

Salzschäden an Kulturgütern

Stand des Wissens und Forschungsdefizite

Ergebnisse des DBU Workshops im Februar 2008
in Osnabrück

Herausgeber: Hans-Jürgen Schwarz, Michael Steiger



Impressum

Herausgeber: Hans-Jürgen Schwarz, Michael Steiger

Gestaltung: Ri-Con/ Research in Conservation
Richard-Wagner Straße 9
30177 Hannover

Umschlagsfoto: Hans-Jürgen Schwarz

Diese Broschüre wurde hergestellt mit Unterstützung der Deutschen Bundesstiftung Umwelt im Rahmen des Förderprojektes Az.: 25937-45

Hannover, September 2009

ISBN 978-3-00-028965-1

8 Modellierung und Simulation von Transportprozessen und Phasenumwandlungen bauschädlicher Salze

Andreas Nicolai*

* Institut für Bauklimatik der Technischen Universität Dresden, Zellescher Weg 17, 01069 Dresden

8.1 Einleitung

Die Transportprozesse in porösen Medien sind meist abhängig von strömenden Flüssigkeiten und Gasen. Im Kontext der Schädigung von Baumaterialien und -konstruktionen durch Schadsalze ist das Transportmedium Wasser von zentralem Interesse. Die Beschreibung von Feuchtetransport in porösen Stoffen, zunächst Anfang 1900 in Böden im Fachgebiet der Bodenphysik und Agrarwirtschaft, ist seit Mitte des letzten Jahrhunderts auch verstärkt Gegenstand der Forschung im Fachgebiet der Bauphysik.

Der folgende Artikel gibt einen Überblick über den aktuellen Stand der Forschung zu Feuchte-, Wärme- und Salztransportprozessen in porösen Bauwerksstoffen. Die derzeit verfügbaren Modelle und Teilmodelle zur Beschreibung thermodynamischer Zustände und Prozesse werden erläutert, und es werden entsprechende Berechnungswerkzeuge vorgestellt. Im Zusammenhang werden die jeweils noch offenen Fragen diskutiert und kritische, noch ungelöste Probleme zum Verständnis der Mechanismen und vollständigen modellbasierten Beschreibung erörtert.

8.2 Stand der Modellierung von Transportprozessen in porösen Medien

Moderne Modelle und Simulationssysteme zur Beschreibung des Feuchtetransports in porösen Stoffen sind funktional ausgereift und beschreiben

- den Flüssigwassertransport in Abhängigkeit verschiedener Materialeigenschaften sowie des Feuchtegehalts des Materials,
- den Dampftransport durch luftgefüllte Poren,
- Phasenumwandlungen, d. h. Kapillarkondensation und Verdunstung,
- Enthalpietransport, welcher mit Flüssigwasser- und Wasserdampftransport assoziiert werden kann, und
- den Zusammenhang zwischen Feuchtegehalt des Materials und thermodynamischen Potenzialen, wie Dampfdruck und Kapillardruck.

Im Besonderen die Betrachtung der Kondensation und Verdunstung im Porenraum erlaubt es, komplexe Prozesse wie Abkühlung durch Verdunstung und Erwärmung durch Kondensation im Porensystem abzubilden.

Dabei gibt es eine enge Kopplung zwischen Feuchte- und Wärmetransport, insbesondere durch die Feuchteabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit, dem Enthalpietransport oder dem starken Temperatureinfluss auf den Wasserdampfpartialdruck, und damit dem treibenden Potenzial der Dampfdiffusion. Diese Kopplung verlangte stets starke Vereinfachungen für die Anwendung analytischer Lösungsverfahren. Seit Anfang der 90er Jahre des letzten Jahrhunderts hat die Entwicklung und Verfügbarkeit von Rechnern und die damit einhergehende Verbreitung numerischer Lösungsverfahren dazu geführt, dass gekoppelte Feuchte- und Wärmetransportprozesse in porösen Medien nahezu uneingeschränkt modelliert und gelöst werden können. Es existieren mehrere Simulationswerkzeuge, welche

- instationäre Prozesse,
- 1D, 2D und 3D-Geometrien mit einer Vielzahl unterschiedlicher Materialien,
- und ebenso instationären, gemessenen oder modellierten Randbedingungen (z.B. Wärmeleitung, Dampfdiffusion, kurzwellige und langwellige Strahlung, Schlagregen, etc.)

berechnen können. In Deutschland gehören die Programme DELPHIN² und WUFI³ zu den verbreiteten, nutzerfreundlichen Simulationswerkzeugen, welche in diesem Rahmen in Forschung und Praxis eingesetzt werden. Trotz Unterschieden in Detailpunkten der Modellierung, wie zum Beispiel der Beschreibung des Feuchtetransports mithilfe des Wassergehaltgradientenmodells bzw. Kapillardruckmodells, basieren heutige HAM (Heat, Air, and Moisture) Transportmodelle auf sehr ähnlichen physikalischen Formelgerüsten und setzen im Allgemeinen folgende Vereinfachungen an:

- Es wird ein Kontinuummodell verwendet, d. h. Materialien werden als homogene Stoffe betrachtet.
- Es wird eine konstante Wasserdichte angenommen.
- Es werden im Allgemeinen isobare Bedingungen angenommen, Gasdruckunterschiede werden lediglich als treibende Kraft für Wasserdampfkonvektion berücksichtigt.
- Das Porensystem wird als inert, perfekt starr und damit zeitlich unveränderlich angenommen.

² DELPHIN Hygrothermische Bauteilsimulationssoftware, www.bauklimatik-dresden.de (NICOLAI 2007, NICOLAI et al. 2009b)

³ WUFI Wärme- und Feuchte Instationär, www.wufi.de

- Es herrscht sofortiges Gleichgewicht zwischen Flüssigwasser und Wasserdampf, d. h. Kondensation und Verdunstung sind keine kinetischen Prozesse.
- Die Gleichgewichtsfunktion zwischen Feuchtegehalt und relativer Luftfeuchte (Sorptionisotherme) bzw. Feuchtegehalt und Kapillardruck (Feuchtespeicherfunktion) sind nicht hysteretisch.

Obwohl Wärme- und Feuchtetransportmechanismen in Baumaterialien dadurch gut abgebildet werden können, verhalten sich verschiedene Materialien stark abweichend von den modellbasierten Vorhersagen. Daher sind Themen wie Prozesshysterese und Inhomogenitäten derzeit noch Teil der aktiven Forschung. Auch die Prozessdynamik der mikroskopischen Feuchteausbreitung und deren Abbildung in makroskopisch-homogenisierten Materialmodellen sind derzeit noch Gegenstand universitärer Forschung.

Viele der oben genannten Annahmen müssen überdacht und neu bewertet werden, sobald Salze im Porenraum Berücksichtigung finden sollen.

8.3 Salzeinflüsse auf Transportprozesse und Speichereigenschaften

Die Eigenschaften des Lösungsmittels Wasser und auch des gesamten Salzgemisches ändern sich je nach Konzentration und Zusammensetzung zum Teil drastisch. So kann die Dichte der Salzlösung erheblich von der Dichte reinen Wassers abweichen. Gleichzeitig führen gelöste Salze zu einer Reduzierung der Wasseraktivität und damit zu einer Veränderung des Gleichgewichts zwischen Flüssigwasser und Wasserdampf. Dieser Einfluss kann z.B. herangezogen werden, um erhöhte Feuchtegehalte in salzbelasteten Konstruktionen und Materialien zu erklären (LIEBRICH et al., 2009).

Weiterhin sind auch das Porensystem und die Feststoffmatrix nicht länger als inert und unveränderlich zu betrachten. Ionenaustauschprozesse können zu einer Veränderung der chemischen Zusammensetzung des Porensystems führen und damit die Festigkeit beeinträchtigen. Lösungsprozesse (engl. Leaching) können zu einer Vergrößerung des Porenquerschnitts und veränderten Transporteigenschaften sowie zu einer Abnahme der Festigkeit führen. Kristallisation im Porensystem führt zur Querschnittsreduzierung und zur teilweisen Blockade von Transportwegen, welche das Feuchtetransportverhalten maßgeblich beeinflussen können. Die von Zusammensetzung und Konzentration bestimmten Eigenschaften der Porenlösung wirken sich auch direkt auf den Flüssigtransport aus. So werden bei höher konzentrierten Lösungen die Strömungsgeschwindigkeiten durch das Porensystem im Allgemeinen kleiner trotz gleicher Potentiale bzw. Druckunterschiede. Wasser, als Lösungsmittel und Transportmedium für Salze,

wird durch die Anwesenheit von Salzen beeinflusst, so dass die reinen HAM-Gleichungen nur für stark verdünnte Lösungen Anwendung finden können.

Gleichzeitig sind Salztransportprozesse, wie Konvektion und Diffusion, stark vom Feuchtegehalt abhängig. Bei niedrigen Feuchtegehalten verlängern sich die Transportwege bzw. stehen Porenbereiche nicht mehr durch einen geschlossenen Flüssigwasserfilm in Verbindung und die Salzdifffusion kommt zum Erliegen.

Weiterhin sind Phasenumwandlungen wie Lösung und Kristallisation, aber auch Hydratation und Dehydratation vom Feuchtegehalt abhängig. Zusätzlich sind für Salze wie z.B. viele Nitrate oder Sulfate, deren Löslichkeit stark temperaturabhängig ist, die lokale Temperatur und der lokale Feuchtegehalt gemeinsam für die Ausprägung einer thermodynamisch stabilen Salzphase entscheidend. Phasenumwandlungen von Salzen sind im Vergleich zu anderen betrachteten Prozessen, wie z.B. Wärmeleitung oder Feuchtetransport oft langsam und müssen daher als kinetische Prozesse betrachtet werden.

Für verschiedene Zusammenhänge und oben genannte Prozesse und Eigenschaften existieren bereits Modelle, andere sind noch gänzlich unerforscht bzw. es konnten durch die nur vereinzelt durchgeführten Laboruntersuchungen noch keine allgemeinen Gesetzmäßigkeiten formuliert werden. Im Folgenden sollen die bislang entwickelten Teilmodelle vorgestellt werden.

8.4 Eigenschaften von Salzgemischen

Salzlösungen, welche nur ein gelöstes Salz enthalten, werden auch als binäre Lösungen bezeichnet. Für eine Vielzahl von baupraktisch relevanten Salzen existieren tabellierte Werte, jedoch sind die Daten häufig nur für geringe Konzentrationen mit guter Genauigkeit zu erhalten. Für Salzgemische, d.h. Lösungen bestehend aus mehreren Ionen, ist die Datenlage aufgrund der großen Anzahl möglicher Zusammensetzungen generell als schlecht zu bewerten. Für die Beschreibung der thermodynamischen Lösungseigenschaften in beliebigen Zusammensetzungen, wie sie in der modellbasierten Vorhersage von Schadensprozessen benötigt werden, sind also zwingend Modelle anzuwenden.

Verbreitet sind dafür Aktivitätsmodelle wie z.B. das Debye-Hückel-Modell oder die Davies-Gleichung, welche jedoch nur für geringe Ionenstärken und damit niedrige Konzentrationen gültig sind. Schadensrelevant sind jedoch Salzlösungen mit hohen Ionenstärken, welche vor allem bei den leicht löslichen Schadsalzen in Bauwerksteilen auftreten. In jüngerer Zeit wurde daher für die Beschreibung von thermodynamischen Eigenschaften von Salzgemischen, vor allem den Aktivitätskoeffizienten der Ionen und des Lösungsmittels Wasser, das Pitzer-Ionen-Inter-

aktionsmodell verwendet (STEIGER et al., 2008). Dieses semi-empirische Modell basiert auf einem Formalismus, welcher auf den Interaktionen von Ionenpaaren und Ionentripeln beruht. Die Anziehungs- bzw. Abstoßungskräfte zwischen den in der Lösung vorhandenen Ionen werden im Modell in Abhängigkeit von den jeweiligen Molalitäten berücksichtigt und daraus thermodynamische Kenngrößen wie z.B. der osmotische Koeffizient, die Wasseraktivität, Ionenaktivitäten, Dichte, Wärmekapazität und andere abgeleitete Größen bestimmt. Die große Anzahl der Parameter wird mit Messreihen für binäre und ternäre Lösungen durch Parameteroptimierung bestimmt, welches dem Modell einen semi-empirischen Charakter gibt.

Die Stärken der Anwendung des Pitzer-Modells für die Vorhersage und modellbasierte Beschreibung von thermodynamischen Lösungseigenschaften sind vielfältig:

- komplette Freiheit der Lösungszusammensetzung,
- ermöglicht Vorhersagen auch bei sehr hohen Ionenstärken, auch bei Lösungen, welche bereits thermodynamisch übersättigt sein können,
- nicht beschränktes System von Gleichungen, welches sich leicht für neue Ionen erweitern lässt,
- generelle Form der Gleichungen, welche gut in numerischen Anwendungen formalisiert und umgesetzt werden kann,
- kann auch für binäre Lösungen angewendet werden.

Die Generalität des Pitzer-Modells und der Parametrisierung hat allerdings auch verschiedene Nachteile, welche weiteren Forschungsbedarf aufzeigen. So wird die Parametrisierung bei steigender Anzahl von Ionen deutlich aufwendiger, verlangt eine sehr große und gute Datenbasis und kann vor allem bei höheren Ionenstärken instabil werden (STEIGER et al., 2008). Für Simulationsrechnungen bedeutet dieses, dass je nach Prozessbedingungen die Möglichkeit falscher Vorhersagen gegeben ist. Dieses erfordert zusätzliche Plausibilitätsprüfungen und gegebenenfalls Abbruch der Berechnungen. Hier ist weitere Forschungsarbeit notwendig, welche die Berechnungsstabilität im Besonderen für Simulationsrechnungen steigert.

Die mithilfe des Pitzer-Modells berechneten Lösungseigenschaften können bereits zur Beschreibung vormalig bereits genannter Effekte herangezogen werden. So kann die erhöhte Feuchteaufnahme salzbelasteter Materialien recht einfach durch Erweiterung der Kelvin-Gleichung beschrieben werden. Die Kelvin-Gleichung, welche in HAM-Modellen den thermodynamischen Zusammenhang zwischen Dampfdruckabsenkung über einem Kapillarmeniskus beschreibt, kann durch Einbeziehung der Wasseraktivität (bei HAM-Modellen und reinem Wasser stets = 1), sehr leicht auf Salzabhängigkeit erweitert werden. Bei höheren Salzkonzentrationen und damit geringeren Wasseraktivitäten wird der Dampfdruck über einem Kapillarmeniskus noch weiter als bisher abgesenkt. Die Gleichgewichtsluftfeuchte

im Porenraum wird also geringer. Dieser Effekt kann nur durch Dampfströme aus der Umgebung in das Material ausgeglichen werden, welches zur beobachteten Erhöhung des Feuchtegehalts führt.

Die Ionenaktivitäten können als treibende Kräfte für die Salzdifffusion herangezogen werden. Bei binären Lösungen werden im Allgemeinen vereinfachte Diffusionsgleichungen dem Fick'schen Gesetz folgend verwendet. Bei Salzgemischen findet die Nernst-Planck-Gleichung Anwendung. Die Bestimmung von Ionendiffusionskoeffizienten und deren Umrechnung in effektive, konzentrationsabhängige Diffusionskoeffizienten für ein binäres Salz ist dabei ein noch ungelöstes Problem und bedarf weiterer Labor- und Modellierungsarbeit. Auch ist die Interaktion zwischen Ionen und Porenwandoberfläche und die daraus resultierende Reduktion der Ionenmobilität noch unerforscht. Daher verwenden derzeitige Ionentransportmodelle die Annahme, dass außer der Interaktion der Ionen untereinander und gegebenenfalls einem äußeren elektrischen Feld keine weiteren Effekte den Diffusionsprozess beeinflussen.

Die Lösungsdichte hat einen besonderen Stellenwert, da zahlreiche für HAM-Modelle entwickelte Kenngrößen eine Dichte von 1000 kg/m^3 implizit verwenden. So muss z.B. der Wasseraufnahmekoeffizient bei Lösungsaufnahmeversuchen mit der Dichteänderung korrigiert werden. Ebenso sind massebasierte Feuchtespeicherfunktionen entsprechend anzupassen. Es ist generell zweckmäßig, bei Betrachtung von Salzlösungen ausschließlich volumenbasierte Kenngrößen zu verwenden, so z.B. den volumetrischen Feuchtegehalt. Das Pitzer-Modell liefert Lösungsdichten für Salzgemische und binäre Lösungen. Dichteunterschiede aufgrund von Konzentrationsunterschieden können zu Konvektionsbewegungen im Porensystem führen, analog zu Luftbewegung im Raum durch warme und kalte Luft. Derzeit wird in der Fachliteratur noch kontrovers diskutiert, ob diese Prozesse relevant sind und separat berücksichtigt werden müssen. Bei sehr porösem Sandstein ist z.B. zu beobachten, dass Konvektionsprozesse zu einer offensichtlichen Vergrößerung der Salzdifffusion führen. Die meisten bisher publizierten und verwendeten Modelle vernachlässigen zumeist den Dichteinfluss, welches bei Dichten von bis zu 1300 kg/m^3 bei Mischungen leicht löslicher Schadsalze kritisch zu hinterfragen ist.

Weitere Forschungsarbeit verlangt auch die Beobachtung, dass Salzlösungen langsamer als reines Wasser von trockenen Materialien aufgenommen werden. Dieses kann bislang nur unzureichend durch Reduktion der Viskosität bei höheren Konzentrationen erklärt werden, da bei verschiedenen Salzgemischen mit hohen Konzentrationen zum Teil eine Beschleunigung der Aufnahme beobachtet wurde. Auch die Annahme, dass bei Lösungsaufnahme von Salzgemischen eine teilweise Entmischung stets ausgeschlossen werden kann, wird derzeit noch kontrovers diskutiert.

8.5 Phasenumwandlungen

Als Phasenumwandlungen werden die chemischen Reaktionen Kristallisation, Lösung, Hydratation, Dehydratation und Deliqueszenz zusammengefasst. Diese Reaktionen sind im Kontext der Wärmeleitung und des Feuchtetransports in Baustoffen als langsame Prozesse zu bewerten und müssen daher als kinetische Prozesse beschrieben werden. Alternativ gibt es Gleichgewichtsmodelle, welche z.B. eine Freundlich-Isotherme verwenden, welche den Zusammenhang zwischen Lösungskonzentration und kristallinem Salz beschreibt. Diesen Gleichgewichtsmodellen sind häufig Vereinfachungen mit Ziel einer einfachen analytischen Lösung geschuldet. In modernen numerischen Simulationsmodellen können diese Einschränkungen aufgehoben und Phasenumwandlungen können kinetisch beschrieben werden.

Für kinetische Phasenumwandlungsmodelle ist stets der thermodynamisch stabile Zustand als Reaktionsziel zu bestimmen. Das Pitzer-Modell kann diesen liefern, indem Sättigungsverhältnisse bezüglich aller möglichen Salzphasen berechnet werden. Weiterhin ist die Reaktionsrate zu bestimmen, was derzeit nur bedingt möglich ist. In einem Differenztemperaturversuch können Salze, deren Löslichkeit stark temperaturabhängig ist, gezielt einer Übersättigung durch Temperaturabsenkung ausgesetzt werden. Der Einfluss der Latentwärme der Phasenumwandlung auf die Proben temperatur kann dann zur Bestimmung der Reaktionsrate herangezogen werden. Dieses Verfahren ist bislang jedoch nur erfolgreich bei einigen Nitraten und Sulfaten angewendet worden (ESPINOSA et al., 2008). Für Chloride, insbesondere dem NaCl ist bislang noch kein Verfahren zur Bestimmung der Reaktionskinetik im Porensystem entwickelt worden. Weiterhin besteht Forschungsbedarf bezüglich der Keimbildung für das Einsetzen der Kristallisation und bezüglich der Abhängigkeit der Kristallisationsverzögerung von der mikroskopischen Oberflächenstruktur des Materials.

Phasenumwandlungen wie Dehydratation oder Deliqueszenz sind Reaktionen zwischen Kristall und Gasphase. Parallel können die Phasenumwandlungen zwischen Kristall und Flüssigphase ablaufen. Mit makroskopischen Kontinuummodellen lassen sich diese Prozesse nicht getrennt beschreiben. Es sind daher neue praktikable Möglichkeiten zu erforschen, welche auf der mikroskopischen Ebene Phasenkontaktflächen beschreiben, jedoch makroskopische Transport- und Austauschprozesse erlauben.

Eng verbunden mit Phasenumwandlungen der Salze sind Eisbildung und Schmelzen von Porenwasser. Hierbei ist die Gefrierpunktabenkung in Abhängigkeit von Porenfüllungsgrad und Salzgehalt zu modellieren (HINNIGER, 2009). Jedoch fehlt auch hier noch ein geschlossenes und übertragbares Modell.

Bei der Modellierung von Phasenumwandlungen ist noch eine Vielzahl weiterer Teilprozesse zu berücksichtigen, welche jedoch aufgrund der oben aufgezählten primären Prozesse bislang nur begrenzt Beachtung fanden. So ist z.B. bei Phasenumwandlungen eine starke Abhängigkeit der Kinetik vom Material zu erkennen. Jedoch lassen sich diese nicht eindeutig auf definierte Kenngrößen wie Porenradienverteilung und chemische Zusammensetzung zurückführen. Auch wird die Kristallisation behindert, sofern die Kristalle keinen Kontakt zur Flüssigphase mehr besitzen oder Diffusionswege zu lang werden. Gerade bei hohen Porenfüllungsgraden wird die mikroskopische Struktur offensichtlich immer wichtiger, so dass rein makroskopische Betrachtungsweisen an Grenzen stoßen und die Realität nur bedingt abbilden können. Weitere Nebeneffekte sind Effloreszenz, d. h. Kristallisation an und auf der Materialoberfläche. Die dabei entstehende Kristallmorphologie und ihre Aggregation hängt vom Salz und den Umgebungsbedingungen ab und hat eigene Feuchte-, Transport- und Speichereigenschaften zur Folge. Auch werden Übergangskoeffizienten zwischen Umgebung und Material beeinflusst. Diese hier genannten Themen sind bislang in Forschungsprojekten noch kaum betrachtet worden und werden üblicherweise als Spezialthemen vernachlässigt.

8.6 Porenmechanik und Salzschädigung

Obwohl zahlreiche Fragen zu Salztransport, Phasenumwandlungen und Feuchte-Salz-Interaktion offen bleiben, können derzeitige kombinierte Transportmodelle, wie z.B. in der Dissertation des Autors dargestellt (NICOLAI, 2007), zu einer simulationsbasierten Vorhersage der Salzverteilung und der örtlichen und zeitlichen Phasenumwandlung verwendet werden. Die Berechnungsergebnisse der instationären räumlichen Simulationen werden derzeit zur Untersuchung der Relevanz verschiedener Einflussfaktoren, d.h. Sensitivitäts- und Parameterstudien verwendet. Durch Mangel an geeigneten Validierungsexperimenten, welche durch Verwendung der Simulation konzipiert und kontrolliert werden, können derzeit jedoch noch keine Aussagen zur Vorhersagegenauigkeit der Simulationsmodelle getroffen werden, jedoch können Ergebnisse bezüglich ihrer Plausibilität bewertet werden. Dabei können moderne Simulationsmodelle für den gekoppelten Wärme-, Feuchte- und Salztransport die in der Natur beobachteten makroskopischen Transportmechanismen wiedergeben.

Eine salzinduzierte Schädigung, welche makroskopisch häufig sehr unregelmäßig und schlecht reproduzierbar zu beobachten ist, lässt sich derzeit nur über Indikatoren als Schadenswahrscheinlichkeit bewerten. Dabei werden z.B. die Häufigkeit und Höhe der Übersättigung einer Porenlösung verwendet. Diesem liegt die Argumentation zu Grunde, dass hohe Übersättigungen es einem Kristall erlauben, auch gegen nennenswerten Druck weiter zu wachsen und damit mechanische

Verformungskräfte auf die Materialmatrix auszuüben. Wird die Simulation vergleichend angewandt, um z.B. den Einfluss von Umgebungsbedingungen wie der Luftfeuchte auf das Schadensrisiko zu untersuchen, können die Linienintegrale der über der Zeit dargestellten Übersättigungen als Maß für das relative Schadensrisiko verwendet werden. Jedoch fehlen auch hier noch schlüssige und belastbare Laboruntersuchungen.

Alternativ zur makroskopischen Bewertung salzinduzierter Schadensrisiken können auch mikroskopische und auf thermodynamischen Grundlagen basierende Verfahren angewendet werden (ESPINOSA-MARZAL et al., 2009). Der Abgleich theoretischer Vorhersagen und experimenteller Ergebnisse ist derzeit jedoch nur durch Einführung verschiedener Parameter möglich, welche bei Modellanwendung auf andere Materialien und Salze derzeit noch stets neu kalibriert werden müssen.

8.7 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Ausgehend von bereits gut entwickelten HAM-Transportmodellen für salzfreie Baumaterialien, wurden in den vergangenen Jahren komplexe Modelle für die Beschreibung kombinierter Wärme-, Feuchte- und Salztransportprozesse entwickelt (NICOLAI, 2007; NICOLAI et al., 2009a). Dabei kamen spezielle Teilmodelle, wie z.B. das Pitzer-Ionen-Interaktionsmodell für die Berechnung thermodynamischer Eigenschaften von Salzmodellen zum Einsatz. Besonderer Schwerpunkt der Forschung lag auf der Modellierung der Feuchte- und Salzinteraktion, welche bislang nur teilweise erforscht ist. Modellansätze für die Beschreibung der erhöhten Feuchteaufnahme salzbelasteter Konstruktionen oder der Feuchteabhängigkeit von Diffusionskoeffizienten können als ausgereift bezeichnet werden. Jedoch sind die Zusammenhänge zwischen Feuchtetransporteigenschaften und kristallinen Phasen im Porenraum noch weitgehend ungeklärt. Ebenso offen sind Fragen bezüglich der Abhängigkeit einer Salzschädigung von mikroskopischer Materialstruktur, chemischer Zusammensetzung sowie der Prozessdynamik und der beteiligten thermodynamischen Potenziale.

Die Modellierung der Salztransport- und Schädigungsprozesse und die numerische Berechnung komplexer instationärer Prozesse sind wichtige Werkzeuge zum Verständnis der Mechanismen und zur Entwicklung von Sanierungs- oder Schadensvorbeugungsmaßnahmen. Bereits zum derzeitigen Stand der Forschung können die komplexen Simulationssysteme, wie z.B. das DELPHIN-Programm, Aufschlüsse zu Ursachen und kritischen Parametern geben.

8.8 Literatur

- ESPINOSA R., DECKELMANN G., FRANKE L. (2009): Model for the mechanical stress due to the salt crystallization in porous materials. In: *Simulation of Time Dependent Degradation of Porous Materials* (ed. L. Franke, G. Deckelmann, R. Espinosa-Marzal). Cuvillier Verlag, Göttingen, 311–326.
- ESPINOSA R., FRANKE L., DECKELMANN G. (2008): Phase changes of salts in porous materials: crystallization, hydration and deliquescence. *Construct. Build. Mater.* 22, 1758–1773.
- HINNIGER A. (2009): Numerical Simulation of Frost Resistance of Masonry. In: *Simulation of Time Dependent Degradation of Porous Materials* (ed. L. Franke, G. Deckelmann, R. Espinosa-Marzal). Cuvillier Verlag, Göttingen, 381–394.
- LIEBRICH C., VOGT R., KRIEGEL R., KAPS C. (2009): Modelling of diffusive transport of salt ions in porous, water-containing building materials and capillary transport behavior of salt solutions, subject to building material, salt type, concentration and fluid content. In: *Simulation of Time Dependent Degradation of Porous Materials* (ed. L. Franke, G. Deckelmann, R. Espinosa-Marzal). Cuvillier Verlag, Göttingen, 19–36.
- NICOLAI A. (2007): Delphin 5, Numerical simulation tool for the coupled heat, air, moisture and salt transport, Webpage, <http://www.bauklimatik-dresden.de/delphin>.
- NICOLAI A. (2007): Modeling and Numerical Simulation of Salt Transport and Phase Transitions in Unsaturated Porous Building Materials. Dissertation, Syracuse University, USA.
- NICOLAI A., SCHEFFLER G., GRUNEWALD J., PLAGGE R. (2009a): Development of a Combined Heat, Moisture and Salt Transport Model for Unsaturated Porous Building Materials. In: *Simulation of Time Dependent Degradation of Porous Materials* (ed. L. Franke, G. Deckelmann, R. Espinosa-Marzal). Cuvillier Verlag, Göttingen, 67–84.
- NICOLAI A., SCHEFFLER G., GRUNEWALD J., PLAGGE R. (2009b): An efficient numerical solution method and implementation for coupled heat, moisture and salt transport – the DELPHIN simulation program. In: *Simulation of Time Dependent Degradation of Porous Materials* (ed. L. Franke, G. Deckelmann, R. Espinosa-Marzal). Cuvillier Verlag, Göttingen, 85–100.
- STEIGER M., KIEKBUSCH J., NICOLAI A. (2008): An improved model incorporating Pitzer's equations for calculation of thermodynamic properties of pore solutions implemented into an efficient program code. *Construct. Build. Mater.* 22, 1814–1850.