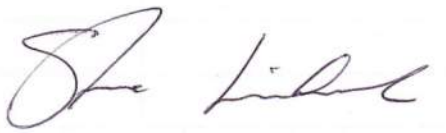
BILAGA 7

SBUF 13701, Milstolpe 8:

SimScan: Verktyg för simulering av scanningisotermer

Lund 2021-03-14



Sture Lindmark

Tekn. Dr.

FuktCom Konsult Lindmark AB
Org nr 556726-3289
Stenshuvudsvägen 55
SE-277 35 KIVIK

Sture.Lindmark@Fuktcom.se
www.fuktcom.se
Mobil 073 - 80 83 600

Innehåll

1 Inledning 3

2 Modeller för isotermer och scanningisotermer 3
2.1 Modell för scanningisotermer 3
2.2 Modell för isotermer 6

3 Att använda SimScan 7
3.1 Instruktioner 8
3.2 Testsida 8
3.3 Passa ABn 8
3.4 Scanning 8
3.5 Diagram 1 9
3.6 Åtgärda fel 9

4 Begränsningar 9
4.1 Kommentar 9

5 Referenser 9

Bilagor

1. Definitioner

2. Exempel på kurvformer med ekvation 3

1 Inledning

I projektplanen för SBUF-projekt 13701 anges att milstolpe 8 avser utveckling av ett beräkningsverktyg för simulering av scanningisotermer. Ett sådant verktyg har utvecklats och redovisas som en separat excel-fil, kallad SimScan. I denna rapport beskrivs kortfattat vad som görs i excel-filen.

Syftet med den modell som används i Simscan är att kunna simulera scanning-kurvor på ett sätt som är enkelt att integrera i ett beräkningsprogram för omfördelningsberäkningar. Främsta avsikten har varit att beräkningarna skall ge ett rimligt förlopp som löper mellan de båda isotermerna, oavsett RF-nivå. Med enklare modeller kan användaren tvingas lägga in kontrollmoment för att säkerställa att inte det beräknade förloppet ger kombinationer av fukthalt och RF som ligger utanför området mellan isotermerna. Modellen tar med automatik hänsyn till de aktuella isotermernas former.

Excel-verktyget SimScan bygger inte på någon fysikalisk modell, utan använder en matematisk modell för att skapa rimliga former på erforderliga scanningkurvor. Användaren måste därför pröva sig fram och anpassa den matematiska modellen (via exponenten m) tills en rimlig scanningkurva erhålls. Verktyget kräver således att användaren har viss kännedom om hur scanningkurvor kan ser ut för det aktuella materialet. Några exempel ges i rapport från delprojekt 5 och 7.

2 Modeller för isotermer och scanningisotermer

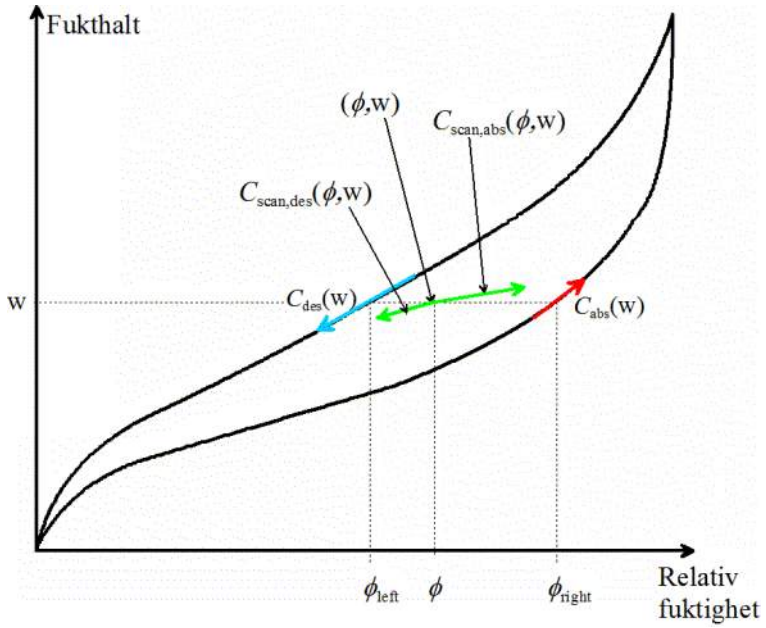
Scanningisotermer är de jämviktskurvor som beskriver fukttillståndet i ett material som övergår från torkning till uppfuktning eller vice versa. I SimScan beräknas sådana scanningisotermer med utgångspunkt i det aktuella fukttillståndet samt desorptions- och absorptionsisotermernas fuktkapacitet vid den aktuella fukthalten. I det följande beskrivs den matematiska modell som används i SimScan.

Scanningisotermers form beskrivs utförligare i delrapport från Milstolpe 5 och 7.

2.1 Modell för scanningisotermer

I modellen beräknas absorptionscanningkurvans fuktkapacitet (lutning) vid varje givet fukttillstånd (beskrivet som RF och w) som en fraktion av fuktkapaciteten enligt absorptionsisotermen vid denna fukthalt. På motsvarande sätt beräknas desorptionscanningkurvans fuktkapacitet (lutning) vid varje givet fukttillstånd (RF och w) som en fraktion av fuktkapaciteten enligt desorptionsisotermen vid den aktuella fukthalten. Vid fortsatt ändring av fukthalten under pågående scanningförlopp ändras fukttillståndet (RF) i enlighet med den aktuella scanningfuktkapaciteten. Fukttillståndet efter nästa tidssteg beräknas således helt och hållet utifrån den situation som råder före tidssteget.

Principen illustreras i Figur 1.



Figur 1: Illustration av hur scanningkapaciteten (fuktkapaciteten vid scanning) beräknats. ϕ och w är den RF och den fukthalt som råder vid jämvikt enligt scanningisotermen.

<u>Absorption</u>:

$$C_{scan,abs}(\emptyset_{scan}, w_{scan}) = f_{abs} \cdot C_{abs}(w_{scan}) \qquad \text{(Ekv. 1a)}$$

$$f_{0,abs} = max\ (f_{min}\ ;\ \frac{\emptyset_{scan} - \emptyset_{des}(w_{scan})}{\emptyset_{abs}(w_{scan}) - \emptyset_{des}(w_{scan})}) \qquad \text{(Ekv. 1b)}$$

$$f_{abs} = \left(f_{0,abs}\right)^m \qquad \text{(Ekv. 1c)}$$

<u>Desorption</u>:

$$C_{scan,des}(\emptyset_{scan}, w_{scan}) = f_{des} \cdot C_{des}(w_{scan}) \qquad \text{(Ekv. 2a)}$$

$$f_{0,des} = max\ (f_{min};\ \frac{\emptyset_{abs}(w_{scan}) - \emptyset_{scan}}{\emptyset_{abs}(w_{scan}) - \emptyset_{des}(w_{scan})}) \qquad \text{(Ekv. 2b)}$$

$$f_{des} = \left(f_{0,des}\right)^m \qquad \text{(Ekv. 2c)}$$

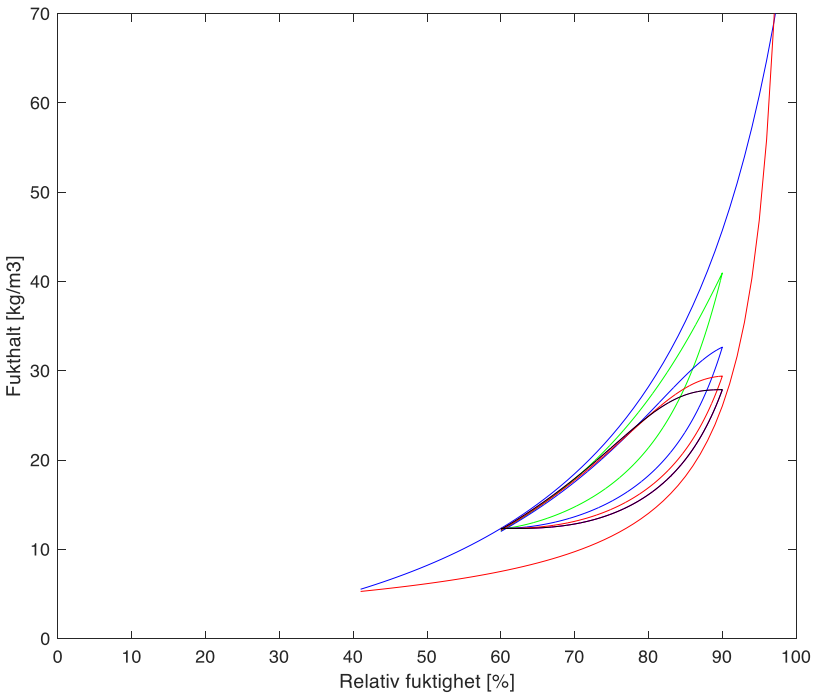
Exponenten m används för att ge scanningisotermen lämplig form, se nedan.

Termen f *(fraction*) kan i ett par fall anta värden som leder till oanvändbara resultat. Det första, och vanligt förekommande fallet, är då ett material som tidigare enbart har torkats övergår till uppfuktning (dvs till absorptionsscanning). Eftersom fukttillståndet då ligger precis på desorptionsisotermen när scanningen startar blir täljaren 0.

Det andra, och i praktiken nästan aldrig förekommande fallet[1], är då materialets fukttillstånd ligger på absorptionsisotermen och materialet sedan övergår till torkning (desorptionsscanning).

För att undvika dessa felkällor måste en begränsning införas i beräkningarna så att f aldrig har ett alltför lågt värde. Därför införs termen $f_{\min}$. Ofta kan $f_{\min}$ sättas till cirka 0,01. Detta värde baseras på att provberäkningar har visat att slutliga resultat i en omfördelningsberäkning inte är starkt beroende av om minsta andelen sätts till 0,1%, 1% eller 5%. Användaren kan själv pröva sig fram. Ju högre värde på exponenten m, desto högre värde behövs till $f_{\min}$, eftersom första delen av scanningkurvan annars kan bli horisontell. Om denna modell för scanningisotermer används i något annat sammanhang än omfördelningsberäkningar är det möjligt att termen måste modifieras.

Exponenten m kan varieras för att få olika form på scanningloopen, se Figur 2. Exponenten m varierar ofta i intervallet 0,5≤k≤1,5 men kan även falla utanför detta intervall. Ju lägre värdet är, desto brantare lutar absorptionsscanningisotermen. Se vidare nedan.



Figur 2: Exempel på hur exponenten i ekvation 1c och 2c påverkar beräknade scanningförlopp: Scanning från 60 till 90 till 60%RF. Grön: Exponent=0,5, blå: 1,0, magenta: 1,5, svart: 2,0. (Beräknat för ett material liknande en avjämningsmassa.)

[1] Desorptionsscanning med start på absorptionsisotermen inträffar bara i de fall cellerna har tillförts så mycket vatten (t.ex. från limfukt) att materialet (i de aktuella cellerna) har blivit kapillärt mättat. Vid lägre fukttillskott än så kommer fukttillståndet fortfarande att finnas på en absorptionsscanningisoterm, och därmed kommer f inte att bli 0. I praktiska beräkningar är det ytterst sällan som fukttillståndet efter absorptionsscanning kommer att vara så nära absorptionsisotermen att f bli besvärande liten. (I en automatiserad beräkning måste hänsyn dock tas till att detta trots allt kan inträffa.)

2.2 Modell för isotermer

För att göra modellen för scanningisotermer praktiskt användbar behövs fuktkapaciteten vid absorption respektive desorption som funktion av RF. Denna kan beräknas på flera olika sätt. I det följande beskrivs en relativt enkel modell för sorptionsisotermer som gör det möjligt att enkelt beräkna fuktkapaciteten vid varje given RF.

I beräkningsverktyget SimScan används följande modell som baseras på tre passningsparametrar; A, B och n:

$$w(\emptyset) = w_e(\emptyset_{c.s})\left(\frac{\emptyset}{\emptyset_{c.s}}\right)^n \frac{(A+\emptyset_{c.s})(B-\emptyset_{c.s})}{(A+\emptyset)(B-\emptyset)} \qquad (3)$$

där

$w(\phi)$ = fukthalt w vid relativa fuktigheten ϕ

$\phi_{c.s}$ = Relativa fuktigheten vid kapillär mättnad

$w_e(\phi_{c.s})$ = fukthalt vid kapillär mättnad

A, B, n = passningsparametrar

A påverkar isotermens form vid låga RF, B vid höga RF och n ger möjlighet till ytterligare anpassning. Anpassningsarbetet kan vara omfattande. Ju lägre värde på A, desto skarpare ”knä” i kurvan i området 0<RF<0,4. Ju högre värde på B, desto flackare kurva (mindre brant) nära RF=1. Exponenten n påverkar kurvans form framförallt vid låga RF (ingen inverkan alls vid RF=1). Tillsammans ger de två sista termerna i ekvationen värdet 1 vid $\phi = \phi_{c.s}$, och därefter skalas hela kurvan med hjälp av $w_e(\phi_{c.s})$ så att rätt fukthalt erhålls.

Ekvationen kan användas såväl till de vanligt förekommande S-formade isotermerna (Brunauers ”Typ II”) som till mer Langmuir-artade isotermer (konvexa uppåt), som t.ex. för mycket tät betong som praktiskt taget saknar kapillärporer.

För normala S-formade isotermer kan parametervärdena vara i storleksordningen 0,01< A <1, B > $\emptyset_{c.s}$ och n cirka >0,1. Lämpligt värde på n är dock starkt beroende av vilket värde som satts på A. Anpassning till Langmuir-typen kan göras med låga värden på A (0,1< A <0,3), mycket höga värden på B ($B \approx 100\times A$) och n cirka 1. Väsentliga avvikelser från dessa riktlinjer kan förekomma. Exempel på passningar ges i Bilaga 2.

Om det inte går att anpassa ekvationen till hela isotermen kan det vara lämpligt att optimera passningen till det RF-område man bedömer kommer att vara mest relevant.

Fuktkapaciteten C beräknas som derivatan av sorptionsisotermen; $dw/d\phi$:

$$C_w(\phi) = \frac{dw}{d\emptyset} = w_e(\emptyset_{c.s}) \cdot \frac{(A+\emptyset_{c.s})(B-\emptyset_{\emptyset_{c.s}})}{\emptyset_{c.s}{}^n} \cdot \frac{n\emptyset^{n-1}(AB+(B-A)\emptyset-\emptyset^2)-\emptyset^n(B-A-2\emptyset)}{((A+\emptyset)(B-\emptyset))^2} \qquad 4$$

Dessvärre är det inte möjligt att beräkna inversen till ekvation 3, dvs det är inte möjligt att analytiskt lösa ut ϕ som funktion av w. För beräkning av ϕ ur känd w krävs numerisk metod, t.ex. Newton-Raphson:

$$\emptyset_{n+1} = \emptyset_n - \frac{w(\emptyset_n)}{C_w(\emptyset_n)} \qquad 5$$

Per definition nås $w_{e,\,c.s}$ vid samma RF vid absorption som vid desorption. Detta gör att kurvorna för absorption och desorption sammanfaller i punkten ($\phi_{c.s}$, $w_{e,c.s}$).

Om isotermen har mätts och definierats så att fukthalten anges vara 0 vid en ϕ >0 ersätts ϕ med (ϕ - $\phi_{w=0}$) där $\phi_{w=0}$ är den RF där fukthalten definierats vara 0.

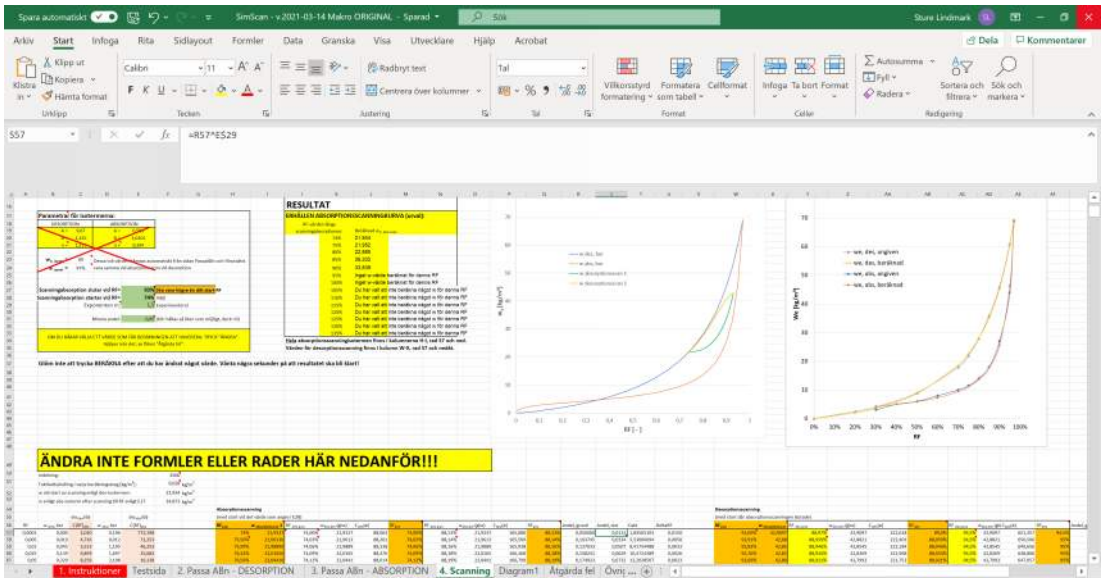
3 Att använda SimScan

Excel-bladet SimScan innehåller åtta flikar:

1. Instruktioner
2. Testsida
3. Passa ABn – Desorption
4. Passa ABn – Absorption
5. Scanning
6. Diagram 1
7. Åtgärda fel
8. Övrigt

Som INPUT behövs data för absorptions- och desorptionsisotermer för det aktuella materialet. Operatören bör också ha en uppfattning om hur scanningisotermer rimligen ser ut för det aktuella materialet.

Som OUTPUT från excel-filen erhålls scanningisotermer, absorption såväl som desorption, vid scanning från en RF till en annan. Värden för detta RF-intervall anges av operatören. Lämpligen väljs det intervall som kan antas bäst motsvara den situation som kommande omfördelningsberäkning avser. Utdata kan sedan klippas in i annat beräkningsprogram, t.ex. WUFI, för fortsatt omfördelningsberäkning. I ett mer automatiserat program, som t.ex. Redist, kan scanningkapaciteten beräknas allteftersom så att man inte i förväg behöver gissa vilket scanningintervall som blir relevant.



Figur 3: Exempel ur SimScan, fliken Scanning.

3.1 Instruktioner

Under Instruktioner förklaras hur excel-filen SimScan är tänkt att användas. Här måste man dels ställa in excel på att kunna göra iterativa beräkningar, aktivera makron samt spara originalfilen under nytt namn innan man börjar göra några ändringar.

3.2 Testsida

På denna flik kan användaren pröva sig fram för att på så sätt bättre förstå hur valet av parametrarna A, B och n påverkar formen på den beräknade isotermen. Här används inte den sanna vattenhalten utan sidan syftar enbart till att visa hur kurvans form förändras.

3.3 Passa ABn

På flikarna PassaABn (desorption respektive absorption) gör man en anpassning av parametrarna A, B och n till de kända isotermerna. Det behövs en uppsättning A, B, och n till absorptionsisotermen och en uppsättning till desorptionsisotermen. Man anger ett intervall för respektive parameter och sedan söker kalkylbladet efter bästa möjliga kombination av parametervärden inom dessa intervall. Man börjar med breda intervall och förfinar sedan allteftersom man ser hur anpassningen utvecklas.

Excel-bladet är stort och därför kan det ta tid att genomföra alla beräkningar. Man måste avvakta att beräkningarna har slutförts innan man gör nästa ändring.

3.4 Scanning

På fliken scanning beräknas scanningisotermer (absorption och desorption) över det RF-intervall som användaren anger. Till grund för beräkningen ligger de A, B och n-värden som anpassats på flikarna PassaABn. Beräkningen görs i en mängd steg, med en liten fukthaltsändring görs i varje steg.

På denna flik måste användaren även välja värde på parametern m i scanning-modellen (ekv 1-2 ovan). Värdet väljs så att en rimlig form på scanningisotermerna erhålls.

Även termen $f_{\min}$ (”minsta andel”) behövs. Vanligtvis fungerar värden i intervallet 0,01-0,1 väl. Välj så lågt värde som möjligt. I takt med att exponenten m ökas kan minsta andel behöva ökas, eftersom första delen av scanningkurvan annars blir helt horisontell.

Vid valet av scanningintervall finns risk att man väljer värden som gör att beräkningarna havererar. I vissa fall fungerar det att ”Ångra” senaste ändringen, men i andra fall kan besvärligare fel uppstå. På fliken *Åtgärda fel* finns viss vägledning för att åtgärda sådana fel. I värsta fall får man gå tillbaka och öppna originalfilen på nytt, döpa om den och göra om sina anpassningar. (Anpassningen av ABn-värden är dock redan gjord då så dessa behöver inte göras om.)

3.5 Diagram 1

Här redovisas ett diagram med de båda isotermerna samt beräknade absorptions- och desorptionsisotermer. Användaren måste själv justera in pilarna som finns i diagrammet.

3.6 Åtgärda fel

På fliken *Åtgärda fel* beskrivs tekniker att rätta till fel som uppstår till exempel till följd av att olämpliga scanningintervall har valts.

4 Begränsningar

Den modell för scanningisotermer som beskrivs ovan fungerar så, att om en scanningloop upprepas flera gånger, så kommer de beräknade fukttillstånden inte att falla helt i varandra, dvs man får inte ett och samma resultat gång på gång på gång. Detta beskrivs närmare i delrapport från milstolpe 5 och 7. Felet har ingen betydelse i de fall man enbart räknar med en enda uppfuktningscykel (dvs som vid normala omfördelningsberäkningar). Om det trots allt är nödvändigt att köra flera torknings-uppfuktningscykler efter varandra kan felet minskas genom lämpligt val av exponenten k i ekvation 1-2.

Fel av denna typ är vanligt förekommande i olika modeller för beräkning av scanningisotermer, se t.ex. [1].

4.1 Kommentar

Som nämndes ovan beräknas ny RF vid scanning ur den förändring av fukthalten som sker under ett tidssteg, baserat på den fuktkapacitet som råder enligt scanningisotermen före tidssteget. Det är möjligt att beräkningsresultaten skulle kunna bli bättre om beräkningen istället gjordes på implicit väg, dvs med hänsyn även till vilken lutning scanningisotermen ska ha efter tidssteget (vilket ju beror av vilka värden som då råder enligt desorptions- och absorptionsisotermerna vid den nya fukthalten).

5 Referenser

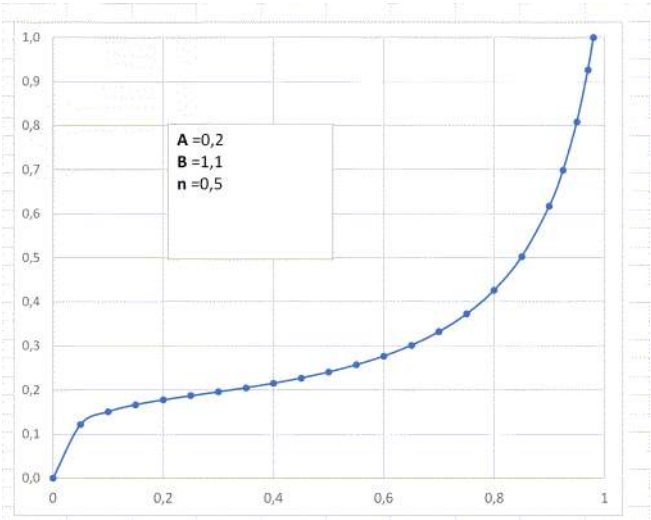
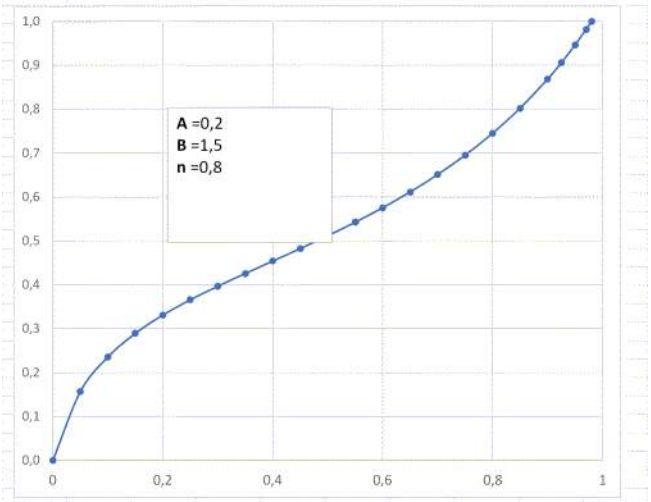
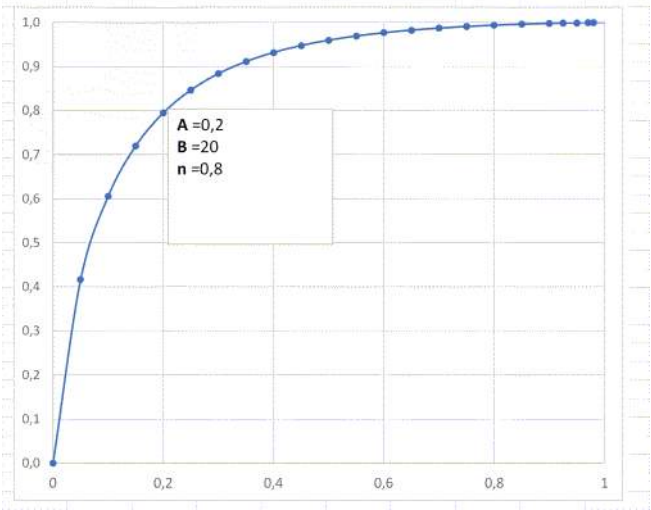
[1] Zhang, Z: Modelling of sorption hysteresis and its eect on moisture transport within cementitious materials, Université Paris-Est, NNT: 2014PEST1055, 2014

1. Bilaga: Definitioner

Absorptionsisoterm: Med absorptionsisoterm avses i denna rapport enbart den absorptionsisoterm som erhålls vid uppfuktning *från ett helt uttorkat tillstånd.* (Med ”helt uttorkat” avses att allt fysikaliskt bundet vatten har torkats bort, men inget av det kemiskt bundna.)

Desorptionsisoterm: Med desorptionsisoterm avses i denna rapport enbart den desorptionsisoterm som erhålls vid torkning med start vid kapillärmättnad. Detta kan betyda 100%RF eller den lägre RF som porlösningen får pga lösta ämnen, trots att inget undertryck råder i porlösningen. Alla andra jämviktskurvor, som startar vid en punkt på absorptionsisotermen eller på en absorptionsscanningisoterm, kallas *desorptionscanningkurvor*.

Absorptionscanningkurva: Jämviktsfuktkurva som erhålls då uppfuktning startar i ett inte helt torrt material. Startpunkten kan ligga på desorptionsisotermen eller någonstans mellan absorptions- och desorptionsistotermerna.

Desorptionscanningkurva: Jämviktsfuktkurva som erhålls då torkning startar i ett material som tidigare genomgått uppfuktning. Startpunkten ligger någonstans mellan absorptions- och desorptionsistotermerna. (Desorption kommer att starta från ett läge <u>på</u> absorptionskurvan endast i det fall att tidigare uppfuktning har skapat kapillär mättnad i materialet. Torkning kommer då att ske längs (den ordinarie) desorptionskurvan.)

2. Bilaga 2: Exempel på kurvformer med ekv. 3