

Hydratations- und Strukturmodell für Zementstein - HydraFE

Model for the hydration and formation of microstructure of cement paste - HydraFE

Nothnagel, R., Budelmann, H.

Abstract

The model introduced here is delivering a description of the capillary pore space during hydration and the state at the beginning of the period of use. This three-dimensional characterization of the porous structure of Portland cement paste and its development is based upon the constitutive volumetric approach of Powers & Brownward. The process is described by means of finite elements. It contains the mobilisation of non-hydrated cement particles and the subsequent formation of hydration products within the porous space. In opposite to existing models the model being developed actually is giving more detailed information on the local porosity distribution and the capillary microstructure.

1. Einleitung

Wesentliche Transport- und Schädigungsvorgänge im Beton laufen im kapillarporösen Raum des Betons ab und prägen so die spätere Dauerhaftigkeit zur Nutzungszeit. Mit dem Hydratations- und Strukturmodell kann die Bildung des Kapillarporenraumes im Zementstein während der Erhärtung in einer numerischen Simulation dargestellt werden. Ausgehend vom Zementleim wird der zeitliche Fortschritt der Hydratation und die damit gekoppelte Strukturbildung anhand eines dreidimensionalen repräsentativen Volumenelementes beschrieben. Wichtige Einflussparameter, wie Partikelgrößenverteilung und räumliche Anordnung, mineralische Komposition des Zementes und Lagerungsbedingungen können dabei berücksichtigt werden. Das Ergebnis ist eine lokale Porositätsverteilung, welche mit Hilfe von Messungen - hier der Quecksilberdruckporosimetrie - in lokale Porenradienverteilungen transformiert werden kann. Das Modell soll einen Beitrag zu einem virtuellen Labor liefern, welches es ermöglicht, die Eigenschaften und Leistungsfähigkeit von Betonen rechnerbasiert vorherzusagen.

2. Vorgehensweise und Modell

Im ersten Schritt wird ein repräsentatives Volumenelement (RVE) generiert. Berücksichtigung finden dabei der Wasser-Zement-Wert und die Partikelgrößenverteilung

des Zementes. Üblicherweise hat das RVE Kantenlängen von 100 µm. Die Partikel sind nach diesem Schritt zunächst zufällig im Volumen angeordnet (Bild 1 links).

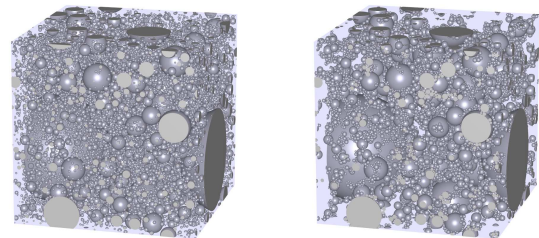


Bild 1: Zementleimdarstellung im RVE

Danach werden die Partikel in einen teilweise agglomerierten Zustand überführt. Dieser Zustand spiegelt den tatsächlichen Zustand im Zementleim ohne Zusatzmittel, wie Superplastiziser, besser wieder und führt zu einer Bildung größerer zusammenhängender Kapillarporenräume (Bild 1 rechts). Das Volumenelement wird in ein räumliches Gitter übertragen. Die Auflösung des Gitters liegt üblicherweise bei einer Kantenlänge von 1 µm. So entstehen 1.000.000 Elemente. Ein Element kann sowohl Zement als auch Porenraum enthalten. Es wird keine binäre Unterscheidung zwischen Feststoff und Wasser gemacht. Die eigentliche Hydratation und Strukturbildung wird mit Hilfe eines FE-Modells umgesetzt.

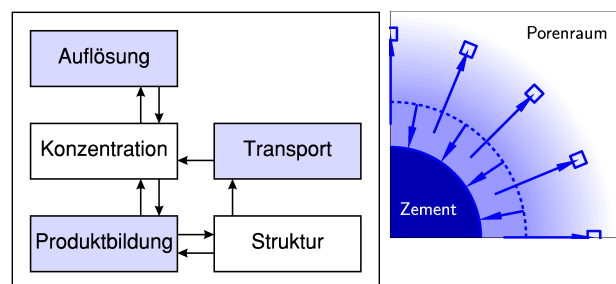


Bild 2: Modellprozesse und Zustandsvariablen im Modell

Im FE-Modell (Bild 2) werden drei wesentliche Modellprozesse gekoppelt betrachtet:

1. Die Auflösung von unhydratisiertem Zement.
2. Der Transport von gelöstem Zement in den Porenraum.

3. Die Bildung von Produkten im freien Porenraum und dadurch die Entstehung der porösen Struktur.

Die Volumenbilanz der Phasenumwandlung erfolgt auf der Basis des Ansatzes von Powers&Brownayard. Die wesentlichen Parameter des Modells bestimmen die Effektivität der Teilprozesse. Durch einen Vergleich mit Messungen der zeitlichen Entwicklung des Hydratationsgrades können sie bestimmt werden. Als Ergebnis liegt eine dreidimensionale lokale Porositätsverteilung vor (Bild 3, Bild 4).

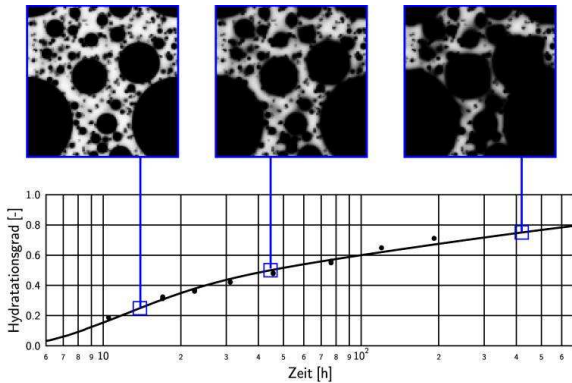
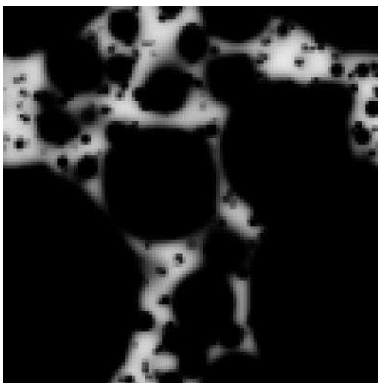


Bild 3: Zeitliche Entwicklung des Hydratationsgrades und der lokalen Porositätsverteilung

Es werden die Phasen Produkt, Porenraum und unhydratisierter Zement unterschieden. Es wird jedoch keine binäre Einteilung der Elemente gemacht. Die Einzellemente können gleichzeitig diese drei Phasen enthalten. Im Gegensatz zu binären Modellen enthält das Berechnungsergebnis Informationen, welche über die gewählte Rechenauflösung hinaus Strukturdaten liefern.



hell: kapillarporöser Porenraum;

dunkel: Hydratationsprodukte und unhydratisierter Zement

Bild 4: Darstellung des Porenraumes als lokale Porositätsverteilung

Die vorliegende lokale Porositätsverteilung kann in Porenradienverteilungen transformiert werden. Hierzu werden die Informationen genutzt, die durch die Einzelporositäten vorliegen und somit auch Porenradien unterhalb der Rechenauflösung bestimmt. Jeder Porosität der

Elemente wird eine spezifische Porenradienverteilung zugeordnet. Die Transformation kann mit Hilfe von MIP-Messungen kalibriert werden. Dabei können Nebeneffekte (Flaschenhalseffekt) kompensiert werden. Dennoch werden die Ergebnisse von der Messmethode beeinflusst. Diese Abweichungen werden z.T. mit abgebildet.

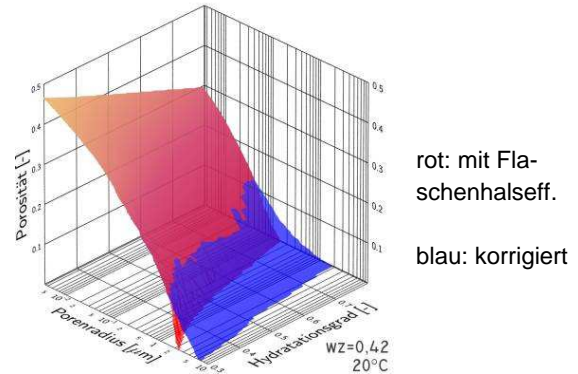


Bild 5: Darstellung des Porenraumes als lokale Porositätsverteilung

3. Zusammenfassung, Anwendung

Das vorgestellte Modell zeigt einen Weg zur realistischeren Darstellung des Porenraumes mit Hilfe der numerischen Modellierung. Durch die gekoppelte Betrachtung von Modellprozessen und die Umsetzung mit Hilfe der FEM werden lokale dreidimensionale Porositätsverteilungen bestimmt, welche den kapillaren Porenraum beschreiben. Die dadurch gelieferten Strukturdaten gehen über die bis dahin existierenden Beschreibungsmöglichkeiten hinaus, da keine binäre Unterscheidung zwischen Feststoff und Porenraum getroffen wird. In einer Erweiterung wurde das Modell für Berechnungen unter versiegelten Bedingungen genutzt. Dabei kommt es durch die Wasserbindung während der Hydratation zu einer Selbstaustrocknung und teilweisen Leerung der Kapillarporen, welche mit den groben Poren beginnt. Die Hydratation wird verlangsamt und kommt zum Stillstand. Weitergehend wurde die Berechnung der Kontaktzone implementiert.

Für ein wirklich leistungsstarkes virtuelles Labor auf dem Gebiet des Betons müssen Verfahren zur Erkundung und Beschreibung der Struktur neu entwickelt werden, welchen den Werkstoff über Größenordnungen allgemeingültig erfassen. Auf dieser Basis kann dann mit nachgeschalteten Werkzeugen die Performance bestimmt rechnerisch bestimmt und optimiert werden.

4. Literaturverzeichnis

- /1/ Nothnagel, R.: Hydratations- und Strukturmodell für Zementstein. Braunschweig, TU, Diss., 2007.