

HafenCity Universität Hamburg

Bauingenieurwesen | Arbeitsbereich Baustofftechnologie

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Gesa Kapteina

Bachelorarbeit

Entwicklung eines FEM - Diffusionsmodells für Chloridtransport in Beton

Nils-Christian Rokoß
6050372

Erstbetreuerin: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Gesa Kapteina

Zweitbetreuer: Christoph Langer M. Sc.

Ort, Ausgabedatum: Hamburg, 01.06.2020

Bearbeitungszeit: 12 Wochen

Ort, Abgabedatum: Hamburg, 24.08.2020

Kurzfassung

Die Chloriddiffusion in Beton erfährt Einflüsse, welche in ihrer Gänze eine hohe Komplexität beinhalten. Analytische Lösungsansätze des 2. Fick'schen Diffusionsgesetzes können das Chlorideindringen in Beton über Vereinfachungen des Sachverhaltes modellieren; sie zeigen jedoch Grenzen auf, nicht-lineare Einflüsse hinreichend genau darzustellen. Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Diffusionsmodell auf Grundlage der Finite-Element-Methode (FEM) entwickelt, um die Einflüsse der Porosität, Tortuosität, Chloridbindung, des Porenverschlusseffektes und der Kontaktzone zwischen Zementstein und Gesteinskorn numerisch in Abhängigkeit der Struktur von Beton zu berücksichtigen. Die Grundtauglichkeit des Modells konnte durch eine Validierung mit empirisch ermittelten Daten belegt werden.

Abstract

The chloride diffusion in concrete is impacted, directly and indirectly, by a number of factors resulting in a complex system of interdependences and reactions. Describing these processes by using an analytical approach based on Fick's 2nd law of diffusion requires simplifications causing a limited representation of non-linear circumstances like i.e. chloride binding. In order to include the impacts of porosity, tortuosity, chloride binding, pore blocking effect and the interfacial transition zone (ITZ) in a numerical way by considering the structure of concrete a diffusion model has been developed based on the finite element method. A basic suitability of this model has been proved by a validation using empirical data.

Abkürzungen

C-A-H	Calciumaluminathydrat
C-S-H	Calciumsilikathydrat
DIN	Deutsches Institut für Normung e.V.
EN	Europäische Norm
FEM	Finite-Element-Methode
ITZ	Interfacial Transition Zone (Kontaktzone)

Lateinische Buchstaben

<i>a</i>	Altersexponent (nach Gehlen) [-]
<i>A</i>	Alterungsterm (nach Gehlen) [-]
<i>A_{Röhling}</i>	Parameter für die Exponentialfunktion zur Bestimmung der Hydratationswärme (Röhling) [-]
<i>B_{Röhling}</i>	Parameter für die Exponentialfunktion zur Bestimmung der Hydratationswärme (Röhling) [-]
<i>c</i>	Konzentration des Solvats / freie Konzentration [mol/m ³]
<i>c₀</i>	Freie Anfangskonzentration [mol/m ³]
<i>c_b</i>	Beladung eines Sorbens durch Sorbat [mol/m ³]
<i>c_G</i>	Konzentration eines immobilen Gases im ungesättigten porösen Medium [mol/m ³]
<i>C_i</i>	Grundchloridgehalt [M.-%/z]
<i>C_{S,Δx}</i>	Chloridkonzentration in der Tiefe Δx in Abhängigkeit der anstehenden Chlorideinwirkung [M.-%/z]
<i>C_t</i>	Totale Konzentration einer Materie [mol/m ³]
<i>D</i>	Allgemeiner Diffusionskoeffizient in freier Lösung [m ² /s]
<i>D₀</i>	Freier Diffusionskoeffizient einer verdünnten Spezies in wässriger Lösung [m ² /s]
<i>D_{eff}</i>	Effektiver Diffusionskoeffizient [m ² /s]

D_{GK}	Größtkorn der Gesteinskörnung [mm]
D_{nss}	Diffusionskoeffizient unter instationären Bedingungen [m^2/s]
$D_{RCM,0}$	Chloridmigrationskoeffizient von wassergesättigtem Beton, bestimmt zum Referenzzeitpunkt t_0 an definiert hergestellten und vorgelagerten Prüfkörpern [m^2/s]
D_{ss}	Diffusionskoeffizient unter stationären Bedingungen [m^2/s]
e_{ITZ}	Verhältnis der erhöhten Porosität der ITZ (Kontaktzone) zum ungestörten Zementstein [-]
f_b	Freundlich-Konstante (nach Tang) [-]
FD_P	Fraktale Dimension der Porosität [-]
J	Teilchenstromdichte [mol/m^2s]
k	systemabhängige Konstante (BET-Isotherme) [-]
K_1	Eingangsparameter für die Berechnung der Tortuosität (nach Bentz) [-]
K_2	Eingangsparameter für die Berechnung der Tortuosität (nach Bentz) [-]
k_e	Parameter zur Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit von D_{eff} (nach Gehlen) [-]
K_F	Freundlich-Konstante [-]
k_t	Regressionsvariable (nach Gehlen) [-]
L	Länge der gradlinigen Verbindung zwischen zwei Punkten [m]
L_e	Effektiver Transportweg eines Masseteilchens im porösen Medium [m]
m	Masse [kg]
M	Molare Masse [g/mol]
N_F	Freundlich-Exponent [-]
p	Gleichgewichtsdruck des Adsorptivs [Pa]
p_0	Dampfdruck des reinen flüssigen Adsorptivs bei der Temperatur T [Pa]
P_r	Relevante Porosität (nach Meng) [-]
P_w	Wirksame Porosität (nach Meng) [-]

Q	Hydratationswärme [J]
Q_0	Variable zur Anpassung der Regressionsanalyse (Röhling) [J]
Q_{max}	Maximale Hydratationswärme [J]
R	Term für chemische Reaktionen (Massentransportgleichung in COM-SOL Multiphysics) [mol/m ³ s]
R_H	Hydraulischer Radius [m]
s	Deklarierung der Steigung in einer Geradengleichung [Einheit variabel]
t	Zeit [s]
t_0	Referenzzeitpunkt (Gehlen) [a]
t_k	Eingangsparameter für die Exponentialfunktion der Hydratationswärme (Röhling) [h]
u	Massendurchschnittsgeschwindigkeitsvektor (Konvektion) [m/s]
V_{mono}	Adsorptvolumen zur Ausbildung einer Monoschicht [m ³]
V_{W0}	Anmachwasserraum [m ³]
V_Z	Ausgangsvolumen des Zementes [m ³]
w/z	Wasserzementwert [-]
x	Tiefe senkrecht zur Chloridbeaufschlagung [m]
Δx	Tiefenbereich in [m], der durch ggf. intermittierende Chlorideinwirkung bedingt, vom Fick'schen Verhalten abweichende Chloridkonzentrationen zeigt
y	y-Achsenabschnitt einer Geradengleichung [Einheit variabel]

Griechische Buchstaben

α	Hydratationsgrad [-]
α_{max}	Maximal erreichbarer Hydratationsgrad [-]
α_V	Volumenanteil eines immobilen Gases im porösen Medium [-]
β	Freundlich-Exponent (nach Tang) [-]
ϵ	Porosität [-]

η_G	Gelbildungsfaktor [-]
ρ	Trockenrohddichte eines Feststoffes [kg/m ³]
τ	Tortuosität [-]
θ	Volumenanteil der flüssigen Phase im porösen Medium [-]

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	I
Abstract	I
Abkürzungen	II
1. Einleitung	1
1.1. Problemstellung	1
1.2. Zielsetzung	2
1.3. Vorgehensweise	3
2. Theoretische Grundlagen	4
2.1. Diffusionseigenschaft von Beton	4
2.2. Zementstein	5
2.2.1. Zement als Bindemittel	5
2.2.2. Hydratation	7
2.2.3. Hydratationsverlauf	8
2.2.4. Hydratationsgrad	10
2.2.5. Porenstruktur	11
2.2.6. Kontinuität und Tortuosität	13
2.2.7. Kontaktzone der Gesteinskörnung mit dem Zementstein	14
2.3. Chloridtransport im Zementstein	15
2.3.1. Transportmechanismus Diffusion	15
2.3.2. Chloridsorption	17
2.3.3. Porenverschlusseffekt	18
2.3.4. Driftgeschwindigkeit	19
2.3.5. Eigenchloridgehalt	19
3. Entwicklung des FEM-Diffusionsmodells mit COMSOL Multiphysics	20
3.1. Numerische Lösung des zweiten Fick'schen Diffusionsgesetzes	20
3.2. Die Finite-Elemente-Methode	20
3.3. COMSOL Multiphysics	21
3.4. COMSOL Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“	24
3.4.1. Aufbau des Interfaces	24
3.4.2. Implementierung der Porosität	26
3.4.3. Implementierung der Tortuosität	29
3.4.4. Implementierung der Chloridbindung mit Hilfe der Freundlich-Isotherme	31
3.4.5. Implementierung des Porenverschlusseffektes	32

3.4.6.	Implementierung des Einflusses der Kontaktzone	34
3.4.7.	Implementierung der Driftgeschwindigkeit	38
3.4.8.	Definitionen der Randbedingungen	38
3.5.	Generieren des FEM-Netzes	42
3.6.	Berechnung des Modells	42
4.	Validierung	43
4.1.	Zielsetzung und Vorgehen	43
4.2.	Experimentelle Daten	44
4.3.	Modell zur Beschreibung des Chlorideindringvorganges nach Gehlen	44
4.4.	Gegenüberstellung der Diffusionskurven	45
4.4.1.	Darstellung der FEM-Ergebnisse	45
4.4.2.	Implementierung der Versuchsdaten in COMSOL Multiphysics	48
4.4.3.	Implementierung des analytischen Modells nach Gehlen	48
4.4.4.	Auswertung	49
4.4.5.	Ergebnis der Validierung	55
5.	Zusammenfassung	56
6.	Ausblick	56
	Literatur	57
	Technische Regelwerke	61
A.	Anhang A: Erhältliche Interfaces im „Chemical Reaction Engineering“- Modul (COMSOL Multphysics)	A-1
B.	Anhang B: Eingangparameter zur Ermittlung des Hydratationsgrades nach Röhling	B-1
C.	Anhang C: Zementabhängige Eingangparameter des FEM-Modells	C-1
D.	Anhang D: Eingangswerte des FEM-Modells in Abhängigkeit von der Betonrezeptur	D-1
E.	Anhang E: FEM-Berechnungen zur Darstellung der Modellentwicklung	E-1
F.	Anhang F: Gegenüberstellung der Diffusionskurven	F-1
G.	Anhang G: Nutzungs- und Verwertungsrecht	G-1
H.	Anhang H: Selbstständigkeitserklärung	H-1

1. Einleitung

1.1. Problemstellung

Mit Einführung der Normen DIN 1045-2 bzw. DIN EN 206-1 hat die Dauerhaftigkeit eines Stahl- bzw. Spannbeton-Bauwerks eine gleichrangige Bedeutung wie die Tragfähigkeit sowie dessen Gebrauchstauglichkeit erhalten. Die Maßnahmen zur Gewährleistung der Dauerhaftigkeit sind abhängig von den Umgebungsbedingungen des Bauwerks, die über die sogenannten Expositionsklassen erfasst werden. Im Gegensatz zum Bemessungsverfahren der Tragfähigkeit und Gebrauchstauglichkeit auf Performance Basis, findet die Dauerhaftigkeit nur deskriptiv Einbezug in die genannten Normen. Praxisrelevante Performance-Konzepte stehen hier nicht zur Verfügung. Ein möglicher Angriff des Stahl- bzw. Spannbetons stellt das Chlorideindringen dar, welches über die Expositionsklasse XD (Beanspruchung durch Chlorid-Einwirkung aus Taumittel) und XS (Beanspruchung durch Chlorid-Einwirkung aus Meersalz) Berücksichtigung findet. Während bis Anfang der 1960er Jahre der Einsatz von Calciumchlorid als Zusatzstoff im Beton zum Beschleunigen der Erhärtung üblich war, ist seit 1963 dessen Verwendung nicht mehr zugelassen [1, S.263]. Man hatte die Schädigung von Betonbauwerken aufgrund einer Chlorideinwirkung erkannt. Diese äußerte sich in Form von Gefügeschädigungen des Zementsteins bei Frost, durch einen chemischen Angriff des Gefüges und durch die chloridinduzierte Korrosion der Stahlbewehrung [1, S.264]. Aufgrund der hohen Alkalität des Betons ist die darin befindliche Stahlbewehrung vor Korrosion geschützt. Ein Passivfilm auf der Stahloberfläche, der nur in einem hoch alkalischen Milieu aufrecht erhalten bleibt, verhindert die Oxidation des Stahls. Dieser kann jedoch durch äußere Einflüsse wie z. B. die Carbonatisierung oder eine Chloridkontamination zerstört werden [2, S.291]. Die Folge ist eine Korrosion der Bewehrung, welche durch die Anwesenheit von Chloriden weiter beschleunigt wird [2, S.291].

Das Eindringen von Chloriden in Beton kann grundlegend durch den physikalischen Prozess der Diffusion und bei einem wasserungesättigten Betonkörper zusätzlich durch kapillare Saugprozesse beschrieben und erklärt werden [2, S.291]. Ein genaues Wissen zum Chlorideindringvorgang in Beton ermöglicht den gezielten Einsatz von Maßnahmen, die die Langzeittragfähigkeit und Gebrauchstauglichkeit eines Bauwerks begünstigen. Langlebige und effiziente Bauweisen fördern den überlegten Einsatz von Ressourcen und spielen somit eine bedeutsame Rolle im Hinblick auf ein nachhaltiges Bauen.

Mit dem Ziel, genaue Kenntnisse über das Eindringverhalten von Chloriden in Beton zu gewinnen, bestehen bereits viele Untersuchungen und Modelle, die diesen Stoff-

transport beschreiben. Aufgrund der sehr komplexen Strukturentwicklung zementgebundener Stoffe fallen die Modelle ebenfalls komplex aus bzw. beruhen auf Vereinfachungen, die eine Modellierung des Sachverhaltes erst möglich machen. So zeigen analytische Modelle im Bereich der nicht-linearen Stoffprozesse im Beton Grenzen auf, die durch einen numerischen Ansatz Beachtung finden können [3, S.21]. Eine numerische Modellierung auf Grundlage der Finite-Elemente-Methode (FEM) weist den Vorteil auf, auf Grundlage des Einbezugs der geometrischen Beschaffenheit des Betons, den Chloridtransport differenzierter zu erfassen. Während die Anwendung der FE-Methode zur Berechnung von statischen Problemen heutzutage ein übliches Instrument darstellt, findet die Methode im Bereich der Modellierung des Stofftransportes nur begrenzt Anwendung. Folglich bestehen für das Beschreiben des Chlorideindringens in Beton nur wenige Ansätze, den Prozess mittels FEM zu erfassen.

1.2. Zielsetzung

Im Hinblick auf den noch geringen Kenntnisstand über die Verwendung der Finite-Element-Methode zur Simulation von Chloriddiffusionsvorgängen in Beton soll in dieser Arbeit ein FEM-Modell entwickelt werden, das diesen Vorgang beschreibt. Ziel ist es, Aussagen über eine Grundtauglichkeit dieser numerischen Methode zum Thema Chloridtransport in Beton treffen zu können.

Die hauptsächliche ingenieurmäßige Aufgabe bei der Anwendung der FE-Methode besteht darin, die zu untersuchenden realen Gegebenheiten in ein finites Analogon zu überführen [4, S.4]. Dazu ist ein gesichertes Grundwissen über die theoretischen Zusammenhänge erforderlich. Die eigentliche Berechnung und Umwandlung der Geometrie in eine Netzstruktur wird vom FE-Programm übernommen. Dies ermöglicht die Berechnung komplexer Sachverhalte im Ingenieurwesen bei geringem Zeitaufwand und minimalem eigenständigen Rechnen.

Da der Chlorideindringvorgang in Beton von vielen Parametern abhängig und damit sehr komplex ist, werden Abgrenzungen getroffen, um der Arbeit einen Rahmen zu setzen und den Umfang des zu erstellenden Modells einzugrenzen. Grundannahme ist daher, dass das Modell nur für wassergesättigte Betonkörper Geltung findet. Somit kann der Chloridtransport auf einen rein diffusiven Vorgang reduziert werden. Weitere Transportprozesse wie die Konvektion finden in diesem Modell daher keine Betrachtung. Ferner findet die Darstellung der Geometrie lediglich auf einer zweidimensionalen Ebene statt. Dadurch sollen vornehmlich lange Berechnungszeiten durch das FEM-Programm verhindert werden. Über die numerische Herangehensweise mittels FEM werden einzelne Parameter implementiert, die maßgebend den Chloridtransport

in Beton beeinflussen. Die durch Tang erläuterte Schwäche von analytischen Modellen, das ein instationärer Chloridtransport in Beton mit einem konstanten Diffusionskoeffizienten eine zu vereinfachte Annahme darstellt [3, S.21], soll in dieser Arbeit Beachtung finden. Weiterhin ist zu erwähnen, dass sich das Modell auf einen Beton im Zustand 1 (ungerissener Beton) bezieht.

1.3. Vorgehensweise

Zum Verständnis des Diffusionsvorganges von Chlorid in Beton bzw. im Zementstein ist ein grundlegendes Wissen zur Struktur und Strukturbildung des Betons notwendig. Da die eigentliche Strukturbildung auf dem Erhärtungsprozess des Zementes mit dem Anmachwasser beruht, findet dieser in den folgenden Kapiteln nähere Betrachtung. Darauf aufbauend soll der Transportprozess des Chlorides im Beton dargestellt werden. Den Hauptteil dieser Arbeit stellt die Entwicklung des FEM-Modells mit Hilfe des Programms „COMSOL Multiphysics 5.5“ mit Einbezug der in den Grundlagen genannten diffusionsbeeinflussenden Faktoren dar. Die Grundtauglichkeit des Modells wird über eine Validierung be- oder widerlegt. Dabei wird das FEM-Modell mittels einer Versuchsreihe der HafenCity Universität Hamburg empirisch geprüft sowie einem analytischen Berechnungsmodell zur Beschreibung von Chlorideindringvorgängen in Beton gegenübergestellt. Die Abbildung 1.1 stellt den Aufbau der Arbeit dar:

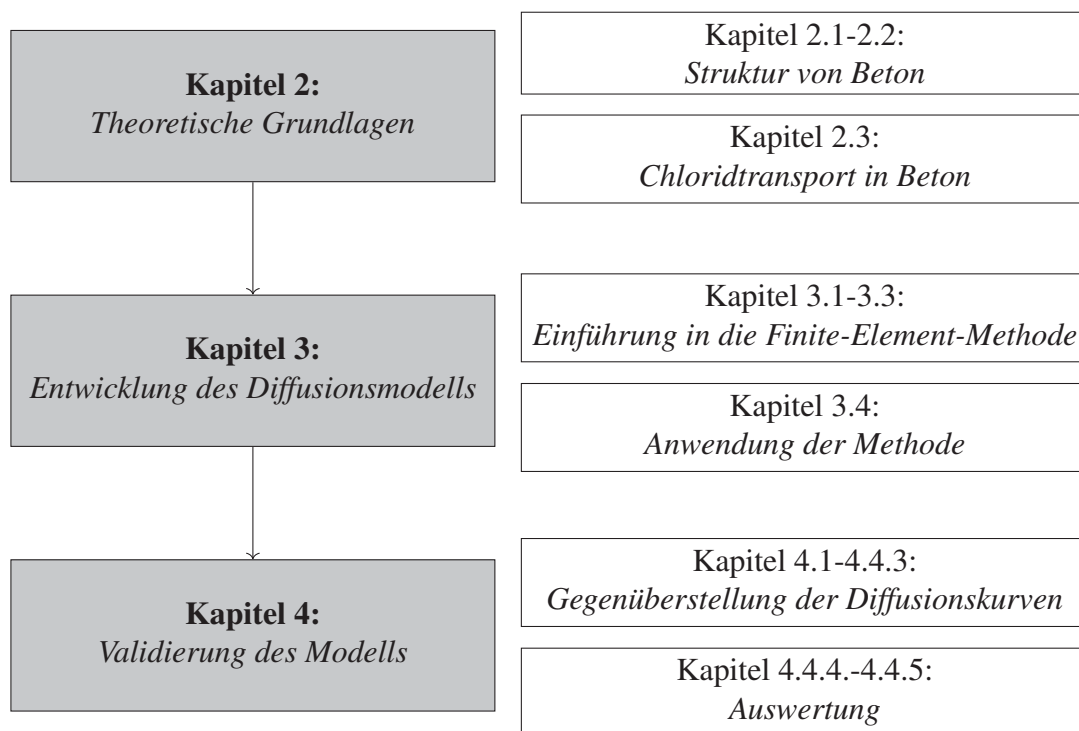


Abbildung 1.1: Aufbau der Arbeit

2. Theoretische Grundlagen

2.1. Diffusionseigenschaft von Beton

Gemäß der DIN 1045 ist der Baustoff Beton ein Mehrstoffsystem, welches aus Zement, grober sowie feiner Gesteinskörnung und Wasser besteht. Zusatzmittel, Zusatzstoffe und Fasern können nach der Definition ebenfalls Bestandteil sein. Mit Beginn der Hydratation erhält der Beton seine Eigenschaften. Beschränkt sich das Größtkorn der Gesteinskörnung auf $D_{GK} \leq 4$ mm, wird das Gemenge als Mörtel, andernfalls als Beton bezeichnet [5, S.226]. Die Abbildung 2.1 soll einführend die Struktur von Beton und die aus der Struktur resultierenden Diffusionseigenschaften veranschaulichen.

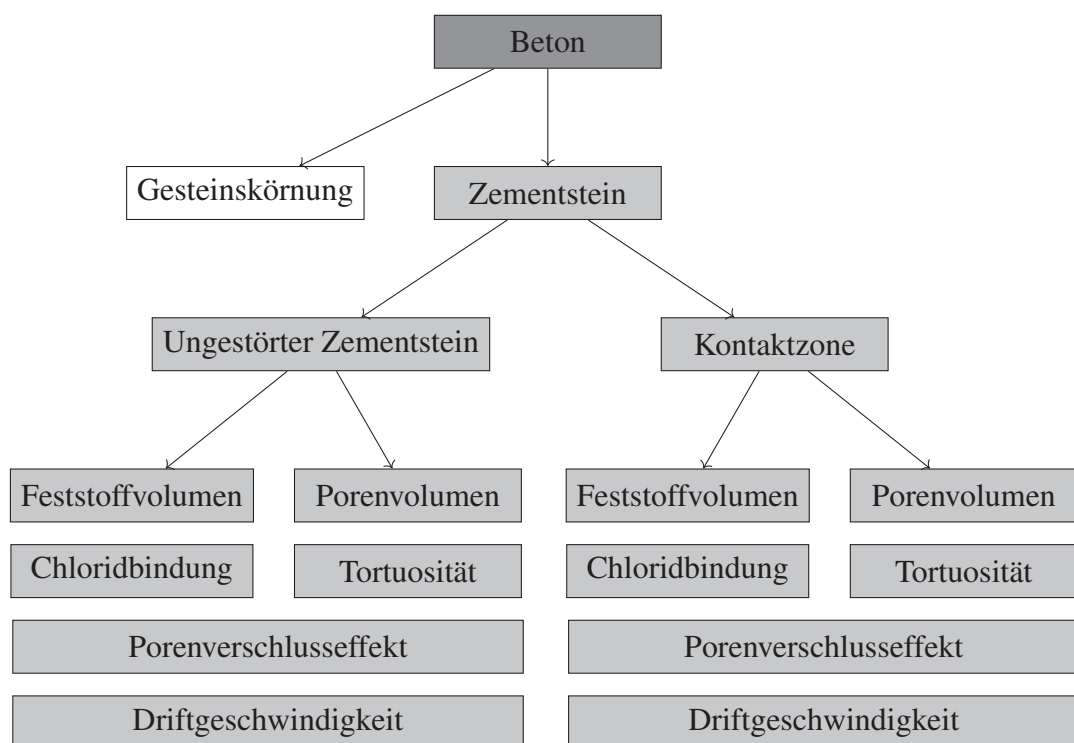


Abbildung 2.1: Struktur von Beton mit Darstellung der diffusionsbeeinflussenden Eigenschaften

Mesoskopisch gesehen, lässt sich Beton in die zwei Hauptbestandteile Zementstein und Gesteinskörnung zerlegen. Anders als bei einer Mikrostruktur werden nur die für den zu untersuchenden Sachverhalt wesentlichen Bestandteile und nicht die Bestandteile der Feinstruktur auf mikroskopischer Ebene erfasst [6, S.68]. Eine makroskopische Darstellung des Betons als Punktkontinuum stellt das Pendant zur Mikrostruktur dar. Bei der Betrachtung der Diffusionseigenschaften scheint der mesoskopische Ansatz sinnvoll, da vornehmlich die im Zementstein befindlichen Kapillarporen für den Chloridtransport im Beton verantwortlich sind [7, S.19] (Kapitel 2.2.5). Folglich finden in den nächsten Kapiteln nur die Struktur und Strukturbildung des Zementsteins

genauere Betrachtung. Da der Zementstein in den Kontaktzonen mit der Gesteinskörnung andere Strukturverhältnisse mit anderen Diffusionseigenschaften aufweist, wird der Zementstein an dieser Stelle differenzierter betrachtet. In der nächsten Ebene kann die Kontaktzone und der ungestörte Zementstein in einen Feststoff- und einen Porenanteil aufgeteilt werden. Im Hinblick auf die Chloriddiffusion beeinflusst der Feststoff den Transport aufgrund seiner Fähigkeit, Chloride zu binden [3, S.3]. Das Porenwasser stellt das eigentliche Transportmedium der Chloride dar. Somit haben der Porenanteil und der Grad der Porenvernetzung (Tortuosität) einen bedeutsamen Einfluss auf den Chloridtransport. Weitere Effekte wie der Porenverschlusseffekt und die Driftgeschwindigkeit der Ionen werden durch den Feststoffanteil sowie durch das Porenvolumen beeinflusst.

2.2. Zementstein

2.2.1. Zement als Bindemittel

Zement ist ein anorganisches Bindemittel. Als pulverförmiger Stoff und unter Zugabe von Wasser bildet er zunächst den sogenannten Zementleim, nach Erhärtung den Zementstein. Chemische und physikalische Reaktionen (Hydratation, Kristallisation) der Edukte führen zur Verfestigung des Leims und zu einer Verkittung von Baustoffen an deren Phasengrenzen [8, S.37]. Hydraulische Bindemittel haben die Eigenschaft, an Wasser und an Luft zu erhärten, während Luftbindemittel lediglich an der Luft erhärten und nur an der Luft beständig sind [8, S.38]. Zement fällt hierbei in die Gruppe der hydraulischen Bindemittel. Die im Bauwesen angewendeten Zemente sind in der Norm DIN EN 197-1 geregelt und werden als CEM-Zemente bezeichnet. Die Ausgangsstoffe zur Zementherstellung sind Kalkstein oder Kreide und Ton bzw. Kalkmergel [9, S.209]. Diese werden durch einen Sinterungsprozess bei ca. 1500°C zu Zementklinker verarbeitet. Die dabei hauptsächlich entstehenden Klinkerphasen (Oxide) sind der Tabelle 2.1 zu entnehmen.

Tabelle 2.1: Phasen des Zementklinkers vgl. [9, S.211]

Klinkerphase	Chemische Formel	Kurzbezeichnung
Tricalciumsilicat (Alit)	$3 \text{ CaO} \cdot \text{SiO}_2$	C_3S
Dicalciumsilicat (Belit)	$2 \text{ CaO} \cdot \text{SiO}_2$	C_2S
Tricalciumaluminat (Aluminat)	$3 \text{ CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$	C_3A
Calciumaluminatferrit (Aluminatferrit)	$4 \text{ CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	C_4AF

Um ein frühzeitiges Erstarren des Zementes zu verhindern, wird dem Zementklinker

Calciumsulfat in Form von Gips ($\text{CaSO}_4 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$), Halbhydrat ($\text{CaSO}_4 \cdot \frac{1}{2} \text{H}_2\text{O}$) oder Anhydrit (CaSO_4) oder eine Mischung der drei Stoffe beigefügt [TR3]. Im Betonbau wird dadurch eine hinreichend lange Einbauphase des Betons gewährleistet. Ferner können dem Zementklinker nach der Sinterung weitere Zuschlagstoffe als Hauptbestandteil der CEM-Zemente beigefügt werden. Die möglichen Hauptbestandteile der CEM-Zemente sind der Tabelle 2.2 zu entnehmen.

Tabelle 2.2: Hauptbestandteile der CEM-Zemente nach Norm DIN EN 197-1

	Hauptbestandteil	Kurzzeichen	Kurzbeschreibung
1.	Portlandzementklinker	K	Herstellung durch Sinterung, hydraulisches Material, nach Massenanteil mind. 2/3 Calciumsilikat
2.	Hüttensand (granulierte Hochofenschlacke)	S	Nebenprodukt beim Hochofenprozess von Eisenerz, latent-hydraulisch
3.	Gebannter Schiefer	T	Ölschiefer bei ca. 800°C gebrannt, hydraulische und puzzolanische Eigenschaften (siehe Punkt 6)
4.	Kalkstein	L, LL	(CaCO_3)-Gehalt $\geq 75 \text{ M.-%}$ TOC=organischer Kohlenstoff L: $\text{TOC} \leq 0,50 \text{ M.-%}$, LL: $\text{TOC} \leq 0,20 \text{ M.-%}$
5.	Silicastaub	D	Hoher Gehalt an Siliciumdioxid, spez. Oberfläche muss mind. 15,0 m^2/g betragen, puzzolanische Eigenschaften (siehe Punkt 6)
6.	Puzzolane		Natürliche Gesteine, enthalten SiO_2 , bei Wasserzugabe reagieren sie mit Calciumhydroxid zu festigkeitsbildenden Calcium-Silicat-Hydraten
6.1	Natürliches Puzzolan	P	Stoffe vulkanischen Ursprungs oder Sedimentgesteine mit geeigneter chemisch-mineralogischer Zusammensetzung
6.2	Natürliches getempertes Puzzolan	Q	Thermisch aktivierte Stoffe vulkanischen Ursprungs, Tone, Schiefer oder Sedimentgestein
7.	Flugasche		Wird aus Rauchgasen von Kohlekraftwerken gewonnen, feinkörniger Staub, bestehend aus kugeligen Partikeln mit amorpher Struktur
7.1	Kieselsäurereiche Flugasche	V	besteht überwiegend aus reaktionsfähigem SiO_2 und Al_2O_3 , puzzolanische Eigenschaften
7.2	Kalkreiche Flugasche	W	weist <u>zusätzlich</u> reaktionsfähiges CaO auf, latent-hydraulische und/oder puzzolanische Eigenschaften

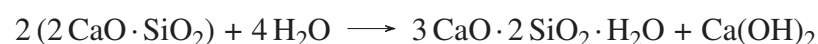
Nebenbestandteile des Zementes können anorganische natürliche mineralische Stoffe, anorganische mineralische Stoffe aus der Klinkerherstellung oder die in der Tabelle 2.2 genannten Stoffe sein, wenn sie nicht bereits als Hauptbestandteil vorliegen. Voraussetzung der Nebenbestandteile ist, dass sie den Wasserbedarf des Zementes nicht signifikant beeinflussen, die Beständigkeit des Mörtels bzw. des Betons nicht beeinträchtigen oder sich negativ auf den Korrosionsschutz der Bewehrung auswirken [TR3].

Die Norm DIN EN 197-1 regelt die Zusammensetzungen von 27 Normalzementen, welche abhängig von der Zusammensetzung in die folgenden fünf Hauptzementarten unterteilt werden:

- CEM I Portlandzement
- CEM II Portlandkompositzement
- CEM III Hochofenzement
- CEM IV Puzzolanzement
- CEM V Kompositzement

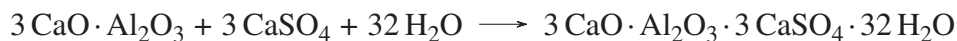
2.2.2. Hydratation

Die Reaktion des Anmachwassers mit den im Zement enthaltenen Klinkerphasen, Zuschlagstoffen und ggf. Zusatzstoffen wird in der Zementchemie als Hydratation bezeichnet. Die dabei entstehenden Calciumsilikathydrate (C-S-H) und Calciumaluminathydrate (C-A-H) führen die eigentliche Verfestigung des Betons herbei [10, S.126]. Ursache dafür sind die entstehenden langkettigen Anionen aus eckenverknüpften SiO_4^- -Tetraedern [11, S.438]. Während des Erhärtungsprozesses entsteht aus diesen Ketten ein Netzwerk winziger Kristallstrukturen, die die Gesteinskörnung des Betons einschließen und das Gefüge damit verfestigen. Der tatsächliche Hydratationsvorgang ist sehr komplex, kann jedoch näherungsweise durch die folgenden Reaktionsgleichungen beschrieben werden. Der Reaktionsverlauf und die Strukturbildung wird essentiell durch die Calcium-Silikate Alit und Belit beeinflusst, die unter folgender Reaktion exotherm mit dem Wasser reagieren [12, S.427]:

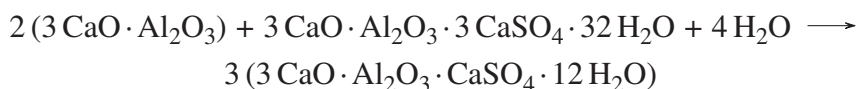


Den Reaktionsgleichungen ist zu entnehmen, dass neben den Calciumsilikathydraten auch das bedeutsame Calciumhydroxid (Portlandit) entsteht, das für die signifikante Erhöhung des pH-Wertes im Beton auf etwa 12,5 verantwortlich ist. Zusätzliche Alkalien erhöhen den pH-Wert weiter auf ca. 13,2 [10, S.126]. Das Portlandit spielt u. a.

eine wichtige Rolle bei dem Erhärtungsprozess von Puzzolanen und dem Hüttensand. Ein Teil der im Portlandzement enthaltenen Klinkerphase Tricalciumaluminat reagiert mit dem Calciumsulfat (z.B. Gips) zu Ettringit, der die bereits genannte frühzeitige Erstarrung des Bindemittels verhindert [12, S.425]:



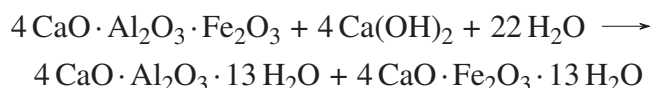
Der Ettringit besteht nur als Zwischenphase und reagiert mit noch vorhandenem Tricalciumaluminat zu Monosulfat [12, S.427]:



Tricalciumaluminat, das nicht bei der Ettringitbildung mitwirkte, reagiert mit dem Portlandit zu Tetracalciumaluminathydrat [12, S.427]:



Calciumaluminatferrit reagiert zum analogen Hydratationsprodukt, ein Teil des Aluminiums ist lediglich durch Eisen ersetzt [12, S.427]:



Im Gegensatz zu den hydraulischen Klinkerphasen im Portlandzement reagieren latent-hydraulische Bindemittel wie z.B. der Hüttensand nur in Gegenwart eines Anregers. In Portlandkompositzementen wird der Anreger durch das freigesetzte Portlandit, dem Calciumsulfat sowie den vorhandenen Alkalien dargestellt [13, S.30]. Die Zusammensetzung des Hüttensandes ist ähnlich der des Portlandzementes und bildet mit den entstehenden C-S-H vergleichbare Hydratationsprodukte. Neben dem benötigten Anreger unterscheidet sich die Hydratation des Hüttensandes vom Portlandzement vor allem durch eine deutlich langsamere Reaktionsgeschwindigkeit [13, S.30].

Puzzolanische Stoffe enthalten Kieselsäure (SiO_2), haben jedoch nur einen geringfügigen Kalkanteil [13, S.31]. Hier reagiert das im Zementleim freiwerdende Portlandit direkt mit dem Puzzolan zu C-S-H-ähnlichen Hydratationsprodukten. Schematisch kann die Reaktion wie folgt beschrieben werden [13, S.31]:



2.2.3. Hydratationsverlauf

Da die Hydratationsgeschwindigkeiten der einzelnen Klinkerphasen und der weiteren Hauptbestandteile deutlich variieren, hängt der Hydratationsprozess eines Zementes stark von seiner Zusammensetzung ab. So beeinflusst Alit besonders die Frühfestigkeit des Zementsteins, wogegen das Belit einen großen Teil zur Nacherhärtung

beiträgt. Latent-hydraulische Bindemittel und Puzzolane, die eine Abhängigkeit vom im Hydratationsverlauf freiwerdenden Portlandit aufzeigen, beeinflussen ebenfalls die Nacherhärtung. Die Abbildung 2.2 verdeutlicht die zeitabhängige Druckfestigkeitsentwicklung der reinen Klinkerphasen, die mit dem Hydratationsverlauf der Klinkerphase gleichzusetzen ist.

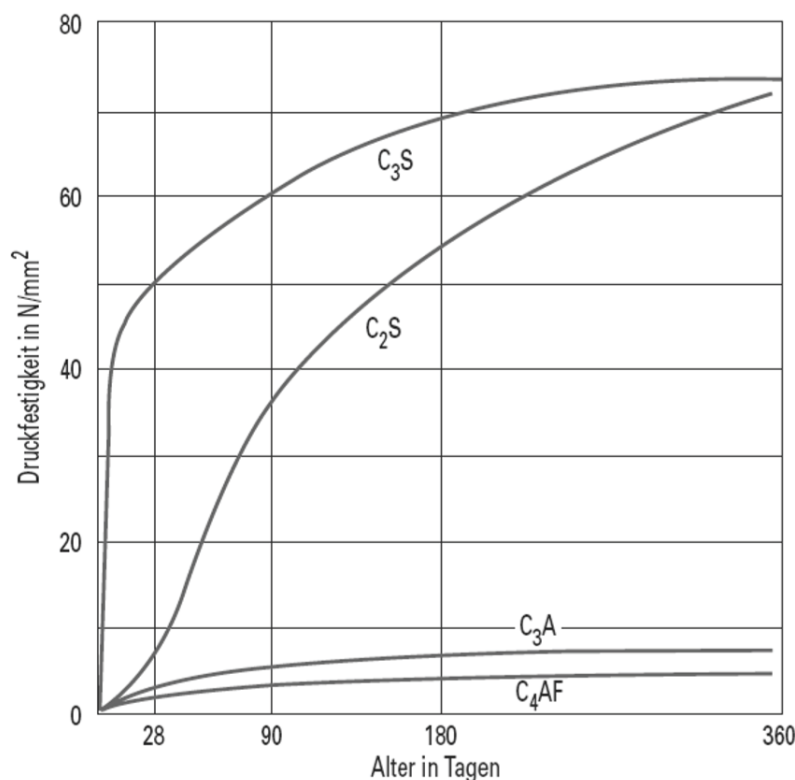


Abbildung 2.2: Druckfestigkeitsentwicklung der reinen Klinkerphasen [14, S.110]

Nicht nur die Zusammensetzung des Zementes, sondern auch seine Mahlfeinheit hat einen Einfluss auf die Hydratationsgeschwindigkeit. Je feiner die Zementpartikel sind, desto größer wird die Kontaktfläche zwischen Partikel und Anmachwasser. Die Folge ist eine höhere Hydratationsgeschwindigkeit und damit einhergehend eine höhere Frühfestigkeit [13, S.41]. Die Endfestigkeit wird durch die Mahlfeinheit eines Zementes nicht beeinflusst, da sich die Zementzusammensetzung nicht ändert.

Der Wasserzementwert (w/z -Wert), also das Verhältnis zwischen der Masse des wirksamen Anmachwassers und der Masse des Bindemittels, beeinflusst ebenfalls den Hydratationsverlauf. Aufgrund eines höheren Wasserangebotes wird der Kontakt zwischen Wasser und Partikeln erhöht und die Reaktion begünstigt [13, S.43]. Ferner wird bei hohem Wasserangebot ein dichtes Gefüge des Zementsteins gestört, sodass die Hydratation durch das in den Porenkanälen transportierte Wasser begünstigt wird. An dieser Stelle sei bereits vermerkt, dass ein zu hoher Wassergehalt den Porenraum des

Zementsteins so vergrößert, dass er einen merklichen Einfluss auf die Durchlässigkeit und Festigkeit des Betons hat.

Des Weiteren beeinflusst die Umgebungstemperatur die Hydratationsreaktionen und -geschwindigkeit. Der Einfluss ist ebenfalls sehr komplex und kann [13, S.46 f.] entnommen werden. In dieser Arbeit wird eine Raumtemperatur bzw. eine Temperatur unter Laborbedingungen (293 K) als konstant in der Berechnung angenommen.

Weitere Faktoren, die den Hydratationsprozess beeinflussen, sind nachfolgend genannt und werden in [13, S.41 ff.] näher behandelt:

- Feuchte
- Zusatzmittel
- Einwirkung von Huminstoffen
- Umgebungsdruck

2.2.4. Hydratationsgrad

Die Prozesskenngröße zur Beschreibung des Hydratationsfortschritts eines Zementes stellt der Hydratationsgrad α [-] dar. Er gibt das Verhältnis zwischen dem aktuellen Hydratationsfortschritt zur maximal möglichen Hydratation an. Schematisch lässt sich dieser wie folgt darstellen:

$$\text{Hydratationsgrad } \alpha = \frac{\text{Aktueller Hydratationsfortschritt}}{\text{Maximal mögliche Hydratation}}$$

Der Hydratationsgrad eines Zementes ist nicht direkt zu messen. Es wurden verschiedene Verfahren entwickelt, um die Kenngröße rechnerisch ermitteln zu können. So konnten z.B. Zusammenhänge zwischen dem Hydratationsgrad und der Wärmeentwicklung, der Porosität oder des autogenen Schwindens des Zementsteins festgestellt werden [13, S.52]. Eine vollständige Hydratation des Zementsteins ist praktisch unmöglich. Besonders Zementpartikel eines verhältnismäßig großen Durchmessers können nicht vollständig durchhydrieren [13, S.56]. Daher wird der aktuelle Hydratationsfortschritt stets mit der maximal möglichen Hydratation ins Verhältnis gesetzt. Der maximal erreichbare Hydratationsgrad α_{max} [-] hängt stark vom w/z -Wert ab und kann nach Röhling mit hinreichender Genauigkeit durch folgende Gleichung berechnet werden [13, S.57]:

$$\alpha_{max} = 1 - \exp(-3,8 \cdot w/z) \quad (2.1)$$

2.2.5. Porenstruktur

Mit der Herstellung von Beton und der Hydratation der Zementpartikel geht die Bildung und Umstrukturierung eines Porengefüges im Zementstein einher. Der Materialkennwert ϵ [-] als Maß der Porosität gibt den Anteil des Porenvolumens am gesamten Volumen des betrachteten Körpers an [13, S.74 f.] und ist damit eine dimensionslose Größe. Grundsätzlich werden die Poren im Zementstein nach ihrer Porengröße klassifiziert und ihre Eigenschaften anhand der Porengröße unterschieden. Die International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) teilte erstmals die Poren in die sogenannten Mikro-, Meso- und Makroporen ein [15, S.606]. Darauf aufbauend etablierte Setzer den Ansatz, den Poren eine zylindrische Form zuzuweisen und diese in Abhängigkeit ihres hydraulischen Radius R_H in die von ihm benannten Grobporen, Kapillarporen und Gelporen aufzuschlüsseln [16, S.167]. Die Tabelle 2.3 verdeutlicht die von Setzer festgelegte Klassifizierung der Poren im Zementstein.

Tabelle 2.3: Klassifizierung von Poren im Zementstein nach Setzer/IUPAC vgl. [16, S.168]

Porenart	Hydraulischer Radius R_H
Grobporen	$\geq 1 \text{ mm}$
Makro-Kapillarporen	$< 1 \text{ mm}$
Meso-Kapillarporen	$< 30 \text{ }\mu\text{m}$
Mikro-Kapillarporen	$< 1 \text{ }\mu\text{m}$
Meso-Gelporen	$< 30 \text{ nm}$
Mikro-Gelporen	$< 1 \text{ nm}$

Die Abbildung 2.3 stellt schematisch die Hydratation eines Zementpartikels dar, der aufgrund der entstehenden C-S-H-Phasen im Laufe der Hydratation eine deutliche Volumenzunahme aufweist. Gleichzeitig ist durch die nadelartigen C-S-H-Phasen ein poröses Netzwerk entstanden. Mit voranschreitender Hydratation wird ca. 25% Wasser (bezogen auf die Zementmasse) in den Hydratphasen chemisch gebunden [17, S.366].

Durch die chemische Verbindung wird eine Volumenverminderung um ca. $6 \text{ cm}^3/100 \text{ g}$ Zement generiert [17, S.364]. Das chemische Schwinden verursacht keine Veränderung der äußeren Abmessung des Zementsteins bzw. Betons (wenn von außen genügend Wasserzufuhr gegeben ist: Laborbedingungen/optimale Nachbehandlung [14, S.128]), sondern bildet die nach Setzer benannten Gelporen [17, S.364]. Das in den Gelporen verbliebene, nicht chemisch gebundene Wasser lagert sich adsorptiv an die

Hydratphasen an. Diese starken intermolekularen Wechselwirkungen machen Gelporen gasundurchlässig [17, S.365] und spielen in Bezug auf die Diffusionseigenschaft des Betons eine vernachlässigbare Rolle [7, S.19].

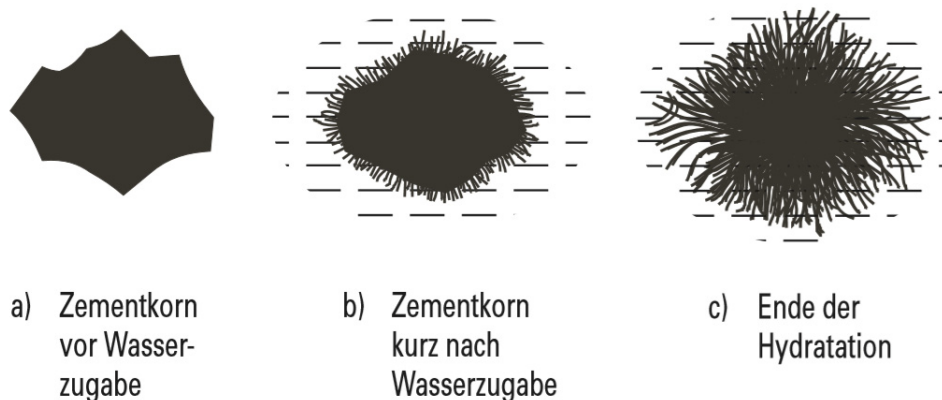


Abbildung 2.3: Einfache Darstellung der Hydratation eines Zementkorns [14, S.127]

Der Anteil an Kapillarporen im Zementstein hängt hauptsächlich vom gewählten w/z -Wert und dem Fortschritt der Hydratation ab. Wie bereits erwähnt, wird ca. 25% Anmachwasser, bezogen auf die Zementmasse, zur Hydratation des Zementes benötigt. Zusätzlich wird ca. 15% Wasser adsorptiv, also physikalisch, gebunden. Dies entspricht einem w/z -Wert von 0,4 (0,36 bis 0,38 nach [18, S.260]). Bei vollständiger Hydratation sollte dann folglich das gesamte Anmachwasser chemisch oder physikalisch im Zementstein gebunden sein. Wenn also der w/z -Wert größer als 0,4 gewählt wurde oder die Hydratation noch nicht (annähernd) abgeschlossen ist, liegt ungebundenes Wasser im Zementstein vor, das sich durch die Bildung von Kapillarporen äußert. Das Prinzip ist in Abbildung 2.4 dargestellt.

Mit dem Verlauf der Hydratation und der Umsetzung des Wasser mit dem Zement zu den Hydratphasen, sinkt die Kapillarporosität, welche somit eine Zeitabhängigkeit aufweist. Da die Hydratation durch die Zusammensetzung des Zementes beeinflusst wird, hat diese auch auf die Porenbildung einen Einfluss. Des Weiteren wirken sich Bestandteile wie Microsilica, Flugasche oder Hüttensand beispielsweise aufgrund eines „füllenden Effektes“ mindernd auf die Porosität aus [13, S.70]. Das Wasser in den Kapillarporen erfährt durch die höhere Porengröße weniger adhäsive Einflüsse im Vergleich zum Gelporen-Wasser, sodass die im Zementstein homogen verteilten Kapillarporen (bzw. das Kapillarporenwasser) für die Transportphänomene im Zementstein hauptsächlich verantwortlich sind [18, S.260].

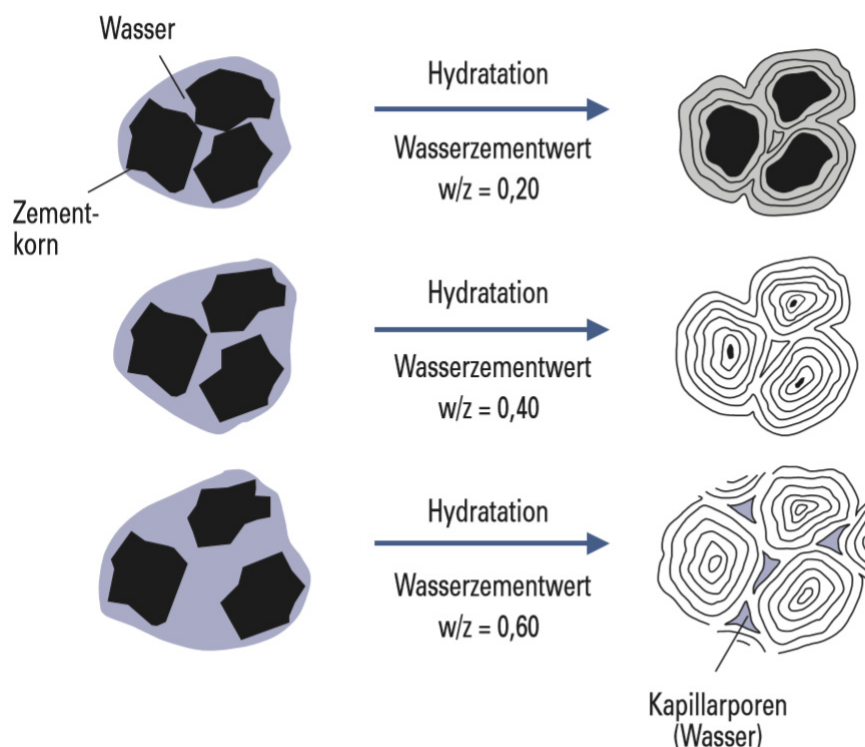


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Erhärtung von Zementen bei verschiedenen w/z -Werten [14, S.129]

Die Grobporen nach Setzer umfassen die Luft- und Verdichtungs-poren. Beim Anmachen des Zementes mit Wasser wird Luft in den Zementleim eingeführt. Die Verdichtung des Gemenges kann die Luft im Zementleim nie restlos ausweichen lassen; Luft-poren im Zementstein sind daher die Folge. Bei einer unvollständigen Verdichtung entstehen die Verdichtungs-poren. Diese stellen die größten Poren im Zementstein dar.

2.2.6. Kontinuität und Tortuosität

Aufgrund der sehr langen Hydratationszeiten, die sich praktisch über Jahre hinweg strecken und aufgrund allgemeiner Unstetigkeiten im Gefüge, ist es wahrscheinlich, dass der Zement nicht vollständig hydratisiert und trotz eines w/z -Wertes von $\sim 0,4$ das Anmachwasser Kapillarporen bildet. Liegt die Kapillarporosität jedoch unter 25% kann der Zementstein als dichtes Gefüge betrachtet werden. Bei einem Kapillarporen-anteil $\leq 25\%$ sind die Kapillarporen kaum untereinander verbunden. Man spricht in diesem Fall von einer Diskontinuität [17, S.367]. In der Praxis wird daher häufig ein w/z -Wert von 0,5 gewählt, um den Hydratationsprodukten genügend Wasser zur Hydratation bereitzustellen. Die Kapillarporosität bleibt bei einem w/z -Wert von 0,5 i.d.R. unter 25% [17, S.367]. Die Tortuosität τ [-] stellt, bezogen auf den Massentransport, einen Parameter dar, der die Kontinuität eines Stoffes erfasst. Sie gibt das Verhältnis zwischen effektiver Weglänge L_e [m], entlang der sich ein Masseteilchen im porösen

Medium vom Punkt A zum Punkt B bewegen muss und der gradlinigen Verbindung L [m] dieser Punkte an [19, S.118].

$$\tau = \frac{L_e}{L} \quad (2.2)$$

Je geringer die Poren des Mediums vernetzt sind, desto größer ist der Umweg des Masseilchens beim Transportvorgang (hier gemeint das Chlorid-Ion); desto größer ist der Materialkennwert τ . Die Folge ist eine Verlangsamung des Diffusionsvorganges. Da der Grad der Tortuosität vom Grad der Porosität abhängt und eine Zeitabhängigkeit der Porosität im Beton bereits aufgezeigt wurde, ist somit auch die Tortuosität nicht konstant und ändert sich mit der Zeit bzw. dem Fortschritt der Hydratation.

2.2.7. Kontaktzone der Gesteinskörnung mit dem Zementstein

Die Zone zwischen der Gesteinskörnung und dem Zementstein wird als Kontaktzone (engl. Interfacial Transition Zone, ITZ) bezeichnet. Sie trägt zur Erhöhung der Diffusionseigenschaften des Betons bei [20, S.28]. Es stellte sich heraus, dass in dieser Zone eine höhere Porosität als im ungestörten Zementstein vorzufinden ist [21, S.67]. Zurückzuführen ist dies auf den sogenannten „Wall-Effekt“, dessen Prinzip der Abbildung 2.5 entnommen werden kann.

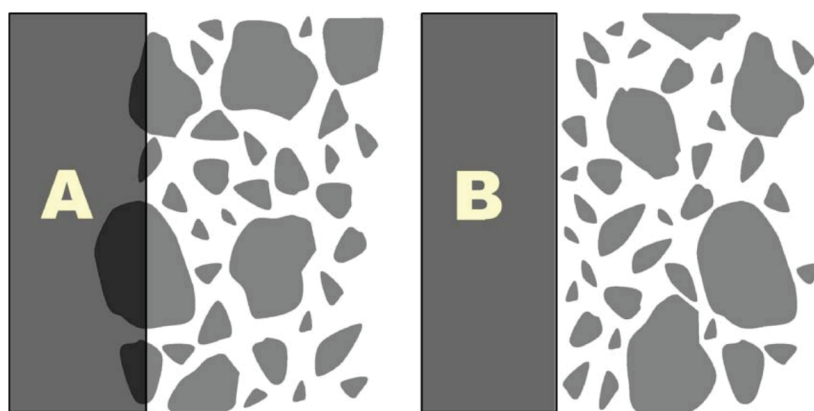


Abbildung 2.5: „Wall-Effekt“ - Prinzipskizze [22, S.412]

Der grau markierte Bereich „B“ stellt ein Gesteinskorn dar. An den Gesteinskorn Grenzen sind vermehrt viele kleine Partikel und kleine Gesteinskörner vorzufinden. Größere Gesteinskörner können sich aufgrund ihrer vornehmlich runden Form nicht an die Grenzen anschmiegen. Die Folge ist eine höhere Konzentration von Zementleim in dieser Zone und daher auch eine höhere Porosität im Bereich von Gesteinskörnern. Bei Nicht-Anwesenheit großer Gesteinskörner verteilen sich die Partikel homogen im Raum (Veranschaulichung im Bereich A). Die Kontaktzone stellt einen in der Dicke schwer zu definierenden Bereich dar. Je nach Literatur beträgt die Dicke der Zone ca. 10 μm bis 35 μm [23, S.968], 20 μm bis 50 μm [22, S.413] [24, S.1] oder auch 50 μm

bis 100 μm [20, S.28]. Nach [22, S.418] wird der ITZ eine Zunahme der Porosität um ca. 10-20% im Vergleich zum ungestörten Zementstein zugewiesen. Gleichzeitig soll diese im Verlauf der Hydratation annähernd proportional zur Porosität des ungestörten Zementsteins abnehmen [22, S.418]. Höhere Ansätze der ITZ-Porositätszunahme von 50 bis 100% sind jedoch auch in der Literatur zu finden [25, S.8].

Beeinflussende Faktoren der ITZ stellen unter anderem der w/z -Wert und der Einsatz von puzzolanischen Stoffen dar. Nach [23, S.968] wird die Dicke der Kontaktzone mit steigendem w/z -Wert erhöht. Puzzolanische Stoffe wie z.B. Flugasche verdichten die Kontaktzone aufgrund ihres Füller-Effektes und der Hydratation mit dem Portlandit. Eine Verringerung der Porosität ist, wie auch im ungestörten Zementstein, die Folge [20, S.28].

Die in der Literatur voneinander abweichenden Aussagen zur ITZ stellen ein Hindernis dar, konkrete Annahmen zur ITZ zu treffen. Aufgrund der sich stets deckenden Feststellung einer Zunahme der Porosität und die daraus resultierende Beeinflussung der Diffusionseigenschaft des Betons, sollte die Kontaktzone in dieser Arbeit jedoch nicht außer Acht gelassen werden.

2.3. Chloridtransport im Zementstein

2.3.1. Transportmechanismus Diffusion

In dieser Arbeit wird lediglich die Diffusion als Transportmechanismus von Chloriden im Beton betrachtet. Die Konvektion der Chloride, hervorgerufen durch kapillares Saugen, die Mikroeislinsepumpe oder durch Permeation [7, S.16], wird in diesem Modell nicht erfasst.

Nach den Gesetzen der Thermodynamik strebt ein System, das sich nicht im Gleichgewicht befindet, Ausgleichsprozesse an, die langfristig einen Gleichgewichtszustand herbeiführen. Unterschiedliche Potenziale im System stellen die Ursache für das Ungleichgewicht dar. Der Ausgleichsprozess findet stets entlang des Potenzialgefälles, dem sogenannten Gradienten, statt. Beim Stofftransport beruht der Ausgleichsprozess im Wesentlichen auf diffusiven Vorgängen [26, S.196], die sich entlang eines Konzentrationsgradienten bewegen. Der Diffusionsvorgang ist auf die stochastische, also zufällige und ungeordnete Bewegung von Materie eines betrachteten Stoffes zurückzuführen [27, S.1] (vgl. Brown'sche Molekularbewegung). Diese Bewegung hat die Tendenz, die Materie gleichmäßig innerhalb der Phase zu verteilen [26, S.197].

Das grundlegende Prinzip der Diffusion beruht auf den Erkenntnissen von Adolf Fick

und seinen gleichnamigen Fick'schen Gesetzen zur Diffusion. Fick erkannte im Jahre 1855 die Analogie zwischen dem Stofftransport und den durch Fourier 1822 aufgestellten Gesetzmäßigkeiten der Wärmelehre [27, S.2] [28, S.65]. Das erste Fick'sche Diffusionsgesetz erfasst dabei den stationären Stofftransport. So gilt für den eindimensionalen Raum, dass die Teilchenstromdichte J [mol/m²s] proportional zum Konzentrationsgradienten $\partial c/\partial x$ [mol/m⁻⁴] entgegen des Potenzialgefälles ist. Die Variable c [mol/m²] erfasst dabei die Konzentration der diffusiven Substanz und x [m] den Ort senkrecht zur Transportrichtung. Die Proportionalitätskonstante wird als Diffusionskoeffizient D_{ss} [m²/s] bezeichnet (Index ss = steady state nach [7][21]). Die Einheiten können sich sowohl auf Massen, als auch auf Stoffmengen beziehen [27, S.2]:

$$J = -D_{ss} \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.3)$$

Das zweite Fick'sche Gesetz erfasst instationäre Vorgänge, bei der sich die Konzentration mit der Zeit und dem Ort ändert. Für den eindimensionalen Fall und bei konstantem Diffusionskoeffizienten findet die folgende Gesetzmäßigkeit Anwendung. Der Diffusionskoeffizient D_{nss} [m²/s] kann dann den Index nss (non steady state nach [7][21]) erhalten, um die instationären Verhältnisse in Abhängigkeit der Zeit t [s] zu verdeutlichen [27, S.4]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{nss} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.4)$$

Findet ein Diffusionsprozess in einem porösen Medium und nicht etwa in einer freien wässrigen Lösung statt, kann der Diffusionskoeffizient differenzierter betrachtet werden. Dullien [29] konnte eine Beziehung zwischen dem Diffusionskoeffizienten eines Stoffes in freier wässriger Lösung und dem sich einstellenden Diffusionskoeffizienten im porösen Medium feststellen. Rein aus der Geometrie des porösen Mediums wirkt sich das Gefüge retardierend auf den Diffusionsprozess aus, was wie folgt zu berücksichtigen ist [29, S.515]:

$$D_{eff} = \frac{\varepsilon}{\tau} D \quad (2.5)$$

D_{eff} [m²/s] stellt den effektiven Diffusionskoeffizienten dar, der den Diffusionsvorgang in Abhängigkeit des porösen Mediums beschreibt. D [m²/s] ist der allgemeine Diffusionskoeffizient der zu betrachtenden Spezies (hier Chlorid-Ionen), der sich in freier wässriger Lösung einstellt. Die Grundlagen der Porosität ε und der Tortuosität τ wurden in den vorherigen Kapiteln behandelt. Da beide Kennwerte im Beton eine Zeitabhängigkeit aufweisen und mit dem Verlauf der Hydratation sinken, sinkt folglich auch der Diffusionskoeffizient, welcher als Maß der Diffusionseigenschaft eines Mediums herangezogen werden kann. Die zeitabhängige Diffusionseigenschaft des

Zementsteins bzw. des Betons lässt sich somit an dieser Stelle nochmals verdeutlichen.

2.3.2. Chloridsorption

Anders als bei der Diffusion in freier Lösung kann der diffundierende Stoff in Wechselwirkung mit dem porösen Medium treten. Dieser Vorgang wird allgemein als Sorption bezeichnet und erfasst sowohl die Adsorption, also die Anlagerung von Materie an Phasengrenzen eines Stoffes, als auch die Absorption [30, S.81]. Die Absorption bezeichnet die Einlagerung von Materie im betrachteten Stoff. Der aufnehmende Stoff wird dabei als Sorbens, der stoffabgebende als Sorptiv bezeichnet. Die ein- bzw. angelagerte Materie ist das Sorbat. Die Sorption kann entweder auf chemischem Weg oder auf physikalischer Ebene zustande kommen. Die Chemisorption umfasst daher chemische Bindungen, die Physisorption beruht hauptsächlich auf Wechselwirkungen aufgrund von van der Waals-Kräften und stellt i.d.R. die schwächere Bindungskraft dar [30, S.81].

Bei der Betrachtung der Chloriddiffusion in Beton hat die Chloridsorption eben diesen retardierenden Einfluss auf den Transport der Chlorid-Ionen [3, S.3]. In dieser Arbeit ist vornehmlich die quantitative Beschreibung des Prozesses von Interesse. Die qualitative Darstellung der Chloridsorption ist sehr komplex und in [31, S.317 ff.] detailliert beschrieben. Je nach der verfügbaren freien Adsorptionsfläche, der Sorbatkonzentration im Sorptiv und der Umgebungstemperatur stellt sich ein Sorptionsgleichgewicht im System ein [30, S.81]. Mit dem Eindringen der Chloride und der sich damit ändernden freien Chloridkonzentration stellt sich ein neues Sorptionsgleichgewicht ein. Die dabei gebundenen Chloride haben keinen Einfluss auf das diffusionsantreibende Potenzialgefälle [7, S.18]. Folglich liegen rein aus Gründen der Chloridsorption im Beton instationäre Bedingungen in Bezug auf die Chloriddiffusion vor [7, S.18 f.].

Adsorptionsisothermen erfassen den Zusammenhang zwischen der Oberflächenbelegung und der Adsorptkonzentration und ermöglichen eine quantitative Beschreibung der Adsorption. Bei einer freien Chloridkonzentration von 0,01 bis 1 mol/l [7, S.32] lässt sich die Chloridsorption (also die Ad- sowie Absorption) von Beton nach Tang [3, S.3] durch die sogenannte Freundlich-Isotherme sowie durch die BET-Isotherme annähernd beschreiben. Beide Isothermen erfassen dabei ein nicht-lineares Verhältnis zwischen Beladung des Sorbens und der freien Chloridkonzentration.

Grundsatz der Freundlich-Isotherme ist, dass die Beladung eines Adsorbens begrenzt ist und bei steigender Beladung stets weniger Adsorbat aufgenommen werden kann [32, S.97]. Erhöht sich also die Konzentration der freien Materie in der Porenlösung, wird nur begrenzt mehr Adsorbat gebunden. Die Wahl der Variablen wird hier vorgrei-

fend auf Grundlage des FEM-Programms festgelegt. Die Beladung c_b [mol/m³] errechnet sich so aus der Konzentration des Solvents/Sorptivs in der Porenlösung [mol/m³], multipliziert mit einer Freundlich-Konstante K_F [-] und potenziert mit dem Freundlich-Exponenten N_F [-]. Konstante und Exponent sind stoffspezifische Kennwerte, die empirisch ermittelt werden müssen [3, S.10][32, S.81]:

$$c_b = K_F \cdot c^{N_F} \quad (2.6)$$

Anders als bei der Freundlich-Isotherme nähert sich beim Brauner-Emmet-Teller-Modell (BET-Isotherme) die Beladung keinem Grenzwert an und kann daher ins unendliche steigen. Die mathematische Form ist [30, S.58]:

$$\frac{p}{(p_0 - p)V} = \frac{1}{k \cdot V_{mono}} + \frac{k - 1}{k \cdot V_{mono}} \cdot \frac{p}{p_0} \quad (2.7)$$

Die Variable p [Pa] ist der Gleichgewichtsdruck des Adsorptivs, p_0 [Pa] der Dampfdruck des reinen, flüssigen Adsorptivs bei einer bestimmten Temperatur, V [m³] das Adsorptivvolumen, V_{mono} [m³] das Adsorptivvolumen zur Ausbildung einer Monoschicht und k [-] eine systemabhängige Konstante.

Zusammenfassend lässt sich eine Stoffbilanz aufstellen, bei der die totale Chloridkonzentration C_t [mol/m³] an einer beliebig gewählten Stelle im Beton die Summe aus freien, sich in Lösung befindenden, ausgedrückt durch c [mol/m³] und die durch Sorption am Beton ein- bzw. angelagerten Chlorid-Ionen, ausgedrückt durch c_b [mol/m³], ist (vgl. [3, S.58]):

$$C_t(t) = c(t) + c_b(t) \quad (2.8)$$

2.3.3. Porenverschlusseffekt

Mit der Adsorption von Chlorid-Ionen an die Porenwänden geht die Bildung einer elektrochemischen Doppelschicht auf den Porenoberflächen einher [21, S.83]. Die Wechselwirkung der freien Ionen in der Porenlösung mit der Doppelschicht verlangsamt den Chloridtransport im Zementstein [21, S.83]. Wiens bezeichnet diesen Effekt als „ionogenen Porenverschlusseffekt“.

Ferner verursachen besonders puzzolanische und latent-hydraulische Reaktionen einen nach Wiens benannten „geometrischen Porenverschlusseffekt“ [21, S.76]. Produkte dieser Reaktionen schlagen sich besonders an Poreneingängen bzw. Porenkanälen nieder, die die Transportwege der Ionen verengen [21, S.76]. Beide Effekte haben somit eine retardierende Wirkung auf die Chloriddiffusion.

2.3.4. Driftgeschwindigkeit

Natriumchlorid ist ein Salz mit der Eigenschaft, in Kontakt mit Wasser in Lösung zu gehen. Neben dem Chlor-Anion befindet sich auch das Natrium-Kation in Lösung, das ebenfalls am Diffusionsprozess beteiligt ist. Das Kation hat im Vergleich zum Chlorid einen geringeren Diffusionskoeffizienten im Zementstein [33, S.1464]. Zum Erhalt der Elektroneutralität stehen Chlorid-Ionen und Natrium-Kationen in einer Wechselwirkung, die beim Transportprozess aufgrund der unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten ein elektrisches Gegenfeld verursachen. Dies hat zur Folge, dass die Driftgeschwindigkeit des Chlorids herabgesetzt wird und sich der Diffusionsprozess dadurch verlangsamt [33, S.1464].

2.3.5. Eigenchloridgehalt

Unabhängig von Diffusionsprozessen können Chloride bereits durch die angewendeten Ausgangsstoffe in den Beton gelangen. Aus technischen und wirtschaftlichen Gründen kann nicht gewährleistet werden, dass Ausgangsstoffe wie z.B. der Zement oder die Gesteinskörnung frei von Chloriden sind [1, S.264]. Der sogenannte Eigenchloridgehalt wird daher durch die Norm DIN EN 206-1 auf einen zulässigen Höchstwert begrenzt. Der Höchstwert hängt von der Betonverwendung ab. Für unbewehrten Beton wird ein Maximalwert von 1 M.-% bezogen auf den Zement angegeben, der beim Einsatz von Stahlbewehrung auf maximal 0,4 M.-% und bei Spannbeton auf 0,2 M.-% limitiert wird. Die durch den Eigenchloridgehalt eingebrachten Chloride sind i.d.R. gleichmäßig im Betongefüge verteilt und Bestandteil des Sorptionsprozesses im Zementstein [1, S.264].

3. Entwicklung des FEM-Diffusionsmodells mit COMSOL Multiphysics

3.1. Numerische Lösung des zweiten Fick'schen Diffusionsgesetzes

Beton ist ein Mehrstoffsystem, dessen Struktur und zeitabhängige Strukturentwicklung in den vorherigen Kapiteln nähere Betrachtung fanden. Die Diffusion von freien Chlorid-Ionen im Beton erfährt Einflüsse, die zum Teil auf nicht-lineare Bedingungen beruhen (z. B. Sorptions-Isotherme) und eine instationäre Berechnung des Problems über das zweite Fick'sche Diffusionsgesetz erforderlich machen. Geometrisch komplexe Bestandteile wie die Gesteinskörnung und die resultierenden Kontaktzonen beeinflussen den instationären Transportprozess. Mit dem Ziel zur Erreichung einer möglichst detaillierten Implementierung der diffusionsbeeinflussenden Faktoren zeigt ein analytischer Lösungsansatz zur Berechnung der Chlorideindringtiefen Grenzen auf. Die am häufigsten angewendete analytische Lösung des zweiten Fick'schen Diffusionsgesetzes wird als Fehlerfunktions-Lösung („error function solution“) bezeichnet [34, S.14] [27, S.14]. Hierbei findet die Gauß'sche Fehlerfunktion zur Lösung der Differentialgleichung Anwendung [35, S.14]. Bei der Berechnung von Diffusionsprozessen unter Einbezug von nicht-linearen Adsorptionsisothermen kann die Fehlerfunktionslösung jedoch keine Anwendung finden [3, S.53]. Der Ansatz einer numerischen Berechnung ist daher von Nöten und scheint aufgrund der weiteren diffusionsbeeinflussenden Faktoren sinnvoll [3, S.54].

3.2. Die Finite-Elemente-Methode

Das numerische Verfahren, welches Anwendung in dieser Arbeit findet, stellt die Finite-Element-Methode (FEM) dar. In diesem Kapitel sollen nur die für diese Arbeit relevanten Grundstrukturen der Methode erläutert werden.

Das grundlegende Prinzip besteht darin – wie bei allen anderen numerischen Verfahren auch – partielle Differentialgleichungen, die abhängig von Zeit und Ort sind, approximativ durch zeitliche und örtliche Diskretisierung zu lösen [36, S.239]. Die FE-Methode unterteilt das Berechnungsgebiet (die Geometrie) in diskrete, finite Elemente. Die Geometrie kann dabei ein-, zwei- oder auch dreidimensional erfasst werden. Die Zerteilung der Geometrie in die finiten Elemente erzeugt das sogenannte Netz, die Ecken der Elemente bilden die Knotenpunkte [37, S.9]. Um eine effiziente Berechnung zu gewährleisten, bestehen die Elemente aus einfachen Geometrien wie z. B. Drei- oder Vierecke im Falle einer zweidimensionalen Berechnung. Anstelle einer analytischen Lösung des Problems, nähert sich das FEM-Programm durch ein lineares Gleichungs-

system mit endlich vielen Unbekannten dem Ergebnis an. Die ermittelten Näherungswerte des Lösungsintervalls beziehen sich stets auf die Knotenpunkte [36, S.240 f.]. Die Teilintervalle zwischen den Knotenpunkten bilden die finiten Elemente. In diesen Teilintervallen wird oft ein linearer Funktionsverlauf, die sogenannte Ansatzfunktion, angenommen [37, S.9]. Quadratische oder höhergradige Polynome sind je nach Art des Ansatzes der FE-Methode und der Form des Elementes ebenfalls möglich. Durch Einsetzen der Ansatzfunktionen in die zu lösenden Differentialgleichungen und unter Einbezug der Anfangs- bzw. Randbedingungen entsteht ein Gleichungssystem, das aufgrund der Komplexität nur computergestützt über ein FEM-Programm zu lösen ist. Grundlegend wird die Genauigkeit der Ergebnisse durch die Anzahl der Knotenpunkte, also durch die Feinheit des generierten Netzes, bestimmt. Je mehr Knotenpunkte berechnet werden, desto genauer wird die numerische Annäherung. Mit einer erhöhten Anzahl der Knotenpunkte geht jedoch stets ein höherer Rechenaufwand einher, sodass eine Korrelation zwischen Genauigkeit des Ergebnisses und dem Rechenaufwand besteht. Prinzipiell lässt sich die Anwendung der FE-Methode in drei Arbeitsschritte aufteilen [38, S.54]:

- Pre-Processing:* Umfasst die Erstellung der Geometrie, die Festlegung der Materialeigenschaften, die Auswahl des Gittertyps und die Erzeugung des Berechnungsnetzes
- Solution:* Festlegung der Randbedingungen und lösen der Modellgleichungen auf dem Berechnungsnetz durch das FEM-Programm
- Post-Processing:* Darstellung der Rechenergebnisse und Interpretation durch den Anwender

3.3. COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics ist eine Software, die mit Hilfe der Finite-Element-Methode physikalische und chemische Prozesse simuliert, die sich mittels Differentialgleichungen beschreiben lassen. Die Software basiert auf dem Vorgängerprogramm FEMLAB [39, S.23] und wird vom gleichnamigen Unternehmen COMSOL entwickelt und vertrieben. Das Programm beinhaltet das Pre- und Post-Processing sowie die eigentliche Berechnung in einem Programm, sodass eine konsistente Bearbeitung des physikalischen und/oder chemischen Prozesses möglich ist.

Die Software lässt sich in die zwei Hauptkomponenten „Model Builder“ und „Application Builder“ aufteilen [40, S.10]. Die Definition des Modells, die Berechnung selbst und das Post-Processing finden auf der Oberfläche des „Model Builders“ statt. Dieser

stellt daher die grundlegende Arbeitsumgebung dar. Mit dem „Application Builder“ können benutzerdefinierte Anwendungen konstruiert werden, die auf einem im „Model Builder“ erstellten Modell basieren. Über die Anwendung können dann Eingangsparameter des Modells variiert und auf deren Basis Berechnungen erneut durchgeführt werden. Ferner enthält der „Application Builder“ einen sogenannten „Methoden-Editor“. Dieser bietet eine Java-gestützte Programmierumgebung, um Subroutinen, Funktionen oder Prozesse zu schreiben, die in COMSOL als „Methode“ bezeichnet werden. Methoden können verwendet werden, um das Modell (z. B. seine Geometrie) innerhalb der „Model Builder“-Oberfläche zu modifizieren oder eine Anwendung aus dem „Application Builder“ anzupassen [40, S.11].

Grundlegend findet die Erstellung sowie die Berechnung des Modells im „Model Builder“ statt. Der Anwender erstellt dabei den sogenannten „Model Tree“, der die chronologisch sinnvollen Schritte darstellt, um das gewünschte Modell zu generieren und zu berechnen. Die Abbildung 3.1 zeigt beispielhaft einen „Model Tree“, wie er in der Software zu sehen ist. Der Abbildung 3.2 kann das Schema zur Erstellung und Berechnung eines Modells entnommen werden. Wird ein Modell konsequent nach dem Schema des „Model Tree’s“ abgearbeitet, folgt nach der Festlegung von globalen Definitionen wie z. B. Variablen oder Funktionen die Erstellung der Komponente, die die Geometrie mit ihren Materialparametern, den chemisch- und/oder physikalische Eigenschaften, die im Modell untersucht werden sollen und das generierte Netz enthält. An dieser Stelle legt der Anwender fest, ob der zu untersuchende Sachverhalt im ein-, zwei- oder dreidimensionalen Raum zu erfassen ist. Die Implementierung der Physik oder der chemischen Eigenschaften erfolgt über die vom Programm vorgegebenen „Physics Interfaces“, die die anzuwendenden Gleichungen, Voreinstellungen für programminterne Solver, Einstellungen zur Generierung des Netzes und Darstellungen der Ergebnisse enthält [40, S.63]. Der Anwender hat die Möglichkeit, mehrere Interfaces in dem Modell zu integrieren und diese in der Berechnung miteinander zu koppeln. Diese Funktion wird in COMSOL als „Multiphysic“ bezeichnet. Sie findet Anwendung, wenn physikalische Prozesse, die sich gegenseitig beeinflussen, in einer Berechnung berücksichtigt werden sollen. Die so gekoppelten Gleichungssysteme werden simultan von der Software gelöst. Ist die Geometrie erstellt und die physikalischen Probleme implementiert, wird das Netz eigenständig durch die Software oder benutzerdefiniert generiert. Anschließend kann das Modell über den Punkt „Studie“ berechnet werden. Der Anwender kann an dieser Stelle entscheiden, ob das Problem stationär oder instationär zu lösen ist. Nach der Berechnung erfolgt das Post-Processing durch die Darstellung der Ergebnisse. Diese können vom Anwender je nach Erfordernis weiter modifiziert werden.

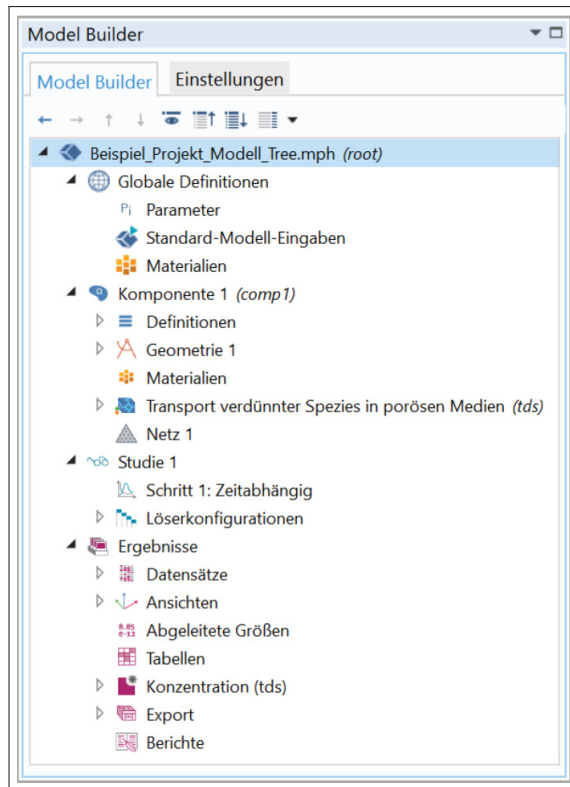


Abbildung 3.1: „Model Tree“ in COMSOL Multiphysics

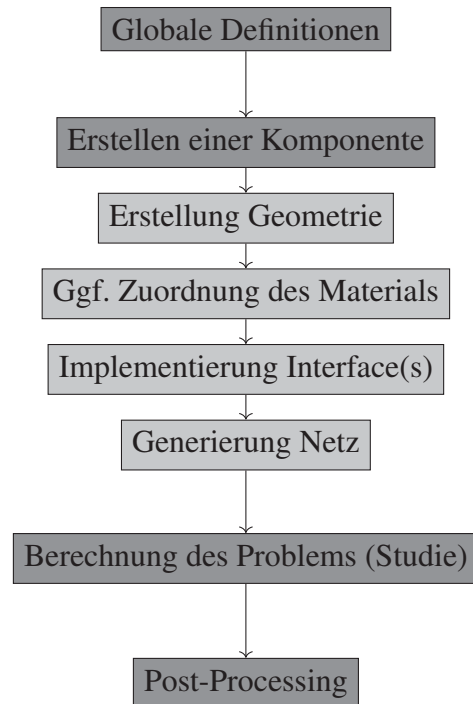


Abbildung 3.2: Schema „Model Tree“

Da bei der Chloriddiffusion im Beton hauptsächlich die Diffusionsrichtung senkrecht zur Fläche der Beaufschlagung von Interesse ist, wird vereinfachend die Komponente im zweidimensionalen Raum erfasst. Als Geometrie dient vorerst ein homogenes Quadrat mit einer Seitenlänge von 4 cm (siehe Abbildung 3.3 (links)). Das Netz wird mit dem gewählten Detaillierungsgrad „fein“ durch das Programm generiert (siehe Abbildung 3.3 (rechts)). Dem Anhang E können Zwischenergebnisse des entwickelten Modells entnommen werden. Hierbei visualisieren die FEM-Berechnungen in chronologischer Reihenfolge den Einfluss der nachfolgend dargestellten implementierten Effekte zur Chloriddiffusion. Im FEM-Modell wurden vorgehend Randbedingungen getroffen, um eine Berechnung und Darstellung der Ergebnisse zu ermöglichen. Die Definition der endgültigen Randbedingungen wird in Kapitel 3.4.8 erläutert.

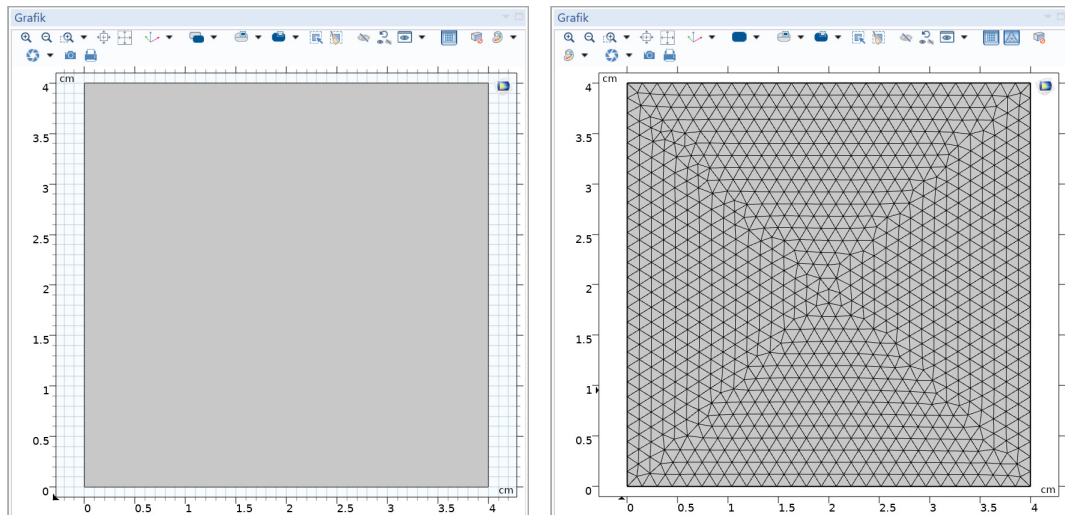


Abbildung 3.3: Links: Vorläufige, vereinfachte Geometrie des Betonkörpers; Rechts: Programminterne Berechnung des Netzes

3.4. COMSOL Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“

3.4.1. Aufbau des Interfaces

Die von COMSOL bereitgestellten Interfaces können modular über eine Lizenz erworben werden. Für die Problemstellung dieser Arbeit wird das Modul „Chemical Reaction Engineering“ gewählt, welches das Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ enthält. Das Interface erlaubt die Modellierung und Simulation des Spezietransports in und zwischen Flüssigkeit, Gasphase und Feststoff in einem (teil-) gesättigten porösen Medium. Dieses soll nähere Betrachtung finden. Dem Anhang A können alle weiteren Interfaces entnommen werden, die über das „Chemical Reaction Engineering“-Modul erhältlich sind.

Das Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ ermöglicht Berechnungen im ein-, zwei-, sowie dreidimensionalem Raum unter stationären und instationären Bedingungen [41, S.17]. Es baut auf das Interface „Transport verdünnter Spezies“ auf, welches den Stofftransport aufgrund Diffusion, Konvektion und Migration erfasst. Beide Interfaces können für Spezies angewendet werden, bei denen der Solvent einen Stoffanteil von mehr als 90 Mol-% aufweist [41, S.122]. Grundlegend unterliegt der Transport verdünnter Spezies in COMSOL Multiphysics der Gleichung 3.1 [41, S.123]. Da die Migration in dieser Arbeit keine Relevanz darstellt, findet diese in der Gleichung keine weitere Erwähnung.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla J_i + u \nabla c_i = R_i \quad (3.1)$$

Dabei ist t [s] die Zeit in Sekunden, c [mol/m³] weiterhin die freie Konzentration des zu beobachtenden Solvats und J [mol/m²s] die Teilchenstromdichte. Der Geschwindigkeitsvektor u [m/s] erfasst die kovektiven Einflüsse. Da nur diffusive Effekte betrachtet werden, wird der Vektor zu null gesetzt. Auch werden keine weiteren chemischen Reaktionen explizit in die Differenzialgleichung aufgenommen, sodass der Term R [mol/m²s] für mögliche chemische Reaktionen ebenfalls entfällt. So kann Gleichung 3.1 wie folgt vereinfacht werden:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla J_i \quad (3.2)$$

Wobei COMSOL die Teilchenstromdichte J wie folgt erfasst [41, S.123]; D [m²/s] stellt hierbei den allgemeinen Diffusionskoeffizienten dar:

$$J = -D\nabla c \quad (3.3)$$

Wird nun Gleichung 3.3 in Gleichung 3.2 eingesetzt, resultiert daraus das zweite Diffusionsgesetz nach Fick (siehe Gleichung 2.4), welches in dieser Arbeit Anwendung findet. Jegliche Transportprozesse, die lediglich auf Diffusion fußen, werden in COMSOL Multiphysics also durch dieses Gesetz beschrieben. Das Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ ergänzt die Gleichung durch adsorptive Einflüsse. Ist das poröse Medium nur teilgesättigt, befindet sich gemäß programmspezifischer Annahmen ein immobiles Gas im verbleibenden Porenraum. Die Gleichung lautet dann [41, vgl. S.133]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta c_i) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho c_{b,i}) + \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_V c_{G,i}) = \nabla[D_{eff}\nabla c_i] \quad (3.4)$$

Der erste Term der linken Seite erfasst die freie Konzentration des Solvats c [mol/m³] und wird mit dem Volumenanteil θ [-] der flüssigen Phase am Gesamtvolumen multipliziert. Der zweite Term der linken Seite stellt die adsorptiven Einflüsse dar. Hier wird die Beladung des Adsorbens durch das Adsorpt c_b [mol/kg] mit der Rohdichte der Festphase ρ [kg/m³] multipliziert. Das Volumen, welches weder durch Festphase noch durch flüssige Phase eingenommen wird, ist dem immobilen Gas zugeschrieben und wird über den Volumenanteil des Gases α_V [-] ausgedrückt. Der letzte Term der linken Seite erfasst daher die Konzentration des immobilen Gases c_G [mol/m³], multipliziert mit dessen Volumenanteil. Die Variable t [s] ist weiterhin die Zeit in Sekunden. Im Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ findet der Diffusionskoeffizient eine differenziertere Betrachtung. Hier wird der effektive Diffusionskoeffizient D_{eff} [m²/s] eingesetzt, um die Einflüsse der Porosität und Tortuosität zu inkludieren (siehe dazu Gleichung 2.5).

Im Falle eines gesättigten Mediums, wie es in dieser Arbeit betrachtet wird, kann die Gleichung vereinfacht werden. Der Anteil der verdünnten Spezies am Gesamtvolumen entspricht der Porosität ϵ [-]. Der Volumenanteil der Gasphase wird dann zu null gesetzt [41, vgl. S.134]. Die Gleichung 3.5 folgt demnach den Regeln der Stoffbilanz nach Gleichung 2.8:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon c_i) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho c_{b,i}) = \nabla[D_{eff} \nabla c_i] \quad (3.5)$$

Zusammenfassend stellt das Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ eine gute Grundlage dar, die genannten diffusiven Einflüsse auf den Chloridtransport mit Einbezug des zweiten Fick’schen Diffusionsgesetzes zu erfassen. Die Porosität sowie die Tortuosität können über die differenzierte Betrachtung des effektiven Diffusionskoeffizienten direkt in der Gleichung berücksichtigt werden. Der freie Diffusionskoeffizient von Chlorid fließt dabei mit $D_{Cl^-} = 2,03 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ in die Berechnung ein. Die zusätzliche Implementierung der Adsorptionseinflüsse in der Massentransportgleichung durch das Programm ermöglicht ebenfalls einen direkten Einbezug. Im ersten Schritt sollen zunächst diese drei Effekte implementiert werden.

3.4.2. Implementierung der Porosität

Den theoretischen Grundlagen ist zu entnehmen, dass die Porosität im Zementstein vom Verlauf der Hydratation und von der Zusammensetzung des Zementes abhängig ist. Die Abbildung 3.4 zeigt die Oberfläche des Interfaces, in der die Porosität des gewählten Gebietes zu erfassen ist. Die Porosität ϵ kann an dieser Stelle über ein Eingabefeld implementiert werden.

Aufgrund der zeitabhängigen Änderung der Porosität im Zementstein war eine Funktion zu finden, die die genannten Sachverhalte erfasst und über das Eingabefeld zu integrieren ist. COMSOL Multiphysics bietet zwar die Möglichkeit, über die Materialdatenbank Beton als Material auszuwählen, jedoch werden keine Daten zur Porosität bereitgestellt. Aufgrund der sehr individuellen Entwicklung der Porosität je nach Wahl des Zementes scheint es auch sinnvoll, diesen Parameter vom Anwender bestimmen zu lassen.

Gewählt wurde der Ansatz nach Röhling, der [13] zu entnehmen ist. Hierbei wird die Kapillarporosität, die verantwortlich für den diffusiven Stofftransport ist, durch folgende Funktion beschrieben [13, S.67]:

$$\epsilon_{Kapillar}(\alpha) = \frac{V_{W0} - \alpha(\eta_G - 1)V_Z}{V_{W0} + V_Z} \quad (3.6)$$

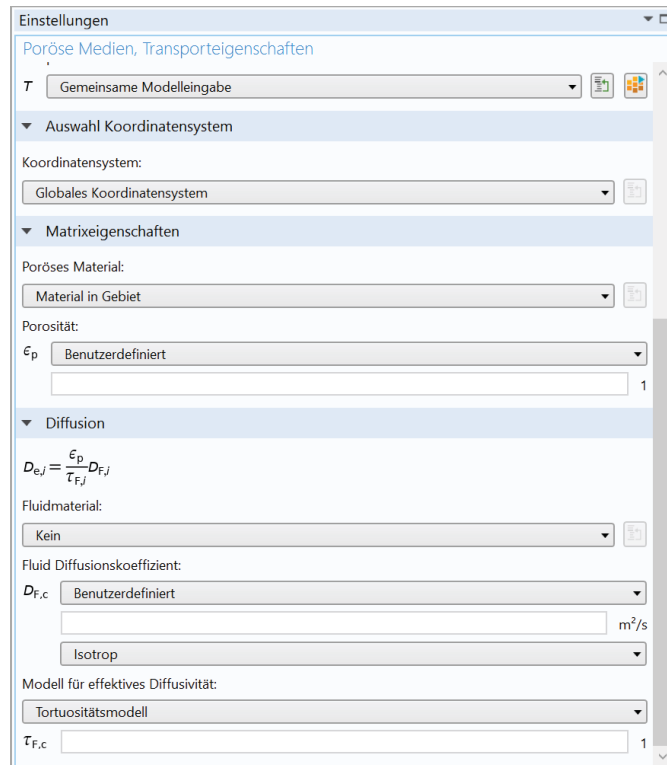


Abbildung 3.4: Bedieneroberfläche „Transporteigenschaften“ des Interfaces

Die Kapillarporosität $\epsilon_{Kapillar}$ [-] wird in Abhängigkeit des Hydratationsgrades α [-] gesetzt. V_{W0} [m³] stellt das Ausgangswasservolumen dar, welches sich mit Hilfe des w/z -Wertes ermitteln lässt. Weiterhin fließt das Ausgangsvolumen V_Z [m³] des Zementes in die Funktion ein (Rohdichte ρ wird mit 3,1 g/cm³ angenommen). Der Gelbildungsfaktor η_G [-] erfasst den Volumenzuwachs gegenüber dem unhydratisierten Zement [13, S.63]. Den einzelnen Zementbestandteilen können unterschiedliche Gelbildungsfaktoren zugewiesen werden, die der Tabelle 3.1 zu entnehmen sind. Der resultierende Gelbildungsfaktor eines Zementes kann unter Gewichtung der Massenanteile der Zementbestandteile durch Addition der Gelbildungsfaktoren ermittelt werden.

Tabelle 3.1: Gelbildungsfaktoren η_G von Zementbestandteilen vgl. [13, S.64 f.]

Gelbildungsfaktor η_G [-]							
C ₃ S	C ₂ S	C ₃ A	C ₄ AF	SFA	BFA	HS	SF
2,160	2,100	2,674	2,123	2,52 ¹⁾ 5,22 ²⁾	2,50 ¹⁾ 5,22 ²⁾	2,18	1,80
¹⁾ 25% FA; ²⁾ 50% FA; SFA: Steinkohlenflugasche; BFA: Braunkohlenflugasche; HS: Hüttensand; SF: Silikastaub							

Weiterhin stellt Röhling eine Funktion zur Beschreibung der bei der Hydratation freiwerdenden Hydratationswärme Q [J] auf und setzt diese in Abhängigkeit zur Zeit t [h] [13, S.140]. Es handelt sich um eine Exponentialfunktion mit konstanten Eingangsparametern $A_{Röhling}$ [-], $B_{Röhling}$ [-] und t_k [-], die von der Zementart abhängig sind.

Q_{max} [J] ist die Hydratationswärme, die in der gesamten Hydratation freigesetzt wird. Die Variable Q_0 [-] kann der Funktion zur Anpassung der Kurve beigefügt werden, findet an dieser Stelle jedoch keine weitere Betrachtung ($Q_0 = 0$):

$$Q(t) = Q_0 + Q_{max} \cdot \exp \left[A_{Röhling} \left(\frac{t}{t_k} \right)^{B_{Röhling}} \right] \quad (3.7)$$

Die Parameter $A_{Röhling}$, $B_{Röhling}$ und t_k können [13, S.142] entnommen werden und sind im Anhang B dargestellt. Sie fundieren auf Messergebnissen, die unter isothermischen Erhärtingsbedingungen gewonnen und durch anschließende Regression ermittelt wurden [13, S.142]. Beschreibt die Funktion 3.7 also den momentanen Hydratationsfortschritt, ausgedrückt durch die Hydratationswärme und wird diese in das Verhältnis zur maximal möglichen Hydratationswärme Q_{max} gesetzt, entspricht dies dem Hydratationsgrad α , der nun in Abhängigkeit zur Zeit t erfasst werden kann:

$$\alpha(t) = \frac{Q_{max} \cdot \exp \left[A_{Röhling} \left(\frac{t}{t_k} \right)^{B_{Röhling}} \right]}{Q_{max}} = \exp \left[A_{Röhling} \left(\frac{t}{t_k} \right)^{B_{Röhling}} \right] \quad (3.8)$$

Es ist nun möglich, die Variable α in der Funktion 3.6 durch die Funktion 3.8 zu ersetzen. Somit kann die Kapillarporosität zeitabhängig beschrieben und zur instationären Berechnung des Problems in COMSOL Multiphysics implementiert werden. Zu beachten ist, dass der Hydratationsgrad α in der Funktion 3.6 zur Ermittlung der Kapillarporosität das Verhältnis zwischen aktuellem Hydratationsfortschritt und Hydratation, bei der alle Zementpartikel hydratisiert sind, erfasst. Der Effekt des maximal möglichen Hydratationsgrades wird hier nicht beachtet. Somit muss der nach Funktion 3.8 ermittelte Hydratationsgrad, der sich, wie gewohnt auf die maximal mögliche Hydratation bezieht, mit dem maximal möglichen Hydratationsgrad α_{max} nach Gleichung 2.1 multipliziert werden. Die endgültige Funktion zur Implementierung der Kapillarporosität in COMSOL Multiphysics lautet somit:

$$\varepsilon_{Kapillar}(t) = \frac{V_{W0} - \alpha_{max} \cdot \exp \left[A_{Röhling} \left(\frac{t}{t_k} \right)^{B_{Röhling}} \right] (\eta_G - 1) V_Z}{V_{W0} + V_Z} \quad (3.9)$$

$$= \frac{V_{W0} - (1 - \exp(-3,8 \cdot w/z)) \cdot \exp \left[A_{Röhling} \left(\frac{t}{t_k} \right)^{B_{Röhling}} \right] (\eta_G - 1) V_Z}{V_{W0} + V_Z} \quad (3.10)$$

Eine erste beispielhafte Berechnung des Modells ist in Anhang E (Abbildung E.1 und E.2) dargestellt. Den Abbildungen ist zu entnehmen, dass das Chlorid die gesamte Geometrie durchdrungen hat. Im Vergleich zu reellen Eindringtiefen ist das Ergebnis

als unrealistisch zu bewerten. Weitere diffusionsbeeinflussende Effekte sind zu implementieren.

3.4.3. Implementierung der Tortuosität

Die Tortuosität kann in der gleichen Bedieneroberfläche wie die Porosität erfasst werden und bildet mit dem freien Diffusionskoeffizienten D_0 und der vorher definierten Porosität ε nach Gleichung 2.5 den effektiven instationären Diffusionskoeffizienten. COMSOL Multiphysics bietet an dieser Stelle vorprogrammierte Modelle zur Beschreibung der Tortuosität. Da es sich dabei um allgemeine Modelle handelt, die sich nicht auf bestimmte Materialien beschränken, sollte ein Modell gefunden werden, das die Besonderheiten zementgebundener Materialien berücksichtigt.

Gewählt wurde der Ansatz nach Bentz, der durch [25] weiter ausgeführt wurde. Bentz und Garboczi erfassen das grundlegende Prinzip zur Berechnung der Porosität im Zementstein in [42]. Das Modell wird von Bentz in [43] mit den Einflüssen durch Mikrosilika auf die Tortuosität ergänzt. Scheydt formuliert die Formeln wie folgt [25, S.15]:

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon; \varepsilon \leq 0,17)} = 10^{-4}K_1 + 10^{-2}K_2\varepsilon^2 \quad (3.11)$$

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon; 0,17 < \varepsilon \leq 0,60)} = 10^{-4}K_1 + 10^{-2}K_2\varepsilon^2 + 1,7(\varepsilon - 0,17)^2 \quad (3.12)$$

Neben der Kapillarporosität wird der Einfluss des Mikrosilikagehaltes über die Parameter K_1 [-] und K_2 [-] in die Berechnung einbezogen. Die Parameter können über die Abbildungen 3.5 und 3.6 bestimmt werden. Ist Mikrosilika kein Zementbestandteil, kann für $K_1 = 4$ und für $K_2 = 3$ gewählt werden. Ferner stellten Bentz und Garboczi eine deutliche Änderung der Tortuosität für $\varepsilon_{Kapillar} \leq 0,18$ fest [42, S.2089]. Es werden daher zwei Modelle abhängig von der vorhandenen Kapillarporosität bereitgestellt. Bei einer Kapillarporosität $\leq 0,17\%$ ist Gleichung 3.11 zu wählen, bis zu einer Kapillarporosität von 60 % kann sonst Gleichung 3.12 Einsatz finden.

Zu beachten ist, dass die Gleichungen lediglich für die Tortuosität im Zementstein anzuwenden sind und keine Einflüsse der Gesteinskörnung im Modell berücksichtigt werden (siehe dazu auch Kapitel 3.4.6). Durch das Einsetzen der Funktion 3.10 zur Berechnung der zeitabhängigen Kapillarporosität ε kann nun auch die Tortuosität in Abhängigkeit des Hydratationsfortschritts beschrieben werden. Die Funktion wird wie folgt in den globalen Bedingungen implementiert, wenn sich die zu erwartende Porosität des Zementsteins stets im Bereich $0,17 < \varepsilon \leq 0,60$ befindet:

$$\tau(\epsilon_{Kapillar}(t)) = \frac{1}{10^{-4}K_1 + 10^{-2}K_2(\epsilon_{Kapillar}(t))^2 + 1,7(\epsilon_{Kapillar}(t) - 0,17)^2} \quad (3.13)$$

Der retardierende Einfluss der Tortuosität auf die Diffusionseigenschaft des Zementsteins ist beispielhaft der FEM-Berechnung im Anhang E (Abbildung E.3 und E.4) zu entnehmen.

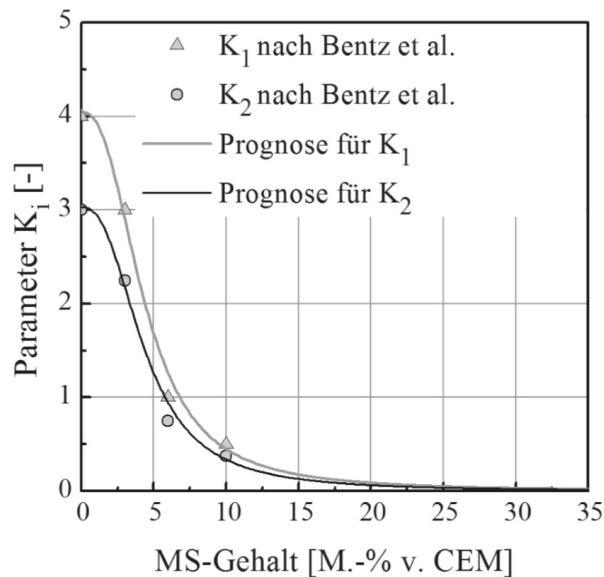


Abbildung 3.5: Parameter K_1 und K_2 in Abhängigkeit des Mikrosilika-Gehaltes zur Bestimmung der Tortuosität nach Bentz [25, Anhang S.A1-2]

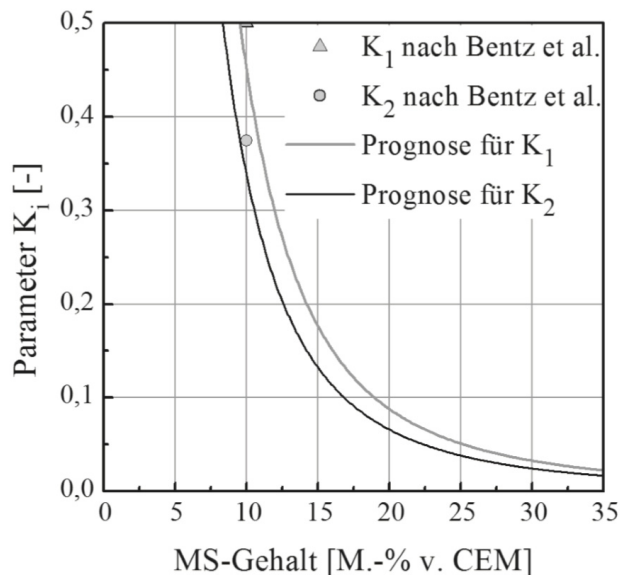


Abbildung 3.6: Parameter K_1 und K_2 in Abhängigkeit des Mikrosilika-Gehaltes zur Bestimmung der Tortuosität nach Bentz (Detailausschnitt der Abbildung 3.5) [25, Anhang S.A1-2]

3.4.4. Implementierung der Chloridbindung mit Hilfe der Freundlich-Isotherme

Nach Tang lässt sich die Chloridbindung im Zementstein mit Hilfe der Freundlich-Isotherme sowie durch die BET-Isotherme ausdrücken [3, S.3]. Beide Modelle wurden in den theoretischen Grundlagen vorgestellt. Zwar lassen sich die Eingangsparameter für die Freundlich-Isotherme nur empirisch ermitteln [3, S.10], sie überzeugt jedoch im Hinblick auf die Implementierung durch ihren simplen Aufbau, der Nachvollziehbarkeit und der Einfachheit in der Anwendung. Tang liefert in [3, S.13] empirisch ermittelte Eingangsparameter für vier Zementarten. Dabei handelt es sich nicht um genormte CEM-Zemente, sie zeigen jedoch Ähnlichkeiten zu ausgewählten CEM-Zementen auf. Die Eingangswerte sind in der Tabelle 3.2 dargestellt. In [3, S.12] ist die Freundlich Isotherme wie folgt aufgeführt:

$$c_b = f_b \cdot c^\beta \quad (3.14)$$

Tabelle 3.2: Eingangswerte für die Freundlich-Isotherme nach Tang [3, S.13]

Zementtyp nach Tang	Vergleichbarer CEM-Zement	f_b	β
100% Portlandzement	CEM I	3,57	0,38
70% Portlandzement 30% Hüttensand	CEM II/B-S	3,82	0,37
50% Portlandzement 50% Hüttensand	CEM III/A	5,87	0,29
70% Portlandzement 30% Flugasche	CEM II/B-V CEM II/B-W	5,73	0,29

Dabei erhält nach Tang die freie Konzentration c die Einheit $\text{g}_{\text{Cl}}/\text{l}$, sodass die Beladung c_b in $\text{g}_{\text{Cl}}/\text{kg}_{\text{Zementstein}}$ ausgegeben wird. Der Abbildung 3.7 ist zu entnehmen, dass in COMSOL Multiphysics die Beladung c_b in der Einheit mol/kg benötigt wird und die freie Konzentration c mit der Einheit mol/m^3 in die Gleichung einfließt. Folgende Umrechnung der Gleichung 3.14 ist damit vorzunehmen, um die gewünschten Einheiten zu erhalten (Molare Masse $M_{\text{Cl}^-} = 35,45 \text{ g/mol}$):

$$c_b = \frac{f_b}{35,45 \cdot \left(\frac{1}{35,45}\right)^\beta} \cdot \left(\frac{c}{1000}\right)^\beta \quad (3.15)$$

Die Abbildung 3.7 zeigt die Anwendung der Freundlich-Beiwerte nach Tang in COMSOL Multiphysics unter Einhaltung der erforderlichen Einheiten. Der Freundlich-Exponent

β ist als „beta“ und die Freundlich-Konstante f_b ist als „fb“ in den globalen Definitionen zu hinterlegen. Ferner ist die Rohdichte des Sorbens (hier der Zementstein) zu erfassen.

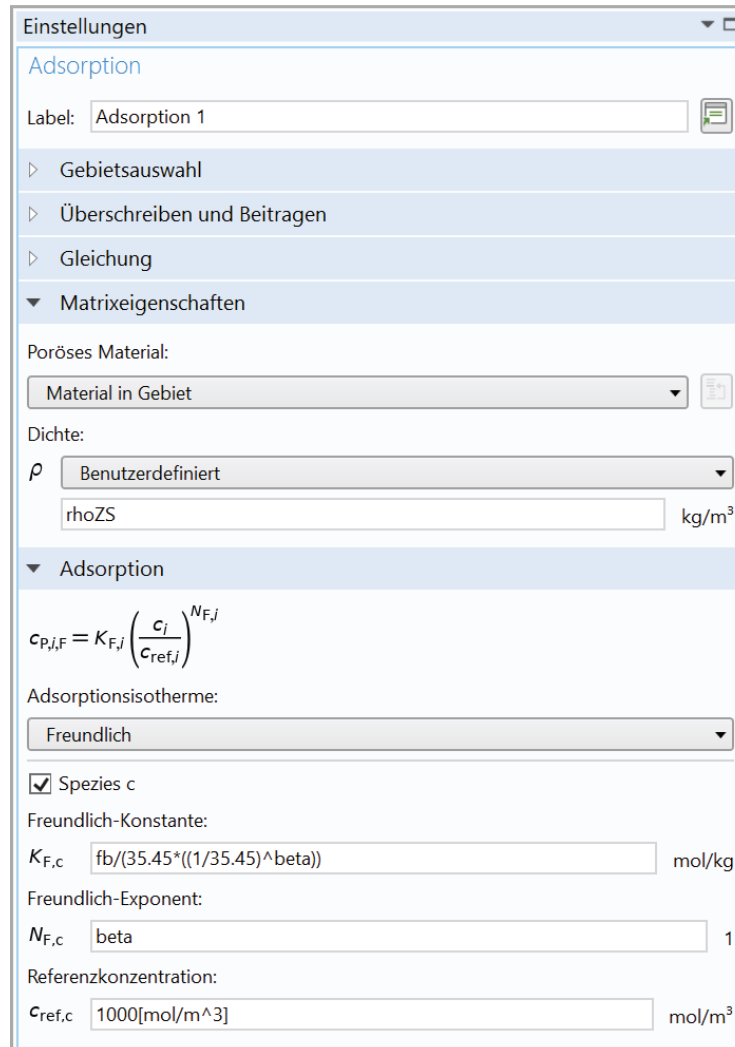


Abbildung 3.7: Bedieneroberfläche „Adsorption“ im Interface

3.4.5. Implementierung des Porenverschlusseffektes

Der Porenverschlusseffekt lässt sich nicht wie etwa die Tortuosität über ein gesonderes Bedienfeld in COMSOL Multiphysics ausdrücken. Um diesen quantitativ erfassen zu können, besteht die Möglichkeit, die Querschnittveränderlichkeit des Porensystems über die fraktale Geometrie/Dimension zu beschreiben [21, S.79] [44]. Die unregelmäßige Porenstruktur im Zementstein lässt sich nur schwer über das Mitteln euklidischer Geometrien beschreiben. Über die fraktale Geometrie - ein Gebiet der Mathematik - können Regelmäßigkeiten in der Unregelmäßigkeit einer Struktur quantitativ erfasst werden [44, S.15]. Eine Charakterisierung der fraktalen Geometrie kann [44, S.14 ff.]

entnommen werden. Im Hinblick auf die Transporteigenschaft von porösen Medien unterscheidet Meng zwischen einer für den Stofftransport relevanten Porosität P_r [-] und der daraus resultierenden Stofftransport-wirksamen Porosität P_w [-] [44, S.60 ff.]. Durch die Einführung der fraktalen Dimension der Porosität FD_P [-] kann deren Zusammenhang verdeutlicht werden [44, S.60]:

$$P_w = P_r^{1+FD_P} \quad (3.16)$$

Die fraktale Dimension der Porosität ist in dieser Gleichung ein Materialkennwert, der von der Wahl des Zementes abhängt. Wiens stellt in [21, Anhang E9] fraktale Dimensionen der Porosität FD_P für bestimmte Zemente bereit. Hierbei handelt sich um Zemente, die noch nicht der Norm DIN EN 197-1 unterlagen, jedoch zum Teil bestimmten CEM-Zementen ähneln. Dabei gibt Wiens in [21, Anhang E9] fraktale Dimensionen der Porosität FD_P jeweils für den Kapillarporenraum und für den Gelporenraum an. Da lediglich die Kapillarporosität im COMSOL-Modell erfasst wird, findet nur die fraktale Dimension $FD_{P,2}$ aus [21, Anhang E9] Anwendung. Es sei an dieser Stelle betont, dass die fraktale Dimension den geometrischen Porenverschlusseffekt darstellt. Für Portlandzemente und Flugaschezemente vor dem Wirksamwerden der puzzolanischen Reaktionen wies Wiens nach, dass der Porenverschlusseffekt hinreichend genau durch die fraktale Dimension erfasst werden kann [21, S. 91]. Der Porenverschlusseffekt bei hüttensandhaltigen Zementen und allen flugaschehaltigen Mischungen ≥ 91 d benötigt genau genommen eine differenziertere Betrachtung [21, S.91]. Ferner sind die fraktalen Dimensionen in [21, Anhang E9] abhängig vom w/z -Wert und dem Betonalter erfasst. Eine genaue zeitliche Änderung der fraktalen Dimension kann schwer aus den Daten ermittelt werden.

Um den Porenverschlusseffekt trotzdem in COMSOL Multiphysics implementieren zu können, wird die nach Funktion 3.10 berechnete Kapillarporosität, die als relevante Porosität für den Stofftransport anzusehen ist, mit der Gleichung 3.16 modifiziert werden. Es gilt demnach $P_r = \epsilon_{Kapillar}$ und die Funktion 3.17 wird in das Bedienfeld der Porosität im Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ eingefügt. Zur Ermittlung der fraktalen Dimension FD_P soll in Abhängigkeit des zu untersuchenden Chlorid-Beaufschlagungszeitraumes ein Mittelwert gewählt werden. Die Eignung dieses Ansatzes wird durch die Validierung in Kapitel 4 geprüft.

$$P_w(\epsilon_{Kapillar}(t)) = \epsilon_{Kapillar}(t)^{1+FD_P} \quad (3.17)$$

3.4.6. Implementierung des Einflusses der Kontaktzone

Durch die Anwesenheit der Gesteinskörnung im Beton wird die Bildung der Kontaktzone hervorgerufen, die aufgrund der erhöhten Porosität einen Einfluss auf den Stofftransport im Beton hat. Je nach Volumenanteil der Gesteinskörnung im Beton und Wahl der Sieblinie wird das Zementsteingefüge durch die Ausbildung der Kontaktzonen gestört. Demnach war ein Modell zu finden, das neben den wesentlichen Eigenschaften der Kontaktzone (Porosität, Dicke der Zone) auch den Volumenanteil und die Sieblinie der Gesteinskörnung mit in die Berechnung einbezieht.

An dieser Stelle sollte die Stärke der FEM-Methode genutzt werden, eine individuelle Geometrie zu erstellen, an der die Berechnung ausgeführt wird. Grundsätzlich kann so die Gesteinskörnung sowie die Kontaktzone geometrisch dargestellt und der Kontaktzone im Programm eine eigene Porosität zugewiesen werden. Das Prinzip der gewünschten Geometrie und die Auswirkung der Änderung des Anteils der Gesteinskörnung am Betonvolumen auf die ITZ ist in Abbildung 3.8 dargestellt.

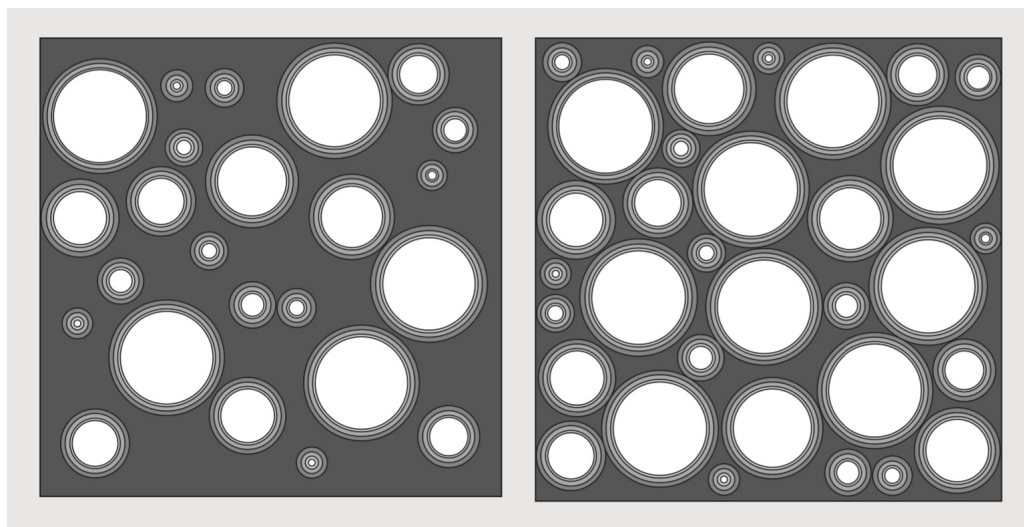


Abbildung 3.8: Einfluss der Gesteinskörnung auf die Kontaktzone [20, S. 91]

Da eine händische Erstellung der Geometrie weder effizient noch zu bewerkstelligen wäre, kann zur Umsetzung über den „Application Builder“ eine Methode geschrieben werden. Folgende Kriterien waren über die Methode zu implementieren, um die gewünschte Geometrie zu erhalten:

1. Abbildung der Gesteinskörnung in Abhängigkeit der Sieblinie (hier: A/B 16)
2. Realistische Verteilung der Gesteinskörnung im Beton
3. Keine „Überschneidung“ der Gesteinskörnung zulassen
4. „Überschneidung“ der Kontaktzonen untereinander zulassen

Dazu wurden folgende Grundannahmen getroffen:

1. Die Gesteinskörner können im zweidimensionalen Raum als Kreise dargestellt werden.
2. Eine realistische Verteilung der Gesteinskörnung wird durch eine zufällige Verteilung hinreichend genau abgebildet.
3. Feinanteile der Gesteinskörnung haben keinen Einfluss auf die Kontaktzonenbildung und werden vernachlässigt.
4. Die Volumenanteile der Gesteinskorngruppen im Beton sind mit dem Flächenanteil in der zweidimensionalen Darstellung gleichzusetzen.

Der beigefügten COMSOL-Multiphysics-Datei ist die Methode „ErstellungGesteinskoernungundITZ“ zu entnehmen. Diese Methode erstellt die vollständige Geometrie eines 2D-Beton-Modells frei wählbarer Größe und benutzerdefinierter Sieblinie mit dem Größtkorn $D_{GK} = 16$ mm. Die Schichtdicke der Kontaktzone wurde mit $75 \mu\text{m}$ angenommen. Das Vorgehen der Methode zur Erstellung der Geometrie ist in Abbildung 3.9 dargestellt.

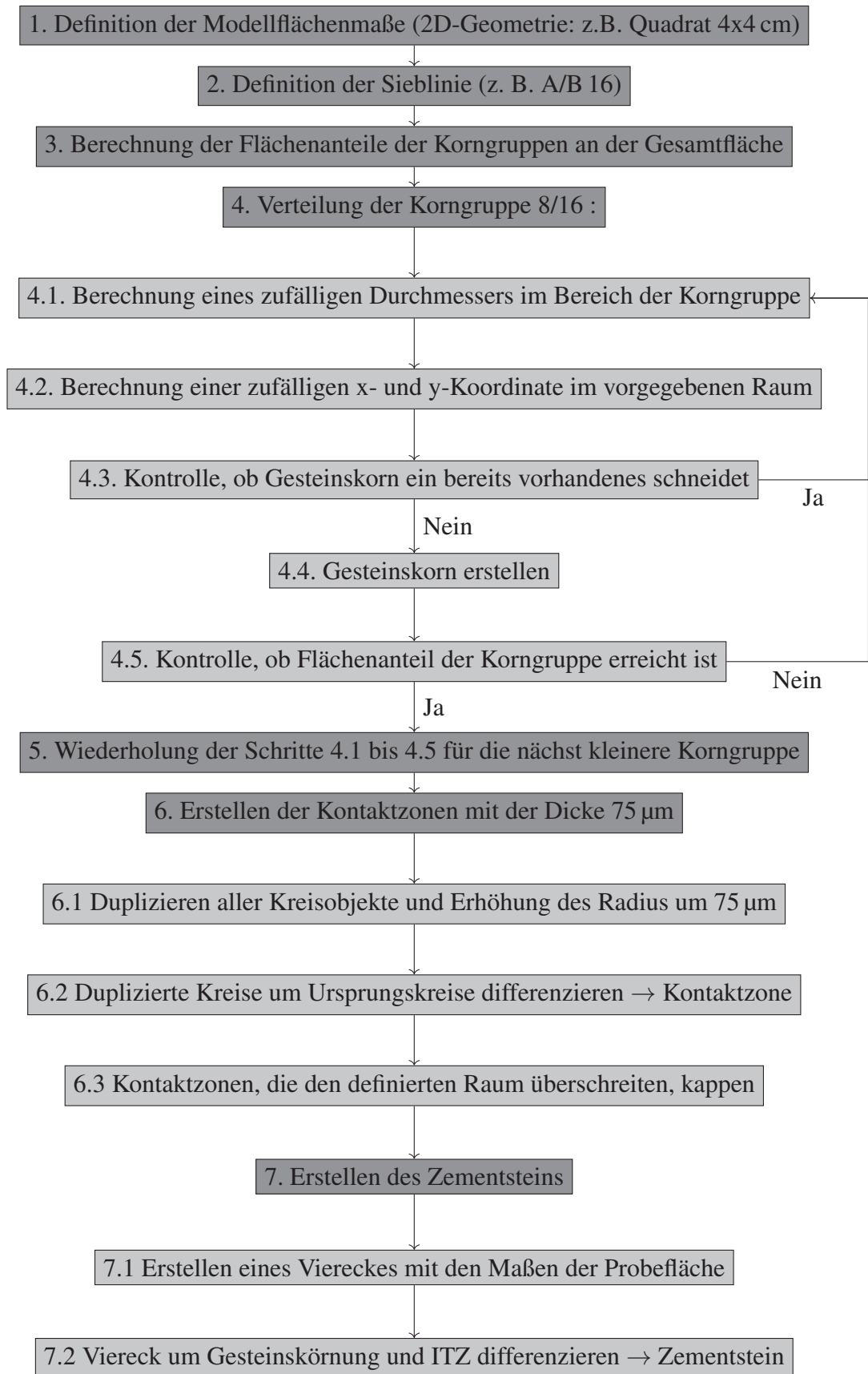


Abbildung 3.9: Schema der Methode zur Erstellung der 2D-Geometrie mit Gesteinskörnung und Kontaktzone

Ist die Geometrie erstellt, kann der Kontaktzone über das Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ eigene Transporteigenschaften zugewiesen werden. Dazu wird der Reiter „Transporteigenschaften“ im Interface dupliziert und die Porosität der Kontaktzone angepasst. In dieser Arbeit wird die Funktion 3.17 zur Berechnung der wirksamen Porosität auch für die Kontaktzone verwendet und mit einem Faktor von 1,3 erhöht, welcher als Variable $eITZ$ in den globalen Definitionen hinterlegt ist. Dies entspricht einer erhöhten Porosität der Kontaktzone im Vergleich zum ungestörten Zementstein von 30%, was sich im Mittel mit den Angaben in den theoretischen Grundlagen deckt. Weiterhin ist die Funktion 3.10, die der Ermittlung der relevanten Porosität dient, ebenfalls mit dem Faktor 1,3 im Bereich der Kontaktzone zu multiplizieren. Diese Funktionen stellen die zeitabhängige Porosität als Eingangswert zur Berechnung der Tortuosität mittels Funktion 3.17 dar.

Die Implementierung der Gesteinskörnung hat ferner den Vorteil, dass nun auch der Einfluss des Gesteinkorns auf die Tortuosität im Beton mit Beachtung der gewählten Sieblinie in die Berechnung einbezogen wird. Die in Kapitel 3.4.3 beschriebene Implementierung der Tortuosität, die sich lediglich auf den reinen Zementstein bezieht, wurde somit ergänzt. Die endgültige Geometrie ist der Abbildung 3.10 zu entnehmen.

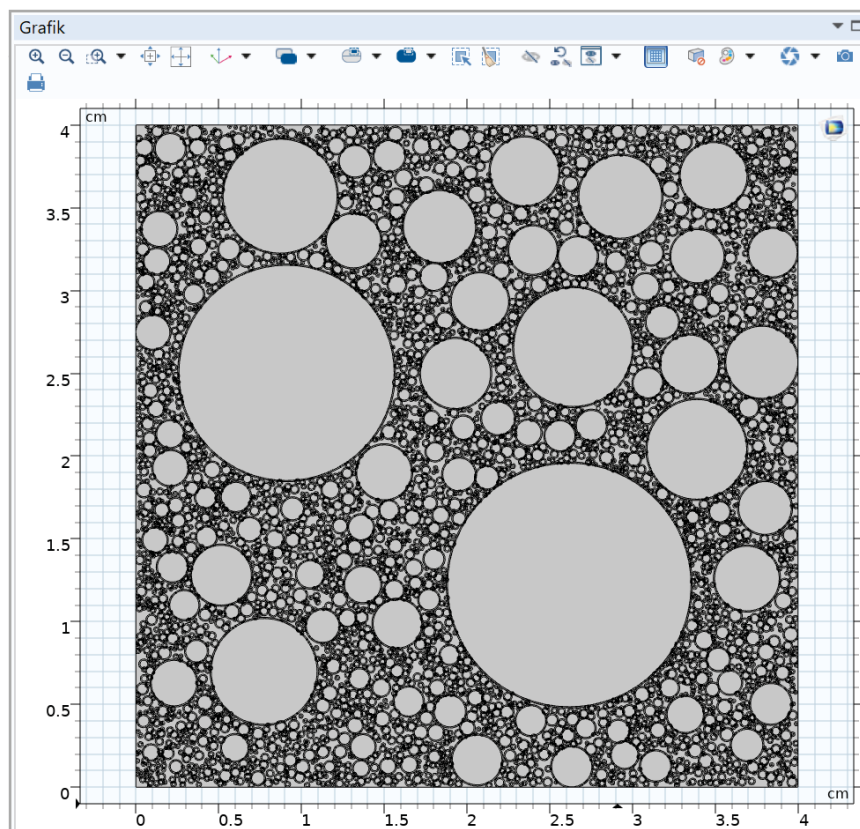


Abbildung 3.10: Differenzierte Geometrie der Modellfläche bestehend aus Zementstein, Gesteinskörnung und Kontaktzone

Ferner ist zu erwähnen, dass die Ausführung der Methode zur Erstellung der Geometrie einen hohen Rechenaufwand verursacht. Die Berechnung einer 4x4 cm Modellfläche dauerte mit einem Intel® Core™ i7-9750H Prozessor bei leistungsoptimierten Einstellungen ca. 3 Tage und es wurden ca. 10.000 Objekte generiert. Der Rechenaufwand wird drastisch reduziert, wenn die Korngruppe 0/0.25 vernachlässigt wird. Der Arbeit ist eine COMSOL Multiphysics-Datei mit einer bereits erstellten Geometrie (4x4 cm Modellfläche, Sieblinie A/B 16) beigelegt. Die Visualisierung einer Beispielberechnung in der Abbildung E.9 und E.10 im Anhang E veranschaulicht den Einfluss der Gesteinskörnung und der Kontaktzone auf den Chloridtransport im Beton. Die zugehörige Diffusionskurve kann dem Anhang F (Abbildung F.1) entnommen werden.

3.4.7. Implementierung der Driftgeschwindigkeit

Die Einflüsse des elektrischen Gegenfeldes, hervorgerufen durch die Wechselwirkung zwischen Chlor-Anion und Natrium-Kation, lässt sich nach [45, S.567] durch die Anwendung der Nernst-Planck-Gleichung beschreiben. Die Gleichung ist als eigenständiges Interface in COMOSOL Multiphysics hinterlegt und müsste bei Betrachtung des Stofftransportes mit dem Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ als Multiphysic gekoppelt werden. Da COMSOL keine vorprogrammierte Multiphysic zwischen den beiden Interfaces anbietet, ist die Implementierung und Kopplung der beiden Interfaces komplex und muss aus zeitlichen Aspekten in dieser Arbeit entfallen. Es sei darauf hingewiesen, dass Grundlagen zur Anwendung der Nernst-Planck-Gleichung im Hinblick auf den dargestellten Sachverhalt in [45] und [33] nachzulesen sind.

3.4.8. Definitionen der Randbedingungen

Mit der Implementierung der vorher genannten diffusionsbeeinflussenden Effekte wurde ein 2D-Modell mit einer differenzierten Geometrie und den zugehörigen Stoffeigenschaften geschaffen. Die Definition der Randbedingungen im Modell sind maßgebend für eine fehlerfreie FEM-Berechnung und werden in dem jeweiligen Interface definiert. Für das Interface „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ müssen die folgenden Randbedingungen definiert werden.

1. Die Anfangskonzentration der zu untersuchenden Spezies im Modellgebiet: Dies entspricht dem Eigenchloridgehalt des Betons bzw. Zementsteins. Der Eigenchloridgehalt wird als Anfangskonzentration im Interface mit der Einheit mol/m^3 hinterlegt. Gewählt wurde eine Anfangskonzentration c_0 von $2 \text{ mol}/\text{m}^3$. Dieser Wert wurde iterativ bestimmt und entspricht in der Ergebnisdarstellung einem Eigenchloridgehalt von 0,1 M.-% bezogen auf die Zementmasse. Die Konzentration von 0,1 M.-% deckt sich mit den Beobachtungen an Betonproben aus ei-

genständigen Laborversuchen des Fachbereiches, die bei der Validierung im Kapitel 4 herangezogen werden. Eine iterative Annäherung war zielführend, da die Anfangskonzentration im Modell noch die Einflüsse der Freundlich-Isotherme erfährt und sich damit während der Berechnung durch das Programm reduziert. Ggf. muss die Anfangskonzentration im Programm erhöht werden, um eine fehlerfreie Berechnung zu gewährleisten. Hier empfiehlt es sich, Werte zwischen 5 mol/m^3 und 10 mol/m^3 zu erfassen. Die Folge ist ein erhöhter, aber noch annehmbarer Eigenchloridgehalt, jedoch müssen keine programminternen Gleichungen modifiziert werden. Der Abbildung 3.11 ist beispielhaft das zu definierende Gebiet des Zementsteins mit der hier genannten Anfangskonzentration zu entnehmen.

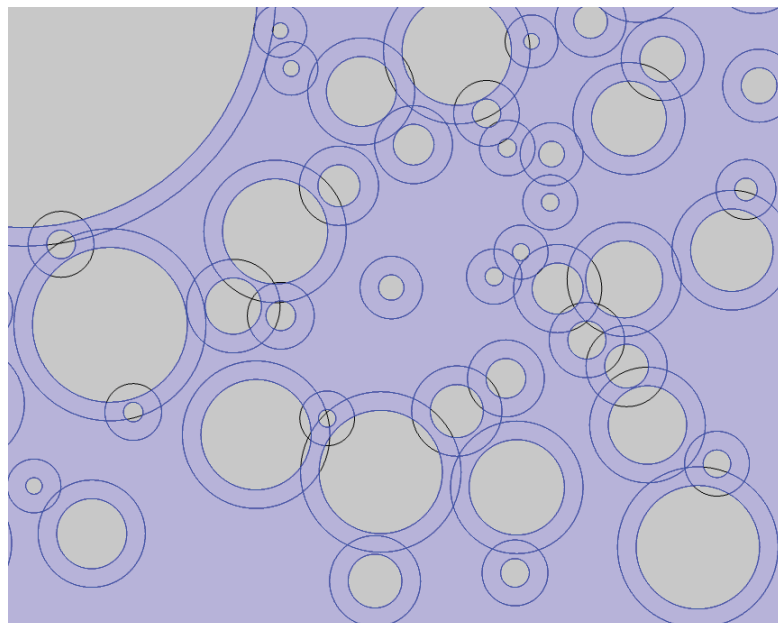


Abbildung 3.11: Gebiete (blau) der zu definierenden Anfangskonzentration (Detailausschnitt der Geometrie)

2. Die Grenzen, an denen die Konzentration der Spezies bekannt ist: Dies entspricht dem Ort der Beaufschlagung des Modells mit der zu untersuchenden Spezies (hier: 3 M.-% NaCl-Lösung auf der obersten horizontalen Außenkante der Modellfläche - siehe Abbildung 3.12). Eine 3 M.-% NaCl-Lösung entspricht der Konzentration von 510 mol/m^3 . Da es sich bei diesem Modell um eine instationäre Berechnung handelt, die den Zeitpunkt der Beaufschlagung einbeziehen soll, war die Definition einer stückweisen Funktion nötig. Die Funktion stellt die Konzentration der Spezies am Ort der Beaufschlagung in Abhängigkeit der Zeit dar. Generell startet die Funktion zum Zeitpunkt $t = 0 \text{ s}$ mit der Konzentration entsprechend des Eigenchloridgehaltes von 2 mol/m^3 (siehe Punkt 1.) und „springt“ zum Zeitpunkt der Beaufschlagung auf $c = 510 \text{ mol/m}^3$. COMSOL Multiphysics

bietet eine Oberfläche zur Definition einer stückweisen Funktion. Die Funktion wurde als $cRand(t)$ in den globalen Definitionen erfasst und kann vom Interface durch einen Bezug abgerufen werden. Die Abbildung 3.13 stellt eine Stufenfunktion $cRand(t)$ mit dem Zeitpunkt der Beaufschlagung von 14 Tagen nach Herstellung dar. Durch eine „Glättung“ des Sprunges zwischen den beiden Werten vor und nach dem Zeitpunkt der Beaufschlagung, ist eine stetige Funktion gewährleistet, die für eine fehlerfreie Berechnung durch das FEM-Programm notwendig ist. Die Glättung kann vom Anwender über die Oberfläche modifiziert werden.

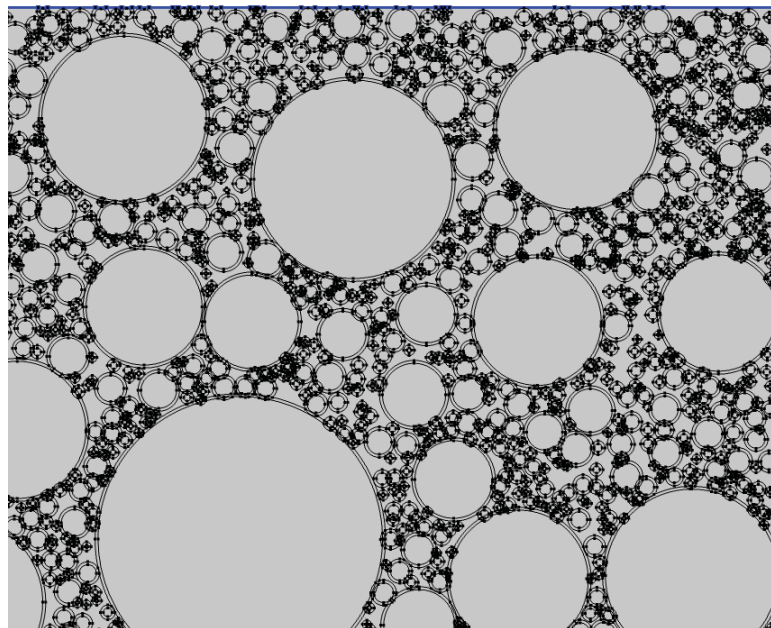


Abbildung 3.12: Zu definierende Randbedingung (blau) der Chlorid-Beaufschlagung (Detailausschnitt der Geometrie)

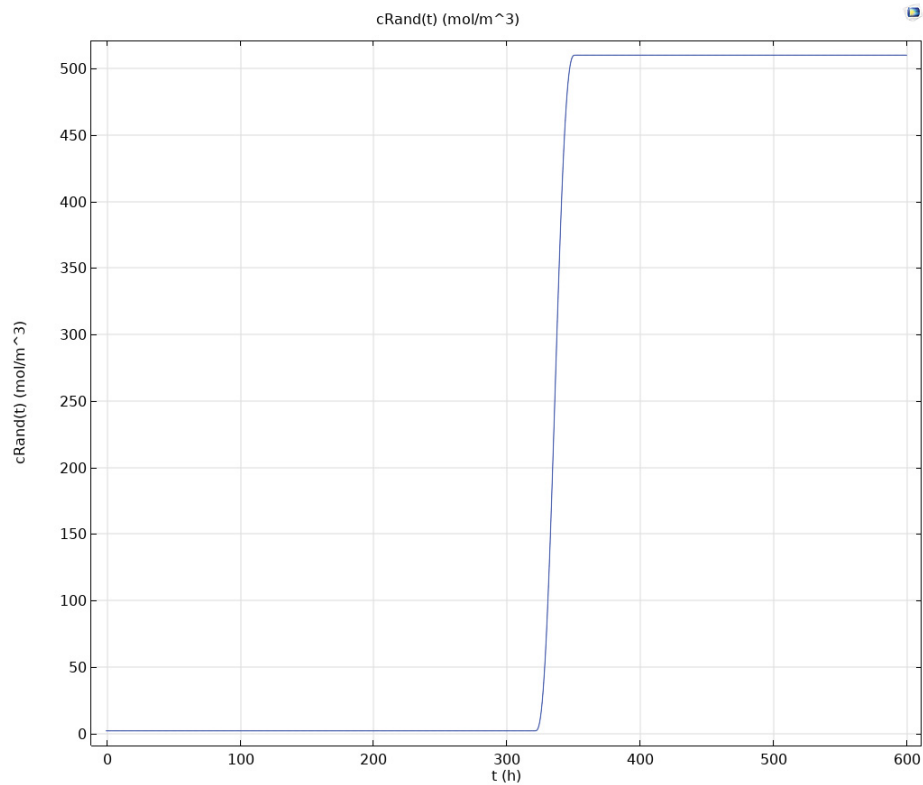


Abbildung 3.13: Zeitabhängige Erfassung der Chlorid-Beaufschlagung durch eine stückweise definierte Funktion in COMSOL Multiphysic

3. Die Grenzen der Gebiete an denen kein Stofftransport möglich ist: Dies entspricht den Kanten der Gesteinskörnung, da der Stofftransport im Gesteinskorn vernachlässigt werden kann (siehe Kapitel 2.1) und den Außenkanten der Modellfläche, bis auf die Kante der Beaufschlagung. Die Abbildung 3.14 verdeutlicht in einem Detailausschnitt der Geometrie die zu definierenden Grenzen.

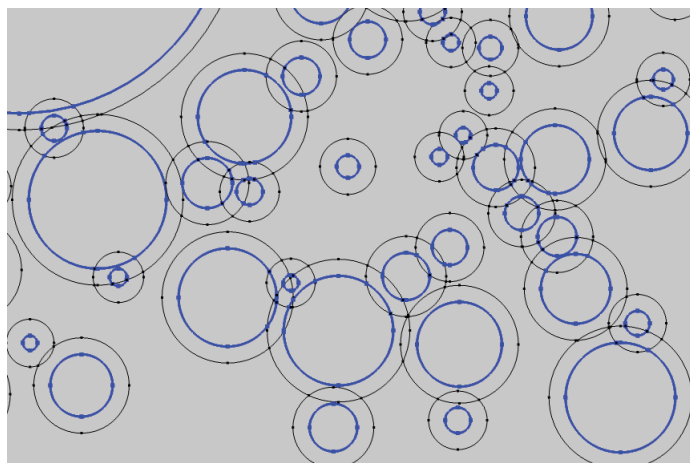


Abbildung 3.14: Definierte Randbedingung „Kein Fluss“ (blau) für die Gesteinskörnung sowie Außenkanten der Modellfläche (Detailausschnitt der Geometrie)

3.5. Generieren des FEM-Netzes

Auch das Netz der differenzierten Geometrie wird programmgesteuert generiert. Der Detaillierungsgrad „fein“ erbrachte das in Abbildung 3.15 dargestellte Netz. Die Software achtet bei der Generierung eigenständig auf geometrisch komplexere Abschnitte im Modell und wählt an diesen Stellen eine höhere Feinheit des Netzes. So ist beispielsweise in Bereichen, in denen Gesteinskörner sehr nah beieinander liegen, ein höherer Detaillierungsgrad anzufinden.

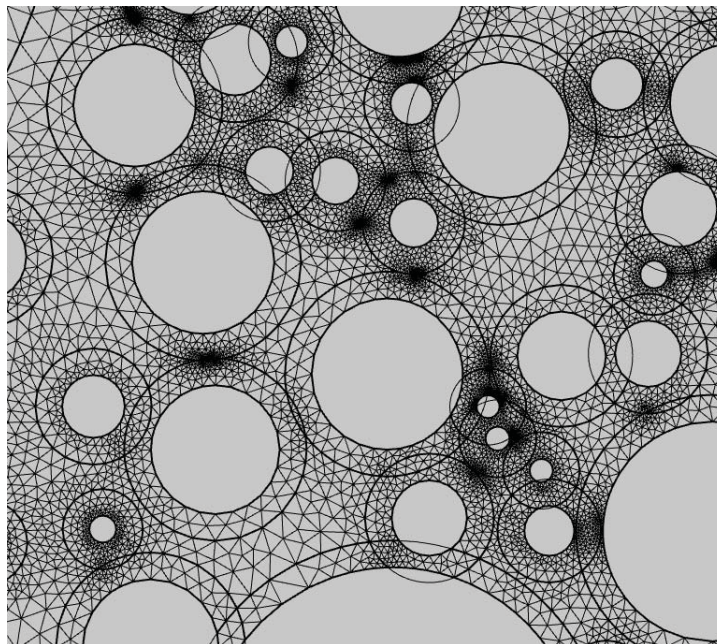


Abbildung 3.15: Programmgesteuerte Generierung des FEM-Netzes

3.6. Berechnung des Modells

Die eigentliche Berechnung des Modells fällt unter den Reiter „Studie“ im „Modell-Tree“. Der Anwender kann hierbei zwischen einer stationären oder instationären Studie unterscheiden. Bei einer instationären Studie, welche für dieses Modell gewählt wird, ist der Zeitraum vom Anwender festzulegen, für den die Berechnung gelten soll. Alle zeitabhängigen Funktionen im Modell, bei denen die Zeit durch die Variable t deklariert ist, werden automatisch in die instationäre Berechnung der Studie einbezogen. So werden in diesem Modell die Chloridbeaufschlagung, der Hydratationsgrad und damit auch die Porosität und Tortuosität zeitabhängig in der Berechnung erfasst.

4. Validierung

4.1. Zielsetzung und Vorgehen

In dieser Arbeit war ein FEM-Diffusionsmodell mit dem grundlegenden Ziel zu entwickeln, den in der Realität ablaufenden Diffusionsprozess befriedigend zu rekonstruieren und damit eine Grundtauglichkeit des Modells zu überprüfen. Die Ergebnisse des FEM-Diffusionsmodells sollen daher mit experimentell ermittelten Daten sowie mit einem rechnerischen Modell zur Darstellung der Chloriddiffusion in Beton verglichen werden. Die experimentellen Daten beruhen auf einer Labor-Versuchsreihe der HafenCity Universität Hamburg, welche im Kapitel 4.2 dargestellt wird. Bei dem rechnerischen Modell handelt es sich um das vollprobabilistische Nachweiskonzept zur Dauerhaftigkeitsbemessung von Stahlbetonbauwerken nach Gehlen [46], welches die Berechnung des Chlorideindringens in Beton aufgrund Diffusion beinhaltet.

Folgende Punkte sollen bei der Gegenüberstellung der Modelle überprüft werden:

- Oberflächenkonzentration
- Maximale Chlorideindringtiefe
- Berechnete Chloridkonzentrationen der Diffusionskurve
- Vergleich des Konzentrationsgefälles

Je nach Wahl des Zementes ergeben sich für das FEM-Modell unterschiedliche Variablen, die in den globalen Definitionen zu hinterlegen sind. Die Anlage C stellt die Variablen in Abhängigkeit des CEM-Zementes dar. Der Anlage ist zu entnehmen, dass nicht für jeden aufgeführten Zement alle Variablen definiert werden können, sodass hier auf Werte vergleichbarer Zemente zurückgegriffen werden muss. Da für den CEM I alle nötigen Werte gegeben sind, soll in dieser Arbeit das Modell zunächst nur anhand eines CEM I validiert werden. Des Weiteren beschränkt sich die Validierung auf einen w/z -Wert von 0,5, da dieser in der Praxis einen häufig gewählten Wert darstellt und das Hydratationsmodell nach Röhling ebenfalls auf Experimenten dieses w/z -wertes beruhen. Der CEM I mit einem w/z -Wert von 0,5 stellt daher die optimalen Voraussetzungen, um eine Grundtauglichkeit des Modells zu be- oder widerlegen. Zur Beurteilung der berechneten FEM-Diffusionskurven sind die ermittelten Chloridgehalte der Versuchsreihe maßgebend. Bei starken Unstimmigkeiten der Profile soll das Modell nach Gehlen weitere Auskünfte geben.

4.2. Experimentelle Daten

Die zur Validierung herangezogenen experimentellen Daten beruhen auf eigenen Versuchen des Fachbereiches, welche durch die Bachelorthesis „Gegenüberstellung der Chloridanalyseverfahren von LIBS und potentiometrischer Titration unter Einbezug von Chloridmigrationskoeffizienten“ von Anil Özer begleitet wurden. Dabei sind Betonproben einseitig mit einer 3 M.-% Natriumchlorid-Lösung zu unterschiedlichen Erstbeaufschlagungszeitpunkten und Expositionsdauern ausgesetzt worden. Maßgebend für eine repräsentative Gegenüberstellung der Versuchsdaten mit den FEM-Ergebnissen ist, dass die Betonproben im Versuch nach Erstellung unter Laborbedingungen in einem Wasserbad bis zu ihrer Beaufschlagung gelagert wurden. Die Betonproben können demnach als wassergesättigt angenommen werden, was eine Grundannahme des FEM-Modells darstellt. Ferner gewährleistet die Herstellung unter Laborbedingungen eine konstante Raumtemperatur von 293 K während des Versuches. Zur Validierung werden die ermittelten Chloridgehalte herangezogen, die anhand der potentiometrischen Titration ermittelt wurden. Das genaue Verfahren der potentiometrischen Titration kann [47] entnommen werden. Zur Gegenüberstellung der Versuchsdaten mit den Ergebnissen des FEM-Modells wurden die im Anhang D (Tabelle D.1) dargestellten Werte in den globalen Definitionen erfasst. Die Werte basieren auf der im Versuch angewendeten und im Anhang D dargestellten Betonrezeptur. Weiter ist der Tabelle D.2 zu entnehmen, dass der zu untersuchende w/z -Wert von 0,5 Anwendung fand.

Die Versuchsreihe besteht aus Chloridgehalten von Betonen mit den Erstbeaufschlagungszeitpunkten von 14, 28, 56, 92 und 180 Tagen nach Betonherstellung, bei einer Beaufschlagungsdauer von 35, 49, 91, 182 und 189 Tagen. Alle Versuchsdaten für den CEM I 42,5 N sollen einer FEM-Berechnung gegenübergestellt werden. Der Gesamtchloridgehalt in Abhängigkeit der Eindringtiefe wurde stets in der Einheit M.-% bezogen auf die angewendete Zementmasse angegeben, was bei der Darstellung der FEM-Ergebnisse zu berücksichtigen war.

4.3. Modell zur Beschreibung des Chlorideindringvorganges nach Gehlen

Weiterhin soll das numerische FEM-Modell einer analytischen Berechnung zur Ermittlung des Chlorideindringens in Beton gegenübergestellt werden. Dazu findet das Modell zur Beschreibung des Chlorideindringvorganges nach Gehlen [46] Anwendung, welches auf der Fehlerfunktions-Lösung des zweiten Fick'schen Diffusionsgesetzes basiert und als Ergebnis den Gesamtchloridgehalt C_t [M.-%/z] abhängig von der Zeit t [s] und der Tiefe x [m] ausgibt. Folgende Funktion war bei der Validierung anzuwenden [46, S.40]:

$$C_t(x, t) = C_{S, \Delta x} \cdot \left[1 - \operatorname{erf} \frac{x - \Delta x}{2 \cdot \sqrt{D_{eff}(t) \cdot t}} \right] \quad (4.1)$$

Die Funktion 4.1 berücksichtigt, dass sich bei einer intermittierenden Chloridbeaufschlagung des Bauteils oberflächennahe Bereiche des Betons nur unzureichend mit dem zweiten Fick'schen Diffusionsgesetz beschreiben lassen [46, S.38]. Ursache hierfür sind stark konvektive Einflüsse, die durch den ständigen Wechsel der Spritzwasserbeaufschlagung (Verkehrswesen/Wechselzone bei Meerwasserbauteilen) und anschließender Verdunstung hervorgerufen werden [46, S.38]. Dieser Bereich kann quantitativ über die Variable Δx einfließen und von der eigentlichen Tiefenlage x subtrahiert werden. Für den zu untersuchenden Sachverhalt kann $\Delta x = 0$ gesetzt werden. $C_{S, \Delta x}$ [M.-%/z] stellt die Chloridkonzentration in der Tiefe Δx in Abhängigkeit der anstehenden Chlorideinwirkung dar. Der effektive Chloriddiffusionskoeffizient D_{eff} [m²/s] wird hierbei über einen zum Referenzzeitpunkt t_0 [a] bestimmten Migrationskoeffizienten $D_{RCM,0}$ [m²/s] (Testmethode RCM) berechnet, der über einen Übertragungsparameter k_t [-], der Variable k_e [-] zum Einbezug der Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten und der Alterungsfunktion $A(t)$ angepasst wird. Der Alterungsexponent a [-] der Funktion 4.2 beschreibt die Zeitabhängigkeit des effektiven Diffusionskoeffizienten. Dabei besteht folgende Beziehung:

$$D_{eff}(t) = k_e \cdot D_{RCM,0} \cdot k_t \cdot A(t) = k_e \cdot D_{RCM,0} \cdot k_t \cdot \left(\frac{t_0}{t} \right)^a \quad (4.2)$$

In Anlehnung an die Modifikation der analytischen Lösung mittels Gaußscher Fehlerfunktion durch Crank [27, S.32], wird die Funktion 4.1 wie folgt angepasst, um den Grundchloridgehalt C_i [M.-%/z] (entspricht hier dem Eigenchloridgehalt) des Betons zu berücksichtigen. Dies ermöglicht eine bessere Vergleichbarkeit der Diffusionskurven.

$$C_t(x, t) = (C_{S, \Delta x} - C_i) \cdot \left[1 - \operatorname{erf} \frac{x - \Delta x}{2 \cdot \sqrt{D_{eff}(t) \cdot t}} \right] + C_i \quad (4.3)$$

4.4. Gegenüberstellung der Diffusionskurven

4.4.1. Darstellung der FEM-Ergebnisse

Die Gegenüberstellung der resultierenden Diffusionskurven kann ebenfalls in COMSOL Multiphysics erfolgen. Im ersten Schritt muss die Darstellung des Ergebnisses der FEM-Berechnung an die zu vergleichenden Daten angepasst werden. Da die Versuchsergebnisse der Titration sowie das analytische Modell nach Gehlen eine eindimensionale Diffusionskurve als Endergebnis darstellen, waren die FEM-Ergebnisse, die sich auf ein 2D-Modell beziehen, auf eine eindimensionale Darstellung zu reduzieren.

In COMSOL Multiphysics ist dazu im „Model Tree“ unter dem Reiter „Ergebnisse“ ein neuer Datensatz zu definieren. Über den Datensatz „Schnittlinie 2D“ können somit die Chloridkonzentrationen erfasst werden, die sich nur auf einem definierten Pfad (die Schnittlinie) ergeben. Dieser Datensatz kann folglich als eindimensionale Kurve abgebildet werden. Die für die Validierung definierte Schnittlinie ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Für eine möglichst stetige Diffusionskurve sollte die Schnittlinie Bereiche mit einem hohen Zementsteinanteil queren. Geschnittene Gesteinskörner, die als Randbedingung porenwasserundurchlässig definiert wurden, liefern keine Ergebnisse. An diesen Stellen ist die Kurve daher unterbrochen. Dies sollte zum Verständnis und Interpretation der Kurven beachtet werden.

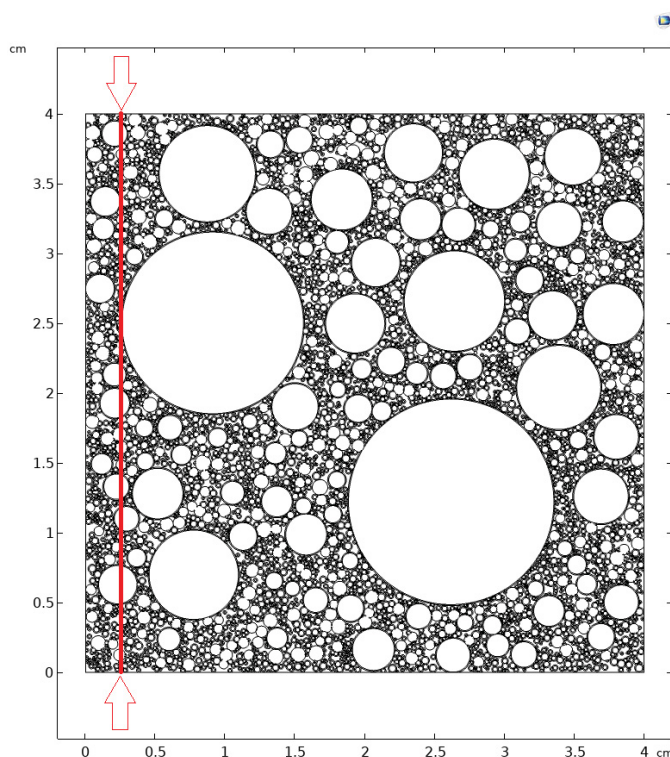


Abbildung 4.1: Darstellung der gewählten Schnittlinie im Datensatz „Schnittlinie 2D“

Weiterhin erfasst die Diffusionskurve der Versuchsreihe sowie des analytischen Modells den Gesamtchloridgehalt des Betons. Folglich soll auch dieser durch COMSOL Multiphysics für das FEM-Modell ausgegeben werden. Mit der Definition des Datensatzes wird bei jeder Berechnung ein Plot der Kurve unter dem Punkt „Ergebnisse“ ausgegeben. Mit der Implementierung des Interfaces „Transport verdünnter Spezies in porösen Medien“ erfasst der Plot die freie Konzentration c der zu untersuchenden Spezies in der Einheit mol/l bezogen auf das Volumen der Lösung. Um die freie Konzentration als Chloridgehalt in M.-%/Zement zu erhalten, muss folgende Umrechnung im generierten Plot vorgenommen werden (die Werte der Gleichung 4.5 basieren auf der Betonrezeptur der Versuchsreihe):

$$c [M\text{-}\%/Zement] = \left(\frac{c_{COMSOL} \cdot M_{Cl^-}}{1000} \cdot \epsilon_{Kapillar}(t) \right) / m_{Zement} \cdot 100 \quad (4.4)$$

$$= \left(\frac{c_{COMSOL} \cdot 35,45 \text{ g/mol}}{1000} \cdot \epsilon_{Kapillar}(t) \right) / 350 \text{ kg} \cdot 100 \quad (4.5)$$

Zur Darstellung des Gesamtchloridgehaltes wird nach der Stoffbilanz die Konzentration der gebundenen Chlorid-Ionen im Beton addiert, die in COMSOL Multiphysics mit der Variable $tds.cP_c$ deklariert ist. Es gilt demnach $c_b = tds.cP_c$ mit der Einheit mol/kg bezogen auf das Gewicht des Zementsteins. Folgende Umrechnung ist vorzunehmen, um auch hier den Chloridgehalt in der Einheit M.-%/Zement zu erhalten. Die Modifizierung des durch COMSOL Multiphysics erstellten Plots ist der Abbildung 4.2 zu entnehmen.

$$c_b [M\text{-}\%/Zement] = \frac{c_{bCOMSOL} \cdot M_{Cl^-}}{1000} \cdot \frac{m_{Zement+Wasser}}{m_{Zement}} \cdot 100 \quad (4.6)$$

$$= \frac{c_{bCOMSOL} \text{ mol/kg} \cdot 35,45 \text{ g/mol}}{1000} \cdot \frac{525 \text{ kg}}{350 \text{ kg}} \cdot 100 \quad (4.7)$$

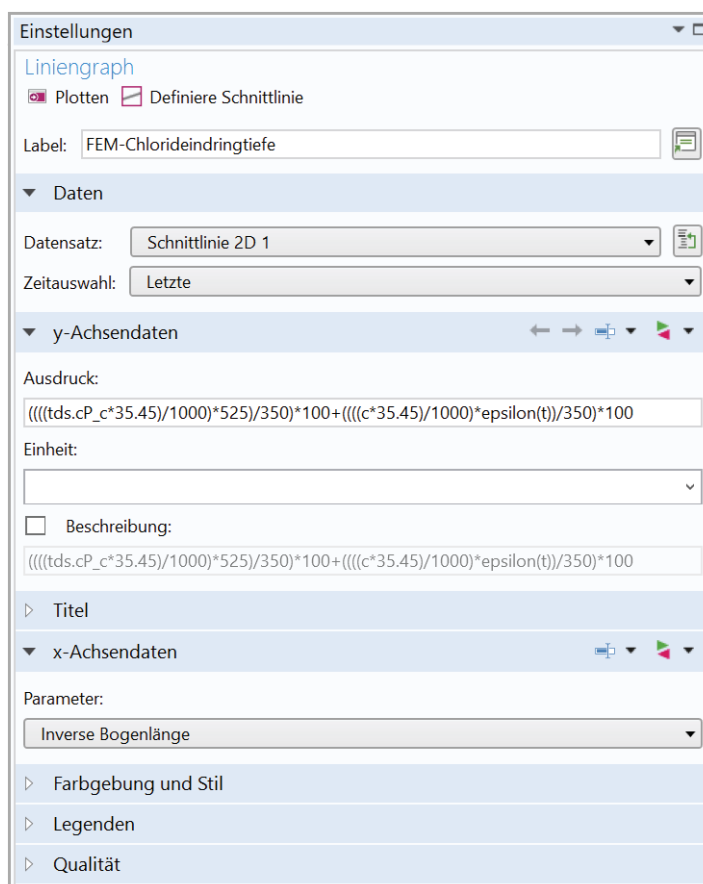


Abbildung 4.2: Anpassung des Datensatzes „Schnittlinie 2D“

4.4.2. Implementierung der Versuchsdaten in COMSOL Multiphysics

Zur Gegenüberstellung der Versuchsdaten mit dem FEM-Modell sind die Daten in COMSOL Multiphysics zu implementieren. Die dieser Arbeit beiliegenden Datei Versuchsdaten_HCU stellt die Gesamtchloridgehalte in M.-%/Zement dar, die über die Titration ermittelt wurden. Der Datei ist zu entnehmen, dass für je eine Tiefenlage von 5 mm der Chloridgehalt gemessen und als Mittel in der Tiefe von 2,5 mm, 7,5 mm, 12,5 mm, 17,5 mm, 22,5 mm und 27,5 mm angesetzt wurde. Beispielfhaft ist die tabellarische Darstellung der Chloridgehalte in Abbildung 4.3 aufgeführt. Zur Implementierung werden die Daten für jede einzelne Probe in eine .txt -Datei übersetzt (Schema siehe Abbildung 4.3 rechts). Die .txt-Datei wird von COMSOL Multiphysics unter dem Reiter „Ergebnisse“ als Tabelle eingelesen und kann im Plot als Diagramm dargestellt werden. Die sechs gegebenen Chloridgehalte sind linear durch das Programm zu verbinden. In der beiliegenden COMSOL Multiphysics-Datei sind bereits alle Versuchsdaten des CEM I als Tabelle und Plot erfasst. Zur Gegenüberstellung der Plots werden diese in einer Plot-Gruppe dargestellt.

		CEMI
Probe	Bohrtiefe	Titration
14d/35d	2,50 mm	2,0578
	7,50 mm	0,9489
	12,50 mm	0,3870
	17,50 mm	0,1363
	22,50 mm	0,1086
	27,50 mm	0,1274

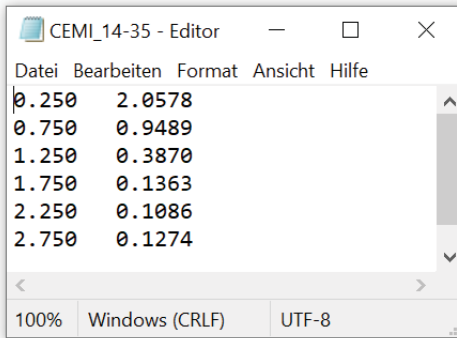


Abbildung 4.3: Übersetzung der Titrationsdaten in eine .txt -Datei

4.4.3. Implementierung des analytischen Modells nach Gehlen

Die in Kapitel 4.3 dargestellte Funktion 4.1 ist in COMSOL Multiphysics in den globalen Definitionen zu erfassen. Jede Funktion in den globalen Definitionen kann als Plot in den Ergebnissen dargestellt werden. Die gewählten Werte zur Implementierung der Funktion sind in der Tabelle 4.1 dargestellt. Soll auch der Plot des Gehlen-Modells dem FEM-Ergebnis gegenübergestellt werden, sind die Plots in einer Plot-Gruppe darzustellen. Es können nun alle Modelle miteinander verglichen und das FEM-Modell validiert werden.

Tabelle 4.1: Implementierte Werte zur Berechnung der Diffusionskurve nach Gehlen

Variable	Einheit	Wert
$C_{s,\Delta x}$	M-%/Z	2,8
Δx	[m]	0
$D_{RCM,0}$	[mm ² /a]	498,49
k_e	[-]	1
k_t	[-]	1
t_0	[a]	0,0767
a	[-]	0,3

4.4.4. Auswertung

Die Gegenüberstellung der erfassten Werte ist im Anhang F dargestellt. Die vom FEM-Modell berechnete Oberflächenkonzentration bei $x = 0$ cm beläuft sich konstant auf ca. 2,8 M.-% bezogen auf die Zementmasse, die zum besseren Vergleich auch als Oberflächenkonzentration im Modell nach Gehlen angesetzt wurde. Sechs der zwölf vorhandenen Diffusionskurven der Titration weisen bei Verlängerung der Kurve bis zur Oberfläche des Probekörpers eine ähnliche Konzentration auf. Im gleichen Zuge ist zu beachten, dass Chloridgehalte bei Betonproben mit einer späten Beaufschlagung aufgrund der vorangeschrittenen Hydratation bereits in oberflächennahen Bereichen eine sehr geringe Konzentration aufweisen. Daher führt eine lineare Verlängerung dieser Kurven zu verfälschten Oberflächenkonzentrationen. Die Oberflächenkonzentration von 2,8 M.-%/Zement stellt daher einen plausiblen Wert dar. Bei einer ersten Gegenüberstellung fällt beim Vergleich der Titrationskurve mit dem FEM-Modell auf, dass die Chloridprofile besonders bei einer späten Beaufschlagung und einer gleichzeitig langen Beaufschlagungsdauer die besten Übereinstimmungen zeigen, die eigentliche Chlorideindringtiefe des FEM-Modells jedoch stets zu gering ist. Werden Beaufschlagungszeitpunkt und Beaufschlagungsdauer zusammengefasst und ist diese < 130 Tage, sind die größten Abweichungen festzustellen. Dadurch weisen diese Profile eine hohe Diskrepanz zu den in der Realität gemessenen Werten auf.

Vor dem Hintergrund, dass die Implementierung des Porenverschlusseffektes einen noch sehr groben Ansatz darstellt und nach Wiens die Ausprägung des Porenverschlusseffektes bei einem reinen Portlandzement (CEM I) im Vergleich zu Zementen mit latent-hydraulischen und puzzolanischen Bestandteilen geringer ist, kann dem Anhang F eine zweite Gegenüberstellung entnommen werden. Hierbei wurde der Porenverschlusseffekt, also die Umrechnung der relevanten Porosität in eine wirksame

Porosität, nicht in das Modell implementiert und somit von der Berechnung ausgeschlossen. Die Diffusionskurven, die den Porenverschlusseffekt inkludieren, wurden entsprechend mit der Anmerkung „mit Porenverschlusseffekt“ im Titel versehen. Die in der zweiten Gegenüberstellung resultierenden FEM-Diffusionskurven weisen Chloridprofile mit einer höheren Chlorideindringtiefe auf.

Den Tabellen 4.2 bis 4.5 kann eine quantitative Auswertung der Kurven entnommen werden. Die in Kapitel 4.1 zur Überprüfung genannten Punkte der maximalen Chlorideindringtiefe, den in den Diffusionskurven dargestellten Konzentrationswerte und das Konzentrationsgefälle wurden hier erfasst. Da die Daten der Versuchsreihe maßgebend zur Überprüfung herangezogen werden, wird in der fünften Spalte die Abweichung zwischen dem FEM-Modell und den empirisch ermittelten Daten dargestellt. Die maximale Eindringtiefe kann den Abbildungen im Anhang F entnommen werden. Die Mittlere Abweichung der Konzentrationen der Diffusionskurve des Gehlen-Modells und der FEM-Berechnung beziehen sich auf die jeweilige Diffusionskurve der Versuchsreihe. Dabei wurden die Konzentrationen in den Tiefen 2,5 mm , 7,5 mm , 12,5 mm, 17,5 mm , 22,5 mm und 27,5 mm der Modelle ermittelt und in das Verhältnis zu den Versuchsdaten gestellt. Das Mittel der sechs Verhältnisse stellt die mittlere Abweichung (arithmetisches Mittel) dar. Um das Konzentrationsgefälle zu vergleichen, wird der oberflächennahe Verlauf der Kurven als annähernd linear betrachtet. In Analogie zur Ermittlung einer Geradengleichung nach dem folgend dargestellten Schema wird die Steigung der Geraden bestimmt:

$$f(x) = s \cdot x + y \quad (4.8)$$

Die Variable x [m] ist in diesem Fall die Tiefe senkrecht zur Beaufschlagung. Die Steigung wird durch die Variable s [M.-%/m] ausgedrückt und der y-Achsenabschnitt durch die Variable y [M.-%] determiniert. Da an dieser Stelle nur die Steigung von Interesse ist, wird lediglich diese graphisch für die jeweiligen Kurven ermittelt und in den genannten Tabellen erfasst. Die Probenbezeichnung wie z. B. „Probe 14d/35d“ gibt Auskunft über den Beaufschlagungszeitpunkt (hier: 14.Tag nach Herstellung) und die Beaufschlagungsdauer (hier: 35 Tage).

Tabelle 4.2: Auswertung der Gegenüberstellung

	Gehlen-Modell	FEM - Berechnung	Versuch (Titration)	Abweichung FEM / Versuch [%]
Probe 14d/35d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	3,00	0,70	2,25	-68,89%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	110,42	61,15	-	61,15%
Steigung s [M.-%/cm]	-1,66	-4,10	-2,11	94,00%
Probe 14d/35d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	3,00	1,50	2,25	-33,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	110,42	16,69	-	16,69%
Steigung s [M.-%/cm]	-1,66	2,02	-2,11	-196,00%
Probe 14d/91d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	4,00	1,00	2,20	-55,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	267,10	71,49	-	71,49%
Steigung s [M.-%/cm]	1,35	3,36	0,79	325,00%
Probe 14d/91d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	4,00	2,20	2,20	0,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	267,10	131,22	-	131,22%
Steigung s [M.-%/cm]	1,35	1,45	0,79	84,00%
Probe 14d/182d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	1,25	2,00	-38,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	368,32	65,16	-	65,16%
Steigung s [M.-%/cm]	1,07	2,57	0,49	424,00%
Probe 14d/182d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	2,75	2,00	38,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	368,32	434,94	-	434,94%
Steigung s [M.-%/cm]	1,07	1,09	0,49	122,00%

Tabelle 4.3: Fortsetzung: Auswertung der Gegenüberstellung

	Gehlen-Modell	FEM - Berechnung	Versuch (Titration)	Abweichung FEM / Versuch [%]
Probe 28d/91d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	4,00	1,00	2,50	-60,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	190,21	64,59	-	64,59%
Steigung s [M.-%/cm]	1,36	1,79	1,36	32,00%
Probe 28d/91d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	4,00	2,10	2,50	-16,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	190,21	55,95	-	55,95%
Steigung s [M.-%/cm]	1,36	1,43	1,36	5,00%
Probe 28d/185d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	1,20	2,75	-56,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	136,46	47,36	-	47,36%
Steigung s [M.-%/cm]	1,12	2,60	1,09	139,00%
Probe 28d/185d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	2,80	2,75	2,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	136,46	49,63	-	49,63%
Steigung s [M.-%/cm]	1,12	1,15	1,09	6,00%
Probe 56d/49d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	3,90	0,70	1,75	-60,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	377,21	106,27	-	106,27%
Steigung s [M.-%/cm]	1,39	5,04	1,36	271,00%
Probe 56d/49d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	3,90	1,50	1,75	-14,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	377,21	44,68	-	44,68%
Steigung s [M.-%/cm]	1,39	1,98	1,36	46,00%

Tabelle 4.4: Fortsetzung: Auswertung der Gegenüberstellung

	Gehlen-Modell	FEM - Berechnung	Versuch (Titration)	Abweichung FEM / Versuch [%]
Probe 56d/189d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	1,70	2,25	-24,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	158,45	33,82	-	33,82%
Steigung s [M.-%/cm]	1,02	2,46	0,66	273,00%
Probe 56d/189d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	2,65	2,25	18,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	158,45	85,76	-	85,76%
Steigung s [M.-%/cm]	1,02	1,16	0,66	76,00%
Probe 92d/35d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	0,70	1,75	-60,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	257,53	40,33	-	40,33%
Steigung s [M.-%/cm]	1,28	2,41	1,44	67,00%
Probe 92d/35d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	1,20	1,75	-31,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	257,53	19,29	-	19,29%
Steigung s [M.-%/cm]	1,28	2,55	1,44	77,00%
Probe 92d/91d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	1,80	1,25	44,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	674,67	104,28	-	104,28%
Steigung s [M.-%/cm]	1,08	3,66	0,33	1009,00%
Probe 92d/91d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	1,90	1,25	52,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	674,67	645,64	-	645,64%
Steigung s [M.-%/cm]	1,08	1,57	0,33	376,00%

Tabelle 4.5: Fortsetzung: Auswertung der Gegenüberstellung

	Gehlen-Modell	FEM - Berechnung	Versuch (Titration)	Abweichung FEM / Versuch [%]
Probe 92d/182d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	1,15	1,75	-34,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	507,02	92,86	-	92,86%
Steigung s [M.-%/cm]	1,00	2,77	0,62	347,00%
Probe 92d/182d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	2,50	1,75	43,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	507,02	379,63	-	379,63%
Steigung s [M.-%/cm]	1,00	1,14	0,62	84,00%
Probe 180d/35d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	0,60	1,75	-66,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	367,21	752,85	-	752,85%
Steigung s [M.-%/cm]	1,05	2,80	0,67	318,00%
Probe 180d/35d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	1,20	1,75	-31,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	367,21	65,08	-	65,08%
Steigung s [M.-%/cm]	1,05	2,67	0,67	299,00%
Probe 180d/91d mit Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	0,85	1,25	-32,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	533,48	79,62	-	79,62%
Steigung s [M.-%/cm]	1,11	3,92	0,30	1207,00%
Probe 180d/91d ohne Porenverschlusseffekt				
Max. Eindringtiefe [cm]	> 4	1,85	1,25	48,00%
Ø-Abweichung der Konzentrationen zur Versuchsreihe	504,14	272,52	-	272,52%
Steigung s [M.-%/cm]	1,11	1,58	0,30	427,00%

4.4.5. Ergebnis der Validierung

Mit Hilfe der zweiten Gegenüberstellung konnten verbesserte Ergebnisse der FEM-Berechnung erreicht werden, wenn Beaufschlagungszeitpunkt und Beaufschlagungsdauer gering gehalten werden. Beträgt die Gesamtzeit < 130 , Tage zeigen das FEM-Modell, die Versuchsdaten sowie das Modell nach Gehlen Übereinstimmungen auf. Die berechnete Chlorideindringtiefe, das Konzentrationsgefälle und die absoluten Chloridkonzentrationen werden zufriedenstellend abgebildet. Für die Berechnung im genannten Zeitraum weisen die FEM-Berechnung und das Modell nach Gehlen gehäuft ähnliche Verläufe auf. Gleichzeitig nähert sich die resultierende Chlorideindringtiefe des FEM-Modells mehr den in der Realität ermittelten Eindringtiefen an.

Für Gesamtzeiten > 130 Tage weist das FEM-Modell mit Einbezug des Porenverschlusseffektes im Vergleich dem Gehlen-Modell deutlich geringere Chloridkonzentrationen und Eindringtiefen auf. Dies deckt sich mit den Diffusionskurven der Versuchsreihe.

Der (geometrische) Porenverschlusseffekt im Beton wird besonders durch puzzolanische sowie latent-hydraulische Reaktionen verursacht. Das Vorhandensein des bei der Hydratation freiwerdenden Calciumhydroxids (Portlandit) ist ausschlaggebend für diese Reaktionen, welche besonders in der Phase der Nacherhärtung (fortgeschrittene Hydratation) stattfinden. Der eigentliche Porenverschlusseffekt findet somit erst zu späteren Zeitpunkten statt. Aufgrund der Vernachlässigung dieses Effektes in der zweiten Gegenüberstellung weichen damit besonders die Chloridprofile von der Realität ab, die den Einfluss des Porenverschlusseffektes aufgrund einer fortgeschrittenen Hydratation erfahren würden. Die somit in der zweiten Gegenüberstellung erhaltenen Chloridprofile können als plausibel bewertet werden. Gleichzeitig wird deutlich, dass das implementierte Modell des Porenverschlusseffektes einen noch zu ungenauen Ansatz darstellt.

Zusammenfassend lässt sich die Grundtauglichkeit des FEM-Modells mit dieser Gegenüberstellung bestätigen. Je nach dargestelltem Ansatz im Anhang F zeigen die Chloridprofile im Hinblick auf deren Eindringtiefe, dem Konzentrationsgefälle und den absoluten Chloridkonzentrationen (besonders bei geringen Beaufschlagungszeitpunkten und -dauern) zufriedenstellende Ergebnisse auf. Die Chloridprofile der Versuchsreihen sind bei der Beurteilung maßgebend. Auch das Modell nach Gehlen zeigt bei kurzen Beaufschlagungsdauern eine hohe Ähnlichkeit zum FEM-Modell auf.

5. Zusammenfassung

In dieser Arbeit konnte ein FEM-Diffusionsmodell für Chloridtransport in Beton auf Grundlage des zweiten Fick'schen Diffusionsgesetzes mit Hilfe der Software COMSOL Multiphysics 5.5 entwickelt werden. Die maßgebende Validierung mit ermittelten Chloridprofilen aus Versuchsreihen der HafenCity Universität Hamburg belegen eine Grundtauglichkeit des FEM-Modells. Das Modell legt dabei den Fokus auf die differenzierte Implementierung der diffusionsbeeinflussenden Effekte Porosität, Tortuosität, Chloridbindung, Kontaktzone der Gesteinskörnung mit dem Zementstein und Porenverschlusseffekt. Mit Einbezug der Geometrie/Struktur des Betons können lokale diffusionsretardierende sowie -akzelerierende Bereiche erfasst werden. Dies kommt dem Bestreben einer möglichst realitätsnahen Darstellung des Chloridtransportes zu Gute. Gleichzeitig ist zu beachten, dass die Qualität der Ergebnisse des FEM-Modells mit der Qualität der einzeln implementierten Modelle steigt und fällt. So liefert das implementierte Modell zur Beschreibung des Porenverschlusseffektes nur bedingt befriedigende Ergebnisse.

6. Ausblick

Ausgehend von der Erkenntnis der Grundtauglichkeit und den bereits guten Ergebnissen des FEM-Modells kann in einem nächsten Schritt die Validierung mit Hilfe von weiteren Zementarten fortgesetzt werden. Dazu sollte das Modell zur Beschreibung des Porenverschlusseffektes jedoch eine nähere Betrachtung und erneute Implementierung erfahren. Ferner besteht die Vermutung einer Qualitätssteigerung des Modells durch die Implementierung weiterer diffusionsbeeinflussenden Effekte wie z. B. die Driftgeschwindigkeit der Chlorid-Ionen. Weiterhin zeigt die Visualisierung der Ergebnisse durch das FEM-Programm Stärken auf, die auch in anderen Bereichen genutzt werden können. Dies kann beispielsweise eine Hilfe zur weiteren Forschung an der Kontaktzone (ITZ) sein.

Literatur

- [1] Stark, Jochen und Bernd Wicht: *Dauerhaftigkeit von Beton*. Springer Vieweg, Berlin und Heidelberg, 2. aktualisierte und erweiterte Auflage, 2013.
- [2] Breit, Wolfgang, Christoph Dauberschmidt, Christoph Gehlen, Christian Sodeikat, Alexander Taffe und Udo Wiens: *Zum Ansatz eines kritischen Chloridgehaltes bei Stahlbetonbauwerken*. Beton- und Stahlbetonbau, 106(5):290–298, 2011.
- [3] Tang, Luping: *Chloride Transport in Concrete: Measurement and Prediction*. Chalmers University of Technology, Department of Building Materials, Göteborg, 1996.
- [4] Klein, Bernd: *FEM: Grundlagen und Anwendungen der Finite-Element-Methode im Maschinen- und Fahrzeugbau*. Studium. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 9. verbesserte und erw. Auflage, 2012.
- [5] Klausen, Dietmar, Rudolf Hoscheid und Peter Lieblang: *Technologie der Baustoffe: Handbuch für Studium und Praxis*. VDE-Verl., Berlin and Offenbach, 15. neu bearbeitete und erweiterte Auflage, 2013.
- [6] Hartmann, Thomas: *Zur mesomechanischen Modellierung von Beton und ihrer Anwendung zur makromechanischen Modellbildung*. München, Univ. der Bundeswehr, Diss., 2009, Universitätsbibliothek der Universität der Bundeswehr München, Neubiberg, 2009.
- [7] Kapteina, Gesa und DAfStb: *Modell zur Beschreibung des Eindringens von Chlorid in Beton von Verkehrsbauten*, Band v.607 der Reihe DAfStb-Heft. Beuth, Berlin, 2013.
- [8] Czichos, Horst, Birgit Skrotzki und Franz Georg Simon: *Das Ingenieurwissen: Werkstoffe*. SpringerLink. Springer Vieweg, Berlin, 2014.
- [9] Neroth, Günter und Dieter Vollenschaar: *Wendehorst Baustoffkunde: Grundlagen - Baustoffe - Oberflächenschutz ; mit 363 Tabellen*. Vieweg+Teubner Verlag / Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH Wiesbaden, Wiesbaden, 27. vollständig überarbeitete Auflage, 2011.
- [10] Götze, Jens und Matthias Göbbels: *Einführung in die Angewandte Mineralogie*. Springer Spektrum, Berlin, 2017.
- [11] Binnewies, Michael, Maik Finze, Manfred Jäckel, Peer Schmidt, Helge Willner und Geoffrey Rayner-Canham: *Allgemeine und Anorganische Chemie*. Springer Spektrum, Berlin, 3. vollständig überarbeitete Auflage, 2016.

- [12] Büchel, Karl Heinz, Hans Heinrich Moretto und Peter Woditsch: *Industrielle anorganische Chemie*. Wiley-VCH, Weinheim, 3. vollst. überarb. Auflage, 2005.
- [13] Röhling, Stefan: *Betonbau*. Fraunhofer IRB-Verl., Stuttgart, 2012.
- [14] Verein Deutscher Zementwerke e.V.: *Zement-Taschenbuch*. Verlag Bau und Technik, Düsseldorf, 2002.
- [15] Sing, Kenneth, D. H. Everett, R. A.W. Haul, L. Moscou, R. A. Pierotti, Jean Rouquerol und T. Siemieniewska: *Reporting Physisorption Data for Gas/Solid Systems*. Pure Appl.Chem, 57:603–619, 1985.
- [16] Auberg, Rainer und M. Setzer: *Frost resistance of concrete: Proceedings of the International RILEM Workshop on Resistance of Concrete to Freezing and Thawing with or without De-icing Chemicals, University of Essen, September 22-23, 1997*, Band 34 der Reihe *RILEM proceedings*. [CRC Press], [Boca Raton], 1997.
- [17] Benedix, Roland: *Bauchemie: Einführung in die Chemie für Bauingenieure und Architekten*. Lehrbuch. Springer Vieweg, Wiesbaden, 6. vollst. überarb. und aktualisierte Auflage, 2015.
- [18] Stark, Jochen und Bernd Wicht: *Zement und Kalk: Der Baustoff als Werkstoff*. BauPraxis. Birkhäuser Basel, Basel, 2000.
- [19] Mishra, Phoolendra K. und Kristopher L. Kuhlman: *Advances in Hydrogeology*. Springer, New York, NY, 2013.
- [20] Lutze, Dietmar und Wolfgang vom Berg: *Handbook on fly ash in concrete: Principles of production and use*. Verlag Bau+Technik, Erkrath, 2. Auflage, 2013.
- [21] Wiens, Udo: *Zur Wirkung von Steinkohlenflugasche auf die chloridinduzierte Korrosion von Stahl in Beton: Zugl.: Aachen, Techn. Hochsch., Diss., 2004*, Band 551 der Reihe *Deutscher Ausschuss für Stahlbeton im DIN Deutsches Institut für Normung e.V.* Beuth, Berlin, 1. Auflage, 2005.
- [22] Scrivener, Karen L., Alison K. Crumbie und Peter Laugesen: *The Interfacial Transition Zone (ITZ) Between Cement Paste and Aggregate in Concrete*. Interface Science, 12(4):411–421, 2004.
- [23] Gao, Yueyi, Chuanlin Hu, Yamei Zhang, Zongjin Li und Jinlong Pan: *Characterisation of the interfacial transition zone in mortars by nanoindentation and scanning electron microscope*. Magazine of Concrete Research, 70(18):965–972, 2018.

- [24] Grondin, F. und M. Matallah: *How to consider the Interfacial Transition Zones in the finite element modelling of concrete?* Cement and Concrete Research, 58:67–75, 2014.
- [25] Scheydt, Jennifer Christine: *Mechanismen der Korrosion bei ultrahochfestem Beton: Zugl.: Karlsruhe, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Diss., 2013*, Band 74 der Reihe *Karlsruher Reihe Massivbau, Baustofftechnologie, Materialprüfung / Institut für Massivbau und Baustofftechnologie*. KIT Scientific Publishing, Karlsruhe, 2014.
- [26] Goedecke, Ralf: *Fluidverfahrenstechnik*. Wiley-VCH, Hoboken, 2008.
- [27] Crank, John: *The mathematics of diffusion*. Oxford science publications. Oxford Univ. Press, Oxford, 2. Auflage, ca. 2009.
- [28] Fick, Adolf: *Ueber Diffusion*. Annalen der Physik, 170(1):59–86, 1855.
- [29] Dullien, F. A.L.: *Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure*. Elsevier Science, Oxford, 2. Auflage, 1991.
- [30] Bechmann, Wolfgang und Ilko Bald: *Einstieg in die Physikalische Chemie für Naturwissenschaftler*. Studienbücher Chemie. Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg, 6. Auflage, 2018.
- [31] Dahme, Ulrich: *Chlorid in karbonatisierendem Beton: Speicher- und Transportmechanismen*. Cuvillier Verlag, Göttingen, 1. Auflage, 2006.
- [32] Freundlich, H.: *Über die Adsorption in Lösungen*. Wilhelm Engelmann, 1906.
- [33] Tang, Luping: *Concentration dependence of diffusion and migration of chloride ions*. Cement and Concrete Research, 29(9):1463–1468, 1999.
- [34] Lay, Sascha: *Abschätzung der Wahrscheinlichkeit tausalzinduzierter Bewehrungskorrosion: Baustein eines Systems zum Lebenszyklusmanagement von Stahlbetonbauwerken: Zugl.: München, Techn. Univ., Diss., 2006*, Band 568 der Reihe *Deutscher Ausschuss für Stahlbeton*. Beuth, Berlin, 1. Auflage, 2007.
- [35] Rahimi, Amir und DAfStb: *Semiprobabilistisches Nachweiskonzept zur Dauerhaftigkeitsbemessung und -bewertung von Stahlbetonbauteilen unter Chlorideinwirkung*, Band v.626 der Reihe *DAfStb-Heft*. Beuth Verlag, Berlin, 1. Auflage, 2017.
- [36] Diersch, Hans Jörg G.: *FEFLOW Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media*. Springer Berlin Heidelberg, 2014.

- [37] Knothe, Klaus und Heribert Wessels: *Finite Elemente: Eine Einführung für Ingenieure*. Lehrbuch. Springer Vieweg, Berlin, 5. Auflage, 2017.
- [38] Westermann, Thomas: *Modellbildung und Simulation: Mit einer Einführung in ANSYS*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [39] Tabatabaian, Mehrzad: *COMSOL for engineers*. Mercury Learning and Information, Dulles, VA, 2014.
- [40] COMSOL: *Introduction to COMSOL Multiphysics*. 2019.
- [41] COMSOL: *The Chemical Reaction Engineering Module User's Guide*. 2019.
- [42] Garboczi, E. J. und D. P. Bentz: *Computer simulation of the diffusivity of cement-based materials*. Journal of Materials Science, 27(8):2083–2092, 1992.
- [43] Bentz, D. P.: *Influence of silica fume on diffusivity in cement-based materials*. Cement and Concrete Research, 30(7):1121–1129, 2000.
- [44] Meng, Birgit: *Charakterisierung der Porenstruktur im Hinblick auf die Interpretation von Feuchtetransportvorgängen: Analyse der Zusammenhänge zwischen Porenstruktur und Feuchtehaushalt am Beispiel von Sandstein: Zugl.: Aachen, Techn. Hochsch., Diss., 1993*, Band 3 der Reihe *Aachener Beiträge zur Bauforschung*. Verl. der Augustinus-Buchh, Aachen, 1. Auflage, 1993.
- [45] Truc, O., J. P. Ollivier und L. O. Nilsson: *Numerical simulation of multi-species diffusion*. Materials and Structures, 33(9):566–573, 2000.
- [46] Gehlen, Christoph: *Probabilistische Lebensdauerbemessung von Stahlbetonbauwerken : Zuverlässigkeitsbetrachtungen zur wirksamen Vermeidung von Bewehrungskorrosion*. Dissertation, Aachen, 2000.
- [47] Dorner, Horst und Günter Kleiner: *Anleitung zur Bestimmung des Chloridgehaltes von Beton*, Band H. 401 der Reihe *Deutscher Ausschuss für Stahlbeton / Deutsches Institut für Normung*. Beuth, Berlin and Köln, 1989.

Technische Regelwerke

- [TR1] DIN 1045-2:2008-08: *Tragwerke aus Beton, Stahlbeton und Spannbeton – Teil 2: Beton – Festlegung, Eigenschaften, Herstellung und Konformität – Anwendungsregeln zu DIN EN 206-1*. Beuth Verlag, August 2008.
- [TR2] DIN EN 206:2013+A1:2016: *Beton – Festlegung, Eigenschaften, Herstellung und Konformität*. Beuth Verlag, Januar 2017.
- [TR3] DIN EN 197:2011: *Zement – Teil 1: Zusammensetzung, Anforderungen und Konformitätskriterien von Normalzement*. Beuth Verlag, November 2011.
- [TR4] DIN EN 12620:2002+A1:2008: *Gesteinskörnungen für Beton*. Beuth Verlag, Juli 2008.

A. Anhang A: Erhältliche Interfaces im „Chemical Reaction Engineering“-Modul (COMSOL Multphysics)

Tabelle A.1: Interfaces im „Chemical Reaction Engineering“-Modul [41, S.17 f.]






























PHYSICS INTERFACE	ICON	TAG	SPACE DIMENSION	AVAILABLE STUDY TYPE
 Chemical Species Transport				
Surface Reactions		sr	all dimensions	stationary (3D, 2D, and 2D axisymmetric models only); time dependent
Transport of Diluted Species ¹		tds	all dimensions	stationary; time dependent
Transport of Diluted Species in Porous Media		tds	all dimensions	stationary; time dependent
Transport of Diluted Species in Fractures		dsf	3D, 2D, 2D axisymmetric	stationary; time dependent
Electrophoretic Transport		el	all dimensions	stationary; stationary with initialization; time dependent; time dependent with initialization
Chemistry		chem	all dimensions	stationary; time dependent
Transport of Concentrated Species		tcs	all dimensions	stationary; time dependent
Nernst-Planck Equations		npe	all dimensions	stationary; time dependent
Nernst-Planck-Poisson Equations		tds+es	all dimensions	stationary; time dependent; stationary source sweep; small-signal analysis, frequency domain
Reaction Engineering		re	0D	time dependent; stationary plug flow
 Reacting Flow				
Laminar Flow		—	3D, 2D, 2D axisymmetric	stationary; time dependent
Laminar Flow, Diluted Species ¹		—	3D, 2D, 2D axisymmetric	stationary; time dependent

Tabelle A.2: Fortsetzung: Interfaces im „Chemical Reaction Engineering“-Modul [41, S.17 f.]

PHYSICS INTERFACE	ICON	TAG	SPACE DIMENSION	AVAILABLE STUDY TYPE
 Reacting Flow in Porous Media				
Transport of Diluted Species		rfd	3D, 2D, 2D axisymmetric	stationary; time dependent
Transport of Concentrated Species		rfd	3D, 2D, 2D axisymmetric	stationary; time dependent
 Fluid Flow				
 Single-Phase Flow				
Creeping Flow		spf	3D, 2D, 2D axisymmetric	stationary; time dependent
Laminar Flow ¹		spf	3D, 2D, 2D axisymmetric	stationary; time dependent
 Porous Media and Subsurface Flow				
Brinkman Equations		br	3D, 2D, 2D axisymmetric	stationary; time dependent
Darcy's Law		dl	all dimensions	stationary; time dependent
Free and Porous Media Flow		fp	3D, 2D, 2D axisymmetric	stationary; time dependent
 Heat Transfer				
Heat Transfer in Fluids ¹		ht	all dimensions	stationary; time dependent
Heat Transfer in Solids and Fluids ¹		ht	all dimensions	stationary; time dependent
Heat Transfer in Porous Media		ht	all dimensions	stationary; time dependent
¹ This physics interface is included with the core COMSOL package but has added functionality for this module.				

B. Anhang B: Eingangsparameter zur Ermittlung des Hydratationsgrades nach Röhling

Tabelle B.1: Eingangsparameter zur Ermittlung des Hydratationsgrades nach Röhling [13, S.142]

Zement	A [-]	B [-]	t_k [h]
CEM I 42,5 R	- 1,60	- 0,73	11,00
CEM I 32,5 R	- 1,83	- 0,70	13,00
CEM II/A 42,5 R	- 1,78	- 0,78	12,00
CEM II/A 32,5 R	- 2,10	- 0,75	15,00
CEM II/B-S 32,5 R (30 % Hüttensand)	- 1,55	- 0,70	8,90
CEM III/A 42,5 N	- 1,90	- 0,85	13,00
CEM III/A 32,5 N (55 – 60 % Hüttensand)	- 2,30	- 0,80	13,00
CEM III/B 42,5 N	- 1,68	- 0,86	16,00
CEM III/B 32,5 N	- 1,82	- 0,75	18,00
CEM III/B 42,5 – LH/HS/NA	- 2,20	- 0,78	13,00
CEM III/B 32,5 – LH/HS/NA	- 2,20	- 0,72	14,00

C. Anhang C: Zementabhängige Eingangsparameter des FEM-Modells

Tabelle C.1: Zementabhängige Eingangsparameter des FEM-Modells

Eingangswert	Einheit	Zementart									
		CEM I 32,5 R	CEM I 42,5 R	CEM II/B-S 32,5 R	CEM II/B-V	CEM II/B-W	CEM III/A 32,5 N	CEM III/A 42,5 N			
Freundlich-Isotherme	f_b [-]	3,57	3,57	3,82	5,73	5,73	5,87	5,87			
	β [-]	0,38	0,38	0,37	0,29	0,29	0,29	0,29			
	A [-]	-1,83	-1,6	-1,55	nicht vorhanden	nicht vorhanden	-2,3	-1,68			
	B [-]	-0,7	-0,73	-0,7	nicht vorhanden	nicht vorhanden	-0,8	-0,86			
Hydr. Grad	t_k [h]	13	11	8,9	nicht vorhanden	nicht vorhanden	13	16			
Kap. Poren	n_G [-]	2,161	2,128	2,194	2,261	2,261	2,221	2,221			
Fraktale Dimension	FD_p [-]	1,7	1,7	nicht vorhanden	nicht vorhanden	nicht vorhanden	nicht vorhanden	nicht vorhanden			
Dichte	ρ_{Zement} [kg/m ³]	3100	3100	3100	3100	3100	3100	3100			

Bestandteil	n_G [-]	Untergrenze	Obergrenze	n_G [-]	Anteile der Klinker-Bestandteile nach Zementart [M-%]						
					CEM I 32,5 R ²	CEM I 42,5 R ¹	CEM II/B-S 32,5 R ²	CEM II/B-V ²	CEM II/B-W ²	CEM III/A 32,5 N ²	CEM III/A 42,5 N ²
C ₃ S	2,16				63	61	45,36	45,36	45,36	31,185	31,185
C ₂ S	2,1				16	19	11,52	11,52	11,52	7,92	7,92
C ₃ A	2,674				11	9,2	7,92	7,92	7,92	5,445	5,445
C ₄ AF	2,123				8	7,8	5,76	5,76	5,76	3,96	3,96
SFA	2,52			5,22	0	0	0	28	28	0	0
BFA	2,5			5,22	0	0	0	0	0	0	0
HS	2,28				0	0	28	0	0	50,5	50,5
SF	1,8				0	0	0	0	0	0	0

¹ In der Versuchsreihe angewendeter Zement; Werte basieren auf Auskunft des Zementherstellers *LafargeHolcim* und stellen einen Mittelwert für die Zementchargen von 07/2017 bis 06/2018 dar.
² Werte basieren auf Literaturangaben [17, S.338] und der Norm DIN EN 197-1 [TR3].

D. Anhang D: Eingangswerte des FEM-Modells in Abhängigkeit von der Betonrezeptur

Tabelle D.1: Eingangswerte des FEM-Modells in den globalen Definitionen

Eingangsparameter	Einheit	Variable in COMSOL	Wert ¹
$A_{Röhling}$	[-]	A	-1,6
c_0	[mol/m ³]	AnfangsC	2
$c_{Lösung}$	[mol/m ³]	cLoesung	510
$B_{Röhling}$	[-]	B	-0,73
β	[-]	beta	0,38
Dauer der Beaufschlagung	[d]	Dauer	zu variieren
eITZ	[-]	eITZ	1,3
f_b	[-]	fb	3,57
FD _p	[-]	FDp	1,70
η_G	[-]	ng	2,128
m_{Zement}	[kg]	Mz	350
ρ_{Zement}	[kg/m ³]	rhoZ	3100
$\rho_{Zementstein}$	[kg/m ³]	rhoZS	2000
Zeitpunkt der Beaufschlagung	[d]	Tag	zu variieren
t_k	[h]	tk	11
w/z	[-]	wz	0.5

¹ Eingabe in COMSOL: Komma als Punkt; Einheiten vernachlässigen

Tabelle D.2: Betonrezeptur der Versuchsreihe

CEMI AB16-Splitt 175/350(0,5)				
Ausgangsstoffe	%	Masse [kg/m ³]	Rohdichte [kg/dm ³]	Stoffraum [dm ³ /m ³]
Zement CEM I 42,5 N	-	350	3,1	113
Wasser	-	175	1	175
Wasser aus Brechsand 0/2	0,00%	0	1	0
Wasser aus Splitt 2/8	0,00%	0	1	0
Wasser aus Splitt 8/16	0,00%	0	1	0
LP	-		-	15
GK				697
0/2	29	566	2,79	203
2/8	39	759	2,78	273
8/16	32	608	2,75	221
Summe:		2458	Summe:	1000

E. Anhang E: FEM-Berechnungen zur Darstellung der Modellentwicklung

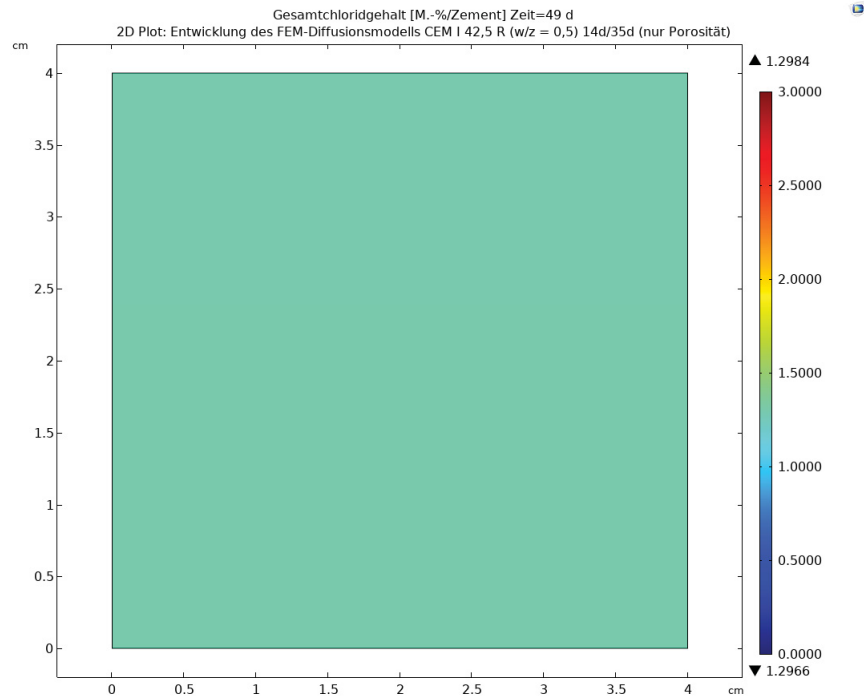


Abbildung E.1: Beispielberechnung des FEM-Modells, 2D-Visualisierung des Chloridgehaltes [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, Porosität

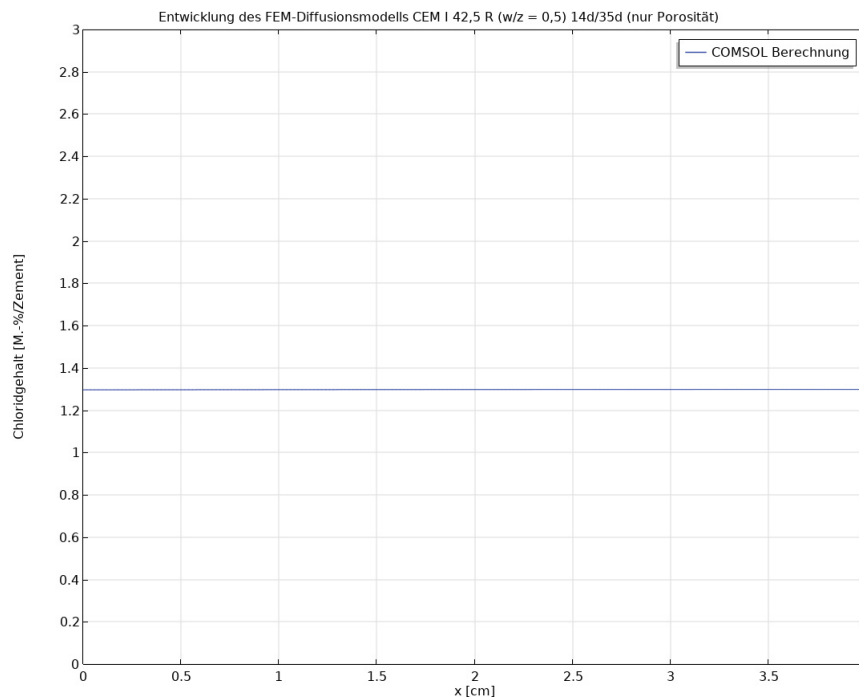


Abbildung E.2: Beispielberechnung des FEM-Modells, 1D-Visualisierung (Diffusionskurve) des Chloridgehaltes [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, Porosität

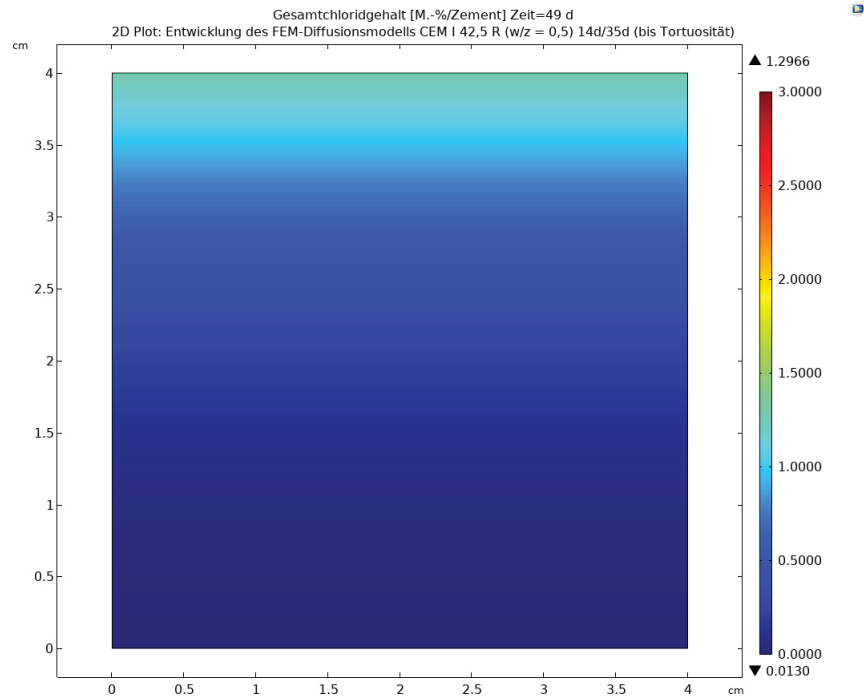


Abbildung E.3: Beispielberechnung des FEM-Modells, 2D-Visualisierung des Chloridgehaltes [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, bis Tortuosität

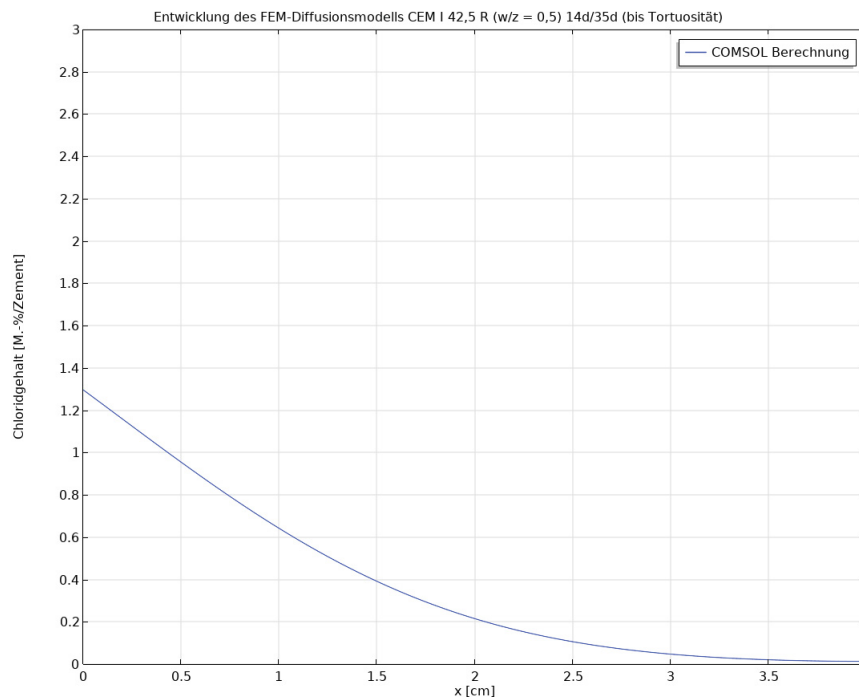


Abbildung E.4: Beispielberechnung des FEM-Modells, 1D-Visualisierung (Diffusionskurve) des Chloridgehaltes [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, bis Tortuosität

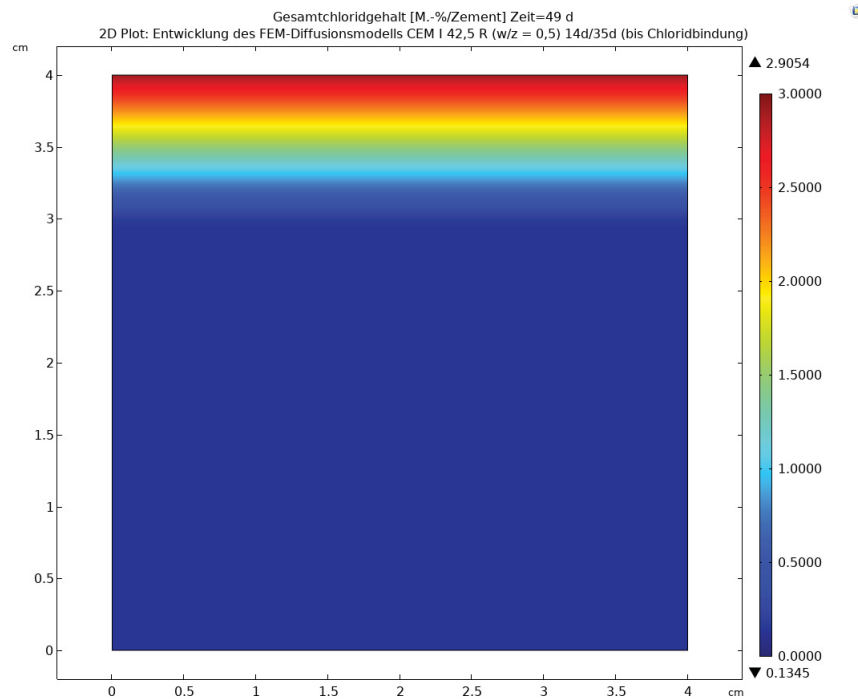


Abbildung E.5: Beispielberechnung des FEM-Modells, 2D-Visualisierung des Chloridgehaltes [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, bis Chloridbindung

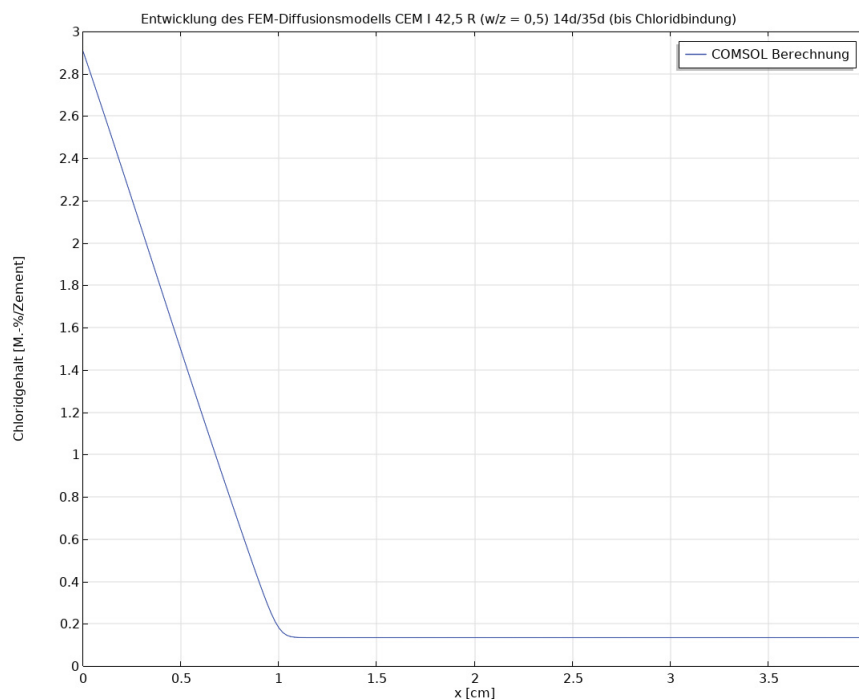


Abbildung E.6: Beispielberechnung des FEM-Modells, 1D-Visualisierung (Diffusionskurve) des Chloridgehaltes [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, bis Chloridbindung

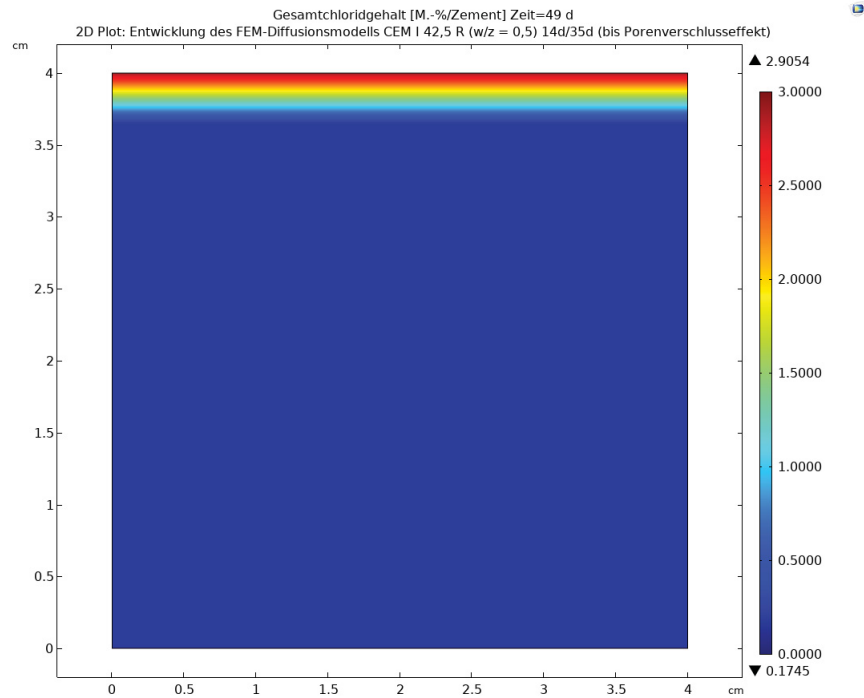


Abbildung E.7: Beispielberechnung des FEM-Modells, 2D-Visualisierung des Chloridgehaltes [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, bis Porenverschlusseffekt

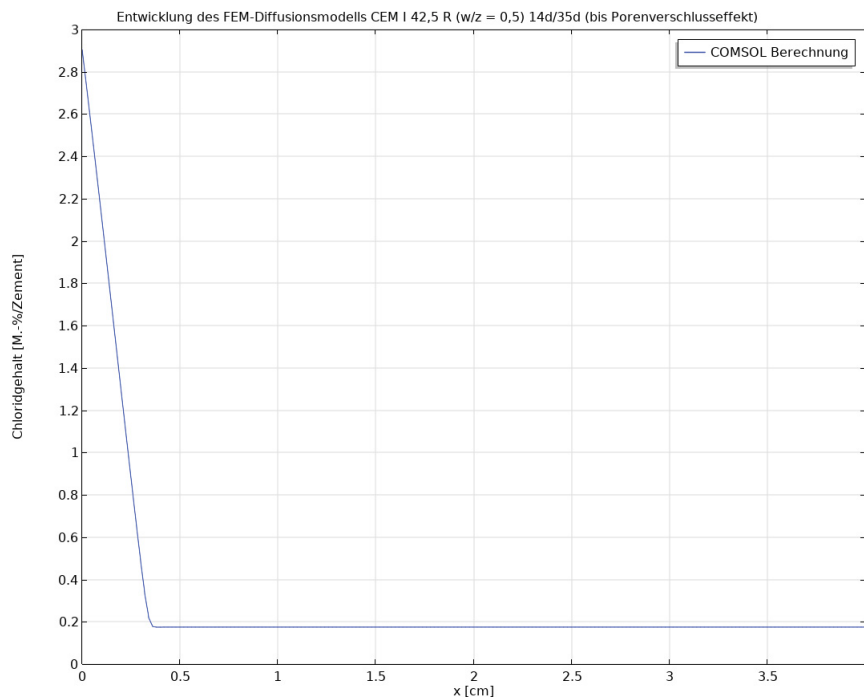


Abbildung E.8: Beispielberechnung des FEM-Modells, 1D-Visualisierung (Diffusionskurve) des Chloridgehaltes [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, bis Porenverschlusseffekt

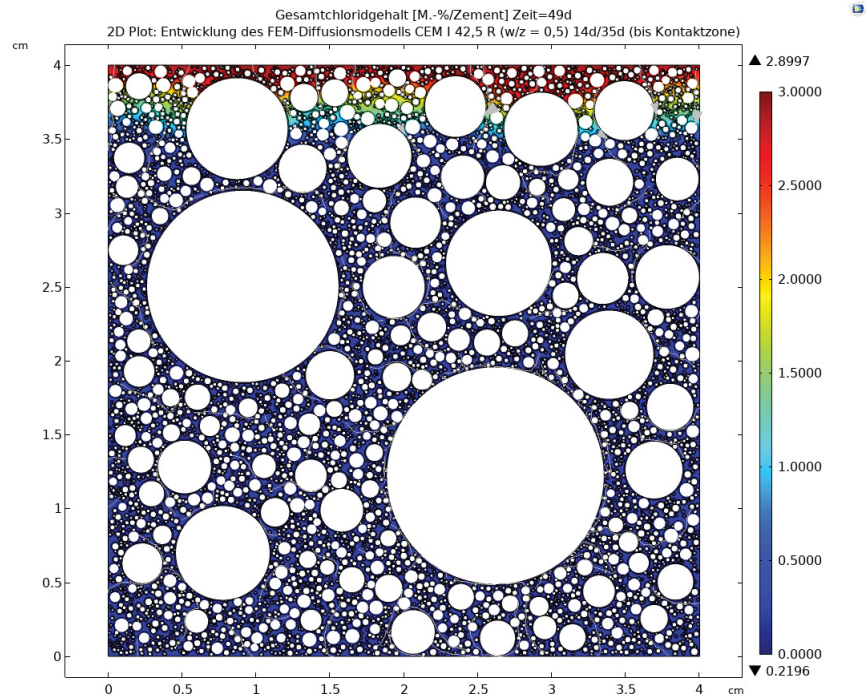


Abbildung E.9: Beispielberechnung des FEM-Modells, 2D-Visualisierung des Chloridgehaltes [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, bis Kontaktzone (endgültiges Modell)

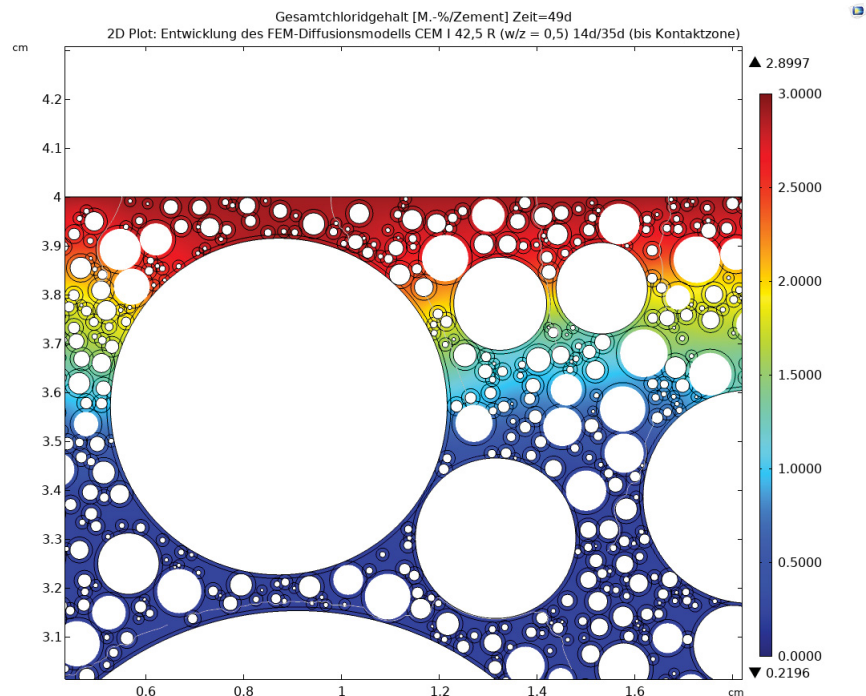


Abbildung E.10: Beispielberechnung des FEM-Modells, 2D-Visualisierung des Chloridgehaltes [M.-%/z], Detailausschnitt der Abbildung E.9

F. Anhang F: Gegenüberstellung der Diffusionskurven

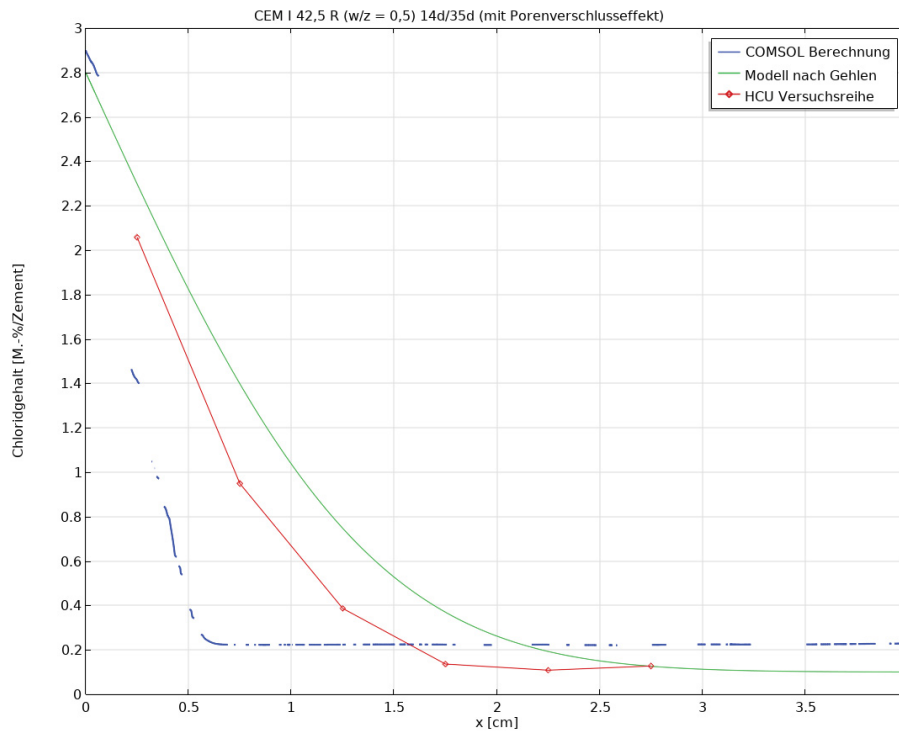


Abbildung F.1: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

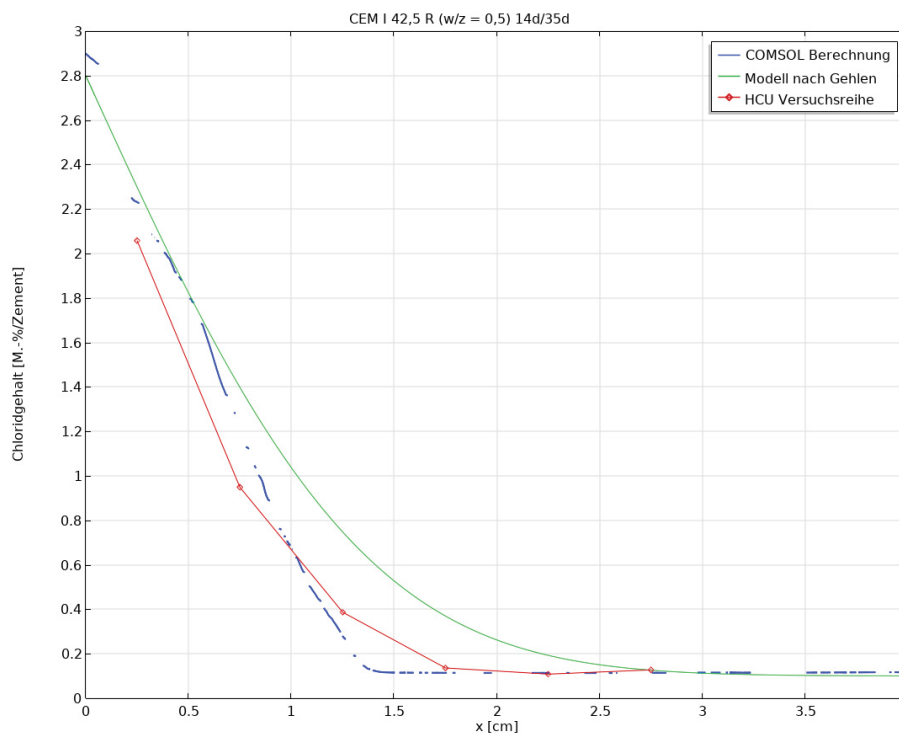


Abbildung F.2: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

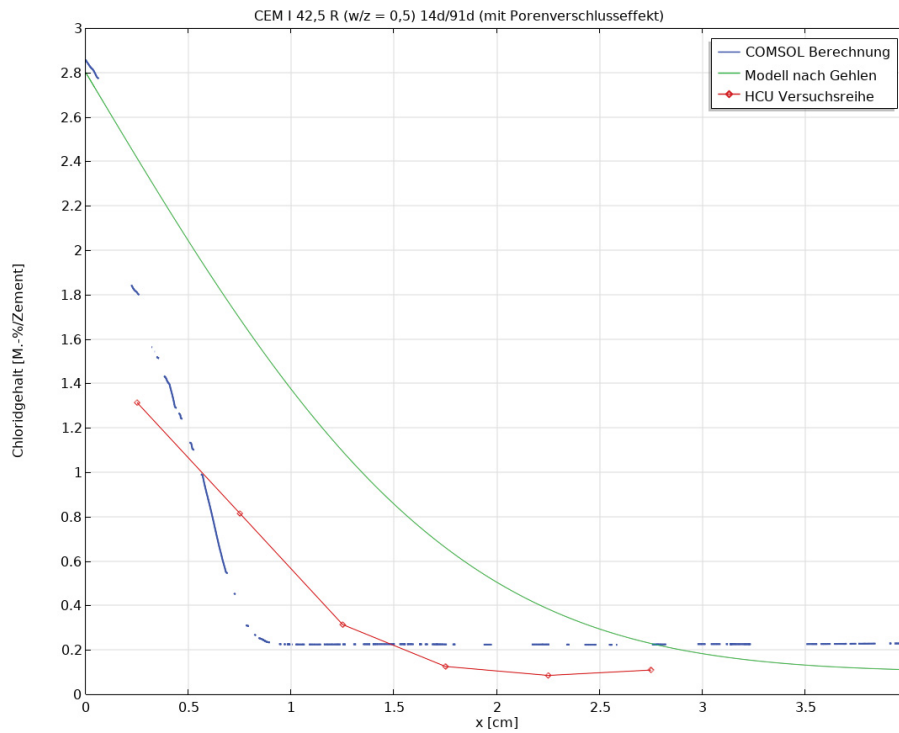


Abbildung F.3: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 91 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

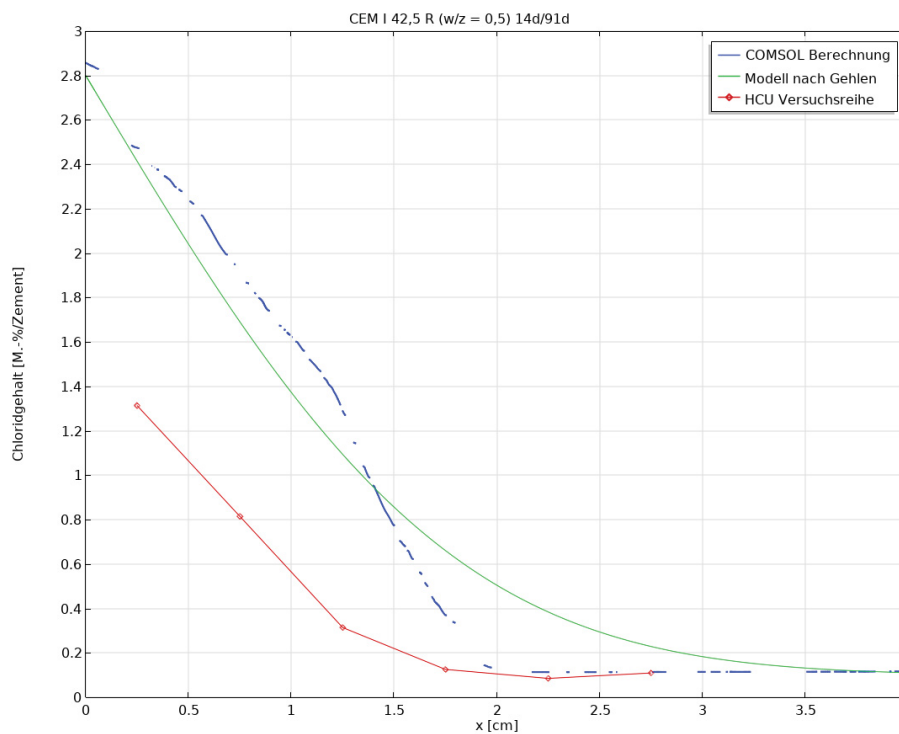


Abbildung F.4: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 91 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

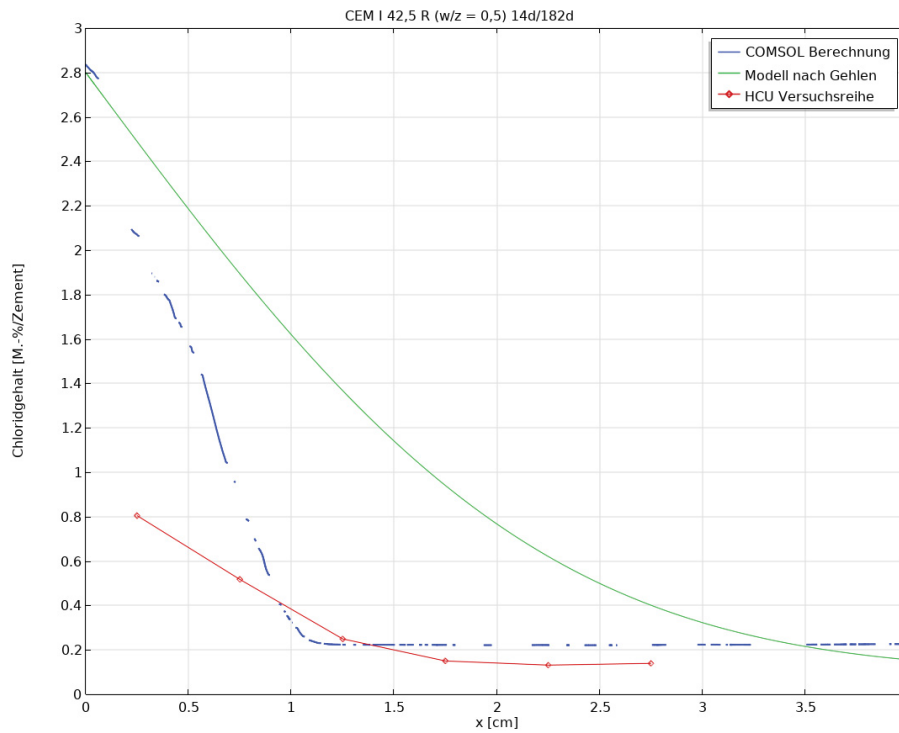


Abbildung F.5: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 182 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

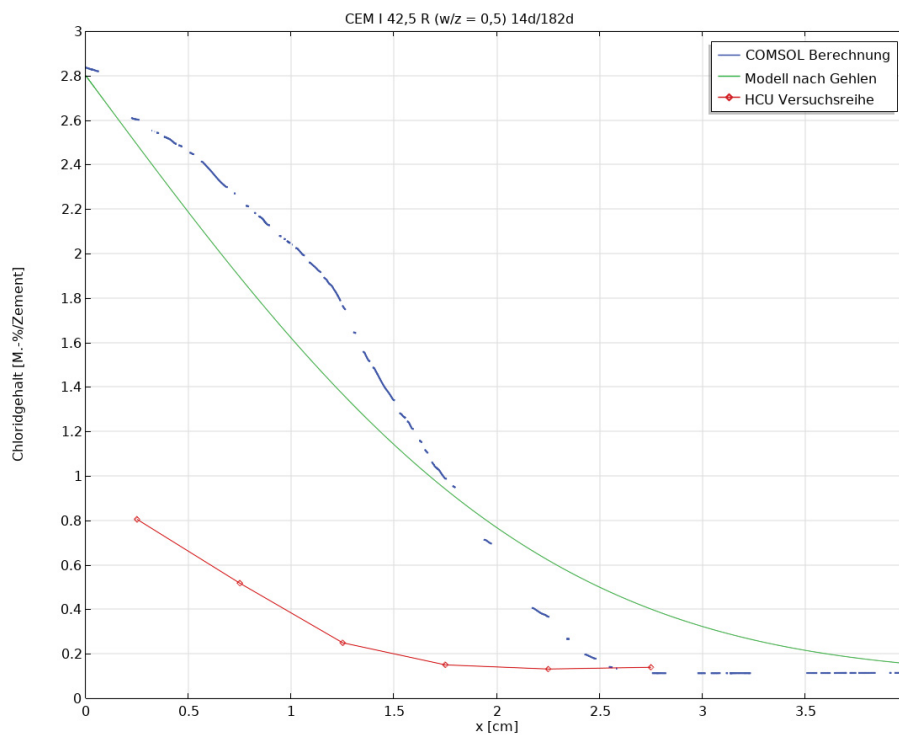


Abbildung F.6: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 14 Tagen für 182 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

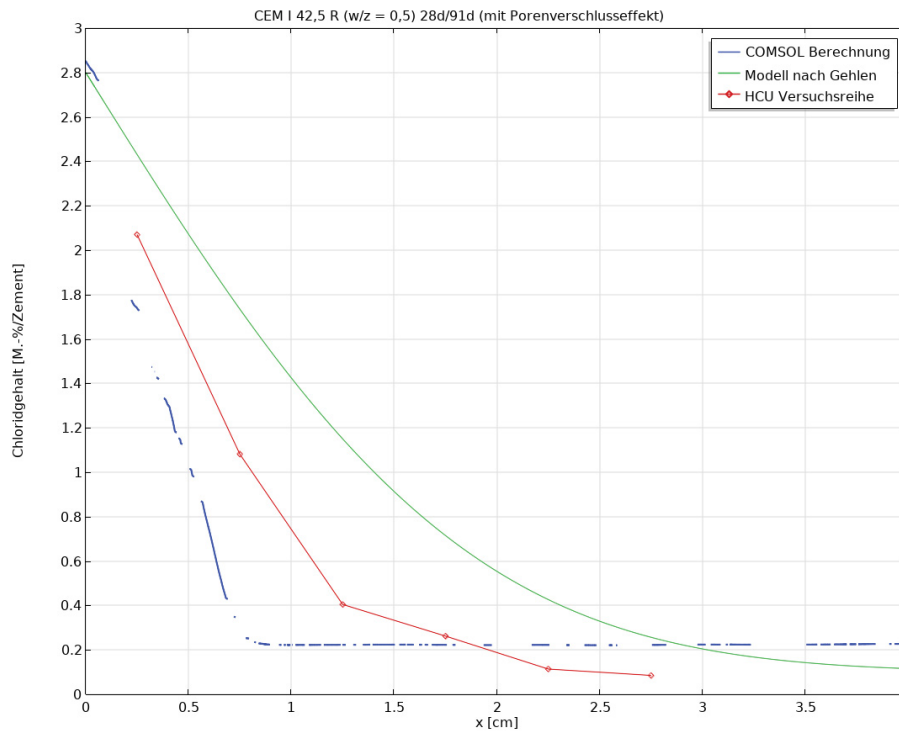


Abbildung F.7: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 28 Tagen für 91 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

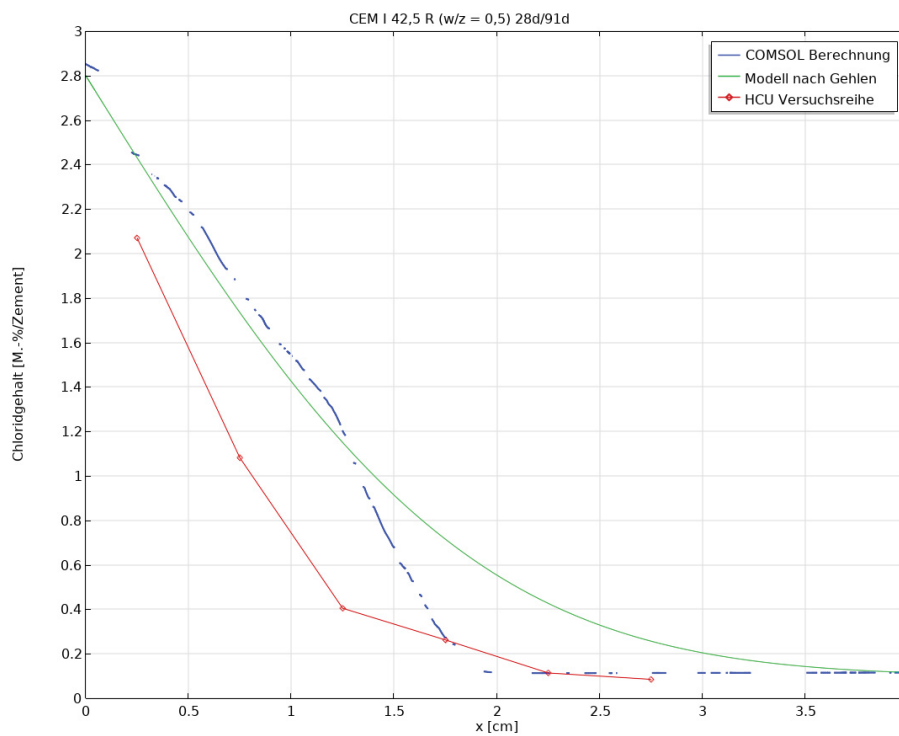


Abbildung F.8: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 28 Tagen für 91 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

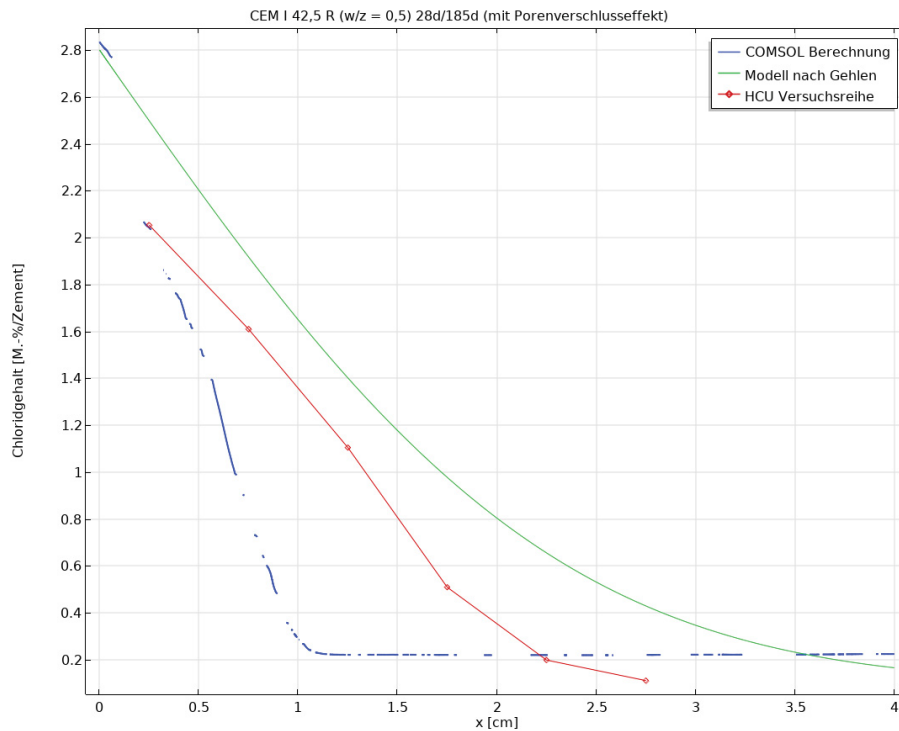


Abbildung F.9: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 28 Tagen für 185 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

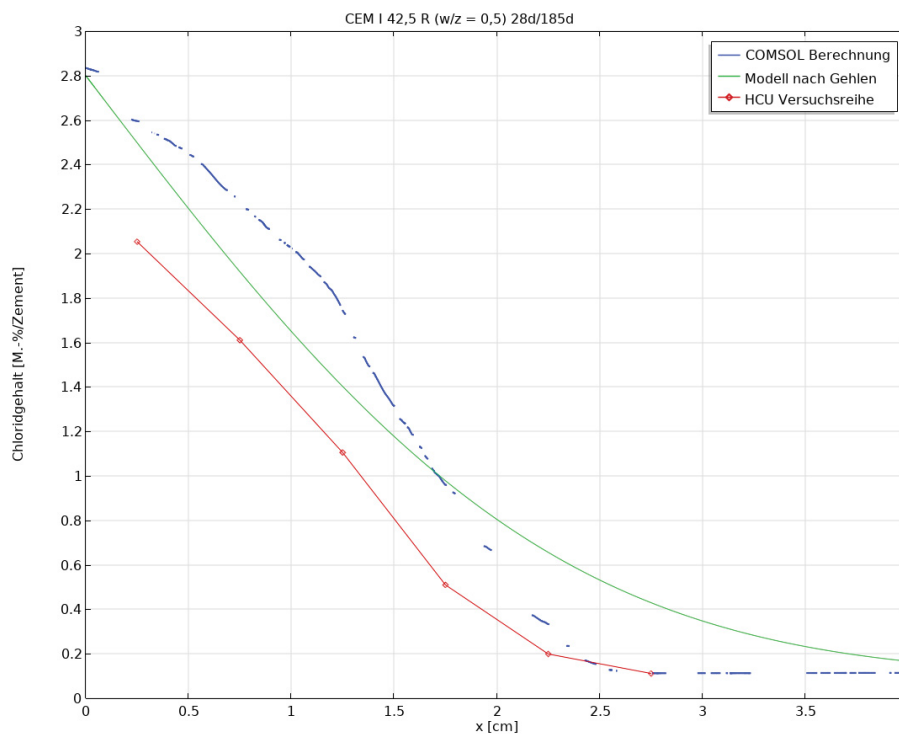


Abbildung F.10: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 28 Tagen für 185 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

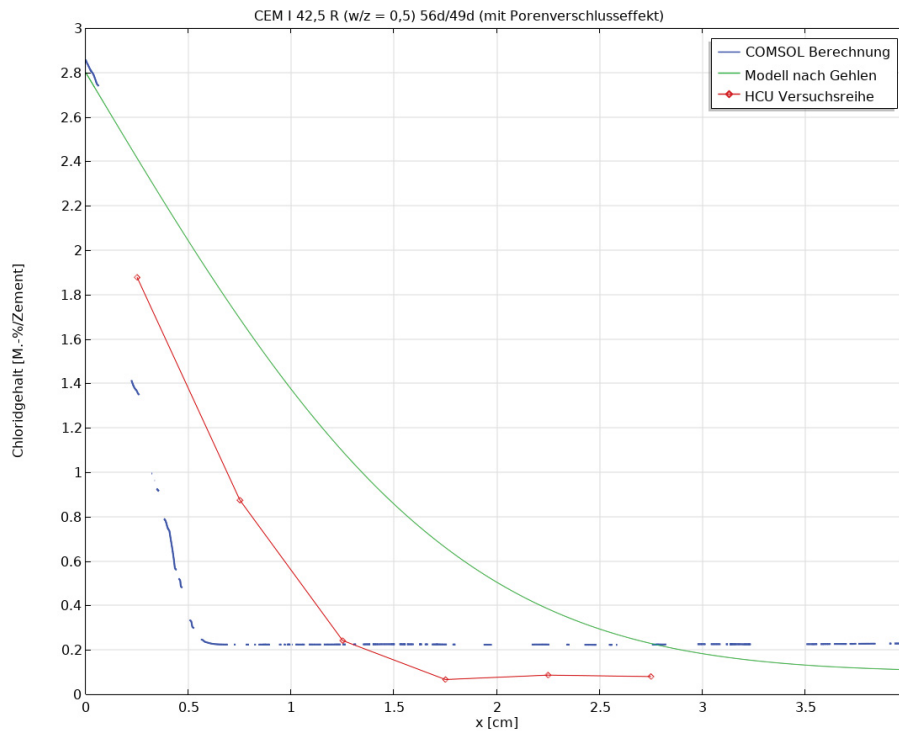


Abbildung F.11: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 56 Tagen für 49 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

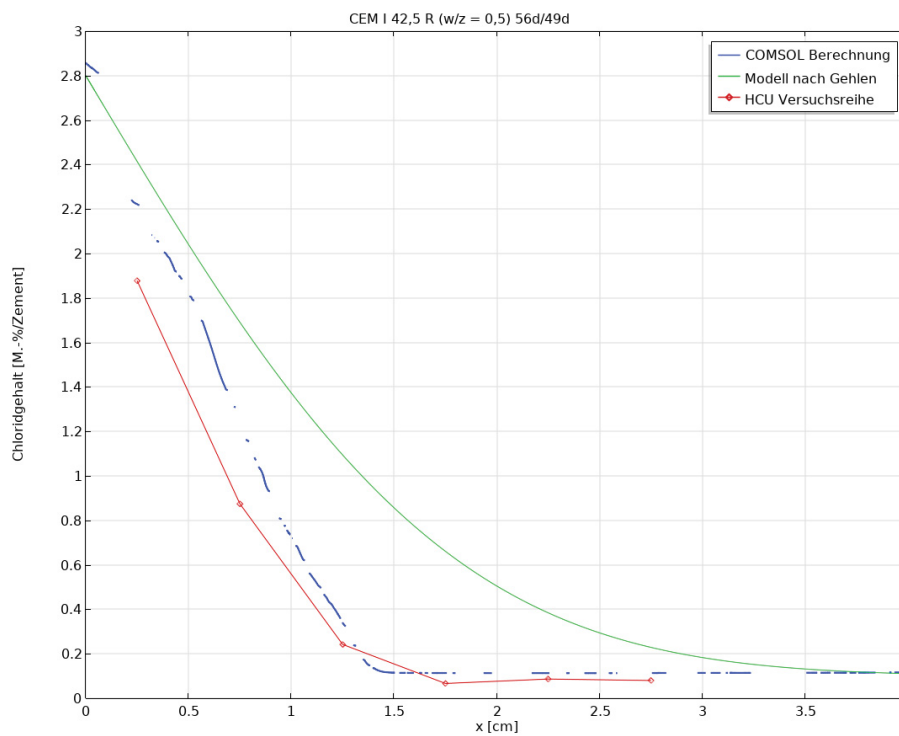


Abbildung F.12: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 56 Tagen für 49 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

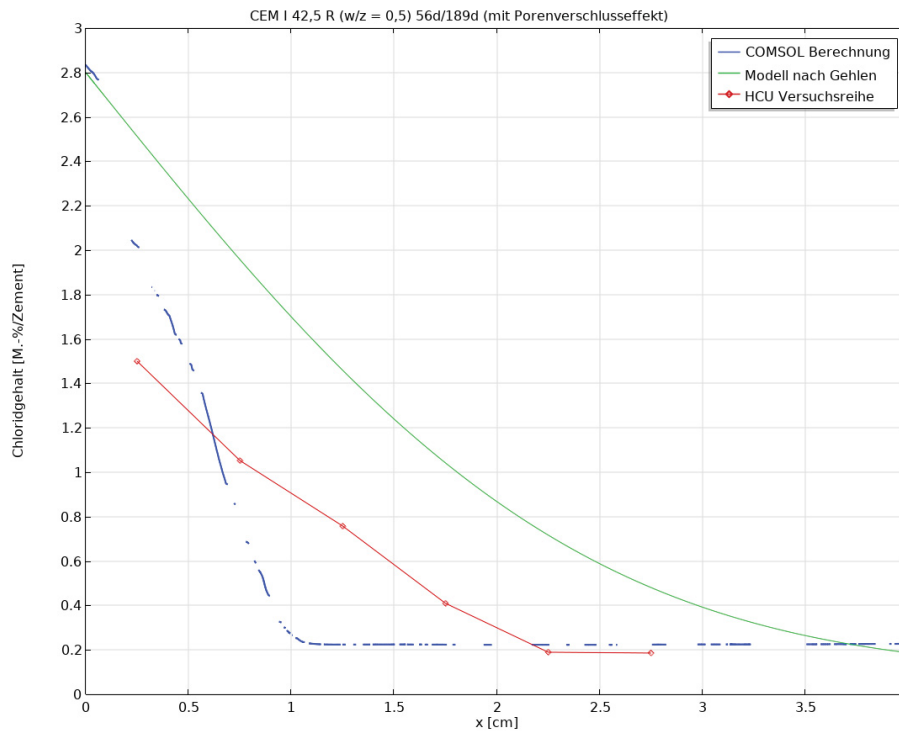


Abbildung F.13: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 56 Tagen für 189 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

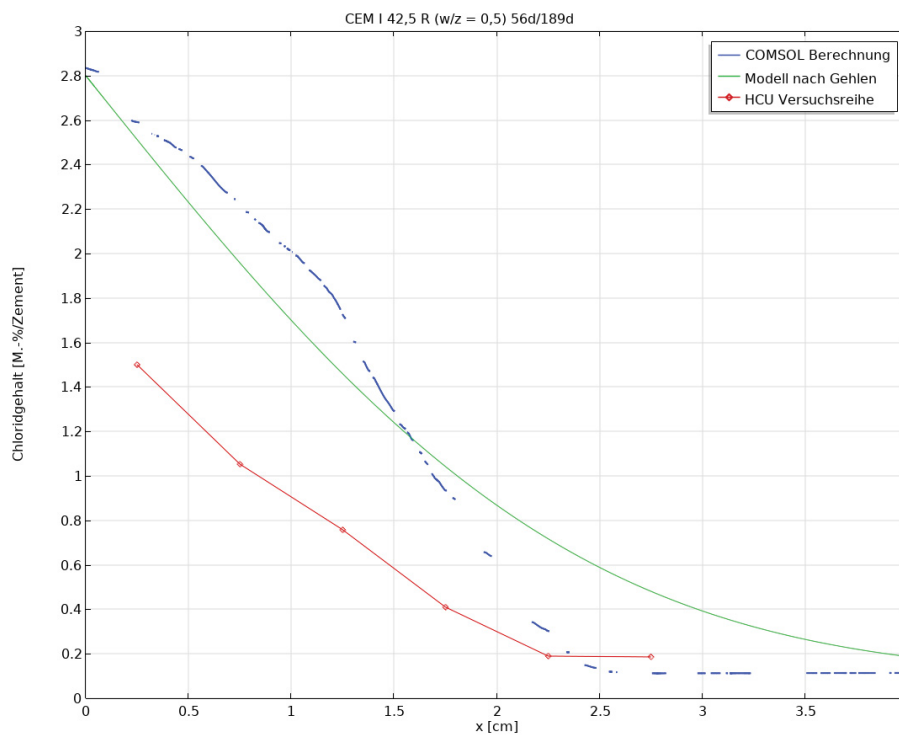


Abbildung F.14: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 56 Tagen für 189 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

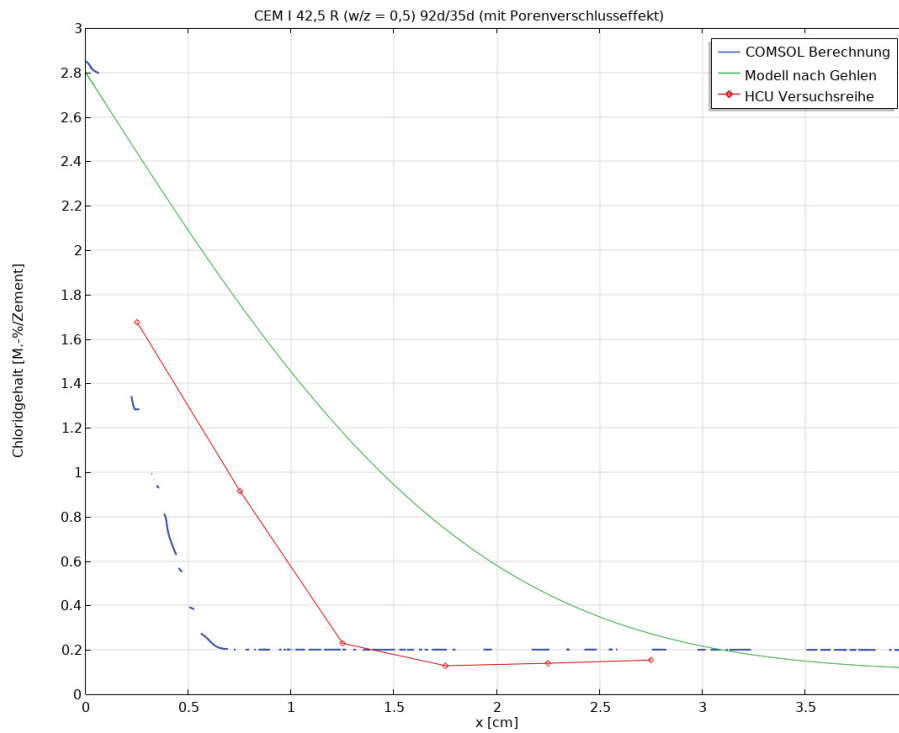


Abbildung F.15: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 92 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

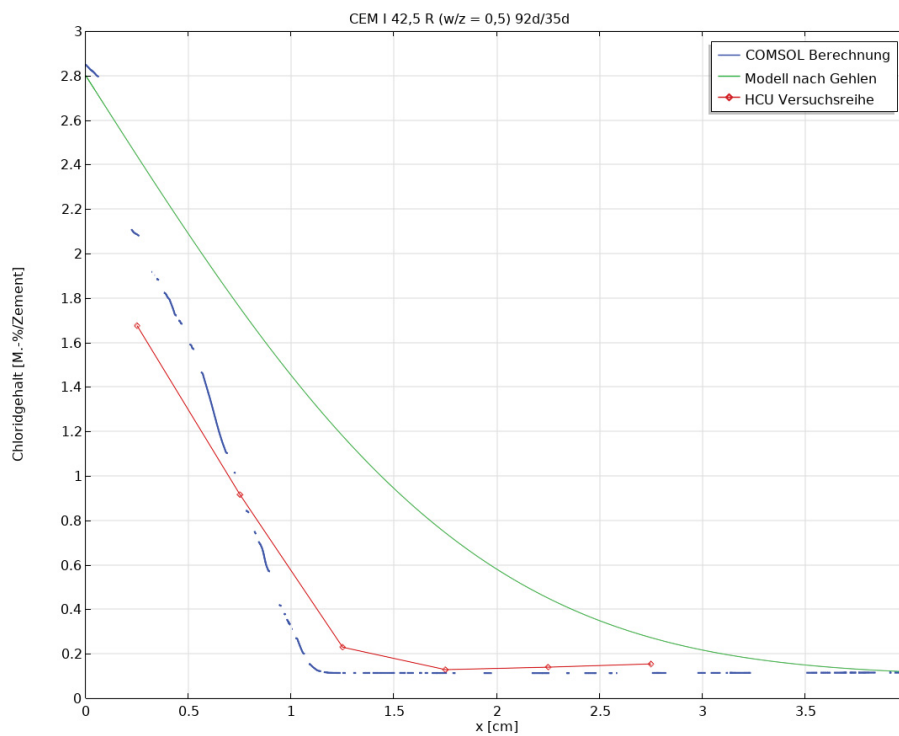


Abbildung F.16: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 92 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

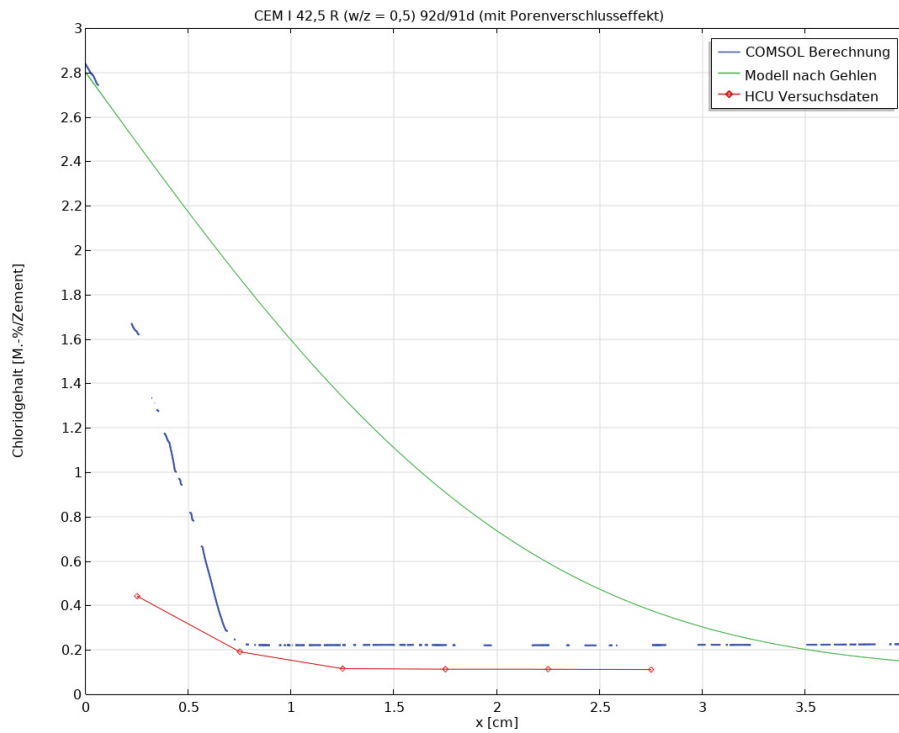


Abbildung F.17: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 92 Tagen für 91 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

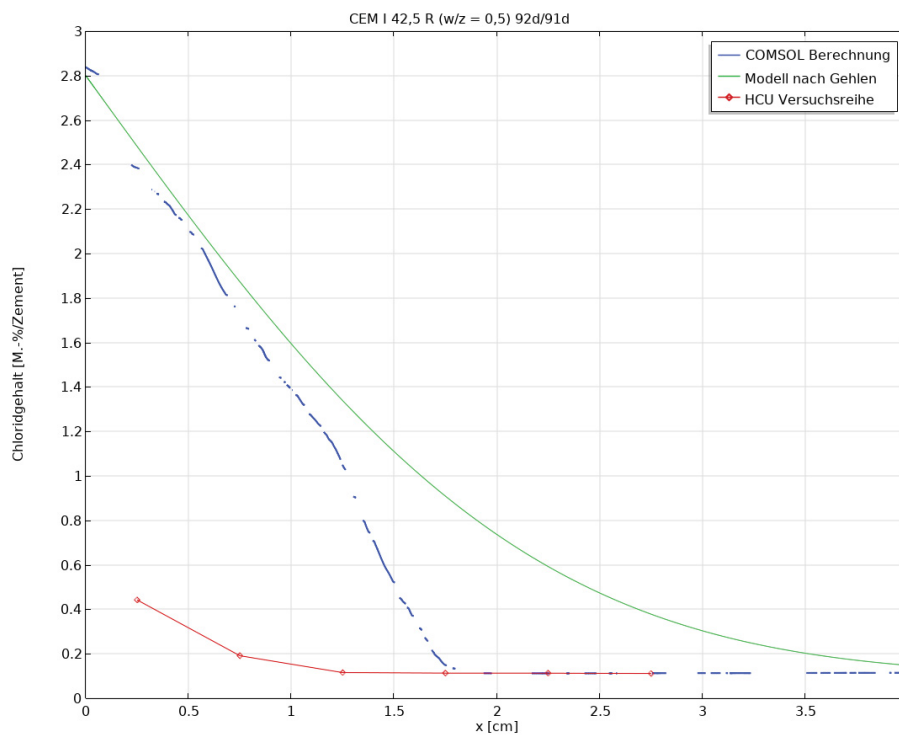


Abbildung F.18: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 92 Tagen für 91 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

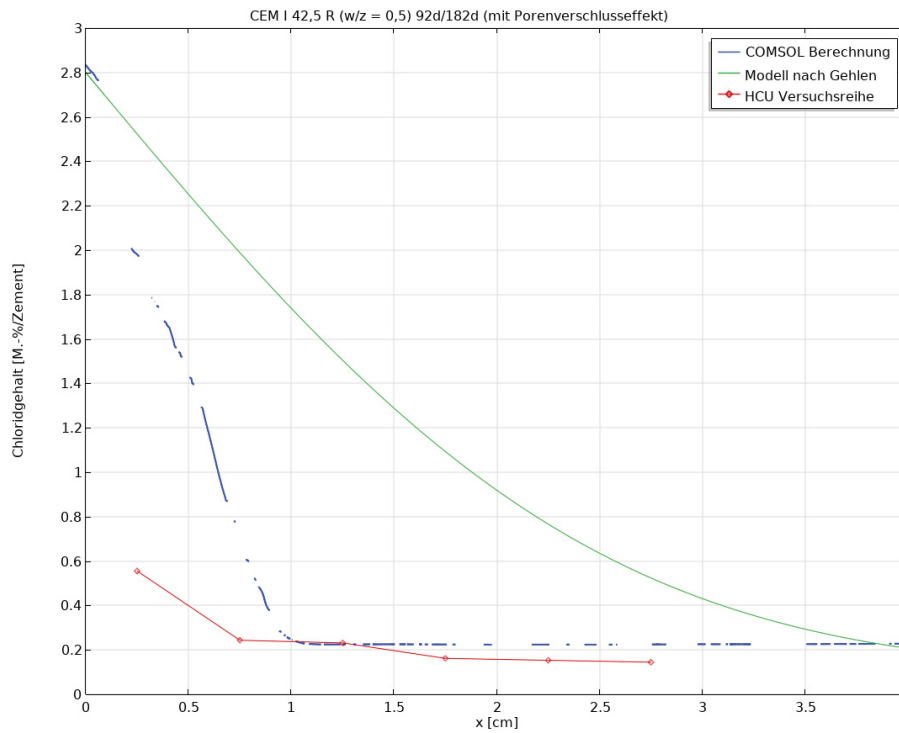


Abbildung F.19: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 92 Tagen für 182 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

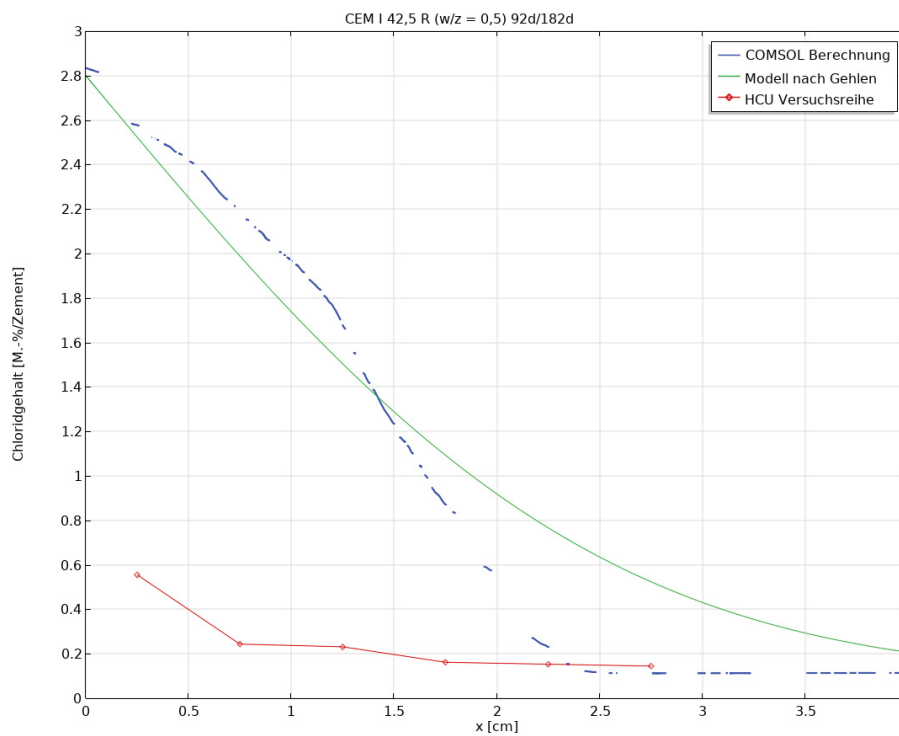


Abbildung F.20: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 92 Tagen für 182 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

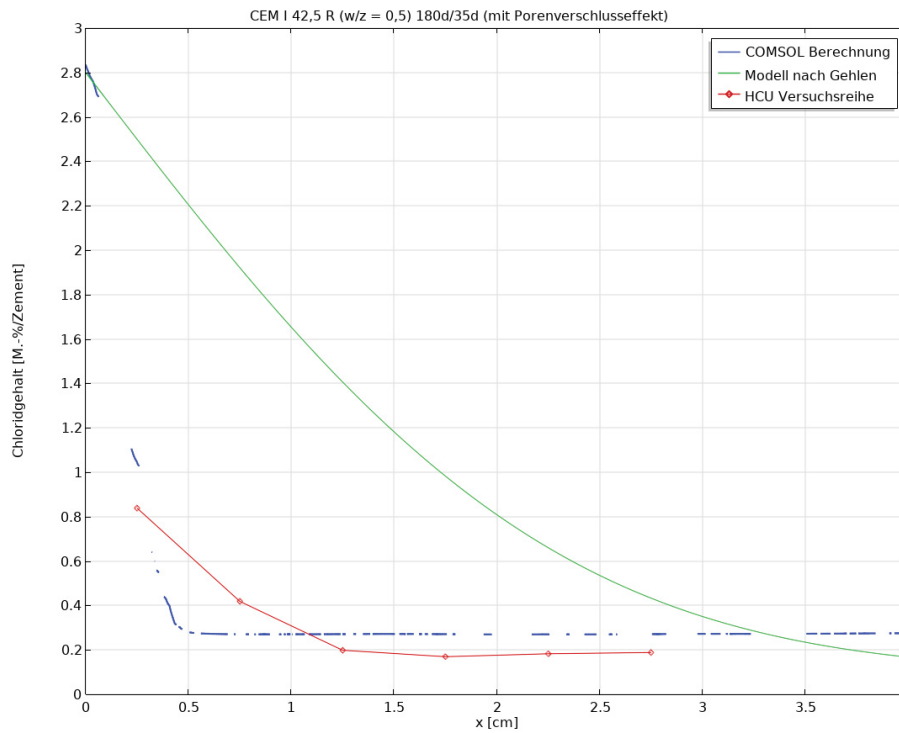


Abbildung F.21: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 180 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

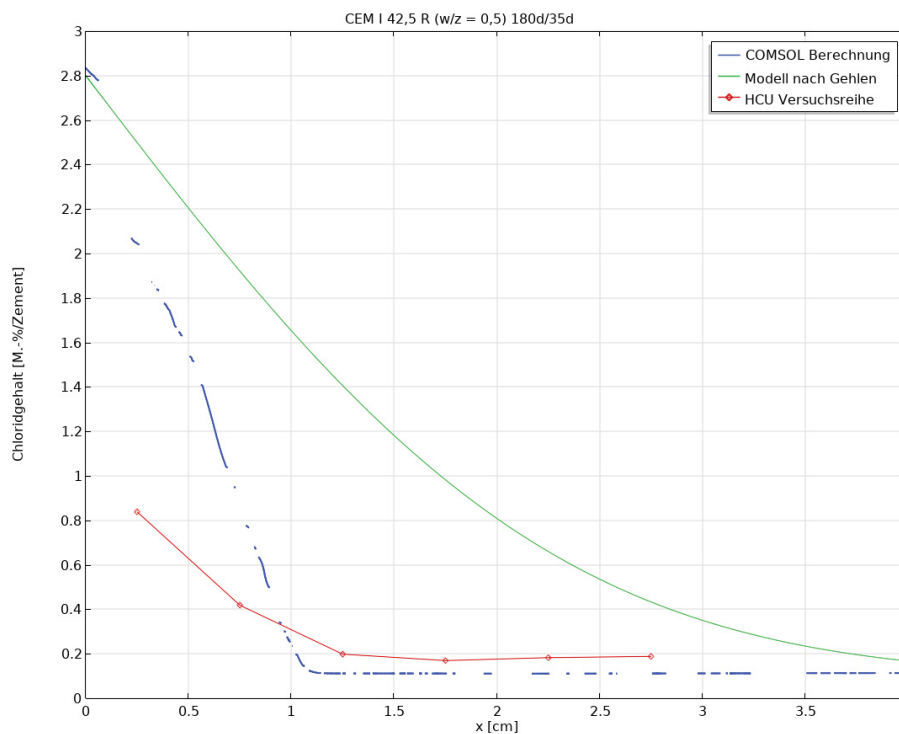


Abbildung F.22: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 180 Tagen für 35 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

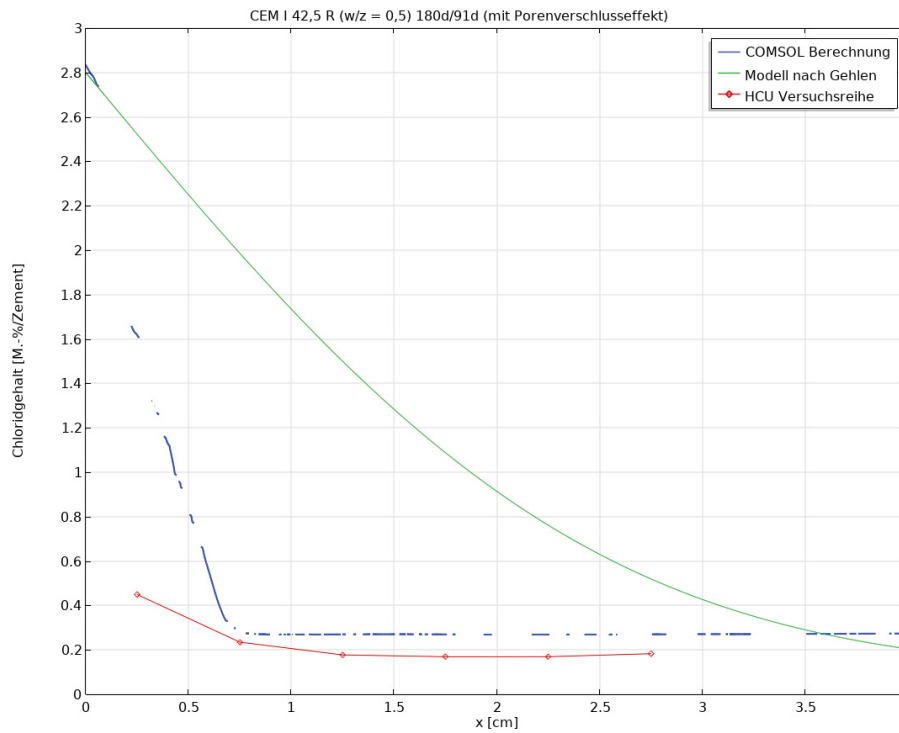


Abbildung F.23: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 180 Tagen für 91 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, mit Porenverschlusseffekt

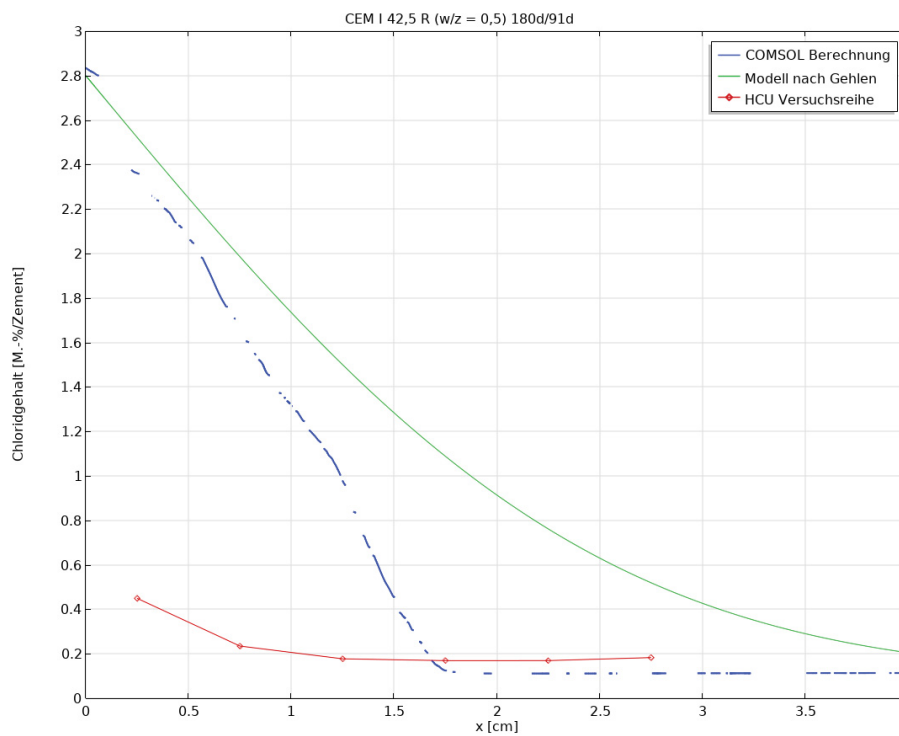


Abbildung F.24: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskurven [M.-%/z], Beaufschlagung nach 180 Tagen für 91 Tage, 3%-ige NaCl-Lösung, CEM I 42,5 R, w/z=0,5, ohne Porenverschlusseffekt

G. Anhang G: Nutzungs- und Verwertungsrecht

Erklärung des Nutzungs- und Verwertungsrechts der Abschlussarbeit

Abschlussarbeiten eines universitären Studiums unterliegen als selbstständige geistige Schöpfung der Verfasserin oder des Verfassers dem Urheberschutz. Urheber und damit Inhaber des Urheberrechts ist damit ausschließlich die Verfasserin bzw. der Verfasser der Arbeit. Die betreuende Professur ist daher nicht Urheber im urheberrechtlichen Sinn.

Auch das Nutzungs- und Verwertungsrecht an dem urheberrechtlich geschützten Werk obliegt der Verfasserin bzw. dem Verfasser der Arbeit. Damit entscheidet die Inhaberin bzw. der Inhaber des Urheberrechts über Nutzung und Verwertung, also über Vielfältigung, Verbreitung und Bearbeitung der Abschlussarbeit. Das Recht der Nutzung und Verwertung eines urheberrechtlich geschützten Werkes ist durch den Urheber übertragbar.

Hiermit übertrage ich der betreuenden Professur Baustofftechnologie (Prof. Dr.-Ing. Gesa Kapteina und ihren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern) an der HafenCity Universität Hamburg das Nutzungs- und Verwertungsrecht an meiner Abschlussarbeit für Lehre, Forschung, Gutachten und Publikationen.

Vorname: Nils-Christian

Nachname: Rokoß

Matrikelnummer: 6050372

Titel der Bachelorarbeit: Entwicklung eines FEM-Diffusionsmodells für Chloridtransport in Beton

Datum, Ort

Unterschrift

H. Anhang H: Selbstständigkeitserklärung

Erklärung

Ich versichere, dass ich die vorliegende Bachelorthesis mit dem Titel „**Entwicklung eines FEM-Diffusionsmodells für Chloridtransport in Beton**“ selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe.

Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Vorname: Nils-Christian

Nachname: Rokoß

Matrikelnummer: 6050372

Datum, Ort

Unterschrift