

В.Б. ПЕТРОПАВЛОВСКАЯ<sup>1</sup>, канд. техн. наук; Т.Б. НОВИЧЕНКОВА<sup>1</sup>, канд. техн. наук;  
 А.Ф. БУРЬЯНОВ<sup>2</sup>, д-р техн. наук; И.В. ОБРАЗЦОВ<sup>1</sup>, инженер (sunspire@list.ru);  
 К.С. ПЕТРОПАВЛОВСКИЙ<sup>1</sup>, магистр (raikiri@inbox.ru)

<sup>1</sup> Тверской государственный технический университет (170026, г. Тверь, наб. Афанасия Никитина, 22)

<sup>2</sup> Московский государственный строительный университет (129337, Москва, Ярославское ш., 26)

## Моделирование структуры гипсовых композитов

С целью исследования возможности снижения энергозатрат при производстве гипсовых материалов исследовалась возможность активизации процесса структурообразования путем подбора оптимального гранулометрического состава. Проведено моделирование топологической структуры гипсовой системы гидратационного твердения. В качестве объекта исследований выбрана система, образованная сферами двух размеров, расположенных в гексагональной структуре. С помощью трехмерного моделирования получена количественная оценка упакованного массива сферических частиц. Приведены результаты исследований дифференциальных и интегральных кривых распределения частиц в дисперсных гипсовых системах. На основе результатов их анализа с учетом результатов компьютерного моделирования были проведены исследования реальных гипсовых смесей различной тонкости помола. С помощью разработанного программного комплекса структурно-имитационного моделирования дисперсных систем, применяемых в технологии строительных композиционных материалов, установлен оптимальный гранулометрический состав бидисперсной сырьевой смеси.

**Ключевые слова:** дисперсная система, структура, моделирование, гипс, контакты, прочность.

V.B. PETROPAVLOVSKAYA<sup>1</sup>, Candidate of Sciences (Engineering); T.B. NOVICHENKOVA<sup>1</sup>, Candidate of Sciences (Engineering);  
 A.F. BURIANOV<sup>2</sup>, Doctor of Sciences (Engineering); I.V. OBRATZSOV<sup>1</sup>, Engineer (sunspire@list.ru); K.S. PETROPAVLOVSKY<sup>1</sup>, Master (raikiri@inbox.ru)

<sup>1</sup> Tver State Technical University (22, Afanasiya Nikitina Embankment, 170023, Tver, Russian Federation)

<sup>2</sup> Moscow State University of Civil Engineering (26, Yaroslavskoye Hwy, 129337, Moscow, Russian Federation)

### Simulation of Gypsum Composites Structures

To study the possibility of reducing the power consumption during the manufacture of gypsum materials, a potential for activating the structure formation process by means of selection of an optimal granulometric composition is investigated. The simulation of the topological structure of the gypsum system of hydration hardening was carried out. The system created by spheres of two sizes located in the hexagonal structure was selected as an object for research. With the help of three-dimensional simulation, a quantitative assessment of the packed array of spherical particles was obtained. Results of the study of differential and integral curves of particles distribution in disperse gypsum systems are presented. On the basis of results of their analysis with due regard for results of the computer simulation, the study of real gypsum mixes of different grinding fineness was conducted. The optimal granulometric composition of the bi-disperse raw mix has been defined with the help of the developed software complex of structural-simulation modeling of disperse systems which are used in the technology of building composite materials.

**Keywords:** disperse system, structure, simulation, gypsum, contacts, durability.

Для гипсовых материалов и изделий нового поколения, используемых в современных технологиях, например при производстве 3D панелей для организации интерьеров, проектирование сырьевых смесей приобретает первостепенное значение, поскольку именно оно определяет в дальнейшем высокое качество изделий, геометрическую точность, разнообразие текстур, обеспечивающих неповторимую архитектурную выразительность, и высокие эксплуатационные характеристики материала [1–6].

Упрочнение гипсового камня, модифицированного сульфатными и сульфатоалюминатными добавками (модификаторами), может привести к образованию этtringита и, как следствие, к самоармированию гипсовой матрицы.

Однако свойства композита определяются также и свойствами самой твердеющей гипсовой матрицы [3].

Для формирования максимального количества кристаллизационных контактов в системе на основе полуводного гипса необходимо, как и в случае негидратационного твердения, сочетание зерен полугидрата различного размера в твердеющей системе. Такие сочетания могут в процессе направленного роста кристаллов дигидрата приводить к повышению прочности гипсовой матрицы [7, 8].

Следовательно, высокая прочность получаемого материала может обеспечиваться увеличением числа кристаллизационных контактов, что в свою очередь требует подбора оптимального гранулометрического состава вяжущего.

Выстраивание структуры гипсового материала путем направленного управления процессами, в том числе

растворения, кристаллизации, перекристаллизации и др., позволяет предопределять свойства получаемых композиций.

Подбор гранулометрического состава необходимо осуществлять из условия получения максимального количества контактов с учетом наиболее плотной упаковки частиц в составе полидисперсных сыпучих систем с точки зрения определения наилучшей модели упаковки бинарных систем с непрерывным зерновым составом в границах применимости физических законов упаковки [9].

Тонкость помола вяжущего также определяет строевые пороковые пространства материала, а значит, и основные физико-механические показатели [7, 8]. Получение более плотной упаковки в дисперсной системе связано с использованием смесей разных полидисперсных порошков, что позволяет повысить прочность структуры. В то же время установлено, что прочность дисперсных тонкопористых структур определяется не столько прочностью частиц, образующих структуру, сколько числом контактов на единичной площади сечения и прочностью индивидуального контакта. Увеличение удельной поверхности твердой фазы с 300 до 1000 м<sup>2</sup>/кг по сравнению с исходной системой дает увеличение числа контактов в 80–100 раз [8]. Число контактов зависит от гранулометрического состава сырьевой смеси, что в свою очередь зависит от топологических характеристик системы. Регулирование соотношения частиц разного размера в составе дисперсной системы дает возможность направленно выстраивать образующуюся структуру гипсовой матрицы.

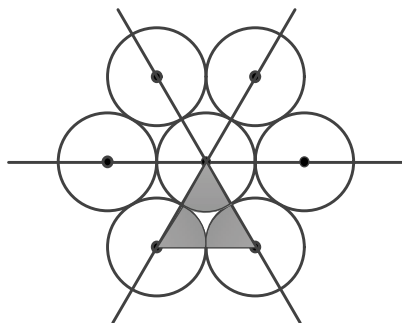


Рис. 1. Плотная гексагональная упаковка сферических частиц

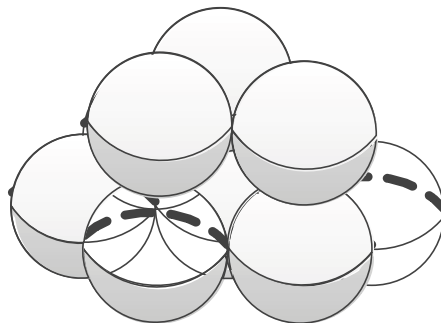
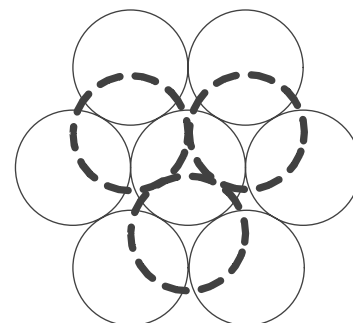


Рис. 2. Координационные элементы структуры регулярной плотнейшей укладки сфер



Упаковка структур характеризуется двумя фундаментальными топологическими характеристиками – величиной плотности упаковки (долевым объемом) и координационным числом (числом ближайшего окружения элемента структуры в системе). Они позволяют описать внутреннюю структуру дисперсной системы в целях ее формирования и регулирования [4].

Достаточно распространенным способом исследования топологического пространства дисперсных систем является трехмерное моделирование заполнения пространственной ячейки (элементарного объема) сферами. В рамках такой модели задача нахождения гранулометрического состава, характеризующегося максимальным координационным числом и обладающего наибольшей плотностью, сводится к задаче исследования модели пространственной упаковки твердых сферических частиц. В случае заполнения объема сферами одного размера наибольшая плотность упаковки частиц будет достигаться при определенном упорядоченном расположении сфер в масштабах всего заполняемого объема. Известно, что максимальная плотность упаковки достигается при расположении центров сфер в узлах границентрированной кубической решетки или при плотной гексагональной укладке [10]. Для регулярной гексагональной упаковки сферических частиц (рис. 1) плотность упаковки составляет 0,7405. В свободной статистической упаковке плотность составляет 0,6–0,64 [4].

Координационное число будет определяться количеством сфер (частиц), соприкасающихся (контактирующих) с центральной сферой по отношению к его ближайшему окружению, т. е. числом сфер в ближайшем окружении центральной сферы [4]. Максимально возможное координационное число для упаковки сфер одного размера 12. При бимодальной упаковке максимальное координационное число также равно 12, а плотность упаковки 0,84–0,866. При использовании бидисперсной смеси частиц с увеличением плотности упаковки от 0,56 до 0,62 координационное число возрастает с 7 до 10. При дальнейшем увеличении плотности упаковки до 0,64 максимальное координационное число достигает 12.

В качестве объекта исследований выбрана система, образованная сферами двух размеров, расположенных в гексагональной структуре.

Задача решается путем создания математической модели, описывающей распределение твердых частиц двух размеров в единице объема (элементарной ячейке) при условии получения максимального координационного числа. Для построения топологической модели используется компьютерная программа, позволяющая

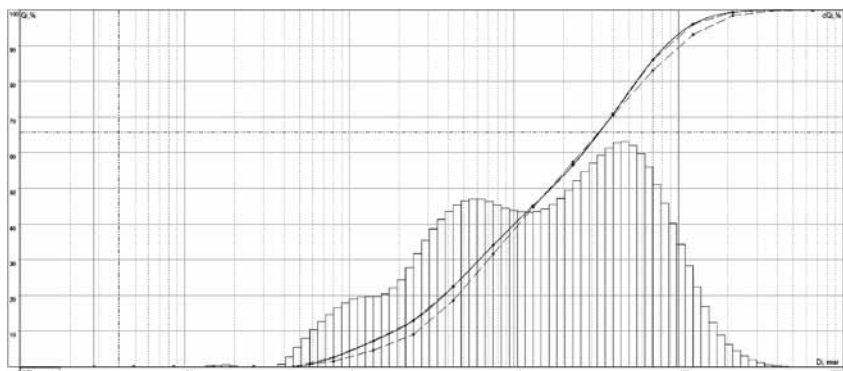


Рис. 3. Зерновой состав исходного порошка гипсового вяжущего

смоделировать упаковки сфер. С помощью данной программы, задавая начальные параметры, можно получить количественную оценку упакованного массива сферических частиц [10].

Ввиду того что реальные порошки имеют широкое распределение частиц по размерам (рис. 3), для получения универсальной математической зависимости процесса структурообразования следует аппроксимировать дисперсную систему, представив ее в виде трехмерных сферических тел [10].

Программа позволяет исследовать процесс упаковки бинарного массива частиц с возможностью задания соотношения их диаметров, что дает возможность получать различные структуры бинарных систем. Результатом работы программы является построенная трехмерная модель упаковки частиц, рассчитанный объем наполнения, а также число контактов, образующихся на поверхности крупной частицы. Расчет количественных характеристик модели выполняется по формулам стереометрии – суммированием объемов сферических тел.

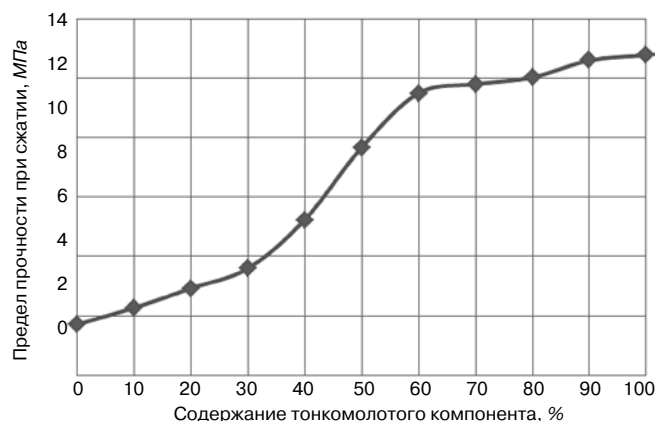


Рис. 4. Зависимость прочности при сжатии гипсового камня от содержания тонкомолотого компонента в составе бинарной дисперсной системы

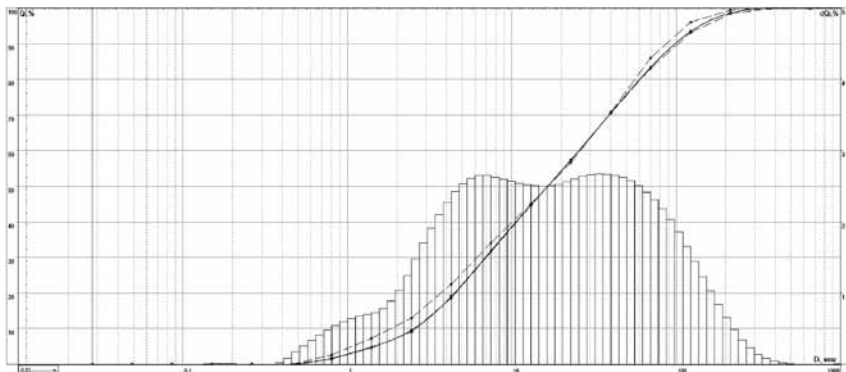


Рис. 5. Оптимальный гранулометрический состав бинарной гипсовой дисперсной системы

Модель имитирует распределение твердых частиц в единице объема (элементарной ячейке) с учетом образования максимального координационного числа, отвечающих теоретическим предпосылкам формирования структуры.

Целью настоящей работы явилось исследование возможности снижения энергозатрат при производстве гипсовых материалов на основе гипса за счет активизации процесса структурообразования путем подбора оптимального гранулометрического состава.

В качестве основного сырьевого компонента в работе применяли гипсовое вяжущее производства Самарского гипсового комбината. Гранулометрический состав порошков гипсового вяжущего оценивали по результатам дисперсионного анализа с помощью анализатора типа Fritsch Particle Sizer 'analysette 22' на базе МГСУ. Распределение размера частиц производилось методом лазерной дифракции согласно ISO 13320-1:2009 «Анализ размера частиц. Методы лазерной дифракции». Оптимизацию гранулометрического состава бинарной системы на основе полугидрата производили с использованием программного комплекса, разработанного в ТвГТУ [9, 10].

Оценку гранулометрического состава гипсового вяжущего по прочности бинарных гипсовых систем гидратационного твердения проводили на стандартных образцах-балочках, изготовленных из теста нормальной плотности и испытанных в стандартные сроки твердения.

С помощью разработанной компьютерной пространственной модели дисперсной системы получены математические зависимости суммы координационных чисел от соотношений объемных наполнений и диаметров частиц бимодальной дисперсной системы. Рассчитанное объемное наполнение бимодальной дисперсной системы составило 0,64.

На основе результатов анализа полученных дифференциальных и интегральных кривых распределения частиц в дисперсных системах полугидрата с учетом

#### Список литературы

1. Румянцев Б.М., Федулов А.А. Перспективы применения гипсовых материалов в высотном строительстве // *Строительные материалы*. 2006. № 1. С. 22–25.
2. Чернышева Н.В., Хархардин А.Н., Эльян Исса Жамал Исса, Дребезгова М.Ю. Расчет и подбор высокоплотного зернового состава заполнителя и бетона на гипсовом композиционном вяжущем // *Вестник Белгородского государственного технологического университета им. В.Г. Шухова*. 2014. № 2. С. 43–48.
3. Хархардин А.Н. Структурная топология дисперсных систем взаимодействующих микро- и наночастиц // *Известия вузов. Строительство*. 2011. № 5. С. 119–125.

установленных математических зависимостей были проведены исследования зависимости прочности гипсового камня от процентного соотношения порошков вяжущего различной тонкости помола в составе бидисперсной сырьевой смеси.

Анализ результатов исследования показывает, что прочность дисперсной системы на основе полугидрата (рис. 4) зависит от гранулометрического состава порошков. При увеличении в составе смеси порошка более тонкого помола ( $d_{cp} \approx 4$  мкм) в диапазоне от 0 до 20% прочность увеличивается на 15% на каждые 10% увеличения тонкомолотого компонента в составе бинарной

смеси; в диапазоне от 30 до 60% прочность увеличивается на 36% на каждые 10% изменения состава смеси. Тогда как при увеличении содержания порошка более тонкого помола в диапазоне от 60 до 100% прочность практически не меняется – 3% прироста прочности на каждые 10% увеличения содержания порошка более тонкого помола.

Гипсовая дисперсная система с оптимальным гранулометрическим составом характеризуется нормальным распределением частиц с двумя неявно выраженными модами (рис. 4). Установленный проведенными исследованиями средний размер частиц в дисперсной системе оптимизированного гранулометрического состава равен 6,381 мкм, максимальный размер частиц полугидрата 44,829 мкм; частиц менее 2 мкм в составе системы 20,23 мас. %.

Согласно проведенным исследованиям прочности гипсового камня установлено оптимальное соотношение порошков в составе бидисперсной сырьевой смеси, на основе которого с помощью разработанного в ТвГТУ программного комплекса структурно-имитационного моделирования дисперсных систем, применяемых в технологии строительных композиционных материалов, определен оптимальный гранулометрический состав бидисперсной сырьевой смеси (рис. 5).

Таким образом, проведенные исследования показывают, что в целях повышения энергоэффективности и улучшения свойств гипсовых изделий возможно использование бинарных смесей полугидрата оптимального зернового состава, полученных подбором гранулометрического состава с использованием методов компьютерного и математического моделирования.

Предлагаемая методика подбора зернового состава позволяет не только управлять процессом структурообразования, но и получать плотно упакованные системы, что предопределяет повышенные эксплуатационные характеристики гипсовых изделий.

#### References

1. Rumyantsev B.M., Fedulov A.A. Prospects for the use of gypsum materials in building construction. *Stroitel'nye Materialy* [Construction Materials]. 2006. No. 1, pp. 22–25. (In Russian).
2. Chernysheva N.V., Kharkhardin A.N. El'yan Issa Zhamal Issa, Drebezgova M.Yu. Calculation and selection of high-density grain composition of aggregate and concrete on a gypsum composite binders. *Vestnik Belgorodskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo universiteta*. 2014. No. 2, pp. 43–48. (In Russian).
3. Kharkhardin A.N. Structural topology disperse systems of interacting micro- and nanoparticles. *Izvestiya vuzov. Stroitel'stvo*. 2011. No. 5, pp. 119–125. (In Russian).

4. Хархардин А.Н. Структурная топология дисперсных материалов сухого и мокрого способов измельчения // *Известия вузов. Строительство*. 2011. № 8–9. С. 112–117.
5. Гаврилова Н.Н., Назаров В.В., Яровая О.В. Микроскопические методы определения размеров частиц дисперсных материалов. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2012. 52 с.
6. Хархардин А.Н., Сулейманова Л.А., Строкова В.В. Топологические свойства полидисперсных смесей и составляющих их фракций по результатам ситового и лазерного анализов гранулометрии // *Известия вузов. Строительство*. 2012. № 11–12. С. 114–124.
7. Петропавловская В.Б., Белов В.В., Новиченкова Т.Б. Малоэнергоёмкие гипсовые строительные композиты. Тверь: Тверской государственный технический университет. 2014. 136 с.
8. Гаркави М.С. Эволюция структурных состояний при твердении вяжущих систем. *Архитектура. Строительство. Образование: Сборник трудов конференции*. Магнитогорск, 2013. С. 185–192.
9. Белов В.В., Петропавловская В.Б., Полеонова Ю.Ю., Образцов И.В. Получение высокопрочных безобжиговых гипсовых материалов на основе техногенных отходов с применением математического и компьютерного моделирования состава сырьевой смеси. *Вестник Волгоградского государственного архитектурно-строительного университета. Серия: Строительство и архитектура*. 2013. Вып. 31. Ч. 2. Строительные науки. С. 563–570.
10. Белов В.В., Образцов И.В. Компьютерное моделирование и оптимизирование составов строительных композитов. Тверь: ТвГТУ, 2014. 124 с.
4. Kharkhardin A.N. Structural topology dispersed materials dry and wet grinding methods. *Izvestiya vuzov. Stroitel'stvo*. 2011. No. 8–9, pp. 112–117. (In Russian).
5. Gavrilova N.N., Nazarov V.V., Yarovaya O.V. Mikroskopicheskie metody opredeleniya razmerov chas-tits dispersnykh materialov [Microscopic methods for the determination of particle size of dispersed materials]. Moscow: RHTU. 2012. 52 p.
6. Kharkhardin A.N., Suleimanova L.A., Strokov V.V. The topological properties of polydisperse mixtures and their constituent fractions based on the results of sieve analysis and laser granulometry. *Izvestiya vuzov. Stroitel'stvo*. 2012. No. 11–12, pp. 114–124. (In Russian).
7. Petropavlovskaya V.B., Belov V.V., Novichenkova T.B. Maloenergoemkie gipsovye stroitel'nye kompozity [Low power gypsum building composites]. Tver: TvGTU, 2014. 136 p.
8. Garkavi M.S. The evolution of structural states hardening cementitious systems. *Architecture. Building. Education: Papers of scientific conference*. Magnitogorsk. 2013. pp. 185–192. (In Russian).
9. Belov V.V., Petropavlovskaya V.B., Poleonova Yu.Yu., Obraztsov I.V. Getting high unburned gypsum materials based on man-made waste using mathematical and computer modeling of the raw mix. *Vestnik Volgogradskogo gosudarstvennogo arkhitekturno-stroitel'nogo universiteta. Seriya: Stroitel'stvo i arkhitektura*. 2013. Vol. 31. Book. 2. Stroitel'nye nauki, pp. 563–570. (In Russian).
10. Belov V.V., Obraztsov I.V. Komp'yuternoe modelirovanie i optimizirovanie sostavov stroitel'nykh kompozitov [Computer simulation and optimization formulations building composites]. Tver: TvGTU. 2014. 124 p.



19. ibausil  
16–18.09.2015  
Weimar

**Институт строительных материалов им. Ф.А. Фингера (FIB)  
университета Bauhaus-Universität г. Веймар (Германия)  
организует 19-й Международный конгресс по строительным материалам**

г. Веймар (Германия)

**IBAUSIL**

16–18 сентября 2015 г.

Международный конгресс по строительным материалам IBAUSIL проводится в г. Веймаре с 1964 г. и за это время стал авторитетным форумом для научного обмена между исследователями университетов и промышленных предприятий с востока и запада.

#### **Основные темы конгресса**

- Неорганические вяжущие вещества;
- Стеновые строительные материалы / содержание сооружений / переработка материалов.
- Бетоны и долговечность бетонов;

Официальные языки конференции – немецкий, английский

Подробности Вы найдете на сайте: [www.ibausil.de](http://www.ibausil.de)

[www.ibausil.de](http://www.ibausil.de)

[www.ibausil.de](http://www.ibausil.de)

[www.ibausil.de](http://www.ibausil.de)

[www.ibausil.de](http://www.ibausil.de)