

17 (2004)

AKTUELLE FORSCHUNGSERGEBNISSE

Mikrostruktursimulation von zementgebundenen Baustoffen – Validierung der Mikrostruktur

Simulation of the Microstructure of Cementitious Materials – Validation of the Microstructure

M. Koster

1 EINLEITUNG

Das von der DFG geförderte Forschungsprojekt „Mikrostruktursimulation von zementgebundenen Baustoffen“ war bereits Gegenstand des Kurzberichts 92 (2003). In dem nunmehr zweiten Förderungszeitraum stehen die Validierung der Mikrostruktur und die Simulation von Feuchte-transport im Fordergrund. Die Bestimmung der Porengrößenverteilung sowie die Simulation der Quecksilberdruckporosimetrie wird in diesem Kurzbericht beschrieben.

2 MORPHOLOGIE DES PORENRAUMS

Die Generierung der Zementsteinmikrostruktur erfolgte mit Hilfe des am NIST entwickelten Computerprogramms CEMHYD3D /1/. Inwieweit die simulierte Struktur realitätsnah ist, wurde durch Vergleich mit einer computertomographischen (CT-) Aufnahme des realen Zementsteins untersucht. In Bild 1 ist die mit CEMHYD3D simulierte Mikrostruktur eines Zementsteins aus Portlandzement mit einem w/z-Wert von 0,45 nach 137 h Hydratation dargestellt. Bild 2 gibt die CT-Aufnahme des realen Zementsteins wieder.

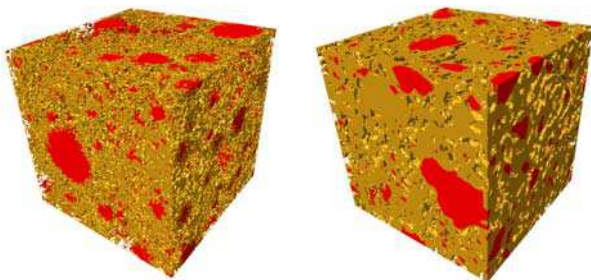


Bild 1: Zementsteinstruktur (CEMHYD3D)

Bild 2: Zementsteinstruktur (CT-Aufnahme)

Fig 1: Microstructure (CEMHYD3D)

Fig 2: Microstructure (CT image)

Rot abgebildet sind unhydratisierte Zementklinker, braun die CSH-Phasen. Die Kantenlänge der beiden Zementsteinstrukturen beträgt 128 Voxel mit einer Voxelgröße von 1 µm. Es ist deutlich zu erkennen, dass die simulierte Struktur einen feiner verteilten Porenraum aufweist als die CT-Aufnahme. Gleiches zeigt die Visualisierung des Porenraums in Bild 3 und Bild 4.

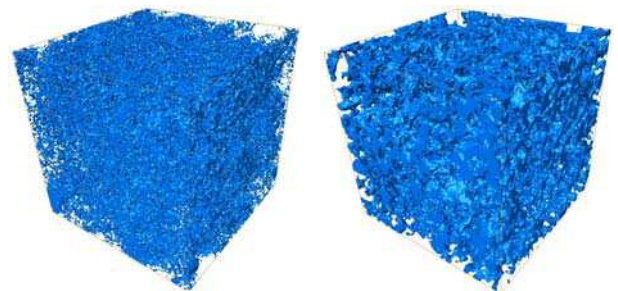


Bild 3: Porenraum (CEMHYD3D)

Bild 4: Porenraum (CT-Aufnahme)

Fig 3: Pore Space (CEMHYD3D)

Fig 4: Pore Space (CT image)

3 MEDIALE ACHSE DES PORENRAUMS

Der Porenraum ist, wie die vorhergehenden Abbildungen zeigen, ein komplexes dreidimensionales Gebilde. Im Hinblick auf die Identifizierung einzelner Porenkanäle ist es sinnvoll, diese Komplexität durch Extraktion der Mittelachse des Porenraums, der sog. Medialen Achse, zu reduzieren. Die Bestimmung der Medialen Achse erfolgte mit Hilfe eines „Thinning“-Algorithmus /2/.

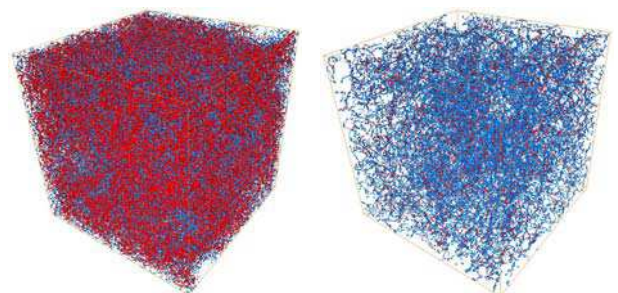


Bild 5: Mediale Achse (CEMHYD3D)

Bild 6: Mediale Achse (CT-Aufnahme)

Fig 5: Medial Axis (CEMHYD3D)

Fig 6: Medial Axis (CT image)

In Bild 5 und Bild 6 ist die Mediale Achse des Porenraums der beiden Zementsteinmikrostrukturen dargestellt. Rot abgebildet sind Verästelungspunkte der Medialen Achse, blau Verbindungspunkte. Die simulierte Struktur weist wesentlich mehr Verästelungspunkte auf als die CT-Aufnahme.

4 BESTIMMUNG DER PORENRADIEN- VERTEILUNG

Die Porenradienverteilung wurde auf folgende Art und Weise ermittelt: Jedes Voxel der Medialen Achse dient als Mittelpunkt für eine im Porenraum platzierte Kugel mit maximalem Radius. Alle Voxel innerhalb dieser Kugel erhalten den Radius der Kugel zugewiesen. Wird ein Voxel in einem späteren Schritt von einer Kugel mit größerem Radius überdeckt, bekommt es den größeren Radius zugeschrieben (vgl. Bild 7).

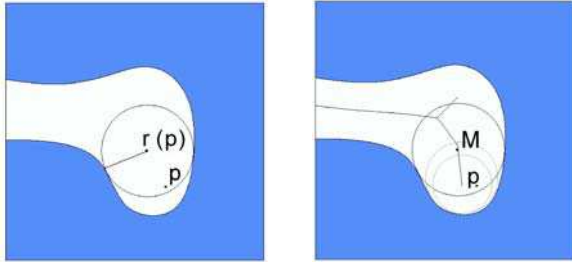


Bild 7: Zur Bestimmung der Porenradienverteilung

Fig 7: Determination of the Pore Size Distribution

Auf diese Weise erhält jedes Voxel des Porenraums einen Radius. Die Voxel mit den verschiedenen Radien werden gezählt und ihre Anzahl auf die Gesamtzahl an Porenvoxel bezogen. Daraus ergibt sich die Porenradienverteilung.

In Bild 8 und Bild 9 ist die Porenradienverteilung der simulierten Zementsteinstruktur und der CT-Aufnahme dargestellt.

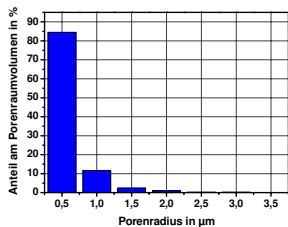


Bild 8: Porenradienverteilung (CEMHYD3D)

Fig 8: Pore Size Distribution (CEMHYD3D)

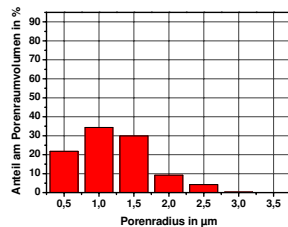


Bild 9: Porenradienverteilung (CT-Aufnahme)

Fig 9: Pore Size Distribution (CT image)

Die Porenradienverteilung, die sich aufgrund der Quecksilberdruckporosimetrie (MIP) ergeben würde, kann dadurch simuliert werden, dass nur diejenigen Voxel eines bestimmten Radius berücksichtigt werden, die von der Oberfläche der Mikrostruktur erreichbar sind. Bild 10 und Bild 11 zeigen das Ergebnis der simulierten MIP.

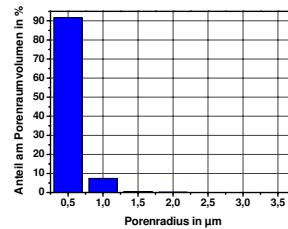


Bild 10: MIP (CEMHYD3D)

Fig 10: MIP (CEMHYD3D)

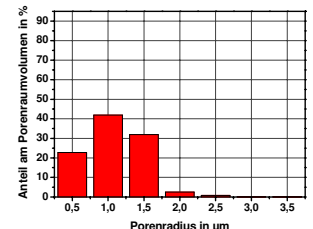


Bild 11: MIP (CT-Aufnahme)

Fig 11: MIP (CT image)

Die relativen Unterschiede zwischen Porenradienverteilung und MIP am Beispiel der CT-Aufnahme verdeutlicht das Diagramm in Bild 12.

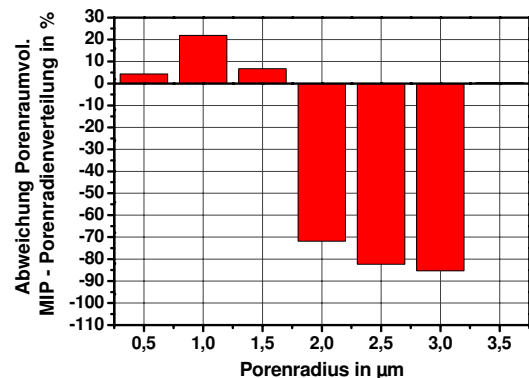


Bild 12: Rel. Abweichung Porenradienverteilung - MIP

Fig 12: Rel. Tolerance Pore Size Distribution - MIP

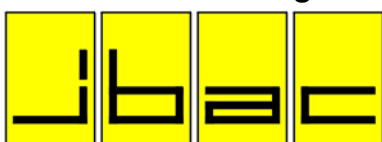
Die Auswirkung des „Tintenflascheneffekts“ die Unterschätzung des Anteils der größeren Poren zu Gunsten der Kleineren, ist deutlich zu erkennen.

5 LITERATUR

- /1/ Bentz, D. P.: CEMHYD3D. A Three-Dimensional Cement Hydration and Microstructure Development Modelling Package. Version 2.0. Washington, D.C.: U.S. Department of Commerce, 2000. - NISTIR Nr. 6485
- /2/ Palagyi, K. ; Sorantin, E. ; Balogh, E. ; Kuba, A. ; Halmi, C. ; et al: A Sequential 3D Thinning Algorithm and its Medical Applications. Berlin : Springer, 2001. - In: 17th International Conference Information Processing in Medical Imaging, IPMI 2001, Davis, USA, June 18-22, 2001, (Insana, M.F.; Leahy, R.M. (Ed.)), S. 409-415

Forschungsförderer: DFG, Bonn, BR 2009/4-1 – F822

Herausgeber:



Institut für Bauforschung Aachen
Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule

Leitung:

Prof. Dr.-Ing. W. Brameshuber
Prof. Dr.-Ing. M. Raupach

Postanschrift: 52056 Aachen
Lieferanschrift: Schinkelstr. 3, 52062 Aachen
Tel.: (0241)80-95100, Fax: (0241)80-92139
E-Mail: postmaster@ibac.rwth-aachen.de
www.ibac.rwth-aachen.de

Die auszugsweise Veröffentlichung dieses Berichtes, seine Verwendung für Werbezwecke sowie die inhaltliche Übernahme in Literaturdatenbanken bedürfen der Genehmigung des ibac.