

P11-2005-28

И. В. Амирханов, Э. Павлушова¹, М. Павлуш¹,
Т. П. Пузынина, И. В. Пузынин, И. Сархадов²

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ
ИСПАРЕНИЯ ВЛАГИ В СТРОИТЕЛЬНЫХ
МАТЕРИАЛАХ

Направлено в оргкомитет XLI Всероссийской конференции
по проблемам математики, информатики, физики и химии,
Москва, 18–22 апреля 2005 г.; в журнал «Вестник Российского
университета дружбы народов. Серия “Прикладная и компьютерная
математика”»

¹Технический университет, Кошице, Словакия

²Таджикский государственный национальный университет, Душанбе

Амирханов И. В. и др.

P11-2005-28

Численное исследование модели испарения влаги
в строительных материалах

В работе исследуются свойства модели испарения влаги в пористом строительном материале прямоугольной формы, предложенной в [1].

Разработаны и исследованы алгоритмы решения нелинейного уравнения диффузии с краевыми и начальными условиями, моделирующего динамику распределения концентрации влаги, и вычисления коэффициентов полинома, описывающего перенос влаги, с использованием экспериментальных измерений концентрации влаги в образце.

Проведено изучение свойств модели в зависимости от степени полинома, набора его коэффициентов и количества используемых экспериментальных данных.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2005

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2005-28

Numerical Investigation of a Moisture Evaporation Model
in Building Materials

The properties of a model of moisture evaporation in a porous building material of a rectangular form proposed in [1] are investigated.

Algorithms of solving a nonlinear diffusion equation with initial and boundary conditions simulating the dynamic distribution of moisture concentration, calculation of coefficients of a polynomial describing transport of moisture with usage of experimental measurement of moisture concentration in a sample are developed and investigated.

Research on the properties of the model is carried out depending on the degree of the polynomial, a set of its coefficients, and the quantity of the used experimental data.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2005

ВВЕДЕНИЕ

Проникновение и перенос влаги приводят к химическим и физическим повреждениям строительных материалов. Поэтому изучение этих процессов в пористых строительных материалах важно для оценки долговечности строительных сооружений, в которых используются эти материалы. Феноменологически перенос влаги описывается уравнением диффузии с использованием коэффициента переноса влаги, который зависит от количества влаги. Для определения коэффициента переноса влаги в определенном материале необходимы экспериментальные количественные измерения пространственного распределения влаги в разные моменты времени.

В работе [1] предложен метод анализа количества влаги в строительных материалах, основанный на облучении нейтронами образца строительного материала, не разрушающем его, и регистрации сигналов от не поглощенных образцом нейtronов. В качестве примера приводятся экспериментальные данные распределения влаги в прямоугольном кирпиче с размерами $3 \times 9 \times 12$ см в процессе его сушки. Все боковые поверхности образца водо- и воздухонепроницаемы, кроме одной, с размерами 3×12 см, откуда происходит испарение влаги в атмосферу. В предположении одномерного движения влаги в образце вдоль его грани размером 9 см вычислен коэффициент влагопереноса в образце, эмпирически определенный в виде полинома третьей степени от концентрации влаги. Коэффициенты полинома вычислялись из условия минимума квадратичного функционала, определяющего отклонение экспериментальных данных от теоретических результатов, получаемых на основе численного решения нелинейного уравнения диффузии.

В настоящей работе разработаны алгоритмы, реализующие численный метод, предложенный в [1], и выполнено численное исследование их точности. На основе разработанных алгоритмов проведено численное исследование зависимости результатов от параметров модели с целью изучения возможности сокращения экспериментальных измерений концентрации влаги в образце и обоснованности эмпирической формулы для коэффициента влагопереноса.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Как и в работе [1], моделирование переноса влаги будем проводить на основе нелинейного уравнения диффузии

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(w) \frac{\partial w}{\partial x} \right], \quad t > 0, \quad 0 < x < 1. \quad (1)$$

Здесь w — концентрация влаги, $D(w)$ — коэффициент влагопереноса, t — время, x — пространственная координата вдоль ширины образца. В данной работе $D(w)$ выбрано в виде полинома N -й степени $D(w) = D_0 + D_1w + D_2w^2 + \dots + D_Nw^N$.

Уравнение (1) будем решать со следующими начальными и граничными условиями:

$$w(x, 0) = w_0(x), \quad \frac{\partial w}{\partial x}(0, t) = 0, \quad w(1, t) = v_1, \quad t > 0, \quad (2)$$

где $w_0(x)$ — распределение влаги при $t = 0$, v_1 — концентрация влаги в воздухе.

Все величины, входящие в задачу (1), (2), переведены в безразмерные единицы. Здесь $w = w(x, t)/w_0$ ($w_0 = 0,2 \text{ г}/\text{см}^3$ — размерная константа), $t = t/t_0$ ($t_0 = 28800$ мин — время испарения), $x = x/x_0$ — координата ($x_0 = 9$ см — размер образца, вдоль которого происходит перенос влаги).

Заметим, что граничные условия отличаются от рассматриваемых в работе [1], что оправдано в рамках модельного исследования.

Начальное условие $w_0(x)$ выбираем в виде табличной функции, которая аппроксимирует профиль концентрации влаги после первого дня испарения (рис. 1, *б*) в безразмерной форме.

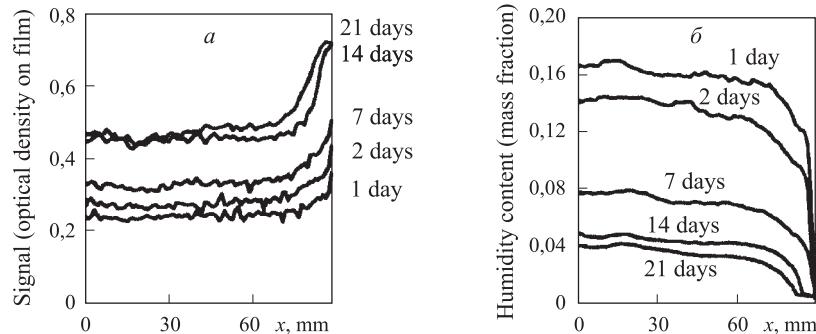


Рис. 1. Профили переноса нейтронов вдоль 9-см грани при $t = 1, 2, 7, 14$ и 21 -й день (*а*) и соответствующих распределений концентраций влажности (*б*), полученных с помощью анализа преобразованных сигналов [1]

Параметры $D = \{D_0, D_1, D_2, \dots, D_N\}$ будем определять из условия минимума функционала

$$S(D) = \sum_{j=1}^M \int_0^1 [w(x, t_j) - w_e(x, t_j)]^2 dx, \quad (3)$$

где M — количество дней, за которые проводились измерения концентрации влаги, $w_e(x, t_j)$ — профиль экспериментальных данных t_j -го дня, $w(x, t)$ — решение задачи (1), (2).

2. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Рассмотрим следующую модельную задачу.

1. Предположим, что задан некоторый набор параметров $D^* = \{D_0^*, D_1^*, D_2^*, \dots, D_N^*\}$. Решая прямую задачу (1), (2) для этого набора, мы получаем решения $w(x, t_1), w(x, t_2), w(x, t_3), \dots, w(x, t_M)$. Эти решения принимаем в качестве экспериментальных данных задачи.

2. Далее берем некоторый набор параметров $D = \{D_0, D_1, D_2, \dots, D_N\}$. Исходя из этого начального приближения, минимизируем функционал (3).

Численное решения модельной задачи состоит из двух взаимосвязанных частей: решения прямой задачи (1), (2) и минимизации функционала (3).

1. Рассмотрим численное решение прямой задачи (1), (2).

Введем равномерную прямоугольную сетку $\{t_j = \tau j \ (j = 0, 1, \dots, n), x_i = hi \ (i = 0, 1, \dots, m)\}$, где h и τ — соответственно шаги по переменным x и t .

Для решения уравнения (1) с начальным и граничными условиями (2) будем использовать следующую абсолютно устойчивую конечно-разностную схему с точностью аппроксимации $O(\tau + h^2)$ [2]:

$$\frac{w_i^{j+1} - w_i^j}{\tau} = \frac{1}{h} \left[C_i^{j+1} \frac{w_{i+1}^{j+1} - w_i^{j+1}}{h} - C_{i-1}^{j+1} \frac{w_i^{j+1} - w_{i-1}^{j+1}}{h} \right], \\ i = 1, 2, \dots, m-1, \quad (4)$$

$$C_i^{j+1} = C(w_i^{j+1}) = \left[D_{i+1}^{j+1} + D_i^{j+1} \right] / 2, \quad (5)$$

$$\frac{3w_0^{j+1} - 4w_1^{j+1} + w_2^{j+1}}{2h} = 0, \quad (6)$$

$$w_m^{j+1} = v_1, \quad j = 0, 1, \dots, n-1. \quad (7)$$

На каждом $j+1$ -м слое уравнение (4) представляет собой нелинейную граничную задачу, которая решается методом простых итераций. Предположим, что значение влаги $w_i^{j+1(s)}$ на s -й итерации известно. При вычислении следующего $s+1$ -го приближения будем брать в функции $C(w_i^{j+1})$ выражения (5) значение влаги $w_i^{j+1(s)}$ из предыдущей итерации.

Таким образом, мы получаем следующую схему итераций:

$$\begin{aligned} -C_{i-1}^{j+1(s)} w_{i-1}^{j+1(s+1)} + \left[C_{i-1}^{j+1(s)} + C_i^{j+1(s)} + \frac{h^2}{\tau} \right] w_i^{j+1(s+1)} - \\ -C_i^{j+1(s)} w_{i+1}^{j+1(s+1)} = \frac{h^2}{\tau} w_i^j, \quad (8) \end{aligned}$$

$$i = 1, 2, \dots, m-1,$$

$$3w_0^{j+1(s+1)} - 4w_1^{j+1(s+1)} + w_2^{j+1(s+1)} = 0, \quad (9)$$

$$w_m^{j+1(s+1)} = v_1. \quad (10)$$

В этом случае мы имеем линейную задачу относительно $w_i^{j+1(s+1)}$, которая решается методом прогонки.

Итерационный процесс завершается при выполнении условия

$$\max |w_i^{j+1(s+1)} - w_i^{j+1(s)}| < \varepsilon, \quad i = 0, 1, \dots, m,$$

где $\varepsilon > 0$ — заранее заданное малое число.

В качестве начального приближения на каждом слое $j+1$ берем значение концентрации влаги с предыдущего слоя j ($w_i^{j+1(0)} = w_i^j, i = 0, 1, 2, \dots, m$). В дальнейшем задачу (1), (2) будем решать с итерациями, когда $s \neq 0$, и без итераций, когда $s = 0$.

2. Метод Ньютона применяем для поиска точки D локального минимума функционала (3), в которой, как известно, градиент $S'(D) = 0$. Поэтому формула метода Ньютона имеет вид [3, 4]

$$D^{(k+1)} = D^{(k)} - [S''(D^{(k)})]^{-1} S'(D^{(k)}). \quad (11)$$

Здесь $S''(D^{(k)}) = A$ — симметричная матрица Гессе размерности $N \times N$ вторых производных функционала (3), вычисляемых по формуле

$$A_{rs} = \frac{\partial^2 S}{\partial D_r \partial D_s}, \quad r, s = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (12)$$

Первые и вторые производные по параметрам $\partial S / \partial D_r, \partial^2 S / \partial D_r \partial D_s$, которые выступают в правых частях уравнений (11) и (12), определяем численно из решения прямой задачи (1), (2) при разных наборах параметров. Покажем это, например, для производных $\partial S / \partial D_1, \partial^2 S / \partial D_1^2$ и $\partial^2 S / \partial D_1 \partial D_2$:

$$\frac{\partial S}{\partial D_1} = \frac{S(D_0, D_1 + \Delta_1, D_2, D_3) - S(D_0, D_1 - \Delta_1, D_2, D_3)}{2\Delta_1},$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^2 S}{\partial D_1^2} = \\
& = \frac{S(D_0, D_1 + \Delta_1, D_2, D_3) - 2S(D_0, D_1, D_2, D_3) + S(D_0, D_1 - \Delta_1, D_2, D_3)}{\Delta_1^2}, \\
& \frac{\partial S}{\partial D_1}(D_0, D_1, D_2 + \Delta_2, D_3) = \\
& = \frac{S(D_0, D_1 + \Delta_1, D_2 + \Delta_2, D_3) - S(D_0, D_1 - \Delta_1, D_2 + \Delta_2, D_3)}{2\Delta_1}, \\
& \frac{\partial S}{\partial D_1}(D_0, D_1, D_2 - \Delta_2, D_3) = \\
& = \frac{S(D_0, D_1 + \Delta_1, D_2 - \Delta_2, D_3) - S(D_0, D_1 - \Delta_1, D_2 - \Delta_2, D_3)}{2\Delta_1}, \\
& \frac{\partial^2 S}{\partial D_1 \partial D_2} = \\
& = \left(\frac{\partial S}{\partial D_1}(D_0, D_1, D_2 + \Delta_2, D_3) - \frac{\partial S}{\partial D_1}(D_0, D_1, D_2 - \Delta_2, D_3) \right) / 2\Delta_2.
\end{aligned}$$

Здесь Δ_1, Δ_2 — достаточно малые положительные числа. Итерационный процесс метода Ньютона можно завершить по разным признакам. Например, по малости нормы функционала (3) в точке $D^{(k+1)}$, или нормы $\|D^{(k+1)} - D^{(k)}\|$, или относительной ошибки $\|D^{(k+1)} - D^*\|/\|D^*\|$, или нормы градиента $\|S'(D^{(k)})\|$. В случае сходимости итерационного процесса все эти значения стремятся к нулю.

3. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТОЧНОСТИ РАСЧЕТОВ

Исследование проведено для $N = 3$ и $M = 4$.

Для выбора оптимальных шагов h, h_t решим задачу (1), (2) для некоторого набора параметров $D^* = \{0, 7899; -8, 3811; 47, 0691; -14, 3700\}$ с начальными шагами $h = 10^{-2}; h_t = 1/28800 = \tau$.

Коэффициенты $D_0^*, D_1^*, D_2^*, D_3^*$ получены методом наименьших квадратов с использованием графической зависимости $D(w)$, приведенной в работе [1], после преобразования ее в безразмерную форму (рис. 2, a). На рис. 2, б изображены последовательно сверху вниз начальное распределение влаги, за которое взяты нормированные значения верхней кривой на рис. 1, б, и вычисленные распределения влаги после первого, шестого, тринадцатого и двадцатого дней ($w(x, t_1), w(x, t_2), w(x, t_3), w(x, t_4)$). В дальнейшем в нашей модельной задаче именно эти распределения будем считать «экспериментальными» данными.

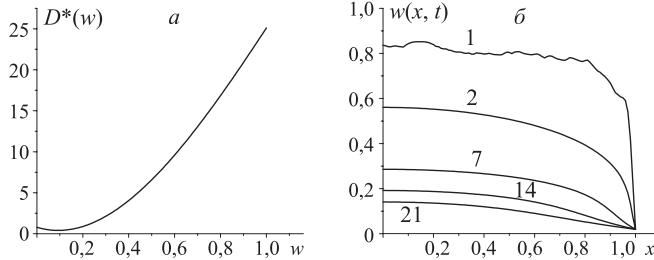


Рис. 2. Полином $D^*(w)$ [1] в безразмерной форме как функция от безразмерной концентрации влажности w (а). Полученные модельные экспериментальные данные (кривые 2, 7, 14, 21) (б) из начального условия $w_0(x)$ (кривая 1) после решения задачи (1), (2) с коэффициентом переноса $D^*(w)$

Теперь рассмотрим, насколько влияют на точность решения задачи (1), (2) внутренние итерации на каждом временном слое. Для этого решим эту задачу до момента времени $t = 1$ один раз с итерациями (количество итераций 5), другой раз без итераций и найдем максимальную разность отклонения и максимальную относительную разность отклонения. При этом получим

$$\max_{0 < x < 1} |w(x, 1) - w^{(5)}(x, 1)| = 1,1050 \cdot 10^{-5} \text{ при } x = 0;$$

$$\max_{0 < x < 1} |w(x, 1) - w^{(5)}(x, 1)|/w(x, 1) = 6,0356 \cdot 10^{-5} \text{ при } x = 0.$$

На последних соседних итерациях максимальные отклонения следующие:

$$\max_{0 < x < 1} |w^{(5)}(x, 1) - w^{(4)}(x, 1)| = 2,97 \cdot 10^{-9} \text{ при } x = 0,87;$$

$$\max_{0 < x < 1} |w^{(5)}(x, 1) - w^{(4)}(x, 1)|/w^{(5)}(x, 1) = 2,7169 \cdot 10^{-8} \text{ при } x = 0,87.$$

Как видно, в требуемых пределах точности расчетов можно обходиться без внутренних итераций для рассматриваемых шагов h , h_t .

Величины максимальных разностей отклонений и максимальных относительных отклонений на сгущающихся сетках следующие:

$$\max_{0 < x < 1} |w_h^{h_t}(x, 1) - w_{h/2}^{h_t}(x, 1)| = 6,4509 \cdot 10^{-5} \text{ при } x = 0,33;$$

$$\max_{0 < x < 1} |w_h^{h_t}(x, 1) - w_{h/2}^{h_t}(x, 1)|/w_h^{h_t}(x, 1) = 5,0877 \cdot 10^{-4} \text{ при } x = 0,33;$$

$$\max_{0 < x < 1} |w_{h/2}^{h_t}(x, 1) - w_{h/4}^{h_t}(x, 1)| = 1,8709 \cdot 10^{-5} \text{ при } x = 0,33;$$

$$\max_{0 < x < 1} |w_{h/2}^{h_t}(x, 1) - w_{h/4}^{h_t}(x, 1)|/w_{h/2}^{h_t}(x, 1) = 1,4746 \cdot 10^{-4} \text{ при } x = 0,33;$$

$$\begin{aligned} \max_{0 < x < 1} |w_h^{h_t}(x, 1) - w_h^{h_t/2}(x, 1)| &= 2,6084 \cdot 10^{-6} \text{ при } x = 0; \\ \max_{0 < x < 1} |w_h^{h_t}(x, 1) - w_h^{h_t/2}(x, 1)| / w_h^{h_t}(x, 1) &= 1,8526 \cdot 10^{-5} \text{ при } x = 0; \\ \max_{0 < x < 1} |w_{h/2}^{h_t}(x, 1) - w_{h/2}^{h_t/2}(x, 1)| &= 2,5105 \cdot 10^{-6} \text{ при } x = 0; \\ \max_{0 < x < 1} |w_{h/2}^{h_t}(x, 1) - w_{h/2}^{h_t/2}(x, 1)| / w_{h/2}^{h_t}(x, 1) &= 1,7823 \cdot 10^{-5} \text{ при } x = 0. \end{aligned}$$

Как видно, при исходных начальных шагах на сгущающихся сетках имеется сходимость.

Для подтверждения точности аппроксимации вычислялись коэффициенты Рунге для шагов h, h_t по формуле

$$K_h = \frac{w_h - w_{h/2}}{w_{h/2} - w_{h/4}}.$$

В табл. 1 приведены зависимости $K_{h_t}(t)$ в точке $x = 0,5$ и $K_h(x)$ в момент времени $t = 1$.

Таблица 1

t	K_{h_t} при $x = 0,5$	x	K_h при $t = 1$
0,00003	1,84846	0,00	3,44298
0,04969	1,99376	0,05	3,44354
0,10003	1,99487	0,10	3,44418
0,14969	1,99545	0,15	3,44491
0,19969	1,99579	0,20	3,44572
0,24969	1,99600	0,25	3,44657
0,29969	1,99613	0,30	3,44745
0,34969	1,99620	0,35	3,44832
0,39969	1,99622	0,40	3,44911
0,45038	1,99620	0,45	3,44975
0,50038	1,99616	0,50	3,45014
0,55038	1,99607	0,55	3,45021
0,56566	1,99604	0,60	3,44989
0,65108	1,99583	0,65	3,44919
0,70108	1,99567	0,70	3,44820
0,75108	1,99549	0,75	3,44705
0,80108	1,99530	0,80	3,44586
0,85108	1,99510	0,85	3,44475
0,90108	1,99490	0,90	3,44376
0,95108	1,99471	0,95	3,44291
0,99969	1,99452	0,99	3,44233

Из этих результатов можно сделать вывод, что все расчеты задачи (1), (2) с точностью $\simeq 10^{-5}$ можно проводить с шагами $h = 10^{-2}$, $h_t = 1/28800$ без внутренних итераций на каждом временном слое.

В табл. 2 приведены результаты минимизации функционала $S(D_0, D_1, D_2, D_3)$ с начальным приближением $D = 1, 1D^*$. В первой колонке стоит номер итерации, во второй колонке — значение функционала, в остальных колонках — значение производных функционала по параметрам и значения самого параметра ($\partial S / \partial D_i$, D_i , $i = 0, 1, 2, 3$). Как видно, всего за 5 итераций функционал с достаточной точностью достигает своего минимального значения. Признаком этого являются значения функционала и его производных по параметрам, которые стремятся к нулю. Значения D_0, D_1, D_2, D_3 стремятся к значениям $D_0^*, D_1^*, D_2^*, D_3^*$.

Таблица 2

it	S	$\partial S / \partial D_0$	$\partial S / \partial D_1$	$\partial S / \partial D_2$	$\partial S / \partial D_3$
0	$5,1537 \cdot 10^{-2}$	$-0,9630 \cdot 10^0$ $D_0 = 0,8689$	$-0,1389 \cdot 10^0$ $D_1 = -9,2192$	$-3,2724 \cdot 10^{-2}$ $D_2 = 51,7760$	$-1,0974 \cdot 10^{-2}$ $D_3 = -15,8070$
1	$2,6289 \cdot 10^{-3}$	$0,1705 \cdot 10^0$ $D_0 = 0,8355$	$3,0707 \cdot 10^{-2}$ $D_1 = -9,2166$	$8,3579 \cdot 10^{-3}$ $D_2 = 50,3871$	$3,0748 \cdot 10^{-3}$ $D_3 = -19,3146$
2	$9,8587 \cdot 10^{-6}$	$6,5585 \cdot 10^{-3}$ $D_0 = 0,7962$	$1,2870 \cdot 10^{-3}$ $D_1 = -8,5276$	$3,8578 \cdot 10^{-4}$ $D_2 = 47,8539$	$1,5732 \cdot 10^{-4}$ $D_3 = -15,4832$
3	$1,4155 \cdot 10^{-9}$	$2,6663 \cdot 10^{-5}$ $D_0 = 0,7900$	$6,2806 \cdot 10^{-6}$ $D_1 = -8,3833$	$2,4167 \cdot 10^{-6}$ $D_2 = 47,0821$	$1,2140 \cdot 10^{-6}$ $D_3 = -14,3886$
4	$1,9162 \cdot 10^{-14}$	$6,2925 \cdot 10^{-9}$ $D_0 = 0,7899$	$1,4465 \cdot 10^{-9}$ $D_1 = -8,3811$	$5,3074 \cdot 10^{-10}$ $D_2 = 47,0692$	$2,4475 \cdot 10^{-10}$ $D_3 = -14,3701$
5	$1,8831 \cdot 10^{-14}$	$-2,0290 \cdot 10^{-14}$ $D_0 = 0,7899$	$-1,0678 \cdot 10^{-15}$ $D_1 = -8,3811$	$1,1331 \cdot 10^{-15}$ $D_2 = 47,0692$	$9,5865 \cdot 10^{-16}$ $D_3 = -14,3701$
	$2,6408 \cdot 10^{-29}$	$D_0^* = 0,7899$	$D_1^* = -8,3811$	$D_2^* = 47,0691$	$D_3^* = -14,3700$

4. ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ

Исследование влияния параметров модели на точность воспроизведения профилей концентрации влаги по их экспериментальным данным проводим в двух направлениях.

1. Функцию $D(w)$ ищем, как и в работе [1], в виде полинома третьей степени $D(w) = D_0 + D_1w + D_2w^2 + D_3w^3$. При этом минимизацию функционала (3) проводим для различных M , т. е. различных по времени наборов вычисленных профилей концентрации влаги, имитирующих экспериментальные данные.

2. При фиксированном максимальном M минимизируем функционал (3), представляя $D(w)$ в виде полиномов различного вида и степени.

В табл. 3 приведены результаты пяти вариантов численных экспериментов, проведенных по пункту 1. Первая колонка содержит номера дней, в которые использовались «экспериментальные» данные для минимизации функ-

Таблица 3

Дни	x	t	$\Delta(w)$	$\delta(w)$	S	$\partial S / \partial D_i$
2	0,99	2	$5,2850 \cdot 10^{-9}$	$7,3711 \cdot 10^{-8}$	$5,9594 \cdot 10^{-17}$	$-8,2275 \cdot 10^{-15}$
	0,92	7	$6,3884 \cdot 10^{-9}$	$7,6336 \cdot 10^{-8}$	$\Delta(D) = 1,5051 \cdot 10^{-6}$	$-1,0191 \cdot 10^{-15}$
	0,81	14	$5,4405 \cdot 10^{-9}$	$6,6862 \cdot 10^{-8}$	$\delta(D) = 8,3417 \cdot 10^{-8}$	$-1,9111 \cdot 10^{-15}$
	0,70	21	$4,3358 \cdot 10^{-9}$	$5,8977 \cdot 10^{-8}$	$S_{2-7-14-21} = 1,6059 \cdot 10^{-14}$	$1,0803 \cdot 10^{-16}$
-	0,00	2	$6,3402 \cdot 10^{-4}$	$1,1298 \cdot 10^{-3}$	$1,0612 \cdot 10^{-11}$	$-5,5654 \cdot 10^{-11}$
	0,00	7	$1,6824 \cdot 10^{-4}$	$5,8828 \cdot 10^{-4}$	$\Delta(D) = 0,1498 \cdot 10^0$	$-7,7325 \cdot 10^{-12}$
	0,00	14	$4,2768 \cdot 10^{-5}$	$2,2291 \cdot 10^{-4}$	$\delta(D) = 8,3027 \cdot 10^{-3}$	$-1,4608 \cdot 10^{-12}$
	0,89	21	$5,7072 \cdot 10^{-7}$	$1,5524 \cdot 10^{-5}$	$S_{2-7-14-21} = 2,3421 \cdot 10^{-5}$	$-3,5826 \cdot 10^{-13}$
2	0,99	2	$1,3642 \cdot 10^{-8}$	$1,9027 \cdot 10^{-7}$	$1,8198 \cdot 10^{-14}$	$-1,2696 \cdot 10^{-13}$
	0,93	7	$2,0139 \cdot 10^{-8}$	$2,7252 \cdot 10^{-7}$	$\Delta(D) = 1,3564 \cdot 10^{-5}$	$-3,9060 \cdot 10^{-15}$
	0,83	14	$1,9434 \cdot 10^{-8}$	$2,7445 \cdot 10^{-7}$	$\delta(D) = 7,5175 \cdot 10^{-7}$	$-1,8959 \cdot 10^{-15}$
	0,73	21	$1,5291 \cdot 10^{-8}$	$2,3221 \cdot 10^{-7}$	$S_{2-7-14-21} = 2,8235 \cdot 10^{-14}$	$-2,4672 \cdot 10^{-15}$
2	0,99	2	$1,4867 \cdot 10^{-8}$	$2,0736 \cdot 10^{-7}$	$1,8831 \cdot 10^{-14}$	$2,0290 \cdot 10^{-14}$
	0,93	7	$1,9393 \cdot 10^{-8}$	$2,6244 \cdot 10^{-7}$	$\Delta(D) = 9,5773 \cdot 10^{-6}$	$1,0678 \cdot 10^{-15}$
	0,82	14	$1,7680 \cdot 10^{-8}$	$2,3790 \cdot 10^{-7}$	$\delta(D) = 5,3081 \cdot 10^{-7}$	$-1,1331 \cdot 10^{-15}$
	0,72	21	$1,3747 \cdot 10^{-8}$	$2,0286 \cdot 10^{-7}$	$S_{2-7-14-21} = 1,8831 \cdot 10^{-14}$	$-9,5865 \cdot 10^{-16}$
2	0,99	2	$1,4546 \cdot 10^{-8}$	$2,0288 \cdot 10^{-7}$	$2,7526 \cdot 10^{-14}$	$-1,5955 \cdot 10^{-15}$
	0,93	7	$1,9428 \cdot 10^{-8}$	$2,6291 \cdot 10^{-7}$	$\Delta(D) = 1,0663 \cdot 10^{-5}$	$3,2708 \cdot 10^{-15}$
	0,82	14	$1,8003 \cdot 10^{-8}$	$2,4226 \cdot 10^{-7}$	$\delta(D) = 5,9097 \cdot 10^{-7}$	$-1,0422 \cdot 10^{-15}$
	0,76	18	$1,5823 \cdot 10^{-8}$	$2,2229 \cdot 10^{-7}$	$S_{2-7-14-21} = 2,0150 \cdot 10^{-14}$	$-9,3461 \cdot 10^{-16}$
21	0,72	21	$1,4071 \cdot 10^{-8}$	$2,0764 \cdot 10^{-7}$		

ционала. Черта означает, что данный день в минимизации функционала не участвует. Вторая колонка содержит координаты точек x максимальных отклонений профилей влажности. Третья колонка — номер дня, который соответствует этой координате. Четвертая и пятая колонки содержат значения максимальных отклонений, которые определяются по формулам

$$\Delta(w) = \max_{0 \leq x \leq 1} |w(x, t) - w_e(x, t)|; \quad \delta(w) = \max_{0 \leq x \leq 1} |w(x, t) - w_e(x, t)| / w(x, t),$$

где $w(x, t)$ — вычисленное, а $w_e(x, t)$ — «экспериментальное» значение концентрации влаги. Шестая колонка содержит минимальное значение функционала S , вычисленное с использованием выборки «экспериментальных» данных по дням, указанным в первой колонке. Приведено также значение функционала $S_{2-7-14-21}$, вычисленного с использованием найденных коэффициентов D и полной выборки «экспериментальных» данных, и значения максимальных отклонений коэффициента переноса влаги

$$\Delta(D) = \max_{0 \leq w \leq 0,83} |D(w) - D^*(w)|; \quad \delta(D) = \max_{0 \leq w \leq 0,83} |D(w) - D^*(w)| / D^*(w).$$

В последней колонке расположены значения производных функционала S по параметрам D_i , $i = 0, 1, 2, 3$. Значения коэффициентов D_0, D_1, D_2, D_3 во всех вариантах, кроме второго, с нужной точностью совпадают с $D_0^*, D_1^*, D_2^*, D_3^*$.

Из анализа табл. 3 следует довольно слабая зависимость результатов от количества дней M при минимизации.

В табл. 4 приведены результаты численных экспериментов, проведенные по пункту 2. В первой колонке таблицы указаны коэффициенты полинома,

Таблица 4

D_i	x	t	$\Delta(w)$	$\delta(w)$	S	$\partial S / \partial D_i$
D_0	0,97	2	$1,2244 \cdot 10^{-2}$	$7,3254 \cdot 10^{-2}$	$1,0940 \cdot 10^{-2}$	$6,1062 \cdot 10^{-12}$
0	0,00	7	$1,0104 \cdot 10^{-2}$	$3,4144 \cdot 10^{-2}$	$D_0 = 0,4629$	0
0	0,87	14	$7,8927 \cdot 10^{-3}$	$0,1213 \cdot 10^0$	$D_3 = 49,2687$	0
D_3	0,00	21	$6,2808 \cdot 10^{-3}$	$4,6692 \cdot 10^{-2}$		$1,1475 \cdot 10^{-11}$
0	0,99	2	$3,6278 \cdot 10^{-2}$	$0,3360 \cdot 10^0$	$7,0657 \cdot 10^{-2}$	0
D_1	0,95	7	$3,7093 \cdot 10^{-2}$	$0,3979 \cdot 10^0$	$D_1 = 4,6357$	$1,6237 \cdot 10^{-11}$
0	0,88	14	$3,1690 \cdot 10^{-2}$	$0,3704 \cdot 10^0$	$D_3 = 30,1744$	0
D_3	0,82	21	$2,7257 \cdot 10^{-2}$	$0,3575 \cdot 10^0$		$-5,8981 \cdot 10^{-12}$
D_0	0,97	2	$2,5768 \cdot 10^{-3}$	$1,4574 \cdot 10^{-2}$	$5,7001 \cdot 10^{-4}$	$-2,0964 \cdot 10^{-11}$
D_1	0,00	7	$2,1124 \cdot 10^{-3}$	$7,3365 \cdot 10^{-3}$	$D_0 = 0,7099$	$-1,7304 \cdot 10^{-12}$
D_2	0,85	143	$2,1192 \cdot 10^{-3}$	$3,2103 \cdot 10^{-2}$	$D_1 = -6,4076$	$6,3410 \cdot 10^{-12}$
0	0,76	21	$1,6647 \cdot 10^{-3}$	$2,6937 \cdot 10^{-2}$	$D_2 = 36,2373$	0
D_0	0,96	2	$9,3586 \cdot 10^{-3}$	$4,6306 \cdot 10^{-2}$	$8,8851 \cdot 10^{-3}$	$-8,2833 \cdot 10^{-12}$
—	0,94	7	$1,0687 \cdot 10^{-2}$	$0,1416 \cdot 10^0$	$D_0 = 0,4204$	0
D_2	0,86	14	$1,0335 \cdot 10^{-2}$	$0,1459 \cdot 10^0$	$D_2 = 4,1804$	$2,6888 \cdot 10^{-13}$
D_3	0,78	21	$8,1273 \cdot 10^{-3}$	$0,1260 \cdot 10^0$	$D_3 = 40,1513$	$-1,0148 \cdot 10^{-12}$
D_0	0,99	2	$1,4867 \cdot 10^{-8}$	$2,0736 \cdot 10^{-7}$	$1,8831 \cdot 10^{-14}$	$2,0290 \cdot 10^{-14}$
D_1	0,93	7	$1,9393 \cdot 10^{-8}$	$2,6244 \cdot 10^{-7}$	$D_0 = 0,7899$	$1,0678 \cdot 10^{-15}$
D_2	0,82	14	$1,7680 \cdot 10^{-8}$	$2,3790 \cdot 10^{-7}$	$D_1 = -8,3811$	$-1,1331 \cdot 10^{-15}$
D_3	0,72	21	$1,3747 \cdot 10^{-8}$	$2,0286 \cdot 10^{-7}$	$D_2 = 47,0692$	$-9,5865 \cdot 10^{-16}$
					$D_3 = -14,3701$	
D_0	0,99	2	$4,4353 \cdot 10^{-8}$	$6,1861 \cdot 10^{-7}$	$5,1428 \cdot 10^{-14}$	$-3,6063 \cdot 10^{-15}$
D_1	0,95	7	$2,2982 \cdot 10^{-8}$	$4,0952 \cdot 10^{-7}$	$D_0 = 0,7899$	$5,5466 \cdot 10^{-16}$
D_2	0,86	14	$2,5387 \cdot 10^{-8}$	$4,1961 \cdot 10^{-7}$	$D_1 = -8,3811$	$-1,2973 \cdot 10^{-16}$
D_3	0,77	21	$2,4213 \cdot 10^{-8}$	$4,1572 \cdot 10^{-7}$	$D_2 = 47,0695$	$8,5211 \cdot 10^{-17}$
D_4					$D_3 = -14,3711$	$-2,5946 \cdot 10^{-16}$
					$D_4 = 9,6067 \cdot 10^{-4}$	

участвующие в минимизации функционала S (3). Вторая–пятая колонки эквивалентны содержанию соответствующих колонок табл. 3. В шестой колонке

приведены вычисленные значения минимума функционала S и соответствующие значения коэффициентов полинома $D(w)$. В седьмой колонке даны вычисленные значения производных функционала S по коэффициентам полинома $D(w)$ в минимуме функционала.

Анализ табл. 4 позволяет сделать вывод, что точность воспроизведения профилей влажности сильно зависит от того, в каком виде ищется функция $D(w)$. Однако только результаты расчетов второго варианта не укладываются в интервал погрешностей 10–15 %, допустимых в строительных расчетах.

Из последнего варианта численного эксперимента видно, что, несмотря на добавления лишнего коэффициента D_4 , коэффициенты D_0, D_1, D_2, D_3 стремятся к $D_0^*, D_1^*, D_2^*, D_3^*$, а $D_4 \rightarrow 0$, т. е. имеется сходимость к точному решению. Это служит подтверждением правильности выбора в работе [1] функции $D(w)$ в виде кубической параболы.

На рис. 3 приведены $D(w)$, которые соответствуют разным вариантам экспериментов в табл. 4. Точками обозначена кривая $D^*(w)$.

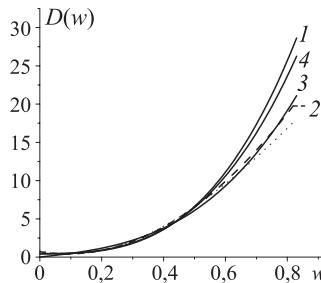


Рис. 3. Вид полиномов $D(w)$ при разных наборах их коэффициентов: 1 — D_0, D_3 ; 2 — D_1, D_2 ; 3 — D_0, D_1, D_2 ; 4 — D_0, D_2, D_3

Таблица 5

l	$\Delta D(w)$	$\delta D(w)$	$\Delta^2 D(w)$	$\delta^2 D(w)$
1	10,5912	0,5870	8,0409	0,1461
2	3,0581	0,1695	0,4876	0,0089
3	2,3126	0,1282	0,3774	0,0069
4	8,2154	0,4553	4,6437	0,0844

В табл. 5 приведены значения абсолютных и относительных отклонений $\Delta D(w), \delta D(w)$, а также значения среднеквадратичных отклонений в абсолютном ($\Delta^2 D(w)$) и относительном ($\delta^2 D(w)$) виде

$$\Delta^2 D(w) = \int_0^{0,83} [D^*(w) - D(w)]^2 dw, \quad \delta^2 D(w) = \Delta^2 D(w) / \int_0^{0,83} D^*(w)^2 dw$$

для первых четырех вариантов расчетов из табл. 4. Здесь приемлемым по точности можно считать только третий вариант, где $D(w)$ описывается квадратичной параболой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе методов решения нелинейного уравнения диффузии и минимизации функционалов с использованием результатов измерений профиля концентрации влаги в нескольких моментах времени разработан алгоритм нахождения концентрации влаги и коэффициента переноса в виде полинома от концентрации влаги: $D(w) = D_0 + D_1w + D_2w^2 + \dots + D_Nw^N$.

Результаты численных экспериментов на модельной задаче позволяют сделать следующие выводы.

1. Точность воспроизведения профилей влажности слабо зависит от количества данных по времени, используемых в минимизации функционала, из чего можно сделать практический вывод о возможности уменьшения выборки по времени экспериментальных данных.

2. Точность воспроизведения профилей влажности зависит от того, сколько и какие коэффициенты D_i в полиноме $D(w)$ используются. Лучшие результаты получаются при использовании всех коэффициентов кубической параболы [1]. Однако анализ результатов в табл. 5 указывает на возможность уменьшения параметров минимизации функционала $S(D)$ (3) в соответствии с требованиями точности строительных расчетов 10–15 %.

Эти выводы представляют интерес для построения пакетов программ для моделирования динамики распространения влаги в строительных материалах и повышения их эффективности за счет уменьшения экспериментальных данных и степени полинома.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 03-01-00657 и № 02-01-00606.

ЛИТЕРАТУРА

1. Pleinert H., Sadouki H., Wittman F. H. Determination of moisture distribution in porous building materials by neutron transmission analysis // Materials and Structures. 1998. V. 31. P. 218–224.
2. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.
3. Васильев Ф. П. Лекции по методам решения экстремальных задач. М.: Изд-во МГУ, 1974. С. 66–69.
4. Турчак Л. М. Основы численных методов. М.: Наука, 1987. С. 176–181.

Получено 14 марта 2005 г.

Корректор *E. B. Сабаева*

Подписано в печать 25.05.2005.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 0,9. Уч.-изд. л. 1,1. Тираж 315 экз. Заказ № 54889.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@pds.jinr.ru
www.jinr.ru/publish/