



A CUSTOMIZABLE COMPUTATIONAL STRATEGY FOR EVALUATION OF ENGINEERING PROBLEMS USING MULTIVARIABLE INTERPOLATION TECHNIQUES

Bruna L. B. Santos

Catarina N. A. Fernandes

Ricardo A. Fernandes

William W. M. Lira

bruna_layz@hotmail.com

catarina@lccv.ufal.br

ricardoaf@lccv.ufal.br

william@lccv.ufal.br

Laboratório de Computação Científica e Visualização (LCCV), Centro de Tecnologia (CTEC),
Universidade Federal de Alagoas (UFAL)

Abstract. *This work presents the development of a configurable computational strategy for evaluation of engineering problems using multivariable interpolation techniques. Technological advances intensify the search for numerical methods to solve increasingly complex problems. Depending on the complexity involved, numerical solutions can demand high computational costs, requiring much time to execute robust analyzes. The adopted strategy is presented as an alternative numerical technique to quickly estimate the solution of these problems. Polynomial response surfaces are generated from certain known configurations, and are evaluated to provide instant behavior approximations of other configurations. The methodology adopted is divided in four steps: a) data generation relating variables combinations and their respective responses, which are obtained through experimental or numerical tests; b) response surface generation applying multivariable interpolation techniques to the data; c) development of a computational tool that is configured according to the problem data and d) evaluation of configurations using the computational tool developed in the previous step. Thus the strategy allows the user to configure the computational environment with a specific problem, allowing rapid estimates for situations not considered during the generation of the original data. to validate and illustrate the proposed strategy, case studies of engineering problems are presented.*

Keywords: *Response surface; Customizable computational tool, Multivariable interpolation.*

1 INTRODUÇÃO

Com o avanço tecnológico, existe uma demanda crescente para utilização de simulações numéricas na solução de problemas em diversas áreas do conhecimento científico. Segundo Pegden *et al.* (1990), a simulação é um processo de projetar um modelo computacional de um sistema real e conduzir experimentos com o propósito de entender seu comportamento e/ou avaliar estratégias para sua operação. O aumento no poder de processamento e capacidade de armazenamento das máquinas atuais faz com que as simulações numéricas sejam utilizadas para resolver problemas com alto grau de complexidade. E, a depender desse grau de complexidade, dificuldades podem ser encontradas durante as simulações, como, por exemplo, a demanda de um tempo maior para se executar modelagens mais robustas.

Existem algumas estratégias que buscam contornar essas questões. Uma delas baseia-se no uso de superfícies de respostas (RSM), onde, a partir de um banco de dados, obtido através de experimentos numéricos ou físicos, são geradas superfícies que interpoem ou ajustem os resultados por meio de funções (Lenth, 2009) e, posteriormente, utiliza-se dessa função para avaliar rapidamente resultados de interesse para novas configurações do problema. Com isso, consegue-se reduzir o tempo e os custos computacionais para obtenção desses resultados, fornecendo estimativas precisas do comportamento do experimento para tais configurações (por exemplo, Araújo *et al.* (2011)).

O presente trabalho apresenta o desenvolvimento de uma estratégia computacional configurável para avaliação de problemas de engenharia utilizando a técnica de interpolação multivariável. A estratégia adotada é apresentada como uma técnica numérica alternativa para estimar rapidamente a solução desses problemas. As superfícies de respostas são geradas a partir de determinadas configurações conhecidas e são avaliadas para fornecer instantaneamente aproximações do comportamento de outras configurações.

2 METODOLOGIA

A metodologia adotada neste trabalho é dividida em três módulos, conforme pode ser visto na Fig. 1. Para o funcionamento adequado do ambiente, os módulos devem funcionar integrados, pois eles seguem uma sequência que os tornam dependentes entre si. Em primeiro lugar, deve-se carregar os dados do problema para que seja possível a geração das superfícies e, conseqüentemente, a construção do ambiente com as informações do problema, incluindo as superfícies geradas.

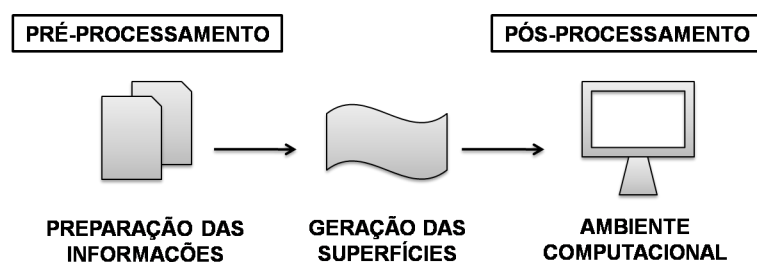


Figura 1: Metodologia utilizada no desenvolvimento do trabalho.

2.1 Preparação das informações

Este módulo trata das informações específicas do problema a ser estudado, necessárias para a configuração do ambiente computacional. Nessa etapa de pré-processamento, utilizam-se arquivos de texto para comunicação entre módulos, pela facilidade em configurar a estratégia para diferentes aplicações. Dessa forma, são idealizados três tipos de arquivos: de dados, de superfícies e de configurações.

O primeiro arquivo contém todas as informações numéricas do problema (configurações das variáveis, formato do polinômio, número de modelos e o banco de dados) e a partir dele gera-se automaticamente as superfícies de respostas e os outros dois arquivos. É importante ressaltar que o primeiro arquivo deve ser criado pelo usuário seguindo o formato estabelecido para que o módulo computacional possa interpretá-lo. No segundo, encontram-se as superfícies geradas (os coeficientes do polinômio) e o formato do polinômio utilizado para gerar essas superfícies. Já o terceiro, abrange as informações literais do problema (nome de variável, nome de resultado, nome do problema) e é a partir dele que pode-se configurar a estratégia para o problema estudado.

2.2 Geração das superfícies

Para geração das superfícies de respostas, são incorporadas dois métodos: a geração por interpolação numérica através do Método de Vandermonde (Horn & Johnson, 2012) e a geração por ajuste através do Método dos Mínimos Quadrados (Björck, 1996). A escolha depende do número de pontos e de coeficientes especificados dentro do arquivo de dados. Caso o número de pontos seja igual ao número de coeficientes, realiza-se uma interpolação. Caso o número de pontos seja maior que o número de coeficientes, realiza-se um ajuste. Caso o número de pontos seja menor que o de coeficientes, não é possível realizar nenhum dos métodos e o sistema indicará um erro.

Considera-se que existem n variáveis que influenciam diretamente nos resultados de interesse e que cada combinação de valores dessas variáveis (configuração de projeto pré estabelecida $\underline{X}$) está associada a um valor solução R ,

$$\underline{X} = [x_1, x_2, \dots, x_n] \rightarrow R. \quad (1)$$

É possível obter uma superfície que ajuste ou interpole, em um espaço com $(n + 1)$ dimensões, os valores representativos de cada configuração pré-estabelecida, caracterizada como uma superfície de resposta (Press *et. al.*, 1992).

Geração das superfícies por Mínimos Quadrados

Seja $\phi(\underline{X}, \underline{\alpha})$ uma função aproximadora de R para uma dada configuração $\underline{X}$, representada matematicamente por:

$$\phi(\underline{X}, \underline{\alpha}) = \sum_{i=1}^m \alpha_i g_i(\underline{X}), \quad (2)$$

onde cada α_i é um coeficiente a ser determinado e cada g_i representa uma função auxiliar, usada para definir o formato da função aproximadora. O Método dos Mínimos Quadrados é

uma técnica de otimização matemática que procura determinar essa função ϕ , minimizando a soma dos quadrados dos desvios,

$$f = \sum_{k=1}^N [R_k - \phi(\underline{X}_k, \underline{\alpha})]^2, \quad (3)$$

onde N representa o número de configurações pré-estabelecidas. Pelo calculo diferencial, encontrar os pontos de mínimo de f corresponde a obtenção de seus pontos críticos, ou seja, os valores $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ tais que as derivadas parciais de f em relação a cada coeficiente seja nula. Calculando as derivadas parciais e impondo essa condição, tem-se que:

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha_i} = 0 \Rightarrow \sum_{k=1}^N [R_k - \phi(\underline{X}_k, \underline{\alpha})] g_i(\underline{X}_k) = 0. \quad (4)$$

Essas equações fornecem um sistema linear com m equações e m incógnitas, que pode ser escrito na forma,

$$\underline{M} \underline{\alpha} = \underline{v}, \quad (5)$$

sendo a matriz $\underline{M}$ e o vetor $\underline{v}$ determinados por:

$$\underline{M} = \underline{A}^T \underline{A}, \quad (6)$$

$$\underline{v} = \underline{A}^T \underline{R}, \quad (7)$$

onde cada termo da matriz $\underline{A}$ é determinado por:

$$A_{ij} = g_j(\underline{X}_i). \quad (8)$$

A resolução do sistema linear mostrado na Eq. (5) fornece os valores das incógnitas, ou seja, de cada coeficiente α_i . Dessa forma, determina-se a função que melhor ajusta os dados fornecidos.

Geração das superfícies por Vandermonde

A interpolação é um caso particular do ajuste numérico para quando o número de coeficientes é igual ao número de configurações fornecidas ($m = N$). Neste caso, a função interpolante $\phi(\underline{X}, \underline{\alpha})$ deve, obrigatoriamente, assumir cada valor R_k quando avaliada na configuração $\underline{X}_k$. A função interpolante é definida de forma semelhante à Eq. (2). Dessa forma, obtém-se um sistema linear com N equações e N incógnitas na forma:

$$\underline{A} \underline{\alpha} = \underline{R}, \quad (9)$$

onde, para este caso, $\underline{A}$ representa a matriz de Vandermonde de ordem N , sendo definida de forma semelhante à Eq. (8).

2.3 Ambiente computacional

Esse módulo de pós-processamento é desenvolvido com as informações contidas nos arquivos apresentados na seção 2.1 e é utilizado para consulta às superfícies geradas. Através do ambiente computacional pode-se definir a nova configuração a ser estudada e visualizar as estimativas do comportamento dessa configuração por meio de gráficos e tabelas. Além disso, é possível visualizar a variação dos resultados de acordo com as variáveis do problema.

3 ESTUDO DE CASO

Nesta seção é apresentado um estudo de caso para visualização e entendimento do funcionamento do software desenvolvido. O problema refere-se ao fluxo de gases em meios porosos e busca estudar a solução para a equação de difusividade de um gás específico. Com os dados do problema, constrói-se o arquivo de dados, a partir desse arquivo a sistemática constrói automaticamente o arquivo de superfícies e um arquivo genérico de configurações. Depois de criado, edita-se o arquivo de configurações com as informações do problema em questão. Em seguida, o sistema é automaticamente configurado a partir das informações existentes nos três arquivos, conforme apresentado na subseção 2.1.

Neste problema, o fluido de interesse é um gás ideal, sujeito a baixas pressões, e com regime permanente, ou seja, não se considera alteração da massa específica do gás com o tempo em nenhum ponto do meio poroso. A geometria do fluxo linear normalmente se encontra em experiências de laboratórios, onde são utilizadas pequenas amostras de testemunhos, porém pode-se também representar algumas situações práticas de campo (Rosa *et. al.*, 2006).

Pela solução da equação da difusividade de um gás sujeito às simplificações supracitadas, as propriedades do gás e do reservatório influenciam diretamente no valor da vazão:

$$q_0 = c \frac{kA}{\mu L} \frac{T_0}{T} \frac{p_1^2 - p_2^2}{2p_0}, \quad (10)$$

onde μ , T_0 e p_0 representam as respectivas propriedades do gás: viscosidade, temperatura e pressão; k , T , L , A , p_1 e p_2 representam as respectivas propriedades do reservatório: permeabilidade efetiva, temperatura, comprimento, área, pressão de entrada e pressão de saída.

Admitindo-se o valor da constante $c = 6,32810^{-9}$, as medidas de comprimento em pés [ft], de pressão em libra-força por polegada quadrada [PSIA], de temperatura em Fahrenheit [°F], viscosidade em centipoise [cP] e a permeabilidade efetiva do reservatório em milidarcy [md], obtém-se a vazão q_0 em condições padrão de pés cúbicos por dia [SCF/d].

Com o intuito de simplificar o problema, as propriedades do reservatório são fixadas, assumindo apenas um modelo discreto, e as variáveis representativas escolhidas do problema são referentes às propriedades do gás: temperatura (T_0), viscosidade (μ) e pressão, (p_0). Os valores usados, tanto para as propriedades do reservatório quanto para as do gás, foram estabelecidos utilizando como referência exemplos encontrados em Rosa *et. al.* (2006) (ver Tab. 1).

Tabela 1: Valores adotados para os parâmetros.

T	A	L	p_1	p_2	k	T_0	μ	p_0
°F	ft ²	ft	PSIA	PSIA	md	°F	cP	PSIA
150	1250	1250	4000	1750	150	50 a 100	0,01 a 0,05	14,7 a 17,7

Como a temperatura do gás é um termo polinomial na Eq. 10, o número de valores escolhido é baseado na ordem da potência que ele aparece na solução exata. Neste caso, são adotados apenas 2 valores de temperatura do gás para todas as configurações. Em relação aos valores de pressão e viscosidade, fez-se um estudo prévio considerando variações de 4 a 8 valores, todos dentro do intervalo mostrado Tabela 1 e igualmente espaçados. São adotados o

valor máximo, o valor mínimo e valores intermediários, que são obtidos dividindo o intervalo entre o máximo e o mínimo pelo número de pontos a ser utilizado. Como esperado, o erro cometido pela interpolação diminuiu com o aumento do número de pontos considerados para a montagem da superfície. Os erros observados para a superfície construída com 8 valores de pressão e 8 valores de viscosidade foram considerados suficientemente pequenos. Esses erros foram observados em pontos diferentes dos considerados na montagem da superfície.

Assim, gera-se o arquivo de dados com 128 configurações distintas, onde cada uma está associada a um resultado de vazão. É adotado um formato polinomial para a superfície de resposta, que terá 128 coeficientes. Como é utilizada a interpolação para construção da superfície, o polinômio considerado é o de maior grau possível para cada variável, ou seja, grau 1 para a temperatura e grau 7 para a pressão e para viscosidade.

As Figuras 2 e 3 ilustram a interface configurada para o problema de fluxo.

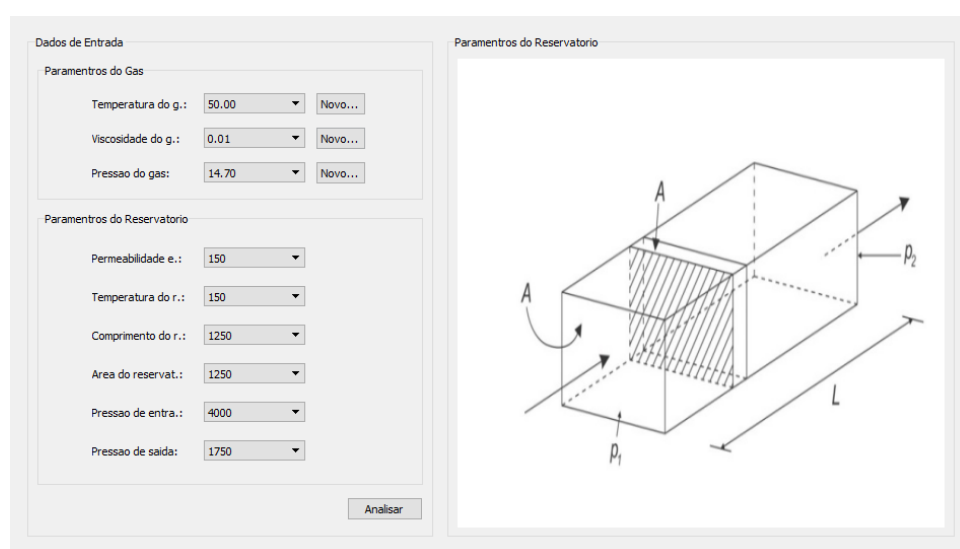


Figura 2: Interface configurada para o problema de fluxo linear em meios porosos.

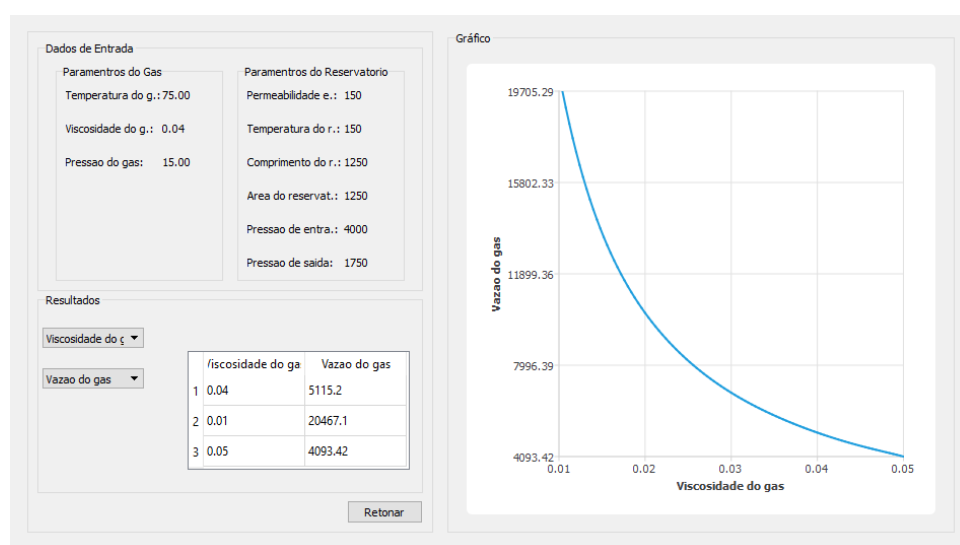


Figura 3: Avaliação de novas configurações problema de fluxo.

Para estudar a qualidade das estimativas fornecidas pela estratégia apresentada, foi avaliada uma configuração diferentes das consideradas para a montagem do banco de dados. O resultado analítico dessa configuração é obtido para comparação e análise do erro cometido pela estratégia. Atribue-se para a temperatura do gás 75 °F, para a viscosidade 0,04 md e para a pressão do gás 15 PSIA. Com esses dados, obtêm-se a vazão e faz-se a comparação do resultado do teste com a respectiva solução analítica, obtida através da equação da difusividade, onde o erro apresentado foi na ordem de 0,03%.

4 CONCLUSÃO

Este trabalho apresentou o desenvolvimento de uma estratégia computacional configurável para a avaliação de problemas de engenharia utilizando a técnica de superfície de resposta e permitindo a sua adaptação para quaisquer problemas, onde incorporou-se dois métodos específicos (ajuste e interpolação) para geração dessas superfícies. O ambiente conta com gráficos e tabelas para melhor visualização dos resultados das avaliações. É apresentado um exemplo para ilustrar as funcionalidades desenvolvidas.

Com os resultados obtidos, pode-se concluir que é possível alcançar bons resultados com a estratégia descrita, obtendo reduções significativas de erros conforme aumenta-se o grau do polinômio. Para o problema estudado, os erros foram pequenos, da ordem de grandeza de 0,03%, mas é importante salientar que existem outros parâmetros mantidos constantes na equação (parâmetros do reservatório) e que em trabalhos futuros, pode-se investigar suas influências na solução da equação da difusividade.

Assim, o desenvolvimento da estratégia computacional configurável foi satisfatório, tornando a ferramenta útil e confiável para agilizar a estimativa do comportamento de problemas nos quais são necessárias previsões imediatas. Futuramente, pretende-se aperfeiçoar o ambiente inserindo novas funcionalidades, como a avaliação dos erros cometidos pelas superfícies, e introduzindo outros formatos de função para as superfícies de resposta como a exponencial e a logarítmica.

5 REFERÊNCIAS

- Araújo, I. N., Araújo, C. N., Fernandes, R. A., Lira, W. W. M. **Uma estratégia alternativa para rápida estimativa de soluções de problemas de engenharia.** In *Anais do X Simpósio de Mecânica Computacional - SIMMEC*. Belo Horizonte, Minas Gerais.
- Björck, A., 1996. **Numerical methods for least squares problems.** Linköping. SIAM.
- Horn, R. A.; Johnson C. R., 2012. **Matrix Analysis.** Second Edition.
- Lenth, R. V., 2009. Response-Surface Methods in R, Using rsm. **Journal of Statistical Software.** 32(7). 1-17.
- Pegden, C.D., Shannon, R. E., & Sadowski R. P., 1990. **Introduction to simulation using SIMAN.** NY. McGraw-Hill.
- Press, W. H., Vetterling, W. T., Flannery, B. P., 1992. **Numerical Recipes in C.** Cambridge University Press.
- Rosa, A. J., de Souza Carvalho, R., & Xavier, J. A. D., 2006. **Engenharia de Reservatório de Petróleo.** Interciência.