

0.1. Когай А.Д. Компьютерное моделирование процессов гидратации цементных систем с учетом испарения жидкой фазы

Компьютерное моделирование гидратационных процессов цементных систем в присутствии инертного заполнителя позволяет анализировать изменение состава компонентов в ходе химических превращений и стадию реакции с возможностью оперативной корректировки технологического режима подготовки композиционных реакционных материалов на основе цемента. В основе разработанной модели лежит новый подход моделирования, включающий в себя макрокинетические химические превращения, процессы теплопереноса и фильтрации, обеспечивающие начальное структурообразование композита. Термомеханическое состояние и фазовый состав реагирующей гетерогенной среды рассматриваются одновременно на макро- и микроскопических уровнях с учетом макроскопической структуры неоднородности [1]. Базовая концепция моделирования гидратации исходного цементного компонента в присутствии песка расширена учетом фазовых превращений, сопровождающих испарение жидкости с поверхности композита. Внедрение новых алгоритмов расчета приближает моделируемый процесс к реальному сценарию твердения. Стоки тепловой энергии зависят как от параметров внешней среды, так и от температуры испаряемой воды на каждом шаге по времени, изменяющейся в связи с экзотермичностью гидратационных процессов. Разработанная модель позволяет изучить главные закономерности ранней гидратации цементного композита при различных условиях, а также спрогнозировать сценарий развития свойств при заданных значениях пористости, концентрационной неоднородности, параметров среды и т.д. Полученное соответствие между итогами вычислительного эксперимента и результатами натуральных испытаний подтверждает адекватность и корректность разработанной модели для дальнейшего внедрения на производства композиционных материалов на основе цемента с целью создания материалов с заданными свойствами.

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

Список литературы

- [1] Лейцин В. Н., Дмитриева М. А. Моделирование связанных процессов в реагирующих средах: монография / Калининград: Издательство БФУ им. И. Канта, 2012. 240 с.