

**ИЕРАРХИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ  
В ВЫСОКОНАПОЛНЕННЫХ СТРОИТЕЛЬНЫХ КОМПОЗИТАХ**

**Довгань И.В.**, д.х.н., профессор,  
**Колесников А.В.**, к.т.н., доцент,  
**Семенова С.В.**, к.т.н., доцент,  
**Шарыгин В.Н.**, к.х.н., доцент,

*Одесская государственная академия строительства и архитектуры*  
svetas@inbox.ru

**Аннотация.** В работе рассматривается феноменологическая теория структурообразования строительных композиционных материалов. Динамика структурообразования рассматривается на основе теории эпигенетических ландшафтов Уоддингтона. Физико-химические процессы, связанные с гидратацией, приводят к возможности формирования структур нескольких видов, что соответствует устойчивым ветвям бифуркации и минимумам структурной свободной энергии. Описываются микроскопические реализации рассматриваемого механизма структурообразования, связанные с перемещением и уплотнением частиц композита. Для рассматриваемых процессов предлагается математическая модель информационной системы с отбором состояний.

**Ключевые слова:** структурообразование, композиты, модели, структурные ансамбли.

**ІЄРАРХІЧНІ МОДЕЛІ СТРУКТУРОУТВОРЕННЯ  
В ВИСОКОНАПОВНЕНИХ БУДІВЕЛЬНИХ КОМПОЗИТАХ**

**Довгань І.В.**, д.х.н., професор,  
**Колесников А.В.**, к.т.н., доцент,  
**Семенова С.В.**, к.т.н., доцент,  
**Шаригін В.М.**, к.х.н., доцент,

*Одеська державна академія будівництва та архітектури*  
svetas@inbox.ru

**Анотація.** В роботі розглядається феноменологічна теорія структуроутворення будівельних композиційних матеріалів. Динаміка структуроутворення розглядається на основі теорії епігенетичних ландшафтів Уоддінгтона. Фізико-хімічні процеси, пов'язані з гідратацією, призводять до можливості формування структур кількох видів, що відповідає стійким гілкам біфуркації і мінімумам структурної вільної енергії. Описуються мікроскопічні реалізації розглянутого механізму структуроутворення, пов'язані з переміщенням та ущільненням частинок композиту. Для розглянутих процесів пропонується математична модель інформаційної системи з відбором станів.

**Ключові слова:** структуроутворення, композити, моделі, структурні ансамблі.

**HIERARCHICAL MODELS OF STRUCTURAL FORMATION IN HIGH-FILLED  
CONSTRUCTION COMPOSITES**

**Dovgan I.V.**, Doctor of Chemistry, Professor,  
**Kolesnikov A.V.**, PhD., Assistant Professor,  
**Semenova S.V.**, PhD., Assistant Professor,  
**Sharygin V.N.**, PhD., Assistant Professor,

**Abstract.** The phenomenological theory of structural formation of building composite materials is considered in the paper. It is assumed that the structure of the material is formed under the influence of two processes – the hydration of the binder, which is accompanied by a change in its grains shape and volume due to the growth of new mineral formation, and the dynamic response of the composite particles structure. On this basis, physicochemical and structural variables are distinguished, the first ones play the role of control parameters. The dynamics of structure formation is considered on the basis of the theory of Uedington's epigenetic landscapes. The physical and chemical processes associated with hydration, lead to the possibility of forming structures of several types, which corresponds to stable branches of bifurcation and minimums of structural free energy. The microscopic realizations of the considered structure mechanism formation, associated with the displacement and compaction of the composite particles, are described. For the considered processes, we propose a mathematical model of the information system with state selection. The role in structure formation and destruction of composite materials parts of transition between structures of different types as «hidden» boundaries of a section is discussed.

**Keywords:** structure formation, composites, models, structural ensembles.

**Введение.** Основные современные задачи материаловедения связаны с созданием высокопрочных, энергосберегающих, простых и экономичных в эксплуатации строительных материалов с заданными характеристиками [1]. Таким критериям удовлетворяют композиционные материалы, содержащие вяжущие либо их смеси [2], наполнители и заполнители различного состава и структуры, а также органические и минеральные добавки.

Строительные композиционные материалы относятся к классу сложных физико-химических систем. Для их исследования часто используются различные методы моделирования [3].

**Анализ последних исследований.** Модели композиционных материалов могут строиться с учетом различных предпосылок: структурных, основанных на теории фракталов [3, 4], статистических [1], основанных на теории разрушения композитов [2] и комбинированных. Одним из вариантов является рассмотрение процессов структурообразования с привлечением теории информационных процессов [5]. Все подходы приведенных видов должны позволять рассматривать чувствительность структуры материала к технологическим воздействиям на разных этапах своего жизненного цикла [2, 6, 7]. Одним из вариантов подхода указанного вида, основанного на теории катастроф, может служить теория эпигенетического ландшафта Уоддингтона [8], идея которого заимствована из теории биологической эволюции и адаптирована к описанию процессов формирования структуры композиционных материалов. Ее расширенное толкование, учитывающие некоторые выводы теории информационных систем [5], представляется продуктивным для описания формирования в композите пространственной структуры в форме ансамблей и кластеров [2], а также для исследования особенностей процессов разрушения композитов.

**Цели и задачи исследования.** Рассмотреть процессы структурообразования композитных материалов как явления в системе с двумя видами переменных. Первый класс переменных соответствует физико-химическим процессам гидратации вяжущего в составе композита, второй – структурной релаксации к ближайшему устойчивому состоянию. Изучить влияние внешних воздействий на композит в соответствии с предлагаемой моделью. Описать процессы формирования пространственной структуры композиционного материала с позиций теории информационных систем. Построить физическую модель взаимодействия частиц композиционных материалов за счет изменения их геометрических свойств.

**Результаты исследований.** Для моделей структурообразования наиболее приемлемым является подразделение координат пространства состояния на два класса, называемых далее химическими и структурными переменными. Такое подразделение оправдано тем, что

физико-химические процессы структурообразования, связанные с формированием минеральных новообразований, являются сравнительно автономными и по отношению непосредственно к структурообразованию играют управляющую роль (рис. 1).

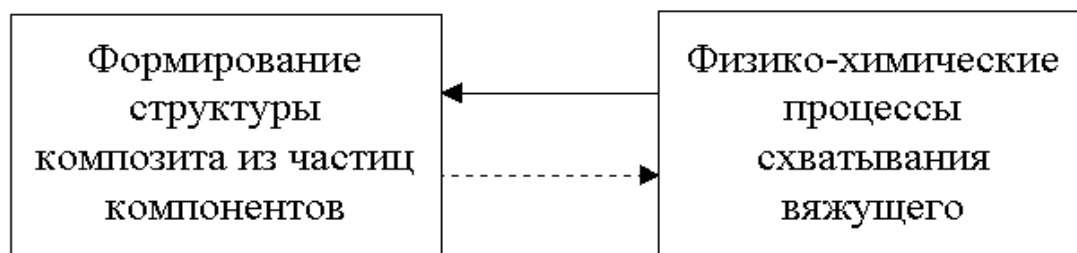


Рис. 1. Характер взаимного влияния процессов структурообразования разных видов

Один из путей моделирования рассмотренных сложных явлений – нисходящий, начинающийся с абстрактных моделей, охватывающий широкий класс явлений. К такому классу относятся, в частности, модели, использующие основные понятия теории катастроф. Примером здесь может служить модель креода, предложенная Уоддингтоном для биологических целей [8, 9], основанная на рассмотрении эволюции системы, задаваемой эпигенетическим ландшафтом (рис. 2). Такая модель продуктивно используется для неживых систем и хорошо описывает основные черты сложных процессов структурообразования композиционных материалов.

Простейшая математическая формулировка следующая: в пространстве состояний  $X$  композиционного материала наблюдается градиентная динамическая система с флуктуациями  $\xi_i$  (1):

$$\frac{d x_i}{d t} = - \frac{\partial \Phi(X, Ch(t), U)}{\partial x_i} + \xi_i. \quad (1)$$

Структурный потенциал  $\Phi(X, Ch(t), U)$  определяет взаимодействие частиц композита. Он зависит от параметров управления, часть которых соответствует химическим переменным  $Ch(t)$ , определяемых особенностями реакций вяжущих компонентов.



Рис. 2. Эпигенетический ландшафт для процесса структурообразования композита

Пластично-вязкому состоянию композитного вяжущего теста на начальных этапах структурообразования соответствует однородное состояние. Последующие этапы структурообразования связаны с появлением новых устойчивых ветвей решений динамической системы (1) из-за усложнения характера структурного потенциала  $\Phi(X, Ch(t), U)$ . Бифуркационные точки  $\Psi$  (точки ветвления, рис. 2) определяют области, вблизи которых формирующаяся структура оказывается чувствительной как к флуктуациям, так и к внешнему

управляющему воздействию (вибрационному, звуковому, электромагнитному, «структурному» с помощью добавления частиц структурообразующего материала). Поскольку чувствительность системы возникает лишь на некотором временном интервале с соответствующими значениями управляющих химических переменных, влияние различных видов активации [6] на процессы структурообразования не характеризуются высокой стабильностью.

Влияние управляющих технологических воздействий в предлагаемой концептуальной модели структурообразования сводится к нарушению симметрии между устойчивыми ветвями при соответствующей бифуркации. Так, вибрационное воздействие с различными амплитудно-частотными характеристиками могут приводить к образованию материала с различной плотностью [7], которая представляет собой одну из структурных переменных. Наглядное отображение роли управляющего воздействия на структурообразование показано на рис. 3.

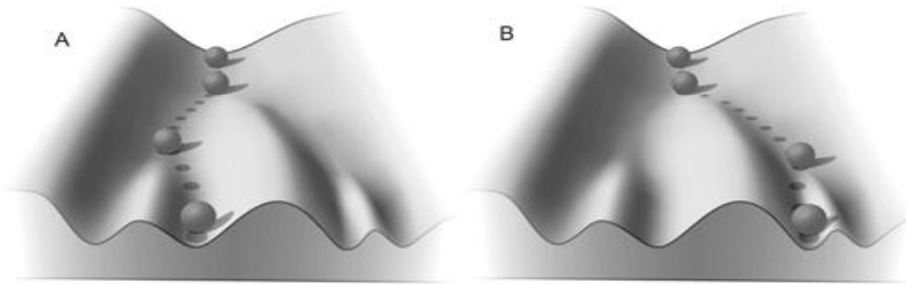


Рис. 3. Влияние флуктуаций на процесс образования структуры материала:  
А и В – влияние воздействий разных видов

Особенностью процессов структурообразования в рассматриваемых системах является возможность формирования в разных участках композитного теста структур разного вида (рис. 4).

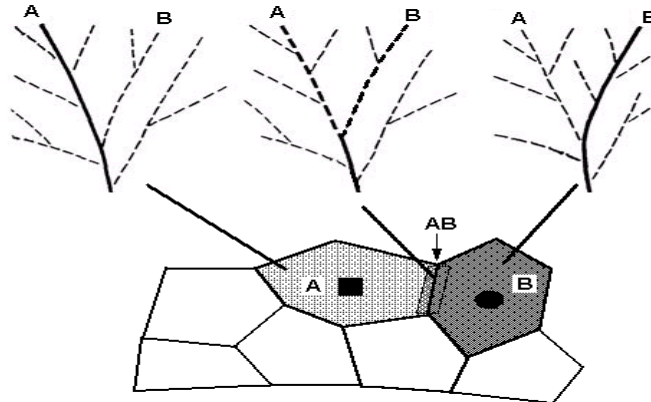


Рис. 4. Формирование областей двух видов А и В и переходной областью АВ с преобладанием различных видов структурной организации

Одним из способов описания пространственной структурной организации композитных материалов является привлечение теории информационных систем [5], в которых осуществляется два существенно различных процесса: начальный этап «перемешивания», в котором устанавливается относительно однородное состояние системы и последующий переход к процессам релаксации к ближайшему устойчивому состоянию. В качестве основной составляющей информационной системы предлагается рассматривать как эталон динамический процесс отбора. Модификация подхода этого типа может быть осуществлена и для рассматриваемой задачи.

Пусть композитное вяжущее тесто, включающее минеральное вяжущее, частицы заполнителя, добавки и другие составляющие подверглись начальной обработке, связанной с замешиванием и установлением относительно однородного состояния. В процессе схватывания

зерна вяжущего в результате различных физико-химических процессов, связанных с гидратацией, изменяют свою форму и объем. В ряде наполненных композитов преимущественно на их поверхности происходит рост минеральных новообразований (рис. 5).

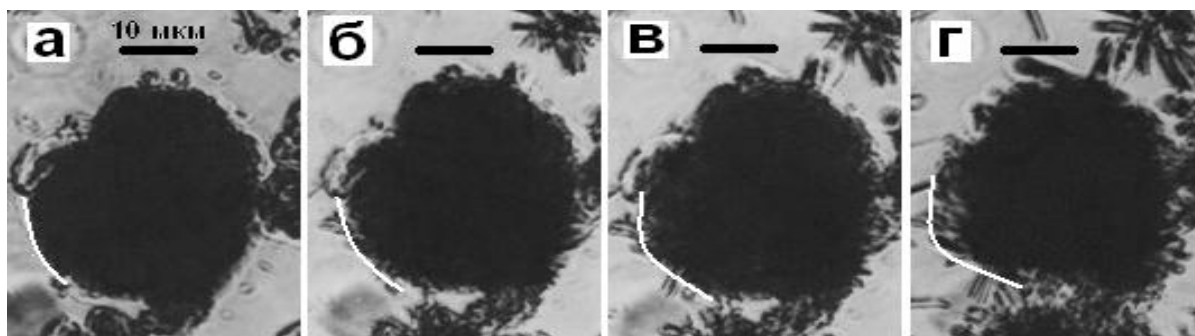


Рис. 5. Изменение формы и увеличение объема частицы гипса при гидратации:  
а – 5 мин. после затворения; б – 10 мин; в – 15 мин; г – 20 мин

Эти процессы связаны, прежде всего, с физико-химическими переменными. Однако соответствующие изменения формы и объема частиц вяжущего приводит к формированию новой структуры зернами вяжущего и частицами наполнителя (и другими частицами композита).

Процессы образования структуры в рассматриваемых случаях, особенно в варианте с упаковкой уплотняющихся частиц, связаны с выбором реализующейся согласно исходной модели (1) структуры. Одной из математических форм системы «с выбором» является частная форма системы Вольтерра-Лотки [10]:

$$\frac{d u_i}{d t} = f(Ch) \cdot u_i \left[ \varepsilon - \sum_j u_j \right] \quad i = 1, \dots, M, \quad (2)$$

здесь  $u_i$  – концентрация структурных ансамблей вида  $j$ ,  $\varepsilon$  – концентрация недифференцированных структурных ансамблей в материале после замешивания,  $f(Ch)$  – неотрицательная функция химических переменных, соответствующая темпу развития процессов структурообразования и, в первом приближении, коэффициенту диффузии в вяжущем тесте. Динамические свойства (2) таковы [5], что структура какого-либо одного вида, например,  $u_1$ , захватывает весь объем материала. Какая именно это будет структура, определяется начальными условиями.

Рассмотренное динамическое поведение противоречит, однако, экспериментально наблюдаемой полиструктурности любого композита [4]. Для учета эффектов подобного вида необходимо в формуле (2) добавить слагаемое, обуславливающее пространственное влияние соседствующих областей композита и перейти к формуле (3):

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = f(Ch) \cdot u_i \left[ \varepsilon - \sum_j u_j \right] + D_i(Ch) \Delta u_j \quad i = 1, \dots, M, \quad (3)$$

здесь последнее слагаемое отражает пространственное влияние соседних участков, зависящее от химических переменных. Содержательная суть влияния второго слагаемого справа напоминает по форме, но отлична по смыслу от обычного влияния диффузии и отражает тенденцию к формированию однородной структуры соседних участков в результате непосредственного (контактного) взаимодействия. Влияние такого вида приводит, например, к образованию однородных структур при росте кристаллов.

Временная эволюция системы (3) приводит к «разметке» объема, т.е. формированию в материале областей с преобладанием разных видов структур. Такого вида области могут быть

видимы при микроскопических исследованиях. Их можно назвать макроскопическими структурными ансамблями, существующими наряду с микроскопическими (например, рис. 4). Переходная область, граница раздела структурных ансамблей, содержит структурные элементы обоих соседствующих типов. Эти области следует относить к «скрытым» границам раздела и рассматривать в качестве кандидатов на роль активных элементов структуры, участвующих, в частности, и в процессах разрушения композиционных материалов.

**Выводы и перспективы дальнейших исследований.** Структурообразование в композитных материалах возможно рассматривать как систему из двух процессов – гидратации вяжущего, сопровождающейся изменением формы и объема его зерен благодаря росту новообразований, и динамическому отклику структуры частиц композитного вяжущего. На этой основе выделяются физико-химические и структурные переменные, первые играют роль управляющих параметров. Согласно предлагаемой модели эпигенетических ландшафтов Уоддингтона, физико-химические процессы, связанные с гидратацией, приводят к возможности формирования структур нескольких видов, чему соответствуют переходы к устойчивым ветвям бифуркации и минимумам структурной свободной энергии. Микроскопические реализации рассматриваемого механизма структурообразования могут быть связаны с перемещением и уплотнением частиц композита. Корректное описание рассматриваемых процессов возможно с помощью математической модели информационной системы с отбором состояний. Предметом дальнейшего исследования может являться роль в структурообразовании и разрушении композитов областей перехода между структурами различных видов как «скрытых» границ раздела.

### Литература

1. Дворкин Л.И. Строительные минеральные вяжущие материалы / Л.И. Дворкин, О.Л. Дворкин. – М.: Инфра-Инженерия, 2011. – 544 с.
2. Выровой В.Н. Композиционные строительные материалы и конструкции / В.Н. Выровой, В.С. Дорофеев, В.Г. Суханов. – Одесса, «ТЭС», 2010. – 168 с.
3. Герега О.М. Генезис структури і властивостей будівельних композиційних матеріалів. Комп'ютерне моделювання: автореф. дис. докт. техн. наук: 05.23.05 / Герега Олександр Миколайович. – Одеса, ОГАСА, 2011. – 35 с.
4. Соломатов В.И. Полимерные композиционные материалы в строительстве / В.И. Соломатов, А.И. Бобрышев, К.Г. Химмлер. – М.: Стройиздат, 1988. – 308 с.
5. Чернавский Д.С. Синергетика и информация: Динамическая теория информации / Д.С. Чернавский. – М.: Эдиториал УРСС, 2004. – 288 с.
6. Пасечник Г.А. Структурообразование дисперсий минеральных вяжущих веществ при механических и электромагнитных воздействиях: автореф. дис. канд. хим. наук 05.23.05 / Пасечник Геннадий Александрович. – Киев, 1973. – 20 с.
7. Кублинь Ч.Я. Об активации цементного теста при интенсивных вибрационных воздействиях / Ч.Я. Кублинь // Исследования по бетону и железобетону. – Рига, 1958. – вып. 3. – С. 26–37.
8. Goldberg A.D. Epigenetics: A landscape takes shape / A.D. Goldberg, C.D. Allis, E. Bernstein. *Cell*, 2007, 128, p. 635–638.
9. Современная палеонтология. Методы, направления, проблемы, практическое приложение: Справочное пособие / Под ред. В.В. Меннера, В.П. Макридина. – М.: Недра, 1988. – 540 с.
10. Свирежев Ю.М. Устойчивость биологических сообществ / Ю.М. Свирежев, Д.О. Логофет. – М.: Наука, 1978. – 352 с.

Стаття надійшла 12.03.2018