УДК 551.583 (282.247.437.8)

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСПЕРСНЫХ СТРУКТУР, ОБРАЗОВАННЫХ В РЕЗУЛЬТАТЕ КАПИЛЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ

Рустамов Эркин Тохирович

Ассистент кафедры общетехнических наук Азиатского международного университета.

Аннотация: Основной целью компьютерного моделирования упаковок дискретных сред является получение статистически адекватных закономерностей, численно описывающих процесс структурообразования реальных сыпучих материалов. Следовательно, для построения компьютерной модели дискретной среды необходимо знать морфологические и размерные параметры частиц, из которых состоит дискретная среда. Как оговаривалось в подразделе «Основные сведения о дисперсных системах», приведенные алгоритмы ориентированы на структурно-имитационное моделирование упаковок идеализированных свободно дисперсных систем с твердой дисперсной фазой и газообразной дисперсионной средой. Данные модели позволяют судить лишь о геометрической конфигурации хаотичных структур, состоящих из тел правильной формы (как правило, рассматриваются эквивалентные сферы) без учета ряда факторов, характерных для реальных гранулированных материалов. К числу таких факторов относится присутствие практически в любом материале, находящемся в естественном состоянии, третьей фазовой составляющей – влаги.

Ключевые слова: дисперс, система, алгоритмы, структурно-имитационное, моделирование, твердой, фаза, газообразной, эквивалентные, сферы, гранулированных материалов, влаги.

Abstract: The main purpose of computer modeling of packages of discrete media is to obtain statistically adequate patterns numerically describing the process of structure formation of real bulk materials. Therefore, to build a computer model of a discrete medium, it is necessary to know the morphological and dimensional parameters of the particles that make up the discrete medium. As discussed in the subsection "Basic information about dispersed systems", these algorithms are focused on structural simulation of packages of idealized freely dispersed systems with a solid dispersed phase and a gaseous dispersion medium. These models allow us to judge only the geometric configuration of chaotic structures consisting of bodies of regular shape (as a rule, equivalent spheres are considered) without taking into account a number of factors characteristic of real granular materials. These

ISSN 3030-3907

factors include the presence of a third phase component, moisture, in almost any material in its natural state.

Keywords: disperses, systems, algorithms, structural simulation, modeling, solid, phase, gaseous, equivalent, spheres, granular materials, moisture.

Annotatsiya: diskret muhit paketlarini kompyuter simulyatsiyalarining asosiy maqsadi haqiqiy quyma materiallarning strukturaviy shakllanish jarayonini raqamli ravishda tavsiflovchi statistik jihatdan etarli naqshlarni olishdir. Shuning uchun diskret muhitning kompyuter modelini yaratish uchun diskret muhitni tashkil etuvchi zarrachalarning morfologik va o'lchovli parametrlarini bilish kerak. "Dispers tizimlar to'g'risida asosiy ma'lumotlar" bo'limida aytib o'tilganidek, yuqoridagi algoritmlar qattiq dispers faza va gazsimon dispersiya muhitiga ega bo'lgan idealizatsiya qilingan erkin dispers tizimlarning qadoqlarini strukturaviy va simulyatsiya modellashtirishga qaratilgan.Dispers tizimlar to'g'risida asosiy ma'lumotlar" bo'limida aytib o'tilganidek, yuqoridagi algoritmlar qattiq dispers faza va gazsimon dispersiya muhitiga ega bo'lgan idealizatsiya qilingan erkin dispers tizimlarning qadoqlarini strukturaviy va simulyatsiya modellashtirishga qaratilgan. Ushbu modellar haqiqiy donador materiallarga xos bo'lgan bir qator omillarni hisobga olmasdan, faqat to'g'ri shakldagi jismlardan tashkil topgan xaotik tuzilmalarning geometrik konfiguratsiyasini baholashga imkon beradi (qoida tariqasida, ekvivalent sohalar ko'rib chiqiladi). Bunday omillar orasida tabiiy holatda bo'lgan deyarli har qanday materialda uchinchi faza komponenti – namlik mavjudligi kiradi.nday omillar orasida tabiiy holatda bo'lgan deyarli har qanday materialda uchinchi faza komponenti – namlik mavjudligi kiradi

Kalit so'zlar: dispersiya, tizim, algoritmlar, strukturaviy simulyatsiya, modellashtirish, qattiq, faza, gazsimon, ekvivalent, sharlar, donador materiallar, namlik.

Введение

В пространстве и во времени структура любого материала непрерывно претерпевает изменения, этому, в частности, способствуют постоянное движение элементарных частиц, атомов, молекул, взаимодействие материала с окружающей средой. К примеру, почти все строительные материалы и их сырьевые смеси, по крайней мере, на микроуровне, представляют собой микрогетерогенные дисперсные системы, состоящие нескольких фаз, к числу которых относится жидкая составляющая. Характер структуры таких систем во многом определяется характером и величиной связей или сил сцепления между структурными элементами (микрочастицами, зернами и т.д.). В зависимости от характера этих связей в дисперсных системах выделяют прочные фазовые контакты в конденсационных (сращивание за счет

ISSN 3030-3907

химических взаимодействий аморфных частиц) или кристаллизационных (сращивание за счет химических взаимодействий частиц в виде кристаллов) структурах дисперсных материалов, непосредственные атомные контакты в сухих порошках и сравнительно слабые силы молекулярного взаимодействия (Ван-дер-Ваальсовые), действующие между частицами через прослойки жидкой фазы, в коагуляционных структурах. Особенность структур второго и третьего видов – полная их обратимость по прочности. Конденсационные и особенно кристаллизационные структуры придают веществу повышенную прочность, хрупкость. Во многих случаях возможно сосуществование всех указанных видов структур. Например, при затворенные цемента водой атомные (непосредственные) контакты переходят в коагуляционных, затем в фазовые. Этому переходу соответствует непрерывное изменение вязкости, модуля упругости и, главное, прочности дисперсных структур.

Помимо рассмотренных выше видов взаимодействий и соответствующих структур необходимо выделить такие важные взаимодействия, как капиллярные, проявляющиеся в трехфазных (твердое – жидкость – газ) дисперсных системах, к которым относится, к примеру, большинство сырьевых (бетонных, растворных, силикатных и т.п.) смесей для изготовления строительных композиционных материалов.

На рисунке 1 показано искривление жидкости в зазоре между двумя частицами сферической формы радиуса $r_ч$, а также между сферической частицей и плоскостью, приводящее к их стягиванию в результате растяжения жидкости и появления в ней отрицательного капиллярного давления (основная составляющая силы капиллярного сцепления) [1].

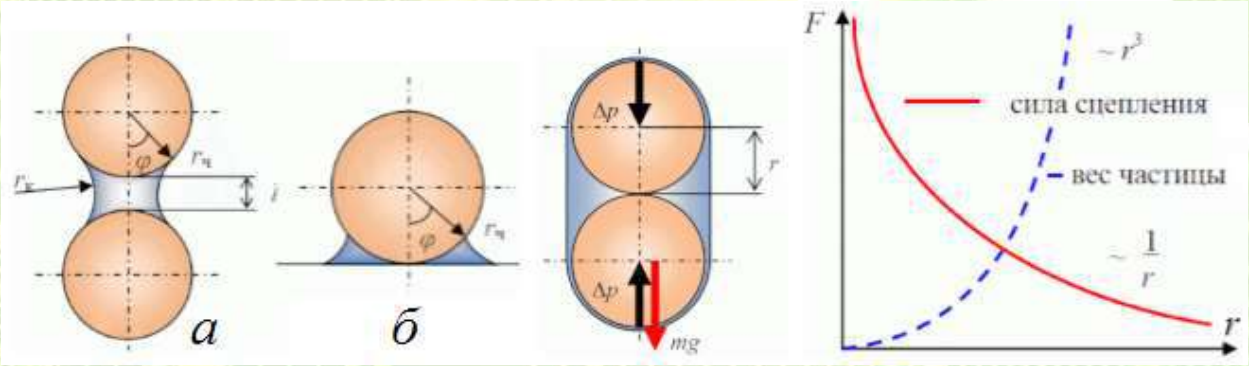


Рисунок 1–Образование капиллярного мениска: между двумя сферическими частицами (а); между сферической частицей и плоскостью, (б) Схема капиллярного сцепления двух шарообразных песчинок, с) Зависимость силы поверхностного натяжения от радиуса частиц.

ISSN 3030-3907

Со стороны искривленной поверхности жидкости действует сила, направленная внутрь, к центру кривизны. Она создает дополнительное давление, величина которого определяется формулой Лапласа:

$$\Delta p^{+} = 2\sigma / r_k, \qquad (1)$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения жидкости, r_k – радиус кривизны ее поверхности.

Например, для частиц песка сила «склеивания» рассчитывается следующим образом. Для простоты будем считать частичку шариком диаметром 300 микрон или 3.10-2 см. Когда соприкасаются две песчинки, окружающие их водяные пленки сливаются, образуя нечто вроде цилиндра с донцами радиуса r (рисунок 2). Коэффициент поверхностного натяжения воды σ = 72,5 дин/см. Подставив эти данные в формулу Лапласа, получаем величину избыточного давления, сжимающего песчинки:

$$\Delta p^{+} = 2 \cdot 72.5 / (1.5 \cdot 10^{-2}) \approx 10000 дин / см^2,$$

Вес песчинки создает «противодавление», усилие, которое растягивает пленку воды и отрывает песчинки друг от друга. Этот вес $p = mg = (4/3)\pi r^3 \rho g$, где ρ – плотность материала, g – ускорение силы тяжести. Он приложен к площади $S = \pi r^2$. Отсюда растягивающее давление:

$$\Delta p^{-} = p / s = (4/3) \cdot r \rho g, \qquad (2)$$

Подставив плотность кварца $2.4 Г / см^3, g \approx 10^3 см / с^2$, получим $\Delta p^{-} \approx 50 дин / см^2$.

Сила, «склеивающая» песчинки, в 200 раз больше силы, их разрывающей. При уменьшении радиусаrчастиц это соотношение очень резко возрастает: вес частицы падает пропорционально r^3, а сила сцепления растет линейно (рисунок 3). Чем меньше размеры частиц, тем сильнее они слипаются одна с другой и прилипают к различным поверхностям.

У крупных песчинок есть некий «критический размер», после превышения которого силы поверхностного натяжения перестают держать их вес. Его несложно отыскать, приравняв силы давления и растяжения $\Delta p^{+} = \Delta p^{-}$, и подставив численные данные. Расчеты дают значение «критического» радиуса частицы примерно 0,6 мм [2].

Преобладание капиллярных сил над другими составляющими меж частичного взаимодействия особенно заметно для частиц размером более 10 мкм и вплоть до 1-2 мм. Именно действием сил капиллярного сцепления

ISSN 3030-3907

объясняются экстремальные зависимости насыпного объема, уплотняемой сырьевых смесей, а также прочности свежесформованных композитных изделий. Капиллярное сцепление проявляется также в капиллярно-пористых телах, структурные элементы которых в основном соединены другими связями некапиллярного характера. В этих телах силы капиллярного сцепления создают внутренние напряжения, вызывающие усадочные деформации, а также влияют на прочность материала.

Подобно тому, как образуются конденсационные или коагуляционных структуры, под действием сил капиллярного сцепления возникают капиллярные структуры (рисунок 4), которые затем накладывают свой отпечаток на строение и свойства материалов, полученных из таких систем.

В полидисперсных трехфазных системах появление капиллярных менисков и возникновение сил капиллярного сцепления между тонкодисперсными и грубодисперсными частицами приводит к прилипанию тонкодисперсных частиц к грубодисперсным с образованием агрегатов-глобул. К примеру, в сырьевых смесях для производства строительных композиционных материалов, в результате процессов капиллярного структурообразования и наиболее важного из них – глобулирования, концентрация вяжущего вещества у поверхности заполнителей и в контактных зонах между ними выше средней концентрации в смеси. В этом одна из причин увеличения прочности и плотности материалов в указанных зонах. Более полное использование гидратационной и связующей активности вяжущего в прессованных строительных композитах (силикатный и бетонный кирпич полусухого прессования и т.п.) достигается на стадии приготовления сырьевых смесей при влажности, соответствующей их максимальному глобулирования. В этом случае жидкая фаза играет роль усиливающего компонента, упрочняя материал за счет перевода матричного цементирующего вещества из объемного состояния в пленочное с более высокими прочностью и структурированностью.

ISSN 3030-3907

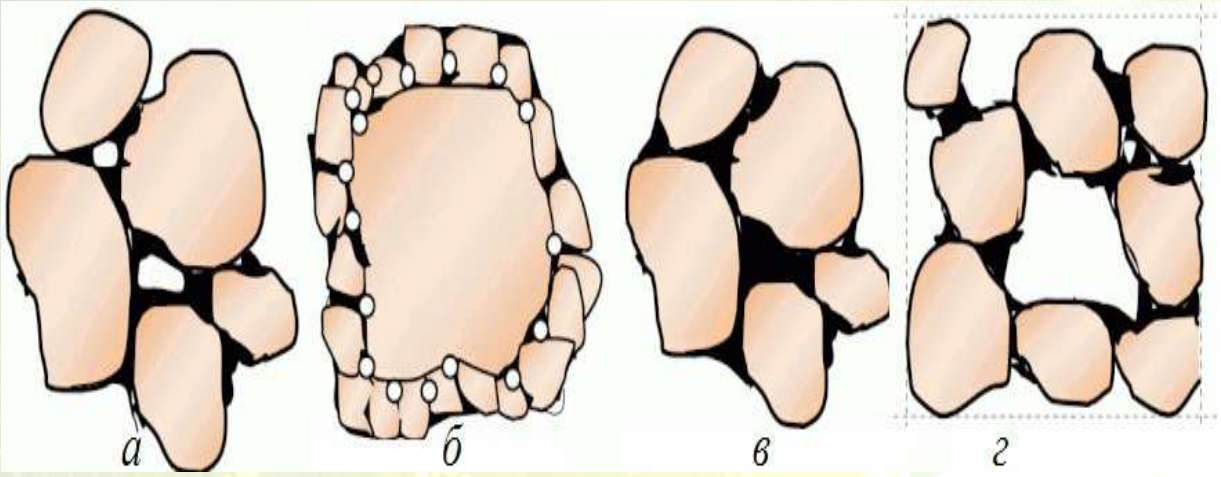


Рисунок 4–Капиллярные структуры в дисперсных системах: а – трехфазная гранула; б – трехфазная глобула; в – двухфазная гранула; г – ячеисто-глобулярная структура.

Если для дисперсных систем и материалов определяющими являются контактные взаимодействия, характер и величина которых обусловливают соответствующий тип структуры (эффект поверхностей), то для грубозернистых систем наибольшее значение имеют закономерности укладки в зависимости от размеров и формы зерен (эффект масс) [1].

На рисунке 5 приведен макроснимок увлажненного кварцевого песка. Влажность системы составляет порядка 5-6 % по массе. На снимке видно капиллярное взаимодействие мелких частиц песка с крупными. «Прилипшие» частички образуют агрегаты-глобулы, которые в свою очередь строят «арочные» структуры.

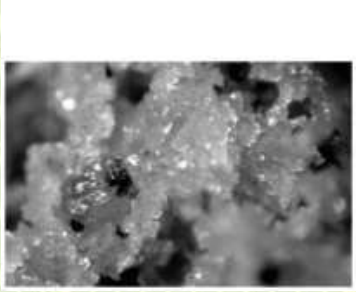


Рисунок 5– Макроснимок увлажненного кварцевого песка

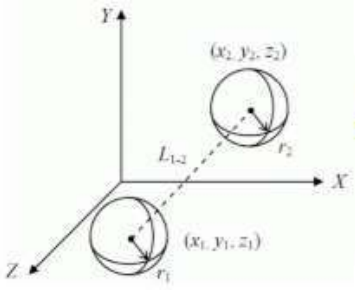


Рисунок 6–К определению расстояния между объектами

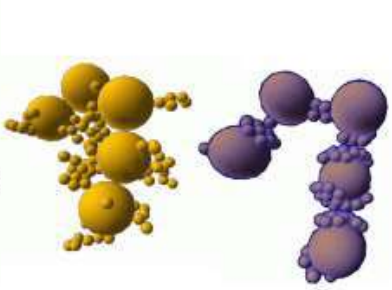


Рисунок 7–Процесс моделирования ячеисто-глобулярной структуры

Сформулируем алгоритм построения компьютерной структурно-имитационной модели объемной ячеисто-глобулярной структуры. Для реализации алгоритма используем язык программирования Blitz Basic с возможностью трехмерной визуализации. Основой алгоритма послужит

ISSN 3030-3907

условие, исключающее пересечение поверхностей объектов в трехмерном пространстве.

Порядок построения модели заключается в следующем.

1. В бесконечном трехмерном пространстве создается объект сфера, имеющая координаты $x = 0, y = 0, z = 0$.

2. Вблизи поверхности случайно выбранной существующей частицы создается *i*-ая сферическая частица. Координаты новой сферической частицы задаются случайными. Таким образом, строится трехмерная цепочечная структура из сферических частиц. Создание новой частицы возможно только при отсутствии пересечения поверхностей частиц. Для этого рассчитываются расстояния между центрами сфер (рисунок 6). Для двух трехмерных тел с координатами (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2), расстояние L_{1-2} между их центрами определяется по формуле:

$$L_{1-2} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}, \qquad (3)$$

Заключение:

Существует множество разнообразных программных пакетов CFD-моделирования. Можно отметить такие широко применяемые программные комплексы, как ANSYS Fluent, Autodesk Simulation CFD, Pushbutton CFD и другие продукты. К примеру, посредством моделирования с использованием CFD-пакетов на сегодняшний день гоночными командами производится анализ и оптимизация весьма сложных потоков воздуха, образующихся на переднем и заднем спойлере современных гоночных автомобилей Формулы-1. Безупречная и эффективная работа будь то гоночного автомобиля Формулы-1, воздухоочистителя или индукционного улавливающего кожуха зависит от потоков воздуха, циркулирующих внутри устройства и в окружающем его пространстве. Моделирование с использованием CFD благодаря заложенным в них физическим и математическим моделям позволяет воспроизвести эти невидимые, но весьма важные и сложные процессы. Самое большое преимущество моделирования с использованием CFD по сравнению с другими экспериментальными методами и измерениями заключается в том, что определяются не только значения в выборочных точках, но и одновременно регистрируется совокупность всех физических величин, и тем самым появляется возможность удостовериться в правильности функционирования модели.

Более детально мы остановимся на компьютерной реконструкции дискретных сред, в частности на структурно-имитационном моделировании

ISSN 3030-3907

упаковок частиц гранулированных материалов, представляющих особый интерес при решении многих рецептурно-технологических задач.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белов В.В. Капиллярное структурообразование сырьевых композиций на основе минеральных вяжущих веществ. – «ALIINFORM» Международное аналитическое обозрение, №6, 2010, С.63-75.
2. Шишлова, А. Песок сухой, влажный и звучащий. – Наука и жизнь, № 6, 1999.
3. Пальцер, У. Компьютерное моделирование в производстве бетонных изделий / У. Пальцер, Й.Г. Швабе // Бетон и Железобетон. 2010. 20-22.
4. Белова, О.В. Методологические основы CFD-расчетов для поддержки проектирования пневмогидравлических систем / О.В. Белова, В.Ю. Волков, А.П. Скибин, А.В. Николаева, А.А. Крутиков, А.В. Чернышев // Инженерный журнал: наука и инновации, 2013, вып. 5. С.1-13.
5. Козырев С.А. CFD метод в компьютерных технологиях как инструмент исследования аэродинамики глубоких карьеров / С.А. Козырев, В.Ф. Скороходов, Р.М. Никитин, П.В. Амосов, В.В. Массан // Труды горного института Кольского НЦ РАН. 2014. С.251-255.
6. Роул, А. Основные принципы анализа размеров частиц / А. Роул // Техническая аннотация Malvern Instruments Limited. 2009. 12 с.
7. Егорова, Е.В. Поверхностные явления и дисперсные системы: учеб, пособие / Е.В. Егорова, Ю.В. Поленов // Иван. гос.хим.-технол, ун-т.- Иваново, 2008. — 84 с.
8. Михеева, Е.В. Поверхностные явления и дисперсные системы. Коллоидная химия. Сборник примеров и задач / Е.В. Михеева, Н.П. Пикула, С.Н. Карбаинова // учебное пособие для студентов ХТФ, ФТФ, ЭЭФ, ИГНД и ИДО. – Томск: Изд-во ТПУ, 2008. – 116 с.
9. Pabst, W. Characterization of particles and particle systems / W. Pabst, E. Gregorova // ICT Prague. 2007. 122 p.
10. Берлин, А.А. Имитация свойств твердых тел и жидкостей методами компьютерного моделирования / А.А. Берлин, Н.К. Балабаев // Физика. Соровский образовательный журнал. №11. 1997. с.85-92.
11. Binder, K., Heermann D.W. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics / K. Binder, D.W. Heermann // An Introduction. London-NY.: Springer. 2010. 200 p.
12. Satoh, A. Introduction to Practice of Molecular Simulation: Molecular Dynamics, Monte Carlo, Brownian Dynamics, Lattice Boltzmann and Dissipative Particle Dynamics / A. Satoh // Elsevier, 2011. 322 p.

ISSN 3030-3907

13. Пальцер, У. Компьютерное моделирование в производстве бетонных изделий / У. Пальцер, Й.Г. Швабе // Бетон и Железобетон. 2010. 20-22.
14. Харитонов, А.М. Структурно-имитационное моделирование в исследованиях свойств цементных композитов: автореф, дис, на соискание ученой степени доктора тех. наук (05.23.05 – Строительные материалы и изделия) / А.М. Харитонов; науч. консультант П.Г. Комохов. — С.-Петербург, 2009. — 38 с.
15. Дорофеенко, С.О. Численное моделирование течения бидисперсного сыпучего материала в реакторе шахтного типа / С.О. Дорофеенко // Теоретические основы химической технологии. 2007. Том 41. №6. С. 625-629.
16. Кучин, И.В. Моделирование процессов структурообразования в дисперсных системах / И.В. Кучин, Н.Б. Урьев // Журнал физической химии. 2007. Том 81. №3. с.421-425.
17. Bullard, J.W. The Virtual Cement and Concrete Testing Laboratory Consortium / J.W. Bullard // Annual Report, January 2003, pp. 1-39.
18. Hu, J. Shape Characterization Of Concrete Aggregate / J. Hu, P. Stroeven. // Image Anal Stereol, 25, 2006; pp. 43-53.
19. Stroeven, P. Virtual Reality Studies of Concrete / P. Stroeven, L.J. Sluys, Z. Guo, M. Stroeven. // Forma, 21, 2006, pp. 227–242.
20. Кондращенко, В.И. Интегрированный подход к решению задач строительного материаловедения / В.И. Кондращенко, Д.А. Гребенников, С.В. Гузенко, А.В. Кендюк // Мат-лы международного конгресса Наука и инновации в строительстве SIB-2008. Том 1. Современные проблемы строительного материаловедения и технологии. Книга 1 (А - Н). – Воронеж. 2008. 358 с. (С. 235-240).

ISSN 3030-3907