

AiF-Forschungsvorhaben-Nr.: 14767 N
Bewilligungszeitraum: 01.05.2006 – 31.10.2008
Forschungsthema: **Computergestützte Simulation der Zementhydratation und der Gefügeentwicklung zur Berechnung der Zementnormdruckfestigkeit im Alter von 28 Tagen anhand von Klinkerdaten**

Anhand von insgesamt rund 50 in Deutschland hergestellten praxisüblichen Zementen unterschiedlicher Zusammensetzung wurde untersucht, ob mit Hilfe der Software „Virtual Cement and Concrete Testing Laboratory (VCCTL)“ die Berechnung der Zementnormdruckfestigkeit im Alter von 28 Tagen anhand von Zementdaten möglich ist.

Als Eingabedaten für die Simulationsberechnung dienten chemisch-mineralogische bzw. physikalische Parameter von Zement und Gesteinskörnung sowie Kenndaten, die über die digitale Bildanalyse (z. B. Klinkerphasenverteilung) ermittelt wurden. Den Simulationsberechnungen wurden die Ergebnisse aus den experimentellen Untersuchungen (z. B. Hydratationswärme, Zusammensetzung der Porenlösung, Porosität, Druckfestigkeit) gegenübergestellt.

Während die Simulationsberechnungen zum Einfluss des C_3S -Gehaltes auf die Druckfestigkeit weitgehend den Erfahrungswerten entsprachen, wurde der Einfluss von Sulfat auf die Hydratationswärmeentwicklung nicht richtig wiedergegeben.

Die Simulation der Zusammensetzung der Porenlösung ergab bei einigen Zementen deutlich überhöhte Sulfat- und Calcium-Ionenkonzentrationen in der Porenlösung. Auch nach dem simulierten vollständigem Verbrauch des Sulfatträgers blieb die simulierte Sulfat-Ionenkonzentration in der Porenlösung auf nahezu unverändert hohem Niveau. Hier muss der Programmcode hinsichtlich des Vorhandenseins bzw. hinsichtlich der Reihenfolge des Verbrauchs der Erstarrungsreglerarten geprüft werden. Der pH-Wert von Porenlösung konnte nicht zielsicher simuliert werden.

Die mit Quecksilberintrusion ermittelten Porositäten für Zementstein im Alter von 7 und 28 Tagen lagen um bis zu rd. 10 Vol.-% über dem jeweiligen Wert der Simulationsberechnung. Das ist u. a. darauf zurückzuführen, dass die CSH-Phasen im VCCTL-Programm ohne Porosität implementiert waren und somit im Allgemeinen nur eine „Kapillarporosität“ wiedergegeben wurde. In vielen Fällen entsprach das mit Quecksilberdruckporosimetrie ermittelte Porenvolumen $\geq 0,01 \mu\text{m}$ der simulierten Porosität. Die gemessenen Porositäten von Normmörtel lagen um bis zu rd. 31 Vol.-% unter dem Wert der entsprechenden Simulationsberechnung und erwartungsgemäß deutlich unterhalb der gemessenen Porosität des jeweiligen Zementsteins. Die mit VCCTL simulierte Porosität von Mörtel entsprach dagegen in etwa der simulierten Porosität des entsprechenden Zementsteins. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass die Porosität von Mörtel bislang nicht korrekt simuliert werden kann.

Der Zusammenhang zwischen Berechnungszyklen und dem tatsächlichen Hydratationsfortschritt wurde in VCCTL für jeden Zement über einen Zeitumrechnungsfaktor anhand von Vorlaufsimulationen durch den Abgleich mit gemessenen Hydratationswärmen bestimmt. Für den Abgleich wurden simulierte Hydratationswärmedaten aus der Vorlaufsimulation gemessenen Hydratationswärmen gegenübergestellt. Zur Simulation der Druckfestigkeit im Alter von 28 Tagen wurde für den Abgleich ein möglichst später Zeitpunkt gewählt, nämlich der Wert im Alter von 7 Tagen. Zwischen Festigkeitsklasse und Zeitumrechnungsfaktor wurde kein unmittelbarer Zusammen-

hang festgestellt. Der simulierte Verlauf der Hydratationswärmeentwicklung wich bei vielen Zementen von der gemessenen Hydratationswärme ab. Dies ist beispielhaft in **Bild 1** für zwei Portlandzemente CEM I 32,5 R unterschiedlicher Herkunft dargestellt.

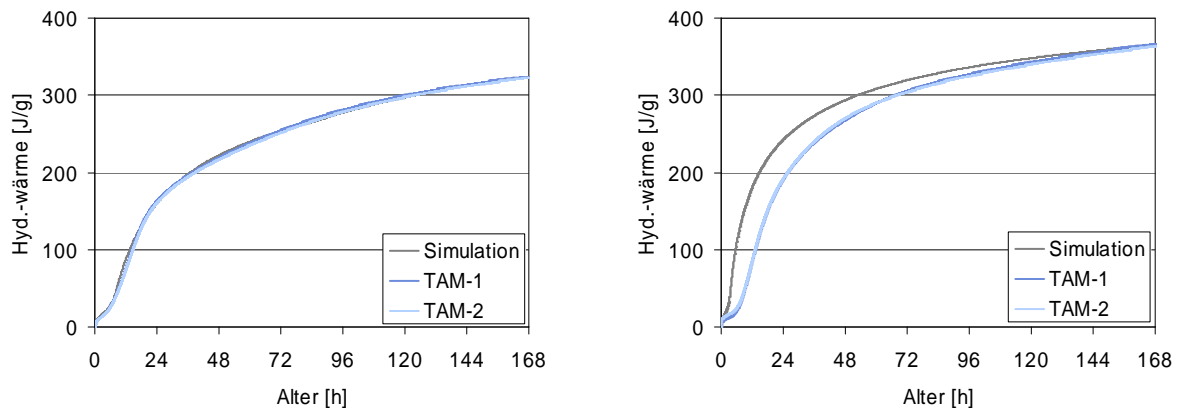


Bild 1 Der Abgleich der Hydratationswärme der Vorlaufsimulation auf die mittels Wärmeflusskalorimetrie (TAM) doppelt bestimmte Hydratationswärme ergab bei manchen Zementen (links) eine gute bzw. bei anderen (rechts) eine weniger gute Übereinstimmung der Hydratationswärmeentwicklung

Häufig lag die simulierte Hydratationswärme deutlich oberhalb der gemessenen Hydratationswärme. In diesen Fällen schritt die simulierte Hydratation schneller voran als die tatsächliche Hydratation. Daraus ergaben sich in der Simulationsberechnung niedrigere Porositäten.

Die Simulation der Zementhydratation lieferte die Zusammensetzung des Gefüges und somit Aussagen zur Raumauffüllung der Hydratationsprodukte $X(t)$ bzw. zur Porosität $P(t)$. Mit Hilfe des Ansatzes von Powers, der von einer Grundfestigkeit des Gefüges ausgeht, die durch die Porosität abgemindert wird, wurde anhand der Gleichungen

$$D(t) = D_0 \cdot X(t)^{n1} \quad \text{bzw.} \quad D(t) = D_0 \cdot (1 - P(t))^{n2}$$

der Druckfestigkeitsverlauf berechnet. Den gemessenen Druckfestigkeiten von Zementstein und Normmörtel wurde der entsprechende simulierte Druckfestigkeitsverlauf gegenübergestellt.

Neben der Bestimmung des Druckfestigkeitsverlaufs mit Hilfe der Powers-Gleichung anhand der simulierten Porosität $P(t)$ wurde der Druckfestigkeitsverlauf auch anhand der Raumauffüllung der Hydratationsprodukte $X(t)$ (Gel/Space-Verhältnis) bestimmt. Der anhand der Porosität $P(t)$ simulierte Druckfestigkeitsverlauf lag bei gleichen Variablen D_0 und n über dem der anhand der Raumauffüllung der Hydratationsprodukte $X(t)$ simulierten Verlauf.

Um den gemessenen Druckfestigkeitsverlauf durch den simulierten Druckfestigkeitsverlauf wiedergeben zu können, mussten für jeden Zement die Variablen D_0 und n anhand der zuvor bestimmten Druckfestigkeiten im Alter von 2, 7 und 28 Tagen separat bestimmt werden. Im Vergleich zu den von Locher genannten Werten $D_0 = 203 \text{ MPa}$ und $n = 4,67$ waren für die Mehrzahl der untersuchten Zemente die Druckfestigkeit des porenfreien Zementsteins D_0 als auch die Variable n niedriger. Allgemeingültige Werte für D_0 und n , um den Druckfestigkeitsverlauf verschiedener Zementarten bzw. -festigkeitsklassen einheitlich und zielsicher zu approximieren, konnten jedoch nicht abgeleitet werden.

Alternativ konnte die Druckfestigkeit anhand von Korrelationen mit dem Elastizitätsmodul unabhängig von der eben genannten Methode mit Hilfe der VCCTL-Software berechnet werden. Die Werte des Elastizitätsmoduls der Simulationsberechnungen lagen über den nach DAfStb Heft 422 bzw. über den nach ASTM C 215 bestimmten Werten. Die anhand des simulierten Elastizitätsmoduls berechneten Druckfestigkeiten lagen jedoch unterhalb der gemessenen Druckfestigkeiten und korrelierten somit mit den simulierten Porositäten von Normmörtel jedoch nicht mit den simulierten Elastizitätsmoduli.

Um die Abweichungen zwischen der simulierten Porosität bzw. berechneten Druckfestigkeit vom entsprechenden Messwert bei Normmörtel zu untersuchen, wurden der Einfluss verschiedener Kenngrößen zur Berücksichtigung von Gesteinskörnung bei den Simulationsberechnungen betrachtet. Wesentliche Einflussgrößen der Gesteinskörnung waren der Elastizitätsmodul und die Korngrößenverteilung. Für die Variation des Elastizitätsmoduls der Gesteinskörnung in einem Bereich von 60 GPa bis 105 GPa erhöhte sich die Druckfestigkeit des Mörtels zwischen dem geringsten und höchsten Wert mit steigendem Elastizitätsmodul um rd. 35 % (16 MPa). Die Variation der Korngrößenverteilung des Normsand es innerhalb der laut Norm erlaubten Grenzen, ergab mit dem groberen Sand eine um rd. 14,6 % (6,6 MPa) höhere Druckfestigkeit als mit dem feineren Sand. Die Kontaktzone als Bereich zwischen Gesteinsoberfläche und ungestörter Zementmatrix war ebenfalls ein entscheidender Einflussfaktor auf die resultierende Festigkeit. Die Breite der Kontaktzone zwischen Gestein und ungestörter Zementmatrix wurde in VCCTL durch den Medianwert der Partikelgrößenverteilung des Zements abgeschätzt. Sie variierte für die Zemente zwischen 10 μm und 30 μm , im Mittel lag sie bei rd. 16 μm . Bereits eine Verringerung der Breite der Kontaktzone um 2 μm bewirkte einen Druckfestigkeitsanstieg um rd. sieben Prozent im Alter von 28 Tagen.

Insgesamt wurde deutlich, dass insbesondere die Wahl des Elastizitätsmoduls der Gesteinskörnung, die Korngrößenverteilung des Normsand es sowie die Abmessung und Eigenschaften der Kontaktzone entscheidende Faktoren für die Simulationsberechnung der Druckfestigkeit im Alter von 28 Tagen darstellten.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die Simulation des Druckfestigkeitsverlaufs von Normmörtel weder über die Berechnung anhand der Raumauffüllung der Hydratationsprodukte $X(t)$ noch über die Porosität $P(t)$ mit dem angewendeten einheitlichen Verfahren zuverlässig simuliert werden konnte. Die Bestimmung der Variablen D_0 und n der Powers-Gleichung zur Berechnung der Druckfestigkeit musste für jeden Zement separat erfolgen. Neben den Parametern des verwendeten Zementes waren insbesondere Kenngrößen der Gesteinskörnung und der Übergangzone von Gestein zu unbeeinflusster Zementmatrix für das Simulationsergebnis entscheidend. Allein die Variation dieser Kenngrößen innerhalb der praxisüblichen Schwankungsbreite kann das Simulationsergebnis entscheidend beeinflussen. Grundsätzlich scheint die VCCTL-Software zur Abbildung der Hydratation von Zement geeignet zu sein. Sie sollte jedoch insbesondere hinsichtlich der Simulation der Porosität von Mörtel und der Zusammensetzung der Porenlösung sowie in Bezug auf den Einfluss von Sulfat auf den Hydratationsprozess weiter entwickelt werden.

Die verwendete Version der VCCTL-Software ermöglichte unter den im Bericht dargestellten Randbedingungen keine zuverlässige Vorhersage der Zementnormdruckfestigkeit im Alter von 28 Tagen anhand von Zementkenndaten. Diesbezüglich ist für einen Einsatz in der Praxis unbedingt weiterer Entwicklungsbedarf notwendig. Das Forschungsziel, die VCCTL-Software hinsichtlich der Genauigkeit und Praxisrelevanz zu beurteilen, wurde erreicht.