

CORRELAÇÃO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DA ÁGUA UTILIZANDO REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS

Benedito Dias Baptista Filho

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN-CNEN/SP
Av. Prof. Lineu Prestes, 2242 Cidade Universitária
05508-000, São Paulo, SP, Brasil

RESUMO

Programas de análise termo-hidráulica requerem a rápida e precisa determinação de propriedades da água em qualquer estado que esta se encontre. Muitas vezes as propriedades são obtidas por interpolação em tabelas, em outros casos são utilizadas funções de aproximação considerando opções de cálculos mais rápidos, com perda de precisão, ou processamento mais lento. Limitação em faixas causa problemas dificilmente detectados pelo usuário. A necessidade de equações precisas e de rápida solução mereceu a criação de uma associação internacional para as propriedades da água, a IAPWS, que desenvolve formulações baseadas nas equações de energia livre de Gibbs e Helmholtz. Técnicas recentes baseadas em redes neurais artificiais (RNA) se apresentam como poderosas ferramentas de compactação de dados. Este trabalho apresenta os resultados iniciais de uma pesquisa que compara o desempenho de RNA treinadas pelo método de retro-propagação com a formulação IAPWS-IF97. As conclusões indicam ser promissor o uso de RNA.

Keywords: neural networks, water and steam properties.

I. INTRODUÇÃO

A análise termo-hidráulica utilizada para projeto, avaliação de desempenho, ou para análise de acidentes em reatores nucleares, é feita com o uso de códigos computacionais cada dia mais sofisticados e demandantes em termos de processamento computacional. A rápida e precisa determinação de propriedades termodinâmicas da água, no estado de saturação, nas condições de líquido sub-resfriado ou vapor super-aquecido, é fundamental para esses problemas. Imprecisão ou uso inadequado podem causar problemas dificilmente detectados pelo usuário.

As propriedades da água utilizadas nessas análises são, em muitos casos, calculadas por subrotinas de interpolação linear para dados tabulados. Tabelas armazenadas na memória do computador durante a execução dos programas, ocupam espaço e diminuem o desempenho dos programas. Em alguns trabalhos são utilizadas funções de aproximação. A importância, tanto no tabelamento quanto no equacionamento, de valores precisos de propriedades da água é tão grande que deu ensejo a várias conferências internacionais. Por esse motivo foi até criada uma organização internacional que lidera e coordena a maioria das atividades voltadas para as propriedades da água e vapor: a "IAPWS - The International Association for the Properties of Water and Steam." A IAPWS é uma associação internacional, sem fins

lucrativos voltada exclusivamente para prover formulações internacionalmente aceitas para as propriedades da água e vapor leve, água pesada e soluções aquosas selecionadas; estabelecer as necessidades de pesquisa e promover e coordenar pesquisas em vapor, água e sistemas aquosos importantes em ciclos térmicos; coleccionar e avaliar os dados resultantes dessas pesquisas, comunicando e promulgando as descobertas; e, promover um "fórum" internacional para troca de experiências, idéias e resultados da pesquisa em meios aquosos a alta temperatura. As Tabelas de Vapor da ASME e da JSME, além de outras, são baseadas nas formulações da IAPWS.

O trabalho apresenta os primeiros resultados de uma pesquisa para comparar o desempenho de uma RNA treinada pelo método de retro-propagação para reproduzir parte da formulação IAPWS-IF97 [1]. É apresentada a parte da formulação utilizada para comparação e é avaliado o desempenho de algumas RNA treinadas para reproduzir três propriedades termodinâmicas.

II. FORMULAÇÃO IAPWS-97

A formulação das propriedades termodinâmicas da água pela IAPWS-IF97, desenvolvida para uso geral e in-

dustrial, considera faixas em função da pressão e temperatura, definidas pelas regiões da Fig. 1.

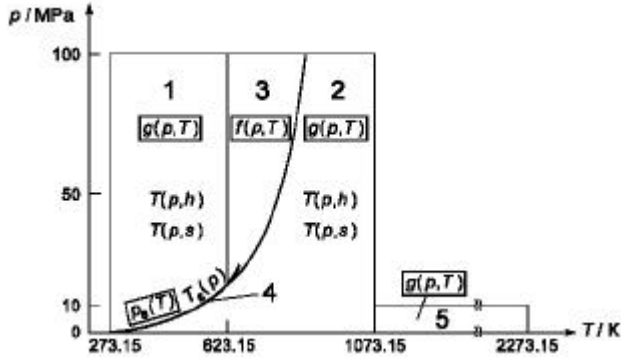


Figura 1. Divisão em Regiões (IAPWS-IF97).

As propriedades em cada uma dessas 5 regiões são obtidas pela combinação de derivadas das equações de energia livre de Gibbs e de Helmholtz, equacionadas na forma de polinômios de ordens elevadas. Em alguns casos são necessários processos iterativos relativamente demandantes, como por exemplo na região 3, onde as equações são função da temperatura e densidade. Esse problema pode não ser tão significativo nas formulações de uso industrial da IAPWS-IF97 no entanto, no caso da formulação científica, a IAPWS-95 [2] além da necessidade do processo iterativo em toda a extensão da formulação, as aproximações envolvem funções de ordens mais elevadas.

A equação de energia livre específica de Helmholtz, aplicada na região 3 é dada por:

$$\frac{f(\mathbf{r}, T)}{RT} = \mathbf{f}(\mathbf{d}, \mathbf{t}) = n_1 \ln \mathbf{d} + \sum_{i=2}^{40} n_i \mathbf{d}^{I_i} \mathbf{t}^{J_i}, \quad (1)$$

onde n_i , I_i e J_i são dados na Tabela 1; $\mathbf{d} = \mathbf{r} / r_c$, $\mathbf{t} = T_c / T$, R , r_c , e T_c são:

$$R = 0.461\,526 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$T_c = 647.096 \text{ K}$$

$$r_c = 322 \text{ kg m}^{-3}$$

A solução da Eq. 1 para um par de p e T requer a utilização de um processo iterativo no qual é assumido um valor de \mathbf{r} , a partir desse valor é calculada a pressão, obtida por meio da derivada de $f(\mathbf{r}, T)$ em relação a p .

$$p = \mathbf{r}^2 (\partial f / \partial \mathbf{r})_T \quad (2)$$

O valor de \mathbf{r} é atualizado em função da diferença de pressão obtida entre iterações. O processo se repete até se reduzir essa diferença a valores desprezíveis. Uma vez convergido o valor de \mathbf{r} , podem ser determinadas todas as outras propriedades por meio das seguintes equações:

Energia interna específica:

$$u = f - T(\partial f / \partial T)_r \quad (3)$$

Entropia específica:

$$s = -(\partial f / \partial T)_r \quad (4)$$

Entalpia específica:

$$h = f - T(\partial f / \partial T)_r + \mathbf{r}(\partial f / \partial \mathbf{r})_T \quad (5)$$

Calor específico a volume constante:

$$c_v = (\partial u / \partial T)_r \quad (6)$$

Calor específico a pressão constante:

$$c_p = (\partial h / \partial T)_p \quad (7)$$

Velocidade do som:

$$w = (\partial p / \partial \mathbf{r})_s^{1/2} \quad (8)$$

Depois da solução iterativa de (2) é necessária a solução de diversas derivadas de f para se determinar cada uma das propriedades em função de p e T . Cada caso sempre envolve a soma de 40 termos com coeficientes e expoentes diversos. Para se obter a entalpia, h , p. ex., é necessário f , $(\partial f / \partial T)$, \mathbf{r} , e $(\partial f / \partial \mathbf{r})$: *um considerável esforço de processamento numérico para a solução de quatro expressões, com diversas operações de soma, multiplicação e exponenciação*, como será abordado adiante.

III. MODELO POR REDES NEURAIS

O problema em específico é um típico caso de "aproximação de uma função contínua." A formulação mais genérica possível de uma RNA para solução desse tipo de problema é a das *redes alimentadas adiante (RAA)*, ou *redes em "feed-forward"*. São baseadas em unidades simples, arranjadas em camadas e com os sinais seguindo uma única direção (Fig. 2).

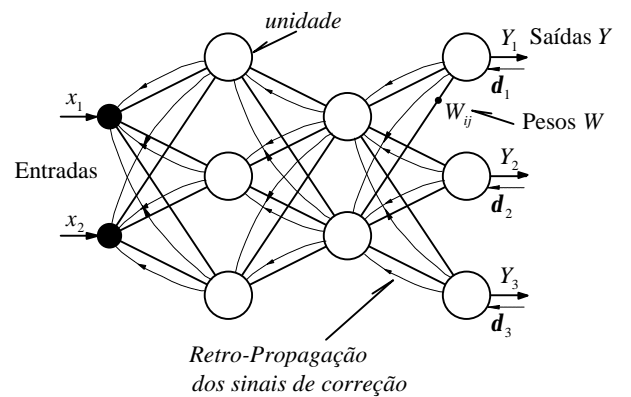


Figura 2. RAA com Retro-Propagação.

As interligações são chamadas de *pesos* e representam sinapses. Uma descrição mais detalhada das RAA é dada em outro trabalho deste encontro [3]. Quando utilizam funções de transferência sigmóides, ou *curvas-S*, as RAA são chamadas de "Perceptrons de Múltiplas Camadas." Essas redes geralmente são treinadas com o método de retro-propagação [4], que é um método do tipo "supervisionado," ou seja, requer um "professor."

TABELA 1. Valores dos Coeficientes e Expoentes da Equação de Energia Livre de Helmholtz para a Região 3, Eq. (1)

i	I_i	J_i	n_i	i	I_i	J_i	n_i
1	0	0	1,06580700285130E+00	21	3	4	-2,01899150235700E+00
2	0	0	-1,57328452902390E+01	22	3	16	-8,21476371739630E-03
3	0	1	2,09443969743070E+01	23	3	26	-4,75960357349230E-01
4	0	2	-7,68677078787160E+00	24	4	0	4,39840744735000E-02
5	0	7	2,61859477879540E+00	25	4	2	-4,44764354287390E-01
6	0	10	-2,80807811486200E+00	26	4	4	9,05720707197330E-01
7	0	12	1,20533696965170E+00	27	4	26	7,05224500879670E-01
8	0	23	-8,45668128125020E-03	28	5	1	1,07705126263320E-01
9	1	2	-1,26543154777140E+00	29	5	3	-3,29136232589540E-01
10	1	6	-1,15244078066810E+00	30	5	26	-5,08710620411580E-01
11	1	15	8,85210439843180E-01	31	6	0	-2,21754008730960E-02
12	1	17	-6,42077651816070E-01	32	6	2	9,42607516650920E-02
13	2	0	3,84934601866710E-01	33	6	26	1,64362784479610E-01
14	2	2	-8,52147088242060E-01	34	7	2	-1,35033722413480E-02
15	2	6	4,89722815418770E+00	35	8	26	-1,48343453524720E-02
16	2	7	-3,05026172569650E+00	36	9	2	5,79229536280840E-04
17	2	22	3,94205368791540E-02	37	9	26	3,23089047037110E-03
18	2	26	1,25584084243080E-01	38	10	0	8,09648029962150E-05
19	3	0	-2,79993296987100E-01	39	10	1	-1,65576797950370E-04
20	3	2	1,38997995694600E+00	40	11	26	-4,49238990618150E-05

Esse "professor" na verdade é representado por um conjunto de dados relacionando entradas com saídas desejadas, e que é fornecido na forma de uma *Tabela de Treinamento* (TT). O método de retro-propagação tem por objetivo minimizar uma função custo, ou *Função Energia do Erro*, definida como a somatória, sobre todos os padrões, da somatória do quadrado dos erros na saída da rede, ou seja, da diferença entre os valores desejados e obtidos. Esse método apresenta uma série de problemas e requer alguns artifícios para produzir resultados com alguma confiança, ou seja, depende muito da experiência do usuário.

Em todos os casos é necessário investigar a melhor configuração e determinar o número ideal de unidades. Quando os dados apresentam ruído por exemplo, é necessário reduzir ao máximo o número de unidades e interromper o treinamento no momento certo, evitando que a rede "aprenda esse ruído." Para isso, durante o processo de aprendizado são utilizados dados não apresentados no treinamento evitando esse problema conhecido como "super-ajuste." Esse não é o caso deste problema uma vez que os dados são isentos de ruído por serem gerados pela solução das equações apresentadas na seção 2 (não serão realizadas comparações com resultados experimentais).

Esta pesquisa se encontra na sua fase inicial. Para este trabalho foi utilizada apenas a formulação da região 3, apresentada na seção 2, para se gerar uma tabela com três propriedades em função de p & T : o *volume específico*, a *entalpia específica* e a *entropia específica*. A tabela produzida foi limitada à faixa de pressão de 4 MPa a 16 MPa, a cada 2 MPa, e à faixa de temperatura de 150°C a 350°C, de 10°C em 10°C. As equações foram programadas em Pascal gerando tabelas em arquivos texto, para utilização no treinamento. Foram selecionados 113 conjuntos de dados correspondentes a 113 pares de p e T para o treinamento. Para a comparação de resultados das redes neurais artificiais treinadas com essa tabela foram considerados dados adicionais, obtidos em intervalos de 5°C em 5°C, num total de 222 conjuntos de dados.

Foram testadas configurações de redes com duas e três camadas, variando progressivamente o número de unidades, de 5 a 50. Foi sempre utilizada uma função de transferência tipo tangente hiperbólica, $\tanh()$, com uma constante $\beta = 1,57$; uma taxa de aprendizado $\eta = 0,2$; e, uma constante de momento $\alpha = 0,1$. A Fig. 3 ilustra a maior rede testada, com 3 camadas. Ela considera as duas entradas, p e T , duas camadas internas com 25 unidades cada, e a camada de saída com as três saídas: volume, entalpia e entropia.

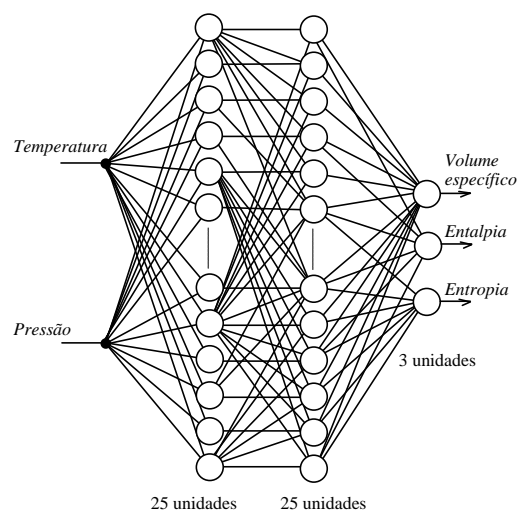


Figura 3. Arquitetura da Rede.

Apesar do problema de aproximação de uma função contínua tipicamente não requerer mais do que duas camadas, os resultados obtidos com redes de três camadas são nitidamente superiores. A Fig. 4 mostra as diferenças relativas entre valores previstos pela formulação IAPWS-IF97, valores desejados, e os obtidos com uma RNA de 10 unidades na primeira camada e 3 na camada de saída. A Fig. 5 mostra o mesmo para uma rede com 3 camadas, sendo 5 unidades na primeira, 5 na segunda e 3 na de saída. Os re-

sultados se referem aos 222 pontos da tabela de verificação e um treinamento limitado a 50000 épocas. Redes com maior número de unidades não apresentaram nenhuma melhoria aos resultados, chegando mesmo ao extremo de produzirem piores resultados para o mesmo número de épocas de treinamento. Isso pode ser observado com o resultado obtido com as redes mais complexas: 2 camadas com 50 e 3 unidades; e, 3 camadas com 25, 25 e 3 unidades, respectivamente nas Fig. 6 e 7. As Fig. 8 a 10 mostram a superposição dos resultados obtidos com a rede de 3 camadas e 13 unidades com os dados obtidos pela formulação IAPWS-IF97. Os resultados da Fig. 8 são para o volume específico, da Fig. 9 para entalpia, e da Fig. 10 para entropia.

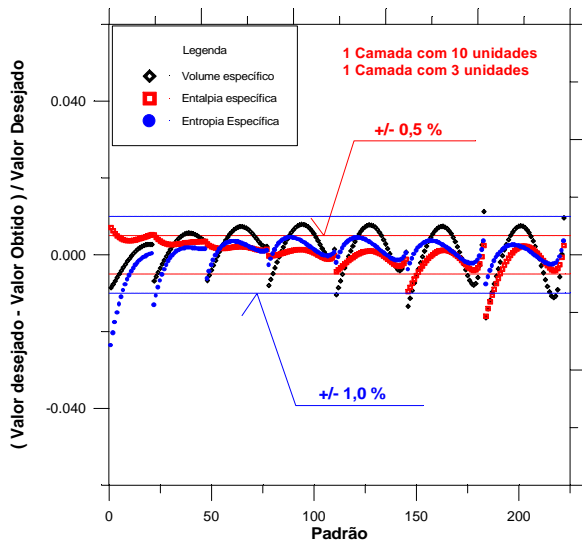


Figura 4. Diferenças Relativas – Rede com Duas Camadas.

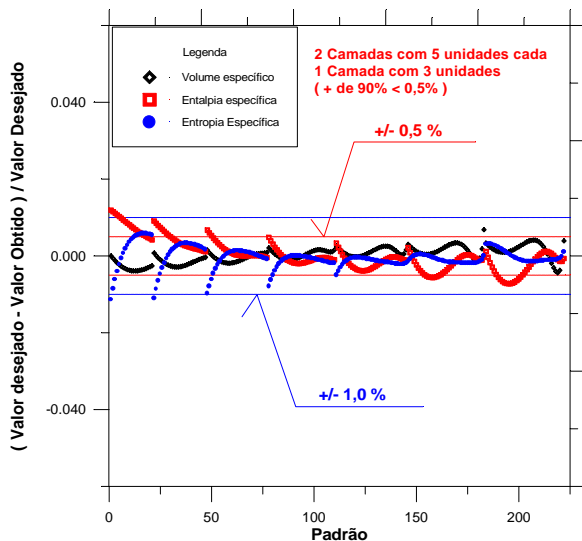


Figura 5. Diferenças Relativas – Rede com Três Camadas.

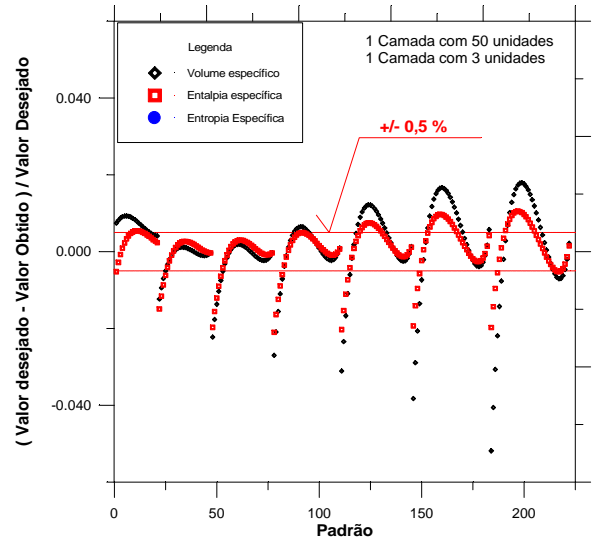


Figura 6. Diferenças: Rede com 2 Camadas, 53 Unidades.

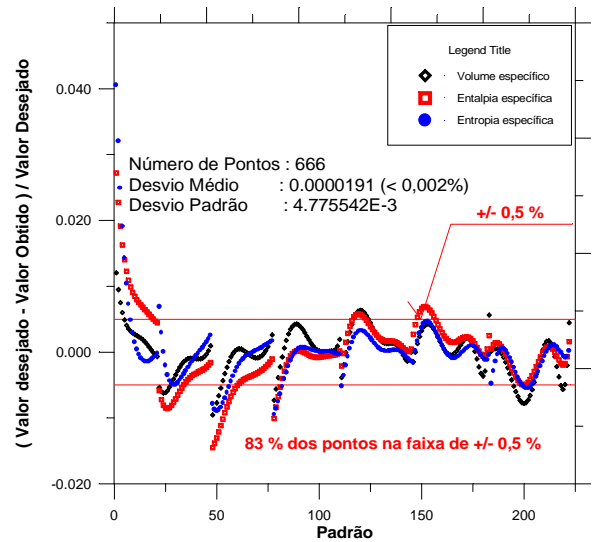


Figura 7. Diferenças: Rede com 3 Camadas, 53 Unidades.

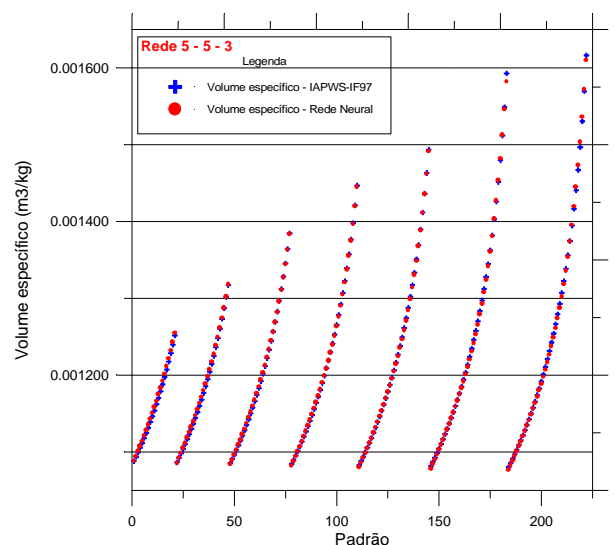


Figura 8. Resultados para o Volume Específico.

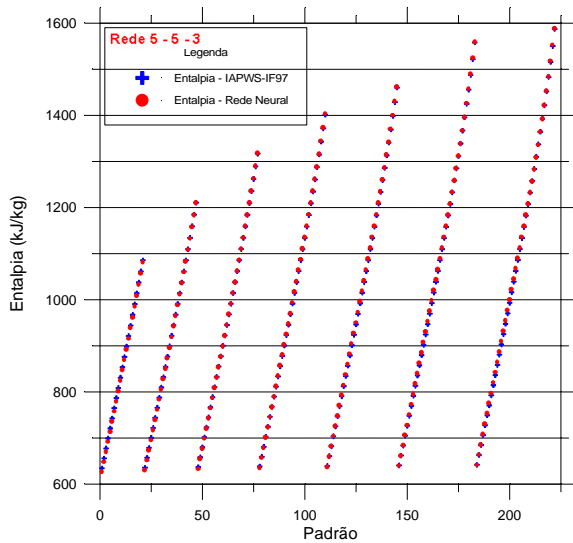


Figura 9. Resultados para a Entalpia Específica.

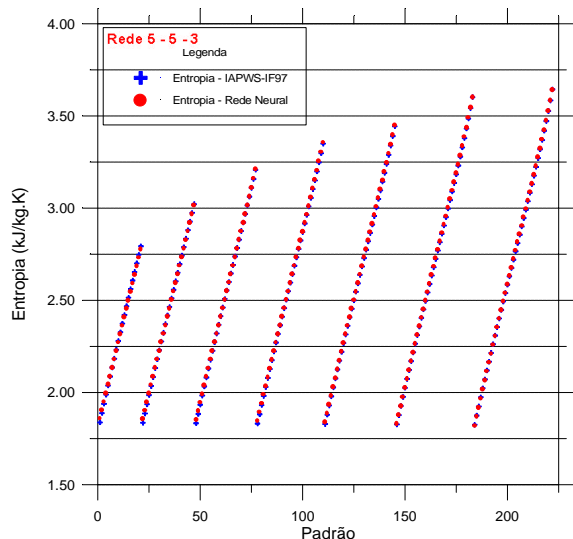


Figura 10. Resultados para a Entropia Específica.

Apesar dos resultados aparentarem serem bons, incertezas superiores a $\pm 0,5\%$ podem não ser satisfatórias para algumas aplicações. Além disso, a incerteza dos resultados só pode ser discutida indiretamente. Por si só a formulação IAPWS-IF97 apresenta incertezas que variam de 0,05% a 0,2%, no caso do volume específico, Fig. 11, e de até 0,5% no caso do calor específico, Fig. 12, dado mais próximo para representação da entalpia. Isso pode mesmo significar que uma rede extremamente simples como a analisada, resultados da Fig. 5 e rede da Fig. 13, pode substituir uma formulação complexa como a apresentada na seção 2.

A implementação em hardware de uma rede neural significaria *processamento paralelo*, ou seja, *simultâneo*, de todas operações em dada camada, o que a colocaria num patamar de desempenho inimaginável. No entanto, as atuais implementações são em software, ou seja, simulações por meio de programas digitais. Na implementação em hardware o esforço de processamento envolveria o despendido para o percurso das 3 camadas. Na implementação em software envolve a realização de todas as operações, em todas as camadas. Mesmo nessas condições, sua capacidade e de-

sempenho pode superar outros métodos. Em software não há diferenças sensíveis entre redes de 2 ou 3 camadas, desde que o número de unidades e conexões seja o mesmo.

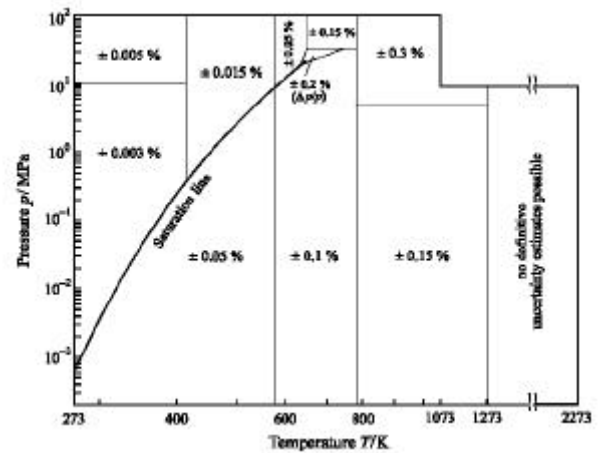


Figura 11. Incertezas da IAPWS-IF97 para o Volume Específico (Dv/v).

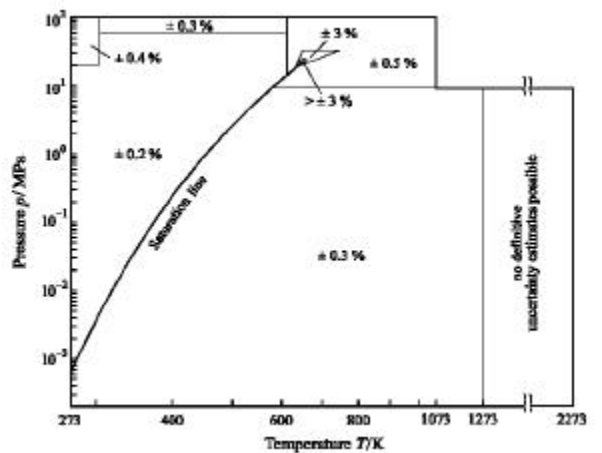


Figura 12. Incertezas para o Calor Específico (Dc_p/c_p).

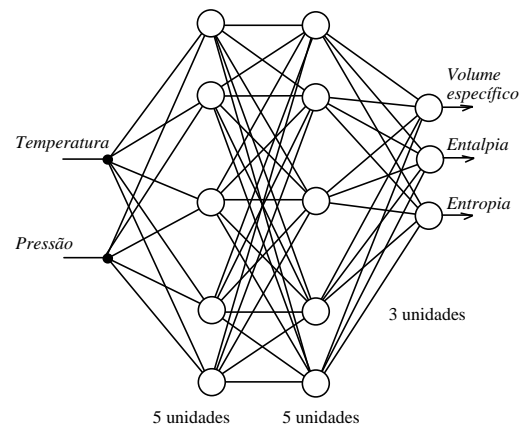


Figura 13. Arquitetura da Rede 5-5-3.

Neste problema específico, o esforço computacional pode ser estimado considerando-se as operações necessárias apenas para a *fase de ação*, ou seja, a *produção de resultados após o treinamento*. Para a rede com 3 camadas e 13 unidades (5-5-3) da Fig. 13, as operações matemáticas si-

muladas no processo de ação para obtenção, por exemplo do volume específico, são:

$$v = \tanh \left[\mathbf{b} \left(\sum_{i=1}^5 (w_{v,i} y_i + w_{0-v}) \right) \right] \quad (9)$$

$$y_i = \tanh \left[\mathbf{b} \left(\sum_{j=1}^5 (w_{i,j} y_j + w_{0-i,j}) \right) \right] \quad (10)$$

$$y_j = \tanh \left[\mathbf{b} (w_{e-j,T} T + w_{e-j,p} p + w_{0-e-j}) \right] \quad (11)$$

De um modo simplificado, o esforço (E) para solução das equações pode ser transformado no número de operações básicas como: soma/subtração (+); multiplicação (x); e, exponenciação (e). Considerando (5 x) na normalização das entradas e saídas e que o esforço para a $\tanh()$ pode ser aproximado por $E_{\tanh} = (4e; 1x; 2+)$ tem-se que o esforço total para determinação das 3 propriedades é:

- $E_{\text{RNA}} = (52 e; 81 x; 108 +)$

Nesta fase da pesquisa ainda não foi estabelecida a metodologia para comparação do desempenho, que envolverá o binômio precisão/processamento. Para uma comparação inicial podemos simplesmente constatar que, no caso da formulação vista na seção 2, o esforço para a solução iterativa da eq. (2) já é muito superior ao despendido pela RNA 5-5-3. Essa indicativa pode ser obtida considerando-se apenas o esforço para solução iterativa da derivada de f , da eq. (1), em relação a \mathbf{r} , ou seja, em relação a \mathbf{d} : e a determinação de p , eq. (2):

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{d}} = RT \left[\frac{n_1}{\mathbf{d}} + \sum_{i=2}^{40} n_i \mathbf{t}^{J_i} I_i \mathbf{d}^{I_i-1} \right] \quad (12)$$

$$p = \mathbf{r}^2 \frac{\partial f}{\partial \mathbf{d}} = \mathbf{r}^2 RT \left[\frac{n_1}{\mathbf{d}} + \sum_{i=2}^{40} n_i \mathbf{t}^{J_i} I_i \mathbf{d}^{I_i-1} \right] \quad (13)$$

Um iteração, envolvendo uma única avaliação de (13), resulta no esforço de:

- $E_{\text{pIAPWS}} = (77 e; 120 x; 40 +)$

A convergência em p conclui com a obtenção de \mathbf{r} . Verificou-se um mínimo de 6 iterações para a convergência desse processo, ou seja, a simples obtenção do valor de \mathbf{r} representa um esforço mais de 10 vezes superior ao esforço da RNA para obtenção das 3 propriedades, v , h e s .

IV. CONCLUSÕES

Foram avaliadas diversas configurações de RNA para aproximação de 3 propriedades termodinâmicas da água

(v , h e s) na faixa de pressão de 4 MPa a 16 MPa, e na faixa de temperatura de 150°C a 350°C.

Os primeiros resultados da pesquisa mostraram que redes com poucas unidades, 13 nas condições testadas, apresentam resultados com razoável precisão. Observou-se melhores resultados em redes com 3 camadas. A melhor configuração foi obtida com uma rede com 5 unidades na primeira camada, 5 unidades na segunda e 3 unidades, uma para cada propriedade, na saída.

Na comparação de desempenho da RNA treinada pelo método de retro-propagação com a solução das equações da formulação IAPWS-IF97 para a região 3 da água, os resultados indicaram que a RNA pode fornecer respostas dezenas de vezes mais rápidas. Esses resultados são preliminares pois a metodologia para comparação de desempenho ainda não foi estabelecida.

REFERÊNCIAS

- [1] Cooper, W.W., et al., **Releases on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam**, Erlangen, Germany, September 1997.
- [2] **IAPWS Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use**, Fredericia, Denmark, September 1996.
- [3] Baptista F., B.D., **Redes Neurais Artificiais na Engenharia Nuclear (Parte 1)**, Paper Code 17R09, Anais do XIII ENFIR, 11 a 16 de Agosto, Rio de Janeiro, 2002.
- [4] WERBOS, P.J., **Beyond regression: New Tools for Prediction and Analysis in the Behavioral Sciences**, Ph.D. dissertation, Committee on Appl. Math., Harvard Univ., Cambridge, MA: Nov. 1974.

ABSTRACT

Thermal-hydraulics programs need the fast and precise supply of water properties at any condition. Sometimes these properties are obtained by interpolation from tables, in other cases functions are used considering several options for faster calculations with loss of precision or slower processing. Functions with range limitation can cause problems hardly detected by users. The need of precise formulations gave opportunity to the creation of an international association for the properties of the water, the IAPWS, that develops formulations based on the Gibbs and Helmholtz free energy equations. Recent techniques based on artificial neural networks (RNA) appear to be powerful tools of data compression and can be used in similar problems. This work presents the initial results of a research that compares the RNA's performance with the formulation IAPWS-IF97. The conclusions indicate to be promising the use of RNA in this task.