

0.1. Когай А.Д. Моделирование процессов гидратации цементных систем

Исследование механизмов гидратации цементных систем является определяющим для развития методов управления процессами структурообразования цементного камня при создании современных бетонов с заданными свойствами. Моделирование физических процессов, сопровождающих химические реакции в процессе гидратации, позволяет исследовать факторы, влияющие на скорость и глубину превращений и отражающие развитие системы.

Предложена модель связанных процессов в реагирующих средах [1] для описания структурных изменений цементного камня в присутствии мелкого заполнителя в процессе гидратации. Актуальность работы заключается в разработке инструмента исследования процесса гидратации цемента на ранних сроках, позволяющего анализировать изменения состава и структуры в ходе химических превращений, прогнозировать кинетику набора прочности. Предложенная модель может быть использована при подборе составов новых мелкозернистых бетонов и для прогнозирования свойств уже разработанных композитов на основе цемента.

В предложенной модели материал рассматривается как гетерогенная среда, основу которой составляют реагирующие компоненты и инертные вещества с учетом различных концентраций составляющих, включая поры, по всему рассматриваемому объему. В основе разработанной модели лежит новый подход моделирования гидратации цементной системы, включающий в себя ряд физико-химических процессов, обеспечивающих начальное структурообразование композита. Для описания тепловых процессов применяются двухтемпературные уравнения теплового баланса. На фоне прогрева объема смеси, вызванного экзотермичностью реакции гидратации, решаются задачи макрокинетики и фильтрации. Для моделирования макрокинетики химической реакции цемента с водой экспериментально определяется энергия активации. Для этого используется метод изотермической калориметрии цементных систем при температурах 20, 30 и 40°С. Вынужденная фильтрация жидкой фазы моделируется с учетом капиллярного давления, вызванного особенностями формирования поровой структуры цементного камня.

Результаты проведенных вычислительных экспериментов демонстрируют адекватность предложенной модели и хорошо согласуются с результатами экспериментальных исследований по определению прочности цементного камня или бетона.

Научный руководитель — д.ф.-м.н. Дмитриева М. А.

Список литературы

- [1] Лейцин В.Н., Дмитриева М.А. Моделирование связанных процессов в реагирующих средах / Ка-

лининград: Издательство БФУ им. И. Канта, 2012. 240 с.