

СЕКЦИЯ II

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ ОБРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ

ПРИМЕНЕНИЕ ДИАГРАММ ВОРОНОГО В МОДЕЛИРОВАНИИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

М.В. Ртищева, В.С. Разумейчик

*Учреждение образования «Брестский государственный
технический университет», Беларусь*

Научный руководитель С.С. Дереченник

Благодаря широкому распространению в природных явлениях и процессах и постоянному применению в техногенной деятельности человека, чрезвычайно важным объектом исследований являются дисперсные системы. Дисперсные системы – это микрогетерогенные системы, состоящие из двух или более фаз. При этом одна из фаз образует непрерывную дисперсионную среду, в объеме которой распределены частицы дисперсной фазы (фаз) с размерами в диапазоне от долей до десятков микрометров [1]. Общими для всех дисперсных систем фундаментальными физико-химическими признаками являются гетерогенность, то есть наличие поверхности раздела между фазами и раздробленность (дисперсность). Многие виды таких систем служат стартовой основой для получения дисперсных (композитных) материалов, таких как бетоны, наполненные резины и пластики, керамические и металлокерамические материалы, твердые ракетные топлива и т. п.

Исследуемой дисперсной системой является цементная паста, состоящая из частиц дисперсной фазы (цементного порошка), равномерно распределенных в дисперсионной среде (воде). Важнейшими структурно-топологическими характеристиками исследуемой системы являются:

- гранулометрический состав зерен (распределение их по размерам);
- химико-минералогический состав цемента;
- водоцементное отношение (массы дисперсионной среды и массы дисперсной фазы);
- условия твердения.

Прогнозирование основных характеристик подобных цементных систем, таких как плотность, а следовательно, прочность и проницаемость, имеет огромное практическое значение. А экспериментальное определение этих свойств требует весьма большого объема дорогостоящих исследований. Таким образом, очевидно, что при разработке новых материалов с необходимым набором свойств наиболее реален путь имитационного моделирования композитных материалов, в частности цементной пасты, что не только значительно сокращает материальные и временные затраты на исследование, но и позволяет довольно наглядно описывать процессы, происходящие в таких цементных системах.

Прежде чем приступать к моделированию процессов гидратации, кристаллизации и образования микро- и мезоструктур в цементных материалах, необходимо понимать, что все эти процессы, в частности из-за низкого коэффициента диффузии,

происходят в локальной области зерна и не влияют существенно на те же процессы, происходящие в локальной области другого такого зерна.

При моделировании процесса растворения цементного порошка в воде можно принять следующие допущения:

- частицы имеют форму шара;
- все частицы обводнены и не соприкасаются друг с другом.

Таким образом, учитывая «обособленность» процессов каждого зерна, возникает задача определения «зоны влияния» для каждой частицы дисперсной системы. То есть при моделировании необходимо построить такое разбиение плоскости, при котором каждая область этого разбиения представляет собой множество точек, более близких к данной частице, чем к какой-либо другой. Задача построения таких зон влияния решается с помощью диаграммы Вороного [2]. В случае, когда все частицы дисперсной системы имеют одинаковый диаметр, расположение цементных зерен можно задавать координатами их центров, сводя таким образом окружности к точкам, что значительно облегчает сам процесс требуемого разбиения, и полученные в результате такого построения ячейки диаграммы будут представлять необходимые нам зоны влияния для каждой частицы дисперсной системы.

Однако при моделировании подобного процесса возникает большая сложность ввиду отсутствия доступа к программным системам построения диаграммы Вороного, а также методам и алгоритмам, используемым при разработке этих программных систем. Поэтому при исследованиях возникает необходимость самостоятельной разработки метода, алгоритма, а также программной реализации данного разбиения плоскости.

Особенностью диаграммы Вороного является то, что ее ребра представляют собой серединные перпендикуляры к отрезкам, соединяющим соседние заданные точки, а вершины – это точки пересечения соответствующих ребер. Предлагаемый алгоритм построения диаграммы Вороного основывается на подходе «сканирующей линии»: воображаемая прямая перемещается по плоскости сверху вниз, достраивая диаграмму на каждом шаге и останавливаясь для дополнительной обработки в точках, достижение которых вызывает изменение состояния алгоритма. Изменение хода алгоритма необходимо:

- при появлении новой заданной точки на сканирующей линии – для добавления координат появившейся точки в список точек, влияющих на построение диаграммы;
- при появлении новой вершины диаграммы – для исключения координаты соответствующей точки из списка точек, влияющих на построение диаграммы.

Увеличение диаграммы будет происходить благодаря последовательной дорисовке всех ребер на каждом шаге построения. Так как ребра диаграммы – это серединные перпендикуляры к отрезкам, соединяющим две соседние заданные точки, значит, на каждом шаге надо рисовать точку, равноудаленную от двух заданных точек, а необходимая также зависимость от уровня сканирующей линии достигается тем, что эта точка должна быть центром окружности, проходящей через две данные точки и касающейся сканирующей линии (рис. 1). Новая вершина диаграммы появится тогда, когда будут равны координаты двух центров окружностей, соответствующих двум парам соседних заданных точек, и общая окружность будет проходить через три заданные точки и касаться сканирующей линии (рис. 2).



Рис. 1. Процесс построения диаграммы

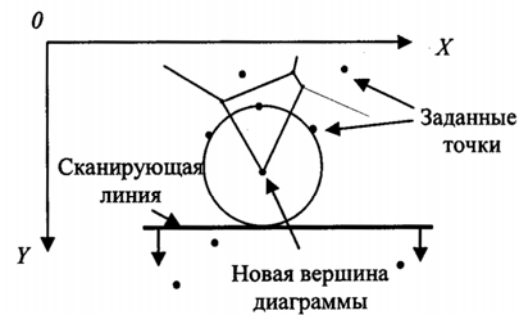


Рис. 2. Возникновение новой вершины диаграммы

Достоинства данного подхода при построении заключаются в том, что построенная часть диаграммы сохраняется постоянной и не зависит от расположения заданных точек, находящихся под сканирующей линией. Предложенный алгоритм достаточно интересен для программной реализации. Он использует специально разработанные динамические структуры, необходимые для хранения данных (необходимо хранить информацию о текущем положении диаграммы и текущем положении сканирующей линии) и требует относительно небольших временных затрат.

Таким образом, с помощью предложенного алгоритма построения диаграммы Вороного было получена упрощенная модель частиц цемента в воде с соответствующей каждой частице зоной влияния (рис. 3).

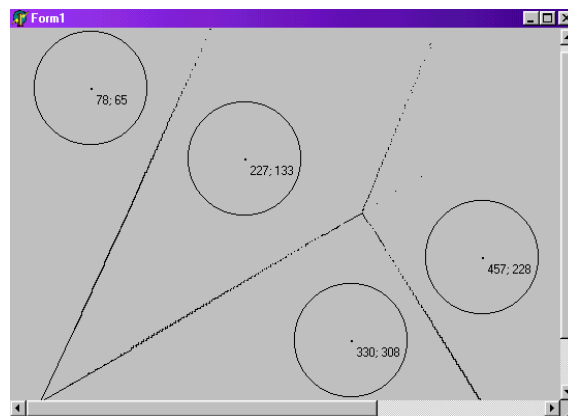


Рис. 3. Упрощенная модель частиц цемента в воде

Однако реальные цементные порошки состоят из частиц различного диаметра (в основном 3...37 мкм). В таких системах границы зон влияния должны смещаться в сторону частиц меньшего диаметра. Очевидно, что в данном случае предложенный алгоритм построения таких зон влияния с помощью диаграммы Вороного непригоден (недостаточно задавать лишь координаты центров зерен). Следовательно, возникает задача: модифицировать алгоритм разбиения, чтобы сделать его пригодным для исследования реальных цементных систем. Модифицируем алгоритм следующим образом: процесс построения диаграммы остается без изменений, однако середин-

ные перпендикуляры строятся к отрезкам, соединяющим точки пересечения соответствующих окружностей и прямой, проходящей через центры этих окружностей.

Модифицируем предложенный алгоритм также для моделирования дисперсной системы с учетом ее минералогического состава (различные скорости растворения частиц дисперсной фазы): при непосредственной прорисовке ребер точки будем выводить с некоторым смещением в сторону частиц меньшего диаметра. Данное смещение пропорционально отношению соответствующих скоростей растворения.

Таким образом, предложенный алгоритм построения диаграммы Вороного и его модификации могут весьма эффективно использоваться при моделировании процессов структурообразования в дисперсных системах. Он позволяет определить не только взаимное расположение зерен дисперсной фазы, количество ближайших соседних зерен, но также исследовать структуру пустого межзеренного пространства, что является важным при прогнозировании основных характеристик цементных систем, таких как плотность, прочность и проницаемость.

Литература

1. Урьев, Н.Б. Структурированные дисперсные системы /Н.Б. Урьев // Соровский образовательный журнал. – 1998. – № 6. – С. 27-42.
2. Препарата, Ф. Вычислительная геометрия: введение /Ф. Препарата, М. Шаймос. – М.: Мир, 1989. – С. 250.

О ВОЗМОЖНОСТИ СНИЖЕНИЯ ЭНЕРГОЗАТРАТ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ ИЗДЕЛИЙ ИЗ КОРДИЕРИТА

Р.Ю. Попов

*Учреждение образования «Белорусский государственный
технологический университет», г. Минск*

Научный руководитель И.М. Терещенко

Ввиду широкого использования кордиеритовой керамики на предприятиях Республики Беларусь весьма актуальной задачей является разработка энергосберегающей технологии их производства. Большое внимание кордиерит заслужил благодаря разнообразию полезных свойств, а именно – высокой термостойкости, химической устойчивости и электросопротивлению. Эти свойства и являются определяющими при использовании изделий на основе кордиерита в качестве электроизоляторов в печах, подложек, лещадок, а также футерующего материала химических реакторов. Кроме того, следует отметить тот факт, что производство данного вида керамики не требует использования никаких экзотических сырьевых компонентов. В качестве сырья могут использоваться огнеупорные каолиновые глины, тальк, технический глинозем, углекислый магний, корунд, хризотил-асбест и др. Синтез кордиерита возможен также и из чистых оксидов, однако для получения высококачественных изделий требуется температура обжига выше 1400 °С, а также выдержка при максимальной температуре около 16 ч. Поскольку изделия, обожженные при 1400 °С, имеют низкую плотность, высокую пористость, и, как следствие, малую прочность. Основными недостатками кордиеритовой керамики являются относительно высокая температура синтеза (выше 1350 °С при использовании промышленных составов на основе природных и синтетических сырьевых материалов). Кафедрой технологии стекла и керамики были проведены исследования, показывающие эффективность использования каолинит-гидрослюдистых глин совместно с гидроксидом алюминия. В частности оказывается возможным существенное снижение температуры обжига