HTWK
Hochschule für Technik,
Wirtschaft und Kultur Leipzig

Masterarbeit

Simulation des gleichzeitigen Feuchte- und Chloridtransports in Beton

im Studiengang Bauingenieurwesen

an der

Hochschule für Technik, Wirtschaft und Kultur Leipzig

Sophie Schulze (74086)

Betreuer: Prof. Dr.-Ing. Volker Slowik

Dr. rer. nat. Beate Villmann

Leipzig, den 28.10.2021

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis 4

Tabellenverzeichnis 7

Formelverzeichnis 8

1 Einführung 14

1.1 Problemstellung und Zielsetzung 14

1.2 Vorgehensweise 15

2 Stand des Wissens 16

2.1 Feuchtetransport 16

2.1.1 Feuchtespeicherung 18

2.1.2 Feuchte-Diffusionskoeffizient 20

2.2 Chloridtransport 22

2.2.1 Chloridtransport in gesättigtem Beton 24

2.2.2 Chloridtransport in ungesättigtem Beton 24

2.2.3 Chlorid-Diffusionskoeffizient 25

2.2.4 Chlorid-Bindungsisotherme 31

3 Numerische Simulation 33

3.1 Userroutine für Feuchtetransport 33

3.1.1 Sorptionsisotherme 35

3.1.2 Feuchte-Diffusionskoeffizient 35

3.1.3 Diffusionsstromdichte 36

3.2 Userroutine für Chloridtransport 36

3.2.1 Chlorid-Diffusionskoeffizient 39

3.2.2 Chlorid-Bindungsisotherme 40

3.3 Überprüfung der Objektivität der Simulationsergebnisse 41

3.4 Einfluss der Konvergenzkriterien 44

4 Validierung der Simulationsergebnisse 45
4.1 Gesättigter Probekörper 45
4.1.1 Fall 1 – Konstanter Chlorid-Diffusionskoeffizient 46
4.1.2 Fall 2 – Zeitabhängiger Chlorid-Diffusionskoeffizient 49
4.2 Ungesättigter Probekörper 50
4.3 Weitere Überprüfungen 53
4.3.1 Experimente von Wittmann 53
4.3.2 Simulation von Ababneh 57
5 Anwendungen der gekoppelten Simulation von Feuchte- und Chloridtransport 60
5.1 Ausgangsdaten für die Simulationen 60
5.2 Einflüsse aus unterschiedlichen Umgebungsbedingungen und Materialparametern 66
5.2.1 Vergleich zwischen gesättigtem und ungesättigtem Bauteil 66
5.2.2 Abhängigkeit vom Wasserzementwert 68
5.2.3 Zeitlich veränderliche Randbedingung 73
5.2.4 Auswaschen des Chlorids 79
5.3 Simulationen mit unterschiedlichen Bauteilgeometrien 80
5.3.1 Dreidimensionales Bauteil 80
5.3.2 Bauteil mit Einzelriss 82
6 Zusammenfassung 85
Literatur 87
Anhang 91
Inhaltsverzeichnis USB-Stick 115
Erklärung 116

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Schematische Darstellung der Transportmechanismen nach [3] 16

Abbildung 2: Unterschiedliche Bezugsgrößen für die Einheiten des Chloridgehalts nach [14] 23

Abbildung 3: Versuchsaufbau zur Messung des Diffusionskoeffizienten im stationären Zustand nach [14] 26

Abbildung 4: Schematische Darstellung des allgemeinen und des effektiven Diffusionskoeffizienten nach [22] 27

Abbildung 5: Versuchsaufbau zur Messung des Diffusionskoeffizienten unter instationären Bedingungen nach [14] 28

Abbildung 6: Veranschaulichung der Integrationspunkte und Abstände – links Regelfall, rechts Sonderfall: Randelement 38

Abbildung 7: Feuchteprofile mit unterschiedlichen Zeitinkrementen 42

Abbildung 8: Chloridprofile mit unterschiedlichen Zeitinkrementen 42

Abbildung 9: Feuchteprofile mit unterschiedlichen Elementgrößen 43

Abbildung 10: Chloridprofile mit unterschiedlichen Elementgrößen 43

Abbildung 11: Fall 1 – Chloridprofile mit Berücksichtigung nur einer Randbedingung für eine 10 cm dicke Wand 47

Abbildung 12: Fall 1 – Chloridprofile mit Berücksichtigung nur einer Randbedingung für eine unendlich dicke Wand 48

Abbildung 13: Fall 1 – Chloridprofile mit Berücksichtigung zweier Randbedingungen für eine 10 cm dicke Wand 48

Abbildung 14: Fall 2 – Chloridprofile mit Berücksichtigung eines zeitlich veränderlichen Chlorid-Diffusionskoeffizienten 49

Abbildung 15: Gegenüberstellung der Profile des Feuchtegehalts w gemäß Medved' und Černý [2] und aus ANSYS 52

Abbildung 16: Gegenüberstellung der Profile des Chloridgehalts C gemäß Medved' und Černý und aus ANSYS 52

Abbildung 17: Gegenüberstellung der Profile des freien Chloridgehalts Cf gemäß Medved' und Černý und aus ANSYS 53

Abbildung 18: Schematische Darstellung der Experimente von Wittmann et al. nach [35] 54

Abbildung 19: Linearer Zusammenhang zwischen aufnehmbarer Feuchtemenge und der Wurzel aus der Zeit 55

Abbildung 20: Vergleich der Chloridprofile von Wittmann et al. [35, 36] und aus ANSYS 57

Abbildung 21: Vergleich der Feuchteprofile gemäß Ababneh et al. [4] und aus ANSYS 58

Abbildung 22: Vergleich der Chloridprofile gemäß Ababneh et al. [4] und aus ANSYS 58

Abbildung 23: Auswirkungen der Masseanteile von Zuschlag und Zement auf die Chloridprofile ... 59

Abbildung 24: Profile der relativen Feuchte h (links) und des Feuchtegehalts w (rechts) zu verschiedenen Zeitpunkten 63

Abbildung 25: Profile des gesamten Chloridgehalts C zu verschiedenen Zeitpunkten 63

Abbildung 26: Profile des freien Chloridgehalts Cf zu verschiedenen Zeitpunkten 64

Abbildung 27: Profile des gebundenen Chloridgehalts Cb zu verschiedenen Zeitpunkten 64

Abbildung 28: Freier Chloridgehalt an verschiedenen Stellen über die Expositionszeit 65

Abbildung 29: Feuchteprofile bei unterschiedlichen Anfangs- und Randbedingungen 67

Abbildung 30: Chloridprofile für unterschiedliche Anfangs- und Randbedingungen 68

Abbildung 31: Gegenüberstellung der Sorptionsisothermen (links) und der Feuchte-Diffusionskoeffizienten (rechts) für unterschiedliche Wasserzementwerte 69

Abbildung 32: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskoeffizienten (links) und der Chlorid-Bindungsisothermen (rechts) für unterschiedliche Wasserzementwerte 69

Abbildung 33: Feuchteprofile bei unterschiedlichen Wasserzementwerten 70

Abbildung 34: Chloridprofile bei unterschiedlichen Wasserzementwerten 71

Abbildung 35: Chloridprofile für gebundenes Chlorid mit unterschiedlichen Wasserzementwerten 71

Abbildung 36: Chloridprofile für freies Chlorid bei unterschiedlichen Wasserzementwerten 72

Abbildung 37: Vergleich von mit verschiedenen Wasserzementwerten erhaltenen Simulationsergebnissen und entsprechenden experimentellen Daten 72

Abbildung 38: Periodische Randbedingungen des Feuchte- und Chloridgehalts für die Varianten PeriodeKurz und PeriodeLang 74

Abbildung 39: Relative Feuchte h nach sechs Monaten und nach zwei Jahren für unterschiedliche Periodenlängen 75

Abbildung 40: Gesamter Chloridgehalt C nach sechs Monaten und nach zwei Jahren für unterschiedliche Periodenlängen 76

Abbildung 41: Freier Chloridgehalt Cf nach einem und nach zwei Jahren für unterschiedliche Periodenlängen 77

Abbildung 42: Gegenüberstellung der relativen Feuchte h bei zeitlich veränderlichen und konstanten Randbedingungen 78

Abbildung 43: Gegenüberstellung des gesamten Chloridgehalts C bei zeitlich veränderlichen und konstanten Randbedingungen 78

Abbildung 44: Gegenüberstellung des freien Chloridgehalts Cf bei zeitlich veränderlichen und konstanten Randbedingungen 79

Abbildung 45: Periodische Randbedingungen des Feuchte- und Chloridgehalts für die Varianten PeriodeLang und Regen 79

Abbildung 46: Gegenüberstellung des freien Chloridgehalts Cf mit und ohne Berücksichtigung einer Regenphase 80

Abbildung 47: Chloridgehalt im dreidimensionalen Bauteil mit gleichen Randbedingungen an drei Randflächen 81

Abbildung 48: Chloridgehalt im dreidimensionalen Bauteil mit unterschiedlichen Randbedingungen an drei Randflächen 82

Abbildung 49: Geometrie für die Riss-Modellierung mit Darstellung des Netzes, an rot gekennzeichneten Flächen Randbedingungen vorgegeben 83

Abbildung 50: Chloridgehalt im Bauteil mit Einzelriss nach einem Tag 84

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Aktivierungsenergie U in Abhängigkeit des Wasserzementwerts [26] 31

Tabelle 2: Übertragung der Formelzeichen und Einheiten von Wärme- auf Feuchtetransport 34

Tabelle 3: Varianten des Feuchte-Diffusionskoeffizienten 35

Tabelle 4: Bedeutungen der Funktionen F und P 38

Tabelle 5: Varianten des Chlorid-Diffusionskoeffizienten 39

Tabelle 6: Varianten der Chlorid-Bindungsisotherme 40

Tabelle 7: Parameter der in ANSYS verwendeten Sorptionsisotherme 54

Tabelle 8: Parameter des in ANSYS verwendeten Feuchte-Diffusionskoeffizienten 55

Tabelle 9: Parameter der in ANSYS verwendeten Feuchte-Sorptionsisotherme 60

Tabelle 10: Parameter des in ANSYS verwendeten Feuchte-Diffusionskoeffizienten 60

Tabelle 11: Parameter des in ANSYS verwendeten Chlorid-Diffusionskoeffizienten 61

Tabelle 12: Parameter der in ANSYS verwendeten Chlorid-Bindungsisotherme 62

Formelverzeichnis

Lateinische Buchstaben

A	$[kg/(m^2 \cdot h)]$	materialspezifischer Wasseraufnahmekoeffizient im Wurzel-t-Gesetz
A	$[-]$	Parameter der Feuchte-Sorptionsisotherme
A	$[-]$	Freundlich-Exponent für Chlorid-Bindungsisotherme
A_B	$[m^2]$	Querschnittsfläche des Betons
A_L	$[m^2]$	Querschnittsfläche der Porenstruktur
a_i	$[-]$	experimentell ermittelte Parameter zur Berechnung der Volumenanteile für die Chlorid-Bindungsisotherme (siehe Tabelle A 1)
B	$[-]$	Parameter der Feuchte-Sorptionsisotherme
B	$[-]$	empirischer Parameter der Chlorid-Bindungsisotherme
$\tilde{B}$	$[-]$	Freundlich-Koeffizient für Chlorid-Bindungsisotherme
$\tilde{\tilde{B}}$	$[-]$	Parameter der Chlorid-Bindungsisotherme
$\tilde{b}$	$[m^2/s]$	Parameter für $D_l(w)$
b_i	$[-]$	experimentell ermittelte Parameter zur Berechnung der Volumenanteile für die Chlorid-Bindungsisotherme (siehe Tabelle A 1)
C	$[-]$	Parameter der Feuchte-Sorptionsisotherme
C		Netto-Adsorptionswärme (bei Berechnung der Feuchte-Sorptionsisotherme)
C	$[kg_{Cl}/m_B^3]$	gesamter Chloridgehalt
C_f	$[kg_{Cl}/m_W^3]$	freier Chloridgehalt
C_b	$[kg_{Cl}/m_B^3]$	gebundener Chloridgehalt
C_{bm}	$[kg_{Cl}/m_B^3]$	Gehalt an gebundenem Chlorid bei gesättigter einschichtiger Adsorption
C_0	$[-]$	Parameter zur Berechnung der Netto-Adsorptionswärme C
c	$[Ws/(kg \cdot K)]$	spezifische Wärmekapazität
$\tilde{c}$	$[-]$	Parameter für $D_l(w)$
c_i	$[-]$	experimentell ermittelte Parameter zur Berechnung der Volumenanteile für die Chlorid-Bindungsisotherme (siehe Tabelle A 1)
$cond_M$	$[kg_W/(m_B \cdot s)]$	Feuchte-Diffusionskoeffizient (bei w_M)
$cond_V$	$[kg_B/(m_B \cdot s) \cdot m_W^3/m_B^3]$	Feuchte-Diffusionskoeffizient (mit w_V)

$conductivity$	$[kg_W/(m_B \cdot s)]$ bzw. $[kg_B/(m_B \cdot s) \cdot m_W^3/m_B^3]$	Feuchte-Diffusionskoeffizient (Bezeichnung in ANSYS)
D	$[-]$	Parameter der Feuchte-Sorptionsisotherme
$D(h)$	$[m^2/s]$	Diffusionskoeffizient der Porenluftfeuchte
D_{l+v}	$[kg_W/(m_B \cdot s)]$	Feuchte-Diffusionskoeffizient
$D_l(w_M)$	$[m^2/s]$	feuchteabhängiger Koeffizient für Flüssigtransport
$D_l(w_V)$	$[m^2/s]$	feuchteabhängiger Koeffizient für Flüssigtransport
D_v	$[kg_W/(m_B \cdot s)]$	Koeffizient für den Dampftransport
$D_{H,cp}$	$[cm^2/day]$	Feuchte-Diffusionskoeffizient des Zementleims
$D_{H,agg}$	$[cm^2/day]$	Feuchte-Diffusionskoeffizient des Zuschlags
D	$[m^2/s]$	allgemeiner Chlorid-Diffusionskoeffizient
D_{eff}	$[m^2/s]$	effektiver Chlorid-Diffusionskoeffizient
D_0	$[m^2/s]$	intrinsischer Chlorid-Diffusionskoeffizient
$D_{app}(t)$	$[m^2/s]$	scheinbarer Chlorid-Diffusionskoeffizient
$D_{app}(t_0)$	$[m^2/s]$	scheinbarer Chlorid-Diffusionskoeffizient zur Zeit t_0
D_{Cl}	$[m^2/s]$	Chlorid-Diffusionskoeffizient
D_{agg}	$[cm^2/days]$	Chlorid-Diffusionskoeffizient des Zuschlags
D_{cp}	$[cm^2/days]$	Chlorid-Diffusionskoeffizient des Zementleims
$dens$	$[kg_B/m_B^3]$	Dichte des Betons (Bezeichnung in Userroutine)
E	$[-]$	Parameter der Feuchte-Sorptionsisotherme
E_w	$[-]$	Parameter des Feuchte-Diffusionskoeffizienten
E_f	$[-]$	Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten
F	$[-]$	Parameter der Feuchte-Sorptionsisotherme
f_{cp}	$[-]$	Masseanteil des Zementleims
f_{agg}	$[-]$	Masseanteil des Zuschlags
f_{CSH}	$[-]$	Volumenanteil der C-S-H-Phasen am Beton
f_1	$[-]$	Volumenanteil an unhydratisierten Zementpartikeln und kristallinen Phasen wie Calciumhydroxid und Ettringit im Beton
f_{Poren}	$[-]$	Volumenanteil an Poren im Beton
f_{core}	$[-]$	Volumenanteil an unhydratisierten Zementpartikeln im Beton
f_{CH}	$[-]$	Volumenanteil an Calciumhydroxid im Beton
f_{AFm}	$[-]$	Volumenanteil an Ettringit im Beton
$flux$	$[kg_W/(m^2 \cdot s)]$	Diffusionsstromdichte (Bezeichnung in Userroutine)

g	$[kg_W/(m^2 \cdot s)]$	Diffusionsstromdichte
g_i	$[-]$	Volumenanteil des Zuschlags
H	$[kg/(m^2 \cdot s)]$	Filmkoeffizient
H_C	$[-]$	kritischer Gehalt an relativer Feuchte
h	$[m]$	Abstand zwischen dem Mittelpunkt des aktuellen und inneren Integrationspunkt und dem Mittelpunkt des aktuellen und äußeren Integrationspunkt
h	$[-]$	relative Porenluftfeuchte
h_1	$[-]$	Grenzwert zwischen den zwei Funktionen der Sorptionsisotherme
J_L	$[kg_{Cl}/(m_W^2 \cdot s)]$	Diffusionsstromdichte von freiem Chlorid in wässriger Lösung
J_B	$[kg_{Cl}/(m_B^2 \cdot s)]$	Diffusionsstromdichte von freiem Chlorid in Beton
K_H	$[-]$	Henry-Koeffizient für Chlorid-Bindungsisotherme
k		Parameter zur Beschreibung der Porensättigung (bei Berechnung der Feuchte-Sorptionsisotherme)
k	$[-]$	Langmuir-Koeffizient für Chlorid-Bindungsisotherme
k_{ion}	$[-]$	Konstante zur Berechnung des Chlorid-Diffusionskoeffizienten
L	$[m]$	Länge des Betons
L_{eff}	$[m]$	effektive Weglänge durch die Porenstruktur des Betons
M_f	$[-]$	Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten
m	$[kg]$	Masse
m	$[kg/m^2]$	aufnehmbare Flüssigkeitsmenge im Wurzel-t-Gesetz
m	$[-]$	Konstante zur Berechnung des Chlorid-Diffusionskoeffizienten
N_f	$[-]$	Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten
n		Anzahl an adsorbierten Schichten in einer Pore
N_{ct}		Parameter zur Beschreibung der Art des Zements
n_{agg}		Parameter zur Beschreibung der Porenstruktur des Zuschlags
p	$[g/cm^3]$	Faktor zur Umrechnung des Volumens V in $[cm^3/g]$ in einen Volumenanteil f $[-]$
Q	$[J]$	Wärme
q	$[Ws/(m^2 \cdot s)]$	Wärmestromdichte
R	$[J/mol\ K]$	universelle Gaskonstante
S		spezifische Oberfläche (= Oberfläche pro Schüttvolumen)

$s_{transition}$	$[s]$	halbe Dauer der Übergangszeit
T	$[m_W^2/m_B^2]$	Tortuosität des Betons (im Kapitel 2.2.3)
T	$[K]$	Temperatur
T_0	$[K]$	Referenztemperatur
t	$[h]$ bzw. $[s]$	Zeit
t	$[days]$	Alter des Betons (im Kapitel 2.1.1 und im Anhang A.1)
t_s	$[s]$	Zeitpunkt der Mitte der Übergangsphase
t_0	$[days]$	Aushärtezeit
$temp$	$[-]$	Temperatur bzw. rel. Porenluftfeuchte in der Userroutine
$Temp1$	$[K]$	Grenzwert zwischen den zwei Funktionen der Sorptionsisotherme (Bezeichung in Userroutine)
$Temp_max$	$[K]$	Parameter zur Normierung der Feuchte in der Userroutine
$tgrad$		Vektor der Gradienten der Temperatur
U	$[J/mol]$	Aktivierungsenergie
V_{agg}		Parameter zur Beschreibung der Porenstruktur des Zuschlags
V_B	$[m^3]$	Volumen des Betons
V_{CSH}	$[m^3]$	Volumen an C-S-H-Phasen
V_{ct}		Parameter zur Beschreibung der Art des Zements
V_m		Einschichtkapazität
V_p		Porosität
V_p^c		kritische Porosität
$w(h)$	$[kg_W/kg_B]$ bzw. $[m_W^3/m_B^3]$	Feuchte-Sorptionsisotherme
w_{100}	$[kg_W/kg_B]$ bzw. $[m_W^3/m_B^3]$	Parameter der Feuchte-Sorptionsisotherme
w_{max}	$[kg_W/kg_B]$ bzw. $[m_W^3/m_B^3]$	Parameter der Feuchte-Sorptionsisotherme
w_M	$[kg_W/kg_B]$	massebezogener Feuchtegehalt
w_V	$[m_W^3/m_B^3]$	volumenbezogener Feuchtegehalt
w_i		Prozentsatz des Gewichts der einzelnen Bestandteile im Zement
w/z	$[-]$	Wasserzementwert
x	$[m]$	Ort
z	$[g]$	Anteil Zement an einem Gramm Zementleim

Griechische Buchstaben

α	$[-]$	Alterungsfaktor im Chlorid-Diffusionskoeffizient
α	$[Ws/(m^2 \cdot s \cdot K)]$	Wärmeübergangskoeffizient
α_h		Parameter zur Berechnung des Diffusionskoeffizienten des Zementleims
α_i		Grad der Hydratation der einzelnen Bestandteile des Zements
β_{CSH}		Massenverhältnis von C-S-H-Phasen zu Beton
β_h		Parameter zur Berechnung des Diffusionskoeffizienten des Zementleims
β_{sol}		Parameter zur Berechnung der Chlorid-Bindungsisotherme
γ_h		Parameter zur Berechnung des Diffusionskoeffizienten des Zementleims
Δ_a	$[m]$	Abstand zwischen aktuellem Integrationspunkt und Nachbarintegrationspunkt im Nachbarelement (siehe Kapitel 3.2)
Δ_i	$[m]$	Abstand zwischen aktuellem und Integrationspunkt und Nachbarintegrationspunkt im betrachteten Element (siehe Kapitel 3.2)
Δ_i	$[cm^3/g]$	Volumenänderung der einzelnen Bestandteile des Zements (siehe Anhang A.1)
Δt	$[s]$	Zeitinkrement / Zeitschrittweite
Δx	$[m]$	Elementlänge
Δx_{IP}	$[m]$	Abstand zwischen Rand eines Elements und nächstgelegenem Integrationspunkt
$\partial w/\partial h$	$[kg_W/kg_B]$ bzw. $[m_W^3/m_B^3]$	Feuchtespeicherkapazität
$\partial C_b/\partial C_f$		Bindungskapazität
ε	$[m_W^3/m_B^3]$	Porosität des Betons
η		Boltzmann Transformation
θ	$[K]$	Temperatur
λ	$[W/(m \cdot K)]$	Wärmeleitfähigkeit
μ	$[kg_B/kg_W]$	Faktor zum Anpassen der Einheiten
ξ		x bzw. y bzw. z
ρ	$[kg/m^3]$	Dichte
ρ_B	$[kg_B/m_B^3]$	Dichte des Betons
ρ_{Sch}		spezifische Schüttdichte des Zementleims
ρ_{sol}	$[kg/m^3]$	Dichte der Porenlösung

ρ_W	$[kg_W/m_W^3]$ bzw. $[g_W/cm_W^3]$	Dichte des Wassers
ρ_Z	$[g_Z/cm_Z^3]$	Dichte des Zements
ψ		Parameter zur Ermittlung des Volumenanteils f_{core}
Ω		Parameter zur Beschreibung des Hydrationsgrads des Zements

Mathematische Symbole

∂	Operator für partielles Differential
Δ	Differenzzeichen
∇	Nabla-Operator
$erfc$	komplementäre Fehlerfunktion

Indizes

a	Nachbarintegrationspunkt im Nachbarelement
agg	Zuschlag
B	Beton
c	betrachtetes Element bzw. betrachteter Integrationspunkt
$c\text{-}1$	Nachbarelement
$c+1$	Nachbarelement
Cl	Chlorid
cp	Zementleim
CSH	C-S-H-Phasen im Beton
i	Nachbarintegrationspunkt im betrachteten Element
i	aktueller Zeitschritt
$i+1$	nächster Zeitschritt
ini	Anfangsbedingung
M	massebezogen, d. h. Feuchtegehalt w in $[kg_W/kg_B]$
m	Mittelwert
$NaCl$	Natriumchlorid
s	Randbedingung
sol	Lösung
V	volumenbezogen, d. h. Feuchtegehalt w in $[m_W^3/m_B^3]$
W	Wasser
Z	Zement

1 Einführung

1.1 Problemstellung und Zielsetzung

Stahlbeton ist ein vielseitig einsetzbarer sowie wirtschaftlicher Baustoff und daher zur Zeit einer der am häufigsten verwendeten [1]. Ein Problem dieses Baustoffes ist jedoch die Korrosion der Stahlbewehrung, was zu einer verkürzten Nutzungsdauer oder kostenintensiven Sanierung führen kann.

Aufgrund der hohen Alkalität des Zements ist die Bewehrung im nicht karbonatisierten Beton passiviert und somit vor Korrosion geschützt. Diese Passivierungsschicht kann jedoch aufgrund von Karbonatisierung des Betons oder Überschreitung des kritischen Chloridgehalts im Bereich der Bewehrung zerstört werden. Sind bei Letzterem zudem Feuchtigkeit und Sauerstoff verfügbar, setzt die chloridinduzierte Stahlkorrosion ein. Einerseits reduziert sich dadurch die Tragfähigkeit des Stahls aufgrund des verringerten Stahlquerschnitts, andererseits entstehen Abplatzungen des Betons durch die Vergrößerung des Volumens der Bewehrung.

Chloride gelangen vor allem aus Streusalz und Meerwasser in Stahlbetonbauwerke. Demnach ist dieser Schädigungsmechanismus von besonderer Bedeutung für Bauwerke in mariner Umgebung und für die Infrastruktur in Regionen, in denen häufig Streusalz verwendet wird.

Damit Chloride transportiert werden können, muss Wasser als Lösungs- und Transportmittel vorhanden sein [2, 3]. Dabei wird zwischen gesättigtem und ungesättigtem Beton unterschieden. Bei gesättigtem Beton liegt der Gehalt an relativer Porenluftfeuchte im Beton bei 100 %, während bei ungesättigten Beton die relative Feuchte geringer ist und gegebenenfalls Feuchtetransport im Bauteil stattfindet. In beiden Fällen ist eine treibende Kraft des Transportprozesses der Konzentrationsunterschied des Chlorids. Im ungesättigten Beton findet zudem Feuchtetransport statt, durch den der Transport des Chlorids ebenfalls beeinflusst wird [4].

Um Kosten und Ressourcen einzusparen, sollte die Nutzungsdauer eines Stahlbetonwerks möglichst lang sein. Die Restlebensdauer des Bauwerks kann abgeschätzt werden, wenn Feuchte- und Chloridgehalt im Bauteil bekannt sind. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit soll dazu ein numerisches Modell des gekoppelten Feuchte- und Chloridtransports in die Simulationssoftware ANSYS implementiert werden. Dadurch sollen Feuchte- und Chloridgehalt in einem dreidimensionalen Bauwerk zu einer bestimmten Zeit und an einem definierten Ort ermittelt und so auf den Zustand des Bauwerks geschlossen werden können.

1.2 Vorgehensweise

Da der Chloridtransport in Beton das Vorhandensein von Wasser voraussetzt, ist es für die meisten Anwendungsfälle erforderlich, den gleichzeitigen Transport von Feuchte und Chlorid zu betrachten und eine gekoppelte Simulation der beiden Prozesse durchzuführen. In der Literatur sind verschiedene Modelle zur Beschreibung des gleichzeitigen Feuchte- und Chloridtransports zu finden. Auch die einzelnen Parameter, die die Transportvorgänge charakterisieren, können auf unterschiedliche Weise ermittelt werden und so verschiedene Abhängigkeiten von den Materialeigenschaften berücksichtigen. In der vorliegenden Arbeit werden in Kapitel 2 zunächst ausgewählte Modelle des Feuchte- und Chloridtransports beschrieben.

Um die in der Literatur vorgeschlagenen Modelle anschließend in ANSYS zu implementieren, werden vorhandene Funktionen der Simulationssoftware genutzt und erweitert, siehe Kapitel 3. In Kapitel 4 erfolgt eine Validierung der implementierten Modelle durch den Vergleich der Simulationsergebnisse mit veröffentlichten Daten. Abschließend werden in Kapitel 5 verschiedene Anwendungen und Einsatzmöglichkeiten des Simulationsmodells vorgestellt.

Während in der Literatur häufig verschiedene Einwirkungen auf den Beton kombiniert betrachtet werden, siehe [5], beschränkt sich diese Arbeit auf unbelasteten und nicht gerissenen Beton.

2 Stand des Wissens

Das Vorhandensein von Wasser ist eine Grundvoraussetzung für die Beweglichkeit von Chloriden in Beton. Aus diesem Grund ist der Chloridtransport entscheidend von der im Bauteil enthaltenen Feuchte abhängig [6]. Deshalb werden im Folgenden sowohl der Feuchte- als auch der Chloridtransport im Beton betrachtet.

2.1 Feuchtetransport

Der Feuchtehaushalt eines porösen mineralischen Baustoffes wird einerseits von der Feuchtespeicherfähigkeit des Materials und andererseits von den Transportmechanismen des Wassers beeinflusst [7]. Letztere sind vom Feuchtegehalt der Umgebung abhängig, da sich zwischen Baustoff und Umgebung im Laufe der Zeit ein Gleichgewicht einstellt [8]. Wird dieses durch Änderung der Umgebungsbedingungen gestört, nimmt das Porengefüge Wasser auf beziehungsweise gibt dieses an die Umgebung ab. Dabei können verschiedene Transportmechanismen wirksam werden. Nach [7] und [3] sind unter praktischen bauphysikalischen Bedingungen im Wesentlichen

- die Kapillarleitung,
- die Wasserdampfdiffusion,
- die Effusion und
- die Oberflächendiffusion

maßgebend.

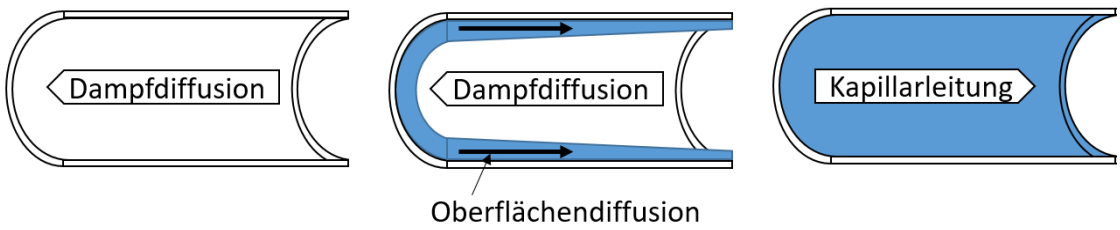


Abbildung 1: Schematische Darstellung der Transportmechanismen nach [3]

Die Effusion und die Wasserdampfdiffusion sind Transportarten des dampfförmigen Wassers und unterscheiden sich darin, ob die mittlere freie Weglänge eines Wassermoleküls größer oder kleiner ist als der Porenradius [7]. In mineralischen Baustoffen gibt es jedoch meist ein vergleichsweise breites Porengrößenspektrum, sodass beide Transportphänomene nebeneinander vorliegen und über einen gemeinsamen Diffusionskoeffizienten beschrieben werden können [3]. In Abbildung 1 sind die beiden Transportarten daher unter dem Begriff der Dampfdiffusion zusammengefasst.

Bei der Oberflächendiffusion handelt es sich um Transport von flüssigem Wasser, das sich an der inneren Oberfläche der Poren anlagert. Der Transport ist dabei abhängig von der Schichtdicke des

Sorbatfilms, sodass der Konzentrationsunterschied als das treibende Potenzial angenommen und ebenfalls ein Diffusionsansatz verwendet werden kann [3, 7].

Die Kapillarleitung beschreibt den Transport des flüssigen Wassers im teilgesättigten Porenraum. Im Bauwesen wird diese kapillare Wasseraufnahme näherungsweise durch das Wurzel-*t*-Gesetz beschrieben. Dieses besagt, dass die Eindringtiefe in ein poröses Bauteil mit fortschreitender Zeit immer langsamer zunimmt [3]. Wird die Eindringtiefe umgerechnet auf die aufnehmbare Flüssigkeitsmenge m, ergibt sich folgender Zusammenhang:

$$m = A \cdot \sqrt{t} \tag{1}$$

mit	m ...	aufnehmbare Flüssigkeitsmenge	$[kg/m^2]$
	A ...	materialspezifischer Wasseraufnahmekoeffizient	$[kg/(m^2 \cdot h)]$
	t ...	Zeit	$[h]$

Obwohl es sich hierbei um ein Strömungsphänomen handelt, hat sich auch zur Beschreibung des kapillaren Transportvorgangs die Verwendung des Diffusionsansatzes durchgesetzt [3]. In Kapitel 4.3.1 ist zu sehen, dass sich auch bei Nutzung eines entsprechenden Diffusionskoeffizienten ein linearer Zusammenhang zwischen der aufnehmbaren Flüssigkeitsmenge und der Wurzel aus der Zeit einstellt.

Formal können somit alle vier wesentlichen Transportmechanismen in Anlehnung an die Fick'schen Diffusionsgesetze modelliert werden. Diese beschreiben die Diffusion von Teilchen, die durch Unterschiede in den Konzentrationen hervorgerufen wird.

Das erste Fick'sche Gesetz besagt, dass die Diffusionsstromdichte g proportional zum Gradienten der Konzentration ist, im Falle des Feuchtetransportes damit proportional zum Gradienten der relativen Feuchte. Das negative Vorzeichen in Gleichung (2) ist darin begründet, dass der Diffusionsstrom dem Konzentrationsgradienten entgegengerichtet ist.

$$g = -D(h)\frac{\partial h}{\partial x} \tag{2}$$

mit	x ...	Ort	$[m]$
	h ...	relative Porenluftfeuchte	$[-]$
	$D(h)$ ...	Diffusionskoeffizient der Porenluftfeuchte	$[m^2/s]$
	g ...	Diffusionsstromdichte	$[kg_W/(m^2 \cdot s)]$

Die zeitliche Änderung der Konzentration wird mit Hilfe des zweiten Fick'schen Diffusionsgesetzes beschrieben. Dieses besagt, dass die zeitliche Änderung der Konzentration proportional zur zweiten Ableitung der Konzentration nach dem Ort ist, wie in Gleichung (3) dargestellt.

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(h)\frac{\partial h}{\partial x}\right) \qquad (3)$$
$$\left[\frac{1}{s} = \frac{1}{m}\left(\frac{m^2}{s}\frac{1}{m}\right)\right]$$

In dieser Arbeit wird der feuchteabhängige Transport mit Gleichung (4) beschrieben. Im Gegensatz zum Diffusionskoeffizienten $D(h)$ in Gleichung (3) sind im Diffusionskoeffizienten D_{l+v} sowohl der Flüssigwasser- als auch Dampftransport berücksichtigt.

$$\rho_B \frac{\partial w_M}{\partial h}\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{l+v}\frac{\partial h}{\partial x}\right) \qquad (4)$$
$$\left[\frac{kg_B}{m_B^3}\frac{kg_W}{kg_B}\frac{1}{s} = \frac{1}{m}\left(\frac{kg_W}{m_B \cdot s}\frac{1}{m}\right)\right]$$

mit	t …	Zeit	$[s]$
	w_M …	massebezogener Feuchtegehalt	$[kg_W/kg_B]$
	ρ_B …	Dichte des Betons	$[kg_B/m_B^3]$
	D_{l+v} …	Feuchte-Diffusionskoeffizient	$[kg_W/(m_B \cdot s)]$

2.1.1 Feuchtespeicherung

Die Feuchtespeicherfunktion oder Sorptionsisotherme beschreibt den Zusammenhang zwischen der relativen Luftfeuchte h und dem Feuchtegehalt w des Baustoffs [3]. Die Funktion der Sorptionsisotherme $w(h)$ ist nicht linear und wird in dieser Arbeit auf drei unterschiedliche Weisen beschrieben. Die Speicherkapazität eines Bauteils lässt sich durch die Ableitung $\partial w/\partial h$ angeben.

Nichtlineare Sorptionsisotherme

Die Sorptionsisotherme kann aus den zwei folgenden Funktionen zusammengesetzt werden:

im Bereich von $0 < h \leq h_1$: $w(h) = w_{100} \cdot (Ah^3 + Bh^2 + Ch + (1 - A - B - C))$ (5)

im Bereich ab $h > h_1$: $w(h) = Dh^2 + Eh + F$ (6)

Die Parameter D, E und F des zweiten Teils der Sorptionsisotherme lassen sich aus den Parametern A, B, C, w_{100} und w_{max} ermitteln. Der Wert w_{100} stellt das Ergebnis der Gleichung (5) bei einer relativen Feuchte von 100 % dar. Bei der gleichen relativen Feuchte ergibt sich w_{max} aus Gleichung (6).

$$D = \frac{w_{max} - w_{100} \cdot (-2Ah_1^3 - Bh_1^2 + 3Ah_1^2 + 2Bh_1 + 1 - A - B)}{h_1^2 - 2h_1 + 1} \qquad (7)$$

$$E = w_{100} \cdot (3Ah_1^2 + 2Bh_1 + C) - 2Dh_1 \qquad (8)$$

$$F = w_{max} - D - E \qquad (9)$$

Bilineare Sorptionsisotherme

Alternativ kann ein bilinearer Ansatz zugrunde gelegt werden:

im Bereich von $0 < h \leq h_1$: $w(h) = w_{100} \cdot (Ch + (1 - C))$ (10)

im Bereich ab $h > h_1$: $w(h) = Dh^2 + Eh + F$ (11)

Die Parameter E und F des zweiten Teils der Sorptionsisotherme können aus den Parametern C, w_{100} und w_{max} ermittelt werden.

$$D = 0 \tag{12}$$

$$E = \frac{w_{max} - w_{100} \cdot (Ch_1 + 1 - C)}{1 - h_1} \tag{13}$$

$$F = w_{max} - E \tag{14}$$

Modell nach Xi et al. [9]

Neben den beschriebenen Ansätzen wird in der Literatur zur Beschreibung des Feuchtegehalts $w(h)$ auch das BSB-Modell [10], wie in Gleichung (15) dargestellt, verwendet [8].

$$w(h) = \frac{C\ k\ V_m\ h}{(1 - k\ h) \cdot (1 + (C - 1)\ k\ h)} \tag{15}$$

mit V_m ... Einschichtkapazität

C ... Netto-Adsorptionswärme

k ... Parameter zur Beschreibung der Porensättigung

Dieses Modell wird zur Bestimmung der Sorptionsisotherme sowohl des Zementleims als auch des Zuschlags genutzt. Die beiden Sorptionsisothermen werden anschließend über die Masseanteile des Zementleims und des Zuschlags gemäß Gleichung (16) zu einer effektiven Sorptionsisotherme zusammengefasst.

$$w(h) = f_{cp} \cdot \big(w(h)\big)_{cp} + f_{agg} \cdot \big(w(h)\big)_{agg} \tag{16}$$

mit f_{cp} ... Masseanteil des Zementleims

f_{agg} ... Masseanteil der Zuschlags

Die Einschichtkapazität V_m ist definiert als die Masse, die benötigt wird, um das Adsorbat mit einer einzelnen Molekülschicht zu bedecken, und wird nach [9] für den Zementleim wie folgt bestimmt.

$$V_m = \left(0{,}068 - \frac{0{,}22}{t}\right)\left(0{,}85 + 0{,}45\frac{w}{z}\right)V_{ct} \qquad t > 5\ Tage, \quad 0{,}3 < \frac{w}{z} < 0{,}7 \tag{17}$$

mit w/z ... Wasserzementwert

t ... Alter des Betons in Tagen

V_{ct} ... Art des Zements $(= 0{,}9;\ 1{,}0;\ 0{,}85;\ 0{,}6$ für Typ I, II, III, IV)

Für den Zuschlag wird die Einschichtkapazität aus der Einschichtkapazität des Zementleims nach Gleichung (18) ermittelt.

$$V_m = 0{,}0647\, V_{agg} \tag{18}$$

mit V_{agg} ... beschreibt die Porenstruktur des Zuschlags

für dichte Zuschläge: $V_{agg} = 0{,}05 \ldots 0{,}10$
für poröse Zuschläge: $V_{agg} = 0{,}01 \ldots 0{,}04$

Die Netto-Adsorptionswärme C wird nach [9] sowohl für den Zuschlag als auch für den Zementleim wie folgt bestimmt.

$$C = \exp\left(\frac{C_0}{T}\right) \tag{19}$$

mit C_0 ... Parameter $(= 855)$

T ... Temperatur in Kelvin

Für den Parameter k in Gleichung (15) muss die Anzahl an adsorbierten Schichten in einer Pore n nach Gleichung (21) ermittelt werden.

$$k = \frac{(1 - 1/n)\, C - 1}{C - 1} \tag{20}$$

$$n = \left(2{,}5 - \frac{15}{t}\right)\left(0{,}33 + 2{,}2\frac{w}{z}\right) N_{ct} \qquad t > 5\ Tage, \quad 0{,}3 < \frac{w}{z} < 0{,}7 \tag{21}$$

mit N_{ct} ... Art des Zements $(= 1{,}1; 1{,}0; 1{,}15; 1{,}5$ für Typ I, II, III, IV)

Hier findet eine Unterscheidung zwischen Zementleim und Zuschlag in der Anzahl der adsorbierten Schichten wie folgt statt.

$$n = 4{,}063\, n_{agg} \tag{22}$$

mit n_{agg} ... beschreibt die Porenstruktur des Zuschlags

für dichte Zuschläge: $n_{agg} = 1{,}0 \ldots 1{,}5$
für poröse Zuschläge: $n_{agg} = 1{,}7 \ldots 2{,}0$

Die Berechnung der Sorptionsisotherme nach Xi et al. [9] wird in dieser Arbeit nur indirekt verwendet. Um Abhängigkeiten vom w/z-Wert zu berücksichtigen, kommt die Sorptionsisotherme nach den Gleichungen (15) bis (22) zur Anwendung. Jedoch wird der Kurvenverlauf anschließend mit den Parametern der nichtlinearen Sorptionsisotherme gemäß Gleichungen (5) und (6) abgebildet.

2.1.2 Feuchte-Diffusionskoeffizient

Auch für den Diffusionskoeffizienten gibt es in der Literatur verschiedene Ansätze. Im Folgenden werden zwei in dieser Arbeit verwendete vorgestellt.

Ansatz nach Krus [7]

Für die Berechnung des feuchteabhängigen Transportkoeffizienten D_{l+v} wird in [11] der Ansatz nach Krus [7] verwendet. Dieser enthält sowohl den Flüssigtransportkoeffizienten D_l als auch den Dampftransportkoeffizienten D_v. Damit kommt folgende Gleichung zur Anwendung:

$$D_{l+v} = \rho_B \cdot D_l(w_M) \cdot \frac{\partial w_M}{\partial h} + D_v = \rho_B \frac{\partial w_M}{\partial h} \cdot \tilde{b} \cdot e^{\tilde{c} \cdot w_M(h)} + D_v \tag{23}$$

$$\left[\frac{kg_W}{m_B \cdot s} = \frac{kg_B}{m_B^3} \cdot \frac{m^2}{s} \cdot \frac{kg_W}{kg_B} + \frac{kg_W}{m_B \cdot s} = \frac{kg_B}{m_B^3} \frac{kg_W}{kg_B} \cdot \frac{m^2}{s} \cdot 1 + \frac{kg_W}{m_B \cdot s}\right]$$

mit	ρ_B ...	Dichte des Betons	$[kg_B/m_B^3]$
	w_M ...	massebezogener Feuchtegehalt	$[kg_W/kg_B]$
	h ...	relative Porenluftfeuchte	$[-]$
	$D_l(w_M)$ ...	feuchteabhängiger Koeffizient für Flüssigtransport	$[m^2/s]$
	D_v ...	Koeffizient für Dampftransport	$[kg_W/(m_B \cdot s)]$
	$\tilde{b}$ ...	Parameter für $D_l(w_M)$	$[m^2/s]$
	$\tilde{c}$ ...	Parameter für $D_l(w_M)$	$[-]$

Im Unterschied zum hier beschriebenen Fall, bei welchem der Feuchtegehalt auf die Masse des Betons bezogen wird, kann dieser auch auf das Volumen des Betons bezogen werden. Damit ergibt sich für die Beschreibung des Transportvorgangs folgende Gleichung:

$$\rho_B \frac{\rho_W}{\rho_B} \frac{\partial w_V}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{l+v} \frac{\partial h}{\partial x}\right) \tag{24}$$

$$\left[\frac{kg_B}{m_B^3} \frac{kg_W \cdot m_B^3}{m_W^3 \cdot kg_B} \frac{m_W^3}{m_B^3} \frac{1}{s} = \frac{1}{m}\left(\frac{kg_W}{m_B \cdot s} \frac{1}{m}\right)\right]$$

Der Transportkoeffizient D_{l+v} berechnet sich dann nach Gleichung (25):

$$D_{l+v} = \rho_B \cdot D_l(w_V) \cdot \frac{\partial w_V}{\partial h} + D_v \frac{\rho_B}{\rho_W} = \rho_B \frac{\partial w_V}{\partial h} \cdot \tilde{b} \cdot e^{\tilde{c} \cdot w_V(h) \cdot \frac{\rho_W}{\rho_B}} + D_v \frac{\rho_B}{\rho_W} \tag{25}$$

$$\left[\frac{kg_B}{m_B \cdot s} \cdot \frac{m_W^3}{m_B^3} = \frac{kg_B}{m_B^3} \cdot \frac{m^2}{s} \cdot \frac{m_W^3}{m_B^3} + \frac{kg_W}{m_B \cdot s} \frac{kg_B \cdot m_W^3}{m_B^3 \cdot kg_W} = \frac{kg_B}{m_B^3} \frac{m_W^3}{m_B^3} \cdot \frac{m^2}{s} \cdot 1 + \frac{kg_W}{m_B \cdot s} \frac{kg_B \cdot m_W^3}{m_B^3 \cdot kg_W}\right]$$

mit	ρ_W ...	Dichte des Wassers	$[kg_W/m_W^3]$
	w_V ...	volumenbezogener Feuchtegehalt	$[m_W^3/m_B^3]$

Um eine Unterscheidung zwischen den Diffusionskoeffizienten bei Berücksichtigung von einerseits masse- und andererseits volumenbezogenem Feuchtegehalt zu ermöglichen, werden diese nachfolgend als $cond_M$ beziehungsweise $cond_V$ bezeichnet.

Modell nach Xi et al. [12]

Xi et al. [12] haben ein Modell entwickelt, das die Abhängigkeit des Diffusionskoeffizienten vom Wasserzementwert darstellt. Dabei wird in Gleichung (26) zunächst nur der Zementleim des Betons berücksichtigt.

$$D_{H,cp} = \alpha_h + \beta_h \left[1 - 2^{-10^{\gamma_h (h-1)}}\right] \tag{26}$$

mit $D_{H,cp}$ ... Diffusionskoeffizient des Zementleims $[cm^2/day]$

$\alpha_h = 1{,}05 - 3{,}8 \cdot (w/z) + 3{,}56 \cdot (w/z)^2$

$\beta_h = -14{,}4 + 50{,}4 \cdot (w/z) - 41{,}8 \cdot (w/z)^2$

$\gamma_h = 31{,}3 - 136 \cdot (w/z) + 162 \cdot (w/z)^2$

Die Parameter der Gleichung (26) wurden in [12] für Wasserzementwerte von 0,5 bis 0,75 kalibriert. Für immer häufiger verwendete Betone mit kleinerem w/z-Wert ($w/z \leq 0{,}47$) schlagen Ababneh et al. [4] vor, $\beta_h = 0$ zu setzen, jedoch ohne dies mit weiteren Daten zu validieren.

Um den Diffusionskoeffizienten für den gesamten Beton zu ermitteln, kann die Kompositttheorie von Christensen [13] genutzt werden. Nach dieser Theorie lassen sich die Diffusionskoeffizienten des Zementleims und des Zuschlags in Abhängigkeit vom Volumenanteil des Zuschlags miteinander wie folgt verrechnen.

$$D_{l+v} = D_{H,cp} \cdot \left(1 + \frac{g_i}{\frac{1 - g_i}{3} + \frac{1}{\left(D_{H,agg}/D_{H,cp}\right) - 1}} \right) \tag{27}$$

mit g_i ... Volumenanteil des Zuschlags $[-]$

$D_{H,cp}$ ... Diffusionskoeffizient des Zementleims $[cm^2/day]$

$D_{H,agg}$ ... Diffusionskoeffizient des Zuschlags $[cm^2/day]$

Da der Diffusionskoeffizient des Zuschlags im Vergleich zum Diffusionskoeffizienten des Zementleims sehr klein ist, kann dieser vernachlässigt werden.

Wie bereits im Kapitel 2.1.1 für den Fall der Sorptionsisotherme beschrieben, wird auch diese Vorgehensweise in vorliegender Arbeit nur angewandt, um Abhängigkeiten vom w/z-Wert zu berücksichtigen. Der so ermittelte Verlauf des Diffusionskoeffizienten wird anschließend mit den Parametern des Ansatzes nach Krus [7] abgebildet.

2.2 Chloridtransport

Die im Beton enthaltenen Chloridionen können in gebundene und freie Ionen unterteilt werden. Erstere sind chemisch an Bestandteilen des Zements gebunden, physikalisch adsorbiert oder in Gel-

oder Kapillarporen eingeschlossen. Die verbleibenden freien Chloridionen können durch den Beton transportiert werden [4].

$$C = C_f + C_b \tag{28}$$

mit C … gesamter Chloridgehalt
C_f … freier Chloridgehalt
C_b … gebundener Chloridgehalt

Bei der Angabe des Chloridgehalts werden in der Literatur verschiedene Einheiten verwendet, die sich auf unterschiedliche Größen beziehen [14]:

- bezogen auf Beton: in % oder kg_{Cl}/m^3_{Beton}
- bezogen auf Zementgehalt: in % oder kg_{Cl}/m^3_{Zement}
- bezogen auf Porenlösung: in $kg_{Cl}/m^3_{Porenlösung}$ oder $mol_{Cl}/l_{Porenlösung}$

In Abbildung 2 ist eine schematische Darstellung der unterschiedlichen Bezugsgrößen zu sehen.

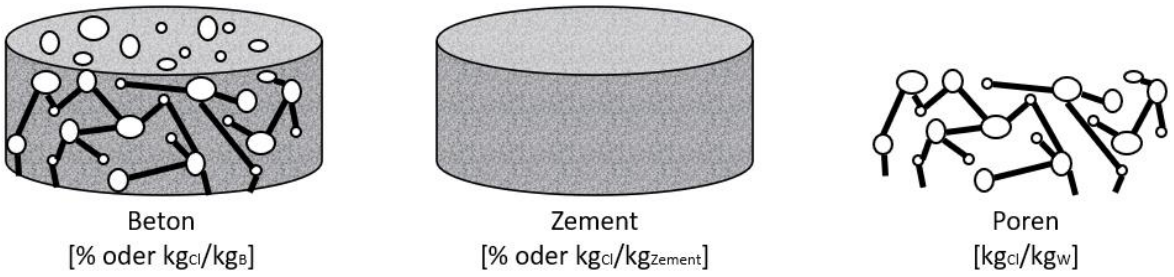


Abbildung 2: Unterschiedliche Bezugsgrößen für die Einheiten des Chloridgehalts nach [14]

In dieser Arbeit werden die Einheiten wie bei Medved‘ und Černý [2] verwendet. Damit gilt Gleichung (29) für die Unterteilung der Chloridionen.

$$C = w_V \cdot C_f + C_b \tag{29}$$

mit	C …	gesamter Chloridgehalt	$[kg_{Cl}/m^3_B]$
	C_f …	freier Chloridgehalt	$[kg_{Cl}/m^3_W]$
	w_V …	volumenbezogener Wassergehalt	$[m^3_W/m^3_B]$
	C_b …	gebundener Chloridgehalt	$[kg_{Cl}/m^3_B]$

Der Transport der freien Chloridionen erfolgt im Wesentlichen über zwei Vorgänge. Im gesättigten Beton ist die Diffusion der Chloridionen der hauptsächliche Transportmechanismus. Im ungesättigten Beton werden zusätzlich die im Wasser gelösten Chloridionen durch den Feuchtigkeitsstrom transportiert. Dieser Mechanismus wird Konvektion genannt [6]. Im Folgenden werden die Transportgleichungen für beide Varianten beschrieben.

2.2.1 Chloridtransport in gesättigtem Beton

Im gesättigten Beton können die Transportvorgänge allein über die Diffusion beschrieben werden. Dabei diffundieren die freien Chloridionen von Bereichen mit höherer Chloridkonzentration in Bereiche mit niedrigerer Konzentration. Für nicht-stationäre Verhältnisse wird in diesem Fall das zweite Fick'sche Diffusionsgesetz (Gleichung (30)) genutzt.

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{Cl}\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\right) \tag{30}$$

Eine Lösung dieser Differentialgleichung für einen zeitlich und örtlich konstanten Diffusionskoeffizienten wird in [15] beschrieben:

$$C(x,t) = C_s - (C_s - C_{ini}) \cdot \left[\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D_{app}(t) \cdot t}}\right)\right] \tag{31}$$

mit	$C(x,t)$ ...	Chloridgehalt	[Masse-% des Zements]
	C_s ...	Chloridgehalt an der Oberfläche des Betons	[Masse-% des Zements]
	C_{ini} ...	Chloridgehalt am Anfang	[Masse-% des Zements]
	D_{Cl} ...	Chlorid-Diffusionskoeffizient	$[m^2/s]$
	$D_{app}(t)$ ...	scheinbarer Chlorid-Diffusionskoeffizient	$[m^2/s]$
	x ...	Ort des zugehörigen Chloridgehalts	$[m]$
	t ...	Zeit der Einwirkung	$[s]$

Die Ermittlung des scheinbaren Chlorid-Diffusionskoeffizienten ist in Kapitel 2.2.3 dargestellt.

Gleichung (31) kann für den zeitabhängigen Chlorid-Diffusionskoeffizienten nach Gleichung (39) nur näherungsweise genutzt werden. In Gaal [16] wird die folgende Lösung der Differentialgleichung unter Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit des Chlorid-Diffusionskoeffizienten hergeleitet.

$$C(x,t) = C_s - (C_s - C_{ini}) \cdot \left[\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{\frac{D_{app}(t_0)}{1-\alpha} \cdot \left(\frac{t_0}{t}\right)^{\alpha} \cdot t}}\right)\right] \tag{32}$$

mit	$D_{app}(t_0)$ ...	scheinbarer Diffusionskoeffizient, gemessen zur Zeit t_0	$[m^2/s]$
	α ...	Alterungsfaktor	$[-]$

2.2.2 Chloridtransport in ungesättigtem Beton

Medved' und Černý [2] errechnen den Chloridtransport gekoppelt an den Feuchtetransport in Anlehnung an das Modell von Bear und Bachmat [17]. Bei Martín-Pérez et al. [18] findet ein ähnlicher Ansatz Anwendung. Dabei werden die Dispersion des Chlorids im Wasser, der Einfluss des Feuchtetransports auf den Chloridtransport und der Effekt des gebundenen Chlorids berücksichtigt [2]. Für

einen eindimensionalen Transport sieht das sogenannte Diffusion-Advektions-Modell nach Medved‘ und Černý [2] wie folgt aus:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[w_V\, D_{Cl}\, \frac{\partial C_f}{\partial x} + C_f\, D_l(w_V)\, \frac{\partial w_V}{\partial x}\right] \tag{33}$$

$$\left[\frac{kg_{Cl}}{m_B^3 \cdot s} = \frac{1}{m}\left(\frac{m_W^3}{m_B^3}\frac{m^2}{s}\frac{kg_{Cl}}{m_W^3 \cdot m} + \frac{kg_{Cl}}{m_W^3}\frac{m^2}{s}\frac{m_W^3}{m_B^3 \cdot m}\right)\right]$$

mit

C …	Konzentration des gesamten Chlorids im Beton	$[kg_{Cl}/m_B^3]$
C_f …	Konzentration des freien Chlorids in Wasser	$[kg_{Cl}/m_W^3]$
D_{Cl} …	Chlorid-Diffusionskoeffizient	$[m^2/s]$
w_V …	volumenbezogener Feuchtegehalt	$[m_W^3/m_B^3]$
$D_l(w_V)$ …	feuchteabhängiger Koeffizient für Flüssigtransport	$[m^2/s]$

Ein etwas abgewandeltes Modell wird bei Ababneh et al. [4] beschrieben. Hierbei ist zu beachten, dass die freie Chloridkonzentration C_f im hinteren Teil der Gleichung nicht nach x abgeleitet wird. Zudem sind die Chloridkonzentrationen in anderen Einheiten definiert. Ein ähnliches Modell wird auch in Saetta et al. [19] beschrieben.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[D_{Cl}\frac{\partial C_f}{\partial x}\right] + \mu\, \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{cond_M}{\rho_B}\frac{\partial h}{\partial x}\right] C_f \tag{34}$$

$$\left[\frac{kg_{Cl}}{kg_B \cdot s} = \frac{1}{m}\left(\frac{m^2}{s}\frac{kg_{Cl}}{kg_B \cdot m}\right) + \frac{kg_B}{kg_W}\frac{1}{m}\left(\frac{kg_W \cdot m_B^3}{m_B \cdot s \cdot kg_B}\frac{1}{m}\right)\frac{kg_{Cl}}{kg_B}\right]$$

mit

C …	Konzentration des gesamten Chlorids im Beton	$[kg_{Cl}/kg_B]$
C_f …	Konzentration des freien Chlorids im Beton	$[kg_{Cl}/kg_B]$
D_{Cl} …	Chlorid-Diffusionskoeffizient	$[m^2/s]$
μ …	Faktor zum Anpassen der Einheiten	$[kg_B/kg_W]$
$cond_M$ …	Feuchte-Diffusionskoeffizient (bei w_M)	$[kg_W/(m_B \cdot s)]$

In der Literatur sind noch weitere Ansätze zu finden [z.B. 20], jedoch wird sich in vorliegender Arbeit auf die beiden beschriebenen beschränkt.

2.2.3 Chlorid-Diffusionskoeffizient

Der Diffusionskoeffizient ist ein Maß dafür, wie durchlässig ein Medium für darin diffundierende Teilchen ist [21]. Es ist zu beachten, dass je nach Intensität der äußeren Einwirkungen für denselben Beton unterschiedliche Diffusionskoeffizienten ermittelt werden können [14].

Der Chlorid-Diffusionskoeffizient kann nach Lay [22] auf verschiedene geometrische Größen bezogen sein. So wird entweder der Weg durch die Poren des Betons oder der direkte Weg in Transportrichtung berücksichtigt. Auch als zugrundeliegender Querschnitt kann einerseits der

Lösungs- und andererseits der Betonquerschnitt genutzt werden. Zudem kann die experimentelle Bestimmung des Chlorid-Diffusionskoeffizienten auf unterschiedliche Weise erfolgen, was den Wert des Chlorid-Diffusionskoeffizienten beeinflusst [23]. Aus diesen Gründen muss klar zwischen verschiedenen Arten von Chlorid-Diffusionskoeffizienten unterschieden werden.

Der **allgemeine Diffusionskoeffizient D** von Chlorid beschreibt den Chloridtransport in einem ausschließlich mit wässriger Lösung gefüllten Volumenelement. Da hier aber die verwinkelte Porenstruktur und die geringere Lösungsquerschnittsfläche im Beton nicht berücksichtigt werden, ist dieser Wert größer als der Diffusionskoeffizient von Chlorid in Beton [22]. Er wird aus dem ersten Fick'schen Gesetz folgendermaßen hergeleitet.

$$D = \frac{J_L}{-\frac{\partial C_f}{\partial x}} \tag{35}$$

mit J_L ... Diffusionsstromdichte von freiem Chlorid in wässriger Lösung $[kg_{Cl}/(m_W^2 \cdot s)]$

C_f ... freier Chloridgehalt $[kg_{Cl}/m_W^3]$

x ... Ort $[m]$

Der **effektive Diffusionskoeffizient D_{eff}** wird unter stationären Bedingungen in Diffusionszellenversuchen, wie in Abbildung 3 dargestellt, ermittelt [22]. Dabei werden Testkammern mit unterschiedlichen Chloridkonzentrationen auf beiden Seiten des Probekörpers angebracht und die Diffusionsstromdichte über die Änderung der Chloridionenkonzentration in der hinteren Kammer gemessen [14]. Im Gegensatz zu Gleichung (35) wird in Gleichung (36) also die Diffusionsstromdichte im Beton berücksichtigt.

$$D_{eff} = \frac{J_B}{-\frac{\partial C_f}{\partial x}} \tag{36}$$

mit J_B ... Diffusionsstromdichte von freiem Chlorid in Beton $[kg_{Cl}/(m_B^2 \cdot s)]$

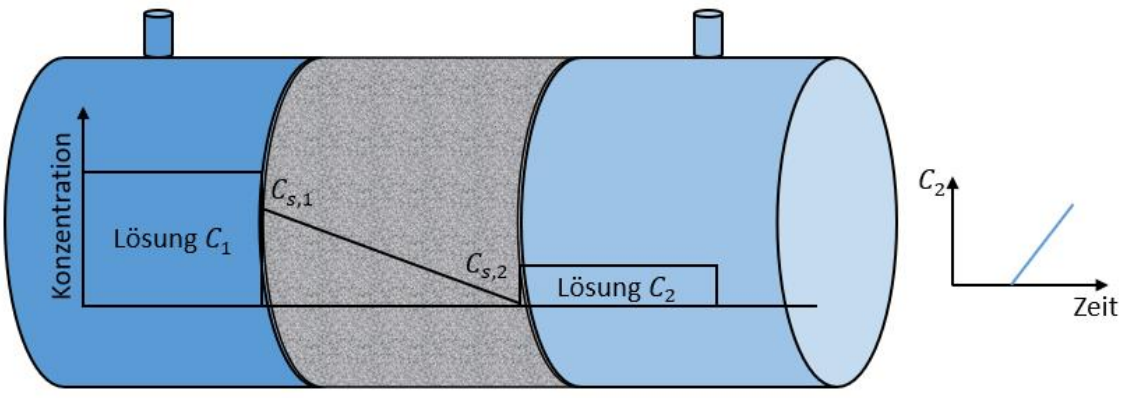


Abbildung 3: Versuchsaufbau zur Messung des Diffusionskoeffizienten im stationären Zustand nach [14]

Abbildung 4 veranschaulicht den Unterschied zwischen allgemeinem und effektivem Diffusionskoeffizienten. Dadurch, dass der effektive Diffusionskoeffizient am realen Bauteil gemessen wird, sind die effektive Weglänge L_{eff} durch die Porenstruktur sowie die Querschnittsfläche A_L der Porenstruktur automatisch berücksichtigt [22]. Der allgemeine Diffusionskoeffizient charakterisiert hingegen ausschließlich den Transport durch eine wässrige Lösung in einem Volumenelement mit der Länge L und der Querschnittsfläche A_B und ist damit unabhängig von L_{eff} und A_L.

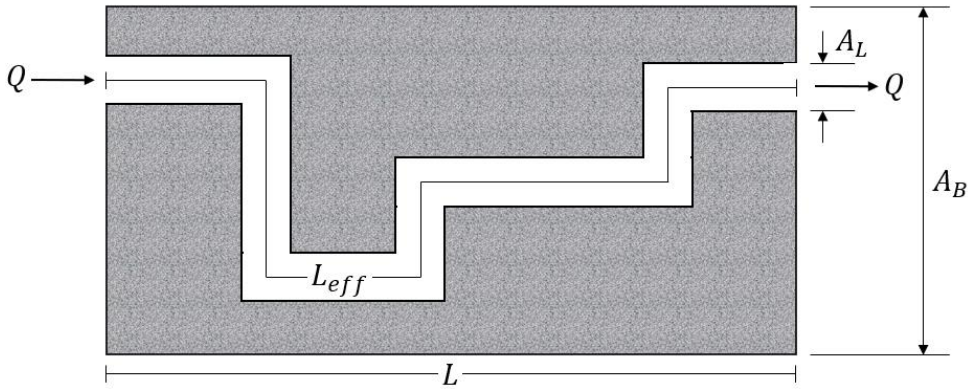


Abbildung 4: Schematische Darstellung des allgemeinen und des effektiven Diffusionskoeffizienten nach [22]

Der **intrinsische Diffusionskoeffizient D_0** ergibt sich wie folgt aus dem Verhältnis des effektiven Diffusionskoeffizienten und der Porosität des Betons [22].

$$D_0 = \frac{D_{eff}}{\varepsilon} = \frac{D}{T} \tag{37}$$

mit ε ... Porosität des Betons $[m_W^3/m_B^3]$

T ... Tortuosität des Betons $[m_W^2/m_B^2]$

Die genannten Chlorid-Diffusionskoeffizienten werden im stationären Zustand ermittelt. In der Realität liegen jedoch instationäre Bedingungen vor und es kann beobachtet werden, dass der Wert des Diffusionskoeffizienten im Laufe der Zeit sinkt [24]. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die weiterhin reagierenden Bindemittel im Beton die Poren verkleinern und auch bereits eingedrungene Chloride die Poren in der Oberflächenschicht verstopfen [15].

Beim **scheinbaren Diffusionskoeffizienten D_{app}** wird, wie in Gleichung (38) zu sehen, zusätzlich die Bindung des Chlorids berücksichtigt.

$$D_{app} = \frac{D_0}{\left(1 + \frac{\partial C_b}{\partial C_f}\right)} \tag{38}$$

Lay [22] beschreibt folgendes Problem dieses Ansatzes. Die Bindungskapazität $\partial C_b/\partial C_f$ ergibt sich aus dem Anstieg der Chlorid-Bindungsisotherme und nimmt mit steigender freier Chlorid-

konzentration ab. Demnach steigt der nach Gleichung (38) errechnete scheinbare Diffusionskoeffizient im Laufe der Zeit. Dies stimmt aber nicht mit dem sinkenden Chlorid-Diffusionskoeffizienten überein, wie er in der Realität beobachtet wird.

Alternativ kann der Effekt der Chloridbindung durch eine Zeitabhängigkeit des gemessenen Chlorid-Diffusionskoeffizienten berücksichtigt werden. So wird der scheinbare Diffusionskoeffizient $D_{app}(t)$ nach dem fib Model Code for Concrete Structures [15] wie folgt ermittelt:

$$D_{app}(t) = D_{app}(t_0)\left(\frac{t_0}{t}\right)^{\alpha} \tag{39}$$

mit $D_{app}(t_0)$ ... scheinbarer Diffusionskoeffizient, gemessen zur Zeit t_0 $[m^2/s]$

α ... Alterungsfaktor $[-]$

Zur Messung des Diffusionskoeffizienten unter instationären Bedingungen wird eine Seite des Probekörpers mit Chlorid belastet, wie in Abbildung 5 schematisch dargestellt ist. Die Chloride diffundieren aufgrund des Konzentrationsunterschieds auf natürliche Weise in den Beton. Der Diffusionskoeffizient kann über die Messung der Verteilungskurve der Chloridionen oder die Bestimmung der Eindringtiefe des Chlorids durch Färbung mit Silbernitrat ermittelt werden [23].

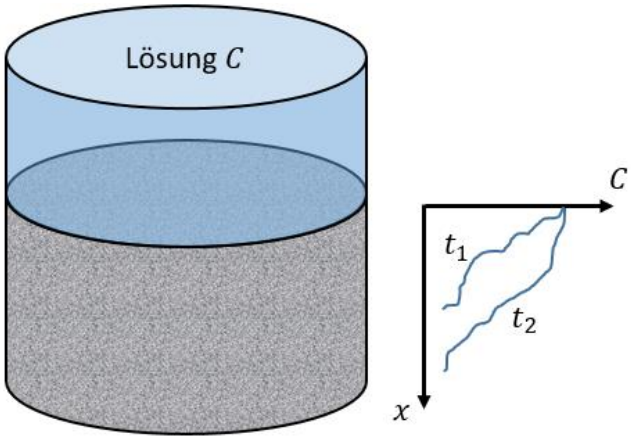


Abbildung 5: Versuchsaufbau zur Messung des Diffusionskoeffizienten unter instationären Bedingungen nach [14]

Sowohl die stationäre als auch die instationäre Messung beanspruchen eine Versuchsdauer von mehreren Monaten. Es gibt aber die Möglichkeit, eine elektrische Spannung an den Probekörper anzulegen, was die Chloridwanderung (Migration) beschleunigt und somit die für die Messung erforderliche Zeit verkürzt [23]. Bei den beschleunigten Migrationstests ist zu beachten, dass die Bindung der Chloride an die Zementphasen bei zu niedrigem Chloridgehalt der Lösung in geringerem Maße als in der Realität auftritt und der so ermittelte Diffusionskoeffizient demzufolge nur den Transportwiderstand im Beton beschreibt. Somit lässt sich mithilfe dieser Migrationstests nur auf die Einflüsse der Porosität und die Vernetzung der Poren schließen [14].

Diffusionskoeffizient nach Xi et al. [25]

Ababneh et al. [4] verwendet in Anlehnung an Xi et al. [25] einen Chlorid-Diffusionskoeffizienten, in dem mittels fünf Parameter folgende Einflüsse berücksichtigt werden:

- Wasserzementwert
- Aushärtezeit des Betons
- Zusammenwirken von Zuschlagstoffen und Zementleim
- relative Feuchte
- Temperatur
- Konzentration an freien Chloridionen

Dieser Diffusionskoeffizient wird nach Gleichung (40) ermittelt.

$$D_{Cl} = f_1(w/z\,, t_0) \cdot f_2(g_i) \cdot f_3(h) \cdot f_4(T) \cdot f_5\big(C_f\big) \tag{40}$$

Parameter f_1 beschreibt die Abhängigkeit des Diffusionskoeffizienten vom Wasserzementwert des Betons sowie der Aushärtungszeit nach [25]. Gleichung (41) ist gültig für $t_0 \leq 28$ Tage. Danach kann $t_0 = 28$ angesetzt werden.

$$f_1(w/z\,, t_0) = \left[\frac{1}{4} + \frac{28 - t_0}{300}\right]\left(\frac{w}{z}\right)^{6{,}55} + \frac{28 - t_0}{62500} \tag{41}$$

mit w/z ... Wasserzementwert $[-]$

t_0 ... Aushärtezeit in Tagen $[days]$

Um die unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten der Bestandteile Zementleim und Zuschlag zu berücksichtigen, wird für den zweiten Parameter ein Modell für kugelförmige Einschlüsse in zusammengesetzten Materialien nach Christensen [13], siehe Gleichung (42), angesetzt.

$$f_2(g_i) = D_{cp}\left(1 + \frac{g_i}{\frac{1 - g_i}{3} + \frac{1}{\left(D_{agg}/D_{cp}\right) - 1}}\right) \tag{42}$$

mit g_i ... Volumenanteil des Zuschlags $[-]$

D_{agg} ... Diffusionskoeffizient des Zuschlags $[cm^2/days]$

D_{cp} ... Diffusionskoeffizient des Zementleims $[cm^2/days]$

Die Diffusionskoeffizienten D_{agg} bzw. D_{cp} der beiden Bestandteile können nach Martys et al. [26] folgendermaßen ermittelt werden:

$$D = \frac{2\left[1 - \left(V_p - V_p^c\right)\right]}{S^2}\left(V_p - V_p^c\right)^{4{,}2} \tag{43}$$

mit V_p … Porosität

V_p^c … kritische Porosität

S … spezifische Oberfläche (= Oberfläche pro Schüttvolumen)

Für den Diffusionskoeffizienten des Zementleims wird die Porosität des Zementsteins aus dem Wassergehalt w bei einer relativen Luftfeuchte von $h = 100\ \%$ und der spezifischen Schüttdichte ρ_{Sch} abgeschätzt: $V_p = \rho_{Sch} \cdot w(h = 1)$. Nach Martys et al. [26] kann für die kritische Porosität 3 % angesetzt werden.

Auch die Ermittlung des Diffusionskoeffizienten des Zuschlags kann nach Gleichung (43) erfolgen. Alternativ besteht die Möglichkeit, einen konstanten Wert von $D_{agg} = 1 \cdot 10^{-12}\, cm^2/s$ zu verwenden.

Das Modell von Xi et al. [25] wurde durch Ababneh et al. [4] um den folgenden Faktor erweitert. Der Ansatz beruht auf einem Model von Bažant und Najjar [27] für Feuchte-Diffusion und ist in Gleichung (44) zu sehen.

$$f_3(h) = \left(1 + \frac{(1-h)^4}{(1-H_C)^4}\right)^{-1} \tag{44}$$

mit h … relative Feuchte

H_C … kritischer Gehalt an relativer Feuchte

H_C charakterisiert die relative Feuchte, bei der der Diffusionskoeffizient halb so groß ist wie bei der relativen Luftfeuchte von $h = 1$ [6].

Durch den vierten Faktor wird der Einfluss der Temperatur auf den Diffusionskoeffizienten berücksichtigt. Dazu wird die Arrhenius-Gleichung angewandt, siehe Gleichung (45).

$$f_4(T) = exp\left[\frac{U}{R}\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right] \tag{45}$$

mit U … Aktivierungsenergie $[J/mol]$

R … universelle Gaskonstante $R = 8{,}314\ J/(mol\ K)$

T_0 … Referenztemperatur $[K]$

T … Temperatur $[K]$

Gemäß Xi et al. [25] ist die Aktivierungsenergie U vom Wasserzementwert sowie von der Zementart abhängig. Für Zementleim aus Portlandzement wurden Werte für drei verschiedene w/z-Werte ermittelt [28], siehe Tabelle 1.

Tabelle 1: Aktivierungsenergie U in Abhängigkeit des Wasserzementwerts [26]

Wasserzementwert	**Aktivierungsenergie**
$w/z = 0{,}4$	$U = 41{,}8 \pm 4{,}0\ kJ/mol$
$w/z = 0{,}5$	$U = 44{,}6 \pm 4{,}3\ kJ/mol$
$w/z = 0{,}6$	$U = 32{,}0 \pm 2{,}4\ kJ/mol$

Die Abhängigkeit des Diffusionskoeffizienten vom Gehalt an freien Chloridionen wird durch den fünften Faktor nach Gleichung (46) berücksichtigt. Hierbei ist zu beachten, dass dieser Faktor nicht kleiner oder gleich Null sein darf.

$$f_5(C_f) = 1 - k_{ion}\,(C_f)^m \tag{46}$$

mit k_{ion} … Konstante $k_{ion} = \sqrt{70}$ [25]
m … Konstante $m = 0{,}5$ [25]

In der vorliegenden Arbeit wird der Diffusionskoeffizient nach Ababneh et al. [4] verwendet, da mit diesem viele verschiedene Einflüsse berücksichtigt werden können.

2.2.4 Chlorid-Bindungsisotherme

Der Anteil des gebundenen Chlorids am gesamten Chloridgehalt kann über die Chlorid-Bindungsisotherme ermittelt werden. Diese beschreibt den Gleichgewichtszustand zwischen freiem Chlorid C_f und an den Porenwänden des Materials gebundenem Chlorid C_b.

Bei Medved‘ und Černý [2] wird die Bindungsisotherme vereinfacht über den **linearen Ansatz nach Henry** beschrieben:

$$C_b = K_H \cdot C_f \tag{47}$$

mit K_H … Henry-Koeffizient $[-]$

Nach Jiřičková und Černý [29] gibt es zwei weitere Ansätze. Eine Variante der Chlorid-Bindungsisotherme wird von **Freundlich** [30] wie folgt beschrieben:

$$C_b = \tilde{B} \cdot {C_f}^A \tag{48}$$

mit $\tilde{B}$ … Freundlich-Koeffizient $[-]$
A … Freundlich-Exponent $[-]$

Bei Xi et al. [25] wird der Freundlich-Koeffizient $\tilde{B}$ gemäß Gleichung (49) ermittelt:

$$\tilde{B} = \frac{\beta_{CSH}}{1000} \cdot 10^{B} \cdot \left(\frac{1}{35.45 \cdot \beta_{sol}}\right)^{A} \tag{49}$$

mit B ... empirischer Parameter $[-]$

A ... empirischer Parameter (Freundlich-Exponent) $[-]$

Der Parameter β_{CSH} beschreibt das Massenverhältnis von C-S-H-Phasen zu Beton. Da die Dichten der C-S-H-Phasen und des Betons etwa gleich sind, kann dieses Verhältnis auch wie folgt aus dem Volumenanteil f_{CSH} ermittelt werden:

$$\beta_{CSH} \approx f_{CSH} = \frac{V_{CSH}}{V_B} = 1 - f_1 - f_{Poren} \tag{50}$$

Die Berechnung der Volumenanteile f_1 und f_{Poren} nach einem Modell von Jennings und Tennis [33] ist in Anhang A.1 dargestellt.

Der Parameter β_{sol} ergibt sich, wie in Gleichung (51) zu sehen, aus dem massebezogenen Feuchtegehalt w_M und der Dichte der Porenlösung ρ_{sol}.

$$\beta_{sol} = \frac{w_M}{\rho_{sol}} \tag{51}$$

Eine zweite Beschreibung der Chlorid-Bindungsisotherme erfolgt gemäß **Langmuir** [31] nach Gleichung (52):

$$\frac{1}{C_b} = \frac{1}{k\ C_{bm}} \cdot \frac{1}{C_f} + \frac{1}{C_{bm}} \tag{52}$$

mit k ... Langmuir-Koeffizient

C_{bm} ... Gehalt an gebundenem Chlorid bei gesättigter einschichtiger Adsorption

Gemäß Nilsson und Tang [32] kann die Chlorid-Bindungsisotherme nach Freundlich [30] angesetzt werden, wenn die Konzentration an freien Chloridionen größer als $0{,}01\ mol/l$ ist. Die Isotherme nach Langmuir [31] ist zutreffend, wenn C_f kleiner als $0{,}05\ mol/l$ ist. Mit einer molaren Masse M von $35{,}45\ g/mol$ für Chlorid ergeben sich umgerechnet in Massenkonzentration Grenzen von $0{,}3545\ kg/m^3$ bzw. $1{,}773\ kg/m^3$.

In der vorliegenden Arbeit werden nur die lineare Bindungsisotherme sowie die Bindungsisotherme nach Freundlich [30] verwendet.

3 Numerische Simulation

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit soll eine Methode gefunden und getestet werden, mit der ein gekoppelter Feuchte- und Chloridtransport mithilfe der Finiten-Elemente-Methode simuliert werden kann. Diese Methode beinhaltet ein Diskretisierungsverfahren, um physikalische Größen durch das näherungsweise Lösen von Differentialgleichungen zu bestimmen. Dazu wird hier die Software ANSYS genutzt.

In den Standardfunktionen von ANSYS sind weder Feuchte- noch Chloridtransport implementiert. Für den Feuchtetransport ist es möglich, einen in ANSYS vorhandenen Elementtypen für instationären Wärmedurchgang zu nutzen und mit Hilfe von ANSYS User Programmable Features auf den Feuchtetransport zu übertragen. Um diesen mit dem Chloridtransport zu koppeln, wird in der Programmierschnittstelle für thermische Materialmodelle (UserMatTh) zusätzlich der Chloridtransport implementiert. Die Lösung der Differentialgleichung für den Chloridtransport erfolgt dabei numerisch, wobei eine explizite Vorgehensweise gewählt wird.

In der genannten Programmierschnittstelle (im Folgenden Userroutine genannt) kann ein benutzerspezifisches Materialmodell erstellt werden, welches das Materialverhalten bezüglich Feuchte- und Chloridtransport unter Nutzung vorzugebender Sorptionsisothermen und Diffusionskoeffizienten beschreibt. Anhang A.2.1 und A.2.2 enthalten Auszüge aus der Userroutine, mit der die Simulationen der vorliegenden Arbeit durchgeführt wurden. Die möglichen Eingabeparameter für das Materialmodell werden in ANSYS mit $prop(\dots)$ bezeichnet. Die Zuordnung die einzelnen Parameter ist in den folgenden Kapiteln sowie im Anhang A.3 zu finden.

Das in ANSYS Workbench genutzte Analyse-System ist die instationäre thermische Analyse (Transient Thermal).

Im Folgenden werden die beiden Bestandteile der Userroutine genauer beschrieben.

3.1 Userroutine für Feuchtetransport

Zur Berechnung des gekoppelten Feuchte- und Chloridtransports ist es zunächst notwendig, die Feuchteverteilung im Bauteil zu ermitteln.

In der instationären thermischen Analyse in ANSYS ist die folgende Differentialgleichung hinterlegt:

$$\rho \cdot c \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial x}\right) \tag{53}$$

Da diese analog zur Gleichung des Feuchtetransports (siehe Gleichung (4)) aufgebaut ist, lässt sich der vorhandene Elementtyp Solid278 für die Simulation des Feuchtetransports nutzen. Dazu werden

die Formelzeichen und Einheiten des instationären Wärmetransports, wie in Tabelle 2 dargestellt, auf den Feuchtetransport übertragen.

Tabelle 2: Übertragung der Formelzeichen und Einheiten von Wärme- auf Feuchtetransport

Feuchtetransport			**Wärmetransport**	
transportierte Masse m	kg	←	transportierte Wärme Q	Ws
relative Feuchte h	$-$	←	Temperatur θ	K
Zeit t	s	←	Zeit t	s
Ortskoordinate x	m	←	Ortskoordinate x	m
Dichte ρ	$\frac{kg}{m^3}$	←	Dichte ρ	$\frac{kg}{m^3}$
Feuchtekapazität $\frac{\partial w}{\partial h}$	$\frac{kg}{kg}$	←	spezifische Wärmekapazität c	$\frac{Ws}{kg \cdot K}$
Diffusionskoeffizient D_{l+v}	$\frac{kg}{m \cdot s}$	←	Wärmeleitfähigkeit λ	$\frac{Ws}{m \cdot s \cdot K}$
Diffusionsstromdichte g	$\frac{kg}{m^2 \cdot s}$	←	Wärmestromdichte q	$\frac{Ws}{m^2 \cdot s}$
Filmkoeffizient H	$\frac{kg}{m^2 \cdot s}$	←	Wärmeübergangskoeffizient α	$\frac{Ws}{m^2 \cdot s \cdot K}$

Die Simulation in ANSYS erfolgt dabei vollständig in den Einheiten des Wärmetransports, sodass die Übertragung auf den Feuchtetransport erst bei der Auswertung der Ergebnisse berücksichtigt wird.

Für eine robustere Lösung wird die relative Feuchte h folgendermaßen normiert. Die Größe $temp$ wird der Userroutine bei Aufruf von ANSYS übergeben und entspricht der Temperatur bzw. hier der Feuchte zu Beginn des aktuellen Zeitschrittes. Die Werte für $prop(9)$ und $prop(10)$ sind in Kelvin anzugeben.

$$h = \frac{temp}{Temp_max} = \frac{temp}{prop(10)} \tag{54}$$

$$h_1 = \frac{Temp1}{Temp_max} = \frac{prop(9)}{prop(10)} \tag{55}$$

Zur Implementierung des Feuchtetransports in die Userroutine werden die nachfolgend beschriebenen Funktionen definiert. Dabei kann zunächst angegeben werden, ob der Feuchtegehalt volumen- oder massebezogen berücksichtigt werden soll. Wird der Parameter $prop(12)$ mit einem positiven Wert belegt, ist der Feuchtegehalt massebezogen und in kg_W/kg_B anzugeben. Bei einem negativen Wert ist die Einheit des dann volumenbezogenen Feuchtegehalts m_W^3/m_B^3.

3.1.1 Sorptionsisotherme

Die Sorptionsisotherme wird definiert, wie in den Gleichungen (5) bis (14) beschrieben. Zudem wird in der Userroutine explizit die Ableitung von $w(h)$ angegeben, also die Feuchtekapazität $\partial w/\partial h$ definiert. Die einzugebenden Materialparameter sind in der Userroutine den folgenden Parametern zugeordnet.

- $A = prop(2)$ $[-]$ entspricht bei Feuchte $[-]$
- $B = prop(3)$ $[-]$ entspricht bei Feuchte $[-]$
- $C = prop(4)$ $[-]$ entspricht bei Feuchte $[-]$
- $w_{100} = prop(11)$ $[J/kg]$ entspricht bei massebezogener Feuchte $[kg_W/kg_B]$
- $w_{max} = prop(1)$ $[J/kg]$ entspricht bei massebezogener Feuchte $[kg_W/kg_B]$

Zudem kann mittels $prop(12)$ festgelegt werden, ob die Sorptionsisotherme nichtlinear oder bilinear angesetzt werden soll. Eine nichtlineare Sorptionsisotherme wird verwendet, wenn ein Absolutwert von $prop(12)$ größer oder gleich 1,5 ist. Wenn der Absolutwert kleiner als 1,5 ist, setzt sich die Sorptionsisotherme aus zwei linearen Anteilen zusammen.

3.1.2 Feuchte-Diffusionskoeffizient

Der Feuchte-Diffusionskoeffizient wird in der Userroutine als $conductivity$ bezeichnet und kann auf zwei unterschiedliche Weisen errechnet werden. Dazu wird dem Materialparameter $prop(26)$ ein bestimmter Wert zugeordnet, siehe Tabelle 3.

Tabelle 3: Varianten des Feuchte-Diffusionskoeffizienten

Werte von $prop(26)$	**Funktion**
2	**Feuchte-Diffusionskoeffizient nach Medved‘ und Černý [2]:** siehe Kapitel 4.2 Gleichung (73)
ungleich 2	**Feuchte-Diffusionskoeffizienten nach Krus [7]:** für massebezogenen Feuchtegehalt w_M: $cond_M = \rho_B \cdot \frac{\partial w_M}{\partial h} \cdot \tilde{b} \cdot e^{\tilde{c} \cdot w_M(h)} \cdot \frac{1}{Temp_max} + D_v =$ $= dens \cdot \frac{\partial w_M}{\partial h} \cdot prop(5) \cdot e^{\frac{1}{prop(6)} w_M(h)} \cdot \frac{1}{prop(10)} + prop(7)$ für volumenbezogenen Feuchtegehalt w_V: $cond_V = \rho_B \cdot \frac{\partial w_V}{\partial h} \cdot \tilde{b} \cdot e^{\tilde{c} \cdot w_V(h) \cdot \frac{\rho_W}{\rho_B}} \cdot \frac{1}{Temp_max} + D_v \cdot \frac{\rho_B}{\rho_W} =$ $= dens \cdot \frac{\partial w_V}{\partial h} \cdot prop(5) \cdot e^{\frac{1}{prop(6)} w_V(h) \cdot \frac{1000}{dens}} \cdot \frac{1}{prop(10)} + prop(7) \cdot \frac{dens}{1000}$

3.1.3 Diffusionsstromdichte

Die Diffusionsstromdichte $flux$ in den drei Raumrichtungen wird in der Userroutine entsprechend Gleichung (2) berechnet und zusammen mit der Feuchtekapazität und dem Feuchte-Diffusionskoeffizenten an ANSYS zurückgegeben.

$$flux(i) = conductivity \cdot tgrad(i) \tag{56}$$

Die Symbole in Gleichung (56) entsprechen den in der Userroutine verwendeten. Der Vektor $tgrad$ beinhaltet die Gradienten der Temperatur, d. h. hier der relativen Feuchte, zu Beginn des aktuellen Zeitschritts und wird der Userroutine beim Aufruf von ANSYS übergeben.

3.2 Userroutine für Chloridtransport

Die Simulation des Chloridtransports in ANSYS beruht auf der Differentialgleichung von Medved‘ und Černý [2]. Für einen volumenbezogenen Feuchtegehalt kommt diese Differentialgleichung in folgender Form zur Anwendung:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla\left(w_V \cdot D_{Cl} \cdot \nabla C_f\right) + \nabla\left(C_f \cdot \frac{cond_V}{\rho_B} \cdot \nabla h\right) \tag{57}$$

$$\left[\frac{kg_{Cl}}{m_B^3 \cdot s} = \frac{1}{m}\left(\frac{m_W^3}{m_B^3} \cdot \frac{m^2}{s} \cdot \frac{kg_{Cl}}{m_W^3 \cdot m}\right) + \frac{1}{m}\left(\frac{kg_{Cl}}{m_W^3} \cdot \frac{kg_B \cdot m_W^3}{m_B \cdot s \cdot m_B^3} \cdot \frac{m_B^3}{kg_B} \cdot \frac{1}{m}\right)\right]$$

Bei Nutzung des massebezogenen Feuchtegehalts in kg_W/kg_B sieht die Differentialgleichung wie folgt aus:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla\left(w_M \cdot \frac{\rho_B}{\rho_W} \cdot D_{Cl} \cdot \nabla C_f\right) + \nabla\left(C_f \cdot \frac{cond_M}{\rho_W} \cdot \nabla h\right) \tag{58}$$

$$\left[\frac{kg_{Cl}}{m_B^3 \cdot s} = \frac{1}{m}\left(\frac{kg_W}{kg_B} \cdot \frac{kg_B \cdot m_W^3}{m_B^3 \cdot kg_W} \cdot \frac{m^2}{s} \cdot \frac{kg_{Cl}}{m_W^3 \cdot m}\right) + \frac{1}{m}\left(\frac{kg_{Cl}}{m_W^3} \cdot \frac{kg_W \cdot m_W^3}{(m_B \cdot s) \cdot kg_W} \cdot \frac{1}{m}\right)\right]$$

mit	C …	gesamter Chloridgehalt	$[kg_{Cl}/m_B^3]$
	C_f …	freier Chloridgehalt	$[kg_{Cl}/m_W^3]$
	w_V …	volumenbezogener Feuchtegehalt	$[m_W^3/m_B^3]$
	w_M …	massebezogener Feuchtegehalt	$[kg_W/kg_B]$
	h …	relative Feuchte	$[-]$
	D_{Cl} …	Chlorid-Diffusionskoeffizient	$[m^2/s]$
	$cond_V$ …	Feuchte-Diffusionskoeffizient (mit w_V)	$[kg_B/(m_B \cdot s) \cdot m_W^3/m_B^3]$
	$cond_M$ …	Feuchte-Diffusionskoeffizient (mit w_M)	$[kg_W/(m_B \cdot s)]$
	ρ_B …	Dichte des Betons	$[kg_B/m_B^3]$
	ρ_W …	Dichte von Wasser	$[kg_W/m_W^3]$
	t …	Zeit	$[s]$

Zur Bestimmung des neuen Chloridgehalts am Integrationspunkt c wird eine explizite Zeitintegration genutzt. Das bedeutet, dass der Chloridgehalt am Ende des Zeitschritts aus den Zustandsvariablen zu Beginn des Zeitschritts ermittelt wird, siehe Gleichung (59). Die Länge des Zeitschritts ist Δt.

$$C_{i+1} = \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_i \cdot \Delta t \tag{59}$$

Die numerische Differentiation der Funktion P erfolgt gemäß dem Schema für eine mehrdimensionale Wärmeleitungsgleichung nach Hofmann [33]. Die einzelnen Summanden auf der rechten Seite der Gleichung

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial x}\left(F(\xi)\frac{\partial P}{\partial \xi}\right) \tag{60}$$

ergeben sich zu

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(F(\xi)\frac{\partial P}{\partial \xi}\right) = \frac{1}{h}\left(\frac{F_{ma}}{\Delta_a}(P_a - P_c) + \frac{F_{mi}}{\Delta_i}(P_c - P_i)\right) \tag{61}$$

Der Index c verweist dabei auf den aktuell betrachteten Integrationspunkt, für den $\partial P/\partial t$ berechnet werden soll. Der Nachbarintegrationspunkt im eigenen Element wird mit dem Index i und der nächstliegende Integrationspunkt des Nachbarelements mit dem Index a bezeichnet, siehe Abbildung 6.

Der Abstand zwischen dem Rand eines Elements und dem nächstgelegenen Integrationspunkt Δx_{IP} wird für das Element Solid278 mit acht integrationspunkten wie folgt ermittelt, wobei Δx die Elementlänge jedes der beiden Elemente darstellt:

$$\Delta x_{IP} = \frac{1}{2} \cdot \Delta_a = \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \cdot \Delta x \tag{62}$$

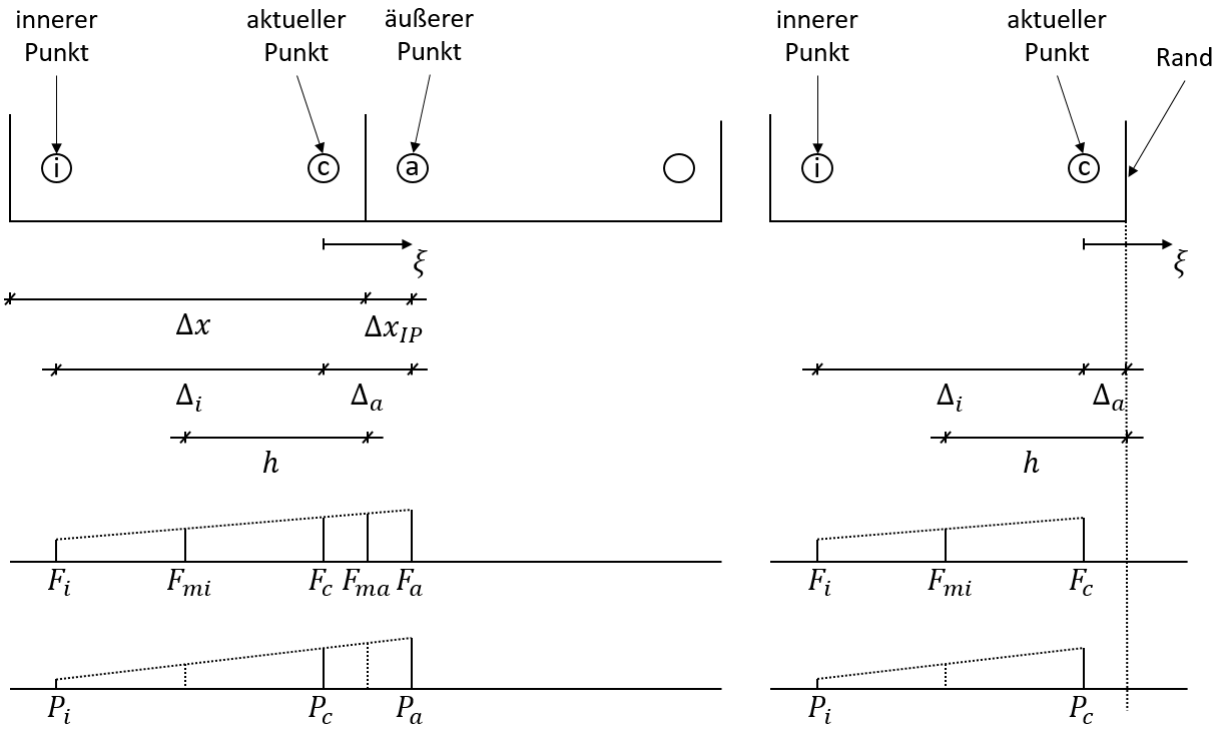


Abbildung 6: Veranschaulichung der Integrationspunkte und Abstände – links Regelfall, rechts Sonderfall: Randelement

Der Abstand h stellt den Abstand der Mittelpunkte zwischen den Integrationspunkten dar. Dabei ist zu beachten, dass sowohl h als auch Δ_i und Δ_a gemäß der Orientierung von ξ vorzeichenbehaftet sind. Demzufolge haben Δ_i und Δ_a in Gleichung (61) verschiedene Vorzeichen. Die Funktionswerte F_{ma} und F_{mi} beschreiben den Mittelwert aus den Werten am aktuellen Integrationspunkt und am jeweiligen Nachbarintegrationspunkt.

$$h = \frac{\Delta_i + \Delta_a}{2} \qquad F_{ma} = \frac{F_c + F_a}{2} \qquad F_{mi} = \frac{F_i + F_c}{2} \tag{63}$$

Das Randelement stellt einen Sonderfall dar, für den sich die Differentiationsformel reduziert auf:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(F(\xi)\frac{\partial P}{\partial \xi}\right) = \frac{1}{h}\left(\frac{F_{mi}}{\Delta_i}(P_c - P_i)\right) \qquad \text{mit} \quad h = \frac{\Delta_i}{2} + \Delta_a \tag{64}$$

Die Differentialgleichungen (57) bzw. (58) bestehen aus zwei Summanden in der Form der Gleichung (60). Demnach kommen den Funktionen F und P die in Tabelle 4 dargestellten Bedeutungen zu:

Tabelle 4: Bedeutungen der Funktionen F und P

	Bedeutung von F		Bedeutung von P	
	mit w_V	mit w_M	mit w_V	mit w_M
1. Summand	$w_V \cdot D_{Cl}$	$w_M \cdot \frac{\rho_B}{\rho_W} \cdot D_{Cl}$	C_f	C_f
2. Summand	$C_f \cdot \frac{cond_V}{\rho_B}$	$C_f \cdot \frac{cond_M}{\rho_W}$	h	h

Da es sich bei der gewählten Vorgehensweise um eine explizite Lösung handelt, muss ein Stabilitätskriterium eingehalten werden. So darf das Zeitinkrement folgende Länge nicht überschreiten:

$$\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{2 \cdot D_{Cl}} \tag{65}$$

Bei Ansatz der Elementlänge Δx wird das zulässige Zeitinkrement erfahrungsgemäß überschätzt. Daher wird empfohlen, die Grenze deutlich zu unterschreiten oder zur Berechnung des Grenzwertes statt der Elementlänge Δx den Abstand Δ_a aus Abbildung 6 zu verwenden.

Bei Nutzung der Userroutine für die Berechnung des Chloridtransports sind folgende Einschränkungen zu berücksichtigen:

- Als Maßeinheiten sind kg, s und m zu verwenden.
- Nur orthogonale Finite-Elemente-Netze dürfen verwendet werden, d. h. alle Elemente müssen quaderförmig und alle Elementkanten parallel zu den Achsen x, y oder z sein.
- Nur lineare Elemente dürfen verwendet werden, d. h. sie müssen genau acht Integrationspunkte haben.
- Es kann nur mit einem einzigen Kern der CPU gerechnet werden.

3.2.1 Chlorid-Diffusionskoeffizient

Der Chlorid-Diffusionskoeffizient kann unterschiedlich definiert sein und verschiedene Abhängigkeiten berücksichtigen, siehe Kapitel 2.2.3. Aus diesem Grund kann in der Userroutine dem Materialparameter $prop(14)$ ein bestimmter Wert zugeordnet werden, um aus verschiedenen Diffusionskoeffizienten auszuwählen, siehe Tabelle 5.

Tabelle 5: Varianten des Chlorid-Diffusionskoeffizienten

Wert von $prop(14)$	**Funktion**
2	**konstanter Chlorid-Diffusionskoeffizient:** $D_{Cl} = prop(15)$
3	**analytische Lösung des Chlorid-Diffusionskoeffizienten nach Medved‘ und Černý [2]:** siehe Kapitel 4.2 Gleichung (74)
4	**zeitabhängiger Diffusionskoeffizient [15]:** $D_{app}(t) = D_{app}(t_0) \cdot \left(\frac{t_0}{t}\right)^{\alpha}$ $= prop(15) \cdot \left(\frac{prop(16)}{t}\right)^{prop(17)}$

5	**Diffusionskoeffizient nach Xi et al. [25] / Ababneh et al. [4]:** für massebezogenen Feuchtegehalt w_M: $D_{Cl} = f_{1,2,4} \cdot \left(1 + \frac{(1-h)^4}{(1-H_c)^4}\right)^{-1} \cdot \left(1 - k_{ion} \cdot \left(C_f \cdot \frac{w_M}{\rho_W}\right)^m\right)$ $= prop(15) \cdot \left(1 + \frac{(1-temp)^4}{\left(1-prop(16)\right)^4}\right)^{-1} \cdot \left(1 - prop(17) \cdot \left(\frac{C_f \cdot w_M}{1000}\right)^{prop(18)}\right)$ für volumenbezogenen Feuchtegehalt w_V: $D_{Cl} = f_{1,2,4} \cdot \left(1 + \frac{(1-h)^4}{(1-H_c)^4}\right)^{-1} \cdot \left(1 - k_{ion} \cdot \left(C_f \cdot \frac{w_V}{\rho_B}\right)^m\right)$ $= prop(15) \cdot \left(1 + \frac{(1-temp)^4}{\left(1-prop(16)\right)^4}\right)^{-1} \cdot \left(1 - prop(17) \cdot \left(\frac{C_f \cdot w_V}{dens}\right)^{prop(18)}\right)$
ungleich 2, 3, 4 oder 5	$D_{Cl} = 2 \cdot 10^{-6}\, m^2/s$

3.2.2 Chlorid-Bindungsisotherme

Auch für die Bindungsisotherme können verschiedene Ansätze genutzt werden, wie in Kapitel 2.2.4 dargestellt. Die entsprechende Funktion wird hier über den Materialparameter $prop(25)$ ausgewählt, siehe Tabelle 6.

Tabelle 6: Varianten der Chlorid-Bindungsisotherme

Wert von $prop(25)$	**Funktion**
3	**lineare Bindungsisotherme:** $C_b = C_f \cdot K_H = C_f \cdot prop(19)$
5	**Freundlich-Bindungsisotherme:** für massebezogenen Feuchtegehalt w_M: $C_b = \tilde{B} \cdot {C_f}^A = \tilde{\tilde{B}} \cdot \rho_B \cdot \left(\frac{C_f \cdot w_M}{\rho_W}\right)^A = prop(20) \cdot dens \cdot \left(\frac{C_f \cdot w_M}{1000}\right)^{prop(19)}$ für volumenbezogenen Feuchtegehalt w_V: $C_b = \tilde{B} \cdot {C_f}^A = \tilde{\tilde{B}} \cdot \rho_B \cdot \left(\frac{C_f \cdot w_V}{\rho_B}\right)^A = prop(20) \cdot dens \cdot \left(\frac{C_f \cdot w_V}{dens}\right)^{prop(19)}$
ungleich 3 oder 5	$C_b = C_f = 0$

3.3 Überprüfung der Objektivität der Simulationsergebnisse

Für eine Berechnung mittels Finite-Elemente-Methode wird der Probekörper in eine endliche Anzahl kleiner Elemente unterteilt. Die Genauigkeit des Ergebnisses hängt dabei von der Feinheit des so entstehenden Netzes ab. Jedoch dürfen die Ergebnisse der numerischen Simulation nicht signifikant von der Wahl der Elementgröße oder des Zeitinkrements abhängig sein. Um diese Objektivität der Ergebnisse zu überprüfen, werden Simulationen mit unterschiedlichen Elementgrößen und Zeitschritten durchgeführt und die Ergebnisse miteinander verglichen.

Die Eingabedaten für die Materialparameter der Simulationen sind in Anhang A.3.1 zusammengestellt. Das maximale Zeitinkrement der Ausgangssimulation betrug $\Delta t = 500\ s$ und ein Element hatte die Länge $\Delta x = 0{,}001\ m$. In den Simulationen wurde die in ANSYS implementierte automatische Zeitschrittsteuerung verwendet. Es ist empfehlenswert, die Simulationen mit einem vergleichsweise kleinen Zeitinkrement, welches vorgegeben werden kann, zu beginnen. Je nach Konvergenzverhalten bei der Simulation des Feuchtetransports wird dann in ANSYS das Zeitinkrement automatisch vergrößert, bis das vorgegebene maximale Zeitinkrement erreicht ist. Theoretisch kann das Zeitinkrement bei entsprechend schlechtem Konvergenzverhalten wieder kleiner werden. Die Simulation des Chloridtransports erfolgt in den gleichen Zeitschritten wie diejenige des Feuchtetransports.

Zunächst soll der Einfluss des Zeitinkrements untersucht werden, indem das maximale Zeitinkrement einerseits auf 5000 s erhöht und anderseits auf 50 s reduziert wird. In Abbildung 7 und Abbildung 8 sind die Feuchte- und Chloridprofile mit unterschiedlichen maximalen Zeitinkrementen nach einem Tag sowie nach 10 und 20 Tagen zu sehen. Lediglich die Vergrößerung des Zeitschritts bewirkt eine leichte Abweichung in den ersten Zentimetern bei den Profilen nach einem Tag. Daraus lässt sich schließen, dass ein kürzerer Zeitschritt gewählt werden sollte, wenn das Profil zum betrachteten Zeitpunkt vergleichsweise steil verläuft, um ein möglichst genaues Profil zu erhalten. Die festgestellte Abweichung stellt aber keine inakzeptable Zeitschrittabhängigkeit des Endergebnisses dar, da sich dieses bei Reduzierung des Zeitinkrements nicht mehr signifikant ändert. Es konnte also die erwartete Zeitschrittkonvergenz nachgewiesen werden.

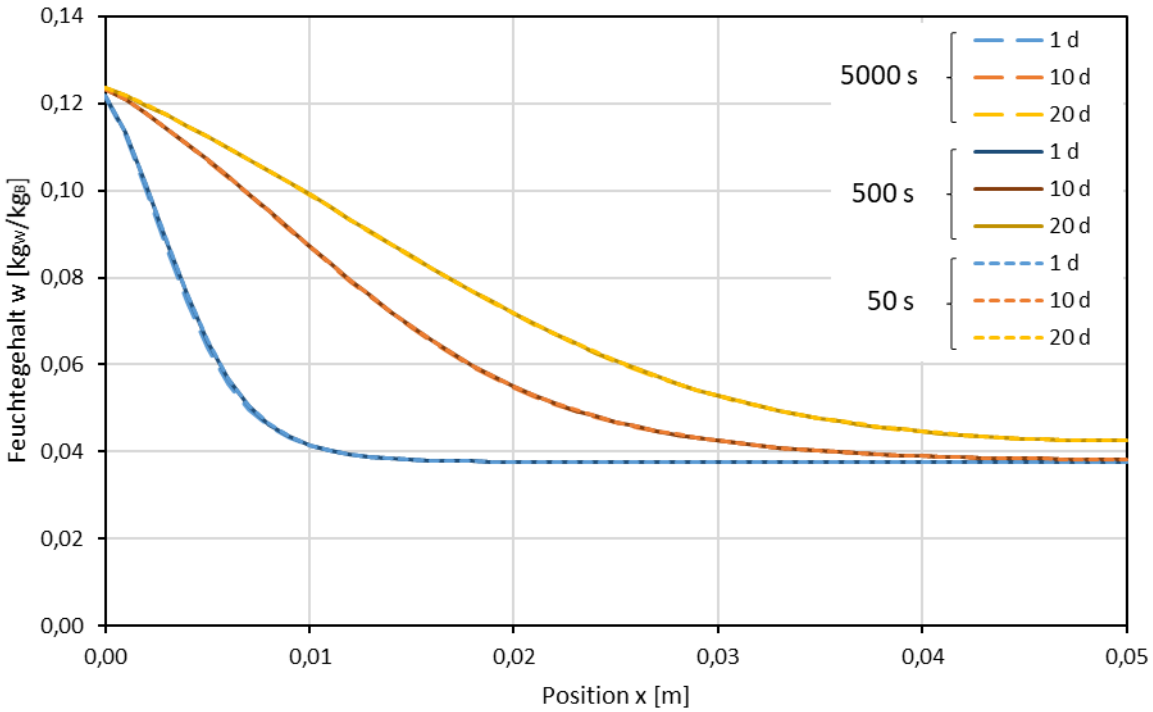


Abbildung 7: Feuchteprofile mit unterschiedlichen Zeitinkrementen

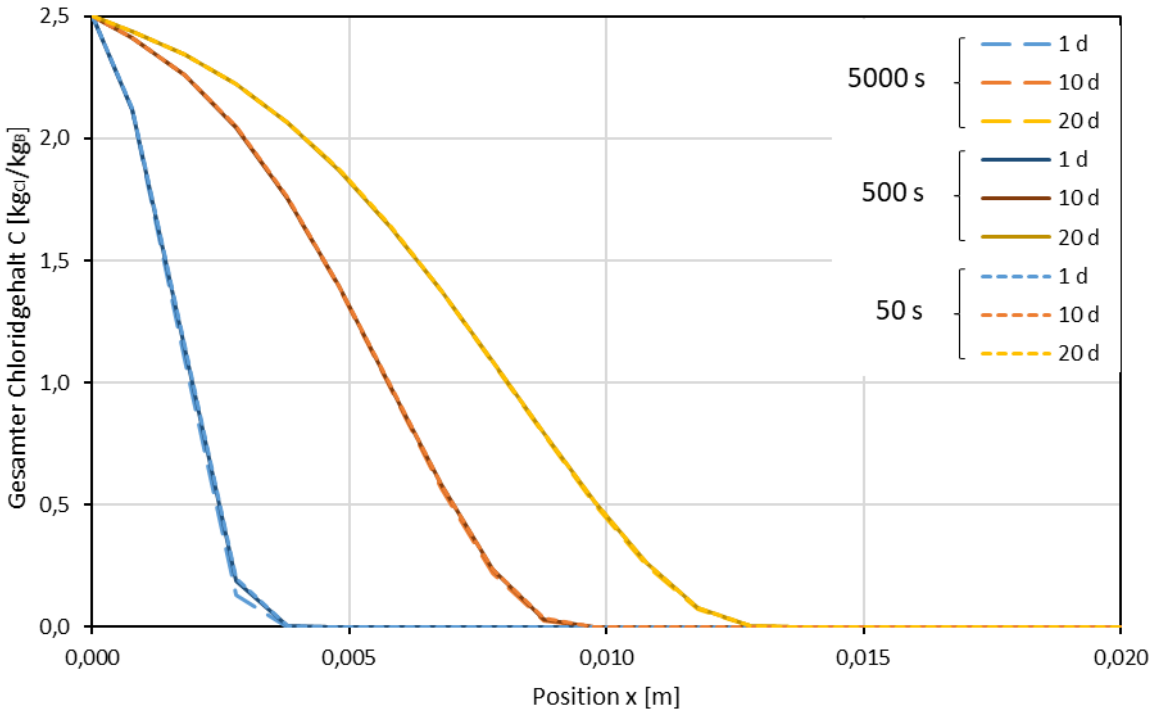


Abbildung 8: Chloridprofile mit unterschiedlichen Zeitinkrementen

Zur Betrachtung der Netzabhängigkeit wird die Elementgröße einerseits auf 0,005 m vergrößert und andererseits auf 0,0005 m verringert. In Abbildung 9 und Abbildung 10 sind die Abweichungen vor allem bei einer Elementgröße von 0,005 m deutlich zu sehen. Auch hier lässt sich erkennen, dass bei steilen Verläufen ein feineres Netz gewählt werden sollte, während das grobe Netz für den flacheren Verlauf des Feuchteprofils nach 20 Tagen ausreichend ist. Ein weiteres Indiz für ein zu grobes Netz

ist ein eckiger Verlauf des Profils. Mit Verfeinerung des Netzes konvergieren die Ergebnisse erwartungsgemäß und ab einer Elementgröße von 1 mm können sie im vorliegenden Fall als objektiv betrachtet werden.

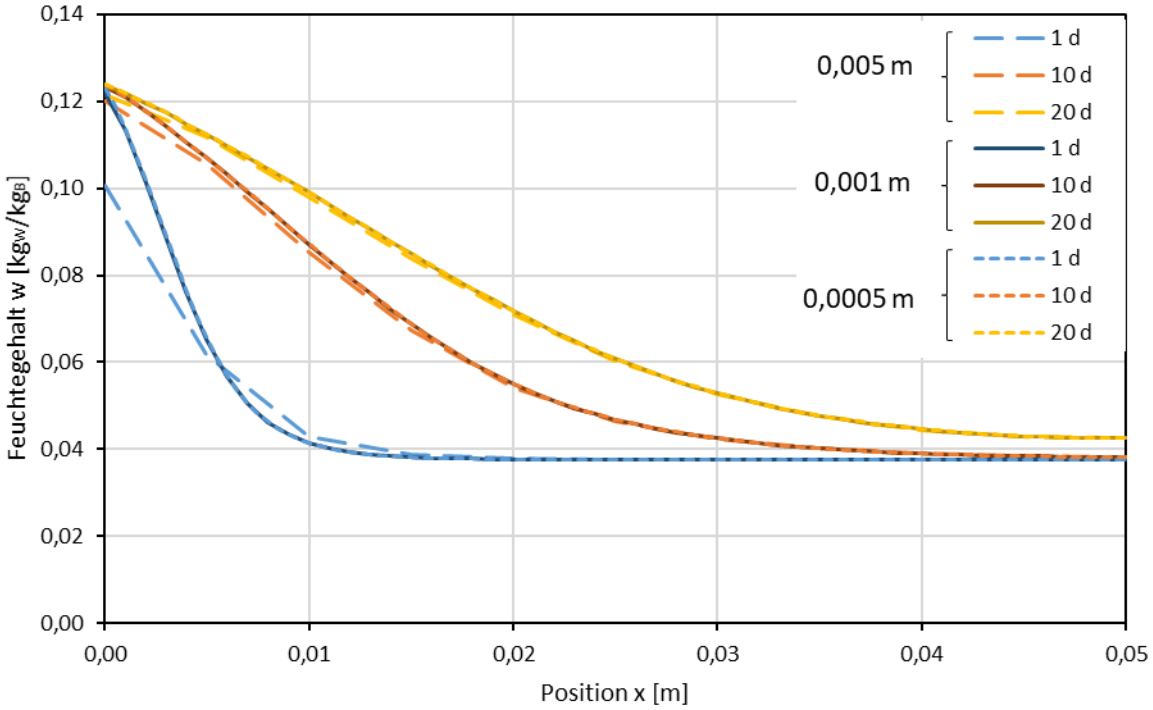


Abbildung 9: Feuchteprofile mit unterschiedlichen Elementgrößen

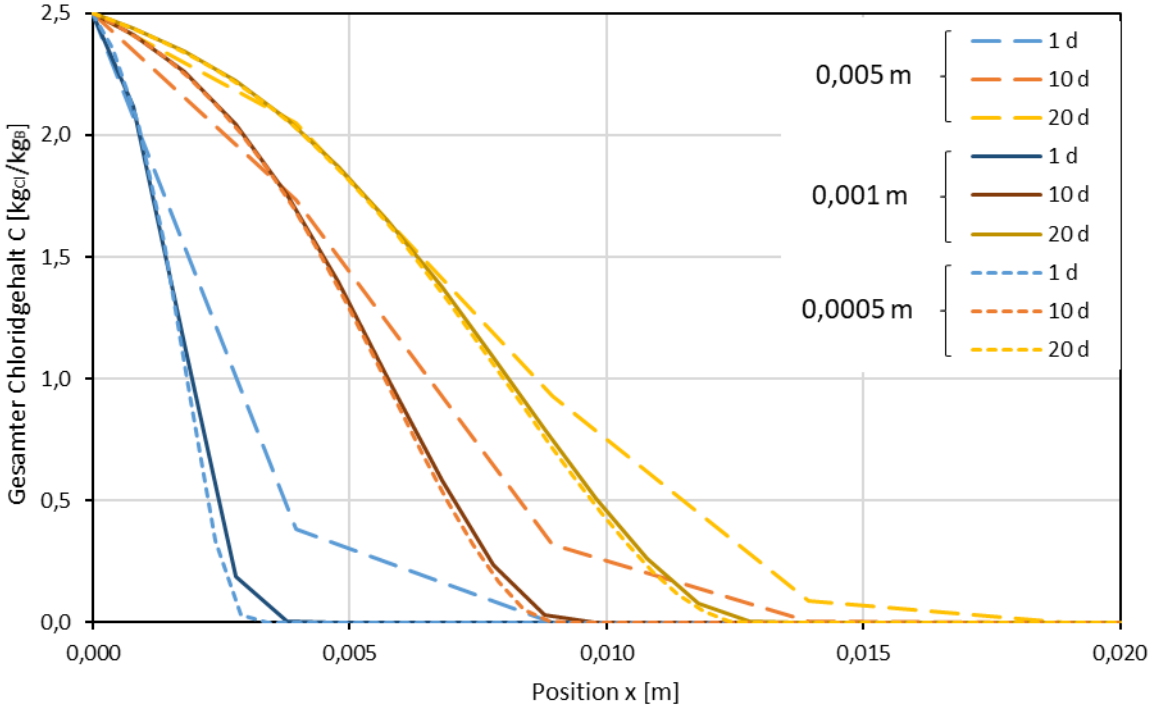


Abbildung 10: Chloridprofile mit unterschiedlichen Elementgrößen

3.4 Einfluss der Konvergenzkriterien

Da als Analyse-System in ANSYS die instationäre thermische Analyse genutzt wird, sind auch die Konvergenzkriterien dafür ausgelegt. Um geeignete Kriterien für diese Simulationen zu finden, werden verschiedene Varianten ausprobiert.

Das Kriterium *Heat Convergence* ist standardmäßig auf *Program Controlled* eingestellt, wird also automatisch durch ANSYS festgelegt. Die manuelle Einstellung auf eine *Minimum Reference* von $10^{-6}\ W$ und $10^{-14}\ W$ hatte keine Auswirkung auf das Ergebnis und auch in der Rechenzeit konnten nur minimale Unterschiede festgestellt werden. Aus diesem Grund wird das *Heat Criterion* in den weiteren Berechnungen bei der Einstellung *Program Controlled* belassen.

Das bedeutendere Kriterium ist die *Temperature Convergence*. Mit Erhöhung des Grenzwerts verändern sich die Ergebnisse minimal und die Rechendauer erhöht sich. Als sinnvoller Wert wird ein *Input Value* von $10^{-4}\ K$ erachtet, mit dem die Simulation in ANSYS gut konvergiert und die Rechenzeit akzeptabel ist.

Das Einschalten der Option *Line Search* führt zu keiner merklichen Veränderung der Ergebnisse. Da sich aber die Rechenzeit fast verdoppelt, wird die Eingabe *Program Controlled* beibehalten, was dem Ausschalten der Option *Line Search* entspricht.

Die *Nonlinear Formulation* wird ebenfalls in der Einstellung *Program Controlled* belassen, wodurch *Full* gewählt wird.

4 Validierung der Simulationsergebnisse

Um die Userroutine und die gewählte Methode zur numerischen Lösung der Differentialgleichungen zu validieren, werden die mit ANSYS berechneten Feuchte- und Chloridprofile mit Daten aus Veröffentlichungen verglichen.

4.1 Gesättigter Probekörper

Zunächst wird ein gesättigter Probekörper angenommen, sodass der Chloridtransport allein über den Ansatz der Chlorid-Diffusion erfolgt. Dazu kann das in Kapitel 4.1 beschriebene zweite Fick'sche Gesetz nach Gleichung (30) angewendet werden:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{Cl}\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\right) \tag{30}$$

Für die Simulation mit ANSYS wird die Differentialgleichung des Chloridtransports für volumenbezogenen Feuchtegehalt ausgewählt:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla\left(w_V \cdot D_{C_f} \cdot \nabla C_f\right) + \nabla\left(C_f \cdot \frac{cond_V}{\rho_B} \cdot \nabla h\right) \tag{57}$$

Um die Differentialgleichung für den Chloridtransport nach Gleichung (30) zu erhalten, müssen die Anfangs- sowie Randbedingungen für den Feuchtegehalt zu $h = 1{,}0$ gesetzt werden. Da der Feuchtegehalt w_V bei diesem Ansatz keinen Einfluss haben soll, wird $w_{max} = 1{,}0$ eingegeben. Weitere Angaben zum Feuchtetransport sind nicht notwendig. Die entsprechenden Parameter können auf 1 gesetzt werden. Aufgrund des konstanten Feuchtegehalts fällt der zweite Teil der Differentialgleichung weg. Um C mit C_f gleichzusetzen und somit die Bindung von Chloriden nicht zu berücksichtigen, wird ein linearer Ansatz der Bindungsisothermen gewählt und $K_H = 0$ gesetzt. Eine Übersicht der in ANSYS eingegebenen Materialparameter ist Anhang A.3.2 zu entnehmen.

Im RILEM-Kurs „Computational Methods for Building Physics and Construction Materials" [34] vom 12. bis 16. April 2021 wurden eine analytische und eine numerische Lösung der Differentialgleichung nach Gleichung (30) vorgestellt und Chloridprofile mit Hilfe von Excel-Tabellen ermittelt. Diese Daten werden nun mit den mit ANSYS erhaltenen Profilen verglichen.

Bei dem im RILEM-Kurs [34] vorgestellten Beispiel handelt es sich um eine 10 cm dicke Betonwand. Diese enthält zunächst kein Chlorid ($C_{ini} = 0{,}0\ kg_{Cl}/m_B^3$) und wird dann einseitig mit Chlorid ($C_s = 3{,}0\ kg_{Cl}/m_B^3$) beaufschlagt.

Die analytische Lösung aus dem RILEM-Kurs beruht auf dem Ansatz nach Gleichung (31).

$$C(x,t) = C_s - (C_s - C_{ini}) \cdot \left[\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D_{Cl} \cdot t}}\right)\right] \tag{31}$$

Für die numerische Lösung wird das explizite Euler-Verfahren genutzt:

$$C_c^{i+1} = C_c^i + \frac{D_{Cl} \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \cdot \left[C_{c-1}^i - 2C_c^i + C_{c+1}^i\right] \tag{66}$$

Dabei beschreiben der Index c das betrachtete Element und *c-1* beziehungsweise *c+1* dessen Nachbarelemente. Der Index i verweist auf den aktuellen und *i+1* auf den nächsten Zeitschritt.

4.1.1 Fall 1 – Konstanter Chlorid-Diffusionskoeffizient

Zunächst wird der Vergleich der drei Berechnungsmethoden mit einem konstanten Chlorid-Diffusionskoeffizienten durchgeführt. In ANSYS geschieht dies durch Einstellung des zweiten Falls des Chlorid-Diffusionskoeffizienten, $prop(14) = 2$ gemäß Tabelle 5.

In allen Berechnungen liegt die Elementgröße Δx bei 5 mm. Bei der analytischen Lösung muss kein Zeitschritt vorgegeben werden; bei der numerischen Lösung sowie in ANSYS wird dieser durch das Stabiltätskriterium nach Gleichung (65) definiert. Während für die numerische Lösung in der Gleichung (67) die Elementlänge Δx Berücksichtigung findet, wird zur Berechnung des Grenzwerts für die Simulation in ANSYS in Gleichung (68) Δ_a gemäß Abbildung 6 angesetzt.

$$\Delta t_{numerisch} = 1{,}0 \cdot 10^7\ s < \frac{\Delta x^2}{2 \cdot D_{cl}} = \frac{0{,}005^2}{2 \cdot 1{,}0 \cdot 10^{-12}} = 1{,}25 \cdot 10^7\ s \tag{67}$$

$$\Delta t_{ANSYS} = 1{,}0 \cdot 10^6\ s < \frac{\Delta_a^2}{2 \cdot D_{cl}} = \frac{0{,}002113^2}{2 \cdot 1{,}0 \cdot 10^{-12}} = 2{,}23 \cdot 10^6\ s \tag{68}$$

Abbildung 11 zeigt die Chloridprofile nach 25, 50 und 100 Jahren aus der analytischen und numerischen Berechnung sowie aus der Simulation mit ANSYS. Bei der Auswertung der Ergebnisse aus ANSYS ist zu beachten, dass der jeweilige Chloridgehalt im Integrationspunkt ermittelt wird. Dieser entspricht nicht dem Rand des Elements, sodass die Ergebnisse um den Abstand zwischen Elementrand und Integrationspunkt verschoben werden müssen. In der Darstellung in Abbildung 11 bis Abbildung 14 ist die folgende Verschiebung in Richtung x, d. h. in Richtung der Oberflächennormalen bereits berücksichtigt.

$$\Delta x_{IP} = \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \cdot \Delta x = \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \cdot 0{,}005\ m = 1{,}057 \cdot 10^{-3}\ m \tag{62}$$

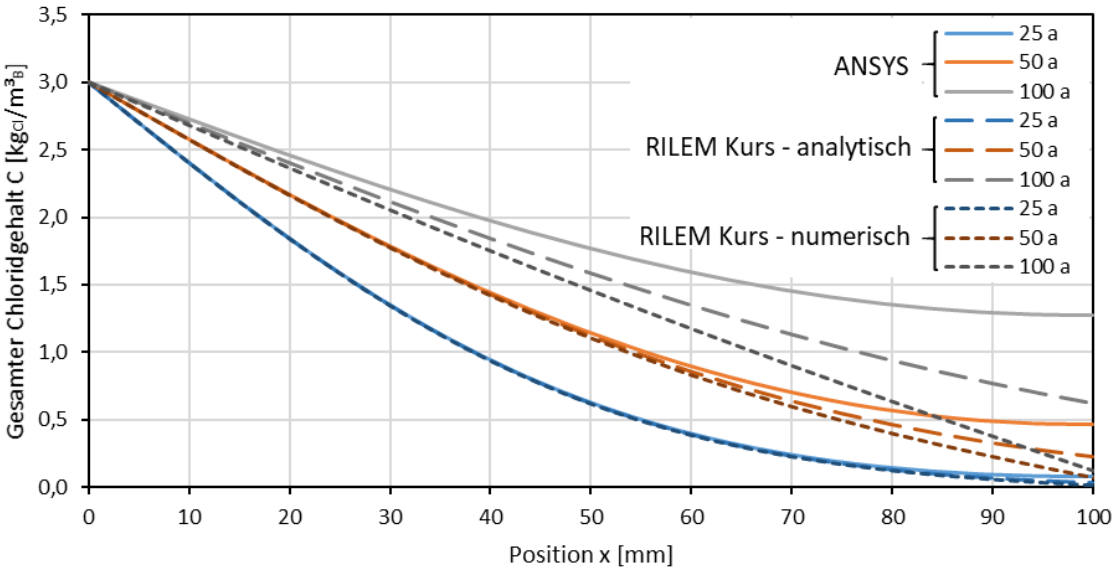


Abbildung 11: Fall 1 – Chloridprofile mit Berücksichtigung nur einer Randbedingung für eine 10 cm dicke Wand

Bei der analytischen Lösung kann nur eine Randbedingung auf einer der beiden Oberflächen der Betonwand berücksichtigt werden. Das Ergebnis der analytischen Berechnung stellt somit den Fall einer unendlich ausgedehnten Wand dar, von der nur die ersten 10 cm betrachtet werden. Sowohl in der numerischen Lösung als auch in der Simulation mit ANSYS ist auch auf der anderen Seite der Wand eine Angabe zur Randbedingung zu machen, welche sich auf das entstehende Profil auswirkt.

Bei der numerischen Berechnung über das explizite Euler-Verfahren beträgt die Randbedingung auf der gegenüberliegenden Seite $C_s = 0{,}0\ kg_{Cl}/m_B^3$. In ANSYS wird durch das Fehlen einer Angabe zum Randwert an dieser Seite angenommen, dass das Chlorid dort nicht austreten kann und sich ansammelt. Da das Chlorid nach den betrachteten Zeiten aber bis zur anderen Seite der 10 cm dicken Betonwand gelangt, stimmen die Ergebnisse beider numerischen Berechnungen mit den jeweils vorgegebenen Randbedingungen nicht mit den Ergebnissen für eine unendlich ausgedehnte Wand überein. Eine bessere Anpassung kann erreicht werden, wenn die Dicke des Bauteils vergrößert wird. Bei ausreichender Bauteildicke hat die Randbedingung auf der rechten Seite keinen Einfluss mehr auf das Chloridprofil in den ersten zehn Zentimetern. Die in Abbildung 12 dargestellten Chloridprofile wurden für eine 50 cm dicke Betonwand ermittelt.

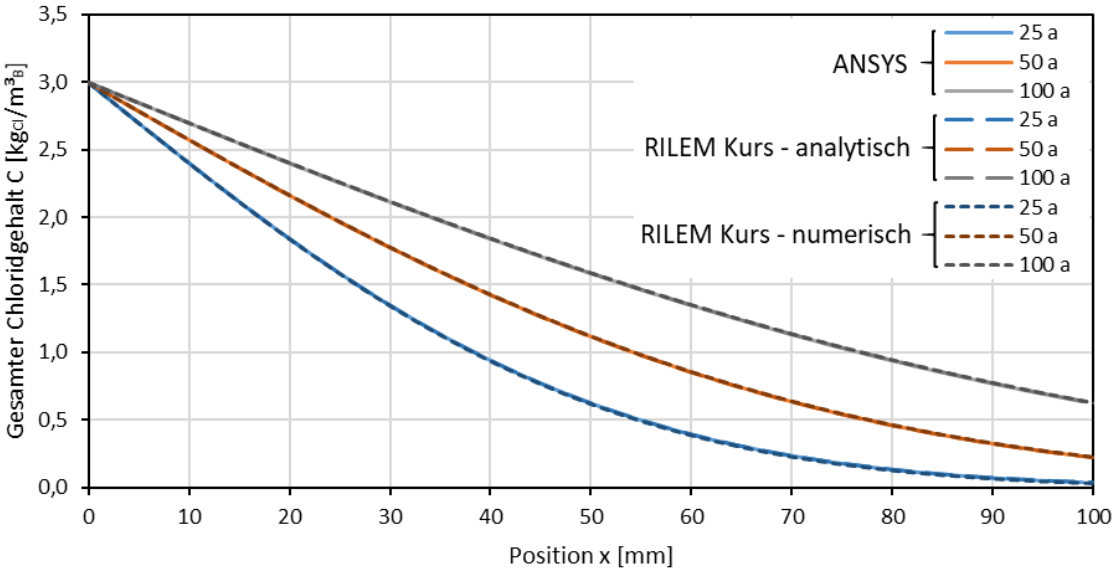


Abbildung 12: Fall 1 – Chloridprofile mit Berücksichtigung nur einer Randbedingung für eine unendlich dicke Wand

Der Fall, dass eine zweite Randbedingung vorgegeben ist, kann ebenfalls in der Userroutine für ANSYS berücksichtigt werden. Um den Programmieraufwand gering zu halten, wird die zusätzliche Randbedingung direkt in die Userroutine geschrieben. Mit der Vorgabe von $C_s = 0{,}0\ kg_{Cl}/m_B^3$ an der Stelle $x = 106{,}05\ mm$ ergeben sich die in Abbildung 13 dargestellten Chloridprofile.

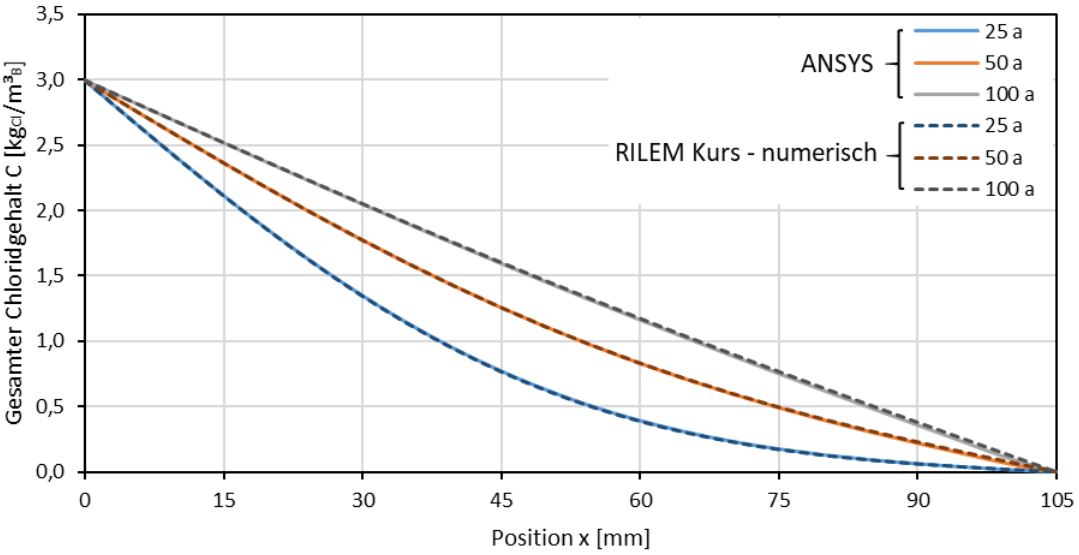


Abbildung 13: Fall 1 – Chloridprofile mit Berücksichtigung zweier Randbedingungen für eine 10 cm dicke Wand

Die leichte Verschiebung am rechten Rand des Bauteils resultiert aus einer Ungenauigkeit bei der Angabe der Randbedingung. Bei der numerischen Lösung gemäß RILEM-Kurs [34] wird die zusätzliche Randbedingung bei $105\ mm$ angegeben. Mit Berücksichtigung der Verschiebung zwischen Elementrand und Integrationspunkt befindet sich die Randbedingung in ANSYS bei $104{,}98\ mm$, woraus die genannte Abweichung entsteht. Bei Wahl eines feineren Netzes kann der Unterschied zwischen den beiden Lösungen verringert werden.

4.1.2 Fall 2 – Zeitabhängiger Chlorid-Diffusionskoeffizient

In einem zweiten Schritt kommt ein zeitabhängiger Chlorid-Diffusionskoeffizient nach Gleichung (39) zur Anwendung. Dazu wird in ANSYS der vierte Fall des Chlorid-Diffusionskoeffizienten gewählt, $prop(14) = 6$ gemäß Tabelle 5.

$$D_{app}(t) = D_{app}(t_0)\left(\frac{t_0}{t}\right)^{\alpha} = 1{,}0 \cdot 10^{-12} \cdot \left(\frac{2419200\ s}{t}\right)^{0{,}3} \tag{39}$$

Da die analytische Lösung nach Gleichung (31) nur näherungsweise für einen zeitabhängigen Chlorid-Diffusionskoeffizienten gilt, wird die Lösung der Differentialgleichung nach Gaal [16] verwendet.

$$C(x,t) = C_s - (C_s - C_i) \cdot \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{\frac{D_{app}(t_0)}{1-\alpha} \cdot \left(\frac{t_0}{t}\right)^{\alpha} \cdot t}}\right)\right] \tag{32}$$

Abbildung 14 zeigt die ermittelten Chloridprofile nach 25, 50 und 100 Jahren für alle drei Berechnungsmethoden bei Berücksichtigung des zeitabhängigen Chlorid-Diffusionskoeffizienten. Bei den numerischen Lösungen mit dem Euler-Verfahren beziehungsweise mit ANSYS ist erneut eine Probekörperlänge von 50 cm sowie die oben genannten Zeitschrittweiten berücksichtigt. Damit lassen sich sehr gute Übereinstimmungen erreichen.

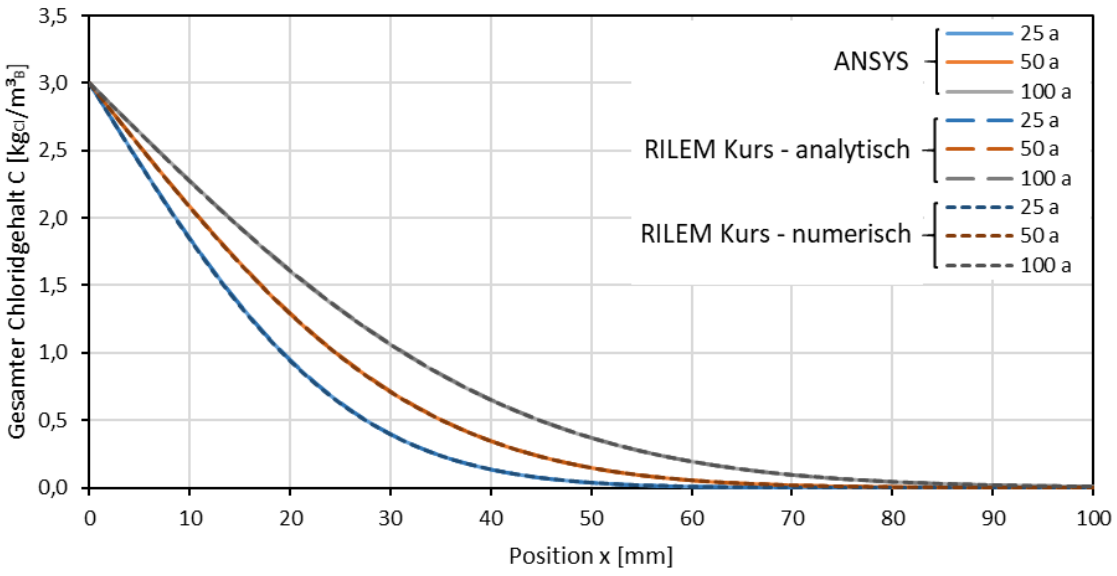


Abbildung 14: Fall 2 – Chloridprofile mit Berücksichtigung eines zeitlich veränderlichen Chlorid-Diffusionskoeffizienten

4.2 Ungesättigter Probekörper

Um die Userroutine unter Berücksichtigung der gekoppelten Transportprozesse zu überprüfen, erfolgen Simulationen für einen ungesättigten Probekörper. Diese so ermittelten Ergebnisse werden anschließend mit den Daten aus einer Publikation von Medved‘ und Černý [2] verglichen.

Der Vergleich zwischen der Simulation mit ANSYS und der analytischen Lösung aus Medved‘ und Černý [2] erfolgt anhand von Feuchte- und Chloridprofilen zu verschiedenen Zeitpunkten. Über die nachfolgend dargestellten Gleichungen werden der Wassergehalt und der gesamte wie auch der freie Chloridgehalt jeweils nach 0,01 s, 0,1 s, 1 s, 5 s, 10 s, 25 s und 50 s analytisch ermittelt.

$$w(\eta) = 0 + 0{,}1285\ erfc\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 440 \cdot (\eta - 6{,}41 \cdot 10^{-4})\right] \tag{69}$$

$$C(\eta) = 0 + 1{,}805\ erfc\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 3670 \cdot (\eta - 1{,}0 \cdot 10^{-4})\right] \tag{70}$$

$$C_f(\eta) = 0 + 0{,}67\ erfc\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 3680 \cdot (\eta - 1{,}1 \cdot 10^{-4})\right] \tag{71}$$

mit $\eta = x/\sqrt{t}$

$erfc$ komplementäre Fehlerfunktion

Zu den gleichen Zeiten werden diese Profile auch mit ANSYS berechnet. Als Anfangs- und Randbedingungen werden nachfolgende Werte angesetzt.

Anfangsbedingungen: $h_{ini} = 0{,}0$

$C_{ini} = 0{,}0 \frac{kg_{Cl}}{m_B^3}$

Randbedingungen: $h_s = 1{,}0$

$C_s = 0 + 1{,}805\ erfc\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 3670 \cdot (0 - 1{,}0 \cdot 10^{-4})\right] = 2{,}4448 \frac{kg_{Cl}}{m_B^3}$

Im Unterschied zum in ANSYS verwendeten Ansatz nach Krus [7] wird in der Veröffentlichung von Medved‘ und Černý [2] bei der Berechnung des Feuchtetransports nicht die relative Feuchte h, sondern der Feuchtegehalt w nach der Zeit t abgeleitet. Für die Überführung der Differentialgleichung von Medved‘ und Černý [2] in diejenige von Krus muss der Dampftransport D_v zu Null gesetzt werden, sodass $\frac{\partial w}{\partial h}\frac{\partial h}{\partial t}$ zu $\frac{\partial w}{\partial t}$ zusammengefasst werden kann. Demnach findet die Sorptionsisotherme keine Berücksichtigung und der Verlauf dieser ist nicht relevant. In ANSYS wird die Sorptionsisotherme in diesen Simulationen nur verwendet, um die Anfangs- und Randbedingungen von der vorgegebenen relative Feuchte h in einen Feuchtegehalt w umzurechnen. Dazu wird eine lineare Sorptionsisotherme gewählt. Die Steigung der

Sorptionsisotherme ergibt sich aus Gleichung (69), sodass mit der Randbedingung $h_s = 1{,}0$ ein Feuchtegehalt von $w(\eta = 0) = 0{,}164\, kg_W/kg_B$ ermittelt werden kann.

$$w(h) = 0{,}164 \cdot h \tag{72}$$

Um eine gute Übereinstimmung zu ermöglichen, werden für beide Diffusionskoeffizienten die in Medved‘ und Černý [2] beschriebenen Ansätze verwendet. Für den Feuchte-Diffusionskoeffizienten ist eine Anpassung notwendig, damit dieser analog zum Feuchte-Diffusionskoeffizienten nach Krus [7] aufgebaut ist.

$$cond_V = \rho_B \cdot \frac{\partial w_V}{\partial h} \cdot D_l(w_V) = \rho_B \cdot \frac{\partial w_V}{\partial h} \cdot \left(\frac{1}{\pi \cdot 440^2} + \frac{6{,}41 \cdot 10^{-4}}{2 \cdot 440} \cdot \frac{w_V - 0}{0{,}1285} \cdot e^{E_w^2} \right) \tag{73}$$

mit $E_w = erfc^{-1}((w_V - 0)/0{,}1285)$

Der Ansatz für den Chlorid-Diffusionskoeffizienten erfolgt gemäß Gleichung (74):

$$D_{Cl} = \frac{\frac{1{,}805}{3670} \cdot \left(2e^{-N_f} + \pi \cdot 3670 \cdot 1 \cdot 10^{-4} \cdot erfcN_f\right) - \frac{0{,}1285}{440} \cdot C_f \cdot \left(2e^{-M_f^2} + \pi \cdot 440 \cdot 6{,}41 \cdot 10^{-4} \cdot erfcM_f\right)}{2 \cdot \pi \cdot 3680 \cdot 0{,}67 \cdot (0 + 0{,}1285 \cdot erfcM_f) \cdot e^{-E_f^2}} \tag{74}$$

mit $E_f = erfc^{-1}\big((C_f - 0)/0{,}67\big)$

$$M_f = \frac{440}{3680} \cdot E_f + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 440 \cdot (1{,}1 \cdot 10^{-4} - 6{,}41 \cdot 10^{-4})$$

$$N_f = \frac{3670}{3680} \cdot E_f + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 3670 \cdot (1{,}1 \cdot 10^{-4} - 1{,}0 \cdot 10^{-4})$$

Die in den Gleichungen (73) und (74) vorhandenen Zahlenwerte entstammen den experimentellen Daten aus [2] und werden nur leicht angepasst, um kürzere Rechenzeiten zu erhalten. Die Bindungsisotherme ist gemäß [2] linear und der Henry-Koeffizient beträgt $K_H = 2{,}43$. Anhang A.3.3 enthält eine Zusammenstellung der in ANSYS eingegebenen Materialparameter.

Abbildung 15 bis Abbildung 17 zeigen den Vergleich der beiden Berechnungen. Die Simulation wird für ein $0{,}02\, m$ langes Bauteil durchgeführt, sodass die eindringende Feuchte nach $25\, s$ die gegenüberliegende Seite erreicht. Da in ANSYS dort keine Randbedingung angegeben ist, kann die Feuchte nicht austreten und sammelt sich an. Damit ist die Abweichung der Chloridprofile aus ANSYS zu den Chloridprofilen aus der analytischen Berechnung nach Medved‘ und Černý [2] zu den Zeiten $25\, s$ und $50\, s$ zu erklären. Zu den übrigen Zeiten wird eine sehr gute Übereinstimmung erreicht.

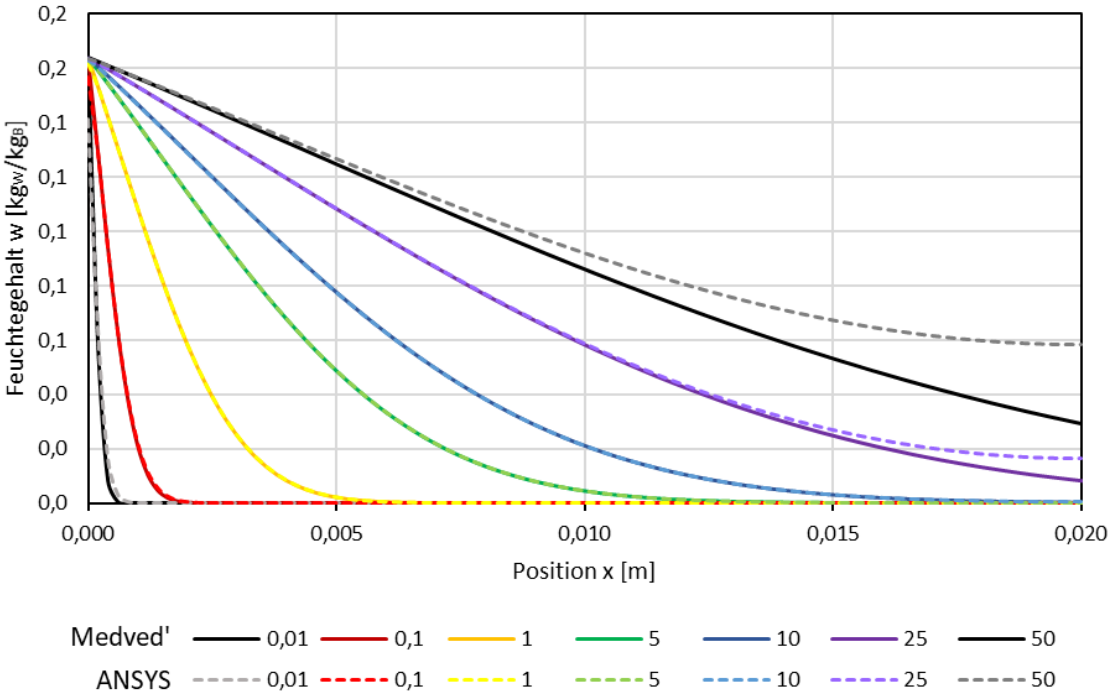


Abbildung 15: Gegenüberstellung der Profile des Feuchtegehalts w gemäß Medved' und Černý [2] und aus ANSYS

Sowohl bei der Gegenüberstellung des gesamten Chloridgehalts C in Abbildung 16 als auch des freien Chloridgehalts C_f in Abbildung 17 gibt es leichte Abweichungen. Die Tatsache, dass die Feuchte den gegenüberliegenden Rand erreicht, ist dafür nicht die Ursache, da das Chlorid nicht so weit in das Bauteil eindringt und der Feuchtegehalt im für das Chlorid relevanten Bereich sehr gut übereinstimmt. Die Abweichung des Chloridgehalts wird stattdessen auf gerundete Angaben der Werte in [2] zurückgeführt.

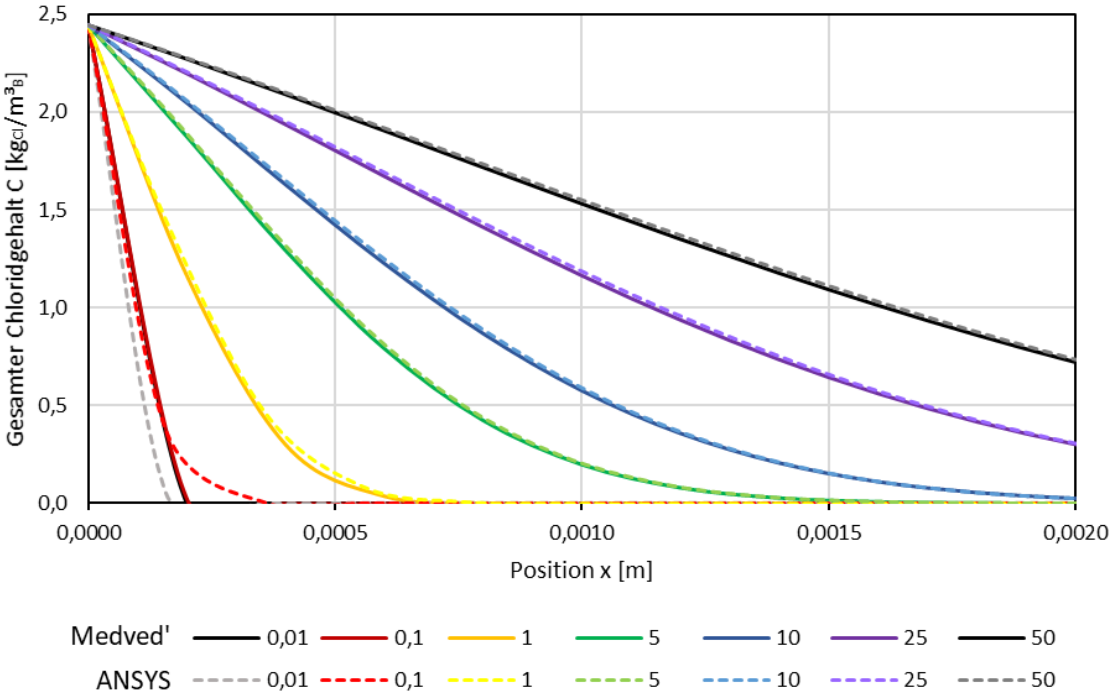


Abbildung 16: Gegenüberstellung der Profile des Chloridgehalts C gemäß Medved' und Černý und aus ANSYS

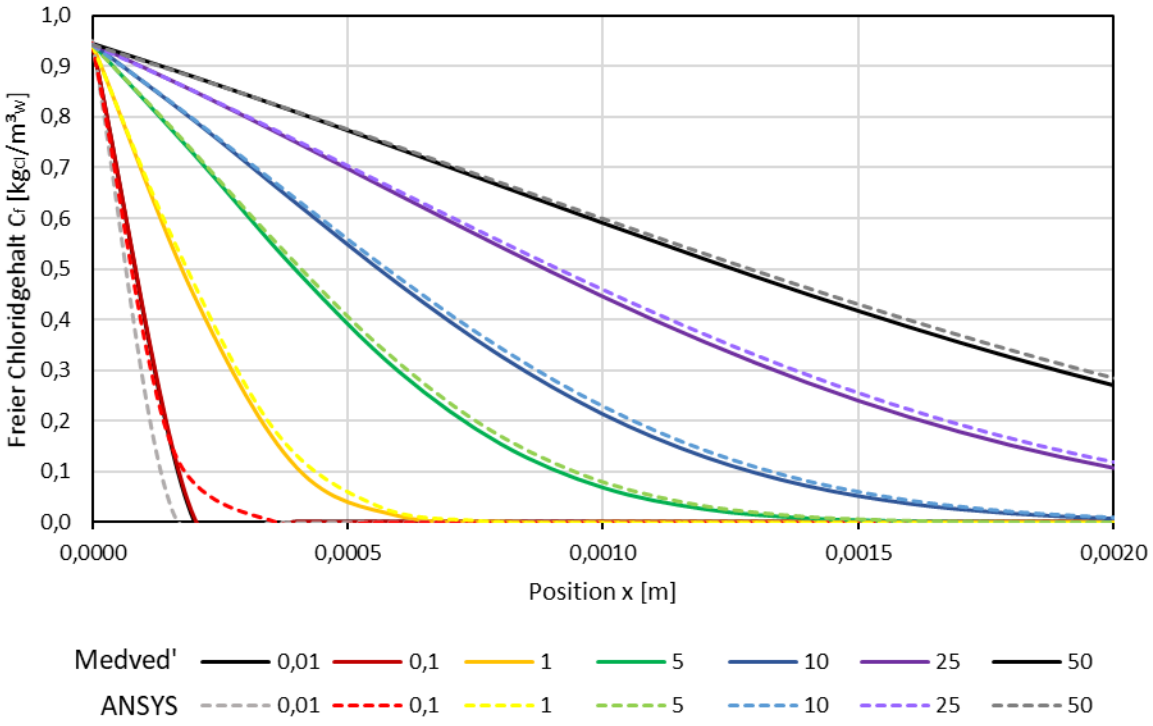


Abbildung 17: Gegenüberstellung der Profile des freien Chloridgehalts C_f gemäß Medved' und Černý und aus ANSYS

Da die geringen Abweichungen erklärt werden können, wird die gewählte numerische Methode für die Berechnungen als geeignet betrachtet.

4.3 Weitere Überprüfungen

Um die hier angewandte numerische Lösungsmethode mehrfach zu validieren, werden noch weitere experimentelle beziehungsweise Berechnungsergebnisse aus Veröffentlichungen mit den Simulationen unter Verwendung von ANSYS verglichen. Aufgrund von fehlenden Angaben in den Veröffentlichungen wird bei diesen Vergleichen jedoch keine gute Anpassung erreicht. Dennoch soll das Vorgehen im Folgenden beschrieben werden.

4.3.1 Experimente von Wittmann

In [24, 35, 36] wird ein Experiment vorgestellt, bei dem das Eindringen von Chlorid in Beton in Kombination mit anderen den Beton schädigenden Einwirkungen untersucht wurde. Aus den dort beschrieben Betonarten wird Beton B ausgewählt, der einen w/z-Wert von 0,5 hat. Der Probekörper mit den Abmessungen 100 x 100 x 100 mm wurde nach einem Tag aus der Stahlform ausgeschalt und bis zum Alter von 7 Tagen bei einer Temperatur von 20 ± 3 °C und einer relativen Feuchte von etwa 98 % gelagert. Anschließend erfolgte eine Lagerung unter Laborbedingungen bei 20 ± 3 °C und 50 % relativer Luftfeuchte.

Zur Bestimmung des materialspezifischen Wasseraufnahmekoeffizienten A aus dem Wurzel-t-Gesetz wurden die Betonwürfel halbiert und getrocknet. Anschließend wurden sie, wie in Abbildung 18 zu sehen, mit einer Seite in Wasser gelegt und nach 30 Minuten sowie einer, zwei, vier, acht und 24 Stunden gewogen. Der so ermittelte materialspezifische Wasseraufnahmekoeffizient A für den unbehandelten Beton B beträgt $0{,}254\,kg/(m^2 \cdot \sqrt{h})$ [24]. In [35] ist dieser Wert jedoch mit $57{,}7\,g/(m^2 \cdot \sqrt{h})$ angegeben. Eine Begründung dieses Unterschieds wurde in den Veröffentlichungen nicht gegeben.

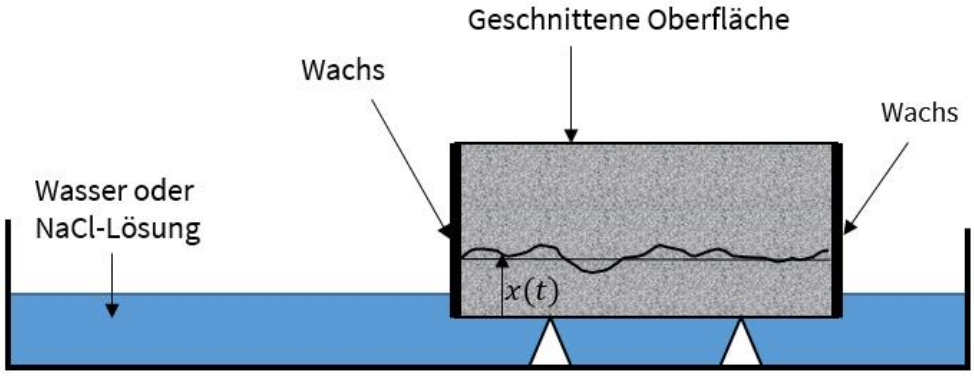
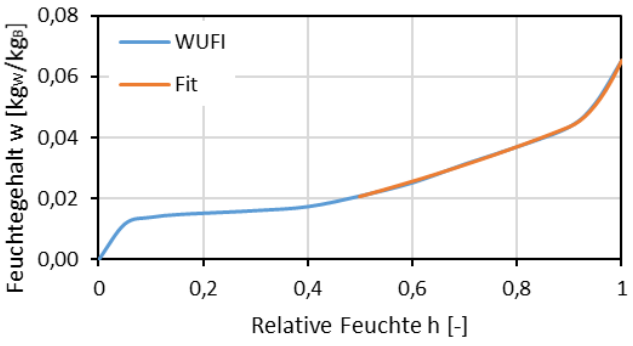


Abbildung 18: Schematische Darstellung der Experimente von Wittmann et al. nach [35]

Wie in Kapitel 2.1 bereits erwähnt, wird das kapillare Saugen auch im Ansatz des Feuchte-Diffusionskoeffizienten berücksichtigt. Dieser wird daher so gewählt, dass sich ein linearer Zusammenhang zwischen der aufnehmbaren Flüssigkeitsmenge m und der Wurzel aus der Zeit mit dem Anstieg $A = 0{,}254\,kg/(m^2 \cdot \sqrt{h})$ ergibt. Dazu ist es zunächst notwendig, die Sorptionsisotherme zu kennen. Da in den Veröffentlichungen dazu keine Angaben zu finden waren, wurden die Daten der Sorptionsisotherme für einen Beton mit einem w/z-Wert von 0,5 aus dem Berechnungsprogramm WUFI genutzt. Die entsprechenden in ANSYS einzugebenden Materialparameter sind in Tabelle 7 angegeben.

Tabelle 7: Parameter der in ANSYS verwendeten Sorptionsisotherme

w_{max}	$[Ws/kg]$	0,065217
A	$[-]$	0,2595
B	$[-]$	-0,0197
C	$[-]$	0,7602
h_1	$[-]$	0,9
w_{100}	$[Ws/kg]$	0,050746



Die verwendeten Parameter für den Feuchte-Diffusionskoeffizienten sind Tabelle 8 zusammengestellt.

Tabelle 8: Parameter des in ANSYS verwendeten Feuchte-Diffusionskoeffizienten

$\tilde{b}$	$[m^2/s]$	7,120E-14
$\tilde{c}$	$[Ws/kg]$	170
D_v	$[W/(m\,K)]$	0

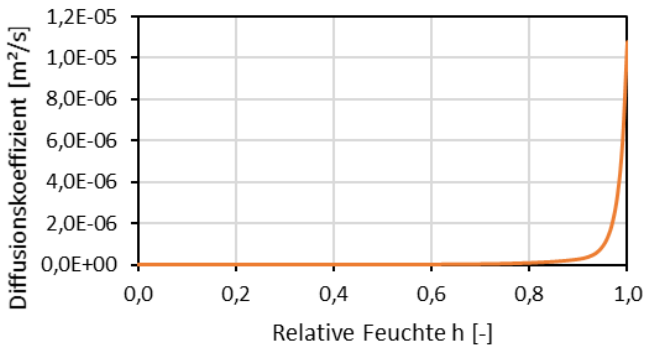


Abbildung 19 zeigt den linearen Zusammenhang gemäß dem Wurzel-t-Gesetz im Vergleich zu den mit ANSYS über den Diffusionskoeffizienten ermittelten Feuchtemengen. Dazu wurden die mit ANSYS errechneten Feuchtegehalte w_M $[kg_W/kg_B]$ mit der angenommenen Betonrohdichte von $2.300\ kg_B/m_B^3$ multipliziert und daraus die aufgenommene Flüssigkeitsmenge pro Fläche ermittelt.

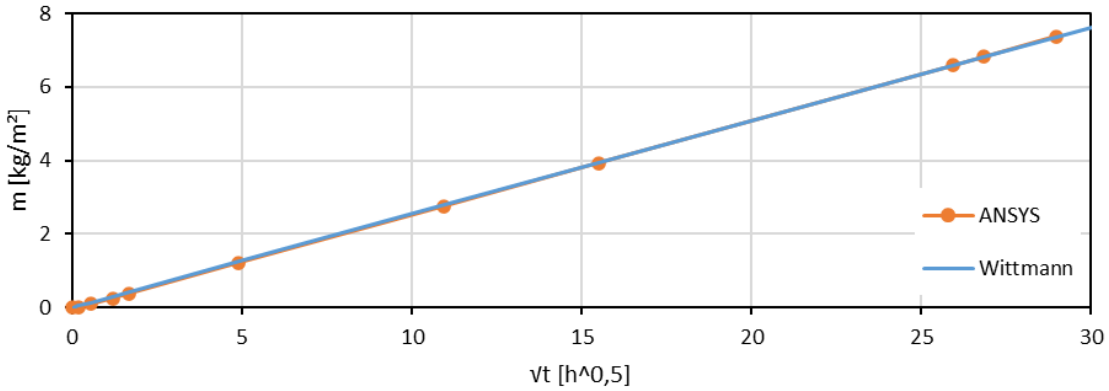


Abbildung 19: Linearer Zusammenhang zwischen aufnehmbarer Feuchtemenge und der Wurzel aus der Zeit

Da aus der aufnehmbaren Feuchtemenge nicht auf das Feuchteprofil geschlossen werden kann, ist die Verwendung der genannten Materialparameter nur eine von mehreren Möglichkeiten zur Beschreibung des Feuchtetransports. So entsteht bei Annahme einer linearen Sorptionsisotherme und eines linearen Feuchte-Diffusionskoeffizienten ein wesentlich flacher verlaufendes Feuchteprofil als mit den genannten Materialparametern. Da aber auch mit den linearen Ansätzen keine bessere Übereinstimmung mit den Daten aus den Experimenten erreicht werden konnte, sind die nachfolgend gezeigten Chloridprofile mit den in Tabelle 7 und Tabelle 8 genannten Materialparametern erstellt.

In den Experimenten bei [35, 36] wurden halbierte Betonwürfel in eine 3 %-ige NaCl-Lösung gelegt, wie in Abbildung 18 zu sehen ist. Anschließend wurden einzelne Schichten des Betons abgetragen und so das Chloridprofil ermittelt. In [35] erfolgte nach 24 Stunden die Entnahme und die sofortige Bestimmung des Chloridgehalts. In [36] wurden die nach 28 Tagen entnommenen Betonkörper zunächst für mehrere Tage unter Laborbedingungen gelagert, bevor der Chloridgehalt ermittelt wurde.

Die einer 3 %-igen NaCl-Lösung entsprechende Randbedingung muss in die in ANSYS verwendeten Einheiten umgerechnet werden. 3 g Natriumchlorid entsprechen 1,8 g Chlorid pro 100 ml Wasser, woraus sich eine Konzentration c von $18\,kg_{Cl}/m_W^3$ ergibt. Unter der Annahme von $w_M = 0{,}065217\,kg_W/kg_B$ lässt sich die folgende Randbedingung für die Simulationen mit ANSYS berechnen:

$$C_s = \frac{m_{Cl}}{m_B} = \frac{m_{Cl}}{\rho_B \cdot V_B} = \frac{m_{Cl} \cdot w_M}{\rho_W \cdot V_W} = \frac{c \cdot w_M}{\rho_W} = \frac{18\,kg_{Cl} \cdot 0{,}065217\,kg_W \cdot m_W^3}{m_W^3 \cdot kg_B \cdot 1000\,kg_W} = 0{,}0012\,\frac{kg_{Cl}}{m_B^3} \quad (75)$$

Aus dem Diagramm in [35] ist jedoch eine Randbedingung von etwa $C_s = 0{,}0015\,kg_{Cl}/m_B^3$ abzulesen. Dieser Werte wurde für die Simulation verwendet und vereinfacht über den gesamten Zeitraum als konstant angesetzt.

Der scheinbare Diffusionskoeffizient für die Diffusionsperiode von einem bis drei Monaten wird in [24] mit einem Wert von $D_{app} = 1{,}28 \cdot 10^{-12}\,m^2/s$ angegeben.

Zur Bindung von Chloriden wurde keine Angabe gemacht, sodass eine lineare Bindungsisotherme mit einem Henry-Koeffizient von 2,43 nach Medved‘ und Černý [2] verwendet wird. In Anhang A.3.4 können die in der Simulation verwendeten Materialparameter eingesehen werden.

In Abbildung 20 sind die Chloridprofile aus der Simulation mit ANSYS den Angaben aus den Veröffentlichungen von Wittmann et al. [35, 36] gegenübergestellt. Die rot eingefärbten Kurven stellen den Versuch aus [35] und die blauen Verläufe den Versuch aus [36] dar, wobei bei letzterem eine siebentägige Lagerung der Betonkörper unter Laborbedingungen angenommen und somit das Profil nach 35 Tagen errechnet wurde. Hierbei konnte keine gute Übereinstimmung der Ergebnisse erreicht werden. Auch das Verändern einzelner Parameter hat zu keiner Verbesserung geführt. Zu beachten ist jedoch, dass für einige Materialparameter Werte ohne experimentellen Nachweis angenommen werden mussten, und dass der Versuchsablauf nicht vollständig dokumentiert ist. So ist beispielsweise die genaue Anzahl der Tage, die der Probekörper nach Chloridbeaufschlagung unter Laborbedingungen gelagert wurde, nicht bekannt. Daher ist die große Abweichung nicht auf einen Fehler in der numerischen Lösung zurückzuführen, sondern vielmehr auf die vielen zu treffenden Annahmen.

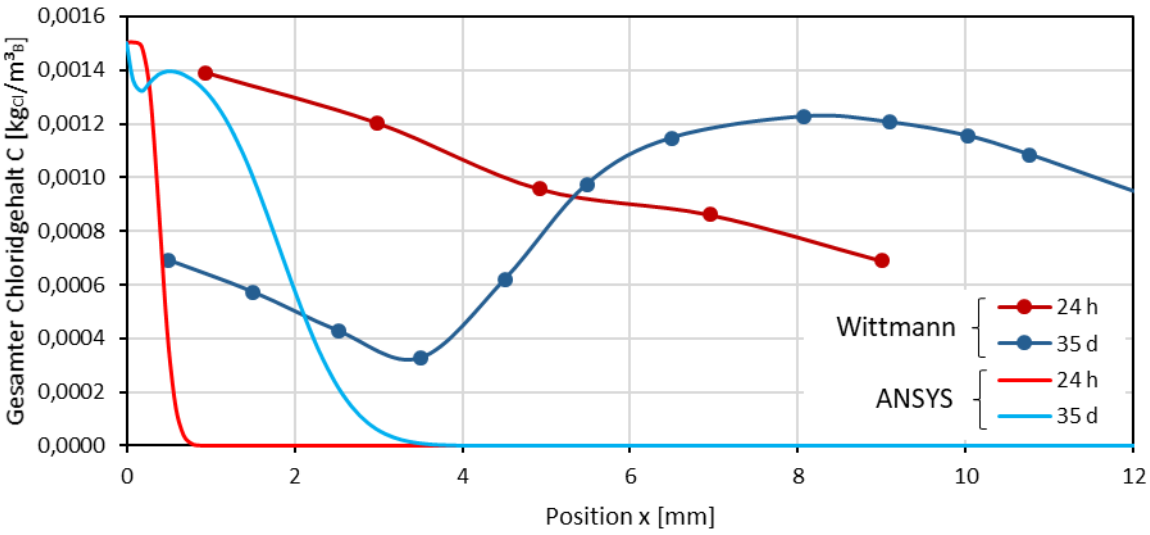


Abbildung 20: Vergleich der Chloridprofile von Wittmann et al. [35, 36] und aus ANSYS

4.3.2 Simulation von Ababneh

In der Veröffentlichung von Ababneh et al. [4] wird eine numerische Simulation für gekoppelten zwei-dimensionalen Feuchte- und Chloridtransport beschrieben. Wie auch in der vorliegenden Arbeit werden dazu eine Feuchte-Sorptionsisotherme, ein Feuchte- und ein Chlorid-Diffusionskoeffizient sowie eine Chlorid-Bindungsisotherme definiert. Im Unterschied zur Methode von Medved‘ und Černý [2] wird im zweiten Teil der Differentialgleichung (vergleiche Gleichung (34)) der Gehalt des freien Chloridgehalts nicht nach dem Ort x abgeleitet. Im Zuge des Vergleichs der Ergebnisse nach Ababneh et al. [4] mit denen aus ANSYS wurde diese Variante der Differentialgleichung auch in ANSYS implementiert. Die dabei notwendige Anpassung der Userroutine ist in Anhang A.2.3 beschrieben.

In der genannten Veröffentlichung sind Feuchte- und Chloridprofile zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt, die sich bei der einseitigen Chlorideinwirkung eines $10\,cm$ dicken Betonkörpers einstellen. Da jedoch auch hier einige Angaben zu verwendeten Parametern in der Veröffentlichung nicht enthalten sind, kann keine hinreichende Übereinstimmung zumindest der Chloridprofile mit denen aus den ANSYS-Simulationen festgestellt werden. Abbildung 21 und Abbildung 22 zeigen die Ergebnisse im Vergleich.

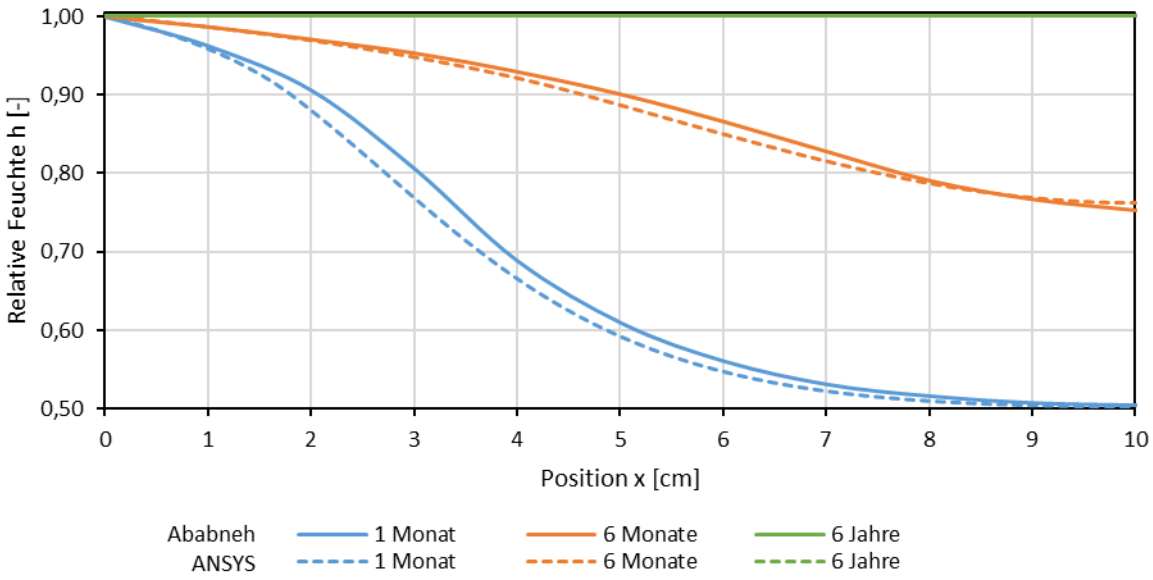


Abbildung 21: Vergleich der Feuchteprofile gemäß Ababneh et al. [4] und aus ANSYS

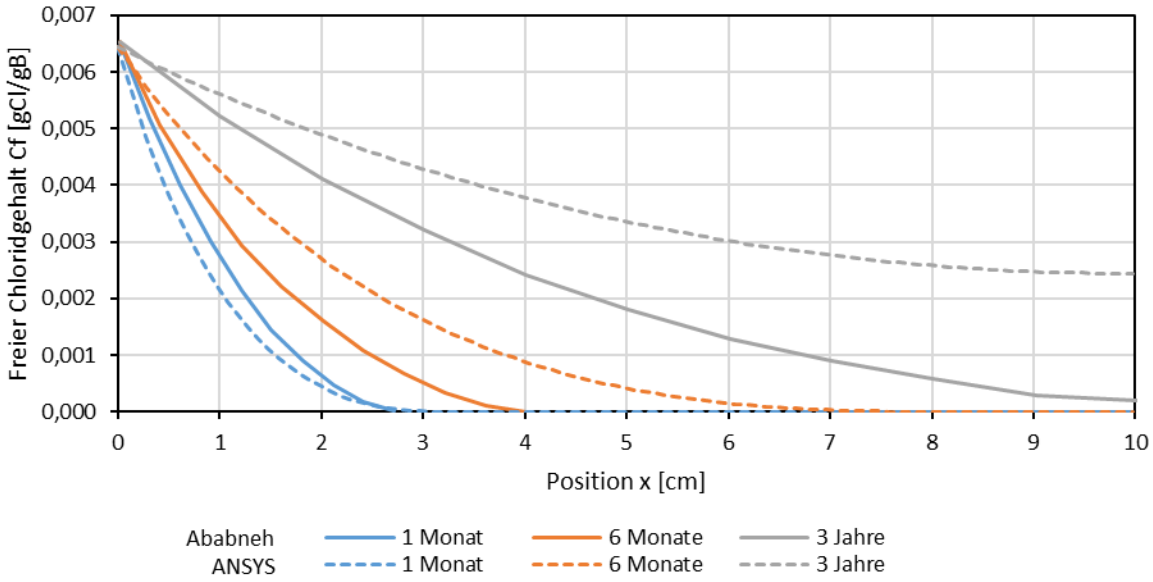


Abbildung 22: Vergleich der Chloridprofile gemäß Ababneh et al. [4] und aus ANSYS

Für die Simulation mit ANSYS sind einige Annahmen zu treffen. So werden die der Zementart Type 1 entsprechenden Angaben zur Berechnung der Feuchte-Sorptionsisotherme genutzt. Die Dichte des Betons und des Zements wird mit 2,3 g/cm^3 beziehungsweise 3,1 g/cm^3 angesetzt. Entsprechend den Angaben in der Veröffentlichung wird die Simulation für einen Beton mit einem Wasserzementwert von $w/z = 0{,}6$ und einem Volumenanteil des Zuschlags von $g_i = 0{,}7$ durchgeführt. Als Aushärtezeit werden 28 Tage und als aktuelle Temperatur 293,15 K angenommen. Es konnte nicht nachvollzogen werde, dass bei Ababneh et al. [4] als Randbedingung eine 5,0 %-ige Chloridlösung, was etwa 12,65 kg_{Cl}/m_B^3 oder $5{,}5 \cdot 10^{-3}$ g_{Cl}/g_B entspricht, angesetzt wurde. Mit dieser Randbedingung würde sich kein freier Chloridgehalt von $6{,}5 \cdot 10^{-3}$ g_{Cl}/g_B ergeben, der in den

Abbildungen bei Ababneh et al. [4] jedoch angegeben ist. In der hier beschriebenen Simulationen wird daher mit einer Randbedingung von $19{,}0\ kg_{Cl}/m_B^3$, also $8{,}26 \cdot 10^{-3}\ g_{Cl}/g_B$, gerechnet. Die den Simulationen für Abbildung 21 und Abbildung 22 zugrundeliegenden Parameter sind in Anhang A.3.5 enthalten.

Die akzeptable Anpassung der errechneten Feuchteprofile an diejenigen von Ababneh et al. [4], siehe Abbildung 21, konnte durch eine Variation der Masseanteile von Zuschlag und Zement erreicht werden. Die Auswirkungen der Veränderung dieser Werte sind in Abbildung 23 dargestellt. Die beste Übereinstimmung wurde mit $f_{cp} = 0{,}36$ und $f_{agg} = 0{,}64$ erzielt.

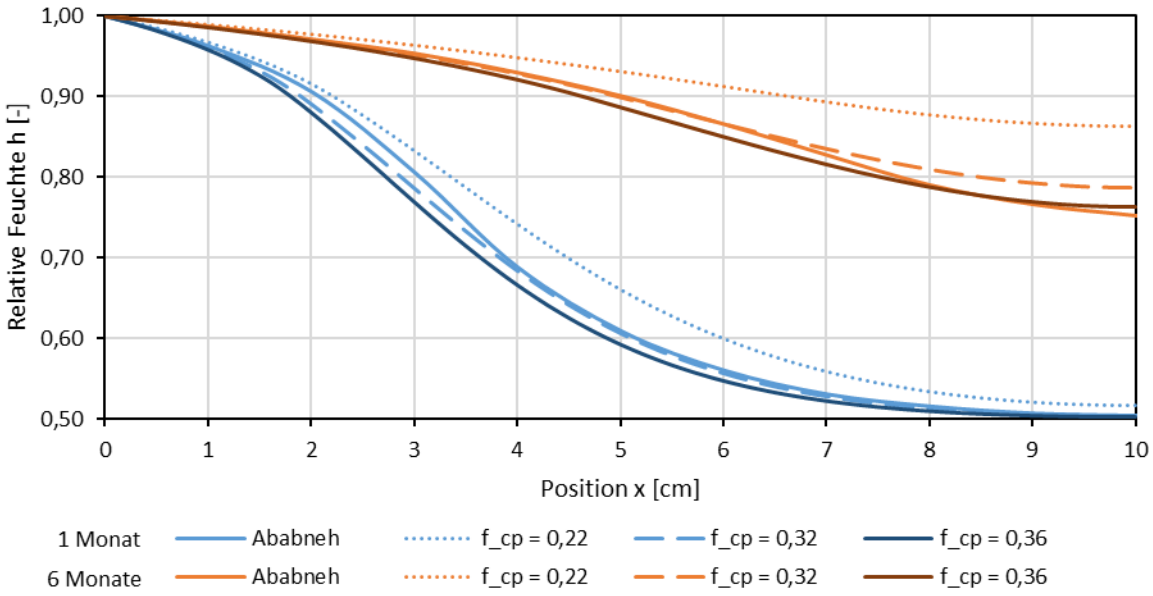


Abbildung 23: Auswirkungen der Masseanteile von Zuschlag und Zement auf die Chloridprofile

Auch für die Parameter des Chloridtransports wurden verschiedene Varianten getestet. Jedoch besteht hierbei das Problem, dass der in der Veröffentlichung abgebildete exponentielle Verlauf des Chlorid-Diffusionskoeffizienten über die relative Feuchte nicht nachvollzogen werden kann. Mit der angegebenen Formel (Gleichung (40)) würde sich ein S-förmiger Verlauf ergeben. Bei der Ermittlung des Chlorid-Diffusionskoeffizienten aus den Diagrammdaten lässt sich zudem eine Zeitabhängigkeit erkennen, die in der angegebenen Formel nicht berücksichtigt und daher unverständlich ist. Anpassungen der Parameter H_C und S des Diffusionskoeffizienten führen nicht zu einer besseren Übereinstimmung mit den Profilen aus der Veröffentlichung. Auch durch den Parameter der Bindungsisotherme β_{CSH} kann keine Verbesserung erreicht werden.

Da die Abweichungen zwischen den Chloridprofilen erheblich sind, wird die Variante der Differentialgleichung nach Ababneh et al. [4] für gekoppelten Transport im Rahmen dieser vorliegenden Arbeit nicht weiter betrachtet.

5 Anwendungen der gekoppelten Simulation von Feuchte- und Chloridtransport

Im Folgenden sollen Anwendungsmöglichkeiten für die numerische Simulation des gleichzeitigen Feuchte- und Chloridtransports mittels ANSYS gezeigt werden. Es erfolgen Simulationen mit verschiedenen Materialparametern sowie unterschiedlichen Geometrien, um Abhängigkeiten und Einflüsse einzelner Parameter zu veranschaulichen.

5.1 Ausgangsdaten für die Simulationen

Für die Simulationen in ANSYS sind Angaben zur Sorptionsisotherme, zu den Feuchte- und Chlorid-Diffusionskoeffizienten sowie zur Chlorid-Bindungsisotherme zu machen. In Anlehnung an die Parameter der Publikationen von Ababneh et al. [4] sowie Medved‘ und Černý [2] werden für die in diesem Kapitel beschriebenen Simulationen die nachfolgend zusammengestellten Daten genutzt.

Als Dichte des Betons werden $2.300\,kg_B/m_B^3$ angesetzt. Tabelle 9 und Tabelle 10 enthalten die Parameter der Feuchte-Sorptionsisotherme sowie des Feuchte-Diffusionskoeffizienten.

Tabelle 9: Parameter der in ANSYS verwendeten Feuchte-Sorptionsisotherme

w_{max}	$[Ws/kg]$	0,12410
A	$[-]$	2,16578
B	$[-]$	-2,59091
C	$[-]$	1,42513
h_1	$[-]$	0,9
w_{100}	$[Ws/kg]$	0,11220

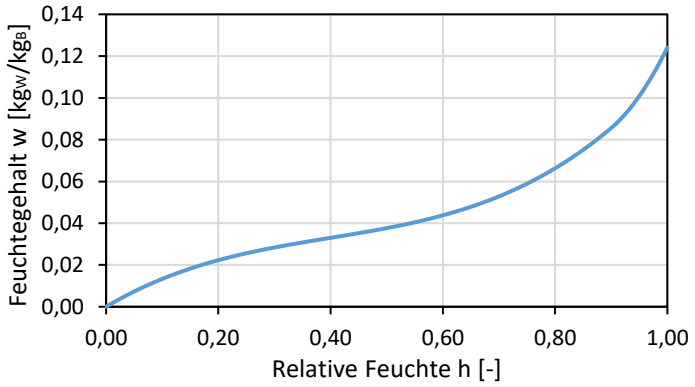
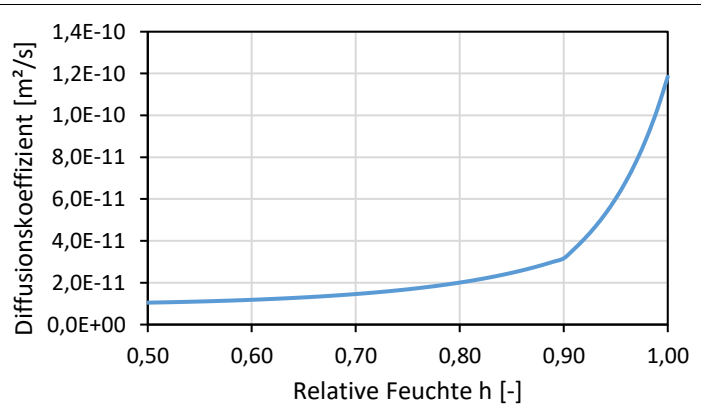


Tabelle 10: Parameter des in ANSYS verwendeten Feuchte-Diffusionskoeffizienten

$\tilde{b}$	$[m^2/s]$	2,3058E-11
$\tilde{c}$	$[Ws/kg]$	17,5303
D_v	$[W/(m\,K)]$	1,8826E-08



Für den Chlorid-Diffusionskoeffizienten wird der Ansatz, wie er in Ababneh et al. [4] beschrieben ist, verwendet und somit der Materialparameter $prop(14)$ auf 5 gesetzt. Mittels des Parameters $f_{1,2,4}$ kann die Größenordnung des Diffusionskoeffizienten beschrieben werden. In Anlehnung an [4] wird er aus den Gleichungen (41), (42) und (45) ermittelt:

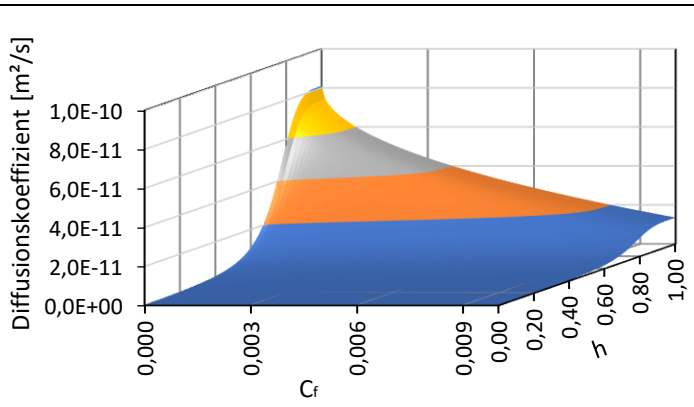
$$f_{1,2,4} = f_1(w/z\,, t_0) \cdot f_2(g_i) \cdot f_4(T) \tag{76}$$

Der verwendete Wert gilt für einen Beton mit einem w/z-Wert von 0,6 und einer Aushärtezeit t_0 von 28 Tagen. Für einen Beton mit einem Wasserzementwert von 0,6 ist die Aktivierungsenergie $U = 32\ kJ/mol$. Der Volumenanteil g_i des Zuschlags liegt bei 0,7. Die Referenztemperatur T_0 wird mit 296 K angegeben, während die aktuelle Temperatur 293,15 K beträgt. Als Diffusionskoeffizient des Zementleims wurde nach Gleichung (43) folgendes berechnet:

$$D_{cp} = \frac{2[1-(0{,}78-0{,}03)]}{0{,}060624^2}(0{,}78-0{,}03)^{4{,}2} = 40{,}63\frac{cm^2}{day} = 4{,}703 \cdot 10^{-8}\ \frac{m^2}{s} \tag{43}$$

Mit den genannten Werten ergibt sich der Parameter $f_{1,2,4}$ zu $8{,}11036 \cdot 10^{-11}\ m^2/s$. Die übrigen für den Chlorid-Diffusionskoeffizienten einzugebenden Werte sind Tabelle 11 zu entnehmen.

Tabelle 11: Parameter des in ANSYS verwendeten Chlorid-Diffusionskoeffizienten

$f_{1,2,4}$	$[m^2/s]$	8,11036E-11	
H_c	$[-]$	0,75	
k_{ion}	$[-]$	8,333	
m	$[-]$	0,5	

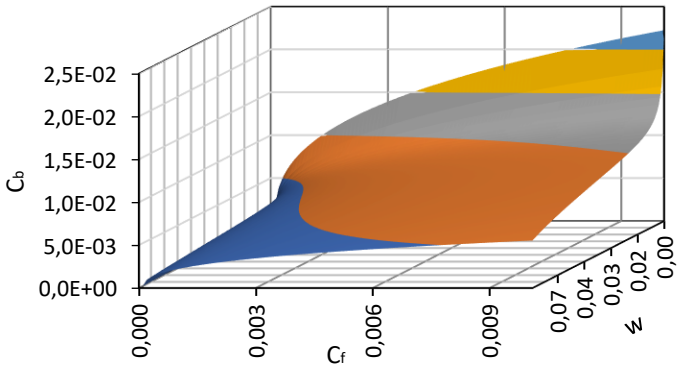
Die Chlorid-Bindungsisotherme wird durch den Ansatz nach Freundlich [30] beschrieben. Dazu wird der Materialparameter $prop(25)$ auf 5 gesetzt. Der in der Userroutine genutzte Wert $\tilde{\tilde{B}}$ muss zunächst wie folgt ermittelt werden.

$$\tilde{\tilde{B}} = \frac{\beta_{CSH}}{1000} \cdot 10^B \cdot \left(\frac{\rho_{Sol}}{35{,}45}\right)^A \tag{77}$$

Der Parameter ρ_{Sol} beschreibt die Dichte der Porenlösung, für die hier die Dichte des Wassers verwendet wird. β_{CSH} charakterisiert den Massenanteil der C-S-H-Phasen an der Gesamtmasse des Betons. In den nachfolgend beschriebenen Simulationen wird dafür der von Ababneh et al. [4] verwendete Wert angesetzt, siehe Tabelle 12.

Tabelle 12: Parameter der in ANSYS verwendeten Chlorid-Bindungsisotherme

β_{CSH}	[−]	0,294
ρ_{Sol}	$[kg_W/m_W^3]$	1000
A	[−]	0,3788
B	[−]	1,14
$\tilde{\tilde{B}}$	[−]	0,0143798



Neben diesen Eingabeparametern zur Beschreibung des Materialverhaltens sind für die Simulationen mittels ANSYS Angaben zur Netzgröße, zur Zeitschrittweite sowie zu den Konvergenzkriterien zu machen.

Als Größe eines Elements wird $\Delta x = 0{,}001\ m$ gewählt. Dies stellt einen Kompromiss zwischen einer angemessenen Rechenzeit und einer praktikablen Auflösung der Ergebnisse dar. Die Zeitschrittweite wird mittels des Stabilitätskriteriums nach Gleichung (65) abgeschätzt, sollte aber deutlich unterschritten werden:

$$\Delta t = 500\ s < \frac{(\Delta x)^2}{2 \cdot D_{Cl}} = \frac{(0{,}001)^2}{2 \cdot 8{,}11036 \cdot 10^{-11}} = 6165\ s \tag{78}$$

Dies gibt das maximale Zeitinkrement an. Es wird empfohlen, zunächst mit einer sehr kleinen Zeitschrittweite zu beginnen, die von ANSYS dann je nach Konvergenzverhalten bis auf $\Delta t = 500\ s$ erhöht wird.

Die Ergebnisse der numerischen Simulationen können auf verschiedene Weisen dargestellt werden. Im Folgenden wird dies anhand der oben beschriebenen Materialparameter veranschaulicht.

Um die Feuchte- oder Chloridprofile über die Bauteildicke zu verschiedenen Zeitpunkten abzubilden, wie in der Literatur häufig zu sehen, ist in ANSYS ein Pfad entlang der Bauteildicke zu erstellen. Diesem Pfad folgend wird das Feuchte- beziehungsweise Chloridprofil dargestellt.

Abbildung 24 zeigt die Profile der relativen Feuchte h sowie des Feuchtegehalts w nach einem Tag sowie nach 10, 20 und 30 Tagen.

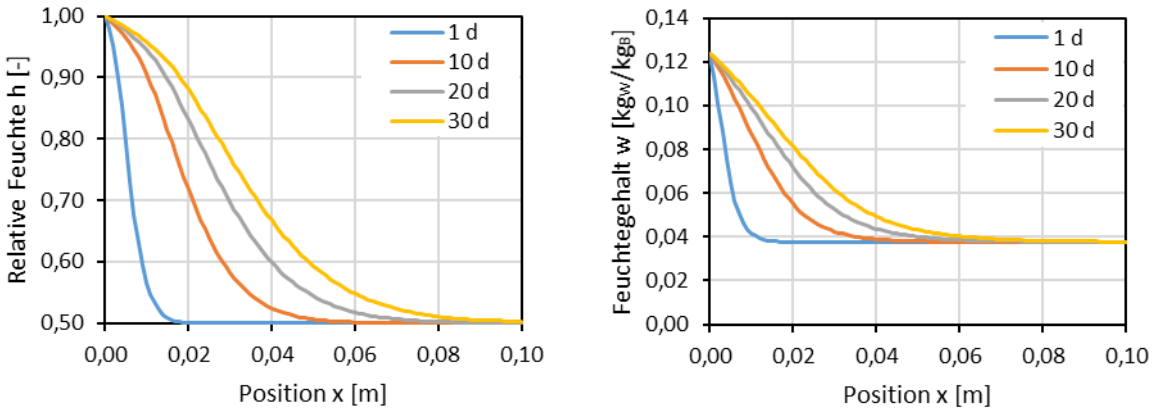


Abbildung 24: Profile der relativen Feuchte h (links) und des Feuchtegehalts w (rechts) zu verschiedenen Zeitpunkten

Gleichermaßen ist dies auch für den Chloridgehalt möglich. In Abbildung 25 ist der gesamte Chloridgehalt C, in Abbildung 26 der Gehalt an freien Chloridionen C_f und in Abbildung 27 der Gehalt an gebundenem Chlorid C_b zu sehen. In den abgebildeten Profilen ist zu erkennen, dass Wasser tiefer als Chlorid in poröse Materialien eindringt, was mit Aussagen beispielsweise von Wittmann et al. [24] übereinstimmt. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die in diesen Simulationen verwendeten Materialparameter nur in Anlehnung an Daten aus Veröffentlichungen gewählt wurden und keinem experimentell validierten Datensatz entstammen.

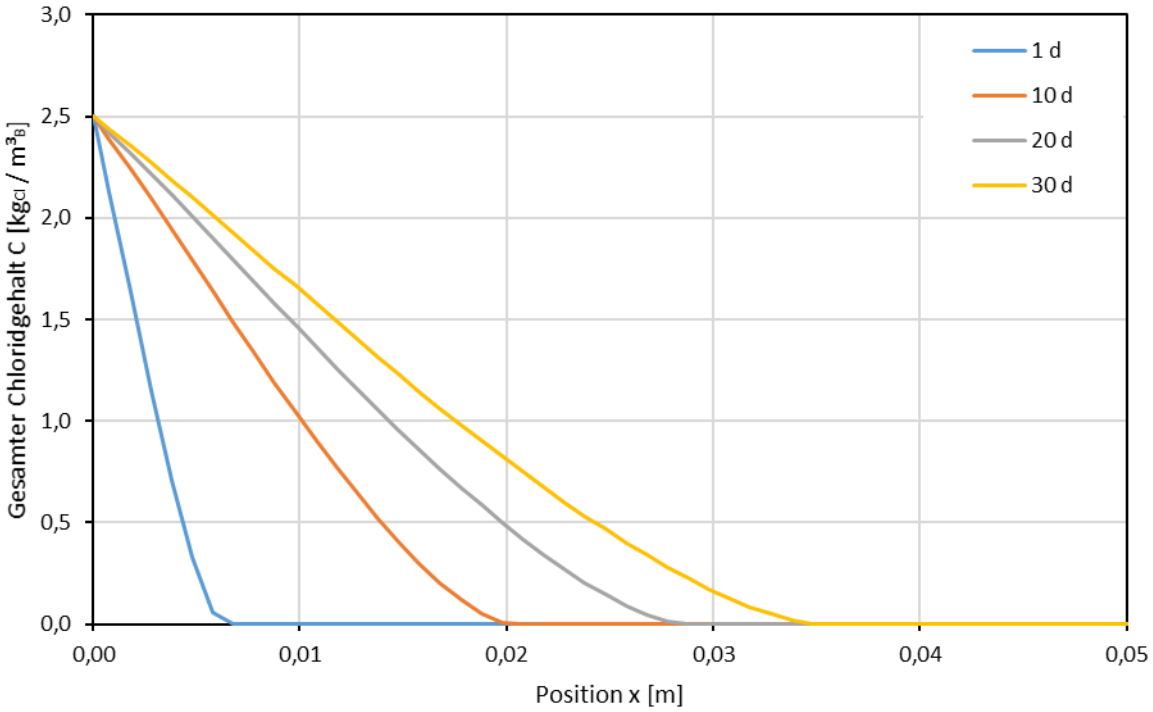


Abbildung 25: Profile des gesamten Chloridgehalts C zu verschiedenen Zeitpunkten

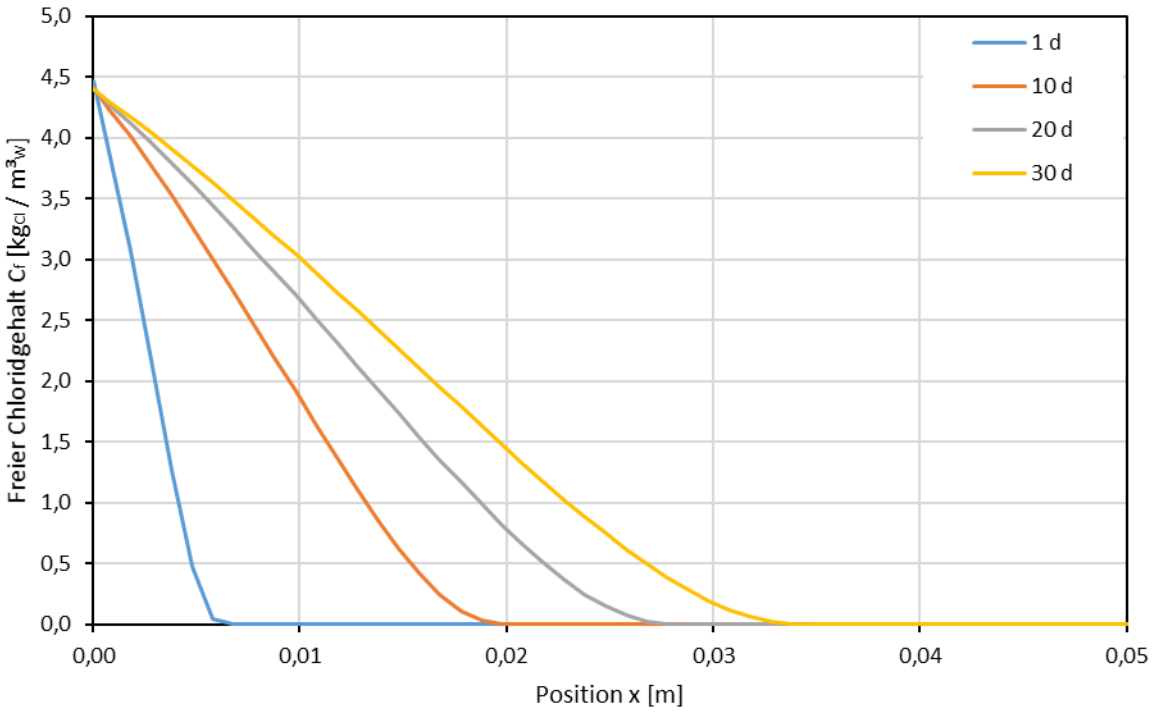


Abbildung 26: Profile des freien Chloridgehalts C_f zu verschiedenen Zeitpunkten

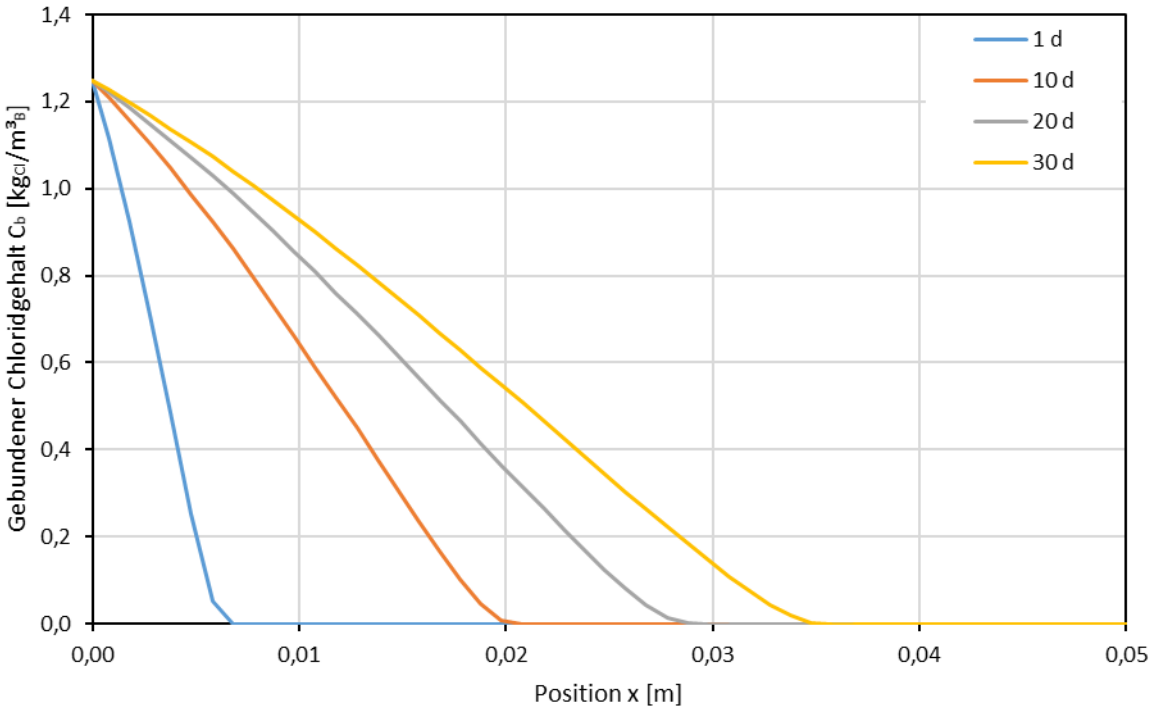


Abbildung 27: Profile des gebundenen Chloridgehalts C_b zu verschiedenen Zeitpunkten

Für die Dauerhaftigkeit des Betons ist der Gehalt an freiem Chlorid maßgeblich. Bezogen auf den Zementgehalt liegt der höchstzulässige Chloridgehalt gemäß DIN EN 206 bei einem Massenanteil von 0,4 %. Um dies an der Stelle, an der sich die Bewehrung befindet, zu überprüfen, wird in

Abbildung 28 der für die Korrosion maßgebende freie Chloridgehalt C_f an verschiedenen Stellen über die Expositionszeit abgebildet.

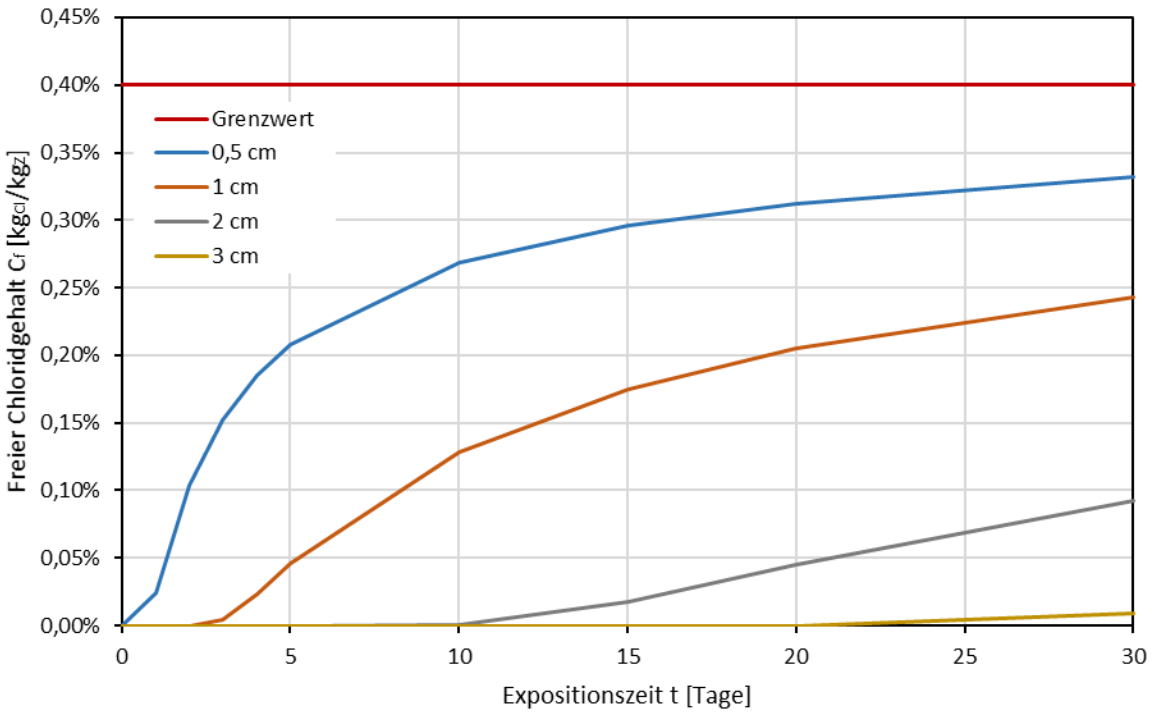


Abbildung 28: Freier Chloridgehalt an verschiedenen Stellen über die Expositionszeit

Der Chloridgehalt in Abbildung 28 wurde unter Annahme folgender Betonzusammensetzung in einen auf den Zementgehalt bezogenen Masseanteil umgerechnet:

- 180 kg Wasser
- 300 kg Zement
- 1890 kg Zuschlag

Die Umrechnung ergibt dann:

$$C_f\left[\frac{kg_{Cl}}{kg_Z}\right] = C_f\left[\frac{kg_{Cl}}{m_B^3}\right] \cdot \frac{300\ kg_Z}{2300\ kg_B} \cdot \frac{1}{w_M} \cdot 1000\,\frac{kg_W}{m_W^3} \tag{79}$$

Im betrachteten Zeitraum von 30 Tagen wird der Grenzwert, wie in Abbildung 28 zu sehen, an keinem Ort überschritten.

5.2 Einflüsse aus unterschiedlichen Umgebungsbedingungen und Materialparametern

Im Folgenden wird gezeigt, welchen Einfluss die Umgebungsbedingungen auf den Transport des Chlorids haben. Zudem werden die Materialparameter so abgeändert, dass unterschiedliche Betonzusammensetzungen berücksichtigt werden können. Auch hierfür werden die errechneten Chloridprofile miteinander verglichen.

5.2.1 Vergleich zwischen gesättigtem und ungesättigtem Bauteil

Um einen Eindruck davon zu bekommen, wie sich die Berücksichtigung des Feuchtegehalts sowie -transports auf den Chloridtransport auswirkt, werden bezüglich der Feuchte verschiedene Randbedingungen angenommen.

Zur Beschreibung des Materialverhaltens kommen für diese Simulationen die in Kapitel 5.1 angegebenen Parameter zur Anwendung.

In einer Simulation wird ein gesättigtes Bauteil angenommen. Sowohl die Anfangs- als auch die Randbedingung der relativen Feuchte werden demnach zu $h_{ini} = h_s = 1{,}0$ gesetzt. Eine zweite Simulation berücksichtigt den Fall eines ungesättigten Betonkörpers, indem Anfangs- und Randbedingung mit $h_{ini} = h_s = 0{,}5$ angegeben werden. Für den dritten Fall wird ein ungesättigter Betonkörper betrachtet, der durch in Wasser gelöstes Streusalz belastet wird. Dies wird mit einer Anfangsbedingung von $h_{ini} = 0{,}5$ und einer einseitigen Randbedingung von $h_s = 1{,}0$ simuliert. Die Randbedingung bezüglich des Chloridgehalts liegt in allen drei Varianten bei $C_s = 2{,}5\ kg_{Cl}/m_B^3$.

Abbildung 29 zeigt die in den verschiedenen Simulationen erhaltenen Feuchteprofile. In blau ist die erste Variante mit dem gesättigten Betonkörper, in orange der konstante geringere Feuchtegehalt der zweiten Variante und in verschiedenen Grautönen der sich verändernde Feuchtegehalt aus Variante 3 dargestellt. Während die Feuchteprofile bei Ansatz der gleicher Feuchte für Anfangs- und Randbedingungen zeitlich und räumlich konstant sind, verändert sich das Profil im dritten Fall sowohl in Abhängigkeit von der Bauteillänge als auch über die Zeit.

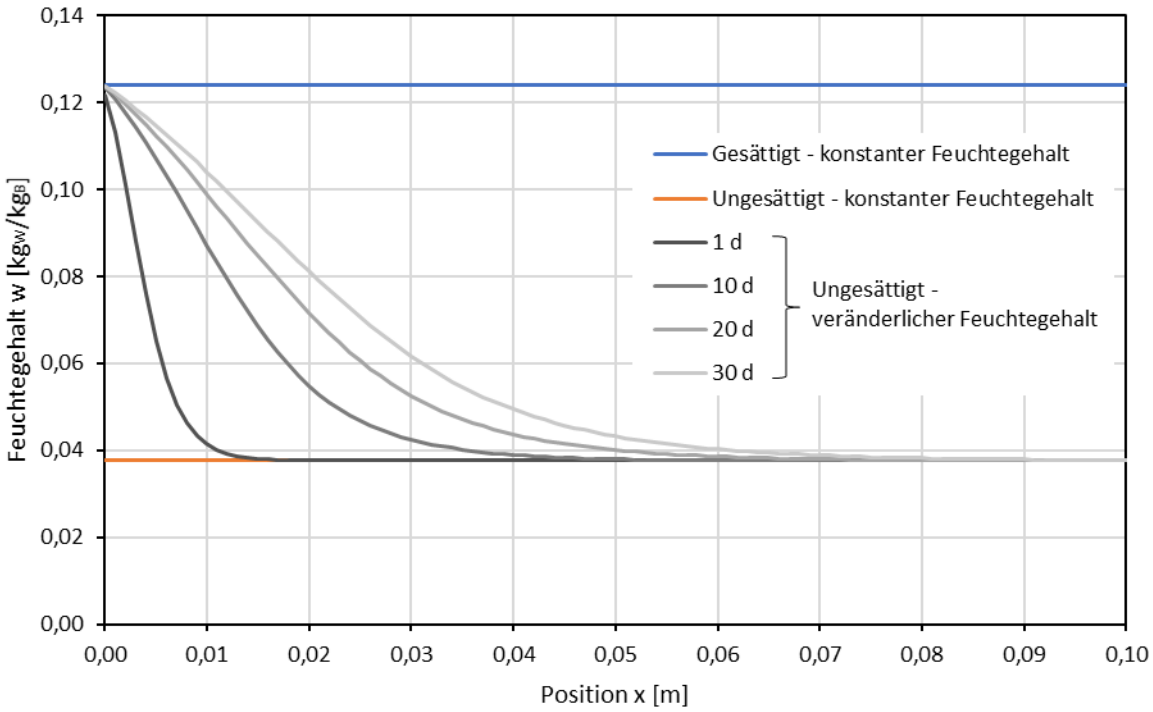


Abbildung 29: Feuchteprofile bei unterschiedlichen Anfangs- und Randbedingungen

In Abbildung 30 sind die Chloridprofile für alle drei Fälle nach einem Tag sowie nach 30 Tagen dargestellt. Der Vergleich zwischen ungesättigtem (orange) und gesättigtem (blau) Betonkörper mit konstantem Feuchtegehalt zeigt, dass der im Bauteil vorhandene Feuchtegehalt generell einen großen Einfluss auf das sich ergebende Chloridprofil hat.

Während der Feuchtegehalt im Fall, dass Feuchte im Beton transportiert wird (grau), wesentlich geringer ist als bei gesättigtem Beton (blau), weichen die errechneten Chloridprofile nur im geringen Maß voneinander ab. Dies ist darauf zurückzuführen, dass in der grau dargestellten Variante neben der Diffusion der Chloridionen auch Konvektion mit dem Feuchtetransport stattfindet. Dabei ist bemerkenswert, dass der Chloridgehalt bei Ansatz eines gesättigten Betonkörpers im Vergleich dazu, dass Konvektion berücksichtigt wird, nur in geringem Maße überschätzt wird. Dies ist ein Indiz dafür, dass mithilfe dieser häufig verwendeten Vereinfachung tatsächlich eine realistische Abschätzung des Chloridgehalts möglich ist. Diese Aussage ist jedoch einzuschränken, da der Feuchte- sowie Chlorid-Diffusionskoeffizient in dieser Simulation nur in Anlehnung an Daten aus Veröffentlichungen gewählt wurde und möglicherweise kein tatsächliches Materialverhalten abbildet.

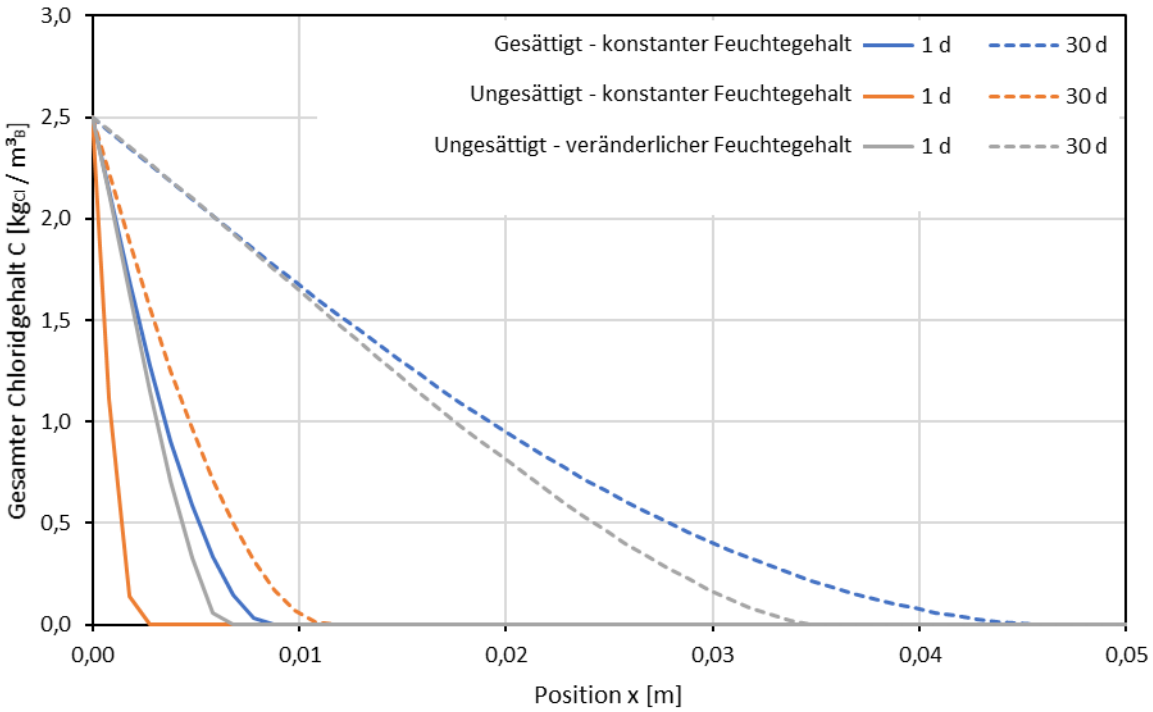


Abbildung 30: Chloridprofile für unterschiedliche Anfangs- und Randbedingungen

Auch bei Ababneh et al. [4] wurde der Einfluss aus der Diffusion der Feuchte in zwei Simulationen untersucht. Dort erfolgt die Gegenüberstellung des gesättigten und ungesättigten Probekörpers mit veränderlichem Feuchtegehalt. Bei einer maximalen Eindringtiefe von etwa 2,7 cm nach einem Monat für gesättigten Beton war die Eindringtiefe im ungesättigten Fall etwa 0,6 cm geringer. Der mit ANSYS ermittelte Unterschied von circa 1 cm bei einer Eindringtiefe von maximal 4,5 cm erscheint somit plausibel.

5.2.2 Abhängigkeit vom Wasserzementwert

Der Wasserzementwert stellt das Massenverhältnis des wirksamen Wassergehaltes zum Zementgehalt im Frischbeton [37] dar und hat Einfluss auf die Porosität des Betons.

Bei Nutzung der Gleichungen nach Xi et al. [9, 12, 25] für den Feuchtetransport, für die Feuchtespeicherung sowie für den Chloridtransport wird eine Abhängigkeit der Materialparameter vom w/z-Wert und somit indirekt von der Porosität des Betons bei der Simulation des Chloridtransports berücksichtigt. Der w/z-Wert beeinflusst zudem die Bindungsisotherme nach Freundlich [30].

Um die Auswirkungen zu veranschaulichen, werden im Folgenden die Ergebnisse für die w/z-Werte 0,5 und 0,6 gegenübergestellt. Ein geringerer w/z-Wert führt bei Nutzung der Sorptionsisotherme nach Gleichung (16) dazu, dass weniger Feuchte gespeichert wird. Zudem hat die Veränderung des w/z-Werts Auswirkungen auf den Feuchte-Diffusionskoeffizienten. Ein geringerer w/z-Wert führt bei Verwendung der Gleichungen (26) und (27) in den oberen Feuchtebereichen zu einem größeren

Diffusionskoeffizienten. In Abbildung 31 ist das Materialverhalten für den Feuchtetransport bei unterschiedlichen Wasserzementwerten dargestellt.

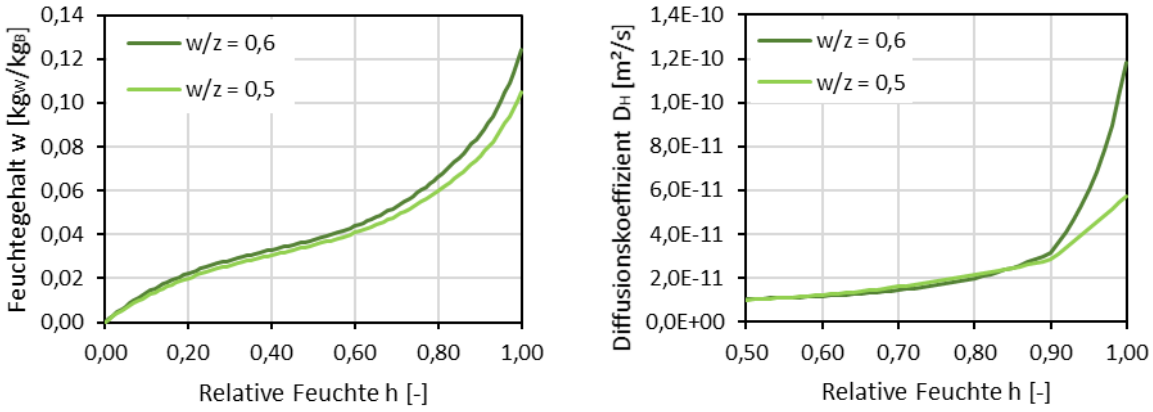


Abbildung 31: Gegenüberstellung der Sorptionsisothermen (links) und der Feuchte-Diffusionskoeffizienten (rechts) für unterschiedliche Wasserzementwerte

In Abbildung 32 links sind die Verläufe des Chlorid-Diffusionskoeffizienten exemplarisch für $C_f = 0$ und die beiden w/z-Werte abgebildet. Auch hier ist der Diffusionskoeffizient bei einem höheren w/z-Wert größer.

Durch das Massenverhältnis β_{CSH} hat der w/z-Wert auch Einfluss auf die Bindungsisotherme. Abbildung 32 rechts zeigt die Bindungsisotherme für eine relative Feuchte von $h = 0{,}01$. Hier ist zu erkennen, dass bei einem geringeren w/z-Wert mehr Chlorid gebunden wird. Hypothetisch lässt sich dies damit erklären, dass die Poren bei einem geringeren w/z-Wert kleiner sind und somit weniger Chlorid durch die Poren geschwemmt wird.

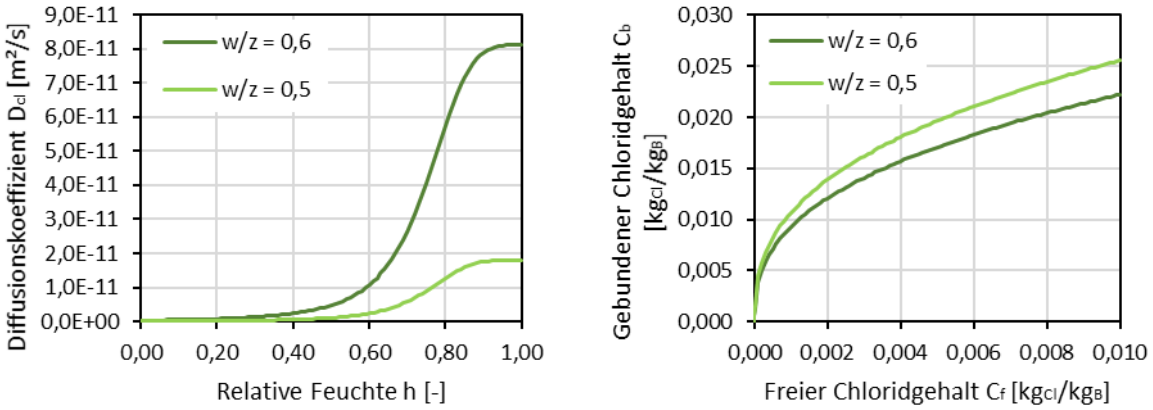


Abbildung 32: Gegenüberstellung der Chlorid-Diffusionskoeffizienten (links) und der Chlorid-Bindungsisothermen (rechts) für unterschiedliche Wasserzementwerte

Mit den beschriebenen Angaben zum Materialverhalten werden mittels ANSYS Simulationen für w/z-Werte von 0,5 und 0,6 durchgeführt. Die Zahlenwerte für die verwendeten Materialparameter sind in Anhang A.3.6 zu finden. Der betrachtete Betonkörper hat eine Ausgangsfeuchte von

$h_{ini} = 0{,}5$ und wird einseitig mit einer Feuchte von $h_s = 1{,}0$ sowie einem Chloridgehalt von $C_s = 2{,}5\ kg_{Cl}/m_B^3$ belastet.

Damit stellen sich nach einem Tag sowie nach 10 beziehungsweise 30 Tagen die in Abbildung 33 bis Abbildung 36 dargestellten Feuchte- und Chloridprofile ein. Die Profile sind für die unterschiedlichen Zeitpunkte in blau (1 Tag), orange (10 Tage) beziehungsweise gelb (30 Tage) eingefärbt. Der geringere Wasserzementwert ist jeweils durch die gestrichelte Linie gekennzeichnet.

In Abbildung 33 ist zu erkennen, dass bei einem geringeren w/z-Wert insgesamt weniger Wasser in den Betonkörper eindringt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass der Porengehalt in diesem Fall niedriger ist.

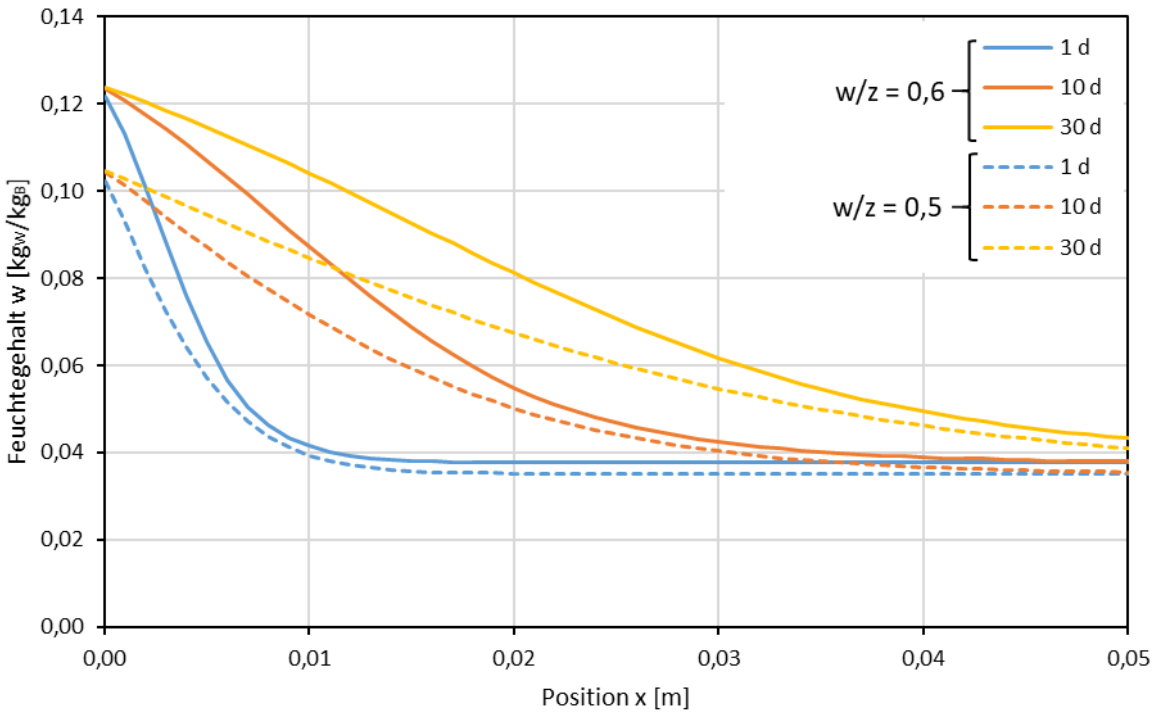


Abbildung 33: Feuchteprofile bei unterschiedlichen Wasserzementwerten

Abbildung 34 zeigt den Effekt, dass Chlorid bei einem kleineren w/z-Wert langsamer beziehungsweise weniger weit transportiert wird. Dies ist einerseits in dem niedrigeren Diffusionskoeffizienten und andererseits im größeren Anteil an gebundenem Chlorid begründet. Letzteres ist auch in Abbildung 35 zu sehen, da hier im Randbereich bei einem niedrigeren w/z-Wert mehr gebundenes Chlorid vorhanden ist. Dies bestätigt die Hypothese, dass das Chlorid aufgrund der geringeren Porosität schlechter durch den Beton transportiert werden kann und somit vermehrt gebunden wird.

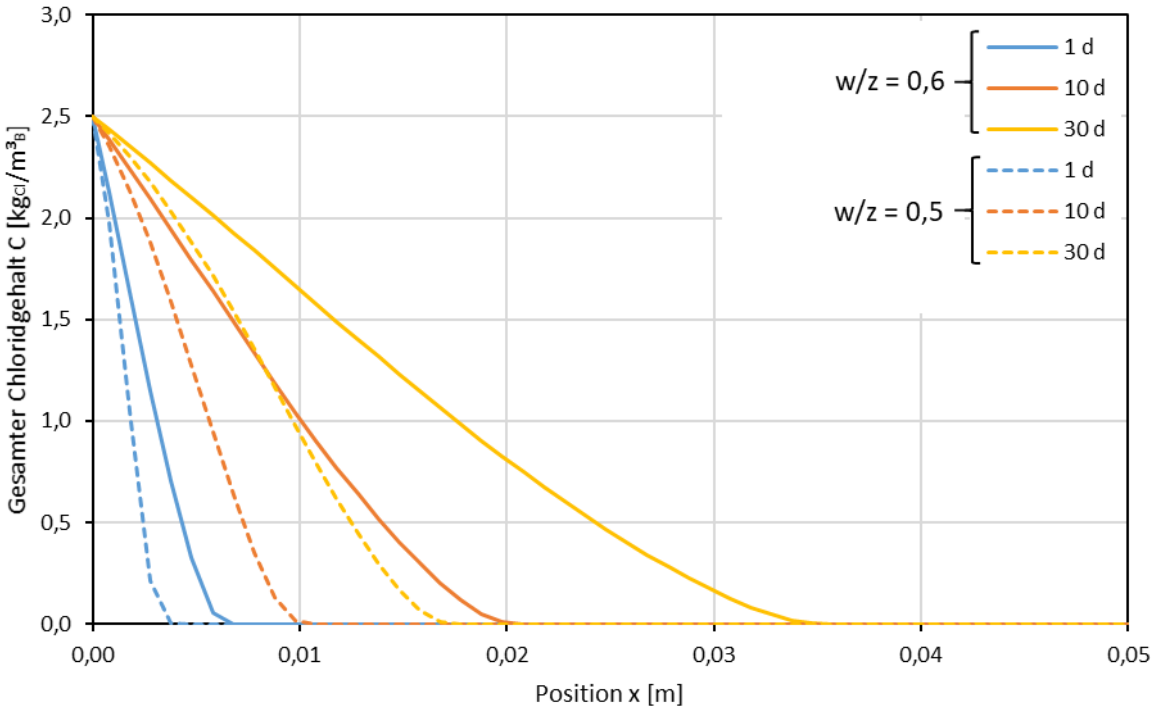


Abbildung 34: Chloridprofile bei unterschiedlichen Wasserzementwerten

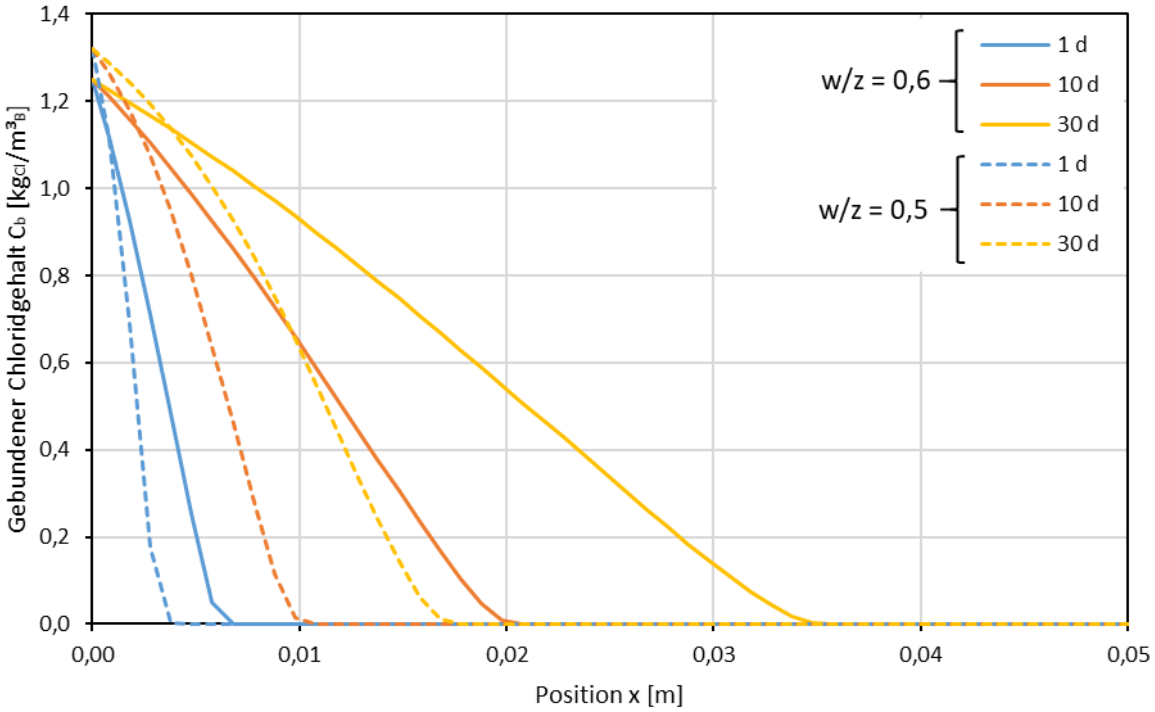


Abbildung 35: Chloridprofile für gebundenes Chlorid mit unterschiedlichen Wasserzementwerten

Wie in Abbildung 36 zu sehen, ist der Gehalt an freiem Chlorid im Randbereich bei einem niedrigeren w/z-Wert ebenfalls höher. Dies ist jedoch dem geschuldet, dass das freie Chlorid pro Kubikmeter Feuchte angegeben wird, von welcher bei einem niedrigeren w/z-Wert weniger vorhanden ist.

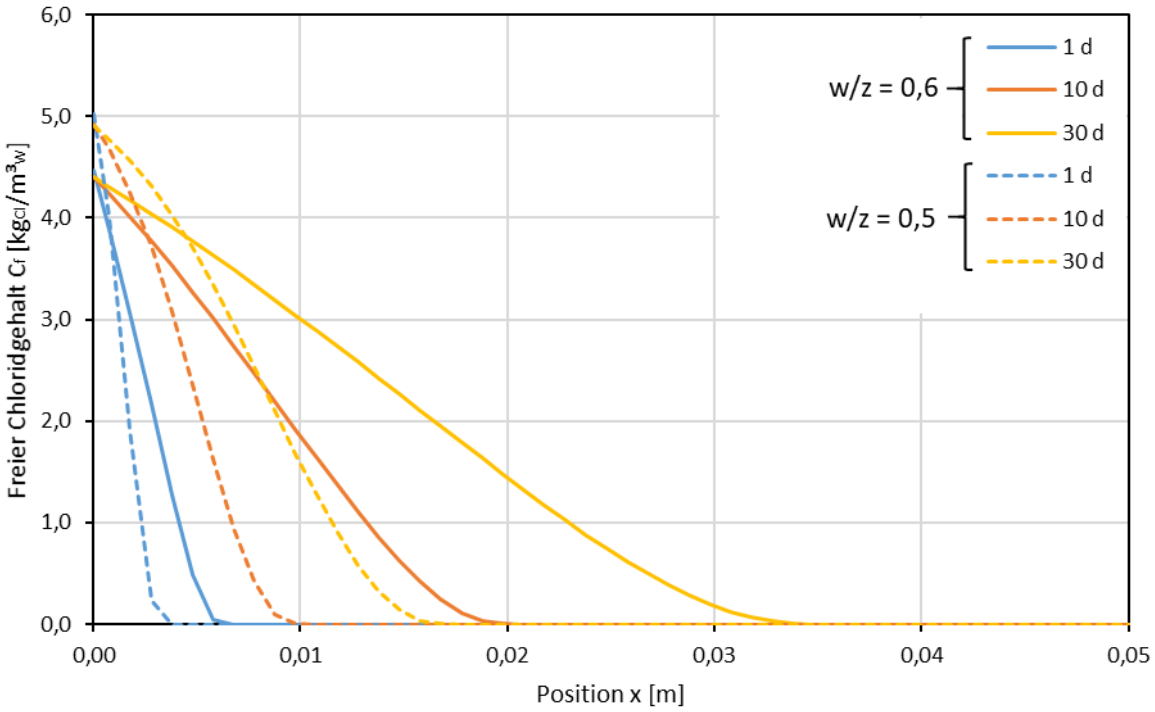


Abbildung 36: Chloridprofile für freies Chlorid bei unterschiedlichen Wasserzementwerten

In den experimentellen Daten von Andrade und Whiting [38] ist ein Vergleich zwischen Betonen mit den Wasserzementwerten von 0,4 und 0,6 zu finden. Nach einer 90-tägigen Chlorideinwirkung wurde dort der gesamte Chloridgehalt C ermittelt. In Abbildung 37 sind links die Chloridprofile aus den Simulationen mit ANSYS und rechts diejenigen aus den experimentellen Daten zu sehen. Da die Ermittlung des Feuchte-Diffusionskoeffizienten bei Xi et al. [12] nur ab einem w/z-Wert von 0,5 kalibriert ist, wird hier für den w/z-Wert von 0,4 das von Ababneh et al. [4] vorgeschlagene Vorgehen, wie in Kapitel 2.1.2 beschrieben, angewandt.

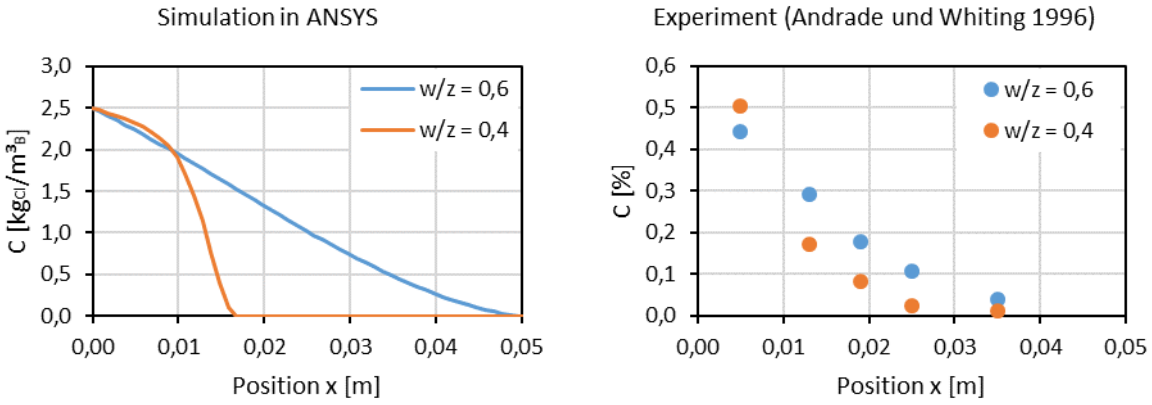


Abbildung 37: Vergleich von mit verschiedenen Wasserzementwerten erhaltenen Simulationsergebnissen und entsprechenden experimentellen Daten

Ziel des Vergleichs war es zu überprüfen, ob die Größenordnung des Unterschieds zwischen den Wasserzementwerten sowie der qualitative Verlauf der Chloridprofile plausibel sind. Dabei ist zu

beachten, dass weder die Randbedingungen noch die Materialparameter aufeinander abgestimmt wurden. Zunächst ist festzustellen, dass zwischen den Eindringtiefen bei den beiden w/z-Werte in den Simulationen ein wesentlich größerer Unterschied als in den Experimenten ermittelt wird. Ob sich dieses Verhalten durch die unterschiedlichen Materialparameter erklären lässt, wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht erörtert. Zu erkennen ist jedoch, dass sowohl bei den Simulationen als auch bei den experimentellen Daten der Gehalt an Chlorid in den ersten Zentimetern des Betons bei einem geringeren w/z-Wert höher ist.

5.2.3 Zeitlich veränderliche Randbedingung

Eine hohe Chloridbelastung von Betonbauwerken entsteht unter anderem durch das Streuen von Salz im Winter. Die betreffenden Bauteile sind demzufolge über den Jahresverlauf einer periodischen Einwirkung ausgesetzt. In diesem Kapitel soll die Möglichkeit der Simulation einer derartigen Einwirkung vorgestellt werden.

Im fib Model Code for Concrete Structures [15] wird folgender Zusammenhang beschrieben, der durch eine Simulation veranschaulicht werden soll:

> „For structures subject to cyclic exposure of chlorides, in particular where de-icing salts are used only during the winter season, the chloride ions in the surface layer are not only transported by diffusion. Other effects such as capillary suction and wash-out will also play a role. The depth of this influenced surface layer will be reduced the more impermeable the concrete is and the shorter the cycles are."

Die These besagt also zum einen, dass neben der Diffusion auch das kapillare Saugen und das Auswaschen den Chloridtransport beeinflussen. Der Vorgang des Auswaschens wird in Kapitel 5.2.4 betrachtet. Zum anderen wird gesagt, dass die Tiefe der beeinflussten Schicht geringer ist, je undurchlässiger der Beton und je kürzer der Belastungszyklus ist, dem ein Bauwerk ausgesetzt ist. Die geringere Eindringtiefe bei größerer Undurchlässigkeit des Betons wurde im Kapitel 5.2.2 beim Vergleich von Betonen mit verschiedenen Wasserzementwerten bestätigt. Nachfolgend werden für die zyklische Belastung zwei verschiedene mittels ANSYS durchgeführte Simulationen beschrieben, bei denen sich sowohl die Feuchte h als auch der Chloridgehalt C periodisch ändern.

Zu Beginn der Simulationen liegt der Feuchtegehalt im Bauteil bei 50 % und es ist kein Chlorid vorhanden. Während in der ersten Simulation („PeriodeLang") das Bauteil immer drei Monate mit Feuchte und Chlorid beaufschlagt wird und dann für 8,5 Monate die Anfangsbedingungen angesetzt werden, dauert die Einwirkung in der zweiten Simulation („PeriodeKurz") nur einen Monat, an den

sich eine knapp dreimonatige unbelastete Phase anschließt. Jeweils nach der Dauer von einem Jahr ist die Summe der Einwirkungen bei beiden Simulationen gleich groß.

Zwischen vorhandener und fehlender Einwirkung wird eine Übergangsphase von 30 beziehungsweise 10 Tagen eingefügt, damit die Änderung der Randbedingungen nicht zu abrupt erfolgt. In dieser Übergangszeit der Länge $2s_{transition}$ wird ein sinusförmiger Verlauf der jeweiligen Randbedingung nach folgender Gleichung angesetzt:

$$C(t) = \frac{C_1 + C_2}{2} + \frac{C_1 - C_2}{2} \cdot \sin\left(\pi + \frac{\pi}{2 \cdot s_{transition}} \cdot (t - t_s)\right) \tag{80}$$

mit C_1 … 1. Randbedingung (hier: $C_1 = 2{,}5\, kg_{Cl}/m_B^3$)

C_2 … 2. Randbedingung (hier: $C_2 = 0{,}0\, kg_{Cl}/m_B^3$)

$s_{transition}$ … halbe Dauer der Übergangszeit $[s]$

t_s … Zeitpunkt der Mitte der Übergangsphase $[s]$

Für die periodische Randbedingung des Feuchtegehalts wird ebenfalls Gleichung (80) verwendet. Dabei werden als erste und zweite Randbedingung $h_1 = 1{,}0$ beziehungsweise $h_2 = 0{,}5$ angesetzt.

Für die Feuchte kann eine periodische Randbedingung direkt in ANSYS Workbench eingegeben werden. Die periodische Randbedingung des Chloridgehalts kann in der Userroutine durch Setzen des Parameters $prop(21 + 2) = -2222$ ausgewählt werden. Allerdings werden die Periodenlänge sowie die Angaben zur Übergangsphase dort fest vorgegeben, sodass für die beiden Varianten unterschiedliche Userroutinen genutzt werden müssen. Die dabei notwendigen Anpassungen können Anhang A.2.4 entnommen werden. In Abbildung 38 sind die angesetzten Randbedingungen zu sehen.

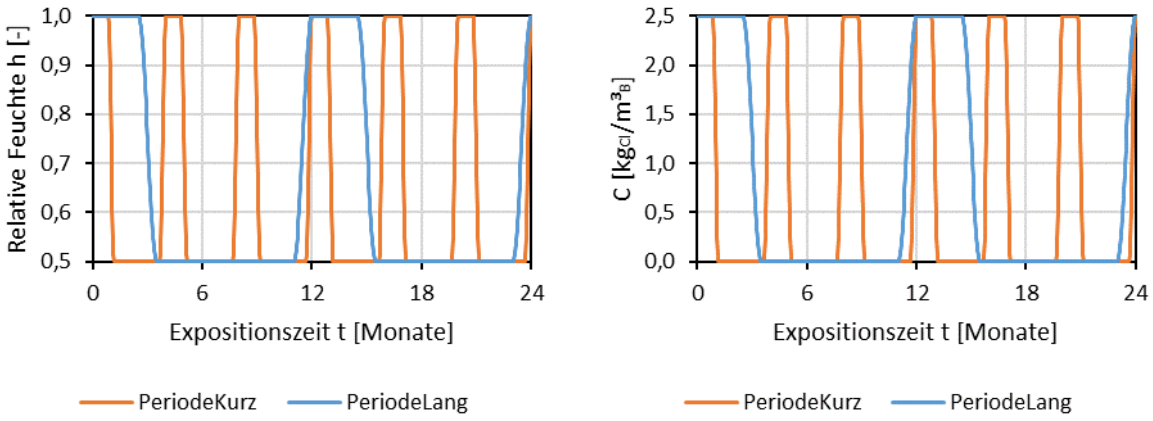


Abbildung 38: Periodische Randbedingungen des Feuchte- und Chloridgehalts für die Varianten PeriodeKurz und PeriodeLang

In diesen Simulationen kommen die in Kapitel 5.1 angegebenen Parameter für die Feuchte-Sorptionsisotherme, für die Feuchte- und Chlorid-Diffusionskoeffizienten sowie für die Chlorid-Bindungsisotherme zur Anwendung.

Abbildung 39 zeigt eine Gegenüberstellung des relativen Feuchtegehalts für beide Varianten nach sechs Monaten sowie nach zwei Jahren. Nach sechs Monaten ist das Bauteil zu diesem Zeitpunkt weder mit Feuchte noch mit Chlorid belastet. Die Ergebnisse für die beiden Periodenlängen können in diesem Fall jedoch nicht gut miteinander verglichen werden, da bei PeriodeKurz die Einwirkungsdauer kürzer ist. Nach zwei Jahren hingegen sind die aufsummierten Einwirkungen gleich groß und ein Vergleich ist möglich.

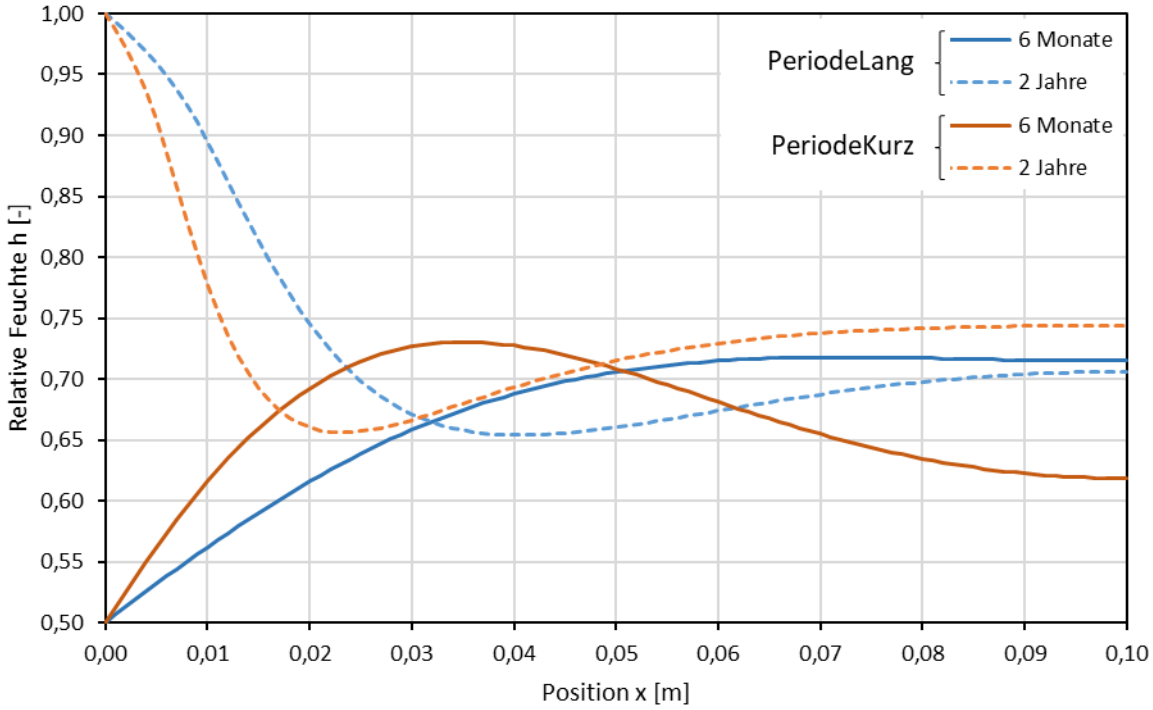


Abbildung 39: Relative Feuchte h nach sechs Monaten und nach zwei Jahren für unterschiedliche Periodenlängen

Da die relative Feuchte im Randbereich nach zwei Jahren bei der kurzen Periode niedriger als bei der längeren Periode ist, lässt sich darauf schließen, dass das Bauteil in den drei unbelasteten Monaten der kurzen Periode besser austrocknen kann als in der unbelasteten Phase der langen Periode. Bei kürzeren Periodenlängen sammelt sich aber mehr Feuchte im Inneren des Bauteils an. Dies ergibt sich daraus, dass das betrachtete Bauteil hier nach 10 cm endet und ein Austreten der Feuchte in den Simulationen dort nicht möglich ist. Bei einem längeren Bauteil würde die Feuchte weiter in das Bauteil eindringen.

Abbildung 40 zeigt den Chloridgehalt zu den gleichen Zeiten wie oben beschrieben. Bei der Variante PeriodeKurz wurde das Bauteil bis zu dem Zeitpunkt nach sechs Monaten mit weniger Chlorid

belastet. Dennoch ist der im Randbereich höhere Chloridgehalt auffällig. Nach zwei Jahren verbleibt bei kürzeren Periodenzeiten insgesamt weniger Chlorid im Bauteil und auch die Eindringtiefe ist etwas geringer. Demnach kann das oben angeführte Zitat bestätigt werden.

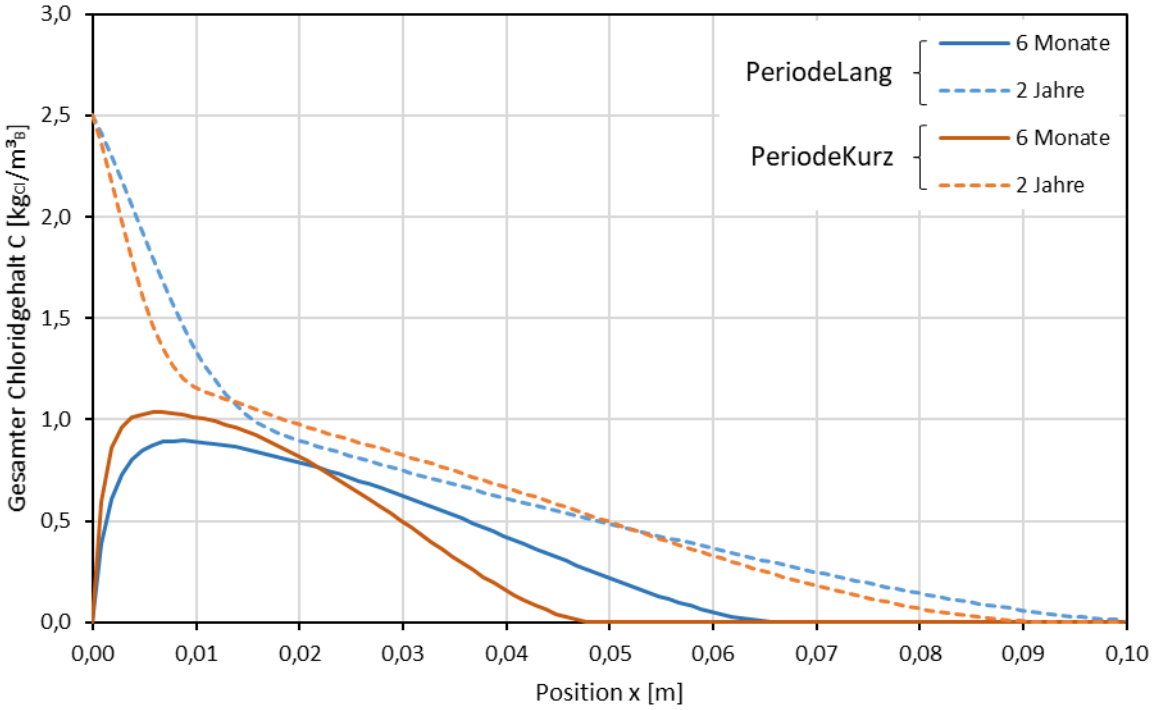


Abbildung 40: Gesamter Chloridgehalt C nach sechs Monaten und nach zwei Jahren für unterschiedliche Periodenlängen

Auch bei der Gegenüberstellung des freien Chloridgehalts in Abbildung 41 ist zu erkennen, dass die Eindringtiefe geringer ist, wenn sich die Einwirkung in kürzeren Abständen verändert. Dabei ist jedoch zu beachten, dass der freie Chloridgehalt in den ersten Zentimetern des Bauteils bei einer kurzen Periode höher ist und der kritische Chloridgehalt hier gegebenenfalls schneller überschritten werden könnte. Zudem ist bemerkenswert, dass der gesamte Chloridgehalt, wie oben beschrieben, in der orange dargestellten Variante zwar niedriger, der Anteil des für die Korrosion kritischen freien Chloridgehalts insgesamt aber höher ist. Diese Erkenntnisse könnten in einer weiteren Untersuchung anhand experimenteller Ergebnisse überprüft werden.

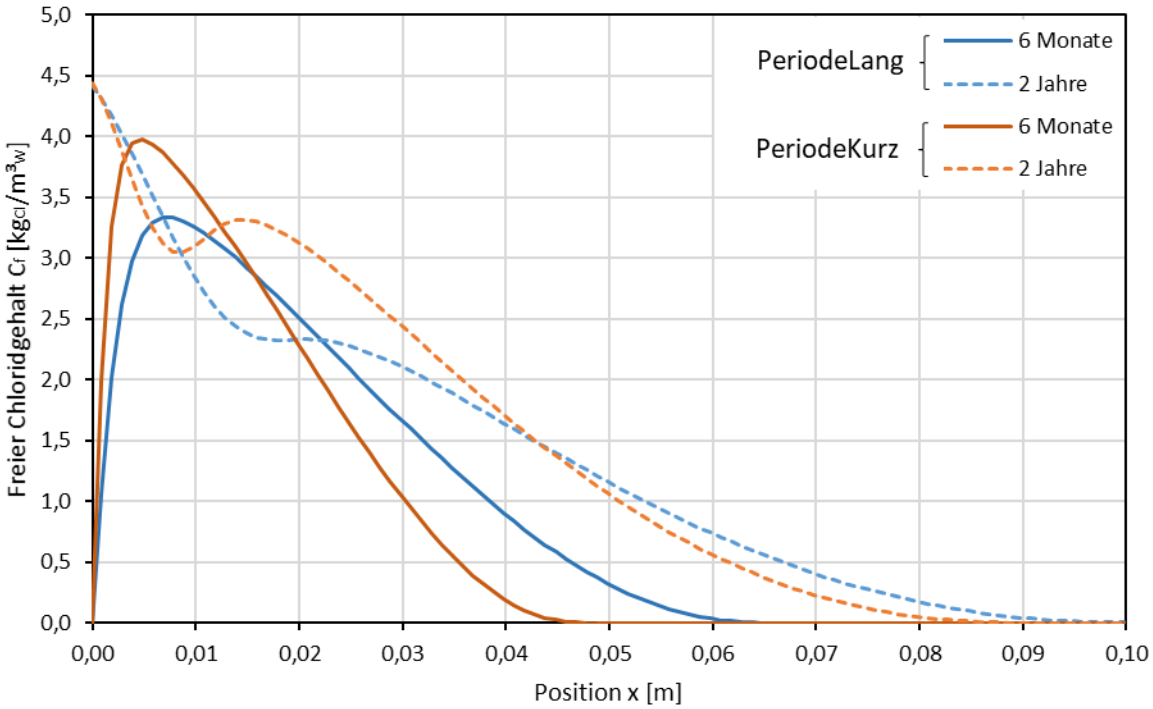


Abbildung 41: Freier Chloridgehalt C_f nach einem und nach zwei Jahren für unterschiedliche Periodenlängen

Um für einen Vergleich zu ermitteln, wieviel Feuchte im Bauteil enthalten wäre, wenn keine Trocknungsphasen auftreten würden, wird eine Simulation ohne Ansatz periodischer Randbedingungen („Konstante RB“) durchgeführt. Die oben beschriebenen und für die Belastungsphasen angesetzten Randbedingungen sind dabei durchgehend wirksam. Die so entstehenden Feuchte- und Chloridprofile sind in Abbildung 42 bis Abbildung 44 in grau dargestellt. Die gezeigten Profile entsprechen einem Zeitpunkt nach sieben Monaten, sodass die aufsummierte Einwirkungsdauer identisch mit den Varianten mit periodischer Einwirkung nach 2 Jahren ist. Wie zu erwarten, ist der Gehalt an Feuchte und Chlorid bei kontinuierlicher Einwirkung höher. In Abbildung 43 ist auffallend, dass die Eindringtiefe beim grau dargestellten Profil des Chloridgehalts geringer ist. Dies ist damit zu erklären, dass das Chlorid in sieben Monaten weniger weit transportiert werden kann, als innerhalb von zwei Jahren.

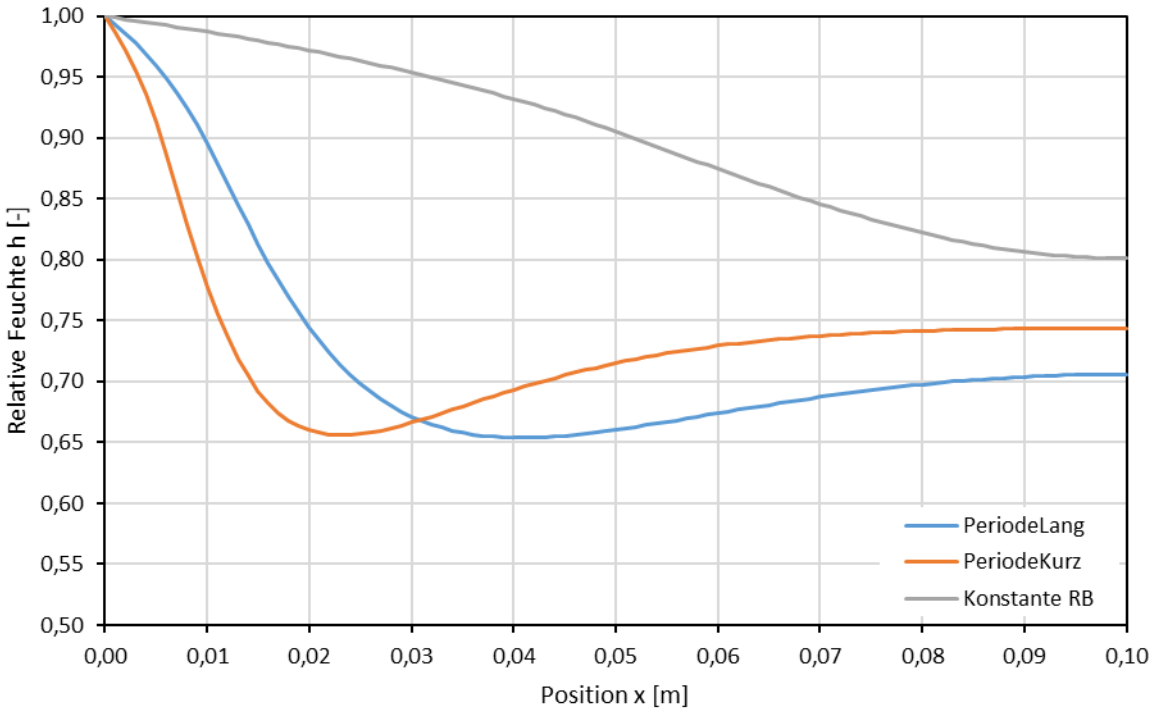


Abbildung 42: Gegenüberstellung der relativen Feuchte h bei zeitlich veränderlichen und konstanten Randbedingungen

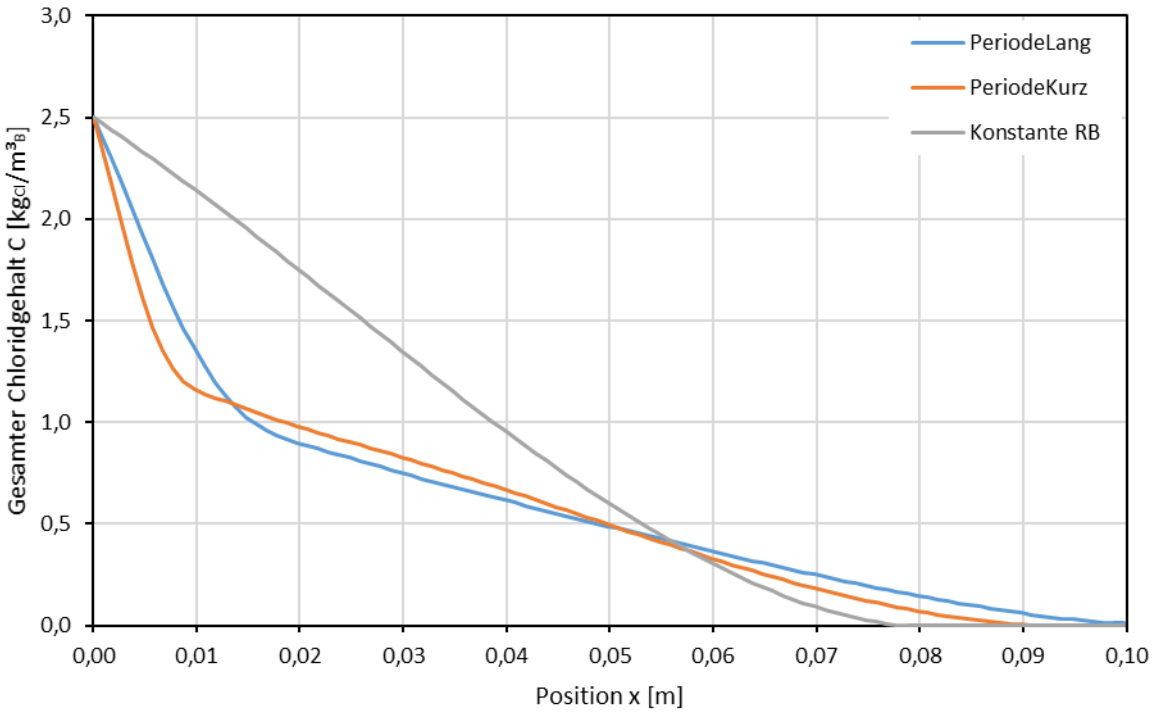


Abbildung 43: Gegenüberstellung des gesamten Chloridgehalts C bei zeitlich veränderlichen und konstanten Randbedingungen

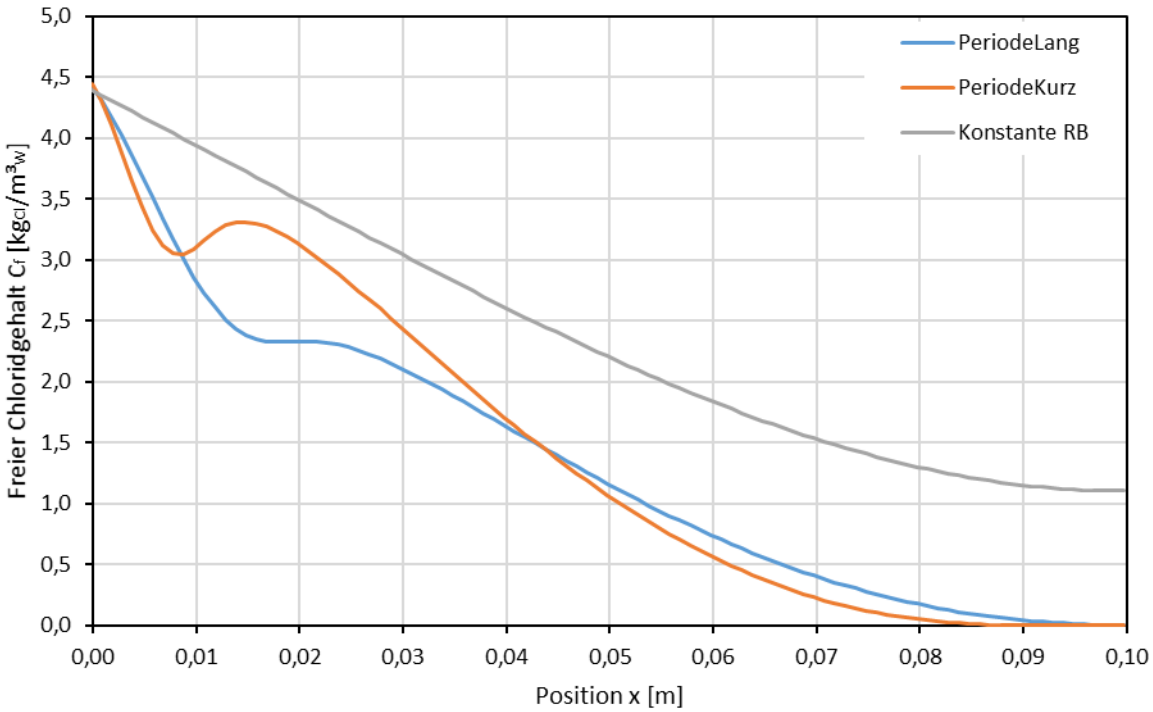


Abbildung 44: Gegenüberstellung des freien Chloridgehalts C_f bei zeitlich veränderlichen und konstanten Randbedingungen

5.2.4 Auswaschen des Chlorids

In einer Erweiterung des oben beschriebenen Beispiels wird das Auswaschen des Chlorids durch Regen betrachtet. Dazu wird die Variante PeriodeLang einer Variante mit zusätzlicher Feuchteeinwirkung in den Phasen ohne Chlorideinwirkung gegenübergestellt. Dies stellt vereinfacht eine Regenzeit im Sommer dar. In Abbildung 45 sind die Randbedingungen der Variante „Regen“ über die Expositionszeit gezeigt.

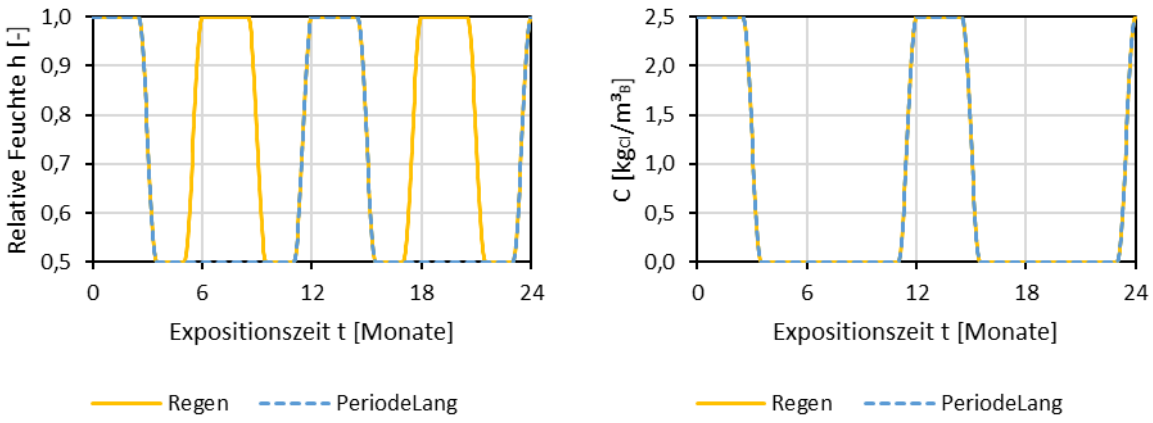


Abbildung 45: Periodische Randbedingungen des Feuchte- und Chloridgehalts für die Varianten PeriodeLang und Regen

Insbesondere in den in Abbildung 46 dargestellten Profilen des freien Chloridgehalts ist zu sehen, dass der Gehalt an freiem Chlorid durch die Regenperiode wesentlich verringert werden kann. Dies ist sowohl nach sechs Monaten als auch nach zwei Jahren deutlich zu erkennen.

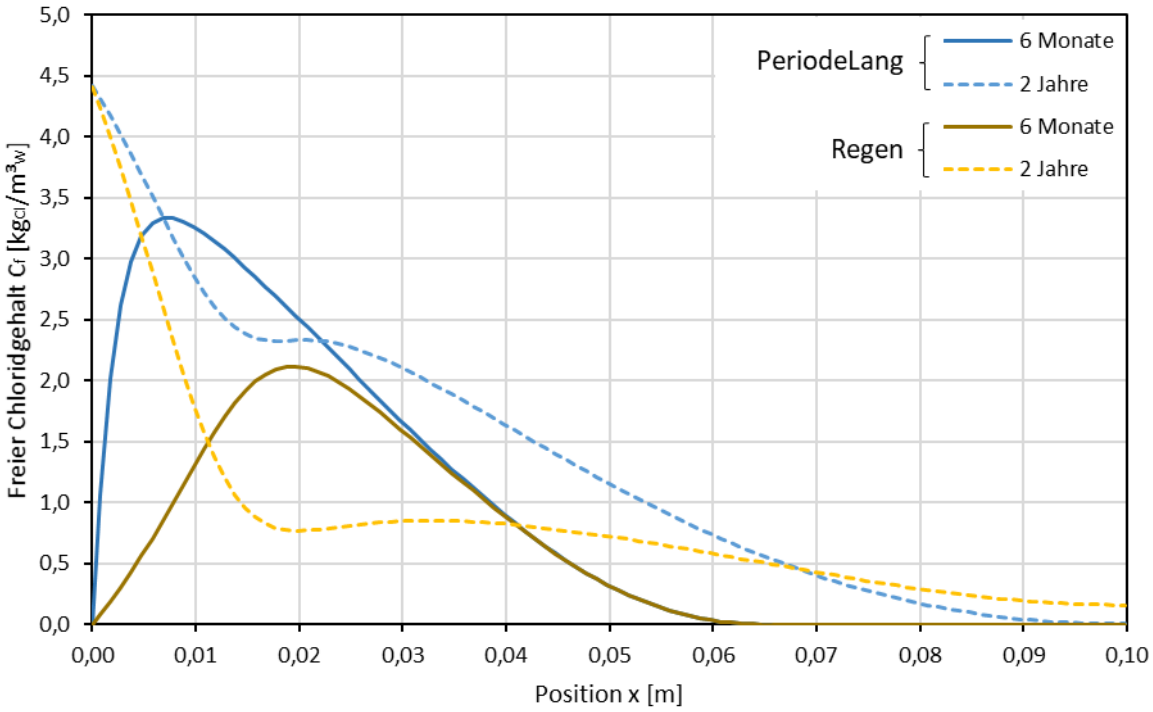


Abbildung 46: Gegenüberstellung des freien Chloridgehalts C_f mit und ohne Berücksichtigung einer Regenphase

Demnach findet auch das Auswaschen des Chlorids, wie es bei [15] beschriebenen wurde, in der numerischen Simulation Berücksichtigung.

5.3 Simulationen mit unterschiedlichen Bauteilgeometrien

Ein Vorteil der Simulation in ANSYS ist die Möglichkeit der Berücksichtigung unterschiedlicher Bauteilgeometrien. Im Folgenden werden zwei mögliche Anwendungen gezeigt.

5.3.1 Dreidimensionales Bauteil

Durch die Vorgabe von drei Randbedingungen auf den Flächen bei $x = 0$, $y = 0$ und $z = 0$ kann Chloridtransport in drei Richtungen simuliert werden. Ein Anwendungsfall dazu wäre beispielsweise die Ecke einer Kaimauer. Mit den in Kapitel 5.1 genannten Materialparametern und folgenden Anfangs- und Randbedingungen ergibt sich nach einem Tag das in Abbildung 47 dargestellte Konturdiagramm für den Chloridgehalt.

Anfangsbedingungen:	$h_{ini} = 0{,}5$	$C_{ini} = 0{,}0\ kg/m^3$
Randbedingungen:	$h_s = 1{,}0$	$C_s = 2{,}5\ kg/m^3$

Die unterschiedlichen Farben in Abbildung 47 (von Rot zu Blau) entsprechen bestimmten Bereichen des Chloridgehalts, siehe Legende am linken Rand. Aufgrund der symmetrischen Vorgaben entsteht auch ein symmetrisches Konturdiagramm des Chloridgehalts.

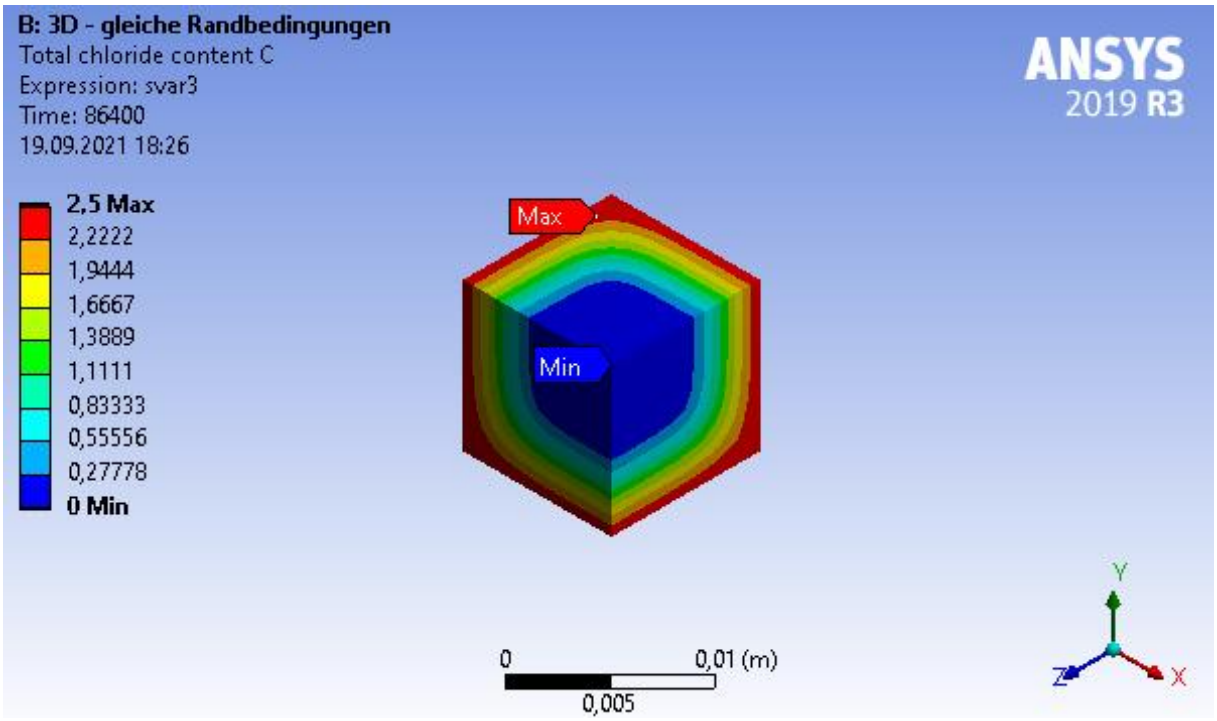


Abbildung 47: Chloridgehalt im dreidimensionalen Bauteil mit gleichen Randbedingungen an drei Randflächen

Bei einer weiteren Simulation werden unterschiedliche Randbedingungen angesetzt. Auf den Flächen bei $x = 0$ und $y = 0$ sind die Randbedingungen für Feuchte und Chlorid gleich denjenigen in der vorherigen Simulation. Für die Randbedingung bei $z = 0$ wird hingegen angenommen, dass an dieser Fläche Wasser ohne darin gelöstes Chlorid ansteht. Demnach betragen der Feuchtegehalt $h_s = 1{,}0$ und der Chloridgehalt $C_s = 0{,}0\ kg_{Cl}/m_B^3$. Dabei entsteht nach einem Tag das in Abbildung 48 dargestellte asymmetrische Konturdiagramm des Chlorids.

In der Userroutine werden die Randbedingungen nacheinander zugeordnet, d. h. zunächst diejenigen an der Fläche bei $x = 0$, dann diejenigen bei $y = 0$ und zum Schluss diejenigen bei $z = 0$. Nachdem einem Integrationspunkt ein Randwert zugeordnet wurde, wird die Userroutine verlassen. Daher haben die Randbedingungen an den Flächen bei $x = 0$ und bei $y = 0$ Einfluss auf die Randbedingungen an den Schnittkanten der Fläche bei $z = 0$ mit den anderen beiden Flächen. Umgekehrt ist dies aber nicht der Fall.

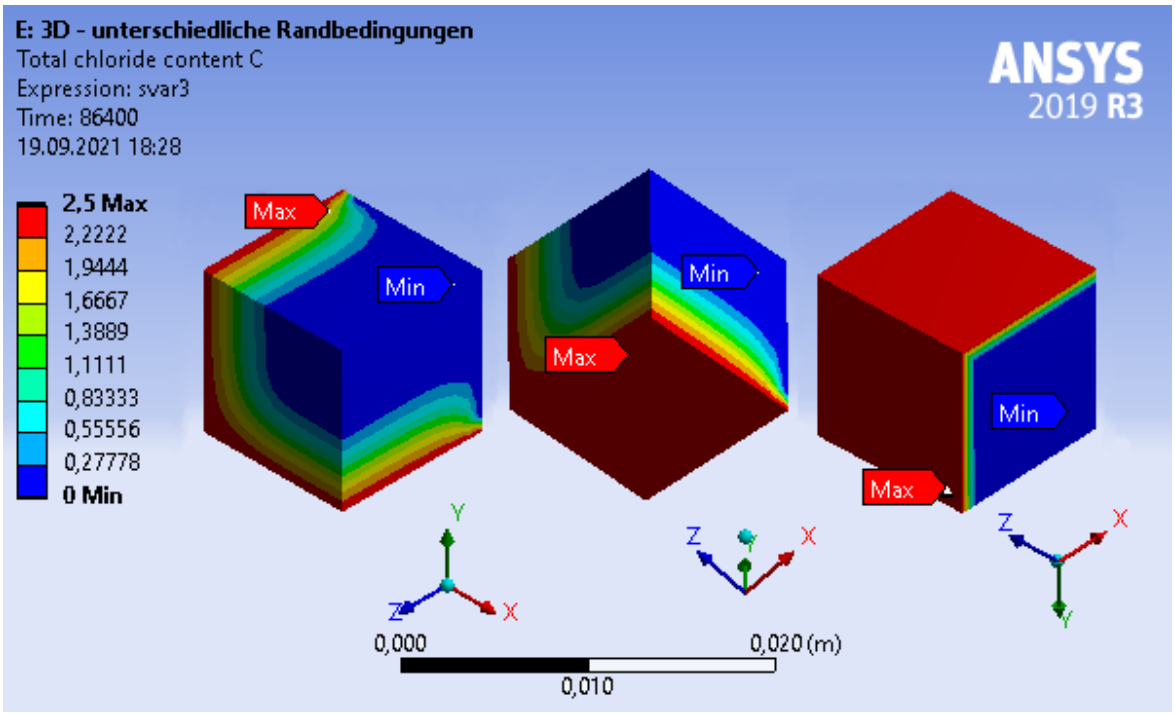


Abbildung 48: Chloridgehalt im dreidimensionalen Bauteil mit unterschiedlichen Randbedingungen an drei Randflächen

5.3.2 Bauteil mit Einzelriss

In der vorliegenden Arbeit wird der Beton grundsätzlich als nicht gerissen angenommen. In der Realität sind die Bauteile jedoch mechanischer Belastung sowie Frost-Tau-Wechseln ausgesetzt, was zur Rissbildung im Beton führen kann. Dies beeinflusst den Transport des Chlorids [35, 39].

Aufgrund der vielfältigen Möglichkeiten der Modellierung in ANSYS kann das Vorhandensein eines Risses abgebildet werden. Dazu wird eine ebene Fläche bestehend aus würfelförmigen Elementen modelliert, in der eine Reihe Elemente fehlt. Diese stellt den Riss dar. Aufgrund der Symmetrie genügt es, die Fläche in der Hälfte des Risses zu halbieren, sodass die Zahl der Elemente reduziert werden kann. In diesem Fall definiert die Elementgröße die halbe Rissweite. Eine Veranschaulichung dieser Geometrie für eine Rissweite von einem Zentimeter ist in Abbildung 49 zu finden. Dabei stellt die Einkerbung auf der linken unteren Seite der Geometrie den Riss dar.

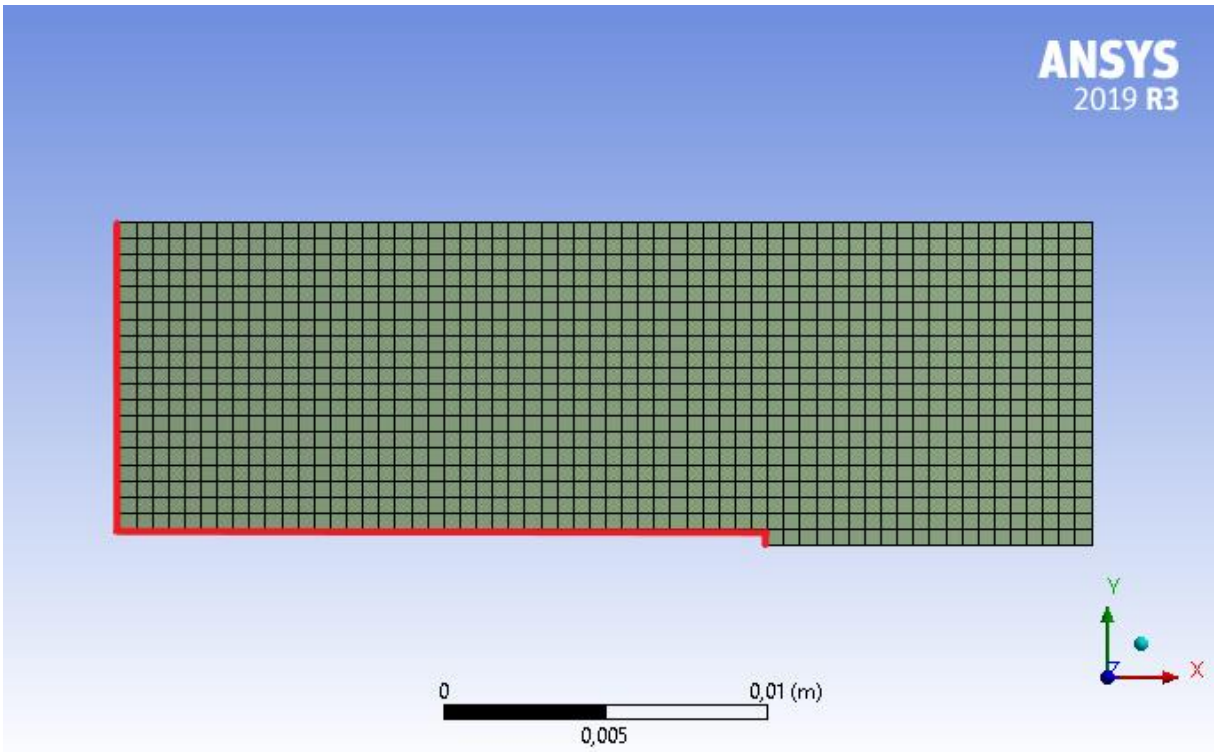


Abbildung 49: Geometrie für die Riss-Modellierung mit Darstellung des Netzes, an rot gekennzeichneten Flächen Randbedingungen vorgegeben

Um das Eindringen des chloridhaltigen Wassers in den Riss zu simulieren, werden Randbedingungen an den drei in Abbildung 49 rot markierten Seiten der Bauteilgeometrie vorgegeben. Diese Vorgabe erfolgt direkt in der Userroutine und kann durch Einstellen des Parameters $prop(21 + 2)$ auf -1111 aktiviert werden. Die Elementgröße und damit die Rissweite ist jedoch im Quelltext fest vorzugeben, sodass eine Anpassung dieser Werte eine jeweils neu kompilierte Userroutine erfordert.

Erneut handelt es sich um ein Bauteil mit 50 %-igem Feuchtegehalt, das außen mit Wasser $(h_s = 1{,}0)$ und 2,5 kg Chlorid pro Quadratmeter Beton belastet wird. Die Materialparameter entsprechen den Angaben in Kapitel 5.1. In Abbildung 50 ist das Konturdiagramm für den Chloridgehalt nach einem Tag zu sehen. Die vorgegebenen Randbedingungen sind erfüllt und sowohl an der konvexen als auch konkaven Ecke ergibt sich ein plausibler Verlauf der Konturen des Chloridgehalts.

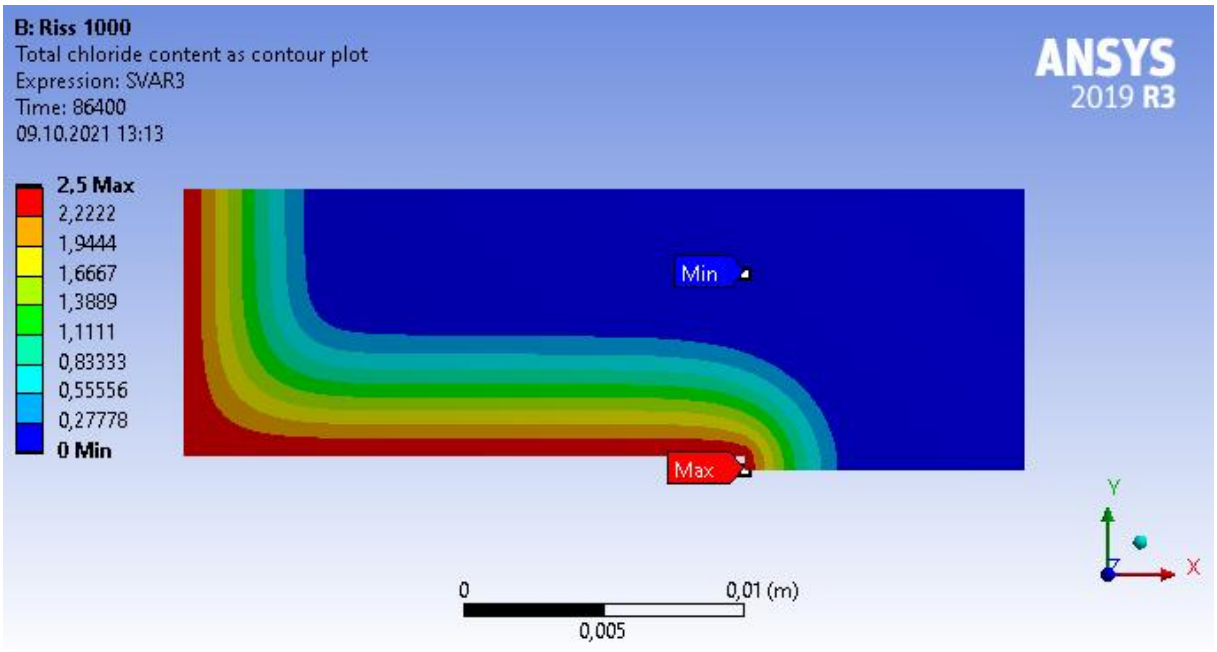


Abbildung 50: Chloridgehalt im Bauteil mit Einzelriss nach einem Tag

6 Zusammenfassung

Die Dauerhaftigkeit von Stahlbetonbauteilen kann durch Chloride wesentlich beeinträchtigt werden. Übersteigt der Chloridgehalt im Beton einen kritischen Wert, beginnt die Stahlbewehrung zu rosten und der Stahlquerschnitt reduziert sich. Das kann zu einer verringerten Tragsicherheit führen. Um den Zeitpunkt abzuschätzen, wann im Bereich der Bewehrung der kritische Chloridgehalt überschritten wird, kann der Chloridtransport mit rechnerischen Mitteln simuliert werden.

Zur Modellierung des Chloridtransports sind in der Literatur verschiedene Ansätze zu finden. So wird in einigen technischen Normen der Chloridtransport ohne Berücksichtigung des Feuchtetransports beschrieben. In der Realität muss jedoch Wasser als Transportmittel vorhanden sein, weshalb der Chloridtransport von der zeitabhängigen Feuchteverteilung im Beton abhängt. In der vorliegenden Arbeit erfolgte deshalb die Simulation des Chloridtransports unter Berücksichtigung des gleichzeitig stattfindenden Feuchtetransports.

Zur Simulation der gekoppelten Transportprozesse wurde die Software ANSYS verwendet. Mit dieser lässt sich instationärer Wärmetransport implizit berechnen. Aufgrund des analogen Aufbaus der Differentialgleichungen für Wärme- und Feuchtetransport kann die in ANSYS implementierte Berechnungsmethode auf den Feuchtetransport übertragen werden. Es ist jedoch nicht möglich, einen weiteren Transportvorgang daran zu koppeln. Um den Chloridtransport in die Software zu implementieren, wurde deshalb mittels einer Userroutine eine explizite Berechnungsmethode hinzugefügt, durch die der Chloridgehalt im Bauteil am Ende eines Zeitschritts aus den Zustandsvariablen zu Beginn des betreffenden Zeitschritts ermittelt werden kann.

Die in der vorliegenden Arbeit für den Chloridtransport verwendete Differentialgleichung wurde der Literatur entnommen. Neben dem gewählten Ansatz nach Medved‘ und Černý [2] können jedoch auch andere Varianten genutzt werden, wie am Beispiel der Differentialgleichung nach Ababneh et al. [4] gezeigt wurde.

Die verwendete numerische Methode zur Lösung der Differentialgleichung wurde durch den Vergleich mit Daten aus der Literatur validiert. Dies erfolgte sowohl für ein feuchtegesättigtes Bauteil, also ohne Berücksichtigung des Feuchtetransports, als auch für ein ungesättigtes Bauteil. Zwei weitere Vergleiche mit veröffentlichten Daten zum Chloridtransport waren hingegen nicht erfolgreich. Hierbei fehlten jedoch teilweise Angaben zu den Materialparametern, wodurch die Abweichungen möglicherweise zu erklären sind.

Ein wesentlicher Vorteil der numerischen Simulation mittels ANSYS liegt darin, dass es keine Beschränkungen bezüglich der Bauteilgeometrie gibt. Anhand von Beispielen wurden in der vorliegenden Arbeit Anwendungsmöglichkeiten des entwickelten Simulationsmodells gezeigt, unter anderem bei Simulationen des Chloridtransports in dreidimensionalen oder einen Einzelriss enthaltenden Bauteilen. Derzeit gibt es dabei jedoch die Einschränkung, dass ein orthogonales Finites-Elemente-Netz aus Elementen mit linearem Ansatz verwendet werden muss.

Ein weiterer Vorteil der Simulation mit der Software ANSYS ist die Möglichkeit der Vorgabe von zeitlich veränderlichen Randbedingungen. In der vorliegenden Arbeit wurde gezeigt, dass sowohl der absolute Feuchtegehalt als auch die Periodizität der Randbedingungen den Chloridgehalt im Bauteil beeinflusst.

Um den Chloridtransport in unterschiedlichen Materialien zu simulieren, ist das Materialverhalten in der Benutzeroberfläche von ANSYS entsprechend anzupassen. Es können materialspezifische Angaben zur Speicherung der Feuchte, zum Feuchte- sowie Chlorid-Diffusionskoeffizienten und zur Bindung der Chloridionen gemacht werden. Es stehen unterschiedliche Ansätze aus der Literatur zur Auswahl. Zukünftig lassen sich weitere Materialmodelle implementieren.

Das vorgestellte Simulationsmodell steht für weitere Anwendungen zur Verfügung. Es wäre interessant, die Ergebnisse der Simulationen mit eigenen experimentellen Ergebnissen zu vergleichen, wobei dann alle Materialparameter bekannt wären oder gemessen werden könnten. Auch die in der Arbeit gezeigten Effekte aus der zeitlichen Veränderung der Randbedingungen sowie aus der Auswaschung des Chlorids durch Regen könnten in einer weiterführenden Untersuchung anhand experimenteller Daten verifiziert werden.

Literatur

[1] Statistisches Bundesamt, Bauen und Wohnen – Baugenehmigungen von Wohn- und Nichtwohngebäuden nach überwiegend verwendetem Baustoff. Lange Reihen z. T. ab 1980, https://www.destatis.de/DE/Themen/Branchen-Unternehmen/Bauen/_inhalt.html, Juli 2021.

[2] I. Medved', R. Černý, Coupled Water and Salt Transport in Porous Materials: Rapid Determination of a Varying Diffusion Coefficient from Experimental Data, *Transport in Porous Media* 105(2014)3, 597-610. https://doi.org/10.1007/s11242-014-0386-4.

[3] P. Rucker-Gramm, Modellierung des Feuchte- und Salztransports unter Berücksichtigung der Selbstabdichtung in zementgebundenen Baustoffen. Dissertation, Technische Universität München, 2008.

[4] A. Ababneh, F. Benboudjema, Y. Xi, Chloride Penetration in Nonsaturated Concrete, *Journal of Materials in Civil Engineering* 15(2003)2, 183-191. https://doi.org/10.1061/(ASCE)0899-1561(2003)15:2(183).

[5] F. H. Wittmann, P. Zhang, T. Zhao, Damage of Concrete under Combined Actions, *Restoration of Buildings and Monuments* 17(2011)5, 321-330. https://doi.org/10.1515/rbm-2011-6469.

[6] G. Kapteina, Modell zur Beschreibung des Eindringens von Chlorid in Beton von Verkehrsbauwerken. Dissertation, Technische Universität München, 2011.

[7] M. Krus, Feuchtetransport- und Speicherkoeffizienten poröser mineralischer Baustoffe – Theoretische Grundlagen und neue Messtechniken. Dissertation, Universität Stuttgart, 1995.

[8] H. Künzel, Verfahren zur ein- und zweidimensionalen Berechnung des gekoppelten Wärme- und Feuchtetransportes in Bauteilen mit einfachen Kennwerten. Dissertation, Universität Stuttgart, 1994.

[9] Y. Xi, Z. P. Bažant, H. M. Jennings, Moisture diffusion in cementitious materials Adsorption isotherms, *Advanced Cement Based Materials* 1(1994)6, 248-257. https://doi.org/10.1016/1065-7355(94)90033-7.

[10] S. Brunauer, J. Skalny, E. Bodor, Adsorption on nonporous solids, *Journal of Colloid and Interface Science* 30(1969)4, 546-552. https://doi.org/10.1016/0021-9797(69)90423-8.

[11] B. Villmann, V. Slowik, P. Wang, F. H. Wittmann, Infinitesimal Shrinkage as Determined by Inverse Analysis Based on Drying and Shrinkage Tests. In: F.-J. Ulm, H. Jennings, R. Pellenq (eds.), Proceedings of the Ninth International Conference on Creep, Shrinkage, and Durability Mechanics (CONCREEP-9), September 22-25, 2013, Cambridge, Massachusetts, United States, 158-165.

[12] Y. Xi, Z. P. Bažant, L. Molina, H. M. Jennings, Moisture diffusion in cementitious materials Moisture capacity and diffusivity, *Advanced Cement Based Materials* 1(1994)6, 258-266. https://doi.org/10.1016/1065-7355(94)90034-5.

[13] R. M. Christensen, Mechanics of composite materials. Dover Publications, Inc., Mineola, NY, 1979.

[14] C. Andrade, Concepts On The Chloride Diffusion Coefficient. In: C. Andrade (ed.), Third International RILEM Workshop on Testing and Modelling the Chloride Ingress into Concrete, Madrid, Spain, September 9 - 10, International Union of Laboratories and Experts in Construction Materials, Systems and Structures, RILEM proceedings PRO no. 38. RILEM Publications, Bagneux, 2004, 3-17.

[15] fib model code for concrete structures 2010. International Federation for Structural Concrete, fib CEB-FIP. Ernst & Sohn, Berlin, 2013.

[16] G. Gaal, Prediction of deterioration of concrete bridges. Delft University Press, Delft, 2004.

[17] J. Bear, Y. Bachmat, Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media, Theory and Applications of Transport in Porous Media, 4, Springer, Dordrecht, 1990.

[18] B. Martín-Pérez, S. J. Pantazopoulou, M. Thomas, Numerical solution of mass transport equations in concrete structures, *Computers & Structures* 79(2001)13, 1251-1264. https://doi.org/10.1016/S0045-7949(01)00018-9.

[19] A. V. Saetta, R. V. Scotta, R. V. Vitaliani, Analysis of Chloride Diffusion into Partially Saturated Concrete, *ACI Materials Journal* 905. https://doi.org/10.14359/3874.

[20] E. Bastidas-Arteaga, A. Chateauneuf, M. Sánchez-Silva, P. Bressolette, F. Schoefs, A comprehensive probabilistic model of chloride ingress in unsaturated concrete, *Engineering Structures* 33(2011)3, 720-730. https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2010.11.008.

[21] M. Homann, Feuchtetransport. In: P. Häupl, G. Höfker, M. Homann, C. Kölzow, A. Maas, C. Nocke, O. Riese, W. M. Willems (Hrsg.), Lehrbuch der Bauphysik. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2017, 196-239.

[22] S. Lay, Abschätzung der Wahrscheinlichkeit tausalzinduzierter Bewehrungskorrosion – Baustein eines Systems zum Lebenszyklusmanagement von Stahlbetonbauwerken. Dissertation, Technische Universität München, 2006.

[23] J. Yang, P. Zhang, J. Feng, Advances in Chloride Ion Diffusion Coefficient Test Research for Concrete. In: R. Mangabhai, Y. Bai, S. Ghazizadeh, S. Shi (eds.), ILCCC2019, June 24-26, 2019, London.

[24] F. H. Wittmann, T. Zhao, F. Jiang, P. Zhang, Influence of Moisture and Ion Migration on Durability and Service Life of Cement-based Materials. In: Faculty of Construction and Environment, Research Institute for Sustainable Urban Development (eds.), Proceedings of the first International Conference on Performance-based and Life-cycle Structural Engineering (PLSE 2012), December 5-7, 2012, 925-933.

[25] Y. Xi, Z. P. Bažant, Modeling Chloride Penetration in Saturated Concrete, *Journal of Materials in Civil Engineering* 11(1999)1, 58-65. https://doi.org/10.1061/(ASCE)0899-1561(1999)11:1(58).

[26] Martys, Torquato, Bentz, Universal scaling of fluid permeability for sphere packings, *Physical Review E* 50(1994)1, 403-408. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.50.403.

[27] Z. P. Bažant, L. J. Najjar, Nonlinear water diffusion in nonsaturated concrete, *Matériaux et Constructions* 5(1972)1, 3-20. https://doi.org/10.1007/BF02479073.

[28] C. L. Page, N. R. Short, A. El Tarras, Diffusion of chloride ions in hardened cement pastes, *Cement and Concrete Research* 11(1981)3, 395-406. https://doi.org/10.1016/0008-8846(81)90111-3.

[29] M. Jiřičková, R. Černý, Chloride Binding in Building Materials, *Journal of Building Physics* 29(2006)3, 189-200. https://doi.org/10.1177/1744259106060138.

[30] H. Freundlich, Über die Adsorption in Lösungen, *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 57U(1907)1, 385-470. https://doi.org/10.1515/zpch-1907-5723.

[31] I. Langmuir, Surface Chemistry, *Chemical Reviews* 13(1933)2, 147-191. https://doi.org/10.1021/cr60045a001.

[32] L. Tang, L.-O. Nilsson, Chloride binding capacity and binding isotherms of OPC pastes and mortars, *Cement and Concrete Research* 23(1993)2, 247-253. https://doi.org/10.1016/0008-8846(93)90089-R.

[33] W. Hofmann, Differenzenverfahren für Partielle Differentialgleichungen. Universität Hamburg, www.math.uni-hamburg.de/home/hofmann/WS0506/Skripte/Part-Dgln-Diff-Verf.pdf, 2005 [Zugriff am: 31.08.2021].

[34] E. A. B. Koenders, Computational Methods for Building Physics and Construction Materials – Chloride diffusion, explicit in Excel Example. TU Darmstadt, RILEM EAC and TUDa Course,, 2021.

[35] F. H. Wittmann, P. Zhang, T. Zhao, Influence of Combined Environmental Loads on Durability of Reinforced Concrete Structures, *Restoration of Buildings and Monuments* 12(2006)4, 349-362. https://doi.org/10.1515/rbm-2006-6069.

[36] H. Zhan, F. H. Wittmann, Relation between the Silicon Resin Profiles in Water Repellent Treated Concrete and the Effectiveness as a Chloride Barrier / Zusammenhang zwischen dem Tiefenprofil des Silikonharzes und der Wirksamkeit einer Hydrophobierung als Chloridschranke, *Restoration of Buildings and Monuments* 11(2005)1, 35-46. https://doi.org/10.1515/rbm-2005-5926.

[37] HeidelbergCement AG, Betontechnische Daten, Leimen, Ausgabe 2017.

[38] C. Andrade, D. Whiting, A comparison of chloride ion diffusion coefficients derived from concentration gradients and non-steady state accelerated ionic migration, *Materials and Structures* 29(1996)8, 476-484. https://doi.org/10.1007/BF02486282.

[39] L. Li, Q. Liu, L. Tang, Z. Hu, Y. Wen, P. Zhang, Chloride penetration in freeze–thaw induced cracking concrete: A numerical study, *Construction and Building Materials* 302(2021). https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2021.124291.

[40] H. F. W. Taylor, A method for predicting alkazi ion concentrations in cement pore solutions, *Advances in Cement Research* 1(1987)1, 5-17. https://doi.org/10.1680/adcr.1987.1.1.5.

Anhang

A.1 Berechnung der Volumenanteile 93

A.2 Userroutine 95

A.2.1 Unterprogramm für den Feuchtetransport 95

A.2.2 Den Chloridtransport betreffende Quelltextauszüge 96

A.2.3 Anpassung der Userroutine für die Differentialgleichung nach Ababneh 99

A.2.4 Anpassungen für zeitlich veränderliche Randbedingungen 100

A.3 Zusammenstellung der für die Userroutine benötigten Materialparameter 101

A.3.1 Verwendete Materialparameter für Kapitel 3.3 und 3.4 103

A.3.2 Verwendete Materialparameter für Kapitel 4.1 105

A.3.3 Verwendete Materialparameter für Kapitel 4.2 107

A.3.4 Verwendete Materialparameter für Kapitel 4.3.1 109

A.3.5 Verwendete Materialparameter für Kapitel 4.3.2 111

A.3.6 Verwendete Materialparameter für Kapitel 5.2.2 113

Tabellenverzeichnis Anhang

Tabelle A 1: Parameter zur Bestimmung des Hydratationsgrads der Bestandteile des Zements 94

Tabelle A 2: Anpassungen für zeitlich veränderliche Randbedingungen 100

Tabelle A 3: Übersicht der Eingabeparameter für die Userroutine (in ANSYS Workbench zu definieren in Engineering Data) 101

Tabelle A 4: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 3.3 und 3.4 103

Tabelle A 5: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 4.1 105

Tabelle A 6: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 4.2 107

Tabelle A 7: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 4.3.1 109

Tabelle A 8: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 4.3.2 111

Tabelle A 9: Verwendete Materialparameter für Simulationen in Kapitel 5.2.2 113

A.1 Berechnung der Volumenanteile

In der Bindungsisotherme nach Xi et al. [25] findet das Massenverhältnis β_{CSH} der C-S-H-Phasen zum Beton Berücksichtigung. Da die Dichten der C-S-H-Phasen und des Betons etwa gleich sind, wird der Wert wie folgt aus dem Volumenanteil f_{CSH} ermittelt:

$$\beta_{CSH} \approx f_{CSH} = \frac{V_{CSH}}{V_B} = 1 - f_1 - f_{Poren} \tag{50}$$

Die Berechnung der einzelnen Volumenanteile erfolgt nach dem Modell von Jennings und Tennis [33]. Der Parameter f_1 enthält den Anteil an unhydratisierten Zementpartikeln und kristallinen Phasen wie Calciumhydroxid und Ettringit. Der Volumenanteil an Poren im Beton wird durch den Parameter f_{Poren} beschrieben. Letzterer lässt sich bei Ababneh et al. [4] nach Gleichung (81) ermitteln:

$$f_{Poren} = \big((1 - z) - z\Omega\big)p \tag{81}$$

mit z ... Anteil Zement an einem Gramm Zementleim $[g]$

Ω ... Parameter zur Beschreibung des Hydrationsgrades des Zements

p ... Faktor zur Umrechnung des Volumens V in $[cm^3/g]$ in einen Volumenanteil f $[-]$

Der Anteil an Zement z sowie der Umrechnungsfaktor p werden wie folgt aus dem Wasserzementwert w/z errechnet:

$$z = \frac{1}{1 + w/z} \tag{82}$$

$$p = \frac{\big(1 + (w/z)\big)\rho_Z}{1 + (w/z) \cdot (\rho_Z/\rho_W)} \tag{83}$$

mit ρ_Z … Dichte des Zements $[g/cm^3]$

ρ_W … Dichte des Wassers $[g/cm^3]$

Der Hydratationsgrad des Zements setzt sich aus Faktoren zusammen, die die Hydratation der Bestandteile des Zements C_3S, C_2S, C_3A und C_4AF beschreiben, und ist nach Gleichung (84) definiert.

$$\Omega = \Delta_{C3S} \cdot \alpha_{C3S} \cdot w_{C3S} + \Delta_{C2S} \cdot \alpha_{C2S} \cdot w_{C2S} + \Delta_{C3A} \cdot \alpha_{C3A} \cdot w_{C3A} + \Delta_{C4AF} \cdot \alpha_{C4AF} \cdot w_{C4AF} \tag{84}$$

mit Δ_i ... Volumenänderung der einzelnen Bestandteile des Zements $[cm^3/g]$

α_i ... Grad der Hydratation der einzelnen Bestandteile des Zements

w_i ... Prozentsatz des Gewichts der einzelnen Bestandteile im Zement

Die Werte für die Volumenänderung der einzelnen Bestandteile Δ_i entstammen der stöchiometrischen Berechnung bei Jennings und Tennis [33]. Die Prozentsätze des Gewichts w_i wurden in der vorliegenden Arbeit den Angaben von Taylor [40] entnommen. Beide Werte sind in Tabelle A 1 enthalten. Der Grad der Hydratation kann nach Jennings und Tennis [33] wie folgt bestimmt werden:

$$\alpha_i = 1 - \exp(-a_i(t - b_i)^{c_i}) \tag{85}$$

mit a_i, b_i, c_i ... experimentell ermittelte Parameter (siehe Tabelle A 1)

t ... Alter des Probekörpers in Tagen $[days]$

Tabelle A 1: Parameter zur Bestimmung des Hydratationsgrads der Bestandteile des Zements

	Δ_i	w_i	a_i	b_i	c_i
C_3S	0,437 cm^3/g	60 %	0,70	0,90	0,25
C_2S	0,503 cm^3/g	15 %	0,12	0,00	0,46
C_3A	0,397 cm^3/g	8 %	0,77	0,90	0,28
C_4AF	0,136 cm^3/g	10 %	0,55	0,90	0,26

Es ist zu beachten, dass die Angaben zu den Parametern a_i, b_i, c_i bei Jennings und Tennis [33] und Ababneh et al. [4] von den ursprünglichen experimentellen Daten nach Taylor [40] abweichen. In der vorliegenden Arbeit wurden die Daten gemäß Taylor [40] verwendet.

Mit einer Dichte des Zements ρ_Z von 3,1 g/cm^3, einer Dichte des Wassers ρ_W von 1,0 g/cm^3 und einem Wasserzementwert von 0,6 ergibt sich der Anteil an Poren f_{Poren} zu 0,349.

Parameter f_1 setzt sich, wie in Gleichung (86) zu sehen, aus den Anteilen an unhydratisierten Zementpartikeln f_{core}, Calciumhydroxid f_{CH} und Ettringit f_{AFm} zusammen.

$$f_1 = f_{core} + f_{CH} + f_{AFm} \tag{86}$$

Die drei Anteile lassen sich wie folgt ermitteln:

$$f_{core} = c\left(\frac{1-\psi}{\rho_c}\right)p \tag{87}$$

mit $\psi = \alpha_{C3S} \cdot w_{C3S} + \alpha_{C2S} \cdot w_{C2S} + \alpha_{C3A} \cdot w_{C3A} + \alpha_{C4AF} \cdot w_{C4AF}$

$$f_{CH} = c\ (0{,}189 \cdot \alpha_{C3S} \cdot w_{C3S} + 0{,}058 \cdot \alpha_{C2S} \cdot w_{C2S})\ p \tag{88}$$

$$f_{AFm} = c\ (0{,}849 \cdot \alpha_{C3A} \cdot w_{C3A} + 0{,}472 \cdot \alpha_{C4AF} \cdot w_{C4AF})\ p \tag{89}$$

Damit ergibt sich der Anteil f_1 zu 0,358, woraus sich ein Volumenanteil an CSH-Phasen f_{CSH} von 0,294 ermitteln lässt. Dieser Wert entspricht dem Masseanteil β_{CSH} wie er in der vorliegenden Arbeit verwendet wird.

A.2 Userroutine

Die Userroutine wurde in Zusammenarbeit mit Prof. Dr.-Ing. Volker Slowik und Dr. rer. nat. Beate Villmann auf der Grundlage des von ANSYS zur Verfügung gestellten Beispiels für den Wärmetransport (usermatth.f) entwickelt. Die Leistungen der Verfasserin betrafen hauptsächlich die Programmierung des Materialverhaltens mittels der im Folgenden aufgelisteten Unterprogramme sowie die Überprüfung der Funktionalität der gesamten Userroutine.

A.2.1 Unterprogramm für den Feuchtetransport

Im Folgenden ist der Quelltext des Unterprogramms für den Feuchtetransport (Subroutine MoistureTransport) aufgelistet.

```
c Moisture Transport
      Subroutine MoistureTransport
      IMPLICIT none
      double precision w_max, A, B, C, b_tilde, c_tilde, D_v, w, h,
     &                 h1, w100, dwdh, conductivity,
     &                 d2wdh2, dconddt, D, E, F,
     &                 Temp1, Temp_max, Ew
      double precision, parameter :: pi = 3.141592653589793
      double precision, parameter :: zero = 0.0d0
      integer i,j
      logical nonlin

c Material parameters
      w_max = prop(1)       ! [Ws/kg]
      A = prop(2)           ! dimensionless
      B = prop(3)       ! dimensionless
      C = prop(4)       ! dimensionless
      b_tilde = prop(5)     ! [m²/s]
      c_tilde = 1/prop(6)   ! c_tilde in [kg/Ws]
      D_v = prop(7)         ! [Ws/(msK)]
      Temp1 = prop(9)       ! [K]
      Temp_max = prop(10)   ! [K]
      h1 = Temp1 / Temp_max ! h1 is dimensionless
      w100 = prop(11)       ! [Ws/kg]
      if (abs(prop(12))>=1.5d0) then
                              nonlin=.true.  ! nonlinear desorption isotherm
                              else
                              nonlin=.false. ! bilinear desorption isotherm
      endif

c Relative Humidity (Temperature, Potential)
      h = Temp / Temp_max

c Desorption isotherm
      if (nonlin) then    ! D, E, F in [Ws/kg]
        D = (w_max-w100*(-2*A*h1**3-B*h1**2+3*A*h1**2+2*B*h1+1-A-B))/
     &  (h1**2-2*h1+1)
        E = w100*(3*A*h1**2+2*B*h1+C)-2*D*h1
        F = w_max-D-E
      else
        D = 0.d0
        E = (w_max-w100*(C*h1+1-C))/(1-h1)
        F = w_max-E
      end if

c Moisture content and derivatives
      iso: if (nonlin) then
      nlin: if (h < h1) then
             w = w100 * (A*h**3 + B*h*h + C*h + (1-A-B-C))
             dwdh = w100 * (3*A*h*h + 2*B*h + C)
             d2wdh2 = w100 * (6*A*h + 2*B)
       else
```

```
            w = D*h*h + E*h + F
            dwdh = 2*D*h + E
            d2wdh2 = 2*D
       end if nlin
      else
      blin: if (h < h1) then
            w = w100*(C*h+(1-C))
            dwdh = w100*C
            d2wdh2 = 0.d0
        else
            w = E*h + F
            dwdh = E
            d2wdh2 = 0.d0
        end if blin
      end if iso

c Transport coefficient (lambda_T)
      select case (int(prop(26)))
      case (2) ! according to Medved, w_m needs to be .false.
        Ew=erfcinv((w-zero)/0.1285)
        conductivity=dens*dwdh*(1/pi/440.0d0**2
     &  +6.41d-4/2.0d0/440.0d0*((w-zero)/0.1285d0)*exp(Ew**2))
      case default
        if (w_m) then
        conductivity = dens * dwdh * b_tilde * exp(c_tilde * w)
     &  / Temp_max + D_v
        else
        conductivity=dens*dwdh*b_tilde*exp(c_tilde*w*1000/dens)
     &  /Temp_max + D_v*dens/1000
        endif
      end select

c Zero output parameters
      do i=1,ncomp
        dudg(i) = 0.d0
        dfdt(i) = 0.d0
        do j=1,ncomp
          dfdg(i,j) = 0.d0
        enddo
      enddo

c Output storage capacity (specific heat)
      dudt = dwdh

c Output flux amd derivatives
      do i=1,ncomp
        flux(i) = conductivity * tgrad(i)  ! [W/m²]
        dfdg(i,i) = conductivity    ! [W/(mK)]
      enddo

c State variables
      ustatev(1) = w
      ustatev(2) = conductivity
      End Subroutine MoistureTransport
```

A.2.2 Den Chloridtransport betreffende Quelltextauszüge

Die Differentialgleichung für den Chloridtransport ist in der Userroutine wie folgt implementiert:

```
c determine new chloride content
      if (w_m) then  ! for parameters of dPdt see declaration of dPdt
        dCdt=dPdt(1, 7, 0, 4)*dens/1000     ! considering gradient of C_f
        ustatev(7)=dCdt                     ! zur Fehlersuche
        dCdt=dCdt+dPdt(4, 2, 0, 8)/1000    ! considering gradient of h
      else
        dCdt=dPdt(1, 7, 0, 4)               ! considering gradient of C_f
        ustatev(7)=dCdt                     ! zur Fehlersuche
        dCdt=dCdt+dPdt(4, 2, 0, 8)/dens    ! considering gradient of h
      endif
      ustatev(8)=dCdt                       ! zur Fehlersuche
      ustatev(3)=ustatev(3)+dCdt*dTime      ! extrapolation
      call Calculate_C_f                    ! determine C_f and C_b
     &  (w_old, ustatev(3), ustatev(4), ustatev(5))
```

Dabei entsprechen die der Funktion dPdt als Zahlen übergebenen Parameter folgenden physikalischen Größen:

1 – Feuchtegehalt w
2 – Feuchte-Diffusionskoeffizient D_{l+v}
3 – gesamter Chloridgehalt C
4 – freier Chloridgehalt C_f
5 – gebundener Chloridgehalt C_b
6 – frei
7 – Chlorid-Diffusionskoeffizient D_{Cl}
8 – relative Porenluftfeuchte h

Die verschiedenen Modelle für die Berechnung des Chlorid-Diffusionskoeffizienten sind wie folgt in der Userroutine implementiert:

```
c Function for chloride diffusion coefficient
      double precision function Chlorid_Diffusion_Coefficient
     & (number_function, C_f, my_w)
      Implicit none
      integer, Intent(in) :: number_function
      double precision, Intent (in) :: C_f, my_w
      double precision C_norm, argument
      double precision Ef, Mf, Nf, D
!      double precision, external :: erfcinv
      double precision, parameter :: pi = 3.141592653589793
      double precision, parameter :: zero = 0.0d0
      double precision, parameter :: max_D = 3.8d-6
      double precision, parameter :: min_D = 1.04d-7
      C_norm = C_f * (prop(21)**3)                    ! considering length unit

      select case (number_function)

        case (2)  ! constant chloride diffusion coefficient
           Chlorid_Diffusion_Coefficient = (prop(21)**2) * prop(15)

        case (3)  ! according to Medved
      argument=(c_f-zero)/0.67d0
      If (argument<=3.d-10) then
          D=max_D
          go to 87
      endif
      If (argument>=2.0d0) then
          D=min_D
          go to 87
      endif
      Ef=erfcinv(argument)
      Mf=440.d0/3680.d0*Ef+sqrt(pi)/2*440.d0*(1.1d0-6.41d0)*1.0d-4
      Nf=3670.d0/3680.d0*Ef+sqrt(pi)/2*3670.d0*(1.1d0-1.0d0)*1.0d-4
      D=1.805d0/3670.d0*(2*exp(-(Nf**2))+pi*3670.d0*1.0d-4*erfc(Nf))
      D=D-(0.1285d0/440.d0*c_f*(2*exp(-(Mf**2))
     &                                +pi*440.d0*6.41d-4*erfc(Mf)))
      D=D/(2*pi*3680.d0*0.67d0*(zero+0.1285d0*erfc(Mf))*exp(-(Ef**2)))
      If (D>max_D) D=max_D
      If (D<min_D) D=min_D
   87 Chlorid_Diffusion_Coefficient = D

        case (4)  ! time-dependent chloride diffusion coefficient
           Chlorid_Diffusion_Coefficient = prop(15)  ! prop(15) is D_28
     &     * (prop(16)/time)**prop(17) ! prop(16) is t_28 in seconds, prop(17) is exponent

        case (5)  ! according to Ababneh
           ! prop(15)=f1*f2*f4; prop(16)= H_c; prop(17)=k_ion=8.333; prop(18)=m=0.5
           If (w_m) then
           Chlorid_Diffusion_Coefficient = prop(15)
     &     /(1+((1.d0-temp)/(1.d0-prop(16)))**4)
     &     * (1 - prop(17) * (C_f*my_w/1000)**prop(18))
           else
           Chlorid_Diffusion_Coefficient = prop(15)
     &     /(1+((1.d0-temp)/(1.d0-prop(16)))**4)
     &     * (1 - prop(17) * (C_f*my_w/dens)**prop(18))
```

```
            endif
          case default
             Chlorid_Diffusion_Coefficient=(prop(21)**2) * 2.1d-6
       end select
       end function Chlorid_Diffusion_Coefficient
```

Die Auswahl der Chlorid-Bindungsisotherme erfolgt im nachfolgend dargestellten Programmteil:

```
c Subroutine for C_f and C_b
       Subroutine Calculate_C_f (w, C, C_f, C_b)
       implicit none
       double precision, intent(in) :: w, C
       double precision, intent (out) :: C_f, C_b
       integer number_isotherm, i
       double precision factor, C_f_div_w, B_tilde
       double precision err1
       parameter (err1 = 1.d-15)
       number_isotherm = int(prop(25))
       select case (number_isotherm)
         case (3)
          If (w_m) then
           C_f = C/((w*dens/1000)+prop(19)) ! prop(19) .. k_h
          else
           C_f = C/(w+prop(19))
          endif
          C_b = prop(19)*C_f
         case (5)
          if ((C <= 1.d-30).or.(w <= 1.d-30)) then
            C_f = 0.d0
            C_b = C - C_f*w*dens/1000
          else ! prop(19)=A=0.3788; prop(20)=B_tildetilde=0.01438; B=1.14
               ! B_tildetilde=betaCSH/1000*10**B*(rho_sol/35.45)**A
            If (w_m) then
             B_tilde = prop(20)*dens*(w/1000)**prop(19)
             C_f = C*1000/(w*dens)
             do i = 1, 100
              C_f = C*C_f/(w*dens/1000*C_f+B_tilde*(C_f)**prop(19))
              if ((C- w*dens/1000*C_f- B_tilde*(C_f)**prop(19))
     &           <err1) exit
             EndDo
             C_b = C - C_f*w*dens/1000
            else
             B_tilde = prop(20)*dens*(w/dens)**prop(19)
             C_f = C/w
             do i = 1, 100
              C_f = C*C_f/(w*C_f+B_tilde*(C_f)**prop(19))
              if ((C- w*C_f- B_tilde*(C_f)**prop(19))
     &           <err1) exit
             EndDo
             C_b = C - C_f*w
            endif
          endif
         case default
            C_f = 0.d0
            C_b = 0.d0
       end select
       end Subroutine Calculate_C_f
```

A.2.3 Anpassung der Userroutine für die Differentialgleichung nach Ababneh

Um die Userroutine an die Differentialgleichung nach Ababneh et al. [4] anzupassen, ist der Abschnitt zur Bestimmung des neuen Chloridgehalts (siehe Beginn von Anhang A.2.2) wie folgt abzuändern:

```
c determine new chloride content
      if (w_m) then  ! for parameters of dPdt see declaration of dPdt
        dCdt=dPdt(1, 7, 0, 4)*dens/1000     ! considering gradient of C_f
        ustatev(7)=dCdt                     ! zur Fehlersuche
        dCdt=dCdt+dPdt(14, 2, 0, 8)/1000    ! considering gradient of h
      else
        dCdt=dPdt(1, 7, 0, 4)               ! considering gradient of C_f
        ustatev(7)=dCdt                     ! zur Fehlersuche
        dCdt=dCdt+dPdt(14, 2, 0, 8)/1000    ! considering gradient of h
      endif
      ustatev(8)=dCdt                       ! zur Fehlersuche
      ustatev(3)=ustatev(3)+dCdt*dTime      ! extrapolation
      call Calculate_C_f                    ! determine C_f and C_b
     &  (w_old, ustatev(3), ustatev(4), ustatev(5))
```

Die Änderungen betreffen nur die Zeilen, in denen dCdt berechnet wird. Die als Eingabeparameter für die Funktion dPdt verwendeten Zahlen sind in Anhang A.2.2 erklärt. Wird zu einer dieser Zahlen eine 10 addiert, bedeutet das, dass der entsprechende Parameter nicht nach dem Ort x abgeleitet wird. In diesem Fall betrifft dies den freien Chloridgehalt C_f.

A.2.4 Anpassungen für zeitlich veränderliche Randbedingungen

Um zeitlich veränderliche Randbedingungen für den Chloridgehalt vorzugeben, muss $prop(21+2)$ auf -2222 eingestellt werden. Damit kommt der folgende Quelltext aus der Userroutine zur Ausführung:

```
c in case periodic boundary conditions (BC) apply to the current integration point
      If (int(prop(21+2))==-2222) then
      If (abs(close_node_coords(1))<small) then    ! node at the boundary x=0 ?
      period_length=10368000
      time_1=2592000
      time_2=9936000
      C_varied=0.d0
      s_transition=432000
      period_time=time
      Do i=1,1000
         if (period_time<period_length) exit
         period_time=period_time-period_length
      EndDo
      ustatev(3)=prop(21+1)                        ! start value of the period
      If ((period_time>=time_1+s_transition).and.  ! between the transitions
     &      (period_time<=time_2-s_transition)) then
         ustatev(3)=C_varied
         goto 78
      EndIf
      If ((period_time>=time_1-s_transition).and.  ! first transition range
     &      (period_time<=time_1+s_transition))
     &   ustatev(3)=(prop(21+1)+C_varied)/2+(prop(21+1)-C_varied)/2*
     &   sin(pi*(1+1/two/s_transition*(period_time-time_1)))
      If ((period_time>=time_2-s_transition).and.  ! second transition range
     &      (period_time<=time_2+s_transition))
     &   ustatev(3)=(prop(21+1)+C_varied)/2-(prop(21+1)-C_varied)/2*
     &   sin(pi*(1+1/two/s_transition*(period_time-time_2)))
   78 call Calculate_C_f                            ! determine C_f and C_b
     & (w_old, ustatev(3), ustatev(4), ustatev(5))
      write (33, rec=rec_number) w_old, cond, ustatev(3:6), temp
      go to 99
      EndIf
      EndIf
```

Im dargestellten Ausschnitt aus der Userroutine ist die PeriodeKurz implementiert. Für die Variante PeriodeLang müssen folgende Anpassungen vorgenommen werden:

Tabelle A 2: Anpassungen für zeitlich veränderliche Randbedingungen

	PeriodeKurz	**PeriodeLang**
period_length	10368000	31104000
time_1	2592000	7776000
time_2	9936000	29808000
s_transition	432000	1296000

A.3 Zusammenstellung der für die Userroutine benötigten Materialparameter

Tabelle A 3: Übersicht der Eingabeparameter für die Userroutine (in ANSYS Workbench zu definieren bei Engineering Data)

Allgemein		
$prop(10)$	$Temp_max$	
$prop(12)$	massebezogener Feuchtegehalt	$prop(12) > 0$
	volumenbezogener Feuchtegehalt	$prop(12) < 0$
$prop(13)$	Anschalten der Simulation des Chloridtransports	
	an	$prop(13) = 1$
	aus	$prop(13) = 0$
$prop(21)$	Längeneinheit in Metern	$prop(21) = 1$
Feuchte-Sorptionsisotherme		
$prop(12)$	Wahl der Sorptionsisotherme	
	nichtlinear	$\|prop(12)\| \geq 1{,}5$
	bilinear	$\|prop(12)\| < 1{,}5$
Parameter der Sorptionsisotherme		
$prop(1)$	w_{max}	
$prop(2)$	A	
$prop(3)$	B	
$prop(4)$	C	
$prop(9)$	$Temp_1 = h_1$	
$prop(11)$	w_{100}	
Feuchte-Diffusionskoeffizient		
$prop(26)$	Wahl des Feuchte-Diffusionskoeffizienten	
	nach Medved‘ und Černý	$prop(26) = 2$
	nach Krus	$prop(26) \neq 2$
Parameter des Feuchte-Diffusionskoeffizienten		
$prop(5)$	Bedeutung abhängig vom gewählten Feuchte-Diffusionskoeffizient	
$prop(6)$		
$prop(7)$		

Chlorid-Diffusionskoeffizient		
$prop(14)$	Wahl des Chlorid-Diffusionskoeffizienten	
	konstant	$prop(14) = 2$
	nach Medved‘ und Černý	$prop(14) = 3$
	zeitabhängig	$prop(14) = 4$
	nach Xi und Bažant / Ababneh	$prop(14) = 5$
	fester Wert	$prop(14) \neq 2\ od.\ 3\ od.\ 4\ od.\ 5$
Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten		
$prop(15)$	Bedeutung abhängig vom gewählten Chlorid-Diffusionskoeffizient	
$prop(16)$		
$prop(17)$		
$prop(18)$		
Chlorid-Bindungsisotherme		
$prop(25)$	Wahl der Chlorid-Bindungsisotherme	
	linear	$prop(25) = 3$
	Freundlich	$prop(25) = 5$
	$C_b = C_f = 0$	$prop(25) \neq 3\ od.\ 5$
Parameter der Chlorid-Bindungsisotherme		
$prop(19)$	Bedeutung abhängig von gewählter Chlorid-Bindungsisotherme	
$prop(20)$		
Randbedingungen für Chlorid		
$prop(22)$	Randbedingung an der Ebene bei $x = 0$	
$prop(23)$	Randbedingung an der Ebene bei $y = 0$	
$prop(24)$	Randbedingung an der Ebene bei $z = 0$	

A.3.1 Verwendete Materialparameter für Kapitel 3.3 und 3.4

Tabelle A 4: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 3.3 und 3.4

Allgemein			
$dens$	Dichte	2300	kg/m^3
$prop(10)$	$Temp_max$	1	K
$prop(12)$	massebezogener Feuchtegehalt	2	–
$prop(13)$	Chloridtransport an	1	–
$prop(21)$	Längeneinheit in Metern	1	–
Feuchte-Sorptionsisotherme			
$prop(12)$	nichtlineare Sorptionsisotherme	2	–
Parameter der Sorptionsisotherme			
$prop(1)$	w_{max}	0,1241	J/kg
$prop(2)$	A	2,16578	–
$prop(3)$	B	-2,59091	–
$prop(4)$	C	1,42513	–
$prop(9)$	$Temp_1 = h_1$	0,9	K
$prop(11)$	w_{100}	0,1122	J/kg
Feuchte-Diffusionskoeffizient			
$prop(26)$	nach Krus	0	–
Parameter des Feuchte-Diffusionskoeffizienten			
$prop(5)$	b_tilde	2,30576E-11	m^2/s
$prop(6)$	$1/c_tilde$	0,057044	–
$prop(7)$	D_v	1,8826E-08	$kg_W/(m_B \cdot s)$
Chlorid-Diffusionskoeffizient			
$prop(14)$	nach Xi und Bažant / Ababneh	5	–
Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten			
$prop(15)$	$f_{1,2,4}$	1E-11	–
$prop(16)$	H_C	0,75	–
$prop(17)$	k_{ion}	8,333	–
$prop(18)$	m	0,5	–

Chlorid-Bindungsisotherme			
$prop(25)$	Freundlich-Isotherme	5	–
Parameter der Chlorid-Bindungsisotherme			
$prop(19)$	A	0,3788	–
$prop(20)$	$\tilde{\tilde{B}}$	0,0143798	–
Randbedingungen für Chlorid			
$prop(22)$	Randbedingung an der Ebene bei $x = 0$	2,5	kg/m^3
$prop(23)$	Randbedingung an der Ebene bei $y = 0$	-1	kg/m^3
$prop(24)$	Randbedingung an der Ebene bei $z = 0$	-1	kg/m^3

A.3.2 Verwendete Materialparameter für Kapitel 4.1

In der nachfolgenden Tabelle sind die Eingabedaten für die Simulation am gesättigten Probekörper, wie in Kapitel 4.1 beschrieben, angegeben. Die Varianten haben die folgenden Bezeichnungen:

- Fall 1.a: konstanter Chlorid-Diffusionskoeffizient mit einseitiger Randbedingung
- Fall 1.b: konstanter Chlorid-Diffusionskoeffizient mit zwei Randbedingungen
- Fall 2: zeitabhängiger Chlorid-Diffusionskoeffizient mit einseitiger Randbedingung

Tabelle A 5: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 4.1

		Fall 1.a	Fall 1.b	Fall 2	
Allgemein					
$dens$	Dichte	1650	1650	1650	kg/m^3
$prop(10)$	$Temp_max$	1	1	1	K
$prop(12)$	volumenbezogener Feuchtegehalt	-1	-1	-1	–
$prop(13)$	Chloridtransport an	1	1	1	–
$prop(21)$	Längeneinheit in Metern	1	1	1	–
Feuchte-Sorptionsisotherme					
$prop(12)$	lineare Sorptionsisotherme	-1	-1	-1	–
Parameter der Sorptionsisotherme					
$prop(1)$	w_{max}	1	1	1	J/kg
$prop(2)$	A	1	1	1	–
$prop(3)$	B	1	1	1	–
$prop(4)$	C	1	1	1	–
$prop(9)$	$Temp_1 = h_1$	0	0	0	K
$prop(11)$	w_{100}	1	1	1	J/kg
Feuchte-Diffusionskoeffizient					
$prop(26)$	nach Krus	0	0	0	–
Parameter des Feuchte-Diffusionskoeffizienten					
$prop(5)$	b_tilde	1	1	1	m^2/s
$prop(6)$	$1/c_tilde$	1	1	1	–
$prop(7)$	D_v	1	1	1	$kg_W/(m_B \cdot s)$

Chloride-Diffusionskoeffizient					
$prop(14)$	konstant | konstant | zeitabhängig	2	2	4	–
Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten					
$prop(15)$	D_{Cl} | D_{Cl} | $D_{app}(t_0)$	1E-12	1E-12	1E-12	–
$prop(16)$	– | – | t_0	0	0	2419200	–
$prop(17)$	– | – | α	0	0	0,3	–
$prop(18)$	– | – | –	0	0		–
Chlorid-Bindungsisotherme					
$prop(25)$	Freundlich-Isotherme	3	3	3	–
Parameter der Chlorid-Bindungsisotherme					
$prop(19)$	A	0	0	0	–
$prop(20)$	$\tilde{\tilde{B}}$	0	0	0	–
Randbedingungen für Chlorid					
$prop(22)$	Randbed. an der Ebene bei $x = 0$	3,0	3,0	3,0	kg/m^3
$prop(23)$	Randbed. an der Ebene bei $y = 0$	-1	-3333	-1	kg/m^3
$prop(24)$	Randbed. an der Ebene bei $z = 0$	-1	-1	-1	kg/m^3

A.3.3 Verwendete Materialparameter für Kapitel 4.2

Tabelle A 6: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 4.2

Allgemein			
$dens$	Dichte	1650	kg/m^3
$prop(10)$	$Temp_max$	1	K
$prop(12)$	massebezogener Feuchtegehalt	1	–
$prop(13)$	Chloridtransport an	1	–
$prop(21)$	Längeneinheit in Metern	1	–
Feuchte-Sorptionsisotherme			
$prop(12)$	lineare Sorptionsisotherme	1	–
Parameter der Sorptionsisotherme			
$prop(1)$	w_{max}	0,164	J/kg
$prop(2)$	A	0,6287	–
$prop(3)$	B	-1,008	–
$prop(4)$	C	1	–
$prop(9)$	$Temp_1 = h_1$	0	K
$prop(11)$	w_{100}	0,0576	J/kg
Feuchte-Diffusionskoeffizient			
$prop(26)$	nach Medved‘ und Černý	2	–
Parameter des Feuchte-Diffusionskoeffizienten			
$prop(5)$	–		–
$prop(6)$	–		–
$prop(7)$	–		–
Chlorid-Diffusionskoeffizient			
$prop(14)$	nach Medved‘ und Černý	3	–
Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten			
$prop(15)$	–		–
$prop(16)$	–		–
$prop(17)$	–		–
$prop(18)$	–		–

Chloride-Bindungsisotherme			
$prop(25)$	linear	3	–
Parameter der Chlorid-Bindungsisotherme			
$prop(19)$	K_H	2,43	–
$prop(20)$	–		–
Randbedingungen für Chlorid			
$prop(22)$	Randbedingung an der Ebene bei $x = 0$	2,4448	kg/m^3
$prop(23)$	Randbedingung an der Ebene bei $y = 0$	-1	kg/m^3
$prop(24)$	Randbedingung an der Ebene bei $z = 0$	-1	kg/m^3

A.3.4 Verwendete Materialparameter für Kapitel 4.3.1

Tabelle A 7: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 4.3.1

Allgemein			
$dens$	Dichte	2300	kg/m^3
$prop(10)$	$Temp_max$	1	K
$prop(12)$	massebezogener Feuchtegehalt	2	–
$prop(13)$	Chloridtransport an	1	–
$prop(21)$	Längeneinheit in Metern	1	–
Feuchte-Sorptionsisotherme			
$prop(12)$	nichtlineare Sorptionsisotherme	2	–
Parameter der Sorptionsisotherme			
$prop(1)$	w_{max}	0,065217391	J/kg
$prop(2)$	A	0,2595	–
$prop(3)$	B	-0,0197	–
$prop(4)$	C	0,7602	–
$prop(9)$	$Temp_1 = h_1$	0,9	K
$prop(11)$	w_{100}	0,050746	J/kg
Feuchte-Diffusionskoeffizient			
$prop(26)$	nach Krus	0	–
Parameter des Feuchte-Diffusionskoeffizienten			
$prop(5)$	b_tilde	7,12E-14	m^2/s
$prop(6)$	$1/c_tilde$	0,00588	–
$prop(7)$	D_v	0	$kg_W/(m_B \cdot s)$
Chlorid-Diffusionskoeffizient			
$prop(14)$	konstant	2	–
Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten			
$prop(15)$	D_{Cl}	1,28E-12	–
$prop(16)$	–	0	–
$prop(17)$	–	0	–
$prop(18)$	–	0	–

Chlorid-Bindungsisotherme			
$prop(25)$	linear	3	–
Parameter der Chlorid-Bindungsisotherme			
$prop(19)$	K_H	2,43	–
$prop(20)$	–		–
Randbedingungen für Chlorid			
$prop(22)$	Randbedingung an der Ebene bei $x = 0$	0,0015	kg/m^3
$prop(23)$	Randbedingung an der Ebene bei $y = 0$	-1	kg/m^3
$prop(24)$	Randbedingung an der Ebene bei $z = 0$	-1	kg/m^3

A.3.5 Verwendete Materialparameter für Kapitel 4.3.2

Nachfolgende Tabelle enthält die in ANSYS eingegebenen Materialparameter für den Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Daten von Ababneh et al. [4]. Dabei ist zu beachten, dass hierbei eine andere Variante der Userroutine, wie in Anhang A.2.3 beschrieben, genutzt wurde.

Tabelle A 8: Verwendete Materialparameter für die Simulationen in Kapitel 4.3.2

Allgemein			
$dens$	Dichte	2300	kg/m^3
$prop(10)$	$Temp_max$	1	K
$prop(12)$	massebezogener Feuchtegehalt	2	–
$prop(13)$	Chloridtransport an	1	–
$prop(21)$	Längeneinheit in Metern	1	–
Feuchte-Sorptionsisotherme			
$prop(12)$	nichtlineare Sorptionsisotherme	2	–
Parameter der Sorptionsisotherme			
$prop(1)$	w_{max}	0,1241	J/kg
$prop(2)$	A	2,16578	–
$prop(3)$	B	-2,59091	–
$prop(4)$	C	1,42513	–
$prop(9)$	$Temp_1 = h_1$	0,9	K
$prop(11)$	w_{100}	0,1122	J/kg
Feuchte-Diffusionskoeffizient			
$prop(26)$	nach Krus	0	–
Parameter des Feuchte-Diffusionskoeffizienten			
$prop(5)$	b_tilde	2,30576E-11	m^2/s
$prop(6)$	$1/c_tilde$	0,057044	–
$prop(7)$	D_v	1,8826E-08	$kg_W/(m_B \cdot s)$

Chlorid-Diffusionskoeffizient			
$prop(14)$	nach Xi und Bažant / Ababneh	5	–
Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten			
$prop(15)$	$f_{1,2,4}$	8,11036E-11	–
$prop(16)$	H_C	0,75	–
$prop(17)$	–	8,333	–
$prop(18)$	–	0,5	–
Chlorid-Bindungsisotherme			
$prop(25)$	Freundlich-Isotherme	5	–
Parameter der Chlorid-Bindungsisotherme			
$prop(19)$	A	0,3788	–
$prop(20)$	$\tilde{\tilde{B}}$	0,0143653	–
Randbedingungen für Chlorid			
$prop(22)$	Randbedingung an der Ebene bei $x = 0$	19	kg/m^3
$prop(23)$	Randbedingung an der Ebene bei $y = 0$	-1	kg/m^3
$prop(24)$	Randbedingung an der Ebene bei $z = 0$	-1	kg/m^3

A.3.6 Verwendete Materialparameter für Kapitel 5.2.2

Im Kapitel 5.2.2 werden bei Berücksichtigung von unterschiedlichen Wasserzementwerten erhaltene Ergebnisse miteinander verglichen. Für die drei folgenden Varianten sind in der Tabelle die Eingabewerte für ANSYS zusammengestellt:

- 0,6: Wasserzementwert von 0,6
- 0,5: Wasserzementwert von 0,5
- 0,4: Wasserzementwert von 0,4

Tabelle A 9: Verwendete Materialparameter für Simulationen in Kapitel 5.2.2

		0,6	0,5	0,4	
Allgemein					
$dens$	Dichte	2300	2300	2300	kg/m^3
$prop(10)$	$Temp_max$	1	1	1	K
$prop(12)$	massebez. Feuchtegehalt	2	2	2	–
$prop(13)$	Chloridtransport an	1	1	1	–
$prop(21)$	Längeneinheit in Metern	1	1	1	–
Feuchte-Sorptionsisotherme					
$prop(12)$	nichtlin. Sorptionsisotherme	2	2	2	–
Parameter der Sorptionsisotherme					
$prop(1)$	w_{max}	0,1241	0,10498	0,08707	J/kg
$prop(2)$	A	2,16578	1,99179	1,80895	–
$prop(3)$	B	-2,59091	-2,43224	-2,28658	–
$prop(4)$	C	1,42513	1,44045	1,47763	–
$prop(9)$	$Temp_1 = h_1$	0,9	0,9	0,9	K
$prop(11)$	w_{100}	0,1122	0,0974	0,0827	J/kg
Feuchte-Diffusionskoeffizient					
$prop(26)$	nach Krus	0	0	0	–
Parameter des Feuchte-Diffusionskoeffizienten					
$prop(5)$	b_tilde	2,30576E-11	1,26301E-10	0	m^2/s
$prop(6)$	$1/c_tilde$	0,057044	1,6309082	0,0980699	–
$prop(7)$	D_v	1,8826E-08	8,7809E-09	5,892E-08	$kg_W/(m_B \cdot s)$

Chlorid-Diffusionskoeffizient					
$prop(14)$	nach Xi und Bažant / Ababneh	5	5	5	–
Parameter des Chlorid-Diffusionskoeffizienten					
$prop(15)$	$f_{1,2,4}$	8,1104E-11	1,8009E-11	2,3407E-12	
$prop(16)$	H_C	0,75	0,75	0,75	–
$prop(17)$	k_{ion}	8,333	8,333	8,333	–
$prop(18)$	m	0,5	0,5	0,5	–
Chlorid-Bindungsisotherme					
$prop(25)$	Freundlich-Isotherme	5	5	5	–
Parameter der Chlorid-Bindungsisotherme					
$prop(19)$	A	0,3788	0,3788	0,3788	–
$prop(20)$	$\tilde{\tilde{B}}$	0,0143798	0,0161117	0,0183415	–
Randbedingungen für Chlorid					
$prop(22)$	Randbed. an Ebene bei $x = 0$	2,5	2,5	2,5	kg/m^3
$prop(23)$	Randbed. an Ebene bei $y = 0$	-1	-1	-1	kg/m^3
$prop(24)$	Randbed. an Ebene bei $z = 0$	-1	-1	-1	kg/m^3

Inhaltsverzeichnis USB-Stick

Auf dem beiliegenden USB-Stick sind die Archiv-Dateien der ANSYS Workbench Projekte zu finden. Diese wurden mit der ANSYS Version 2019 R3 erstellt.

B.01 Simulation – Kapitel 3.3 und 3.4 – Objektivität und Konvergenz

B.02 Simulation – Kapitel 4.1 – Online Kurs

B.03 Simulation – Kapitel 4.2 – Medved‘

B.04 Simulation – Kapitel 4.3.1 – Wittmann

B.05 Simulation – Kapitel 4.3.2 – Ababneh

B.06 Simulation – Kapitel 5.2.1 – Vergleich gesättigt-ungesättigt

B.07 Simulation – Kapitel 5.2.2 – Vergleich w/z-Wert

B.08 Simulation – Kapitel 5.2.3 und 5.2.4 –Periodische Randbedingungen

B.09 Simulation – Kapitel 5.3.1 – 3D-Modell

B.10 Simulation – Kapitel 5.3.2 – Modell mit Einzelriss

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbständig angefertigt habe. Es wurden nur die in der Arbeit ausdrücklich benannten Quellen und Hilfsmittel benutzt. Wörtlich oder sinngemäß übernommenes Gedankengut habe ich als solches kenntlich gemacht.

Leipzig, 28.10.2021 _____

Ort, Datum Unterschrift