УДК 666. 9. 015.7

Г.М. Редькин, канд. техн. наук, доц., Р.В. Лесовик, канд. техн. наук, доц.
(Белгородский технологический университет им В.Г. Шухова)

АППРОКСИМАЦИЯ КИНЕТИКИ ТВЕРДЕНИЯ КОМПОЗИТОВ

Эффективные технологии строительной и дорожно - строительной индустрии возможны в том случае, когда производство строительных и дорожно – строительных материалов, изделий, конструкций и сооружений базируется на изученности физических, механических, химических свойств исходных природных и изготовляемых материалов, на познании процессов в смесях твердых и неорганических вяжущих веществ и т.д.

Одним из основных методов изучения свойств и процессов в строительном материаловедении является их математическое моделирование, которое отражает внутреннюю сущность исследуемых явлений. Математические модели, будучи математическим эквивалентом исследуемых свойств и процессов, являются носителями информации об изучаемых объектах и ее дополнительными источниками. При этом дополнительная информация, полученная в результате моделирования объекта, обуславливает эффективность математического моделирования.

В свете изложенного актуальным является математическое описание физико – химических процессов кинетики твердения композиционных материалов.

Основным показателем качественных характеристик цементных систем является их прочность, которая зависит от времени, минералогического состава вяжущих, пористости цементного камня, температуры и влажности окружающей среды, водоцементного отношения и других факторов. Многообразие факторов затрудняет вывод математической зависимости прочности композитов от времени, которая учитывала бы и эти факторы.

Данному вопросу посвящено сравнительно небольшое количество работ [1, 2, 3], в которых полученные зависимости весьма громоздки и неудобны для обработки экспериментальных данных. Поэтому в теоретико – практических исследованиях кинетики роста прочности бетонов чаще всего используют формулу [4]

$$R = a + b\lg\tau \qquad (1)$$

где R - предел прочности бетона; a и b – постоянные, зависящие от приведенных выше факторов; τ - время твердения бетона.

Формула (1) проще других разработанных зависимостей [1, 2, 3], она адекватно отражает процесс твердения бетонов для значений времени больших одних или нескольких суток. Однако для начальных значений времени из окрестности момента затворения цемента водой ($\tau = 0$) формула (1) дает результаты противоречащие реальности.

Действительно, если $a < 0$, то, полагая в (1) $\tau = 1$ (сутки), получим $R = a < 0$ отрицательную прочность бетона через сутки твердения, что не имеет физического смысла. Более того, полагая в (1) $\tau = 0$ (сутки), получим прочность бетона $R = -\infty$, при любом значении параметра a и $b > 0$, что противоречит не только опыту, но и здравому смыслу.

Из проведенного анализа формулы (1) следует, что ее недостатки можно устранить, аппроксиммируя экспериментальные данные твердения композитов функцией

$$R(\tau) = \alpha \ln\left(\frac{1}{\beta} + \tau\right) + \gamma, \qquad (2)$$

где α, β, γ - неизвестные параметры, зависящие от состава, условий приготовления и твердения исследуемых композиционных материалов.

Опытные данные свидетельствуют, что началу упрочнения первичной структуры композитов соответствует начальное условие $R = 0$ при $\tau = 0$ или

$$R(0) = 0. \qquad (3)$$

Исходя из начального условия (3), положим в равенстве (2) $\tau = 0$, $R(0) = 0$ и получим $\gamma = \alpha \ln \beta$. Следовательно, с учетом последнего равенства из выражения (2) имеем зависящую от двух параметров аппроксимирующую функцию

$$R(\tau) = \alpha \ln(1 + \beta\tau), \qquad (4)$$

которая, в отличие от формулы (1), удовлетворяет начальному условию (3) и при всех значениях $\tau > 0$ принимает положительные значения $R(\tau) > 0$, что не противоречит опытным данным.

При этом α - линейный, а β - нелинейный параметры и геометрический смысл их следующий: параметр β при $\beta > 1$ сжимает, а при $0 < \beta < 1$ растягивает график логарифмической функции относительно оси $O\tau$; параметр α при $\alpha > 1$ растягивает, а при $0 < \alpha < < 1$ сжимает график логарифмической функции относительно оси OR плоскости $O\tau R$.

Определение параметров α и β функции (4) составляет содержание основной задачи теории аппроксимации [5], которая формулируется следующим образом.

Пусть в результате исследований определены значения прочности композитов в зависимости от времени (τ_i; R_i), $i = 1, 2, \ldots, n$ и имеется функция (4), зависящая от параметров α и β.

Требуется определить эти параметры так, чтобы сумма квадратов отклонений экспериментальных данных от функции (4) была минимальной

$$S(\alpha; \beta) = \sum_{i=1}^{n} [R_i - \alpha \ln(1 + \beta\tau_i)]^2 \to \min \qquad (5)$$

В связи с нелинейностью параметра β используем для минимизации суммы (5) вычислительную итерационную процедуру – метод дробления шага.

Из геометрического смысла параметра β следует, что его начальным значением является расположенная в окрестности искомой точки минимума единица, т. е. $\beta_0 = 1$. Положим $\beta = \beta_0 = 1$ в критерий (5) и в силу необходимого условия экстремума функций приравняем производную суммы (5) к нулю $\frac{d}{d\alpha}S(\alpha;1) = 0$ и найдем начальное значение параметра α

$$\alpha_0 = \sum_{i=1}^{n} R_i \ln(1+\tau_i) / \sum_{i=1}^{n} \ln^2(1+\tau_i) \qquad (6)$$

Затем меняем начальное значение $\beta_0 = 1$ либо в сторону его увеличения $\beta_0 = 1 < \beta_1 < \ldots < \beta_k < \beta_{k+1}$, либо в сторону уменьшения $\beta_0 = 1 > \beta_1 > \ldots > \beta_k > \beta_{k+1} > 0$ так, чтобы выполнялось условие монотонности критерия (5)

$$S(\alpha_0; \beta_0) > S(\alpha_1; \beta_1) > \ldots > S(\alpha_k; \beta_k) > S(\alpha_{k+1}; \beta_{k+1}),$$

При этом вычисляем каждый раз соответствующие значения параметра α по формуле

$$\alpha_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} R_i \ln(1+\beta_k \tau_i)}{\sum_{i=1}^{n} \ln^2(1+\beta_k \tau_i)}, \; k = 1, \; 2, \ldots \qquad (7)$$

Если на некотором шаге условие монотонности нарушается $S(\alpha_k; \beta_k) < S(\alpha_{k+1}; \beta_{k+1})$, то дробим β до тех пор пока монотонность не восстановится. Остановкой итерационного процесса служит точность определения минимального значения суммы (5) и параметра β.

Рассмотрим пример выявления закономерности кинетики твердения бетона по реальным экспериментальным данным [6], приведенным в табл.1

Таблица 1

Прочность бетона при сжатии (МПа)

τ, сут	1	3	7	28
R, МПа	7,7	15,5	20,0	29,8

На основе разработанного итерационного процесса определим по формулам (6), (7) и данным табл. 1 значения параметров α, β, суммы (5) и приведем результаты вычислений в табл. 2.

Таблица 2.

Результаты вычислений параметров аппроксимации

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
β_i	1	2	3	2,5	2,25	2,125	2,094	2,188	2,157	2,21
α_i	9,342	7,438	6,588	6,951	7,174	7,301	7,333	7,235	7,267	7,213
$S(\alpha_0;\beta_0)$	11,099	1,369	2,579	1,519	1,276	1,272	1,289	1,262	1,264	1,266

Из анализа табл. 2 следует, что минимальное значение с точностью до 0,002 критерий (5) принимает при i = 7 (восьмой шаг итерации) $S_{min}(7,235; 2,188) = 1,262$, которому отвечают оптимальные значения параметров $\beta_7 = 2,188$, $\alpha_7 = 7,235$ и корреляционное отношение $\eta = 0,99$. График зависимости минимизируемой суммы (5) от параметра β по данным табл. 2 приведен на рис.1.

Таким образом кинетика прочности рассматриваемого бетона определяется функцией

$$R(\tau) = 7,235\ln(1 + 2,188\tau), \tag{8}$$

график которой приведен на рис 2.

Функциями вида (4) по разработанному итерационному процессу определения оптимальных значений параметров α и β по формуле (7) были аппроксимированы многочисленные экспериментальные данные кинетик твердения цементного камня и бетонов различного состава и в разных условиях, при этом корреляционные отношения всегда весьма незначительно отличались от единицы.

Близость к единице корреляционного отношения свидетельствует о почти функциональной зависимости прочности исследуемых композитов от времени, определенной по формулам (4), (7), (8), что позволяет в строительном материаловедении сформулировать следующий закон: прочность твердения композитов прямо пропорциональна логарифму от линейной функции времени.

Установленный закон (4) полностью характеризует процесс твердения композитов и позволяет определять в каждый момент времени такие важные характеристики кинетики твердения, как скорость $u(\tau)$ и сопротивление, торможение $r(\tau)$ твердения цементных систем.

Действительно, скорость твердения есть производная от прочности по времени, поэтому, дифференцируя функцию (4), получим

$$u(\tau)=\frac{\alpha\cdot\beta}{1+\beta\tau}, \tag{9}$$

а торможение твердения – величина обратная скорости $r(\tau)=u^{-1}(\tau)$, откуда

$$r(\tau)=\left(\tau+\beta^{-1}\right)/\alpha \tag{10}$$

Анализ формулы (9) показывает, что свое наибольшее значение скорость твердения принимает в нуле $u_{\max}(0)=\alpha\cdot\beta$ и убывает с ростом τ

$$\lim_{\tau\to\infty}\frac{\alpha\cdot\beta}{1+\beta\tau}=0.$$

Сопротивление твердения (10) представляет собой линейную функцию, принимающую минимальное значение в нуле $r_{\min}(0)=\dfrac{1}{\alpha\beta}$ и возрастающую с ростом τ.

Для рассматриваемого в статье примера из равенств (8), (9) найдем скорость твердения моделируемой кинетики твердения бетона

$$u(\tau)=\frac{15{,}83}{1+2{,}188\tau} \tag{11}$$

и сопротивление твердения

$$r(\tau)=(\tau+0{,}457)/7{,}235 \tag{12}$$

Графики показателей твердения (11), (12) приведены на рис.3.

Выводы:

1. Математическое моделирование процессов кинетики твердения композиционных материалов необходимы для создания эффективных технологий в строительной индустрии.

2. Разработанная аппроксимирующая функция (4) позволила в строительном материаловедении сформулировать закон: прочность твердения композитов прямо пропорциональна логарифму от линейной функции времени.

3. На основе этого закона получены аналитические выражения таких важных характеристик кинетики твердения композитов, как скорость (9) и сопротивление (10) твердения.

Литература

1. Безверхий А.А., Никитский В.Н. Изменение прочности бетона от В/Ц и времени изотермического твердения // Бетон и железобетон.-1983.-№2.-с.14-15.
2. Прогнозирование прочности бетона при повышенных температурах выдерживания // Бетон и железобетон.-1994.-№4.-с.11-13.
3. Головнев И.И., Вальт А.Б., Гольденберг Н.И. Прочность выдерживаемого при различных температурах бетона // Бетон и железобетон.-1986.-№7.-с.27-28.

4. Рахимбаев Ш.М., Поспелова М.А., Елистраткин М.Ю. Кинетика твердения вяжущих веществ: Методические указания.-Белгород: Изд – во БГТУ им. В.Г. Шухова, 2003.-43с.
5. Ахиезер Н.И. Лекции по теории аппроксимации. –М.: Наука, 1970.-256с.
6. Ли Ф.М. Химия цемента и бетона / Пер. с англ.-М.: Стройиздат, 1961.-646с.