

Modelagem numérica de escoamento
transiente em meios porosos
aleatórios saturados usando a
expansão de Karhunen-Loève

JUAREZ DOS SANTOS AZEVEDO

SALVADOR – BAHIA

MARÇO – 2009



**Modelagem numérica de escoamento transiente em meios porosos
aleatórios saturados usando a expansão de Karhunen-Loève**

por

JUAREZ DOS SANTOS AZEVEDO

Licenciado em Matemática (Universidade Estadual de Feira de Santana – 2001)

Mestre em Matemática (UFBa – 2003)

TESE DE DOUTORADO

Submetida em satisfação parcial dos requisitos ao grau de

DOUTOR EM CIÊNCIAS

EM

GEOFÍSICA

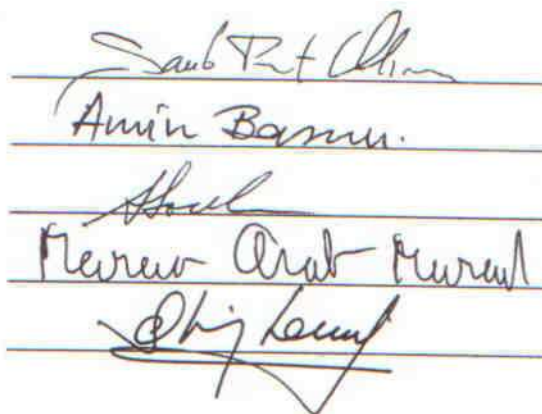
à

Câmara de Ensino de Pós-Graduação e Pesquisa

da

Universidade Federal da Bahia

Comissão Examinadora



The image shows four handwritten signatures in blue ink, each written on a horizontal line. From top to bottom, the signatures are: 1. Saulo Pomponet Oliveira, 2. Amin Bassrei, 3. Abimael Fernando Dourado Loula, and 4. Marcio Arab Murad. The fourth signature is partially obscured by the fifth line.

Dr. Saulo Pomponet Oliveira - Orientador

Dr. Amin Bassrei

Dr. Abimael Fernando Dourado Loula

Dr. Marcio Arab Murad

Dr. Olivar Antônio Lima de Lima

Aprovada em 13 de Março de 2009

A presente pesquisa foi desenvolvida no Centro de Pesquisa em Geofísica e Geologia da UFBA, com recursos próprios, da Capes

A994 Azevedo, Juarez dos Santos.

Modelagem numérica de escoamento transiente em meios porosos aleatórios saturados usando a expansão de Karhunen-Loève / Juarez dos Santos Azevedo. — Salvador, 2009.

109 f.;il., + anexos.

Tese (Doutorado) - Pós-Graduação em Geofísica. Instituto de Geociências da Universidade Federal da Bahia, 2009.

1. Método de Monte Carlo; 2. Processos estocásticos; 3. Aquíferos; 4. Hidrologia I. Oliveira, Saulo Pomponet. II Universidade Federal da Bahia. Instituto de Geociências. III. Título.

CDU 556.013

"O sábio escutará e absorverá mais
instrução, e homem de entendimento
é aquele que adquire orientação
perita." Provérbios 1 : 5

Resumo

Um requisito importante de um modelo geofísico é a capacidade de quantificar a incerteza associada à imprecisão e/ou a escassez de dados de campo. Uma maneira de realizar esta quantificação é descrever o modelo por meio de equações diferenciais cujos parâmetros associados a propriedades materiais são processos estocásticos.

Os métodos de elementos finitos estocásticos são apresentados como um procedimento eficiente na caracterização da solução de equações de evolução com coeficientes estocásticos. Os conceitos de projeção, ortogonalidade e convergência fraca são utilizados para gerar problemas determinísticos auxiliares que são resolvidos por métodos de elementos finitos tradicionais. Em particular, a expansão de Karhunen-Loève é usada para discretizar os parâmetros estocásticos dentro de um conjunto enumerável de variáveis aleatórias.

Os modelos estudados neste trabalho são baseados na Lei de Darcy para fluxo saturado nos regimes permanente e transiente em que a condutividade hidráulica segue uma distribuição lognormal. A solução numérica no regime permanente foi realizada pelos métodos de Monte Carlo, Galerkin espectral, das equações de Momentos baseado na expansão de Karhunen-Loève e da Colocação, visando identificar os benefícios e deficiências de cada método. O método da Colocação mostrou-se mais atrativo que os métodos de Galerkin espectral e de Momentos.

No regime transiente manteve-se o foco nos métodos de Monte Carlo e da Colocação. Estes métodos fornecem uma previsão da média e da variância do potencial hidráulico nos poços de produção a partir das propriedades estatísticas da condutividade hidráulica. Critérios de otimização são aplicados nestes métodos a fim de se estudar a hidráulica de poços em

aqüíferos livres e extensos fixando distâncias mínimas entre poços de produção.

Abstract

An important requirement of a geophysical model is the ability to quantify the uncertainty associated with inaccurate and/or limited field data. One way to accomplish this quantification is to describe the model with differential equations whose parameters associated with material properties are stochastic processes.

Stochastic finite element methods are presented as an efficient procedure for the characterization of the solution of dynamic problems with stochastic coefficients. The concepts of projection, orthogonality, and weak convergence are employed to generate auxiliary, deterministic problems that are solved by standard finite element methods. In particular, the Karhunen-Loève expansion is used to discretize the stochastic parameters within a set of countable random variables.

The models studied in this work are based on Darcy's Law for steady and transient saturated flow in which the hydraulic conductivity follows a lognormal distribution. Numerical solutions in the steady case are computed by the following methods: Monte Carlo, spectral Galerkin, the Moment-equation approach based on KL decomposition, and Collocation, in order to identify the advantages and difficulties of each method. The Collocation method outperformed the spectral Galerkin and the Moment-equation methods.

The Monte Carlo and Collocation methods are focused in the study of the transient regime. These methods provide an estimate of the mean and the covariance of the hydraulic potential of production wells from the statistical properties of the hydraulic conductivity. Optimization criteria are applied in order to study the hydraulics of wells in free, unbounded aquifers by setting minimum distances between production wells.

Índice

Resumo	4
Abstract	6
Índice	7
Índice de Figuras	10
Introdução	13
1 Revisão Teórica	17
1.1 Conceitos Básicos	18
1.2 Expansão de Karhunen-Loève	20
1.2.1 Espectro racional	21
1.2.2 Espectro não racional	25
1.2.3 Problema Estático Unidimensional	30
1.3 Caos polinomial	33
1.3.1 Definição e Propriedades	34
1.3.2 Projeção do caos polinomial finita e polinômios Hermitianos	36
1.3.3 Campos Aleatórios e Simulação por Monte Carlo	40
1.3.4 Problema Estático Unidimensional (Parte 2)	41
2 Comparação dos métodos estocásticos no estudo de escoamento em regime permanente	44
2.1 Introdução	44

<i>Índice</i>	8
2.2	Formulação Matemática 45
2.2.1	Expansão Lognormal 47
2.3	Equações de Momentos baseadas na expansão de Karhunen-Loève (EMKL) 48
2.4	Método de Galerkin Espectral (MGE) e a projeção do Caos Polinomial . . . 54
2.4.1	Cálculo da Esperança 57
2.4.2	Custo Computacional do MGE 57
2.5	Método da Colocação (MCol) para equações diferenciais parciais elípticas . . 58
2.5.1	Coefficientes de Dimensão Finita 60
2.5.2	Método da Colocação 60
2.6	Exemplo: Escoamento uniforme 63
2.6.1	Efeito do comprimento de correlação: EMKL versus MGE 66
2.6.2	Efeito da variância σ_Y^2 : EMKL versus MGE 67
2.7	Comparação do MCol com outros métodos 68
2.7.1	MGE e MCol de grau $P = 1$ e EMKL de ordem 1 69
2.7.2	MGE e MCol de grau $P = 2$ e EMKL de ordem 2 70
2.7.3	Efeitos relacionados ao comprimento de correlação e a grande variabil- idade espacial 70
2.8	Análise de Erro do MCol, MGE e EMKL em relação a MC 72
2.8.1	A sensibilidade da variância versus a variância de perturbação 72
2.9	Escoamento não uniforme 73
3	Métodos de elementos finitos estocásticos no estudo do escoamento em regime transiente 80
3.1	Introdução 80
3.1.1	Formulação do Problema 81
3.1.2	Fórmula de Boulton 82
3.1.3	Fórmula de Theis 83
3.1.4	Descarga de poços interferentes 84

<i>Índice</i>	9
3.2 Método de Monte Carlo (MC)	85
3.3 Método da Colocação (MCol)	86
3.4 Resultados	87
3.4.1 Otimização da exploração do aquífero freático	88
3.4.2 Aplicações em meio estatisticamente heterogêneo	91
4 Conclusão	96
Agradecimentos	101
Apêndice A	102
A.1 Formulação Variacional do problema elíptico estocástico	102
A.1.1 Existência e unicidade para um problema estocástico linear	105
A.1.2 Continuidade referente aos coeficientes κ e f	105
Referências Bibliográficas	108

Índice de Figuras

1.1	Autofunções $\phi_n(x)$ correspondentes aos N autovalores da covariância exponencial com $L = 1$, $N = 4$, $\eta = 1$ e $\sigma_\kappa^2 = 1$	25
1.2	Gráfico da função $C_\kappa(x; y) = \sigma_\kappa^2 e^{- x-y /\eta}$ quando $\eta = 1$, $\sigma_\kappa^2 = 1$ e $L = 1$	26
1.3	Gráfico da função de covariância exponencial C_{κ_N} (esquerda) e superfície de erro absoluto entre as covariâncias C_κ e C_{κ_N} (direita) com $N = 4$. Erro máximo = 0.1126.	26
1.4	Gráfico da função de covariância exponencial C_{κ_N} (esquerda) e superfície de erro absoluto entre as covariâncias C_κ e C_{κ_N} (direita) com $N = 10$. Erro máximo = 0.0364.	27
1.5	Gráfico de decaimento dos autovalores da covariância de Wiener com $N = 100$ e $L = 1$	27
1.6	Gráfico da função de covariância de Wiener $C_\kappa(x; y) = \min(x, y)$	28
1.7	Gráfico da função de covariância de Wiener C_{κ_N} (esquerda) e superfície de erro absoluto entre as covariâncias C_κ e C_{κ_N} de Wiener (direita) com $N = 10$. Erro máximo = 0.01743137980.	28
1.8	Gráfico da função de covariância de Wiener C_{κ_N} (esquerda) e superfície de erro absoluto entre as covariâncias C_κ e C_{κ_N} de Wiener (direita) com $N = 100$. Erro máximo = 0.001206102481.	29
1.9	Funções $H_n(x)$, $n = 1, \dots, 4$	38
1.10	Padrão de esparsidade da matriz \mathbf{K}_{CP} , quando $M = 4$ e ordem polinomial estocástica $P = 1$ (esquerda), $P=2$ (centro) e $P=4$ (direita). O número de componentes não-nulos é indicado por nz	40

1.11	Gráfico da média; $\eta = 1$; $\sigma_\kappa = 0.1$ (esquerda) e $\sigma_\kappa = 0.3$ (direita).	42
1.12	Gráfico do desvio padrão da deflexão; $\eta = 1$; $\sigma_\kappa = 0.1$ (esquerda) e $\sigma_\kappa = 0.3$ (direita).	42
1.13	Gráfico do desvio padrão na extremidade da barra; $\eta = 1$	43
2.1	Condições de Fronteira	64
2.2	Comparação da variância do potencial mantendo-se σ_Y^2 fixo: (a) $\sigma_Y^2 = 1$ e $\eta = 1$; (b) $\sigma_Y^2 = 1$ e $\eta = 4$	67
2.3	Comparação da variância do potencial com $\eta = 4$: (a) $\sigma_Y^2 = 0.25$; (b) $\sigma_Y^2 = 2$; (c) $\sigma_Y^2 = 4$	68
2.4	Efeito do aumento do M no MGE	68
2.5	Comparação da variância do potencial derivada do MCol, MGE, EMKL e MC, com diferente variabilidade espacial e diferente comprimento de correlação.	69
2.6	Comparação da variância do potencial derivada do MCol, MGE, EMKL e MC, com diferente variabilidade espacial e diferente comprimento de correlação. O MCol e o MGE se coincidem em (c)	70
2.7	Comparação da variância do potencial derivada do MCol e MC, com diferente variabilidade espacial.	71
2.8	Gráfico de erro sob a norma L^2 versus σ_Y^2	73
2.9	Gráfico da variância σ_Y^2 sob erro de norma L^2 versus M	74
2.10	Condições de Fronteira	74
2.11	Campo potencial: (a) Solução aproximada por elementos finitos. (b) Perfil da diagonal	75
2.12	Gráfico de Contorno da Média: (a) MC e (b) MCol. A Fig. (c) representa os perfis da diagonal com $\eta = 0.6$ e $\sigma_Y^2 = 1$	76
2.13	Gráfico de Contorno da Variância: (a) MC e (b) MCol. A Fig. (c) representa os perfis da diagonal com $\eta = 0.6$ e $\sigma_Y^2 = 1$	77
2.14	Gráfico de Contorno da Média: (a) MC e (b) MCol. A Fig. (c) representa os perfis da diagonal com $\eta = 1$ e $\sigma_Y^2 = 1$	78

2.15	Gráfico de Contorno da Variância: (a) MC e (b) MCol. A Fig. (c) representa os perfis da diagonal com $\eta = 1$ e $\sigma_Y^2 = 1$	79
3.1	Carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços, em linha separados por uma distância $d_m = 460\text{ m}$ e os respectivos perfis do potencial hidráulico. (a) Fórmula de Theis; (b) Fórmula de Boulton.	90
3.2	Carga hidráulica gerada pela interferência entre três poços, formando um triângulo equilátero de lado $d_m = 700\text{ m}$. (a) Fórmula de Theis; (b) Fórmula de Boulton.	90
3.3	Média da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços, em linha separados por uma distância $d_m = 460\text{ m}$. (a) MC (b) MCol. A Fig. (c) estabelece os respectivos perfis. $\eta = 1$	92
3.4	Média da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços, em linha separados por uma distância $d_m = 460\text{ m}$. (a) MC (b) MCol. A Fig. (c) estabelece os respectivos perfis. $\eta = 4$	93
3.5	Média da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços, em linha separados por uma distância $d_m = 460\text{ m}$. (a) MC (b) MCol. A Fig. (c) estabelece os respectivos perfis. $\eta = 100$	94
3.6	Perfis da variância da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços quando $\eta = 1$. (a) MC (b) MCol.	94
3.7	Perfis da variância da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços quando $\eta = 4$. (a) MC (b) MCol.	95
3.8	Perfis da variância da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços quando $\eta = 100$. (a) MC (b) MCol.	95

Introdução

Muitos parâmetros em sistemas físicos tais como as propriedades materiais, parâmetros geométricos e a fonte mostram variabilidade na distribuição espacial e podem ser modelados como campos aleatórios ao invés de variáveis determinísticas. Matematicamente esta espécie de problema é caracterizada por equações diferenciais estocásticas cujos coeficientes são campos aleatórios. Devido à complexidade da maioria dos problemas, soluções determinísticas de tais problemas não são possíveis quando definidas sobre um domínio em meio heterogêneo. Em vista disso, o tratamento da aleatoriedade no sistema físico necessita ser adaptado pela implementação de métodos numéricos que possam atuar considerando-se as características estocásticas. Neste sentido, modificações têm sido adicionadas ao método de elementos finitos a fim de levarmos em conta os efeitos estocásticos. Essas técnicas são chamadas de métodos de elementos finitos estocásticos e são usadas para resolver equações diferenciais parciais cujos coeficientes são parâmetros aleatórios.

Vários métodos de elementos finitos estocásticos têm sido propostos na literatura. A título de exemplo temos o método de Momentos (Zhang e Lu, 2004) e o de Neumann (Ghanem e Spanos, 1991) que funcionavam bem quando a variabilidade não é muito grande. O método de Monte Carlo é acurado, porém demanda grande custo computacional (Zhang, 2002; Chakraborty e Dey, 1995). Além disso, quando os modelos são de grande porte ou quando existem muitos parâmetros o método de Monte Carlo pode se tornar ineficaz. Outra alternativa é o método de Galerkin espectral desenvolvido por Ghanem e Spanos (1991). Todavia, os sistemas de equações gerados por este método são muito maiores do que os sistemas encontrados na análise dos métodos de elementos finitos determinísticos. Como discretizamos simultaneamente variáveis espaciais e estocásticas, o número de equações do

sistema gerado pelo método de Galerkin espectral corresponde ao produto da dimensão da base determinística pela dimensão da base estocástica.

Este trabalho apresenta também um método de Galerkin espectral modificado conhecido como método da Colocação. Esta metodologia é baseada na proposta de Babuška et al. (2007) para problemas que dependem de campos aleatórios e utiliza a expansão de Karhunen-Loève e a expansão do caos polinomial para construir uma solução dependente do parâmetro de incerteza associado ao modelo. Primeiramente o campo aleatório é discretizado em variáveis aleatórias padrão através da expansão de Karhunen-Loève. Estas variáveis aleatórias são selecionadas de raízes de polinômios Hermitianos das quais surgem eficientes pontos de colocação a serem inseridos no campo aleatório descrito pela expansão de Karhunen-Loève. Depois disso, a média e a variância da solução são estimadas sobre o conjunto de pontos de colocação no espaço da amostra. O número de pontos de colocação usado no modelo é maior do que o número de coeficientes a determinar, reduzindo com isto o efeito de cada ponto individualmente. Porém, o método da Colocação é instável e a aproximação resultante é dependente da seleção dos pontos de colocação (Huang et al., 2007).

A similaridade entre o método da Colocação e o método de Galerkin espectral existe no sentido de que ambos os métodos utilizam a expansão de Karhunen-Loève e a expansão do caos polinomial na representação de campos aleatórios. Todavia, o cálculo dos coeficientes do sistema linear na expansão do caos polinomial é distinta em ambos os métodos. O método de Galerkin espectral usa uma aproximação de Galerkin cujo cálculo dos coeficientes é feito analiticamente enquanto o método da Colocação usa uma aproximação por integração numérica. Estas aproximações podem ser vistas como uma extensão da análise computacional determinística ao caso estocástico com uma extensão apropriada do conceito de minimização (Huang et al., 2007).

Neste trabalho o uso destes métodos permitiu estabelecer critérios para auxiliar na modelagem e análise de fluxo em meios porosos. Estes modelos variam consideravelmente em complexidade e generalidade. Devido à recente proliferação de poderosos computadores, a pesquisa tem progredido admiravelmente no desenvolvimento de modelos computacionais

para meios porosos (Ghanem e Dham, 1998; Dutton e Willis, 1998; Zhang e Lu, 2004; Yang et al., 2004). Estes modelos incluem uma caracterização da heterogeneidade através da probabilidade. Grande parte da pesquisa é aplicada a este tipo de problema, principalmente na simulação de campos aleatórios consistentes com os dados informados. Técnicas tais como o kriging e simulações condicionais foram desenvolvidas para este propósito (Le Ravalec-Dupin, 2005). Neste caso, as propriedades estatísticas dos modelos hipotéticos são usadas para derivar representações homogêneas equivalentes, pois as técnicas analíticas aplicadas em meios homogêneos são válidas em situações limitadas tais como domínio de dimensão espacial infinita ou limite de tempo infinito (Hantush, 1964). Desta forma, modelos analíticos usados na simulação de reservatório são questionáveis.

No desenvolvimento deste projeto, o meio heterogêneo é modelado no sentido estocástico. Expansões convergentes são usadas para permitir que processos estocásticos resultantes sejam integrados e avaliados em algoritmos computacionais. Especificamente a incerteza na condutividade hidráulica do meio poroso é de segunda ordem (variância finita) com função de covariância conhecida. O campo aleatório poderá ser Gaussiano ou lognormal. Os coeficientes obtidos através da solução referente ao campo aleatório têm a finalidade de minimizar a norma de erro, e o resultado é uma representação estocástica da solução do modelo aleatório. A metodologia é apresentada e demonstrada através de aplicações em meio bidimensional. Buscou-se com esta metodologia trazer formas alternativas de baixo custo computacional que preservem a acurácia nos resultados.

Delineamento da Tese

A tese foi dividida nos seguintes capítulos

- **Introdução**, tem brevemente o contexto da pesquisa e descreve os objetivos e estratégias.
- Capítulo 1, **Revisão Teórica**, define os conceitos fundamentais e as propriedades da expansão de Karhunen-Loève e a expansão do caos polinomial e suas aplicações em

meio unidimensional;

- **Capítulo 2, Comparação dos métodos estocásticos no estudo do escoamento em regime permanente**, faz uma descrição e análise destes métodos para problema linear elíptico com coeficientes estocásticos além de indicar que o método da Colocação é eficiente no estudo de equações diferenciais parciais elípticas estocásticas como forma alternativa ao método de Galerkin espectral e as equações de Momentos;
- **Capítulo 3, Métodos de elementos finitos estocástico no estudo do escoamento em regime transiente**, descreve a utilização do método de Monte Carlo e do método da Colocação na estimativa da média e variância do potencial hidráulico sobre fluxo transiente empregando a fórmula de Theis em aquífero livre, de fronteira horizontal infinita, em meio estatisticamente heterogêneo.
- **Conclusão**, finaliza o projeto destacando os pontos positivos e negativos dos métodos estocásticos descritos neste trabalho e apresenta recomendações para pesquisas futuras.

1

Revisão Teórica

Os processos aleatórios podem ser descritos em termos de expansões capazes de caracterizar propriedades materiais e geométricas que mostram a variabilidade aleatória através de uma distribuição espacial ou temporal. Uma representação que possui esta característica é a expansão de Karhunen-Loève, que pode descrever o meio em regime estatisticamente estacionário e não estacionário. Através desta expansão, podemos obter momentos de primeira e segunda ordem em termos de variáveis determinísticas que podem ser usados como instrumento de previsão, e no cálculo de intervalos de confiança em aplicações à hidrologia e a mecânica de fluidos.

Com funções de base determinística ortogonais e variáveis aleatórias não correlacionadas, a expansão de Karhunen-Loève tem sido de interesse pela sua propriedade de bi-ortogonalidade, ou seja, ambas as funções de base determinísticas e as variáveis aleatórias são ortogonais. Isto permite um encapsulamento ótimo da informação contido no processo aleatório em um conjunto de variáveis aleatórias discretas não correlacionadas (Ghanem e Spanos, 1991).

Na próxima seção definimos o processo estocástico e o núcleo de covariância com suas propriedades fundamentais. A seguir descrevemos a expansão de Karhunen-Loève.

1.1 Conceitos Básicos

Ao invés de tratarmos de uma única possível realização sob a variável espacial \mathbf{x} , iremos considerar um processo aleatório ou estocástico que existe sob a indeterminação de uma evolução futura, descrito através de distribuição de probabilidade. Seja κ este processo estocástico, definido no espaço das funções quadrado integráveis $L^2(D \times \Omega)$, cujo $D \subset \mathbb{R}^d$ e $\Omega \neq \emptyset$.

A fim de mensurarmos a correlação existente entre as variáveis aleatórias, a média e a correlação entre dois pontos é dada por

$$E_\kappa(\mathbf{x}) = E(\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})) = \int_\Omega \kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) d\mu(\boldsymbol{\omega}) \quad (1.1)$$

$$E_\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = E(\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})\kappa(\mathbf{y}; \boldsymbol{\omega})) = \int_\Omega \kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})\kappa(\mathbf{y}; \boldsymbol{\omega}) d\mu(\boldsymbol{\omega}), \quad (1.2)$$

respectivamente. A partir de $E_\kappa(\mathbf{x})$ e $E_\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, o núcleo de covariância é definido por

$$C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y}) = E_\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - E_\kappa(\mathbf{x})E_\kappa(\mathbf{y}). \quad (1.3)$$

Este núcleo de covariância é importante pois o uso da expansão de Karhunen-Loève descrito na seção seguinte depende da habilidade de resolver a equação integral da forma

$$\int_D C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y})\phi(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \lambda\phi(\mathbf{x}). \quad (1.4)$$

que por sua vez depende deste núcleo. Esta equação representa a integral de Fredholm de segunda espécie a qual é bem documentada na monografia de Mikhlin (1957). Como função de covariância este núcleo $C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y})$ é limitado, simétrico e positivo definido. Desta forma,

- Existe um conjunto ortonormal e completo das autofunções $\phi(\mathbf{x})$.
- Para cada valor λ existe um número finito de autofunções linearmente independentes.
- Existe no máximo um conjunto contável infinito de autovalores.
- Os autovalores são números reais positivos.

- O núcleo $C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y})$ admite uma expansão uniformemente convergente

$$C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y}) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{y}).$$

Em vista disto, o operador de covariância $V_\kappa : L^2(D) \rightarrow L^2(D)$,

$$V_\kappa \phi(\mathbf{x}) = \int_D C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad \forall \phi \in L^2(D)$$

é simétrico, não-negativo e compacto garantindo com isto a existência de uma seqüência contável de pares $(\lambda_m, \phi_m)_{m \geq 1}$ tais que $V_\kappa \phi_m = \lambda_m \phi_m$. Isto significa que λ_m representa o autovalor associado à autofunção ϕ_m com $\lambda_m \in \mathbb{R}$ e $\lambda_m \rightarrow 0$ quando $m \rightarrow \infty$ (vide Frauenfelder et al. (2005)) e estes autovalores são enumerados em ordem decrescente de grandeza ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots > 0$) com multiplicidade finita.

Em nosso estudo, $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ é um processo estacionário em relação a posição. Isto significa que a média possui a seguinte restrição

$$E[\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})] = E[\kappa(\mathbf{x} + \mathbf{y}; \boldsymbol{\omega})]. \quad (1.5)$$

A função de covariância por sua vez é expressa por

$$\begin{aligned} C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y}) &= E_\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - E_\kappa(\mathbf{x})E_\kappa(\mathbf{y}) = E_\kappa(\mathbf{x} + \mathbf{x}_1, \mathbf{y} + \mathbf{x}_1) - E_\kappa(\mathbf{x} + \mathbf{x}_1)E_\kappa(\mathbf{y} + \mathbf{x}_1) \\ &= E_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{y}, 0) - E_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{y})E_\kappa(0) = C_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{y}; 0) = C_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d. \end{aligned} \quad (1.6)$$

A equação (1.5) significa que a média se mantém constante enquanto a equação (1.6) significa que a função de covariância **estacionária** depende da diferença entre \mathbf{x} e \mathbf{y} . Observe que a estacionariedade é apenas uma decisão empírica, não uma hipótese que pode ser provada ou rejeitada sobre base dos dados informados (Le Ravalec-Dupin, 2005).

Além disso, a covariância $C_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ depende de uma variância σ_κ^2 e de um comprimento de correlação η . A variância σ_κ^2 é definida por

$$\sigma_\kappa^2 = E_\kappa(\mathbf{x}^2) - (E_\kappa(\mathbf{x}))^2 = C_\kappa(0)$$

e o comprimento de correlação η corresponde à distância a partir da qual dois pontos \mathbf{x} e \mathbf{y} deixam de ser correlacionados no sentido em que a correlação entre $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ e $\kappa(\mathbf{y}; \boldsymbol{\omega})$ é

desprezível (Mela e Louie, 2001). Este parâmetro pode ser estimado por meio da análise de variogramas (Mela e Louie, 2001; Le Ravalec-Dupin, 2005). De acordo com Le Ravalec-Dupin (2005), no caso estacionário o variograma mede a dissimilaridade entre as informações separadas pelo vetor $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ enquanto a covariância mede a similaridade entre estas informações.

1.2 Expansão de Karhunen-Loève

A expansão de Karhunen-Loève da função $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ é definida por

$$\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = E_{\kappa}(\mathbf{x}) + \sum_{m \geq 1} \sqrt{\lambda_m} \phi_m(\mathbf{x}) X_m(\boldsymbol{\omega}) \quad (1.7)$$

e as variáveis aleatórias $(X_m)_{m \geq 1}$ são tais que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} X_m(\boldsymbol{\omega}) d\mu(\boldsymbol{\omega}) &= 0, \\ \int_{\Omega} X_m(\boldsymbol{\omega}) X_n(\boldsymbol{\omega}) d\mu(\boldsymbol{\omega}) &= \delta_{nm} \quad \forall n, m \geq 1. \end{aligned}$$

cujas correspondentes autofunções são ortonormais, isto é,

$$\int_D \phi_i(\mathbf{x}) \phi_j(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{ij}.$$

Note que as autofunções ϕ_k da expansão de Karhunen-Loève do processo (1.7) foram derivadas tomando-se por base as propriedades analíticas da função de covariância. Estas propriedades são independentes da natureza estocástica do processo envolvido e permitem que a expansão seja aplicada a processos de alta ordem incluindo processos não estacionários e multidimensionais (Ghanem e Spanos, 1991).

No caso de uma expansão truncada de Karhunen-Loève

$$\kappa_N(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = E_{\kappa}(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^N \sqrt{\lambda_m} \phi_m(\mathbf{x}) X_m(\boldsymbol{\omega}),$$

o Teorema de Mercer (vide Riesz e Sz.-Nagy (1990), pg. 245) estabelece que

$$\sup_{\mathbf{x} \in D} E(\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) - \kappa_N(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}))^2 = \sup_{n=N+1}^{+\infty} \lambda_n \phi_n^2(\mathbf{x}) \rightarrow 0 \text{ quando } N \rightarrow +\infty.$$

Se todavia, as seqüências $(\phi_m(\mathbf{x}))_{m \geq 1}$, $(X_m(\boldsymbol{\omega}))_{m \geq 1}$ forem uniformemente limitadas em $L^\infty(D)$ e $L_\mu^\infty(\Omega)$, respectivamente, e

$$\sum_{m \geq 1} \sqrt{\lambda_m} < \infty$$

então a expansão de Karhunen-Loève converge uniformemente sobre $D \times \Omega$ (Frauenfelder, Schwab e Todor, 2005).

1.2.1 Espectro racional

Um interesse especial em engenharia é a classe dos processos aleatórios unidimensionais estacionários em filtro linear com excitação de ruído branco (Ghanem e Spanos, 1991). Este processo possui densidade espectral expressa por

$$S(\omega) = \frac{N(\omega^2)}{P(\omega^2)} \quad (1.8)$$

em que $N(\cdot)$ e $P(\cdot)$ são polinômios de dimensão finita de ordem n e p respectivamente. O interesse nesta classe de processos vem do fato de que a condição necessária e suficiente para o processo ser percebido como estacionário (Markoviano) é que a densidade espectral seja definida como em (1.8). Neste caso, o efeito do passado infinito sobre o presente é desprezível, ou seja, o processo possui memória finita.

Para um processo estacionário de dimensão espacial d a equação (1.4) é expressa por

$$\int_D C_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \lambda \phi(\mathbf{x}). \quad (1.9)$$

em que $C_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ é uma função simétrica. Quando $d = 1$ e $D = \mathbb{R}$ a equação (1.9) possui solução explícita através da integral de Wiener-Hopf (Paley e Wiener (1937)). Todavia, o caso em que D é limitado será mais importante em nosso contexto.

Antes de tratarmos do caso em que D é limitado, consideremos um processo aleatório de dimensão M dado por $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ cuja função de covariância $C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y})$ é da forma (1.3). Como estamos tratando de um processo estacionário o Teorema de Wiener-Khintchine (Ghanem e Spanos, 1991) prova que a função de covariância $C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y})$ e a densidade espectral de energia

$S(\boldsymbol{\omega})$ constituem um par de Transformadas de Fourier, ou seja, podemos escrever a equação (1.9) como

$$C_{\kappa}(\mathbf{x}; \mathbf{y}) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\mathbf{x}-\mathbf{y})^T \boldsymbol{\omega}} S(\boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega}. \quad (1.10)$$

onde T denota a transposição do vetor e $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \dots, \omega_M)^T$ é o vetor de onda.

No caso unidimensional podemos reescrever a equação (1.9) em uma equação diferencial homogênea com $S(\omega)$ na forma (1.8). Esta equação pode ser resolvida em termos do parâmetro λ e de constantes arbitrárias que são calculadas pela substituição dentro da equação (1.9). Por exemplo, se fizermos

$$S(\omega) = \frac{c\sigma_{\kappa}^2}{\pi(c^2 + \omega^2)}$$

em (1.10) obtemos um importante núcleo representando um processo Markoviano de primeira ordem expresso por

$$C_{\kappa}(x; y) = \sigma_{\kappa}^2 e^{-|x-y|/\eta} \quad (1.11)$$

em que σ_{κ}^2 é a variância do processo aleatório e $\eta = 1/c$ representa o comprimento de correlação.

De fato, se escrevermos $C_{\kappa}(x-y) = C_{\kappa}(\tau)$ então para encontrarmos a densidade espectral $S(\omega)$ do processo Markoviano dado pela função de covariância $C_{\kappa}(x; y) = \sigma_{\kappa}^2 e^{-c|x-y|}$, basta calcularmos a Transformada de Fourier da função $C_{\kappa}(\tau) = f(\tau) = \sigma^2 e^{-c|\tau|}$. Assim, utilizando o teorema de Wiener-Khintchine (Wiener, 1938) temos

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \mathcal{F}(f(\tau)) = \frac{\sigma_{\kappa}^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c|\tau|} e^{-i\omega\tau} d\tau = \frac{\sigma_{\kappa}^2}{2\pi} \left[\int_0^{+\infty} e^{-c\tau} e^{-i\omega\tau} d\tau + \int_{-\infty}^0 e^{c\tau} e^{-i\omega\tau} d\tau \right] \\ &= \frac{\sigma_{\kappa}^2}{2\pi} \left[\int_0^{+\infty} e^{-(c+i\omega)\tau} d\tau + \int_{-\infty}^0 e^{-(-c+i\omega)\tau} d\tau \right] = \frac{\sigma_{\kappa}^2}{2\pi} \left[\frac{1}{c+i\omega} - \frac{1}{-c+i\omega} \right] \\ &= \frac{\sigma_{\kappa}^2}{2\pi} \left[\frac{2c}{c^2 + \omega^2} \right] = \frac{c\sigma_{\kappa}^2}{\pi(c^2 + \omega^2)}. \end{aligned}$$

Supondo que o processo aleatório seja definido sobre um intervalo unidimensional $[0, L]$, a relação entre os autovalores e as autofunções é expressa através de (1.4) como

$$\int_0^L \sigma_{\kappa}^2 e^{-|x-y|/\eta} \phi(y) dy = \lambda \phi(x). \quad (1.12)$$

a qual pode ser escrita na forma

$$\int_0^x e^{-(x-y)/\eta} \phi(y) dy + \int_x^L e^{(x-y)/\eta} \phi(y) dy = \frac{\lambda}{\sigma_{\kappa}^2} \phi(x). \quad (1.13)$$

Utilizando a fórmula integral de Leibniz para calcular a derivada da equação (1.13) com respeito a x obtemos

$$-\frac{1}{\eta} \int_0^x e^{-(x-y)/\eta} \phi(y) dy + \frac{1}{\eta} \int_x^L e^{(x-y)/\eta} \phi(y) dy = \frac{\lambda}{\sigma_\kappa^2} \phi'(x). \quad (1.14)$$

Diferenciando (1.14) novamente com respeito a x chegamos a

$$-\frac{1}{\eta} \left[-\frac{1}{\eta} \int_0^x e^{-(x-y)/\eta} \phi(y) dy + \phi(x) \right] + \frac{1}{\eta} \left[\frac{1}{\eta} \int_x^L e^{(x-y)/\eta} \phi(y) dy - \phi(x) \right] = \frac{\lambda}{\sigma_\kappa^2} \phi''(x). \quad (1.15)$$

Reagrupando os termos da equação (1.15) obtemos

$$\lambda \phi''(x) + \gamma^2 \phi(x) = 0 \quad 0 \leq x \leq L, \quad (1.16)$$

com

$$\gamma^2 = \frac{2\eta\sigma_\kappa^2 - \lambda}{\lambda\eta^2}. \quad (1.17)$$

Escolhendo $x = 0$ e $x = L$ em (1.14) conseguimos as condições de contorno

$$\begin{aligned} \eta \cdot \phi'(0) - \phi(0) &= 0 \\ \eta \cdot \phi'(L) + \phi(L) &= 0. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Como $\gamma^2 > 0$, a equação (1.16) possui a seguinte solução geral:

$$\phi(x) = a \cos(\gamma x) + b \sin(\gamma x). \quad (1.19)$$

Aplicando as condições e contorno (1.18), obtemos um sistema de equações da forma

$$\begin{cases} a - \eta\gamma b = 0 \\ a[-\eta\gamma \sin(\gamma L) + \cos(\gamma L)] + b[\eta\gamma \cos(\gamma L) + \sin(\gamma L)] = 0. \end{cases} \quad (1.20)$$

Limitando-nos a soluções não triviais, podemos reduzir a equação (1.20) a

$$(\eta^2\gamma^2 - 1)\sin(\gamma L) = 2\eta\gamma \cos(\gamma L). \quad (1.21)$$

Fixados η e L , γ pode ser obtido de (1.21) gerando com isto uma seqüência γ_n , $n = 1, 2, \dots$. Os autovalores λ_n podem ser encontrados a partir dos valores correspondentes de γ_n de acordo com a definição (1.17):

$$\lambda_n = \frac{2\eta\sigma_\kappa^2}{(\eta^2\gamma_n^2 + 1)}. \quad (1.22)$$

Certamente diferentes γ_n implicam em diferentes coeficientes a e b na equação (1.19) de forma que podemos escrever as autofunções associadas a γ_n ou λ_n como

$$\phi_n(x) = a_n \cos(\gamma_n x) + b_n \sin(\gamma_n x) \quad (1.23)$$

cujos a_n e b_n são determinados utilizando a condição (1.21) e o fato das autofunções serem normalizadas, isto é, $\int_D \phi_n^2(x) dx = 1$. Logo

$$\begin{aligned} a_n &= \eta \gamma_n b_n \\ b_n &= \frac{1}{\sqrt{(\eta^2 \gamma_n^2 + 1)L/2 + \eta}}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Observamos que enquanto λ_n é proporcional a σ_κ^2 , as autofunções $\phi_n(x)$ independem de σ_κ^2 , dependendo somente do tamanho do domínio L e do comprimento de correlação η . Se L for muito grande a equação (1.21) poderá ser instável. Neste caso, propomos uma normalização do domínio a fim de que a equação (1.21) seja resolvida mais facilmente, ou seja, $x^* = x/L$, $\gamma^* = \gamma L$ e $\eta^* = \eta/L$ (Zhang e Lu, 2004). Assim (1.21) resulta em

$$((\eta^* \gamma^*)^2 - 1) \sin(\gamma^*) = 2\eta^* \gamma^* \cos(\gamma^*), \quad (1.25)$$

e γ^* depende somente de η^* , o comprimento de correlação em relação ao tamanho do domínio particionado e os termos correspondentes serão dados por $\lambda_n^* = \lambda_n/L$, $a_n^* = a_n \sqrt{L}$, $b_n^* = b_n \sqrt{L}$ e $\phi_n^*(x) = \phi_n(x) \sqrt{\lambda}$. Conseqüentemente, $\sqrt{\lambda} \phi_n(x) = \sqrt{\lambda^*} \phi_n^*(x)$ e os termos λ^* e $\phi_n^*(x)$ podem ser derivados da equação (1.25) sem precisar voltar ao domínio original. Uma das vantagens desta formulação é que a estrutura das autofunções dependerá somente da razão entre o comprimento de correlação e o tamanho do domínio, a qual não pode ser maior que 1, visto que a incerteza do sistema aumenta quando o comprimento do domínio é maior que o comprimento de correlação (Ji et al., 2004).

Deve-se enfatizar, que necessitamos resolver somente uma equação transcendente enquanto em Ghanem e Spanos (1991) se resolve duas equações transcendentais

$$\eta \gamma \operatorname{tg}(\gamma L) - 1 = 0$$

$$\eta \gamma + \operatorname{tg}(\gamma L) = 0,$$

considerando-se γ_n da primeira equação para n par e γ_n da segunda equação para n ímpar.

De forma similar, se processa para os autovalores e as respectivas autofunções

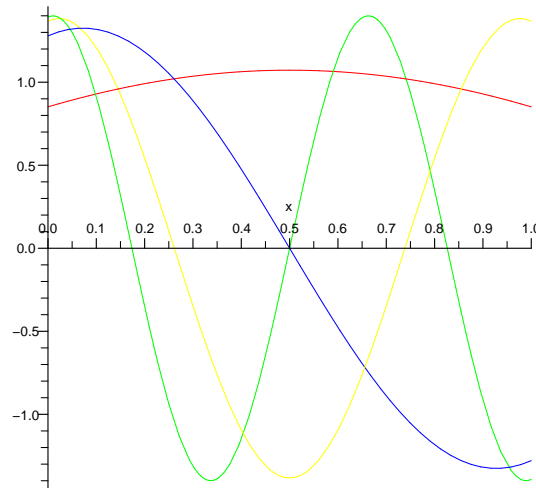


Figura 1.1: Autofunções $\phi_n(x)$ correspondentes aos N autovalores da covariância exponencial com $L = 1$, $N = 4$, $\eta = 1$ e $\sigma_\kappa^2 = 1$.

Fig. 1.1 mostra o gráfico das autofunções $\phi_n(x)$ calculadas através da equação (1.23) com $n = 1, \dots, 4$.

A aproximação proposta à função de covariância C_κ é dada pela função

$$C_{\kappa_N}(\mathbf{x}; \mathbf{y}) = \sum_{k=1}^N \lambda_k \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{y}).$$

Comparamos $C_\kappa(\mathbf{x}; \mathbf{y})$ e $C_{\kappa_N}(\mathbf{x}; \mathbf{y})$ para diferentes valores de N e observamos que a aproximação na covariância poderá produzir erros na solução de uma equação diferencial estocástica (vide Figs. 1.2, 1.3 e 1.4).

1.2.2 Espectro não racional

Não existe um método geral para a solução da equação integral (1.4) no caso do espectro não racional. Diversas destas soluções tem sido investigadas e soluções explícitas são obtidas para certos núcleos de covariância (Ghanem e Spanos, 1991).

Tomemos por exemplo o núcleo de covariância de um processo de Wiener dado por

$$C_\kappa(x; y) = \min(x, y) \quad (x, y) \in [0, L] \times [0, L]. \quad (1.26)$$

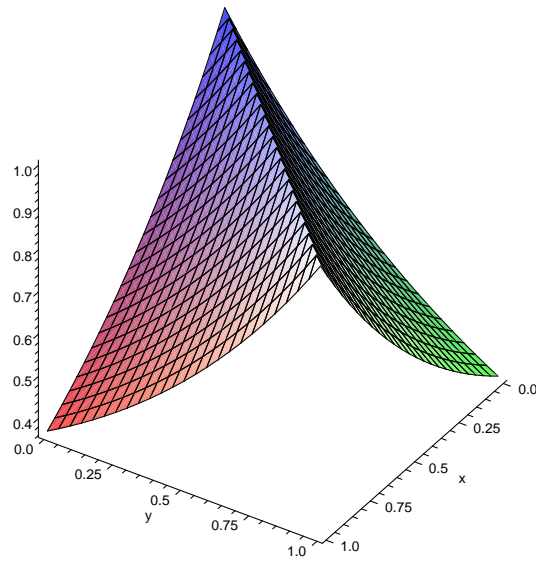


Figura 1.2: Gráfico da função $C_{\kappa}(x; y) = \sigma_{\kappa}^2 e^{-|x-y|/\eta}$ quando $\eta = 1$, $\sigma_{\kappa}^2 = 1$ e $L = 1$

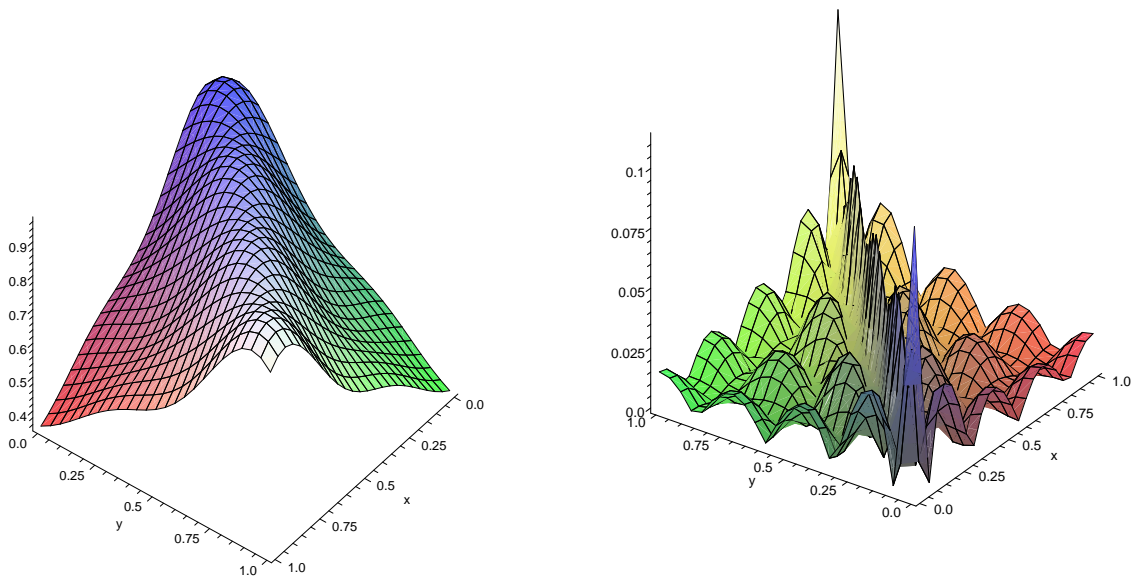


Figura 1.3: Gráfico da função de covariância exponencial C_{κ_N} (esquerda) e superfície de erro absoluto entre as covariâncias C_{κ} e C_{κ_N} (direita) com $N = 4$. Erro máximo = 0.1126.

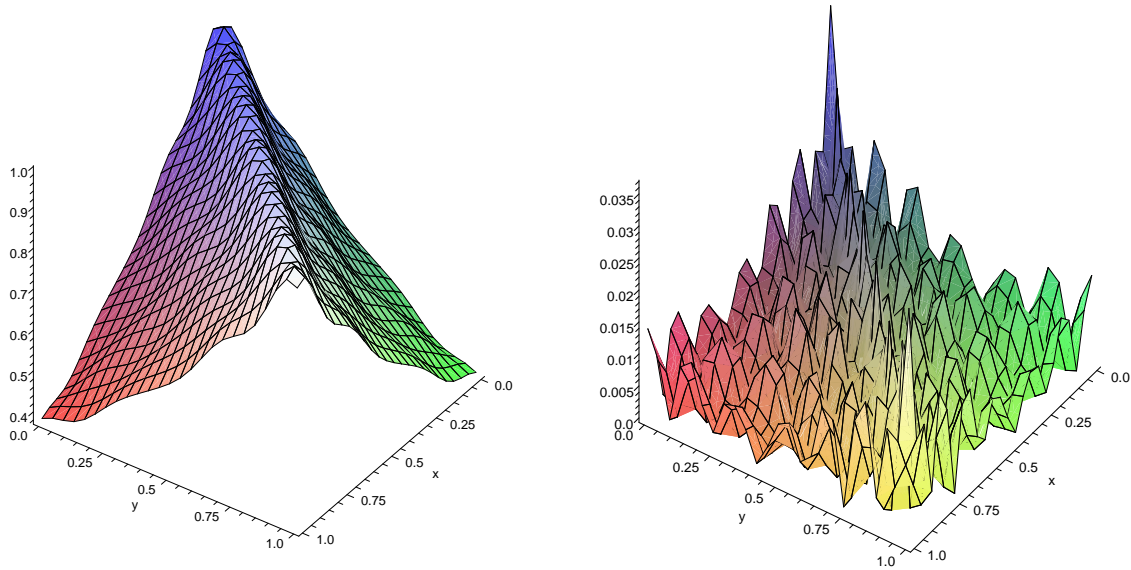


Figura 1.4: Gráfico da função de covariância exponencial C_{κ_N} (esquerda) e superfície de erro absoluto entre as covariâncias C_{κ} e C_{κ_N} (direita) com $N = 10$. Erro máximo = 0.0364.

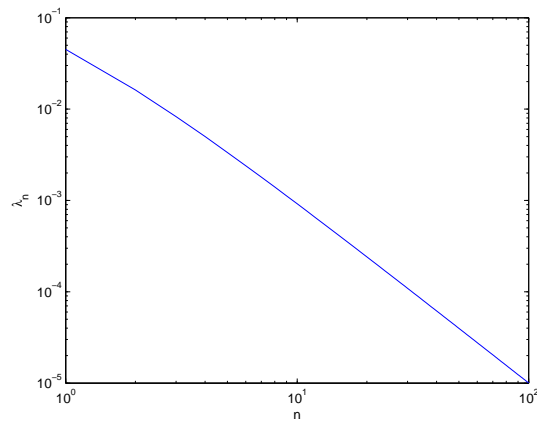


Figura 1.5: Gráfico de decaimento dos autovalores da covariância de Wiener com $N = 100$ e $L = 1$.

As autofunções e os autovalores são expressos por

$$\phi_n(x) = \sqrt{2} \text{sen}\left(\frac{x}{\sqrt{\lambda_n}}\right) \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.27)$$

e

$$\lambda_n = \frac{4L^2}{\pi^2(2n + 1)^2} \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.28)$$

Observe que este processo é não estacionário, enfatizando a generalidade da expansão de Karhunen-Loève para tais processos.

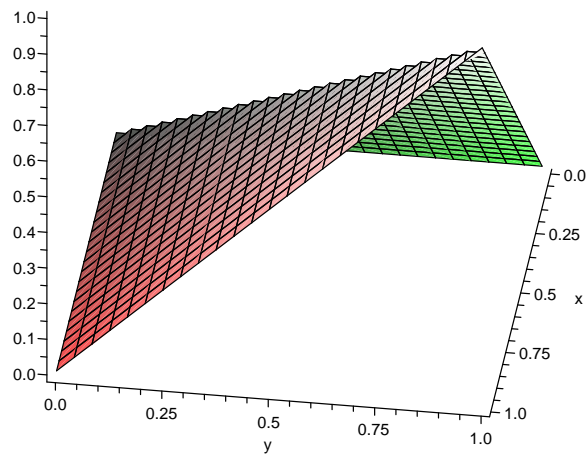


Figura 1.6: Gráfico da função de covariância de Wiener $C_\kappa(x; y) = \min(x, y)$.

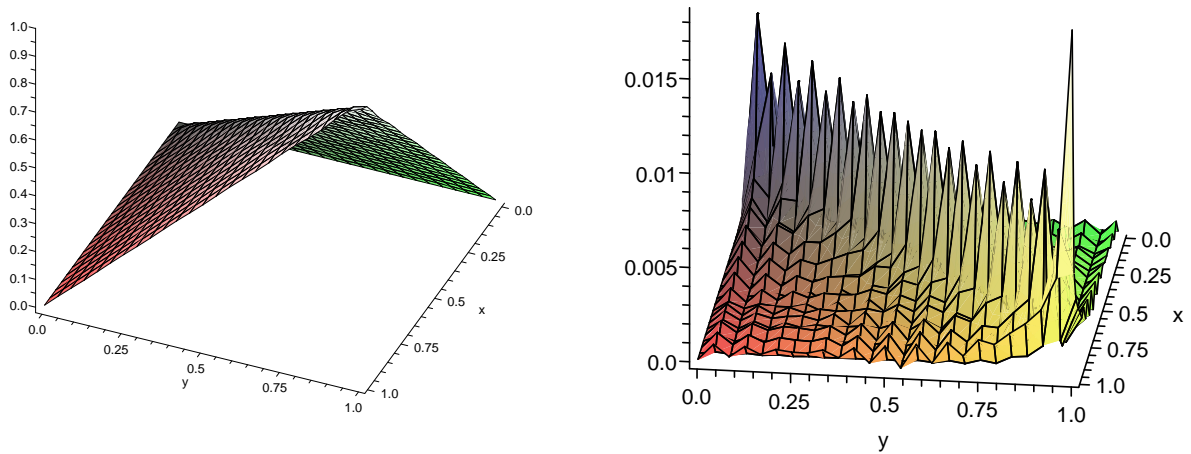


Figura 1.7: Gráfico da função de covariância de Wiener C_{κ_N} (esquerda) e superfície de erro absoluto entre as covariâncias C_κ e C_{κ_N} de Wiener (direita) com $N = 10$. Erro máximo = 0.01743137980.

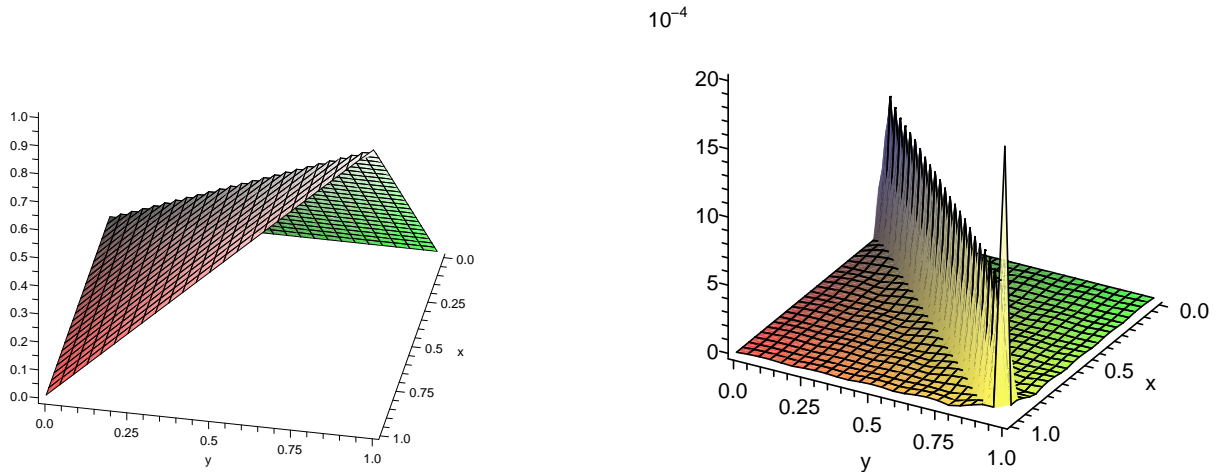


Figura 1.8: Gráfico da função de covariância de Wiener C_{κ_N} (esquerda) e superfície de erro absoluto entre as covariâncias C_{κ} e C_{κ_N} de Wiener (direita) com $N = 100$. Erro máximo = 0.001206102481.

Note pelas Figs. 1.7 e 1.8 que o erro absoluto de aproximação da covariância de Wiener passou da ordem de 10^{-2} com $N = 10$ para ordem 10^{-3} com $N = 100$. Isto mostra que podemos ter uma boa aproximação com o aumento de termos na expansão.

Os processos com função de covariância dada por

$$C_{\kappa}(x; y) = e^{-2x} \cdot e^{|x-y|/b} \quad (1.29)$$

são importantes na literatura. Este processo é modulado não estacionário e as autofunções e os autovalores da expressão (1.29) são

$$\phi_n(x) = J_{1/b} \left(\frac{2e^{-x}}{\sqrt{b\lambda_n}} \right),$$

e $\lambda_n = 4/b r_n^2$ respectivamente tal que $J_k(\cdot)$ é função de Bessel de ordem k da forma

$$J_{1/b}(r_n) = 0; \quad r_n > 0, \quad n = 1, 2, \dots$$

Para maiores detalhes vide Juncosa (1945). Outros processos usados em engenharia possuem núcleo de covariância dado pela equação

$$C_{\kappa}(x; y) = \frac{\text{sen}(k(x-y))}{\pi(x-y)}, \quad (1.30)$$

cujo k é uma constante arbitrária. Este processo representa um ruído branco truncado com densidade espectral dissipando-se nos intervalos em que a função é constante. Para este processo, as autofunções são dadas por funções de onda esferoidal angular em que dois conjuntos de coordenadas são obtidos por resolver curvas de coordenadas cilíndricas sobre os eixos x e z . O terceiro conjunto de coordenadas é formado pelos planos passando através destes eixos (Slepian e Pollak, 1961).

Outro processo de ruído branco usado para caracterizar a variabilidade temporal ou espacial do meio estocástico é dado pela função de covariância

$$C_{\kappa}(x; y) = \frac{c}{|x - y|^{\beta}}, \quad (1.31)$$

onde $c > 0$ é uma constante e $\beta \geq 0$ é conhecido como expoente de Hurst. Note que esta função de covariância depende de uma lei de potência β que tem como característica identificar o grau de heterogeneidade do meio em relação a escala de comprimento. Valores grandes de β descrevem a heterogeneidade em pequenas escalas de comprimento enquanto valores pequenos de β enfatizam heterogeneidade nas grandes escalas (Aguilar, 2008). Além disso, esta covariância não é um processo de variância finita, necessitando de um "cut-off".

Uma última observação está na escolha do domínio D da definição dos processos aleatórios a serem investigados. Considerar D um domínio limitado parece a escolha mais simples para o processo observado. Claramente esta escolha induz a uma hipótese ergódica para um processo que envolve um conjunto de comprimento infinito. Se a ergodicidade é necessária para algum problema em particular então, ela poderá ser usada para estender os limites de integração da equação (1.4) para o infinito. Esta modificação poderá ser necessária numericamente se uma solução explícita da equação integral é disponível somente em domínio ilimitado (Zhang, 2002).

1.2.3 Problema Estático Unidimensional

Esta seção apresenta um modelo discreto de deformação de uma barra segundo Ghanem e Spanos (1991). Consideremos uma barra de comprimento L presa por uma extremidade fixa

e sujeita a uma carga estática $f(x; \omega)$. Suponhamos que o módulo de rigidez da barra é dado por $\kappa = E \cdot I$, em que E é o módulo de elasticidade e I o momento de inércia. Neste caso κ representará um processo aleatório Gaussiano fixado sobre um domínio espacial ocupado pela barra.

Seja $\bar{\kappa}$ e $C_\kappa(x; y)$ a média e covariância, respectivamente, do módulo de rigidez da barra. A energia de deformação armazenada na barra para o caso unidimensional pode ser escrita como

$$V = \frac{1}{2} \int_L \sigma(x) \epsilon(x) dx \quad (1.32)$$

em que $\sigma(x)$ e $\epsilon(x)$ são componentes de tensão e deformação da barra, respectivamente. A tensão e a deformação estão relacionadas através da Lei de Hooke pela equação

$$\sigma = \kappa \cdot \epsilon.$$

Deste modo, a equação (1.32) é expressa por

$$V = \frac{1}{2} \int_L \kappa(x; \omega) \left(\frac{\partial^2 u(x; \omega)}{\partial x^2} \right)^2 dx \quad \omega \in \Omega, \quad (1.33)$$

com $\kappa(x; \omega)$ sendo o módulo de rigidez aleatório e $u(x; \omega)$ o deslocamento aleatório transversal da barra. Vamos dividir a barra em N segmentos e enumerar os $N + 1$ vértices da esquerda para a direita, atribuindo ao primeiro vértice (na extremidade fixa) a posição zero. Aproximamos a função $u(x, \omega)$ na forma

$$u(x; \omega) \approx \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{u}_\alpha(\omega) \mathbf{P}_\alpha(x), \quad (1.34)$$

sendo $\mathbf{u}_\alpha(\omega)$ é um vetor bidimensional de coeficientes desconhecidos representando o deslocamento e a inclinação no vértice x_α . Além disso, $\mathbf{P}_\alpha(x)$ é um vetor de polinômios cúbicos de Hermite. $\mathbf{P}_\alpha(x)$ é não nulo apenas nos segmentos adjacentes ao vértice x_α .

Substituindo a equação (1.34) dentro da equação (1.33) obtemos

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N \int_L \left(\mathbf{u}_\alpha(\omega) \frac{\partial^2 \mathbf{P}_\alpha(x)}{\partial x^2} \right) \kappa(x; \omega) \left(\mathbf{u}_\beta(\omega) \frac{\partial^2 \mathbf{P}_\beta(x)}{\partial x^2} \right) dx. \quad (1.35)$$

De maneira similar, o trabalho da força externa aplicada sobre a barra é dada por

$$V^\diamond = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{u}_\alpha(\omega) \int_L \mathbf{P}_\alpha(x) f(x; \omega) dx. \quad (1.36)$$

Para encontrarmos coeficientes $\mathbf{u}_\alpha(\omega)$ dentro de um limite prescrito de deslocamento, é necessário que a igualdade sobre a variação da energia de deformação e a variação de energia potencial externa feita pelas forças elásticas seja válida, ou seja, devemos selecionar vetores de coeficientes $\mathbf{u}_\alpha(\omega)$ que minimizam a energia potencial total através da equação

$$\frac{\partial(V)}{\partial \mathbf{u}_\alpha(\omega)} - \frac{\partial(V^\circ)}{\partial \mathbf{u}_\alpha(\omega)} = 0. \quad (1.37)$$

O primeiro termo representa a variação de energia de deformação enquanto o segundo termo representa a variação de energia potencial externa. A equação (1.37) significa que o equilíbrio passa ser assegurado se a energia potencial total for estacionária para variações de deslocamento. Em meios elásticos, pode-se mostrar que a energia potencial total não é somente estacionária como também mínima.

Substituindo a equação (1.35) e (1.36) dentro da equação (1.37) temos

$$\sum_{\beta=1}^N \mathbf{u}_\alpha(\omega) \int_L \left(\frac{\partial^2 \mathbf{P}_\alpha}{\partial x^2}(x) \right) \kappa(x; \omega) \left(\frac{\partial^2 \mathbf{P}_\beta}{\partial x^2}(x) \right) dx = \int_L \mathbf{P}_\alpha(x) f(x; \omega) dx; \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (1.38)$$

Assim obtemos um sistema de equações em blocos da forma

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (1.39)$$

tal que

$$\mathbf{K}_{\alpha\beta} = \int_L \left(\frac{\partial^2 \mathbf{P}_\alpha}{\partial x^2}(x) \right) \kappa(x; \omega) \left(\frac{\partial^2 \mathbf{P}_\beta}{\partial x^2}(x) \right) dx,$$

$$\mathbf{u}_\alpha = \mathbf{u}_\alpha(\omega)$$

e

$$\mathbf{f}_\alpha = \int_L \mathbf{P}_\alpha(x) f(x; \omega) dx.$$

As integrais acima envolvem o processo aleatório $\kappa(x; \omega)$ que impossibilita o uso de regras de integração porque a princípio não há como separar a variável espacial x da variável amostral ω . Este problema pode ser resolvido expandindo $\kappa(x; \omega)$ em uma expansão truncada de Karhunen-Loève da forma

$$\kappa(x; \omega) = \bar{\kappa}(x) + \sum_{k=1}^M \xi_k(\omega) \sqrt{\lambda_k} \phi_k(x) \quad (1.40)$$

com $\xi_k(\omega)$, λ_k e $\phi_k(x)$ como definidas na subseção 1.1. Substituindo (1.40) em (1.39) segue

$$\sum_{k=0}^M \xi_k(\omega) \mathbf{K}^{(k)} \mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (1.41)$$

em que

$$\mathbf{K}_{\alpha\beta}^{(k)} = \int_L \sqrt{\lambda_k} \phi_k(x) \left(\frac{\partial^2 \mathbf{P}_\alpha}{\partial x^2}(x) \right) \left(\frac{\partial^2 \mathbf{P}_\beta}{\partial x^2}(x) \right) dx, \quad k = 1, \dots, M, \quad (1.42)$$

$$\mathbf{K}_{\alpha\beta}^{(0)} = \int_L \bar{\kappa}(x) \left(\frac{\partial^2 \mathbf{P}_\alpha}{\partial x^2}(x) \right) \left(\frac{\partial^2 \mathbf{P}_\beta}{\partial x^2}(x) \right) dx \quad (1.43)$$

e

$$\xi_0 \equiv 1.$$

A integração na equação (1.42) pode ser realizada analiticamente se as autofunções do núcleo de covariância forem conhecidas. E geral, pode-se usar um esquema de quadratura se os autovetores forem calculados numericamente em pontos espaciais discretos. Para prosseguir na solução do sistema de equações (1.39), vamos expressar o vetor \mathbf{u} também como uma expansão em termos de $\xi_k(\omega)$, conforme discutido a seguir.

1.3 Caos polinomial

Pelas discussões anteriores ficou claro que a implementação da expansão de Karhunen-Loève requer o conhecimento da função de covariância do processo que está sendo expandido. A expansão não poderá ser implementada enquanto a função de covariância, e portanto, as correspondentes autofunções não forem conhecidas.

Em particular, como não conhecemos a priori a função de covariância da solução \mathbf{u} da equação (1.39), não podemos expressar \mathbf{u} como uma expansão de Karhunen-Loève para em seguida calcular os coeficientes da expansão. Devemos buscar uma expansão alternativa, que pode envolver uma base de funções aleatórias conhecidas com coeficientes determinísticos desconhecidos, minimizando alguma norma de erro resultante de uma representação finita. Para esclarecer esta idéia, sugere-se que a solução da equação (1.39) seja reescrita na forma

$$\mathbf{u} = h[\mathbf{x}; \xi_1(\omega), \xi_2(\omega), \dots], \quad (1.44)$$

em que $h[\cdot; \cdot]$ é um função não linear de seus argumentos. Em seções anteriores notamos que os parâmetros aleatórios foram substituídos pelas correspondentes expansões de Karhunen-Loève. Isto sugere que façamos uma expansão de $h[\cdot; \cdot]$ em termos de variáveis aleatórias $\xi_i(\omega)$.

Baseado nas idéias de Wiener (1938), Cameron e Martin (1947) construíram uma base ortogonal de funcionais não lineares em termos de funcionais de Fourier-Hermite obtendo com isso funcionais não lineares do movimento Browniano. Depois disso, Itô (1951) dá origem a Integral Múltipla de Wiener. Yasui (1979), Engels (1983) e Kallianpur (1980) mostraram que a série de Wiener, a expansão de Cameron-Martin e a expansão de Itô são equivalentes e superiores à série de Volterra em termos das propriedades da convergência e sua aplicabilidade.

Além da matemática (Kallianpur, 1980), a teoria do caos polinomial está presente na comunicação (Yasui, 1979), neuro-ciência (Paley e Poggio, 1977), engenharia mecânica (Jahedi e Ahmadi, 1983) e física estatística (Imamura e Meecham, 1965).

1.3.1 Definição e Propriedades

1.1 Definição. *Seja $\{\xi_i(\omega)\}_{i=1}^{\infty}$ um conjunto de variáveis aleatórias Gaussianas ortonormais. Considere o espaço $\hat{\Gamma}_P$ de todos os polinômios em $\{\xi_i(\omega)\}_{i=1}^{\infty}$ de grau $\leq P$. Seja Γ_P o conjunto de todos os polinômios em $\hat{\Gamma}_P$ ortogonais a $\hat{\Gamma}_{P-1}$. O conjunto Γ_P e o subespaço $\bar{\Gamma}_P$ gerado por Γ_P são denominados caos polinomial e caos homogêneo de ordem P , respectivamente.*

De acordo com a Definição 1.1 o caos polinomial de alguma ordem P consiste nos polinômios ortogonais de ordem P envolvendo alguma combinação de variáveis aleatórias $\{\xi_i(\omega)\}_{i=1}^{\infty}$. Em vista disso, o número de polinômios de ordem P que envolvem uma variável aleatória específica do conjunto $\{\xi_i(\omega)\}_{i=1}^{\infty}$ aumenta com o valor de P . Sabendo-se que as variáveis aleatórias são funções, resulta que o caos polinomial seja um conjunto de funções de funções, isto é, um conjunto de funcionais.

O caos polinomial é um subespaço de $L^2_{\mu}(\Omega)$ e um anel com respeito a multiplicação de

operadores, ou seja, $H_p(H_l(\omega)) = H_p(\omega)H_l(\omega)$. Fazendo $\wedge(\boldsymbol{\xi})$ como espaço de Hilbert gerado por $\{\xi_i(\omega)\}$ e $\Phi_{\wedge(\boldsymbol{\xi})}$ o anel das funções em $H_P(\omega)$ gerado por $\wedge(\boldsymbol{\xi})$, podemos mostrar que $\Phi_{\wedge(\boldsymbol{\xi})}$ é denso em $L_\mu^2(\Omega)$. Isto significa que as funções em $L_\mu^2(\Omega)$ podem ser aproximadas por elementos em $\Phi_{\wedge(\boldsymbol{\xi})}$. Assim, se algum elemento $\mathbf{u}(\omega) \in L_\mu^2(\Omega)$ então

$$\mathbf{u}(\omega) = \sum_{P \geq 0} \sum_{n_1 + \dots + n_r = P} \sum_{\eta_1, \dots, \eta_r} \mathbf{a}_{\eta_1, \dots, \eta_r}^{n_1, \dots, n_r} H_P(\xi_{\eta_1}(\omega), \dots, \xi_{\eta_r}(\omega)), \quad (1.45)$$

em que $H_P(\cdot)$ representa um elemento do caos polinomial de ordem P . O subscrito n_i refere-se ao número de ocorrências de $\xi_{\eta_i}(\omega)$ no argumento listado por $H_P(\cdot)$. Este subscrito provê a possibilidade de repetir argumentos nos polinômios listados pelo polinômio $H_P(\cdot)$ e preservar a generalidade da expansão dada pela equação (1.45). A expansão do caos polinomial que aparece na equação (1.45) envolve r variáveis aleatórias distintas do conjunto $\{\xi_i(\omega)\}_{i=1}^\infty$, com a i -ésima variável $\xi_i(\omega)$ tendo multiplicidade n_i e o número de variáveis envolvidas igual a ordem P do caos polinomial. Além disso, considera-se $H_P(\cdot)$ como um polinômio simétrico em relação a seus argumentos.

A forma dos coeficientes que aparece na equação (1.45) pode então ser simplificada resultando na seguinte expansão

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\omega) &= \mathbf{a}_0 H_0 + \sum_{\eta_1=1}^{\infty} \mathbf{a}_{\eta_1} H_1(\xi_{\eta_1}) + \sum_{\eta_1=1}^{\infty} \sum_{\eta_2=1}^{\eta_1} \mathbf{a}_{\eta_1 \eta_2} H_2(\xi_{\eta_1}, \xi_{\eta_2}) \\ &+ \sum_{\eta_1=1}^{\infty} \sum_{\eta_2=1}^{\eta_1} \sum_{\eta_3=1}^{\eta_2} \mathbf{a}_{\eta_1 \eta_2 \eta_3} H_3(\xi_{\eta_1}, \xi_{\eta_2}, \xi_{\eta_3}) \\ &+ \sum_{\eta_1=1}^{\infty} \sum_{\eta_2=1}^{\eta_1} \sum_{\eta_3=1}^{\eta_2} \sum_{\eta_4=1}^{\eta_3} \mathbf{a}_{\eta_1 \eta_2 \eta_3 \eta_4} H_4(\xi_{\eta_1}, \xi_{\eta_2}, \xi_{\eta_3}, \xi_{\eta_4}) + \dots \end{aligned} \quad (1.46)$$

Os limites no somatório na equação (1.46) refletem a simetria com respeito a seus argumentos. O caos polinomial de ordem ≥ 1 possui polinômios de média zero e para ordens distintas estes polinômios são ortogonais, assim como polinômios de mesma ordem, porém, com argumentos distintos. Observa-se também, que a equação (1.46) pode ser reescrita na forma

$$\mathbf{u}(\omega) = \sum_{j=0}^{\infty} \mathbf{c}_j \psi_j(\boldsymbol{\xi}(\omega)), \quad (1.47)$$

onde existe uma correspondência injetiva entre $\psi_j(\cdot)$ e $H_P(\cdot)$, e entre os coeficientes \mathbf{c}_j e $\mathbf{a}_{\eta_1, \dots, \eta_r}$.

Como definido anteriormente, cada função do caos polinomial depende de um conjunto infinito $\{\xi_i\}_{i=1}^{\infty}$, ou seja, um polinômio com infinitos termos. No sentido computacional, este conjunto infinito necessita ser substituído por um finito. Desta forma, parece lógico introduzir o conceito de caos polinomial de dimensão finita. Em particular, o caos polinomial M -dimensional de ordem P é um subconjunto de Γ_P o qual possui somente M variáveis não correlacionadas. Quando $M \rightarrow \infty$ obtemos o conjunto Γ_P . Neste caso, as propriedades de convergência da representação no caso M -dimensional dependem da escolha do subconjunto de variáveis aleatórias em $\{\xi_i\}_{i=1}^{\infty}$. Na análise em questão, esta escolha será baseada na expansão de Karhunen-Loève.

1.3.2 Projeção do caos polinomial finita e polinômios Hermitianos

Podemos mostrar que os polinômios $H_P(\cdot)$ são ortogonais com respeito à medida de probabilidade Gaussiana, o que torna cada $H_P(\cdot)$ idêntico a um polinômio de Hermite multidimensional (Holden et al., 1996). Esta equivalência é dada pela ortogonalidade com respeito ao operador $E(\cdot)$ definido em (1.1) em que a medida de probabilidade Gaussiana é expressa por

$$\exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{\xi}\right)d\boldsymbol{\xi}, \quad (1.48)$$

com $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_M)$. Este fato sugere um método mais eficiente para construir o caos polinomial através dos polinômios de Hermite. Assim, o caos polinomial $H_P(\cdot)$, M -dimensional de ordem P pode ser expresso por

$$\psi_q(\boldsymbol{\xi}) = H_P(\xi_{\eta_1^q}, \dots, \xi_{\eta_M^q}) = \prod_{k=1}^M H_{\eta_k^q}(\xi_k(\omega)), \quad (1.49)$$

com $\eta^q = (\eta_1^q, \dots, \eta_M^q) \in \mathbb{N}^M$ satisfazendo $\sum_{k=1}^M \eta_k^q \leq P$ e

$$H_P(\xi_{\eta_1}, \dots, \xi_{\eta_P}) = (-1)^P \exp\left(\frac{\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{\xi}}{2}\right) \frac{\partial^P}{\partial \xi_{\eta_1} \dots \partial \xi_{\eta_P}} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{\xi}}{2}\right). \quad (1.50)$$

Sem perda de generalidade, faça $\eta^q = (0, \dots, 0)$ quando $q = 1$. Por exemplo, para $M = 2$ a solução unidimensional $u(\omega)$ pode ser expandida na sua forma total como

$$\begin{aligned} u(\omega) = & a_0 H_0 + a_1 H_1(\xi_1) + a_2 H_1(\xi_2) + a_{11} H_2(\xi_1, \xi_1) + a_{12} H_2(\xi_1, \xi_2) + a_{22} H_2(\xi_2, \xi_2) \\ & + a_{111} H_3(\xi_1, \xi_1, \xi_1) + a_{211} H_3(\xi_2, \xi_1, \xi_1) + a_{221} H_3(\xi_2, \xi_2, \xi_1) + a_{222} H_3(\xi_2, \xi_2, \xi_2) + \dots \end{aligned} \quad (1.51)$$

a qual possui correspondência biunívoca com a expressão

$$\begin{aligned} u(\omega) = & c_0 \psi_0 + c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + c_3 \psi_3 + c_4 \psi_4 + c_5 \psi_5 + c_6 \psi_6 \\ & + c_7 \psi_7 + c_8 \psi_8 + c_9 \psi_9 + \dots \end{aligned} \quad (1.52)$$

Para o caso unidimensional, o caos polinomial normalizado de ordem n associado à $\{\psi_n\}$ é definido como

$$h_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} H_n(x), \quad (1.53)$$

em que $H_n(x)$ é expresso por

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2/2}), \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.54)$$

cuja função geradora é

$$\exp\left(\frac{-t^2}{2} + tx\right) = \sum_{n \geq 0} \frac{t^n}{n!} H_n(x). \quad (1.55)$$

De (1.54) e (1.55) obtemos as seguintes relações de recorrência:

$$\frac{d}{dx} H_n(x) = n H_{n-1}(x). \quad (1.56)$$

e

$$H_{n+1}(x) = x H_n(x) - n H_{n-1}(x) \quad (1.57)$$

Desta maneira, os primeiros polinômios (vide Fig. 1.9) podem ser calculados facilmente, por exemplo:

$$H_0 = 1, \quad H_1(x) = x, \quad H_2(x) = x^2 - 1, \quad H_3(x) = x^3 - 3x, \quad H_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3, \dots$$

Observamos que o caos polinomial M -dimensional normalizado $\{\psi_q\}$, ($q = 1, \dots, M$) é ortonormal com respeito à medida de probabilidade Gaussiana, tanto que se \mathbf{x} é uma variável aleatória Gaussiana M -dimensional temos

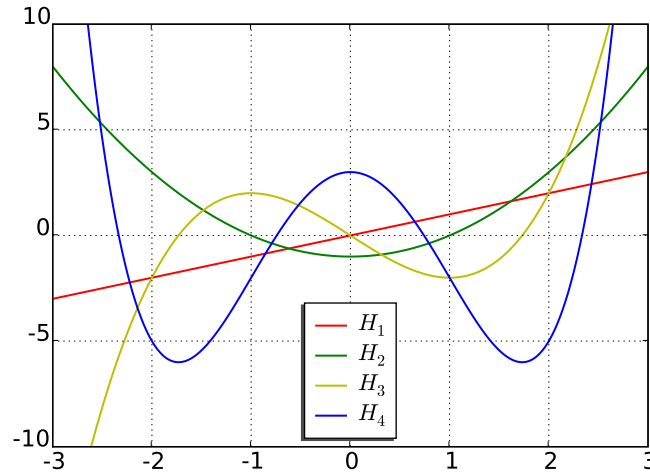


Figura 1.9: Funções $H_n(x)$, $n = 1, \dots, 4$

$$E(\psi_q(\mathbf{x})\psi_r(\mathbf{x})) = \int_{\mathbb{R}^M} \psi_q(\mathbf{x})\psi_r(\mathbf{x}) \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^M} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}\|^2}{2}\right) d\mathbf{x} = \delta_{qr}. \quad (1.58)$$

Como a solução $\mathbf{u}(\omega) = \mathbf{u}(\xi_1(\omega), \dots, \xi_M(\omega)) \in L^2_\mu(\Omega)$, então podemos aproximar a expansão de \mathbf{u} em (1.46) como uma projeção do caos polinomial normalizado de ordem P da forma

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\omega) &= \mathbf{a}_0 h_0 + \sum_{\eta_1=1}^{\infty} \mathbf{a}_{\eta_1} h_1(\xi_{\eta_1}) + \sum_{\eta_1=1}^{\infty} \sum_{\eta_2=1}^{\eta_1} \mathbf{a}_{\eta_1 \eta_2} h_2(\xi_{\eta_1}, \xi_{\eta_2}) \\ &+ \sum_{\eta_1=1}^{\infty} \sum_{\eta_2=1}^{\eta_1} \sum_{\eta_3=1}^{\eta_2} \mathbf{a}_{\eta_1 \eta_2 \eta_3} h_3(\xi_{\eta_1}, \xi_{\eta_2}, \xi_{\eta_3}) \\ &+ \sum_{\eta_1=1}^{\infty} \sum_{\eta_2=1}^{\eta_1} \sum_{\eta_3=1}^{\eta_2} \sum_{\eta_4=1}^{\eta_3} \mathbf{a}_{\eta_1 \eta_2 \eta_3 \eta_4} h_4(\xi_{\eta_1}, \xi_{\eta_2}, \xi_{\eta_3}, \xi_{\eta_4}) + \dots, \\ &\approx \sum_{q=0}^Q \mathbf{c}_q \psi_q(\xi_1(\omega), \dots, \xi_M(\omega)) \end{aligned} \quad (1.59)$$

cujo vetor \mathbf{c}_q de mesmo comprimento do vetor solução $\mathbf{u}(\omega)$ e a função $\psi_q(\{\xi_{\eta_q}\})$ são idênticos ao vetor $\mathbf{a}_{\eta_1 \dots \eta_P}$ e ao caos polinomial normalizado $h_P(\xi_{\eta_1}, \dots, \xi_{\eta_P})$ respectivamente. O termo Q representa o número total de todos os polinômios do caos usados na expansão de ordem P e pode ser calculado através da equação

$$Q = 1 + \sum_{s=1}^P \frac{1}{s!} \prod_{r=0}^{s-1} (M + r),$$

onde o termo $P = 0$ é excluído (Ghanem e Spanos, 1991).

Introduzindo a equação (1.59) na equação (1.41) obtemos

$$\sum_{q=0}^Q \left[\mathbf{K}^{(0)} + \sum_{j=1}^M \xi_j(\omega) \mathbf{K}^{(j)} \right] \mathbf{c}_q \psi_q \approx \mathbf{f}(\omega), \quad (1.60)$$

com $\psi_q = \psi_q(\xi_1(\omega), \dots, \xi_M(\omega))$. De acordo com o método de Galerkin, requerendo-se a ortogonalidade do erro de truncamento na equação (1.60) em relação aos polinômios de Hermite $\{\psi_q\}$ resulta em

$$\sum_{q=0}^Q \left[\sum_{j=0}^M \mathbf{K}^{(j)} E_{jq} \right] \mathbf{c}_q = E(\psi_r \mathbf{f}(\omega)), \quad r = 0, \dots, Q. \quad (1.61)$$

em que E_{jq} é definida por

$$E_{jq} = \begin{cases} E(\psi_q \psi_r), & j = 0 \\ E(\xi_j \psi_q \psi_r), & j = 1, \dots, M. \end{cases} \quad (1.62)$$

Da relação de recorrência (1.57) e da propriedade de ortonormalidade (1.58) em relação à medida Gaussiana, as seguintes expressões de E_{jq} foram obtidas por Schevenels et al. (2004):

$$E_{jq} = \begin{cases} \delta_{qr}, & j = 0 \\ (\sqrt{\eta_j^r} \cdot \delta_{\eta_j^{q+1}; \eta_j^r} + \sqrt{\eta_j^q} \cdot \delta_{\eta_j^{r+1}; \eta_j^q}) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^M \delta_{\eta_j^q \eta_j^r}, & j \neq 0. \end{cases} \quad (1.63)$$

O conjunto de equações (1.61) pode ser escrito como

$$\mathbf{K}_{CP} \mathbf{c}_{CP} = \mathbf{f}_{CP} \quad (1.64)$$

com

$$\mathbf{K}_{CP} = \begin{bmatrix} \sum_{j=0}^M \mathbf{K}^{(j)} E_{j00} & \dots & \sum_{j=0}^M \mathbf{K}^{(j)} E_{j1Q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{j=0}^M \mathbf{K}^{(j)} E_{jQ0} & \dots & \sum_{j=0}^M \mathbf{K}^{(j)} E_{jQQ} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c}_{CP} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_0 \\ \vdots \\ \mathbf{c}_Q \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}_{CP} = \begin{bmatrix} E(\psi_0 \mathbf{f}) \\ \vdots \\ E(\psi_Q \mathbf{f}) \end{bmatrix}. \quad (1.65)$$

Desta forma, uma aproximação polinomial da solução estocástica $\mathbf{u}(\xi_1(\omega), \dots, \xi_M(\omega))$ é obtida pela substituição de \mathbf{c}_q , $q = 0, \dots, Q$ na equação (1.59).

A Fig. 1.10 mostra exemplos do padrão de esparsidade da matriz global de Galerkin \mathbf{K}_{CP} quando o caos polinomial de variáveis aleatórias Gaussianas é usada como base estocástica. Cada ponto no diagrama corresponde a uma posição não-nula da matriz em blocos \mathbf{K}_{CP} . O

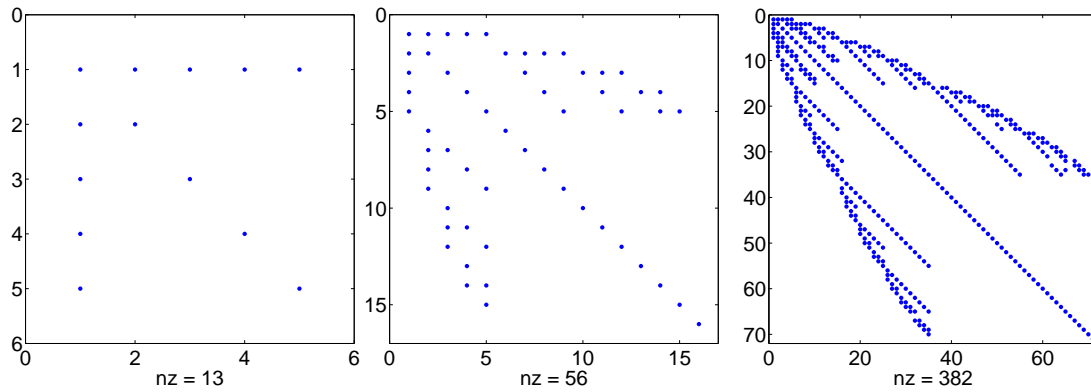


Figura 1.10: Padrão de esparsidade da matriz \mathbf{K}_{CP} , quando $M = 4$ e ordem polinomial estocástica $P = 1$ (esquerda), $P=2$ (centro) e $P=4$ (direita). O número de componentes não-nulos é indicado por nz .

valor médio $m_{\mathbf{u}}$ e a matriz de covariância $R_{\mathbf{u}}$ da solução \mathbf{u} são expressos por

$$m_{\mathbf{u}} = \sum_{q=0}^Q \mathbf{c}_q E(\psi_q) = \sum_{q=0}^Q \mathbf{c}_q \delta_{0q} = \mathbf{c}_0 \quad (1.66)$$

e

$$R_{\mathbf{u}} = \sum_{q=1}^Q \sum_{r=1}^Q \mathbf{c}_q \mathbf{c}_r^T E(\psi_q \psi_r) = \sum_{q=1}^Q \sum_{r=1}^Q \mathbf{c}_q \mathbf{c}_r^T \delta_{qr} = \sum_{q=1}^Q \mathbf{c}_q \mathbf{c}_q^T, \quad (1.67)$$

respectivamente. Devemos observar que no caso de $\kappa(\omega)$ não Gaussiano, as variáveis aleatórias $\xi_i(\omega)$ em geral não serão Gaussianas.

1.3.3 Campos Aleatórios e Simulação por Monte Carlo

A fim de analisarmos o método de elementos finitos estocástico usando a simulação por Monte Carlo, campos aleatórios devem ser gerados. Para este propósito, usamos a mesma discretização espacial por elementos finitos e o campo aleatório é interpolado nos vértices da malha. Assim se há N vértices, então temos N valores aleatórios representados pelo processo Gaussiano padrão $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_1, \dots, \kappa_N)$ cujos valores κ_i , $i = 1, \dots, N$ são variáveis de média zero, porém correlacionadas. O vetor aleatório $\boldsymbol{\kappa}$ pode ser obtido como

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{L}\boldsymbol{\xi}, \quad (1.68)$$

em que $\boldsymbol{\xi}$ é um vetor aleatório de N variáveis aleatórias Gaussianas padrão e \mathbf{L} uma matriz triangular inferior obtida pela decomposição de Cholesky da matriz de covariância discreta

$[C_\kappa(x_i, x_j)]$ ($i, j = 1, \dots, N$) definida por

$$\mathbf{C}_\kappa = \begin{bmatrix} C_\kappa(x_1, x_1) & C_\kappa(x_1, x_2) & \dots & C_\kappa(x_1, x_N) \\ C_\kappa(x_2, x_1) & C_\kappa(x_2, x_2) & \dots & C_\kappa(x_2, x_N) \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ C_\kappa(x_N, x_1) & C_\kappa(x_N, x_2) & \dots & C_\kappa(x_N, x_N) \end{bmatrix}. \quad (1.69)$$

Assim, para cada realização simulada um problema determinístico associado é resolvido e a solução armazenada para gerar sua estatística. Uma média pode ser adicionada a κ para obtermos realizações de média não nula.

Se tratando da deflexão da barra (vide Seção 1.2.3) o processo é repetido para valores fixados de σ_κ . Como κ é um processo Gaussiano, as realizações podem envolver valores negativos e afetar a coercividade. Em vista disso, durante a simulação valores negativos dos parâmetros aleatórios devem ser excluídos, ou seja, a distribuição Gaussiana truncada é utilizada para gerar as amostras aleatórias do vetor $\boldsymbol{\xi}$ (Chakraborty e Dey, 1995).

1.3.4 Problema Estático Unidimensional (Parte 2)

Vamos aplicar o procedimento apresentado acima ao problema proposto na Seção 1.2.3 considerando os parâmetros utilizados por Ghanem e Spanos (1991). Especificamente consideramos uma barra de comprimento $L = 1$ presa por uma extremidade fixa sob uma carga unitária uniformemente distribuída. O módulo de rigidez $\kappa(x; \boldsymbol{\omega})$ foi definido aleatoriamente e modelado com média $\bar{\kappa} = 1$. A função de correlação usada neste exemplo tem forma $C_\kappa(x; y) = \sigma_\kappa e^{-|x-y|/\eta}$ em que σ_κ denota o desvio padrão de κ e η se refere ao comprimento de correlação de κ .

O procedimento de discretização de elementos finitos foi estabelecido sob uma interpolação de Hermite resultando em um sistema de equações da forma

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f},$$

com \mathbf{f} refletindo as condições de fronteira da barra.

O módulo de elasticidade é expandido como representação de Karhunen-Loève de quatro termos e a solução \mathbf{u} em uma representação do caos polinomial de primeira e segunda ordem.

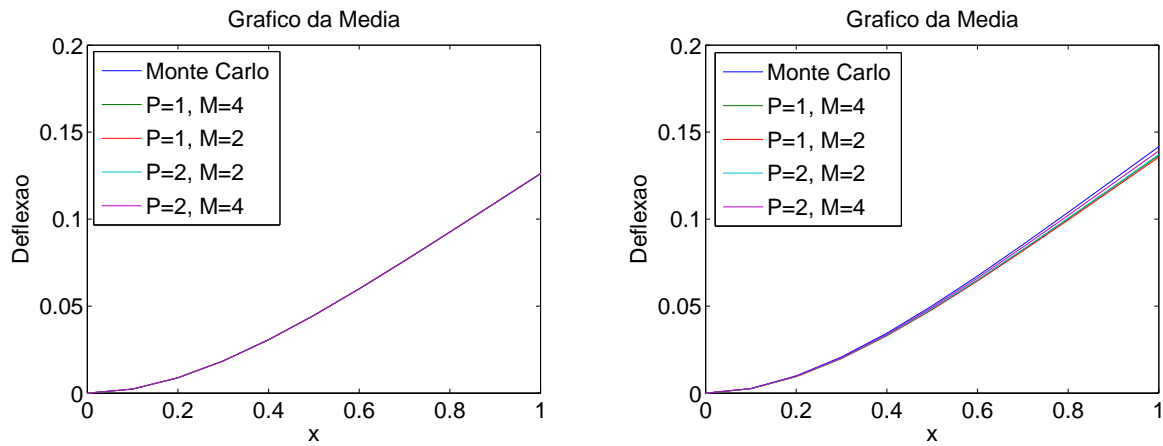


Figura 1.11: Gráfico da média; $\eta = 1$; $\sigma_\kappa = 0.1$ (esquerda) e $\sigma_\kappa = 0.3$ (direita).

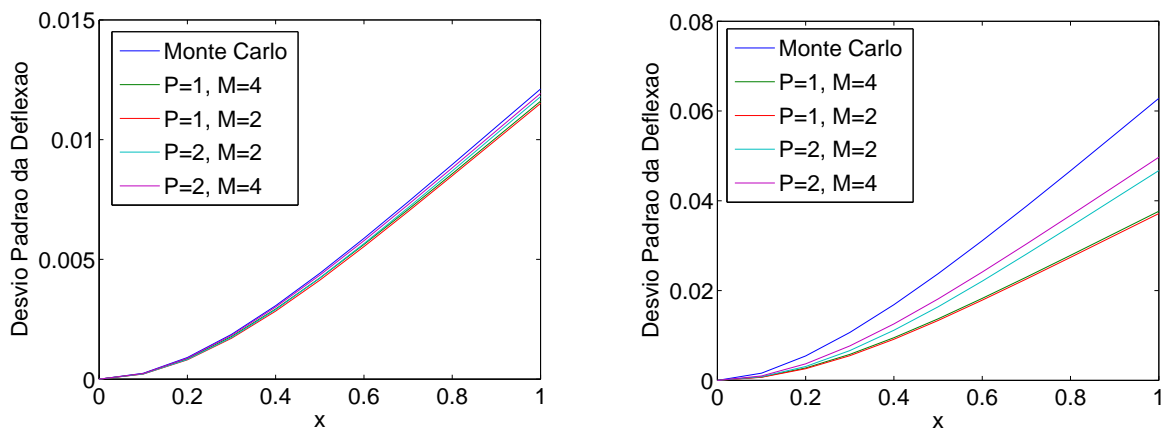


Figura 1.12: Gráfico do desvio padrão da deflexão; $\eta = 1$; $\sigma_\kappa = 0.1$ (esquerda) e $\sigma_\kappa = 0.3$ (direita).

As realizações de Monte Carlo foram feitas para 5000 amostras. Em ambos os métodos foram utilizados 10 elementos na discretização da malha.

A Fig. 1.11 faz uma comparação com solução da expansão de Karhunen-Loève e o método de Monte Carlo em relação ao deslocamento quando σ_κ é 0.1 e 0.3 respectivamente. Nota-se que poucos termos são suficientes quando σ_κ é pequeno.

De forma análoga, a Fig. 1.12 faz a comparação do desvio padrão da deflexão entre a expansão de Karhunen-Loève e o método de Monte Carlo quando σ_κ é 0.1 e 0.3 respectivamente.

A Fig. 1.13 representa o desvio padrão do deslocamento na extremidade da barra por variar o módulo de rigidez κ .

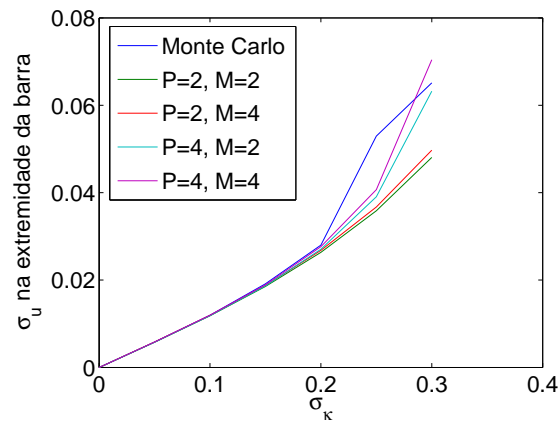


Figura 1.13: Gráfico do desvio padrão na extremidade da barra; $\eta = 1$.

Estes resultados revelaram que é garantida a convergência na expansão do caos homogêneo. Para obtermos uma suficiente acurácia poucos termos podem ser considerados nesta expansão e o custo computacional será menor do que o de Monte Carlo. Todavia, mais termos devem ser tomados quando σ_κ é grande.

2

Comparação dos métodos estocásticos no estudo de escoamento em regime permanente

2.1 Introdução

Neste estudo iremos obter soluções de alta ordem da média e da covariância do potencial hidráulico para fluxo saturado em meio poroso estatisticamente heterogêneo através do método de Momentos sobre base da decomposição de Karhunen-Loève (EMKL), o método de Galerkin espectral (MGE), o método da Colocação (MCol) e comparar estes resultados com o método de Monte Carlo (MC).

No caso das equações de Momentos, escrevemos o potencial como uma série $u = u^{(1)} + u^{(2)} + \dots$ cujos termos $u^{(n)}$ representam o potencial da n -ésima ordem em termos de σ_Y , o desvio padrão de Y , e derivamos equações recursivas para $u^{(n)}$. A função de n -ésima ordem $u^{(n)}$ é decomposta em termos de M variáveis aleatórias Gaussianas ξ_i e os coeficientes desta série são determinados pela substituição da decomposição de Y e $u^{(n)}$ nas equações recursivas de mesma ordem n .

Já o método de Galerkin espectral é obtido através do processo Gaussiano aplicando-se

a função exponencial ao parâmetro aleatório. Uma vez que o processo Gaussiano tenha sido simulado, o campo lognormal pode ser prontamente obtido por integração analítica da exponencial das variáveis aleatórias Gaussianas. Ao substituir a expansão de Karhunen-Loève e a expansão do caos polinomial no modelo, a solução dos sistemas determinísticos produzem soluções aproximadas da equação estocástica original. Usando propriedades do polinômio ortogonal, as integrais no cálculo de momentos podem ser obtidas diretamente.

A condutividade lognormal raramente aparece nas investigações do caos polinomial mas Babuška et al. (2007) estabeleceram que a condutividade lognormal na equação de fluxo representa um problema bem posto. Neste sentido, desenvolvemos uma representação do processo lognormal em termos de polinômios Hermitianos multi-dimensionais e variáveis aleatórias Gaussianas normalizadas independentes.

Finalmente discutimos o método da Colocação (MCol) descrito por Babuška et al. (2007), cuja expansão de perturbação combina a expansão de Karhunen-Loève e a expansão do caos polinomial. O MCol pode ser visto como um método pseudo-espectral, ou seja, uma aproximação de Galerkin espectral, com o uso de fórmulas de quadratura de Gauss-Hermite. Em vista disto, exploramos a validade desta aproximação para vários graus de variabilidade do meio e diferentes comprimentos de correlação. Comparamos estes resultados com os métodos descritos anteriormente.

2.2 Formulação Matemática

Tratamos de um escoamento em meio saturado estacionário satisfazendo a equação de continuidade e lei de Darcy expressas por

$$\nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = f(\mathbf{x}) \quad (2.1)$$

e

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = -\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \quad (2.2)$$

respectivamente e sujeita às condições de fronteira

$$\begin{cases} u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = u_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \mathbf{q}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = q_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Gamma_N \end{cases} \quad (2.3)$$

em que

- $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)^T$;
- \mathbf{q} é o vetor de vazão específica;
- $u(\mathbf{x}) = P(\mathbf{x})/\rho g$ é o potencial hidráulico ($P(\mathbf{x})$ é a pressão, ρ a densidade e g a aceleração gravitacional);
- $f(\mathbf{x})$ um termo fonte;
- $u_0(\mathbf{x})$ é o potencial sobre condições de fronteira de Dirichlet;
- $q_0(\mathbf{x})$ é a vazão sobre condições de fronteira de Neumann;
- $\mathbf{n}(\mathbf{x}) = (n_1, \dots, n_d)^T$ é o vetor unitário normal à fronteira $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$.

Neste estudo a condutividade hidráulica saturada $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \kappa_p(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})\rho g/\mu$ (κ_p é a permeabilidade intrínseca ou absoluta e μ a viscosidade do fluido) é uma função aleatória com $\mathbf{x} \in D$ e $\boldsymbol{\omega} \in \Omega$. Desta forma as equações de (2.1) a (2.3) tornam-se equações diferenciais estocásticas, cujas soluções não são determinísticas mas distribuições de probabilidade ou momentos estatísticos.

Observe que a variância da condutividade hidráulica logarítmica coincide com a permeabilidade absoluta logarítmica $\ln(\kappa)$ pois $Y = \ln(\kappa) + \ln(\rho/g\mu)$ e ρ , g e μ são constantes fixas (Zhang e Lu, 2004).

A fim de garantirmos a existência e unicidade da solução da equação (2.1) temos as seguintes hipóteses:

H1: $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ é uniformemente limitado, ou seja, existe um κ_{min} tal que $P(\boldsymbol{\omega} \in \Omega, \kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) > \kappa_{min}, \forall \mathbf{x} \in \bar{D}) = 1$;

H2: $f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ é quadrado integrável, isto é, $\int_D E[f^2] dx < \infty$ em quase todo ponto.

2.2.1 Expansão Lognormal

Suponha que a condutividade hidráulica $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ siga uma distribuição lognormal cuja variável aleatória log-transformada seja definida por

$$Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \ln(\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})) = \langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle + Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}), \quad (2.4)$$

com $\langle Y(\mathbf{x}) \rangle$ representando a média de $Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ e $Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ a flutuação em relação a expansão de Karhunen-Loève dada por

$$Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} \phi_n(\mathbf{x}) \xi_n = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}) \xi_n. \quad (2.5)$$

em que λ_n e $\phi_n(\mathbf{x})$ representam o autovalor e a autofunção respectivamente associadas a função de covariância $C_Y(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ da variável aleatória $Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$.

Para efeito numérico devemos truncar a expansão (2.5) em M termos. A média da condutividade hidráulica log saturada pode ser estimada usando-se os métodos geoestatísticos tais como o *kriking* (Le Ravalec-Dupin, 2005). Supomos que o campo aleatório $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ pode ser condicionado sobre alguns pontos, o que significa um campo aleatório estatisticamente heterogêneo. Neste caso, a função de covariância $C_Y(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ depende da localização real dos pontos (\mathbf{x}, \mathbf{y}) , de modo que os autovalores e as autofunções de $C_Y(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ em geral necessitam de resolução numérica.

Embora a validade de se usar campos aleatórios Gaussianos para descrever a condutividade logarítmica seja questionável (Gomes-Hernandez e Wen (1998), Rupert e Miller (2007)) adotaremos esta hipótese aqui pois é conveniente para o cálculo e tem sido admitida por alguns autores como Zhang e Lu (2004), Ghanem e Dham (1998) e Rupert e Miller (2007). Além disso, na investigação do solo a distribuição lognormal se ajusta melhor do que outras distribuições, como a distribuição Gamma (Mesquita et al., 2002).

Valendo-nos da existência e unicidade da solução no problema elíptico estocástico (vide Apêndice A.1), na seção seguinte resolvemos a equação de continuidade e lei de Darcy em meio aleatório através das equações de Momentos conforme descrita por Zhang e Lu (2004).

2.3 Equações de Momentos baseadas na expansão de Karhunen-Loève (EMKL)

Sabendo-se que a variabilidade de $u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ depende da variabilidade de $Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$, podemos expressar $u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ em termos de uma série $u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = u^{(0)}(\mathbf{x}) + u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \dots$ tal que a ordem de cada termo seja uma potência de σ_Y . Com estas definições, substituindo (2.2) em (2.1) e fazendo $Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \ln(\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}))$ a equação (2.1) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} & \nabla^2[u^{(0)}(\mathbf{x}) + u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \dots] + \nabla(\langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle) \\ & + Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla[u^{(0)}(\mathbf{x}) + u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \dots] \\ & = -\frac{f(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} [1 - Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \frac{1}{2}(Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}))^2 + \dots]. \end{aligned} \quad (2.6)$$

sujeita às condições de fronteira

$$\left\{ \begin{array}{l} u^{(0)}(\mathbf{x}) + u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \dots = u_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \nabla[u^{(0)}(\mathbf{x}) + u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \dots] \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \\ = -\frac{q_0(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} [1 - Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \frac{1}{2}(Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}))^2 + \dots], \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N. \end{array} \right. \quad (2.7)$$

em que $\kappa_G(\mathbf{x}) = \exp(\langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle)$. Agrupando os termos em ordem separada obtemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 u^{(0)}(\mathbf{x}) + \nabla(\langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle) \nabla u^{(0)}(\mathbf{x}) = -\frac{f(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} \\ u^{(0)}(\mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \nabla u^{(0)}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = -\frac{q_0(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})}, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N \end{array} \right. \quad (2.8)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \nabla(\langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle) \nabla u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \\ = -\nabla Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla u^{(0)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \frac{f(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} (Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})) \\ u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \nabla u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = -\frac{q_0(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} [-Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})], \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N. \end{array} \right. \quad (2.9)$$

Para o caso $m \geq 2$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 u^{(m)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \nabla(\langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle) \nabla u^{(m)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \\ = -\nabla Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla u^{(m-1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) - \frac{f(\mathbf{x})}{m! \kappa_G(\mathbf{x})} [-Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})]^m \\ u^{(m)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = 0, \\ \nabla u^{(m)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = -\frac{q_0(\mathbf{x})}{m! \kappa_G(\mathbf{x})} [-Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})]^m, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \mathbf{x} \in \Gamma_N. \end{array} \quad (2.10)$$

cujo (m) refere-se a ordem da expansão de perturbação Y com respeito a σ_Y . Assumimos que $u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ é expresso como uma combinação linear de variáveis aleatórias ortogonais Gaussianas ξ_n , ($n = 1, 2, \dots$), isto é,

$$u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n^{(1)}(\mathbf{x}) \xi_n \quad (2.11)$$

em que $u_n^{(1)}(\mathbf{x})$ é uma função determinística. Se substituirmos a equação (2.11) e a expansão truncada $Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ dentro da equação (2.9) obtemos uma série de termos de ξ_n cuja soma é nula. Assim a equação (2.9) é dada por

$$\sum_{n=1}^{\infty} \xi_n \left[\nabla^2 u_n^{(1)}(\mathbf{x}) + \nabla \langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle \cdot \nabla u_n^{(1)}(\mathbf{x}) + \nabla \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}) \cdot \nabla u^{(0)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) - \frac{f(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}) \right] = 0. \quad (2.12)$$

Devido à ortogonalidade do conjunto $\{\xi_n\}$, $n = 1, 2, \dots$, todos os coeficientes desta série são nulos. Em vista disso, a equação (2.9) sob as condições de fronteira para $u_n^{(1)}(\mathbf{x})$ pode ser reescrita como

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 u_n^{(1)}(\mathbf{x}) + \nabla(\langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle) \nabla u_n^{(1)}(\mathbf{x}) = -\nabla \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}) \nabla u^{(0)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) + \frac{f(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}) \\ u_n^{(1)}(\mathbf{x}) = 0, \\ \nabla u_n^{(1)}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \frac{q_0(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}), \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \mathbf{x} \in \Gamma_N. \end{array} \quad (2.13)$$

Pela definição de $\tilde{\phi}_n(\mathbf{x})$ todos os termos da equação (2.13) são proporcionais a $\sqrt{\lambda_n}$, que decresce monotonamente quando n cresce. Isto assegura que a magnitude da contribuição de $u_n^{(1)}(\mathbf{x})$ para $u^{(1)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ decresce com n em geral e indica que $u_n^{(1)}(\mathbf{x})$ é proporcional ao desvio padrão da condutividade hidráulica σ_Y .

Para expandir $u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$, nota-se que multiplicando a equação (2.10) por ξ_n no caso $m = 2$ e extraindo a média sob condições de fronteira, conseguimos $\langle u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \xi_n \rangle = 0$ para todo

$n \geq 1$. Conseqüentemente não podemos expandir $u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ em termos de ξ_n pois todos os coeficientes determinísticos seriam nulos, ou seja, se

$$u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \sum_{i=1}^{\infty} u_i^{(2)}(\mathbf{x}) \xi_i,$$

então

$$\langle u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \xi_n \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} u_i^{(2)}(\mathbf{x}) \langle \xi_i, \xi_n \rangle = u_n^{(2)}(\mathbf{x}) = 0, \quad n = 1, 2, \dots$$

Observe que o conjunto $\{\xi_i \xi_j, i \geq j \geq 1\}$ não é ortogonal, pois $\langle \xi_i \xi_i \xi_j \xi_j \rangle = 1 \neq 0$ quando $i \neq j$. Porém, o conjunto é linearmente independente. Basta notar que

$$C(\xi_i \xi_j; \xi_m \xi_n) = \langle \xi_i \xi_j \xi_m \xi_n \rangle - \langle \xi_i \xi_j \rangle \langle \xi_m \xi_n \rangle = \delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm} = \begin{cases} 1, & \{i, j\} = \{m, n\} \\ 0, & \{i, j\} \neq \{m, n\}. \end{cases}$$

Portanto, podemos expandir $u^{(2)}(\mathbf{x})$ como uma série em termos de $\xi_i \xi_j, i \geq j \geq 1$, isto é,

$$u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \sum_{i,j=1}^{\infty} u_{ij}^{(2)}(\mathbf{x}) \xi_i \xi_j \quad (2.14)$$

em que $\xi_i \xi_j = \xi_j \xi_i, u_{ij}^{(2)} = u_{ji}^{(2)} = \tilde{u}_{ij}^{(2)}/2$ para $i \neq j$ para todo $i, j \geq 1$.

Substituindo (2.14) e as expansões $Y^e(\mathbf{x})$ e $u^{(1)}(\mathbf{x})$ dentro da equação (2.10) em $m = 2$, segue-se uma série de termos de $\xi_i \xi_j$ cuja soma é nula. Como os elementos no conjunto $\{\xi_i \xi_j, i, j = 1, 2, \dots\}$ são linearmente independentes, todos os coeficientes desta série devem ser nulos. Desta forma, a equação (2.10) no caso $m = 2$ se reduz a

$$\begin{aligned} \nabla^2 u_{ij}^{(2)}(\mathbf{x}) + \nabla \langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle \cdot \nabla u_{ij}^{(2)}(\mathbf{x}) &= -\frac{1}{2} \frac{f(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} \cdot \tilde{\phi}_i(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) \\ &\quad - \frac{1}{2} \nabla \tilde{\phi}_i(\mathbf{x}) \nabla u_j^{(1)}(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \nabla \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) \nabla u_i^{(1)}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2.15)$$

sob condições de fronteira

$$\begin{cases} u_{ij}^{(2)}(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \nabla u_{ij}^{(2)}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = -\frac{q_0(\mathbf{x})}{2\kappa_G(\mathbf{x})} \cdot \tilde{\phi}_i(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Gamma_N. \end{cases}$$

Observe que o termo $\nabla Y^e \cdot \nabla u^{(1)}$ na equação (2.9) em $m = 2$ pode ser escrito como $\sum_{i,j} \nabla \tilde{\phi}_i \nabla u_j^{(1)}$ ou equivalente $\sum_{i,j} \nabla \tilde{\phi}_j \nabla u_i^{(1)}$. Para fazer $u_{ij}^{(2)} = u_{ji}^{(2)}$ temos de escrever o termo $\nabla Y^e \cdot \nabla u^{(1)}$ como metade de $\nabla \tilde{\phi}_i \nabla u_j^{(1)} + \nabla \tilde{\phi}_j \nabla u_i^{(1)}$ na equação (2.15). Isto acontece

pois tanto $\tilde{\phi}_i$ como $u_i^{(1)}$ são proporcionais a $\sqrt{\lambda_i}$ e em decorrência da equação (2.15) todos os termos são proporcionais a $\sqrt{\lambda_i \lambda_j}$, ou seja, a σ_Y^2 . O decrescimento de $\sqrt{\lambda_i \lambda_j}$ assim como o crescimento de i, j asseguram que a equação (2.15) necessita ser resolvida para um pequeno número de termos. Além disso, por simetria basta resolver $u_{ij}^{(2)}(\mathbf{x})$ quando $(i \geq j)$.

Para o caso $m = 3$, se multiplicarmos a equação (2.10) por $\xi_i \xi_j$ e aplicarmos o operador esperança a ambos os membros, teremos a solução trivial $\langle u^{(3)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \xi_i \xi_j \rangle = 0$. Isto implica que não podemos expandir $u^{(3)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ em termos de $\xi_i \xi_j$. Todavia se multiplicarmos a equação (2.10) por ξ_n ou $\xi_i \xi_j \xi_k$ e tomarmos suas esperanças, o resultado são soluções não-nulas para $\langle u^{(3)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \xi_n \rangle$ e $\langle u^{(3)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \xi_i \xi_j \xi_k \rangle$. Assim, podemos expandir $u^{(3)}(\mathbf{x})$ na forma

$$u^{(3)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n^{(3)}(\mathbf{x}) \xi_n + \sum_{i,j,k=1}^{\infty} u_{ijk}^{(3)}(\mathbf{x}) \xi_i \xi_j \xi_k. \quad (2.16)$$

Substituindo nas equações (2.10) a equação (2.16) e as decomposições $Y^e(\mathbf{x})$, $u^{(1)}(\mathbf{x})$ e $u^{(2)}(\mathbf{x})$ em $m = 3$, segue uma expansão em série cujo somatório é zero. Sabendo-se que os termos combinados $\{\xi_n, n = 1, 2, \dots\}$ e $\{\xi_i \xi_j \xi_k, i, j, k = 1, 2, \dots\}$ são linearmente independentes, segue que todos os coeficientes da série devem ser nulos. Deste modo, temos uma equação homogênea para $u_n^{(3)}(\mathbf{x})$ resultando em $u_n^{(3)}(\mathbf{x}) \equiv 0$ para todo $n \geq 1$. Logo, o termo $u_{ijk}^{(3)}(\mathbf{x})$ satisfaz a equação

$$\begin{aligned} \nabla^2 u_{ijk}^{(3)}(\mathbf{x}) + \nabla \langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle \cdot \nabla u_{ijk}^{(3)}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{6} \frac{f(\mathbf{x})}{\kappa_G(\mathbf{x})} \cdot \tilde{\phi}_i(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}) \\ &- \frac{1}{3} \sum_{P_{ijk}} \nabla \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) \cdot \nabla u_{jk}^{(2)}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.17)$$

sobre condições de fronteira expressas por

$$\begin{cases} u_{ijk}^{(3)}(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \nabla u_{ijk}^{(3)}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \frac{q_0(\mathbf{x})}{6\kappa_G(\mathbf{x})} \cdot \tilde{\phi}_i(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Gamma_N \end{cases}$$

em que $\sum_{m_{ijk}}$ é um somatório sobre um subconjunto $\{i, j, k\}$ de permutação cujos termos repetidos são excluídos. Por exemplo, $\sum_{m_{ijk}} \nabla f_i \nabla u_{jk}^{(2)} = \nabla f_i \nabla u_{jk}^{(2)} + \nabla f_j \nabla u_{ik}^{(2)} + \nabla f_k \nabla u_{ij}^{(2)}$. Assim o termo $\nabla f_i \nabla u_{kj}^{(2)}$ que representa o mesmo termo $\nabla f_i \nabla u_{jk}^{(2)}$ não é incluído.

Em geral podemos assumir que $u^{(m)}(\mathbf{x})$ pode ser expandido como

$$u^{(m)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_m=1}^{\infty} u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\mathbf{x}) \cdot \left(\prod_{j=1}^m \xi_{i_j} \right). \quad (2.18)$$

Substituindo na equação (2.10) a expansão (2.18), a decomposição $Y^e(\mathbf{x})$ e todas as expansões dos termos $u^{(i)}$, $i = 1, \dots, m - 1$ obtemos

$$\begin{aligned} \nabla^2 u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\mathbf{x}) + \nabla \langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle \cdot \nabla u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\mathbf{x}) &= \frac{(-1)^{m+1} f(\mathbf{x})}{m! \kappa_G(\mathbf{x})} \cdot \left(\prod_{j=1}^m \tilde{\phi}_{i_j}(\mathbf{x}) \right) \\ &- \frac{1}{m} \sum_{m_{i_1, \dots, i_m}} \nabla \tilde{\phi}_{i_1}(\mathbf{x}) \nabla h_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m-1)}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.19)$$

sobre condições de fronteira

$$\begin{cases} u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \nabla u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \frac{(-1)^{m+1} q_0(\mathbf{x})}{m! \kappa_G(\mathbf{x})} \cdot \left(\prod_{j=1}^m \tilde{\phi}_{i_j}(\mathbf{x}) \right) & \mathbf{x} \in \Gamma_N. \end{cases}$$

Suponha que tenhamos as soluções das equações (2.19) até $m = 3$. Uma vez calculados $u^{(0)}(\mathbf{x})$, $u_n^{(1)}(\mathbf{x})$, $u_{ij}^{(2)}(\mathbf{x})$, $u_{ijk}^{(3)}(\mathbf{x})$, podemos arbitrariamente calcular a média do potencial e sua função de covariância além de calcular diretamente a covariância entre a condutividade hidráulica e o seu potencial (Zhang e Lu, 2004).

Para termos de ordem três o potencial é aproximado por

$$u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \approx u^{(0)}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^3 u^{(i)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}), \quad (2.20)$$

o qual estabelece uma aproximação do potencial médio da forma

$$\langle u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle \approx u^{(0)}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^3 \langle u^{(i)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle = u^{(0)}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} u_{ii}^{(2)}(\mathbf{x}). \quad (2.21)$$

Os termos $u^{(0)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ e $u_{ii}^{(2)}(\mathbf{x})$ são os termos de primeira e segunda ordem respectivamente.

De (2.20) e (2.21) conseguimos o termo de perturbação dado por

$$u^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) - \langle u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle \approx \sum_{i=1}^3 u^{(i)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) - \langle u^{(2)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle, \quad (2.22)$$

em que $\langle u^{(2)} \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} u_{ii}^{(2)}$.

Usando a expressão (2.22) e a expansão truncada correspondente a $Y^e(\mathbf{x})$ obtemos a covariância da condutividade hidráulica logarítmica e do potencial hidráulico expressa por

$$C_{Y_u}(\mathbf{x}; \mathbf{y}) \approx \langle Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) u^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}) u_n^{(1)}(\mathbf{x}) + 3 \sum_{i,j=1}^{\infty} \tilde{\phi}_i(\mathbf{x}) u_{ijj}^{(3)}(\mathbf{x}). \quad (2.23)$$

Como o conjunto $\{\xi_n, n = 1, 2, \dots\}$ é um conjunto de variáveis aleatórias independentes com distribuição Gaussiana padrão, a ocorrência $\langle \xi_i \xi_j \xi_k \xi_l \rangle$ pode ser facilmente calculada observando-se a relação $\langle \xi_i^{2k+1} \rangle = 0$ e $\langle \xi_i^{2k} \rangle = (2k - 1)!!$ em que $(2k - 1)!! = (2k - 1)(2k - 3) \dots 1$ (Zhang e Lu, 2004). Em vista disso, a covariância do potencial hidráulico pode ser aproximada por

$$C_u(\mathbf{x}; \mathbf{y}) = \langle u^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) u^e(\mathbf{y}; \boldsymbol{\omega}) \rangle \approx \sum_{n=1}^{\infty} u_n^{(1)}(\mathbf{x}) u_n^{(1)}(\mathbf{y}) + 2 \sum_{i,j=1}^{\infty} u_{ij}^{(2)}(\mathbf{x}) u_{ij}^{(2)}(\mathbf{y}) + 3 \sum_{i,j=1}^{\infty} u_i^{(1)}(\mathbf{x}) u_{ijj}^{(3)}(\mathbf{y}) + 3 \sum_{i,j=1}^{\infty} u_i^{(1)}(\mathbf{y}) u_{ijj}^{(3)}(\mathbf{x}). \quad (2.24)$$

Da equação (2.24) temos a variância do potencial hidráulico aproximada por

$$\sigma_u^2 \approx \sum_{n=1}^{\infty} [u_n^{(1)}(\mathbf{x})]^2 + 2 \sum_{i,j=1}^{\infty} [u_{ij}^{(2)}(\mathbf{x})]^2 + 6 \sum_{i,j=1}^{\infty} u_i^{(1)}(\mathbf{x}) u_{ijj}^{(3)}(\mathbf{x}). \quad (2.25)$$

O primeiro termo do lado direito da equação representa a variância do potencial de primeira ordem em σ_Y^2 e o segundo e terceiro termos são correções de segunda ordem em σ_Y^2 . Calculando os termos do potencial hidráulico, os momentos do fluxo podem ser obtidos da equação (2.2).

Alguns importantes fatores contribuem para a eficiência das equações de Momentos sobre a expansão de Karhunen-Loève. Primeiramente as magnitudes de $u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}$ decrescem com o aumento da ordem m permitindo um aproximação de baixa ordem para o desvio σ_Y^2 . Tem-se também que a matriz do sistema é fixa e com dimensão menor que a matriz construída pelo MGE trazendo redução ao custo computacional. Além disso a EMKL tira proveito da ortogonalidade das variáveis $\{\xi_n\}$, na construção das equações de Momentos (Zhang e Lu, 2004).

Os coeficientes determinísticos $u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}$ podem ser resolvidos usando o método de elementos finitos ou o método de diferenças finitas que resultam em um sistema de equações lineares $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Em adição, os coeficientes da matriz \mathbf{A} para aproximação de Karhunen-Loève são sempre os mesmos para todas as equações $u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\mathbf{x})$.

A próxima seção irá descrever o processo lognormal por meio do caos polinomial e da expansão de Karhunen-Loève utilizando o método de elementos finitos estocásticos descrito por Ghanem e Spanos (1991) a fim de gerar a média e a variância da solução.

2.4 Método de Galerkin Espectral (MGE) e a projeção do Caos Polinomial

Uma proposta de aproximação na solução da equação diferencial estocástica envolve a expansão de parâmetros de incerteza e variáveis dependentes desconhecidas em séries de polinômios ortogonais e o cálculo de certas esperanças a fim de produzir um sistema de equações determinísticas. Considere a equação de fluxo em meio poroso estacionário dada por (2.1). Introduzimos os espaços de Hilbert

1. $V = H_0^1(D) \otimes L^2(\Omega)$ cuja norma $\|v\|_V^2 = \int_D E[|\nabla v|^2] dx$
2. $V_\kappa = \{v \in V; \int_D E[\kappa|\nabla v|^2] dx < \infty\}$ com norma $\|v\|_{V_\kappa}^2 = \int_D E[\kappa|\nabla v|^2] dx$.

Definidos os espaços de Hilbert, a forma fraca do problema (2.1) é dada por: Encontrar $u \in V_\kappa$ tal que

$$\int_D E[\kappa \nabla u \nabla v] dx = \int_D E[fv] dx, \quad \forall v \in V_\kappa. \quad (2.26)$$

Uma aplicação direta do Teorema de Lax-Milgram nos permite estabelecer sob as hipóteses $H1$ e $H2$ que o problema (2.26) admite uma única solução $u \in V_\kappa$ (vide Apêndice A.1).

Em virtude da complexidade do modelo, uma solução exata para as equações que governam estes sistemas não é possível de ser obtida quando definida sobre um domínio irregular (Ghanem e Red-Horse, 1999). Aproximamos a função $u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ por funções polinomiais por partes

$$u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \approx \sum_{\alpha=1}^N u_\alpha(\boldsymbol{\omega}) P_\alpha(\mathbf{x}) \quad (2.27)$$

com N representando o número total de graus de liberdade no modelo discreto e P_α um polinômio interpolador associado ao vértice \mathbf{x}_α da malha.

Substituindo (2.27) em (2.26) e escolhendo $v = P_\alpha$ ($\alpha = 1, \dots, N$), obtemos o sistema de equações

$$\mathbf{K}(\exp(Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}))) \mathbf{u}(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{f}, \quad (2.28)$$

em que

$$f_\alpha = \int_D P_\alpha(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

e \mathbf{K} representa uma função que associa $v \in L^2(D, L^2(\Omega))$ a uma matriz $\mathbf{K} = \mathbf{K}(v(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}))$ definida por

$$K_{\alpha,\beta}(v(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})) = \int_D \left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}) \right) v(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \left(\frac{\partial P_\beta}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N. \quad (2.29)$$

A solução \mathbf{u} é projetada sobre o caos polinomial de ordem P na forma

$$\mathbf{u} \approx \sum_{q=0}^Q \mathbf{c}_q \psi_q(\xi_1(\boldsymbol{\omega}), \dots, \xi_M(\boldsymbol{\omega})), \quad Q = 1 + \sum_{s=1}^P \frac{1}{s!} \prod_{r=0}^{s-1} (M+r), \quad (2.30)$$

em que $\psi_q(\boldsymbol{\xi})$ é um polinômio de Hermite M -dimensional de ordem P definido pelo produto de polinômios de Hermite unidimensionais $h_m(\xi)$:

$$\psi_q(\boldsymbol{\xi}) = \prod_{k=1}^M h_{\eta_{qk}}(\xi_k). \quad (2.31)$$

Neste caso a matriz $\boldsymbol{\eta}$ de dimensão $Q \times M$ coleciona todos os multi-índices $\eta_q \in \mathbb{N}^M$ satisfazendo $\sum_{k=1}^M \eta_{qk} \leq P$ (Schevenels et al., 2004). Substituindo (2.30) em (2.28) e requerendo-se que o erro resultante seja ortogonal ao espaço de aproximação gerado por $\psi_q(\boldsymbol{\xi})$ temos

$$\sum_{q=0}^Q \mathbf{K}(\langle \exp(Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})) \psi_q \psi_r \rangle) \mathbf{c}_q = \langle \psi_r \mathbf{f} \rangle, \quad r = 0, 1, \dots, Q. \quad (2.32)$$

Substituindo a expansão (2.5) na equação (2.32), obtemos

$$\mathbf{K}(\langle \exp(Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})) \psi_q \psi_r \rangle) = \mathbf{K} \left(\langle \exp(\langle Y \rangle + \sum_{k=1}^{\infty} \xi_k \phi_k) \psi_q \psi_r \rangle \right), \quad r = 0, 1, \dots, Q. \quad (2.33)$$

Assumindo que $\langle Y \rangle$ independe de \mathbf{x} , obtemos o sistema de equações $\mathbf{K}_L \mathbf{c}_L = \mathbf{f}_L$,

$$\mathbf{K}_L = \exp(\langle Y \rangle) \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{0,0} & \dots & \mathbf{K}_{0,Q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{K}_{Q,0} & \dots & \mathbf{K}_{Q,Q} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c}_L = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_0 \\ \vdots \\ \mathbf{c}_Q \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}_L = \begin{bmatrix} \langle \psi_0 \mathbf{f} \rangle \\ \vdots \\ \langle \psi_Q \mathbf{f} \rangle \end{bmatrix}. \quad (2.34)$$

Os blocos $\mathbf{K}_{r,q}$ da matriz \mathbf{K}_L são dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{r,q} &= \mathbf{K} \left(\left\langle \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} \xi_k \phi_k\right) \psi_r \psi_q \right\rangle \right) \\ &= \mathbf{K} \left(\left\langle \prod_{k=1}^{\infty} \exp(\xi_k \phi_k) \psi_r \psi_q \right\rangle \right) \\ &= \mathbf{K} \left(\prod_{k=1}^{\infty} \left\langle \exp(\xi_k \phi_k) \psi_r \psi_q \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (2.35)$$

O caso em que a média de Y depende de \mathbf{x} é analisado por Zhang (2002). Devido à hipótese de polinômios ψ_q terem dimensão estocástica M e a independência das variáveis aleatórias ξ_k , temos

$$\begin{aligned} \prod_{k=1}^{\infty} \left\langle \exp(\xi_k \phi_k) \psi_q(\boldsymbol{\xi}) \psi_r(\boldsymbol{\xi}) \right\rangle &= \prod_{k=1}^M \left\langle \exp(\xi_k \phi_k) \psi_q(\boldsymbol{\xi}) \psi_r(\boldsymbol{\xi}) \right\rangle \prod_{k=M+1}^{\infty} \left\langle \exp(\xi_k \phi_k) \right\rangle \\ &= \exp\left(\sum_{k=M+1}^{\infty} \phi_k^2/2\right) \prod_{k=1}^M \left\langle \exp(\xi_k \phi_k) \psi_q(\boldsymbol{\xi}) \psi_r(\boldsymbol{\xi}) \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Segue que

$$\prod_{k=1}^M \left\langle \exp(\xi_k \phi_k) \psi_q(\boldsymbol{\xi}) \psi_r(\boldsymbol{\xi}) \right\rangle = \prod_{k=1}^M \left\langle \exp(\xi_k \phi_k) h_{\eta_{qk}}(\xi_k) h_{\eta_{rk}}(\xi_k) \right\rangle = \prod_{k=1}^M \exp(\phi_k^2/2) \tau_{\eta_{qk}\eta_{rk}}^k.$$

Veremos na seção seguinte que $\tau_{\eta_{qk}\eta_{rk}}^k = \tau_{\eta_{qk}\eta_{rk}}^k(\mathbf{x})$ é dado por

$$\tau_{\eta_{qk}\eta_{rk}}^k = \sum_{t=\max(\eta_{qk}, \eta_{rk})}^{\eta_{qk} + \eta_{rk}} \frac{\sqrt{\eta_{qk}! \eta_{rk}!}}{(\eta_{qk} + \eta_{rk} - t)! (t - \eta_{qk})! (t - \eta_{rk})!} \phi_k^{2t - (\eta_{qk} + \eta_{rk})}. \quad (2.37)$$

Da expressão (2.37) segue

$$\prod_{k=1}^{\infty} \left\langle \exp(\xi_k \phi_k) \psi_q(\boldsymbol{\xi}) \psi_r(\boldsymbol{\xi}) \right\rangle = \exp(\sigma_Y^2/2) \prod_{k=1}^M \tau_{\eta_{qk}\eta_{rk}}^k. \quad (2.38)$$

Assim a matriz \mathbf{K}_L é dada por

$$\mathbf{K}_L = e^{\langle Y \rangle} \begin{bmatrix} \mathbf{K} \left(\tau_{\eta_{01}\eta_{01}}^1(\mathbf{x}) \dots \tau_{\eta_{0M}\eta_{0M}}^M(\mathbf{x}) \right) & \dots & \mathbf{K} \left(\tau_{\eta_{01}\eta_{Q1}}^1(\mathbf{x}) \dots \tau_{\eta_{0M}\eta_{QM}}^M(\mathbf{x}) \right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{K} \left(\tau_{\eta_{Q1}\eta_{01}}^1(\mathbf{x}) \dots \tau_{\eta_{QM}\eta_{0M}}^M(\mathbf{x}) \right) & \dots & \mathbf{K} \left(\tau_{\eta_{Q1}\eta_{Q1}}^1(\mathbf{x}) \dots \tau_{\eta_{QM}\eta_{QM}}^M(\mathbf{x}) \right) \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

com

$$\begin{aligned} K_{\alpha\beta} &\left(\tau_{\eta_{q1}\eta_{r1}}^1(\mathbf{x}) \dots \tau_{\eta_{qM}\eta_{rM}}^M(\mathbf{x}) \right) \\ &= \int_D \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}) \right) \left(\tau_{\eta_{q1}\eta_{r1}}^1(\mathbf{x}) \dots \tau_{\eta_{qM}\eta_{rM}}^M(\mathbf{x}) \right) \left(\frac{\partial P_{\beta}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

2.4.1 Cálculo da Esperança

A fim de calcularmos o operador $\langle \exp(Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})) \psi_q \psi_r \rangle$ necessitamos de algumas regras básicas para o polinômio Hermitiano normalizado $h_n(\xi)$.

Note que para uma função f suave no ponto ξ temos

$$\begin{aligned} \partial_\xi h_n(\xi) &= \sqrt{n} h_{n-1}(\xi), \\ \langle u_n(\xi) f(\xi) \rangle &= \langle \partial_\xi^n f(\xi) \rangle / \sqrt{n!}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

com ∂_ξ denotando o operador diferenciação. De acordo com Rupert e Miller (2007) o produto triplo das esperanças $\tau_{kqr} = \langle h_k(\xi) h_q(\xi) h_r(\xi) \rangle$ é

$$\tau_{kqr} = \begin{cases} \frac{\sqrt{k!q!r!}}{(t-k)!(t-q)!(t-r)!}, & t \geq \max(k, q, r) \text{ e } t = (k + q + r)/2 \in \mathbb{Z}, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.42)$$

O termo $\exp(\xi\phi)$ referente à equação (2.33) é representado em termos de polinômios Hermittianos, ou seja,

$$\exp(\xi\phi) = \sum_{n \geq 0} \gamma_n h_n(\xi). \quad (2.43)$$

De (2.41), temos que o coeficiente de Fourier γ_n satisfaz

$$\begin{aligned} \gamma_n &= \langle \exp(\xi\phi) h_n(\xi) \rangle = \langle \partial_\xi^n \exp(\xi\phi) \rangle / \sqrt{n!} = \phi^n \langle \exp(\xi\phi) \rangle / \sqrt{n!} \\ &= \phi^n \exp(\phi^2/2) / \sqrt{n!} \end{aligned} \quad (2.44)$$

e com isso

$$\exp(\xi\phi) = \exp(\phi^2/2) \sum_{n \geq 0} \phi^n h_n(\xi) / \sqrt{n!}. \quad (2.45)$$

Utilizando as equações (2.42) e (2.45) obtemos

$$\begin{aligned} \langle \exp(\xi\phi) h_q(\xi) h_r(\xi) \rangle &= \exp(\phi^2/2) \sum_{n \geq 0} \phi^n \tau_{nqr} / \sqrt{n!} \\ &= \exp(\phi^2/2) \sum_{t=\max(q,r)}^{q+r} \frac{\sqrt{q!r!}}{(q+r-t)!(t-q)!(t-r)!} \phi^{2t-(q+r)}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

2.4.2 Custo Computacional do MGE

O custo computacional do MGE depende da discretização espacial, da dimensão do caos polinomial M e da ordem P . O número total de termos Q com ordem menor ou igual a P ,

e dimensão M é dado por

$$Q = 1 + \sum_{s=1}^P \frac{1}{s!} \prod_{r=0}^{s-1} (M + r),$$

Logo, o tamanho do sistema de equações algébricas para resolver os coeficientes \mathbf{c}_q é $NQ \times NQ$, que pode ser extremamente grande para problemas de certa complexidade na dimensão espacial ou estocástica. No caso da dimensão espacial, a evolução de um corpo sólido requer uma grande resolução da discretização espacial, enquanto na dimensão estocástica esta questão é focalizada em processos que exibem grande variabilidade nos parâmetros, necessitando de termos de alta ordem de aproximação na dimensão estocástica.

O aumento da ordem P resulta em um crescimento exponencial da cardinalidade do espaço de aproximação quando a dimensão estocástica M aumenta. Em vista disso, a complexidade destes problemas é governada pela complexidade estocástica das informações e não da solução. Entretanto, a maior parte das ferramentas computacionais estão mais voltadas para complexidade na solução do que nos dados informados, mantendo a promessa de que os métodos de projeção estocástica podem ser ampliados à uma grande classe de processos computacionalmente intensivos (Lu e Zhang, 2004).

Na próxima seção iremos abordar o MCol. Este estudo revela que o MCol é tão preciso quanto o MGE além do custo computacional ser bastante reduzido comparado com MC e o MGE na solução de equações elípticas.

2.5 Método da Colocação (MCol) para equações diferenciais parciais elípticas

A previsão de fluxo em subsuperfícies envolve um certo grau de incerteza que pode resultar em heterogeneidade do meio e no conhecimento incompleto sobre estas propriedades. Tal incerteza necessita de uma descrição estocástica que conduza a equações diferenciais parciais que governam o escoamento. O MC é a aproximação mais comum para resolver equações diferenciais estocásticas numericamente. No MC necessitamos gerar um grande número de realizações do campo aleatório. Sua acurácia depende do número de realizações que

escolhemos (Li e Zhang, 2007). Apesar da facilidade de implementação do MC, sua principal desvantagem é o grande esforço computacional, especialmente para problemas de grande escala.

Outra aproximação alternativa é o MGE proposto por Ghanem e Spanos (1991). Conforme vimos em seções anteriores este método consiste em representar as variáveis aleatórias usando a expansão do caos polinomial e discretizar as equações usando a formulação fraca de Galerkin (vide Seção 2.4). A expansão do caos polinomial permite que aproximações de alta ordem possuam rápida convergência sob certas condições. Todavia, os coeficientes determinísticos são dependentes de um conjunto de equações acopladas que torna mais difícil a solução à medida que aumenta a dimensão aleatória ou a ordem polinomial aumenta.

O método da equação de Momentos baseada na expansão de Karhunen-Loève (EMKL) é outra forma de aproximação no estudo de escoamento de fase simples em meio poroso, e com uma extensão para meios insaturados além de ser uma alternativa ao escoamento multi-fase em meio transiente. Neste caso, o parâmetro de condutividade hidráulica é representado pela expansão de Karhunen-Loève enquanto o escoamento e as quantidades transportadas tais como o potencial e a velocidade de escoamento são decompostos em termos de uma expansão de perturbação. Apesar da média e da variância serem obtidas por um baixo custo computacional, os resultados convergem lentamente em meios fortemente heterogêneos.

A fim de analisar as incertezas do escoamento em meio poroso exploramos neste estudo o método da Colocação (MCol). Este método consiste em uma aproximação de Galerkin no espaço e de uma colocação de zeros de forma conveniente no produto tensorial ortogonal de polinômios no espaço de probabilidade, conduzindo a solução para sistemas determinísticos desacoplados como na aproximação de MC. Porém o número de simulações requeridas para o MCol é significativamente reduzido em relação a MC.

2.5.1 Coeficientes de Dimensão Finita

Em muitos problemas a fonte de aleatoriedade pode ser aproximada usando apenas um pequeno número de variáveis aleatórias como ocorre com a expansão truncada de Karhunen-Loève (Babuška et al., 2007). Isto motiva a assumir que os coeficientes usados na implementação tem a forma $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \kappa(\mathbf{x}; \xi_1(\boldsymbol{\omega}), \dots, \xi_M(\boldsymbol{\omega}))$ e $f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = f(\mathbf{x}; \xi_1(\boldsymbol{\omega}), \dots, \xi_M(\boldsymbol{\omega}))$ sobre $\Omega \times \bar{D}$ onde $M \in \mathbb{N}_+$ e $\{\xi_n\}_{n=1}^M$ são variáveis aleatórias com média zero e variância unitária. Pelo Lema de Doob-Dynkin (Babuška et al. (2007)) a solução u do problema estocástico (2.26) pode ser descrita apenas por um número finito de variáveis aleatórias $u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = u(\mathbf{x}; \xi_1(\boldsymbol{\omega}), \dots, \xi_M(\boldsymbol{\omega}))$, $\xi_n \in \mathbb{R}$.

Convém observar que na maioria das vezes f e κ são independentes pois o termo fonte e as propriedades materiais são raramente relacionadas. Neste caso, a integração estocástica (2.26) torna-se agora uma integração de valor de fronteira determinística com um parâmetro estocástico M -dimensional. Assim o problema (2.1) é equivalente a

$$\int_D \kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla \phi(x) dx = \int_D f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \phi(x) dx, \quad \forall \phi \in H_0^1(D). \quad (2.47)$$

Por conveniência supomos que κ e o termo fonte f admitem uma extensão suave sobre o conjunto de medida nula de modo que a equação (2.47) pode ser estendida com respeito à medida de Lebesgue. Estritamente falando, a equação (2.47) deverá valer somente para valores de $\boldsymbol{\omega} \in \Omega$ em que o coeficiente $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ é finito.

Neste caso, aproximamos $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ e $u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ pelas expansões finitas

$$\begin{aligned} \kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) &\approx \kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) = \exp \left(\langle Y(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \rangle + \sum_{n=1}^M \sqrt{\lambda_n} \varphi_n(\mathbf{x}) \xi_n \right), \\ u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) &\approx \sum_{k=1}^{M_p} u^{(k)}(\mathbf{x}) L_k(\boldsymbol{\xi}), \end{aligned} \quad (2.48)$$

onde as funções $L_k(\boldsymbol{\xi})$ satisfazem $L_k(\boldsymbol{\xi}^{(l)}) = \delta_{k,l}$.

2.5.2 Método da Colocação

De acordo com a equação (2.51) desejamos uma aproximação numérica da solução exata de (2.26) num subespaço $H_h(D) \otimes \mathcal{P}_p(\Omega)$ em que

- $H_h(D) \subset H_0^1(D)$ é o espaço de elementos finitos de dimensão N_h que contém polinômios contínuos por partes definidos sobre uma malha regular triangular ou quadrangular \mathcal{T}_h cujo parâmetro de espaçamento da malha é h .
- $\mathcal{P}_p(\Omega) \subset L^2(\Omega)$ é o espaço gerado pelo produto tensorial de polinômios de grau no máximo $p = (p_1, \dots, p_M)$, ou seja,

$$\mathcal{P}_p(\Omega) = \bigotimes_{n=1}^M \mathcal{P}_{p_n}(\Omega_n),$$

com $\mathcal{P}_{p_n}(\Omega_n) = \{a_0 + a_1\xi_n + a_2\xi_n^2 + \dots + a_{p_n}\xi_n^{p_n}, a_0, \dots, a_{p_n} \in \mathbb{R}\}$.

Observe que cada espaço $\mathcal{P}_{p_n}(\Omega_n)$ é formado por polinômios $p(\xi_n)$ de grau p_n que dependem da variável aleatória ξ_n . Assim, a dimensão de $\mathcal{P}_{p_n}(\Omega_n)$ é $p_n + 1$ e a dimensão de \mathcal{P}_p , que corresponde ao número de termos da expansão de $u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t)$ é dada por

$$M_p = \prod_{n=1}^M (p_n + 1).$$

Por exemplo, se $p_1 = \dots = p_n = P$, então $M_p = (P + 1)^M$.

Note que o espaço $\mathcal{P}_p(\Omega)$ é um exemplo de caos polinomial de dimensão finita. Escolhemos como base de $\mathcal{P}_p(\Omega)$ os polinômios de Hermite, que são ortogonais com respeito à medida de probabilidade Gaussiana.

Devido à ortogonalidade, as raízes destes polinômios definem fórmulas de quadratura Gaussiana. Em particular, as raízes

$$\xi_n^{(k_n)}, \quad k_n = 1, \dots, p_n + 1$$

do polinômio de Hermite $H_{n+1}(\xi_n)$ normalizados de grau $p_n + 1$ satisfazem

$$\langle f \rangle = \int_{\Omega_n} f(\xi) d\xi = \sum_{k_n=1}^{p_n+1} w_{k_n} f(\xi_n^{(k_n)}) \quad \forall f \in \mathcal{P}_{2p_n+1}, \quad (2.49)$$

onde $w_{k_n} = (n+1)! / (H_{n+2}(\xi_n^{(k_n)}))^2$ são os pesos normalizados (Davis e Rabinowitz (1984), pg. 224). A equação (2.49) mostra que temos $p_n + 1$ na variável ξ_n os quais estabelecem precisão $2(p_n + 1) - 1 = 2p_n + 1$ na média e variância do potencial hidráulico. Como utilizamos regras

de quadratura de Gauss-Hermite para calcularmos a média e a variância deste potencial, estas integrais são exatas neste caso (Babuška et al., 2007).

Seguindo Babuška et al. (2007), definimos

$$\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\xi}^{(M_p)}, \quad \boldsymbol{\xi}^{(k)} = (\xi_1^{(k_1)}, \xi_2^{(k_2)}, \dots, \xi_M^{(k_M)}), \quad (2.50)$$

e representamos a projeção de $u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ através de $L_k(\boldsymbol{\xi}) = \prod_{n=1}^M L_{k_n}(\xi_n)$, onde $L_{k_n}(\xi_n) \in \mathcal{P}_{p_n}$ são polinômios interpoladores de Lagrange definidos por

$$L_{k_n}(\xi_n^{(j_n)}) = \delta_{k_n, j_n}; \quad j_n, k_n = 1, \dots, p_n + 1.$$

A solução do espaço de projeção é encontrada, substituindo (2.48) em (2.47) e requerendo-se a ortogonalidade do erro em relação as funções de Lagrange, nos pontos $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\xi}^{(M_p)}$. Assim, obtemos a equação

$$\int_D \langle \kappa(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^{(k)}) L_q(\boldsymbol{\xi}^{(k)}) L_j(\boldsymbol{\xi}^{(k)}) \rangle \nabla u^{(k)}(\mathbf{x}) \nabla \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_D f(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \langle L_j(\boldsymbol{\xi}^{(k)}) \rangle \, d\mathbf{x}, \quad (2.51)$$

com $k, q, j = 1, 2, \dots, M_p$, para todo $\phi \in H_0^1(D)$.

O operador $\langle \kappa(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) L_q(\boldsymbol{\xi}) L_j(\boldsymbol{\xi}) \rangle$ é aproximado pela fórmula de quadratura Gaussiana (2.49), isto é,

$$\begin{aligned} \langle \kappa(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^{(k)}) L_q(\boldsymbol{\xi}^{(k)}) L_j(\boldsymbol{\xi}^{(k)}) \rangle &\approx \sum_{k=1}^{M_p} \kappa(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^{(k)}) L_q(\boldsymbol{\xi}^{(k)}) L_j(\boldsymbol{\xi}^{(k)}) w_k \\ \langle \kappa(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^{(k)}) L_q(\boldsymbol{\xi}^{(k)}) L_j(\boldsymbol{\xi}^{(k)}) \rangle &\approx \begin{cases} \kappa(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) w_q, & q = j \\ 0, & q \neq j. \end{cases} \end{aligned}$$

Assim a equação (2.51) se reduz a

$$\int_D \kappa(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^{(k)}) \nabla u^{(k)}(\mathbf{x}) \nabla \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_D f(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad \forall \phi \in H_0^1(D), \quad (2.52)$$

cujos sistema desacoplado resultante é

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{0,0} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathbf{K}_{1,1} & \dots & 0 \\ 0 & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \mathbf{K}_{M_p, M_p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{(0)} \\ \mathbf{u}^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{u}^{(M_p)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{f} \\ \vdots \\ \mathbf{f} \end{bmatrix}.$$

Uma vez calculados $u^{(1)}(\mathbf{x}), \dots, u^{(M_p)}(\mathbf{x})$ (que dependem de uma discretização no espaço, como no método de Monte Carlo), a média aproximada é expressa por

$$E_p[u] = \sum_{k=1}^{M_p} u^{(k)}(\mathbf{x}) E[L_k(\boldsymbol{\xi})] = \sum_{k=1}^{M_p} u^{(k)}(\mathbf{x}) w_k, \quad w_k = \prod_{n=1}^M w_{k_n}. \quad (2.53)$$

De forma análoga, a variância aproximada é dada por

$$\text{var}_p(u) = \sum_{i=1}^{M_p} \sum_{j=1}^{M_p} (u^{(i)}(\mathbf{x}) - E_p[u]) w_i w_j (u^{(j)}(\mathbf{x}) - E_p[u]). \quad (2.54)$$

Note que a ordenação dos vetores $\boldsymbol{\xi}^{(k)}$, ou seja, a relação entre o índice k e os índices k_1, \dots, k_M em (2.50), pode se tornar trabalhosa e o número total de vetores M_p pode se tornar elevado à medida que M e P crescem. Esta característica do método da Colocação é conhecida como *curse of dimensionality* (Babuška et al., 2007) e pode comprometer a eficiência do método.

2.6 Exemplo: Escoamento uniforme

Nesta seção examinamos a validade das aproximações propostas pela expansão de Karhunen-Loève no cálculo de equações de Momentos de alta ordem para o potencial do escoamento em meio poroso saturado e para o processo lognormal e comparamos estes resultados com as simulações de Monte Carlo (MC).

Consideramos um domínio bidimensional em meio poroso heterogêneo saturado. O domínio do escoamento é quadrado de tamanho $L_1 = L_2 = 10[L]$ ($[L]$ é uma unidade de comprimento consistente), uniformemente dividido em 40×40 elementos quadrados. Não existe escoamento sobre as fronteiras laterais. O potencial hidráulico é descrito nas fronteiras de $10.5[L]$ a $10.0[L]$ o qual produz o escoamento médio da esquerda para a direita respectivamente (vide Fig. 2.1).

O processo Y tem média zero, é estacionário de segunda ordem, e sua função de covariância é exponencial separável $C_Y(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sigma_Y^2 \exp(-|x_1 - y_1|/\eta - |x_2 - y_2|/\eta)$ nas direções \mathbf{x} e \mathbf{y} . Aqui σ_Y^2 e η denotam a variância e o comprimento de correlação respectivamente. Neste

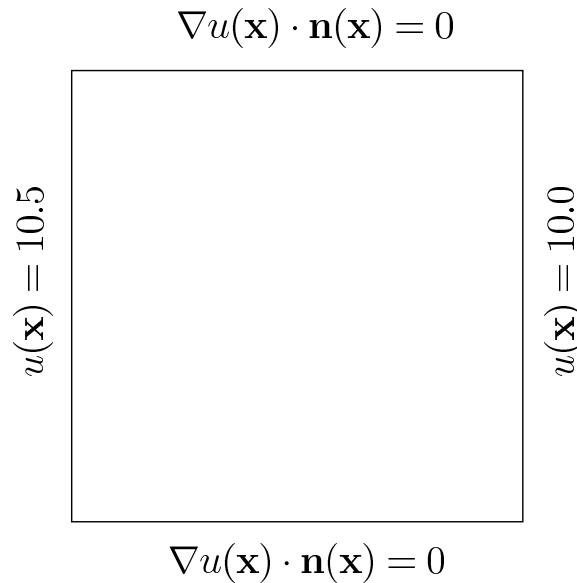


Figura 2.1: Condições de Fronteira

texto o comprimento de correlação possui a mesma unidade de medida do comprimento do intervalo $[0, L]$.

Neste caso, os autovalores são dados por

$$\lambda_n = \frac{4\eta^2\sigma_Y^2}{(\eta^2(\gamma_i)^2 + 1)(\eta^2(\gamma_j)^2 + 1)}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.55)$$

e as autofunções

$$\phi_n(\mathbf{x}) = \phi_i(x_1)\phi_j(x_2), \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.56)$$

em que

$$\phi_i(x) = \frac{1}{\sqrt{(\eta^2(\gamma_i)^2 + 1)L/2 + \eta}} (\eta\gamma_i \cos(\gamma_i x) + \text{sen}(\gamma_i x)) \quad (2.57)$$

e $\gamma_1, \gamma_2, \dots$ são raízes da equação

$$(\eta^2\gamma^2 - 1)\text{sen}(\gamma L) = 2\eta\gamma \cos(\gamma L). \quad (2.58)$$

O autovalores λ_n são escritos em ordem decrescente. Note que o produto de duas seqüências monotonamente decrescentes pode não ser monotonamente decrescente.

A fim de investigar a aplicabilidade da aproximação de Karhunen-Loève para a EMKL, o MGE e o MCol, designamos uma expansão em série com diferentes comprimentos de correlação e distintos graus de variância σ_Y^2 . Analisamos os efeitos da variação do comprimento

de correlação para ambos os métodos, mantendo-se a variância da condutividade hidráulica log saturada fixa. Logo após, examinamos o impacto da variância fixado o comprimento de correlação.

No caso da EMKL, o número de termos incluído na aproximação $u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}$ destas simulações é dado por 100, 40, 30 quando $m = 1, 2, 3$, respectivamente, exceto quando analisamos unicamente a expansão de ordem 1 que utilizou-se 500 termos ao invés de 100 (Zhang e Lu, 2004). Nota-se que um grande número de termos foi utilizado para se obter boas aproximações. Utilizamos a decomposição **QR** a fim de obter os coeficientes determinísticos $u_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}$ até $m = 3$ para a solução das equações de Momentos.

Para o MGE e MCol, o número de termos da expansão de Karhunen-Loève variou entre $M = 4$ e $M = 6$ enquanto grau do caos polinomial no MGE ficou entre $P = 1$ e $P = 2$ e no MCol variou de $P = 1$ a $P = 4$.

Para propósito de validação dos métodos, conduzimos simulações de MC. Em cada caso, utilizou-se 5000 realizações sobre uma malha de 40×40 quadrados cuja dimensão da matriz de covariância exponencial separável é 1681×1681 . A qualidade destas realizações foram examinadas para cada caso comparando-se a variância da solução, onde a média, a covariância e o comprimento de correlação da condutividade hidráulica são conhecidas. A equação de fluxo saturado para estado permanente é resolvida pelo método de elementos finitos bilinear e a média do potencial, assim como a variância, são calculadas destas realizações. Estas estatísticas são consideradas soluções reais do processo e foram comparadas com as aproximações de alta ordem obtidas da expansão de Karhunen-Loève. Na implementação utilizou-se um computador de 512MB com software Matlab 7.0.

Devido às condições de fronteira no exemplo apresentado (vide Fig. 2.1), a média do potencial não tem significativa diferença e portanto não será discutida. Focalizaremos somente a variância do potencial hidráulico.

2.6.1 Efeito do comprimento de correlação: EMKL versus MGE

A Fig. 2.2 compara a variância obtida por simulações de MC, a EMKL e o MGE onde σ_Y^2 é fixado enquanto o comprimento de correlação η sofre variação.

Da Fig. 2.2 (a) no caso $\eta = 1$ e $\sigma_Y^2 = 1$ temos que tanto a aproximação de primeira ordem quanto de segunda ordem praticamente coincidem com a simulação de MC, indicando que 500 termos são suficientes para aproximar $h^{(1)}(\mathbf{x})$ em (2.11). No caso do MGE, o baixo comprimento de correlação trouxe problemas na aproximação com MC. Isto acontece pois de acordo com Frauenfelder et al. (2005) e Rupert e Miller (2007), o decaimento do comprimento de correlação pode deteriorar o decaimento dos autovalores somente por um fator multiplicativo. Conseqüentemente o MGE fica comprometido, visto que este decaimento determina a regularidade estocástica do método. Observa-se também um comportamento homogêneo do EMKL e do MGE quando $\eta = 1$, pois em ambos os casos curvas não sofreram variação com o aumento da ordem, demonstrando que em meio onde as variáveis espaciais são fracamente correlacionadas o aumento da ordem pode não influenciar na melhora dos resultados.

Na Fig. 2.2 (b) quando $\eta = 4$, nota-se que no aumento do comprimento de correlação, somente a expansão de momentos de segunda ordem continua mantendo uma boa aproximação com MC, indicando que podemos diminuir o número de termos retidos na expansão com o aumento do comprimento de correlação. Já o MGE mostrou resultados inferiores mesmo com a ordem do caos polinomial em $P = 2$.

As simulações mostraram que a partir de 1000 amostras o MC apresentou um bom comportamento na convergência e a ordenação do autovalores de forma decrescente é essencial para a convergência de EMKL. O tempo também aumenta significativamente quando o número de elementos aumenta principalmente para o MGE. No caso de MC, para número de elementos $N = 40$ a média de tempo ficou em torno de 7300 segundos enquanto o EMKL de segunda ordem levou em média 1200 segundos. Já no MGE foram gastos aproximadamente 11135 segundos para $P = 2$, $M = 4$.

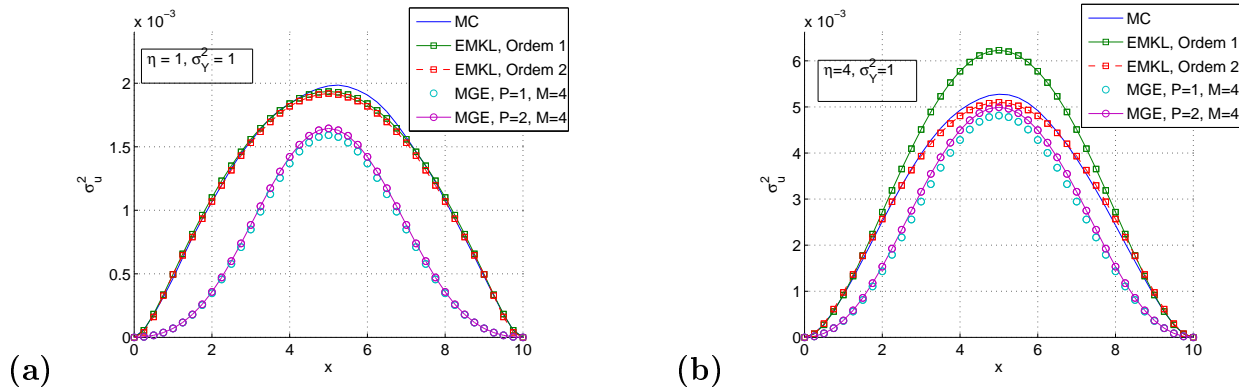


Figura 2.2: Comparação da variância do potencial mantendo-se σ_Y^2 fixo: (a) $\sigma_Y^2 = 1$ e $\eta = 1$; (b) $\sigma_Y^2 = 1$ e $\eta = 4$.

2.6.2 Efeito da variância σ_Y^2 : EMKL versus MGE

A fim de analisar o efeito da variância σ_Y^2 sobre o modelo EMKL e o MGE, examinamos três casos onde o comprimento de correlação η é fixo ($\eta = 4$) para distintos graus de variância $\sigma_Y^2 = 0.25, 2$ e 4 . Notamos da Fig. 2.3 (a) que uma pequena variabilidade do meio não afeta a EMKL.

Da Fig. 2.3 (b) podemos observar que as correções de alta ordem trazem um efeito razoável sobre a melhoria da variância em $\sigma_Y^2 = 2$ para a EMKL enquanto MGE não tem significativa melhora no aumento da ordem P . Já quando o meio é fortemente heterogêneo ($\sigma_Y^2 = 4$) a Fig. 2.3 (c) verifica que a variância obtida por EMKL possui um forte desvio mas o MGE mantém uma aproximação razoável com as simulações de MC.

No caso do MGE fixando-se o grau em $P = 2$, segue da Fig. 2.4 que o aumento no número de termos $M > 4$ na expansão de Karhunen-Loève não traz significativa melhora nos resultados e possui grande demanda computacional optando-se então por $M = 4$. O aumento na ordem para $P \geq 3$ também traz grande demanda computacional na matriz de montagem do sistema (2.39) além de não melhorar os resultados.

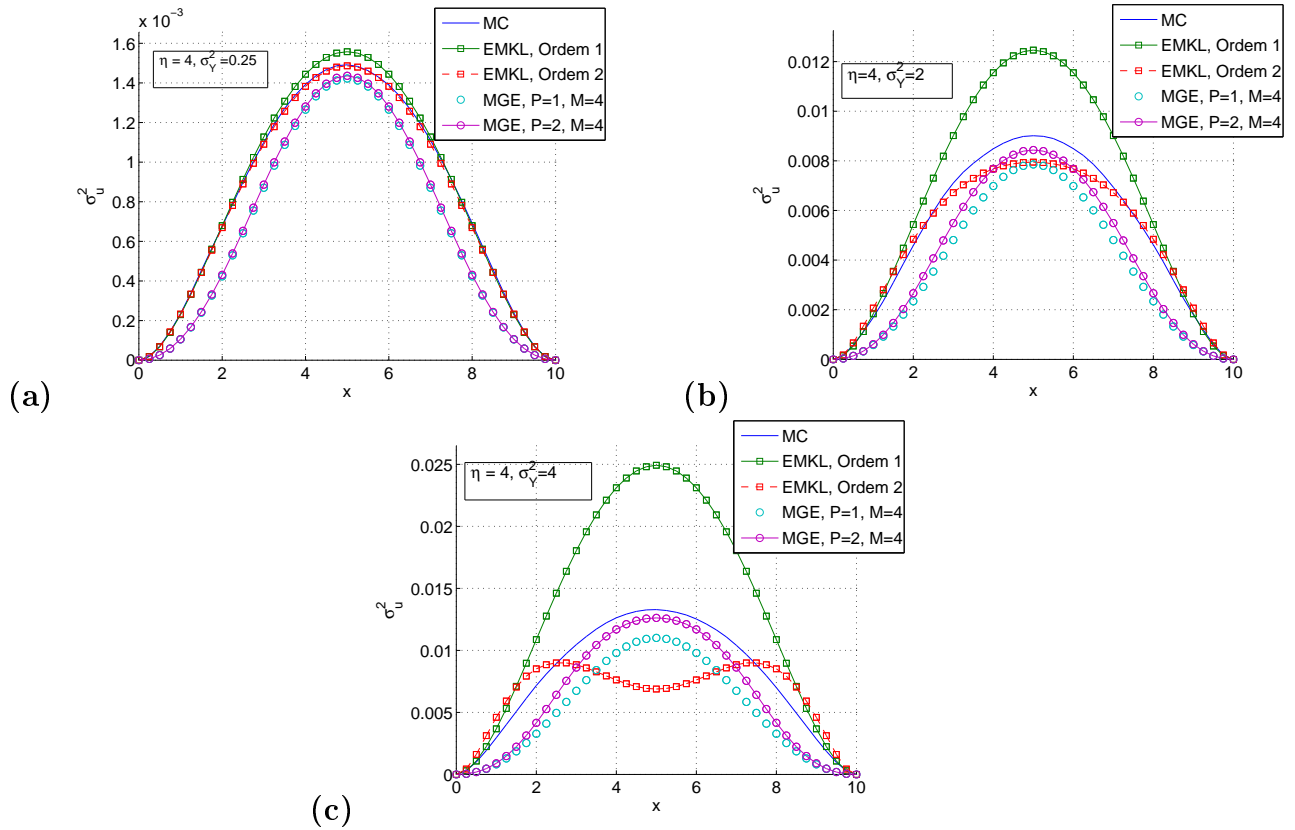


Figura 2.3: Comparação da variância do potencial com $\eta = 4$: (a) $\sigma_Y^2 = 0.25$; (b) $\sigma_Y^2 = 2$; (c) $\sigma_Y^2 = 4$.

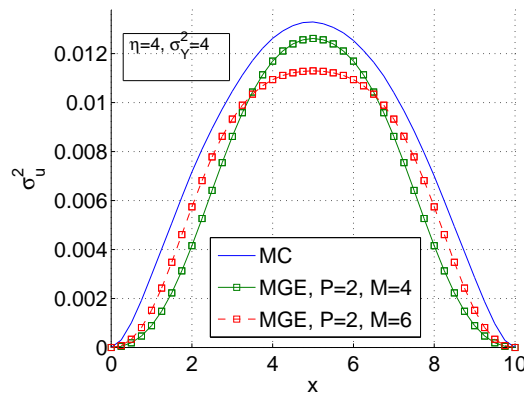


Figura 2.4: Efeito do aumento do M no MGE

2.7 Comparação do MCol com outros métodos

Nesta seção comparamos o método da Colocação (MCol) com o método de Galerkin espectral e a equação de Momentos baseado na expansão de Karhunen-Loève (EMKL), tendo como referencial o método de Monte Carlo (MC). Casos com diferente variabilidade espacial

e diferentes comprimentos de correlação são considerados. Procuramos também separar os gráficos em termos de mesma ordem, visto que tanto o MCol quanto o MGE usam a mesma expansão polinomial e suas ordens possuem o mesmo significado. Inserimos nesta análise o EMKL apesar de sua ordem se referir a expansão de perturbação com respeito ao desvio padrão do processo.

2.7.1 MGE e MCol de grau $P = 1$ e EMKL de ordem 1

Fixando o comprimento em $\eta = 4$ notamos das Fig. 2.5 (a) e Fig. 2.5 (b) uma melhor aproximação do MCol sobre o MGE e o EMKL tanto para $\sigma_Y^2 = 1$ quanto para $\sigma_Y^2 = 4$. Quando $\eta = 1$ os métodos MCol e MGE desviam-se do MC que ao contrário do EMKL apresenta um bom desempenho devido ao número de termos na dimensão estocástica $M = 500$.

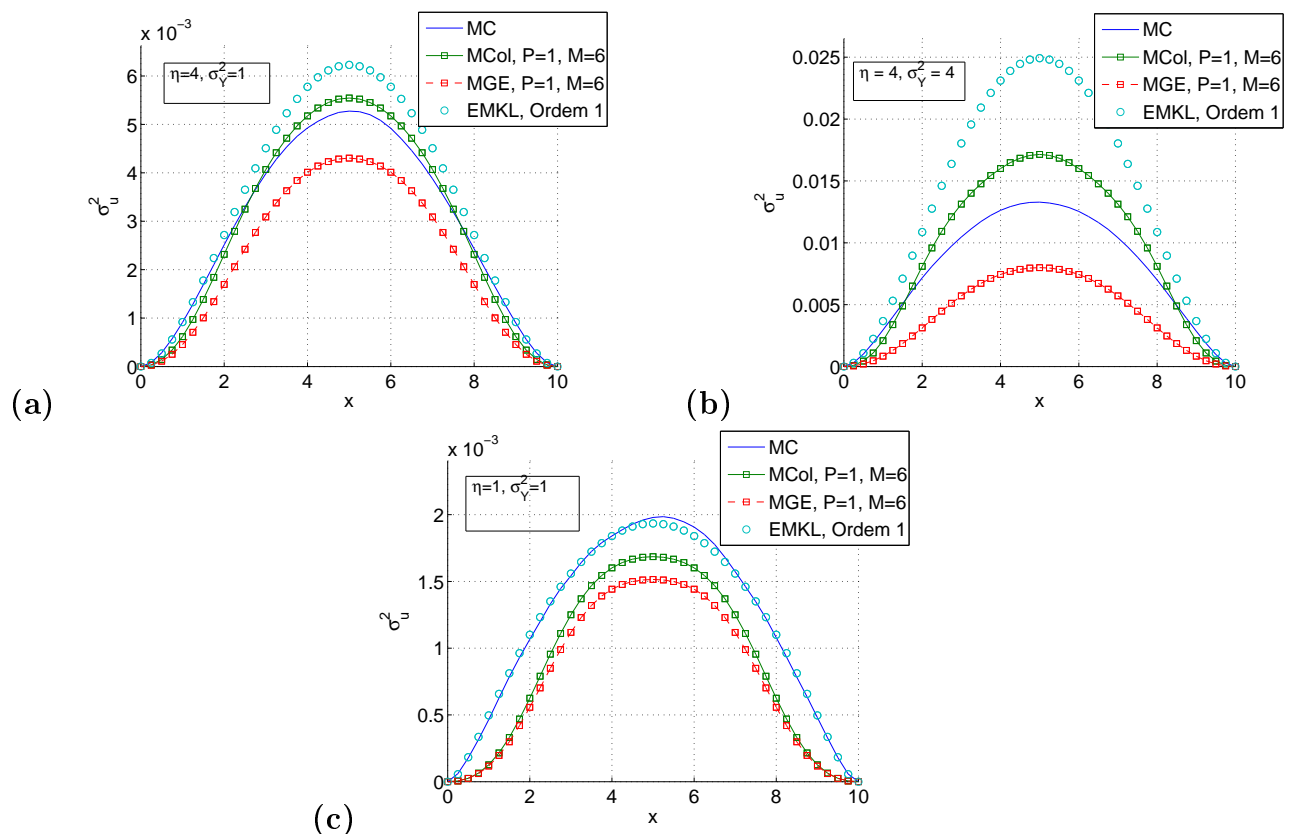


Figura 2.5: Comparação da variância do potencial derivada do MCol, MGE, EMKL e MC, com diferente variabilidade espacial e diferente comprimento de correlação.

2.7.2 MGE e MCol de grau $P = 2$ e EMKL de ordem 2

Novamente fixando o comprimento em $\eta = 4$, as Fig. 2.6 (a) e Fig. 2.6 (b) mostram claramente a convergência do MCol para MC quando a ordem aumenta, tanto para $\sigma_Y^2 = 1$ quanto para $\sigma_Y^2 = 4$. Já para $\eta = 1$ os métodos MCol e MGE novamente desviam-se do MC mesmo aumentando a ordem P , porém o EMKL mantém bom desempenho devido ao número de termos na dimensão estocástica dado por $M = 100, 40$ e 30 com ordens $m = 1, 2$ e 3 respectivamente.

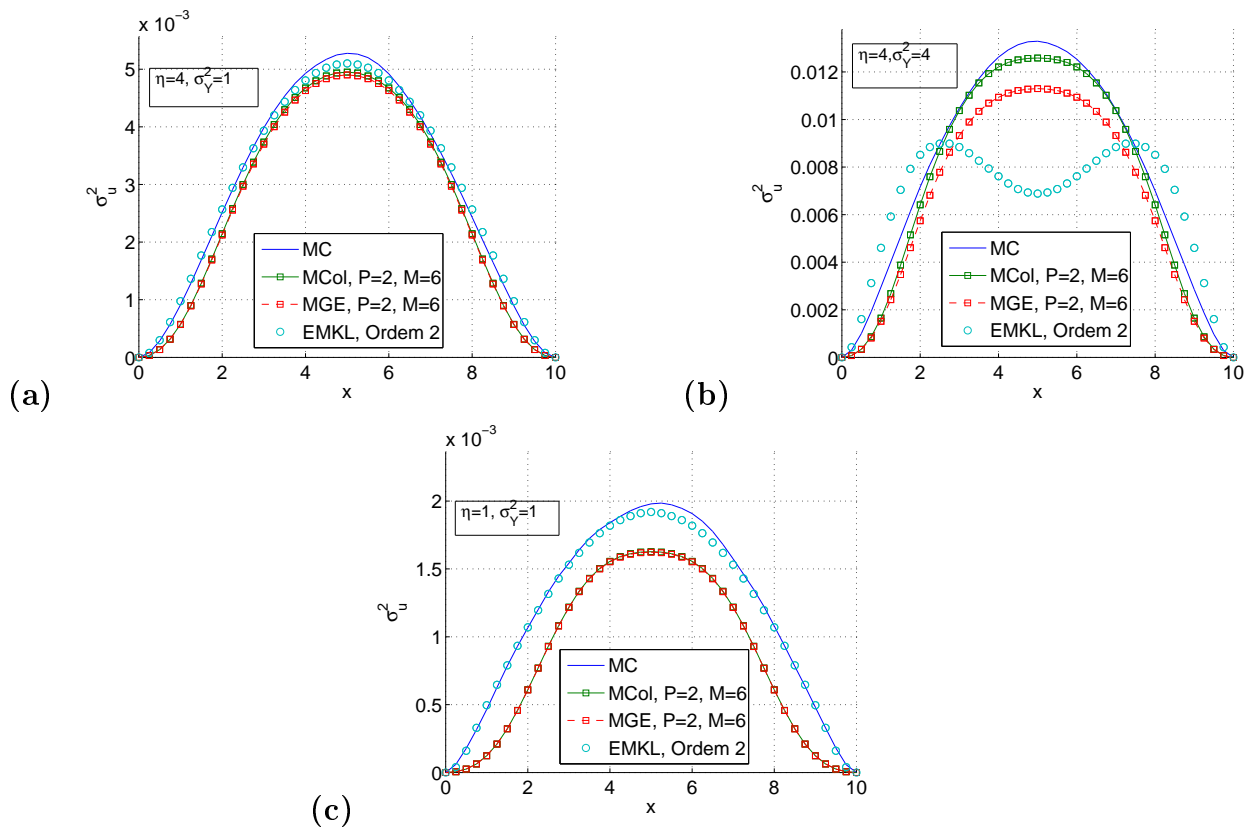


Figura 2.6: Comparação da variância do potencial derivada do MCol, MGE, EMKL e MC, com diferente variabilidade espacial e diferente comprimento de correlação. O MCol e o MGE se coincidem em (c)

2.7.3 Efeitos relacionados ao comprimento de correlação e a grande variabilidade espacial

A Fig. 2.7 mostra as variâncias do potencial em $\eta = 4$ e $\eta = 1$ derivadas do método da Colocação cujo grau polinomial varia de primeira a terceira ordem e pelo método de Monte

Carlo com 5000 realizações.

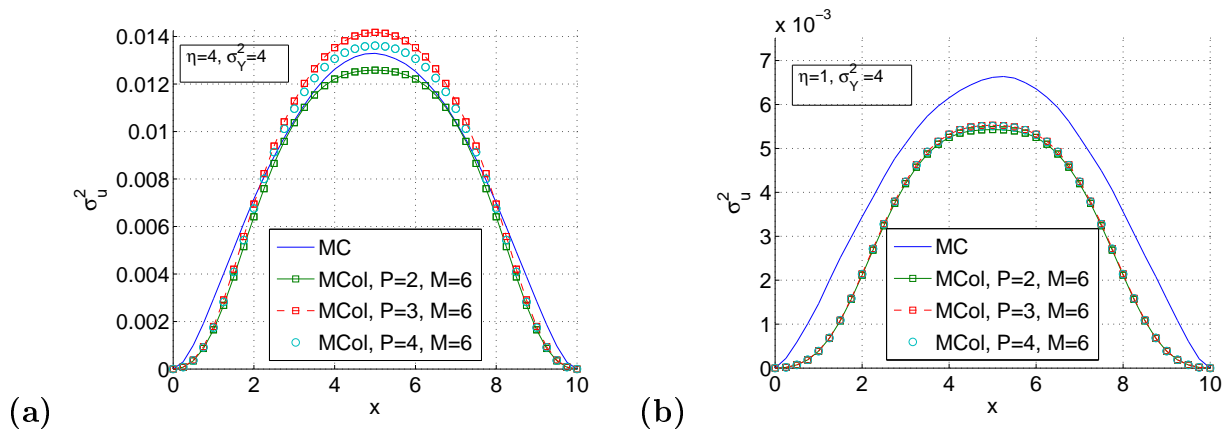


Figura 2.7: Comparação da variância do potencial derivada do MCcol e MC, com diferente variabilidade espacial.

Observa-se na Fig. 2.7 (a) que o desempenho da solução de segunda ordem é superior ao de terceira ordem. Este desempenho inferior do MCcol na terceira ordem está relacionado com a seleção de pontos de colocação das raízes do polinômio Hermitiano de quarto grau, pois, as raízes deste polinômio não contém a origem que corresponde ao ponto de máxima probabilidade para variáveis aleatórias Gaussianas (Li e Zhang, 2007). Isto indica que o MCcol de ordem par pode ter uma melhor performance em relação aos termos de ordem ímpar na presença de grande variabilidade do processo e grande comprimento de correlação como observado em $P = 4$.

A Fig. 2.7 (b) ao contrário, traz o fraco rendimento do MCcol nos pontos onde as variáveis espaciais não estão bem correlacionadas mesmo com ordem $P = 4$. Além disso, todos os gráficos do MCcol possuem praticamente a mesma aproximação, demonstrando que o método já atingiu sua convergência e o número M de termos pode ser insuficiente para este objetivo.

2.8 Análise de Erro do MCol, MGE e EMKL em relação a MC

Sabemos que uma aproximação alternativa ao MCol é dada pelo MGE e EMKL. No caso do MGE desejamos encontrar $u \in H_h(D) \otimes \mathcal{P}_p(\Omega)$ tal que

$$\int_{\Omega} (\kappa \nabla u, \nabla v)_{L^2(D)} d\mu = \int_{\Omega} (f, v)_{L^2(D)} d\mu, \quad \forall v \in H_h(D) \otimes \mathcal{P}_p(\Omega). \quad (2.59)$$

Observe que o problema (2.59) carrega um sistema acoplado cuja dimensão é $N_h \times M_p$ enquanto o MCol somente requer a solução de M_p sistemas lineares desacoplados de dimensão N_h . Como sua dimensão estocástica e suas ordens polinomiais possuem o mesmo significado, faz sentido uma análise de erro da variância do MGE e MCol em relação a MC sobre a norma L^2 .

No caso da EMKL se todos os termos na expansão de perturbação fossem levados em consideração, apesar da ordem referir-se a expansão de perturbação com respeito a variância do processo σ_Y^2 , a EMKL teria a mesma construção da expansão do caos polinomial com o MCol ou MGE. Além disso, a análise de erro da variância nos permite compreender a variabilidade no comportamento do potencial devido a heterogeneidade do meio. Desta forma, a EMKL também faz parte deste estudo.

2.8.1 A sensibilidade da variância versus a variância de perturbação

A fim de investigar a influência da heterogeneidade nos parâmetros de incerteza, conduziu-se simulações em que se calculou a diferença entre a variância do potencial obtida dos métodos de aproximação e o MC sobre a norma L^2 . No cálculo da estimativa de erro fixou-se o comprimento de correlação em $\eta = 4$ variando-se σ_Y^2 .

No cálculo da estimativa de erro da variância do potencial, fixou-se o comprimento de correlação em $\eta = 4$ variando o σ_Y^2 .

Da Fig. 2.8 (a) notamos que a EMKL de primeira ordem é mais eficiente em $0 < \sigma_Y^2 < 1.3$, mas o MCol possui resultado superior à medida que a heterogeneidade aumenta. Já quando

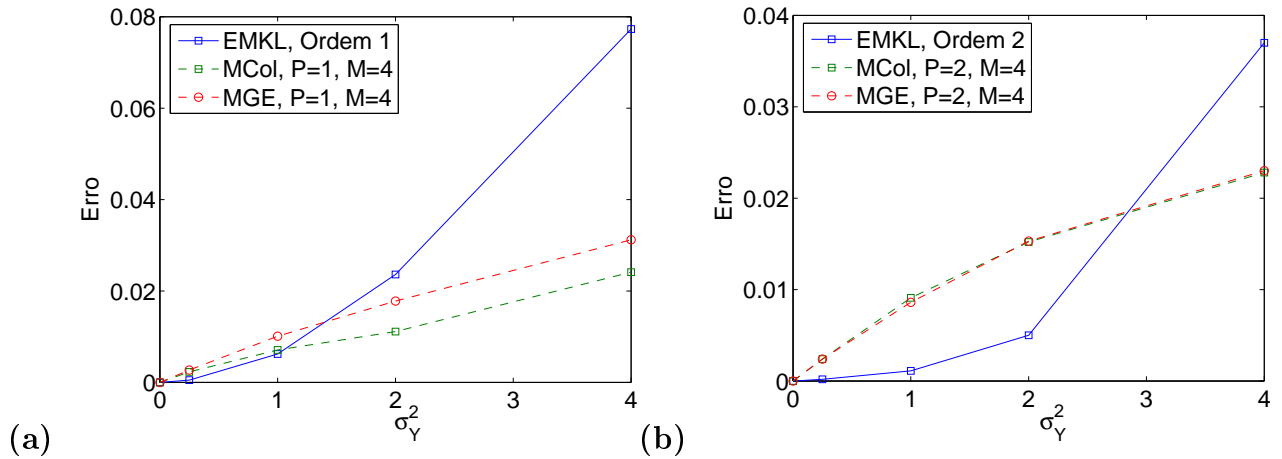


Figura 2.8: Gráfico de erro sob a norma L^2 versus σ_Y^2 .

a ordem de perturbação de EMKL e a ordem do caos polinomial P aumentam para dois (vide Fig. 2.9 (b)) a EMKL traz grande vantagem em $0 < \sigma_Y^2 < 2.6$ porém, o MCol e o MGE esboçam bons resultados quando $\sigma_Y^2 > 2.6$. Além disso, a Fig. 2.9 (b) mostra que os resultados do MCol e MGE convergem para uma mesma solução com o aumento da ordem.

Calculou-se também o mínimo valor de M para se obter o erro abaixo de 1% em função de σ_Y^2 . Pela Fig. 2.9, nota-se que a partir de certo M existe uma convergência dos métodos de aproximação para manter o erro fixo. Da Fig. 2.9 (a) observa-se que o MCol supera tanto o MGE quanto o EMKL em meio fortemente heterogêneo ($\sigma_Y^2 = 2$). Semelhante ao MCol, a EMKL de ordem 1 mantém a mesma porcentagem de erro a partir de $M \geq 10$, porém com variância inferior a $\sigma_Y^2 = 1.3$ superando o MGE que conserva o erro em 1% quando $\sigma_Y^2 = 1$ e $M \geq 6$.

De forma análoga, a Fig. 2.9 (b) continua demonstrando a eficiência do MCol em relação aos outros métodos à medida que a ordem aumenta.

2.9 Escoamento não uniforme

Nesta seção o caso de escoamento não uniforme devido a presença de poços é estudado pela aproximação do MCol e validado pelo MC. Para fácil ilustração, examinamos o método proposto em um problema de solução não regular correspondente a um quarto do domínio.

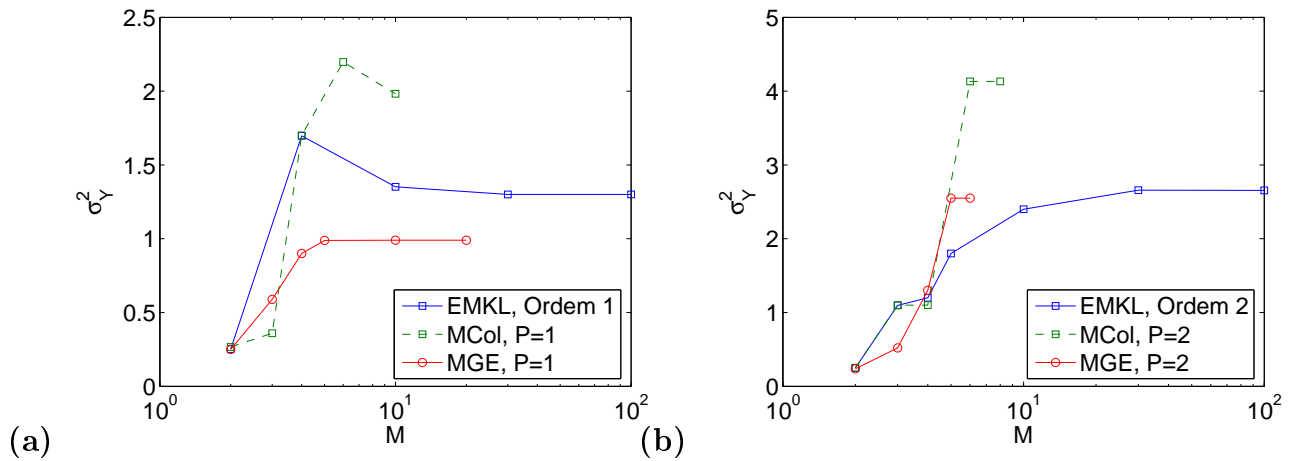


Figura 2.9: Gráfico da variância σ_Y^2 sob erro de norma L^2 versus M .

O modelo matemático consiste em resolver a equação (2.1) sob a geometria descrita pela Fig. (2.10) com $L = 1.854075 \text{ m}$ (Correa e Loula, 2008). A injeção é efetuada no ponto

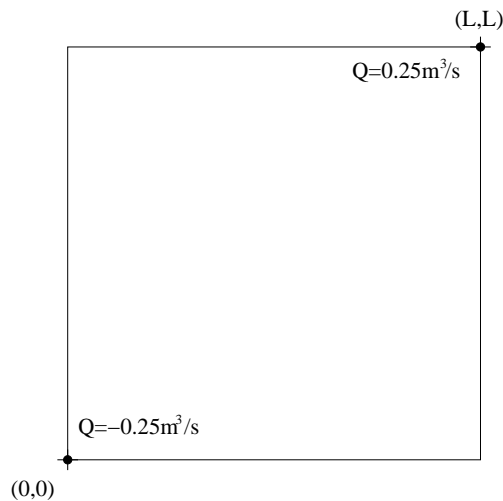


Figura 2.10: Condições de Fronteira

(L, L) enquanto o bombeamento ocorre no ponto $(0, 0)$, com cargas $0.25 \text{ m}^3/\text{s}$ e $-0.25 \text{ m}^3/\text{s}$ respectivamente (vide Fig. 2.10). Devido a simetria do problema, o escoamento prescrito na fronteira é zero.

Introduzimos a regularização da fonte $f(\mathbf{x})$ segundo Correa e Loula (2008): as cargas nas coordenadas são aproximadas por cargas uniformemente distribuídas sobre os vértices dos elementos de modo que

$$f_I = \frac{0.25}{|D_I|}, \quad \mathbf{x} \in D_I \quad f_B = -\frac{0.25}{|D_B|}, \quad \mathbf{x} \in D_B, \quad (2.60)$$

em que $|D_I|$ e $|D_B|$ são as áreas dos elementos contendo a injeção e o bombeamento respectivamente.

Uma aproximação deste problema em meio homogêneo isotrópico ($\kappa = 1$) usando o método de elementos finitos é observada pela solução do potencial na Fig. 2.11 (a) cujo gráfico de perfil da diagonal é dado pela Fig. 2.11 (b). Neste caso, adotou-se uma malha bilinear uniforme 20×20 com elementos quadrados.

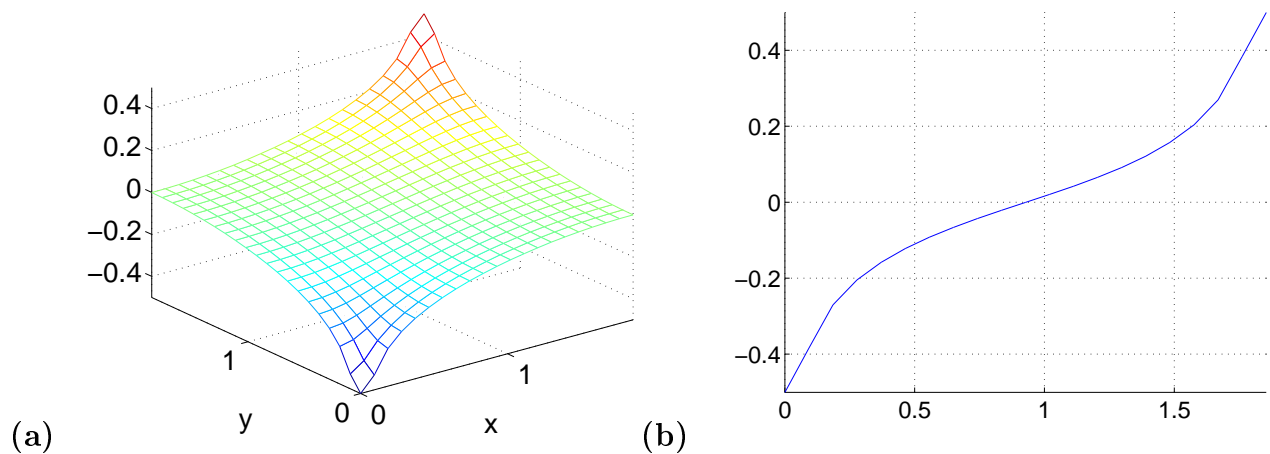


Figura 2.11: Campo potencial: (a) Solução aproximada por elementos finitos. (b) Perfil da diagonal

Já em meio heterogêneo, consideramos a função de covariância da condutividade hidráulica exponencial separável. A fim de explorar o efeito do comprimento de correlação η sob a média e a variância proposta pelo MCol, examinamos dois casos com diferentes comprimentos de correlação ($\eta = 0.6, \eta = 1$), porém com variância do meio fixada em $\sigma_Y^2 = 1$.

As Figs. 2.12 e 2.13 apresentam os gráficos de contorno e os perfis hidráulicos através dos poços na diagonal para média e a variância do potencial respectivamente, no caso em que as variáveis espaciais estão fracamente correlacionadas ($\eta = 0.6$). Verificamos que tanto a média do MCol quanto a variância possuem um pequeno desvio sobre os resultados do MC. Uma possível razão é a de que o baixo comprimento de correlação tende a aumentar o desvio das variáveis espaciais na função de covariância. Aumentando-se o valor de η para 1, os resultados da média e variância do MCol convergem para os resultados de MC demonstrando a precisão do modelo proposto (vide Fig. 2.14 e Fig. 2.15).

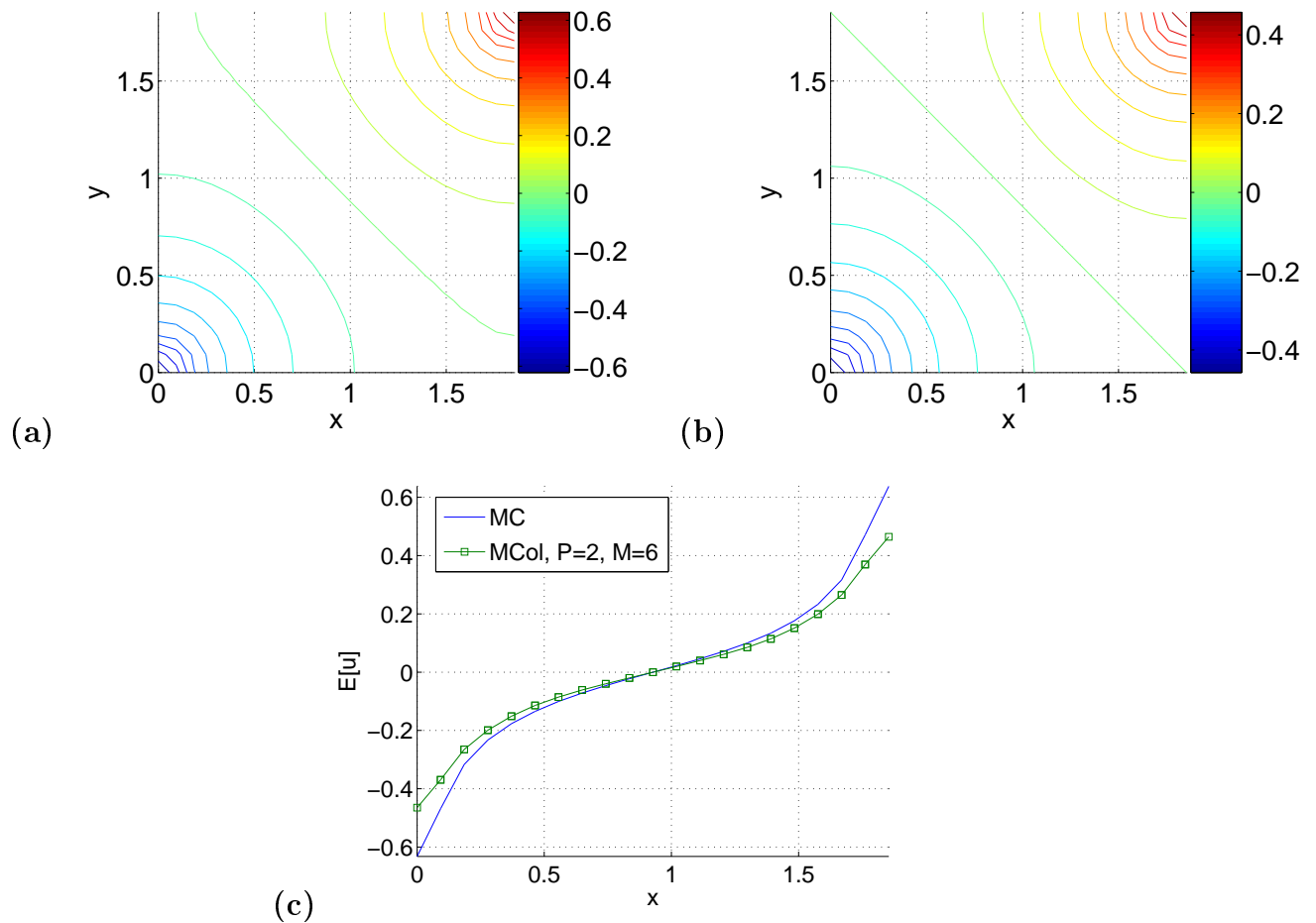


Figura 2.12: Gráfico de Contorno da Média: (a) MC e (b) MCol. A Fig. (c) representa os perfis da diagonal com $\eta = 0.6$ e $\sigma_Y^2 = 1$.

Notamos também um aumento da variância nas extremidades da fronteira em ambos os modelos MC e MCol. Como o escoamento próximo a fronteira é fixado, um pequeno valor relativo da condutividade hidráulica κ no elemento de fronteira sob uma realização deverá forçar os pontos nodais na fronteira a terem um potencial elevado e conseqüentemente produzir um gradiente de potencial relativamente grande. Similarmente um grande valor de κ nos elementos de fronteira deverá forçar os nós da fronteira a terem pequeno valor do potencial, produzindo com isso um gradiente de potencial relativamente baixo. Desta maneira, a variação do potencial nos pontos nodais da fronteira deverá ser maior do que nos outros nós (Zhang e Lu, 2002).

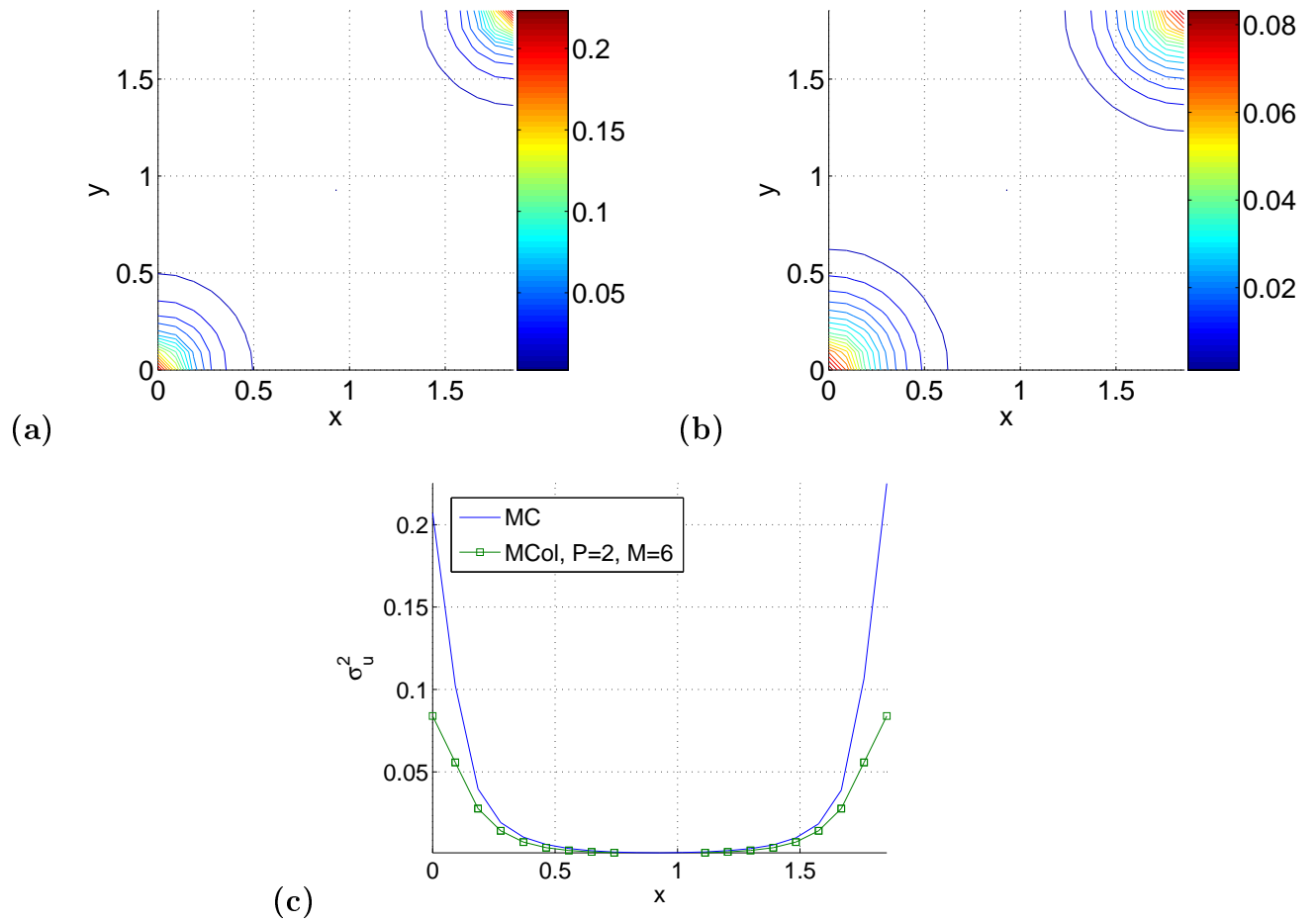


Figura 2.13: Gráfico de Contorno da Variância: (a) MC e (b) MCol. A Fig. (c) representa os perfis da diagonal com $\eta = 0.6$ e $\sigma_Y^2 = 1$

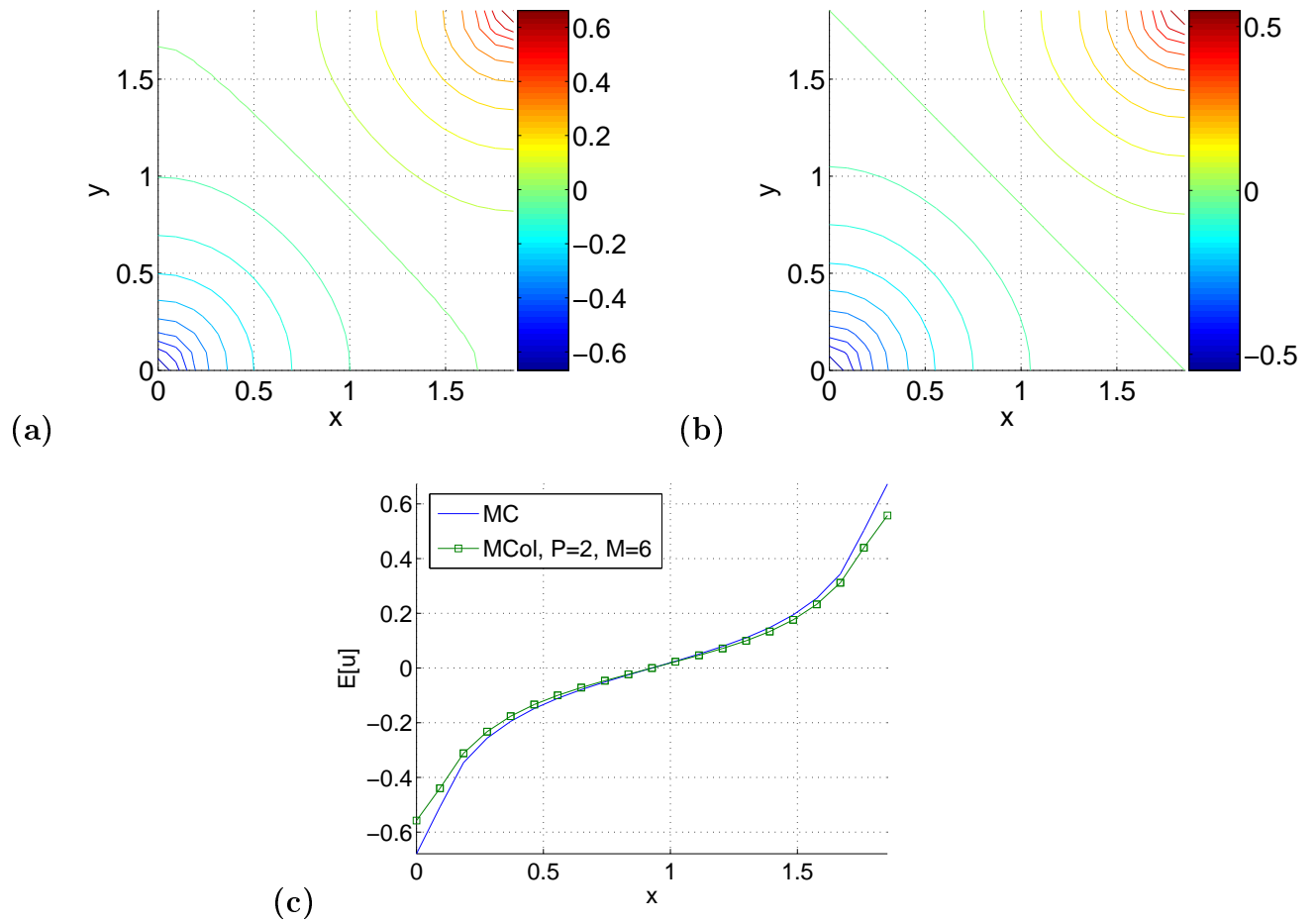


Figura 2.14: Gráfico de Contorno da Média: (a) MC e (b) MCol. A Fig. (c) representa os perfis da diagonal com $\eta = 1$ e $\sigma_Y^2 = 1$.

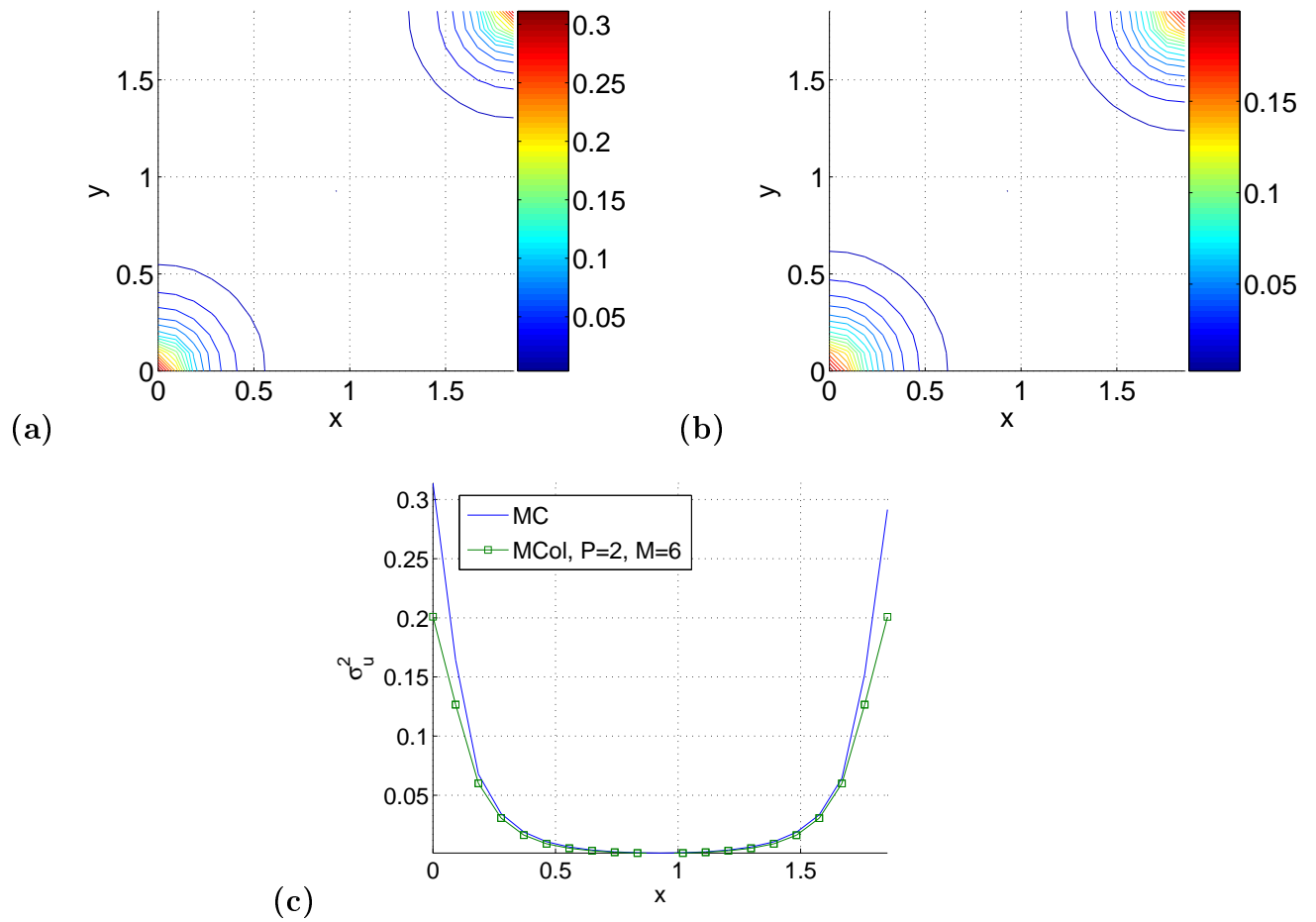


Figura 2.15: Gráfico de Contorno da Variância: (a) MC e (b) MCol. A Fig. (c) representa os perfis da diagonal com $\eta = 1$ e $\sigma_Y^2 = 1$.

3

Métodos de elementos finitos estocásticos no estudo do escoamento em regime transiente

3.1 Introdução

Uma maneira de incorporar a incerteza nas medidas de campo em um modelo de aquífero é a de estabelecer distribuições de probabilidade aos parâmetros físicos do meio. Em vista disso, utilizamos métodos numéricos estocásticos para estimar a média e a variância da carga hidráulica em modelos de fluxo de movimento em regime transiente nos quais a condutividade hidráulica segue uma distribuição de probabilidade lognormal. O conhecimento destas propriedades estatísticas é importante para determinar um intervalo de confiança e com isso administrar quantitativamente uma superfície de fluxo de fluido.

As fórmulas de Boulton e de Theis foram empregadas neste estudo como aproximações do problema de bombeamento de poços em aquíferos sob condições fronteiras horizontais que se estendem para o infinito. Discutimos também um esquema de exploração otimizado recentemente proposto por Cavalcanti (2006) para o aquífero Recôncavo na bacia do rio Capivara (Bahia, Brasil), comparando os dois modelos clássicos e introduzindo a aleatoriedade da

condutividade em um dos arranjos de poços que foram propostos, considerando a solução determinística de Theis na fronteira.

A fim de testar a validade da solução e prover informações adicionais sobre os testes de bombeamento fora do domínio da solução analítica, são utilizadas simulações numéricas de Monte Carlo (MC) e do método da Colocação (MCol) discutidos na Seção 1.3.3 e Seção 2.5.2 respectivamente. Uma compreensão quantitativa destes resultados poderá prover um guia na análise de rebaixamento do nível estático do poço em aquíferos livres.

Na próxima seção introduzimos o modelo de escoamento em regime transiente e revisamos algumas soluções clássicas associadas a meios homogêneos e ilimitados. Em seguida, descrevemos a discretização estocástica dos modelos pelos métodos de Monte Carlo e de Colocação no caso transiente.

3.1.1 Formulação do Problema

Consideremos um poço em um aquífero livre cuja descarga é dada por uma taxa constante Q . A equação de continuidade e a lei de Darcy são descritas respectivamente por

$$S(\mathbf{x}) \frac{\partial h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t) = Q \cdot \delta(\mathbf{x}) \quad (3.1)$$

e

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t) = -T(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t), \quad (3.2)$$

em que $\mathbf{q}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t)$ é o vetor de fluxo específico, $S(\mathbf{x})$ o coeficiente de armazenamento elástico, $T(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = H_0 \kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ é o campo de transmissividade hidráulica onde $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ é a condutividade hidráulica e $\delta(\mathbf{x})$ a função delta de Dirac. Determinamos a carga hidráulica $h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t)$ por meio das equações (3.1)-(3.2) em conjunto com as condições iniciais e de fronteira

$$\begin{cases} h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; 0) = H_0, & \mathbf{x} \in D \subset \mathbb{R}^2 \\ h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t) = h_0(r) & \mathbf{x} \in \Gamma_D, \end{cases} \quad (3.3)$$

que estabelecem que a carga hidráulica é constante (H_0) até o início do bombeamento do poço e que é dada pela carga prescrita $h_0(r)$ na fronteira Γ_D formada por pontos a uma

distância radial r do poço suficientemente grande. Esta condição visa aproximar

$$\lim_{\|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty} h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t) = H_0.$$

Em particular, utilizamos as funções $h_0(r)$ calculadas a partir das soluções determinísticas $h = h(\mathbf{x}; t)$ dadas pelas fórmulas de Boulton (3.6) e de Theis (3.8). Podemos estender o modelo para um arranjo de poços modificando o termo fonte.

Introduzimos a incerteza do modelo, quantificada pela variável independente $\boldsymbol{\omega}$, por meio da condutividade $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$. A condutividade hidráulica forma uma função aleatória de representação lognormal, ou seja:

$$\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \exp(Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})), \quad (3.4)$$

sendo $Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ um processo Gaussiano e estatisticamente estacionário (vide Seção 2.2.1). Admitimos também que a função de covariância $C_Y(\mathbf{x}; \mathbf{y})$ do processo $Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ é exponencial separável. Deste modo, $Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ pode ser representado em termos da expansão de Karhunen-Loève

$$Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} \varphi_n(\mathbf{x}) \xi_n, \quad (3.5)$$

em que $\langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle$ é a média de Y e os termos λ_n e $\varphi_n(\mathbf{x})$ representam o autovalor e a autofunção associadas a $C_Y(\mathbf{x}; \mathbf{y})$ e são descritas pelas fórmulas (2.55) e (2.57), respectivamente.

Para fins de cálculo, é necessário truncar a expansão acima, reduzindo a condutividade à forma $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \approx \kappa(\mathbf{x}; \xi_1, \dots, \xi_M)$ cujo M é a dimensão estocástica.

3.1.2 Fórmula de Boulton

A fórmula de Boulton supõe que o bombeamento produz uma resposta não instantânea no aquífero e pode ser utilizada para aproximar o fluxo não estacionário para um poço num sistema aquífero livre que possui um aquíclode na base da fronteira e uma superfície livre no topo do aquífero, com fluxo vertical entre as fronteiras (Hunt e Scott, 2005).

Boulton (vide Hantush (1964)) verificou que o rebaixamento no potencial hidráulico $s = s(\mathbf{x}; t)$ em um poço num aquífero homogêneo cujo raio de influência é infinito e sem fonte de

recarga pode ser expresso pela fórmula

$$s = H_0 - h = \frac{Q}{2\pi T} V\left(\frac{\kappa t}{\epsilon H_0}, \frac{\nu}{H_0}\right), \quad (3.6)$$

onde a função $V(\tau, \rho)$, chamada de função de poço por gravidade, é definida pela integral

$$V(\tau, \rho) = \int_0^\infty \frac{1}{u} J_0(u, \rho) [1 - \exp(-\tau \cdot u \cdot \operatorname{tgh}(u))] du, \quad (3.7)$$

com $\tau = \kappa t / \epsilon H_0$, $\rho = \nu / H_0$, $\nu = T / S \approx \epsilon$ e J_0 é a função de Bessel de primeira espécie e ordem zero. A transmissividade T e o coeficiente de armazenamento específico S são constantes. Em particular, no caso de aquíferos de espessura uniforme, o coeficiente de transmissividade é fixado em $T = H_0 \kappa$ onde κ é a condutividade hidráulica. O parâmetro ϵ é o armazenamento específico do aquífero ou a razão entre o volume de água que uma coluna unitária do aquífero produz por gravidade e o seu próprio volume, sendo aproximada pela porosidade efetiva ψ_e (porção do espaço poroso conectado no material permeável e saturado no qual ocorre o escoamento).

3.1.3 Fórmula de Theis

Sejam h_w a altura de água do poço e r_w o raio do poço de bombeamento. Hantush (1964) notou que quando $t > 30r_w^2/\nu$ e a profundidade de saturação na região onde o fluxo não perturbado é menor que a altura da coluna de água em bombeamento ($0.5H_0 < h_w$), o rebaixamento observado é dado pela expressão

$$s = H_0^2 - h^2 = \frac{Q}{2\pi\kappa} W\left(\frac{r^2}{4\nu t}\right), \quad (3.8)$$

com $W(u)$ como a função de poço para aquíferos sem vazamento definida por

$$W(u) = \int_u^\infty \frac{1}{x} \exp(-x) dx. \quad (3.9)$$

A equação (3.8) é conhecida como a solução de Theis para aquíferos livres e confinados e foi utilizada por Cavalcanti (2006) para o cálculo de rebaixamento induzido por baterias de poços de produção e para a modelagem analítica de interferência entre poços e da proximidade destas como fronteiras verticais. Porém, a fórmula de Theis é mais restritiva visto que assume

fluxo horizontal no aquífero ao contrário da fórmula de Boulton que faz uma extensão tanto para a velocidade horizontal quanto a vertical do fluxo (Hunt e Scott, 2005).

3.1.4 Descarga de poços interferentes

De acordo com Hantush (1964), se a localização de N poços e o nível de água de em cada um deles ao final de um dado período de bombeamento contínuo forem conhecidos, então a descarga de cada poço pode ser obtida resolvendo as N equações linearmente independentes para um dado nível de água em cada poço usando a equação

$$s = \sum_{i=1}^N Q_i Z_{wi}(\mathbf{x}, t_i) \quad (3.10)$$

em que $Q_i Z_{wi}$ é o potencial do fluxo freático no i -ésimo poço, ou seja, o lado direito de uma equação de rebaixamento de um particular sistema de fluxo (a solução de Boulton (3.6) ou a solução de Theis (3.8)) e Q_i representa a descarga (que pode ser negativa ou positiva).

Pela solução de Theis (3.8), dois poços freáticos de raio r_w afastados lateralmente por uma distância d_m , bombeados pelo mesmo período de tempo t_0 num aquífero sem vazamento e rebaixamento s para ambos os poços, terão descargas Q_1 e Q_2 dadas por

$$Q_1 = Q_2 = \frac{2\pi\kappa s}{W\left(\frac{r_w^2}{4\nu t_0}\right) + W\left(\frac{d_m^2}{4\nu t_0}\right)}. \quad (3.11)$$

Similarmente para três poços distribuídos na forma de um triângulo equilátero de lado d_m ,

$$Q_1 = Q_2 = Q_3 = \frac{2\pi\kappa s}{W\left(\frac{r_w^2}{4\nu t_0}\right) + 2W\left(\frac{d_m^2}{4\nu t_0}\right)}. \quad (3.12)$$

Quando são feitas estimativas de rebaixamento próximos a poços de bombeamento, é necessário incluir a influência de outros poços operando na área, pois a descarga Q e o rebaixamento s são individualmente afetados por poços vizinhos, exceto nos casos em que o período de bombeamento é muito curto ou o espaçamento entre os poços seja grande o bastante para que as zonas de influência não se sobreponham efetivamente.

Para estudar o efeito da incerteza na condutividade $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ sobre as zonas de influência, calculamos a média e a variância da solução do problema definido pelas equações (3.1)-(3.3).

Para aproximar esta solução, discretizamos as variáveis espaciais, temporais e estocásticas separadamente. A discretização espacial é feita pelo método dos elementos finitos, enquanto a discretização temporal é realizada pelo método de Crank-Nicolson. Para a discretização estocástica do problema (3.1)-(3.3), consideramos os métodos de Monte Carlo e de Colocação, descritos na Seção 1.3.3 e Seção 2.5.2, respectivamente, e tratado no regime transiente na seção a seguir.

3.2 Método de Monte Carlo (MC)

Semelhante ao regime permanente (vide Seção 1.3.3), o MC no caso transiente depende da geração de um grande número de amostras do campo de condutividade hidráulica (3.4). Para calcular este campo primeiro discretizamos o domínio espacial D em uma malha formada por N vértices. Em seguida, avaliamos a função de covariância $C_Y(\mathbf{x}; \mathbf{y})$ nos vértices da malha, gerando uma matriz simétrica e positiva definida \mathbf{C}_κ de tamanho $N \times N$ dada por $C_{i,j} = C_Y(\mathbf{x}_i; \mathbf{y}_j)$ ($1 \leq i, j \leq N$). Valendo-se da decomposição de Cholesky, esta matriz pode ser decomposta na forma $\mathbf{C}_Y = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$, sendo que \mathbf{L} é uma matriz triangular inferior.

Seguindo Chakraborty e Dey (1995), aproximamos $Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ nos vértices da malha pelo vetor aleatório $\mathbf{Y} = \mathbf{Y}(\boldsymbol{\omega})$ dado por $\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_0 + \mathbf{L}\boldsymbol{\xi}$, onde \mathbf{Y}_0 , corresponde à média de \mathbf{Y} avaliada nos vértices da malha e $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_N)^T$ é um vetor de N variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com média zero e variância unitária. Note que a covariância do vetor aleatório \mathbf{Y} coincide com a matriz \mathbf{C}_Y :

$$\langle (\mathbf{Y} - \mathbf{Y}_0)(\mathbf{Y} - \mathbf{Y}_0)^T \rangle = \mathbf{L} \langle \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}^T \rangle \mathbf{L}^T = \mathbf{L} \mathbf{I} \mathbf{L}^T = \mathbf{C}_Y.$$

O algoritmo prossegue com a geração das amostras $\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\xi}^{(N_A)}$ do vetor $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\omega})$. Para cada $k = 1, 2, \dots, N_A$, seja $T^{(k)}(\mathbf{x}) = H_0\kappa^{(k)}(\mathbf{x}) = H_0\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}^{(k)})$ a função que interpola $H_0 \exp(\mathbf{Y}^{(k)}) = H_0 \exp(\mathbf{Y}_0 + \mathbf{L}\boldsymbol{\xi}^{(k)})$ nos vértices da malha, isto é, $T^{(k)}(\mathbf{x}_i) = H_0 \exp(Y_i^{(k)})$.

Calculamos para cada k a solução $h^{(k)}(\mathbf{x}; t)$ do problema

$$\left\{ \begin{array}{l} S(\mathbf{x}) \frac{\partial h^{(k)}(\mathbf{x}; t)}{\partial t} - \nabla \cdot (T^{(k)}(\mathbf{x}) \nabla h^{(k)}(\mathbf{x}; t)) = f(\mathbf{x}) \\ h^{(k)}(\mathbf{x}; 0) = H_0, \\ h^{(k)}(\mathbf{x}; t) = h_0(r) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \mathbf{x} \in D \subset \mathbb{R}^2 \\ r \in \Gamma_D, \end{array} \quad (3.13)$$

que aproximamos pelo método de elementos finitos no espaço e o método de Crank-Nicolson no tempo. Convém utilizar no método de elementos finitos a mesma malha e as mesmas funções de interpolação usadas no procedimento acima descrito.

As soluções $h^{(1)}(\mathbf{x}; t), h^{(2)}(\mathbf{x}; t), \dots, h^{(N_A)}(\mathbf{x}; t)$ do problema (3.13) representam amostras que podemos utilizar para estimar a média e a variância da solução procurada. Em geral, um alto número de amostras fornece uma aproximação precisa da média e da variância, mas eleva o custo computacional.

3.3 Método da Colocação (MCol)

Enquanto o método de Monte Carlo introduz uma aproximação da condutividade diretamente nas equações diferenciais (3.1)-(3.2), o método da Colocação parte do problema variacional associado

$$\int_D \frac{\partial h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}, t)}{\partial t} \phi(\mathbf{x}) + T(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t) \nabla \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_D f(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad \forall \phi \in H_0^1(D). \quad (3.14)$$

Aproximamos $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ e $h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t)$ pelas expansões finitas

$$\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \approx \exp \left(\langle Y(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \rangle + \sum_{n=1}^M \sqrt{\lambda_n} \varphi_n(\mathbf{x}) \xi_n \right), \quad h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t) \approx \sum_{k=1}^{M_p} h^{(k)}(\mathbf{x}, t) L_k(\boldsymbol{\xi}), \quad (3.15)$$

cujas funções $L_k(\boldsymbol{\xi})$ satisfazem $L_k(\boldsymbol{\xi}^{(l)}) = \delta_{k,l}$. Substituindo (3.15) em (3.14) e avaliando a equação resultante em $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\xi}^{(M_p)}$, obtemos

$$\int_D \frac{\partial h^{(k)}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \phi(\mathbf{x}) + T(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^{(k)}) \nabla h^{(k)}(\mathbf{x}, t) \nabla \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_D f(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \forall \phi \in H_0^1(D), \quad (3.16)$$

para $k = 1, 2, \dots, M_p$, de modo análogo ao do método de Monte Carlo.

Note que a expansão de $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ em (3.15) decorre do truncamento da expansão de Karhunen-Loève (3.5). A aproximação estabelecida para $h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t)$ visa projetar a solução no espaço $H_0^1(D) \otimes \mathcal{P}_p(\Omega)$ conforme descrito na Seção 2.5.2.

Como em (2.50), definimos

$$\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\xi}^{(M_p)}, \quad \boldsymbol{\xi}^{(k)} = (\xi_1^{(k_1)}, \xi_2^{(k_2)}, \dots, \xi_M^{(k_M)}), \quad (3.17)$$

e representamos a projeção de $h(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}; t)$ através de $L_k(\boldsymbol{\xi}) = \prod_{n=1}^M L_{k_n}(\xi_n)$, onde $L_{k_n}(\xi_n) \in \mathcal{P}_{p_n}$ são polinômios interpoladores de Lagrange definidos por

$$L_{k_n}(\xi_n^{(j_n)}) = \delta_{k_n, j_n}; \quad j_n, k_n = 1, \dots, p_n + 1.$$

Uma vez calculados $h^{(1)}(\mathbf{x}, t), \dots, h^{(M_p)}(\mathbf{x}, t)$ (que dependem de uma discretização no tempo e no espaço, como na seção anterior), a média aproximada é expressa por

$$E_p[h] = \sum_{k=1}^{M_p} h^{(k)}(\mathbf{x}, t) E[L_k(\boldsymbol{\xi})] = \sum_{k=1}^{M_p} h^{(k)}(\mathbf{x}, t) w_k, \quad w_k = \prod_{n=1}^M w_{k_n}. \quad (3.18)$$

De forma análoga, a variância aproximada é dada por

$$var_p(h) = \sum_{i=1}^{M_p} \sum_{j=1}^{M_p} (h^{(i)}(\mathbf{x}, t) - E_p[h]) w_i w_j (h^{(j)}(\mathbf{x}, t) - E_p[h]). \quad (3.19)$$

3.4 Resultados

Nesta seção iremos descrever os resultados de um experimento que fornece uma idéia geral da validade dos métodos numéricos acima descritos em problemas de escoamento laminar em aquíferos. No experimento o escoamento é transiente e utiliza uma geometria motivada pelo estudo de otimização de Cavalcanti (2006). Além disso, o conjunto de parâmetros hidráulicos utilizados são compatíveis com os do aquífero Recôncavo (BA).

O experimento foi estudado no caso determinístico (Cavalcanti, 2006). Propomos um estudo estocástico de tais problemas supondo que a condutividade segue uma distribuição lognormal com a função de covariância exponencial separável.

Consideramos uma malha de 20×20 elementos quadrados e conduzimos simulações de Monte Carlo com 5000 amostras.

3.4.1 Otimização da exploração do aquífero freático

Inicialmente propomos adotar uma bateria ótima contendo um número fixo de poços. A configuração da futura bateria pode ser ampliada em etapas sucessivas de modo que em cada uma delas sejam satisfeitos os critérios de otimização especificados como a seleção do espaçamento adequado, a geometria e as dimensões da bateria de extração de poços. Na seleção deste espaçamento, considerações técnicas e econômicas estão envolvidas. Quanto mais afastados estiverem os poços menor será a interferência entre eles, porém terá um alto custo com tubulações e instalações elétricas (Hantush, 1964).

A fim de reduzir este problema, Cavalcanti (2006) propôs um esquema de exploração otimizado do aquífero Recôncavo na bacia do rio Capivara usando a fórmula de Theis (3.8) e supondo meio homogêneo e isotrópico. Complementando o trabalho de Cavalcanti (2006), utilizamos também a fórmula de Boulton como solução analítica no cálculo da carga hidráulica.

Note que a análise das informações coletadas durante testes de bombeamento, depende largamente da seleção da equação fluxo-poço aplicável no sistema de investigação e da concordância com as suposições básicas que governam estas equações e as características do aquífero estudado.

As variações de rebaixamento com o tempo e a distância do poço de bombeamento podem ser interpretadas por vários caminhos se outras informações não forem avaliadas, trazendo por conta disto resultados imprecisos. Todavia, se os dados são cuidadosamente estudados e todas as possíveis interpretações são consideradas, as análises destes parâmetros podem prover informações valiosas não somente sobre as propriedades hidráulicas, mas também sobre as condições físicas e os parâmetros geométricos do sistema de fluxo tais como: a natureza e localização das fronteiras hidráulicas, a espessura média do aquífero, o raio do poço e as perdas hidráulicas.

Seguindo Cavalcanti (2006), consideramos adequado um rebaixamento máximo permitido da ordem de 13% de H_0 , a espessura saturada média do aquífero, ou seja, $s_{\max} = 50 m$.

Definido como critério de otimização o valor de rebaixamento máximo permissível s_{\max} , é possível determinar a distância mínima d_m entre poços de produção numa bateria genérica de extração. No presente trabalho o rebaixamento máximo permissível é definido como o rebaixamento criado por um único poço acrescido de 10% desse valor a ser causado pela interferência de cada poço da bateria, isto é, se $s_w = 0.13H_0$ é o rebaixamento de um dos poços numa bateria de dois poços, o rebaixamento máximo permissível na bateria é

$$s_{\max} = s_w + 0.1s_w. \quad (3.20)$$

No caso de três poços, o rebaixamento s é expresso por

$$s_{\max} = s_w + 0.1s_w + 0.01s_w, \quad (3.21)$$

e de forma análoga para os demais poços a serem inseridos.

Adotando os valores característicos da geometria e propriedades hidráulicas do aquífero Recôncavo e o critério de otimização referido anteriormente, calculamos as distâncias mínimas entre os poços para baterias com dois e três poços através das equações (3.11) e (3.12) respectivamente, supondo o tempo de exploração contínua de um ano de duração. Os mapas de contorno das distribuição do potencial foram calculados pelo método de elementos finitos cuja malha considerada foi 40×40 elementos quadrados.

As Figs. 3.1 (a) e 3.1 (b) foram calculadas através das fórmulas de Theis e de Boulton respectivamente, e mostram o esquema de dois poços freáticos com descargas uniformes. A Fig. 3.1 (c) mostra o perfil hidráulico entre os dois poços utilizando ambas as fórmulas de Boulton e de Theis.

No caso de três poços usamos a distância calculada por (Cavalcanti, 2006) cuja geometria é um triângulo equilátero de lado $d_m = 700 \text{ m}$ (vide Fig. 3.2).

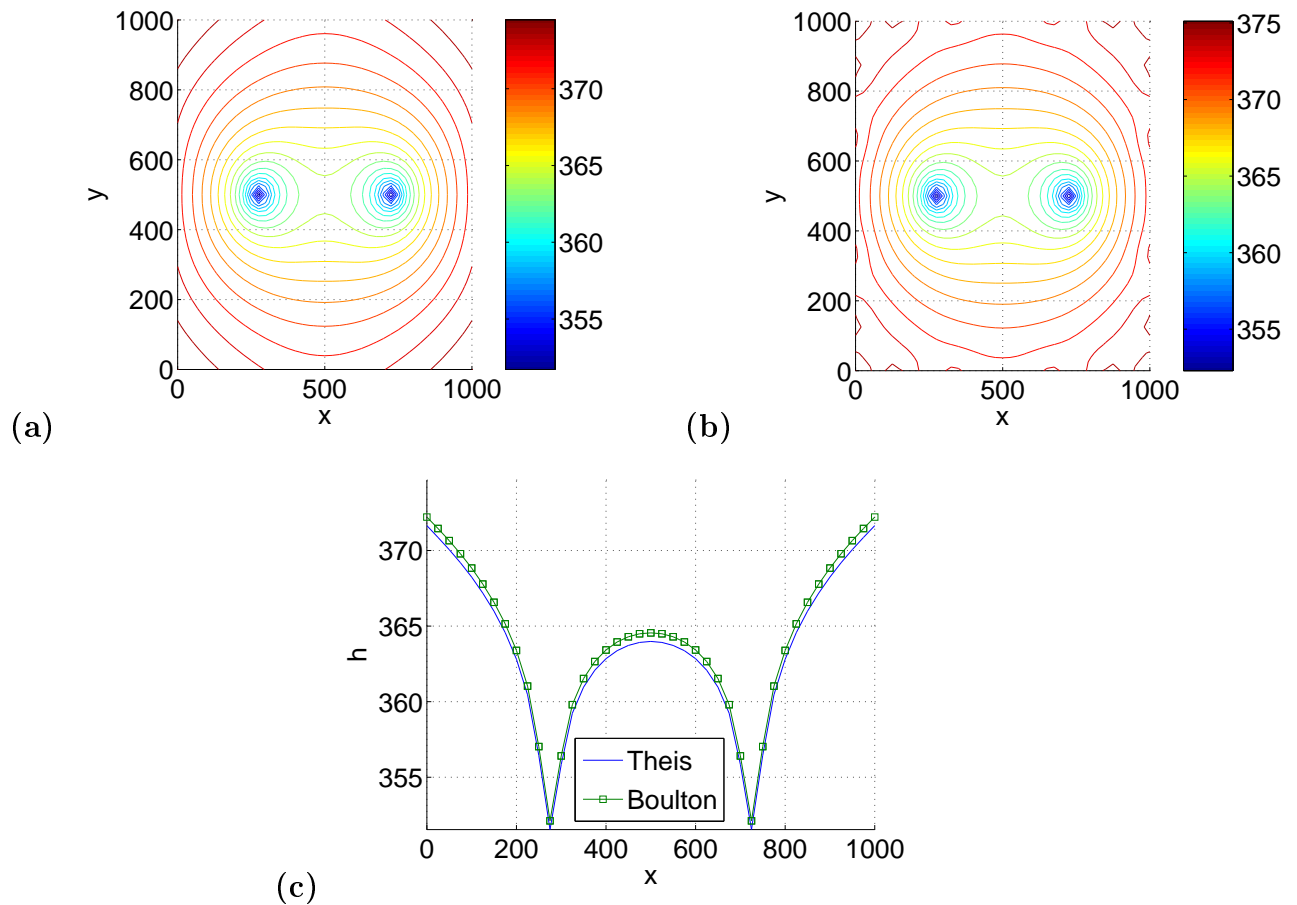


Figura 3.1: Carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços, em linha separados por uma distância $d_m = 460 \text{ m}$ e os respectivos perfis do potencial hidráulico. (a) Fórmula de Theis; (b) Fórmula de Boulton.

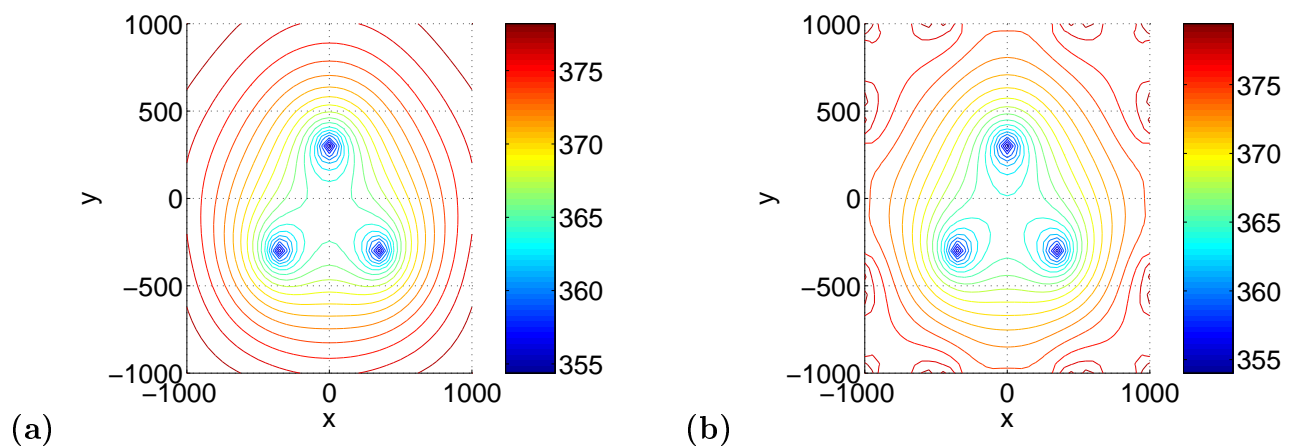


Figura 3.2: Carga hidráulica gerada pela interferência entre três poços, formando um triângulo equilátero de lado $d_m = 700 \text{ m}$. (a) Fórmula de Theis; (b) Fórmula de Boulton.

3.4.2 Aplicações em meio estatisticamente heterogêneo

Para ilustrar a aproximação estocástica na determinação do cálculo de rebaixamento de poços e a validade desta aproximação, aproveitamos a mesma geometria descrita pela Fig. 3.1 (a) cuja dimensão é $[0, 1000] \times [0, 1000]$ numa bateria de dois poços separados pela distância ($d_m = 460 \text{ m}$) e cujas coordenadas são $(270, 0)$ e $(730, 0)$. A estatística da condutividade hidráulica

$$\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = \exp(\langle Y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \rangle + Y^e(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})), \quad (3.22)$$

é dada pela média geométrica $\kappa_G = \exp(\langle Y \rangle) = 0.00001 \text{ m}^2/s$. Nenhum escoamento é prescrito sob a parte inferior ou superior do aquífero e o escoamento nas fronteiras laterais se estendem para o infinito com carga hidráulica fixada em 380 m . A taxa de bombeamento, como no caso homogêneo e isotrópico, foi fixada em $Q = 0.125 \text{ m}^3/s$ e a porosidade efetiva em $\psi_e = 25\%$. Estes parâmetros foram utilizados no modelo de rebaixamento de Theis.

As figuras a seguir comparam os resultados das simulações de MC com os resultados obtidos pelo MCol. No MCol consideramos o caos polinomial de grau $P = 2$ e a dimensão estocástica $M = 6$. Nas Figs. 3.3, 3.4 e 3.5 estão descritos os mapas de contorno da carga hidráulica e os perfis hidráulicos do MC e MCol nos casos $(\eta = 1, \sigma_Y^2 = 1)$, $(\eta = 4, \sigma_Y^2 = 1)$ e $(\eta = 100, \sigma_Y^2 = 1)$ respectivamente.

Através dos gráficos de perfil Fig. 3.3 (c), 3.4 (c) e 3.5 (c) podemos notar que não ocorre grande diferença nos resultados da média mesmo sob baixo comprimento de correlação, por causa das condições de fronteira.

É observado também que o MCol não foi capaz de desenvolver o mesmo resultado da média na variância. Segundo Le Maître et al. (2003) o problema está relacionado à dimensão estocástica muito baixa, visto que as autofunções de alta frequência no caso dos senos e cossenos com coeficientes a_n e b_n elevados (vide equação (1.23)) são excluídas da expansão de Karhunen-Loève e com isso as variações curtas causadas pelo baixo comprimento de correlação não são capturadas e a variância fica sub-estimada.

Entretanto, à medida que a correlação espacial aumenta existe uma melhora significativa

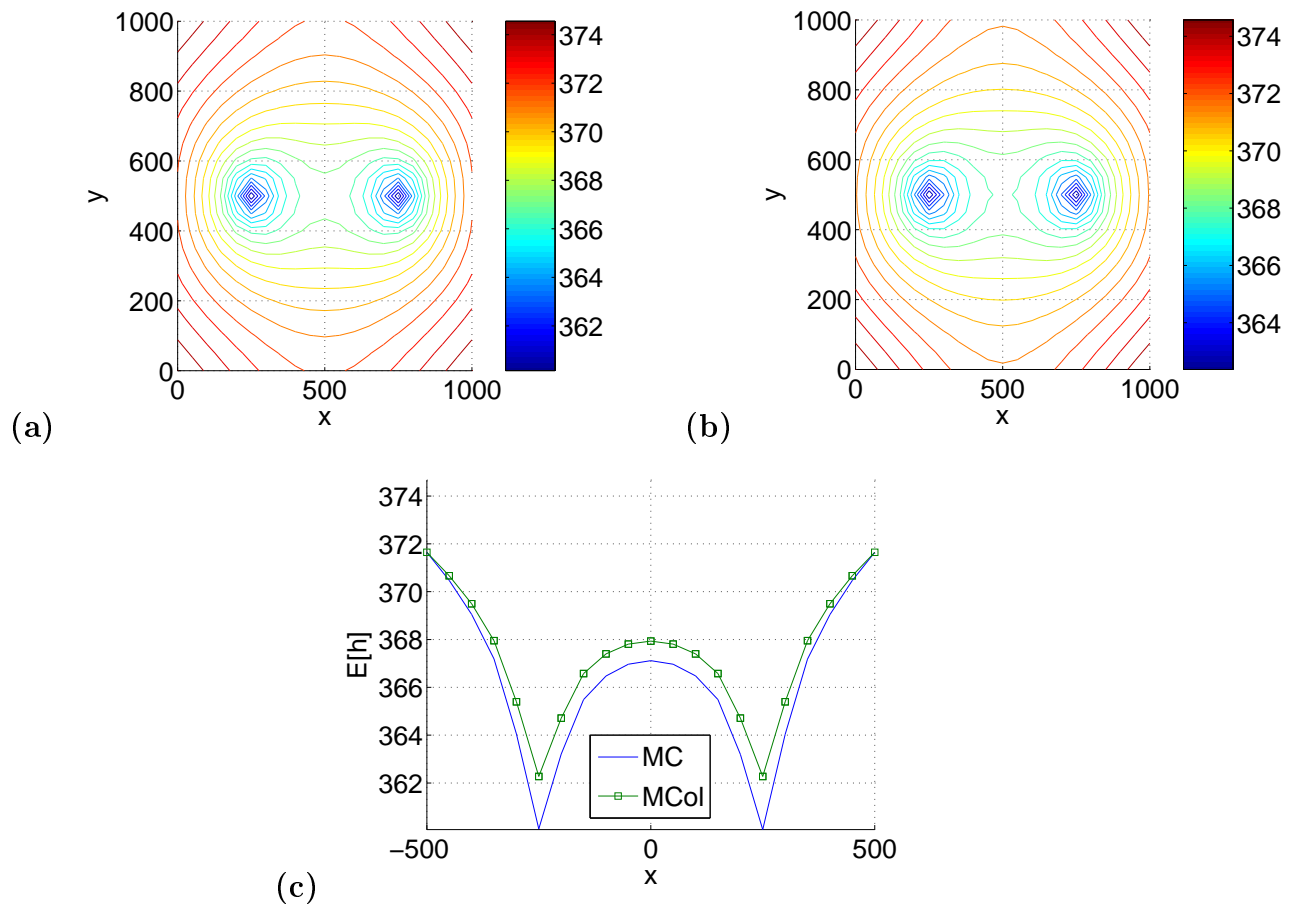


Figura 3.3: Média da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços, em linha separados por uma distância $d_m = 460 \text{ m}$. (a) MC (b) MCol. A Fig. (c) estabelece os respectivos perfis. $\eta = 1$.

na escala da variância (vide Fig. 3.8). Isto acontece porque quanto maior o comprimento de correlação, mais rapidamente os autovalores em (2.55) tendem a zero e mais rápida é a convergência da expansão (3.5), ou seja, o erro de truncamento da expansão (3.5) diminui com o aumento de η .

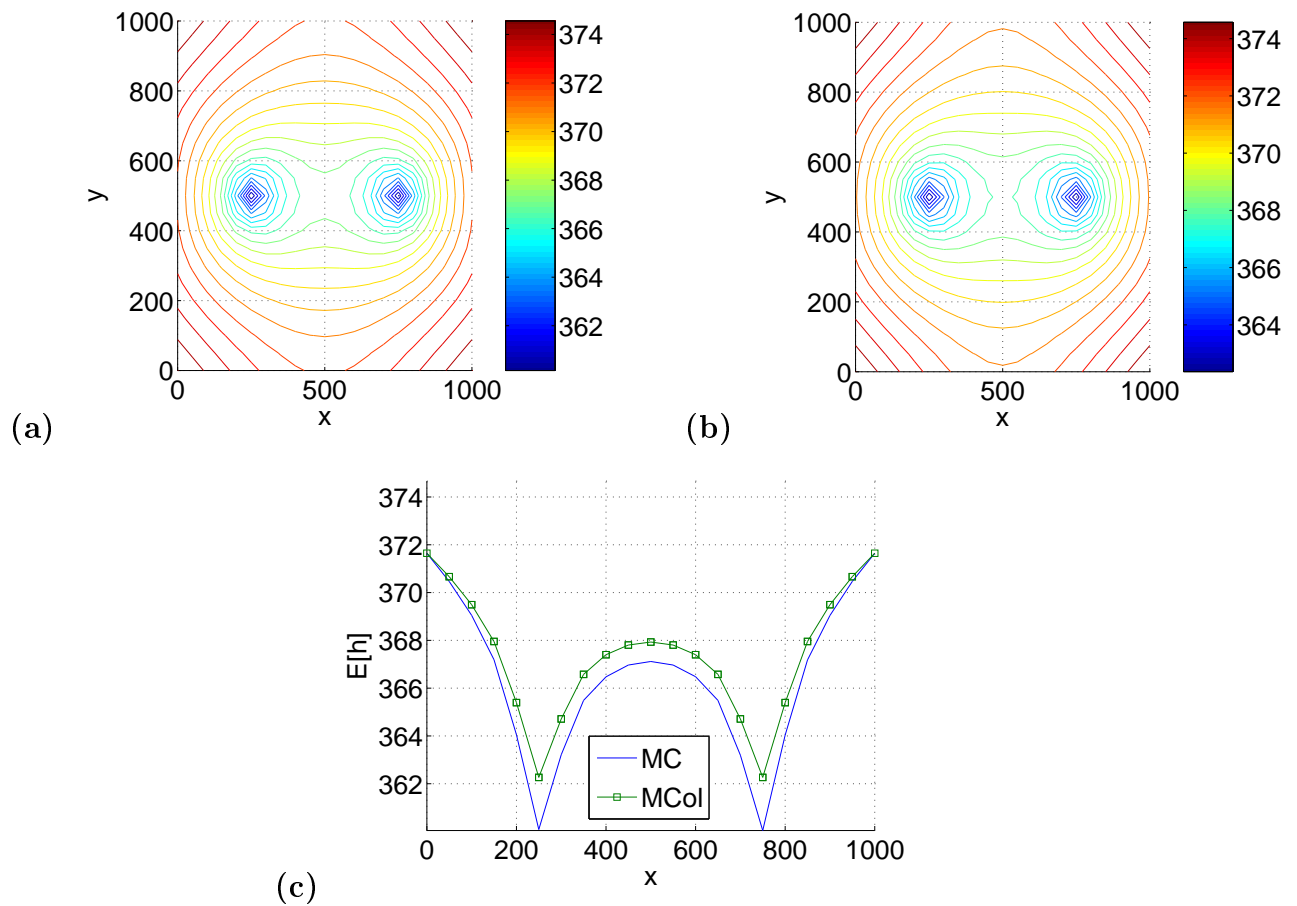


Figura 3.4: Média da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços, em linha separados por uma distância $d_m = 460$ m. (a) MC (b) MCol. A Fig. (c) estabelece os respectivos perfis. $\eta = 4$.

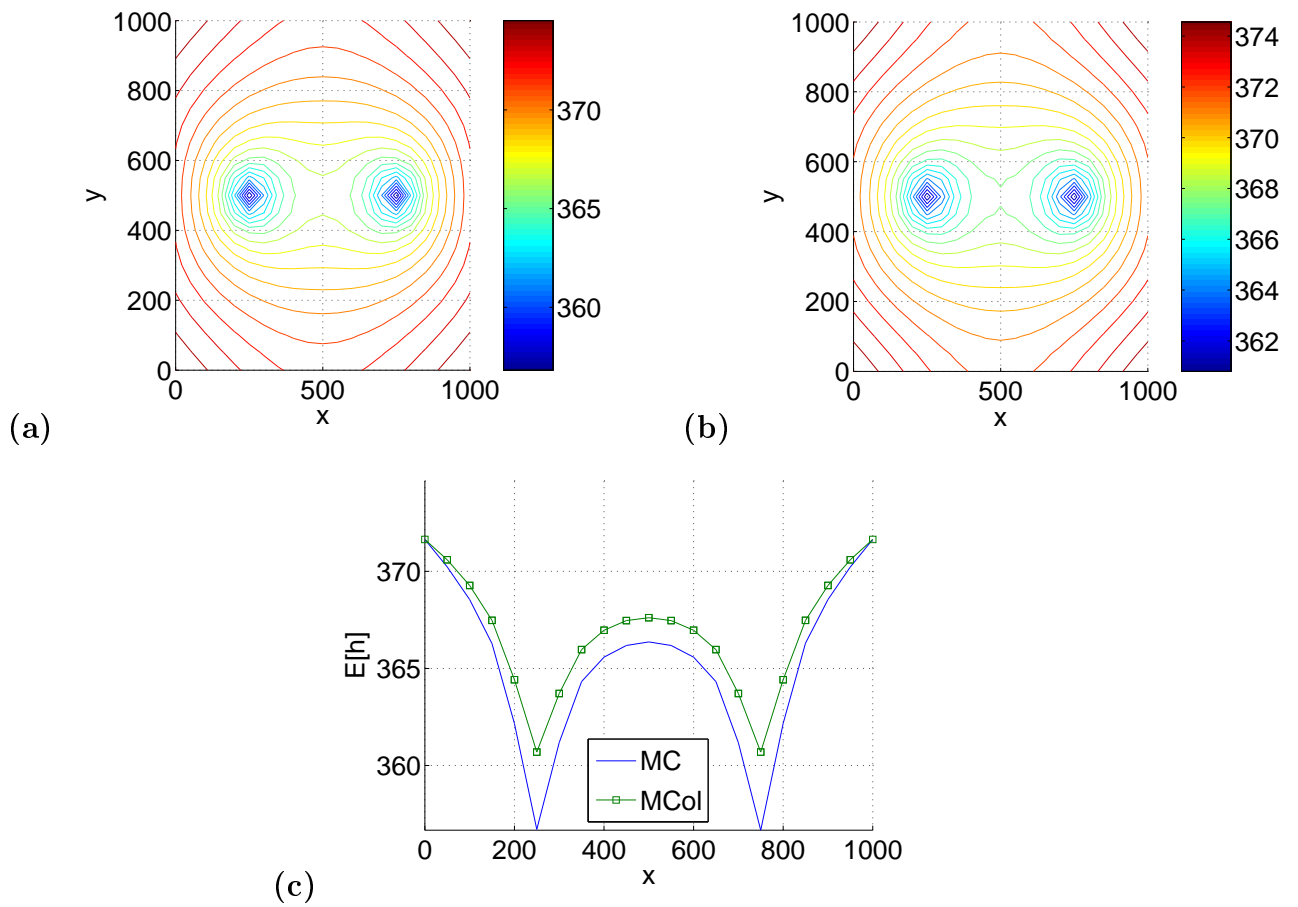


Figura 3.5: Média da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços, em linha separados por uma distância $d_m = 460$ m. (a) MC (b) MCol. A Fig. (c) estabelece os respectivos perfis. $\eta = 100$.

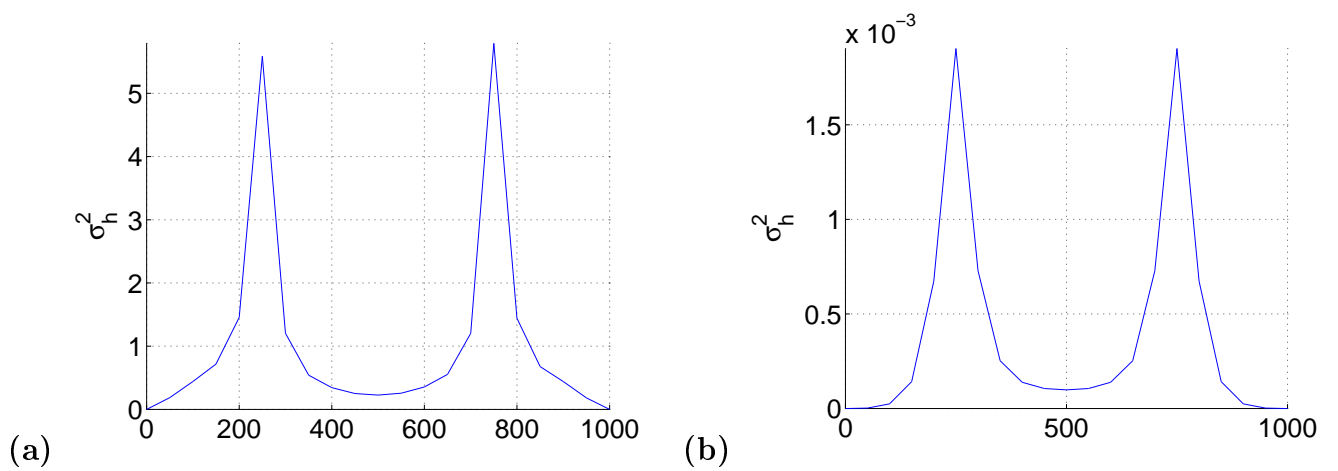


Figura 3.6: Perfis da variância da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços quando $\eta = 1$. (a) MC (b) MCol.

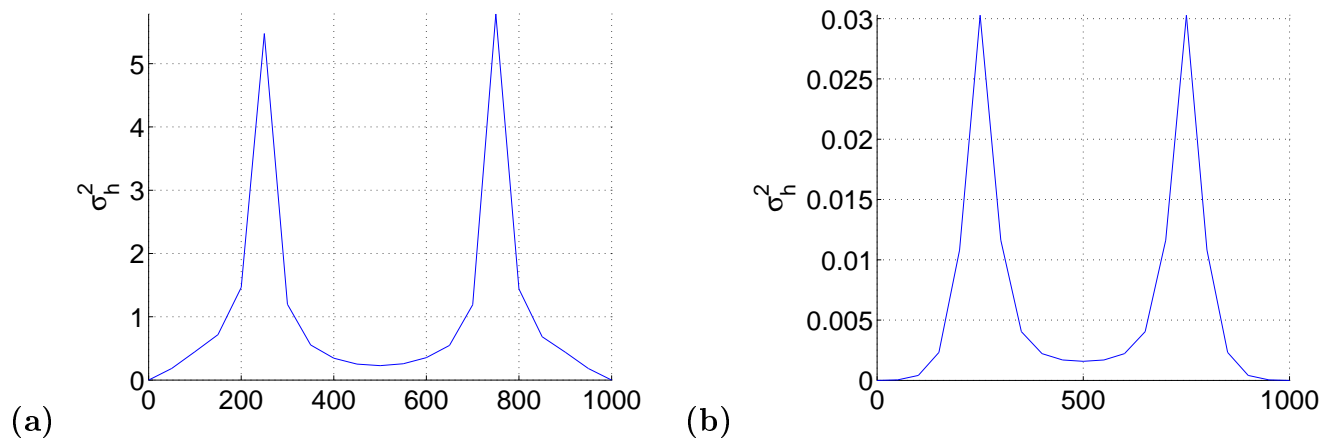


Figura 3.7: Perfis da variância da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços quando $\eta = 4$. (a) MC (b) MCol.

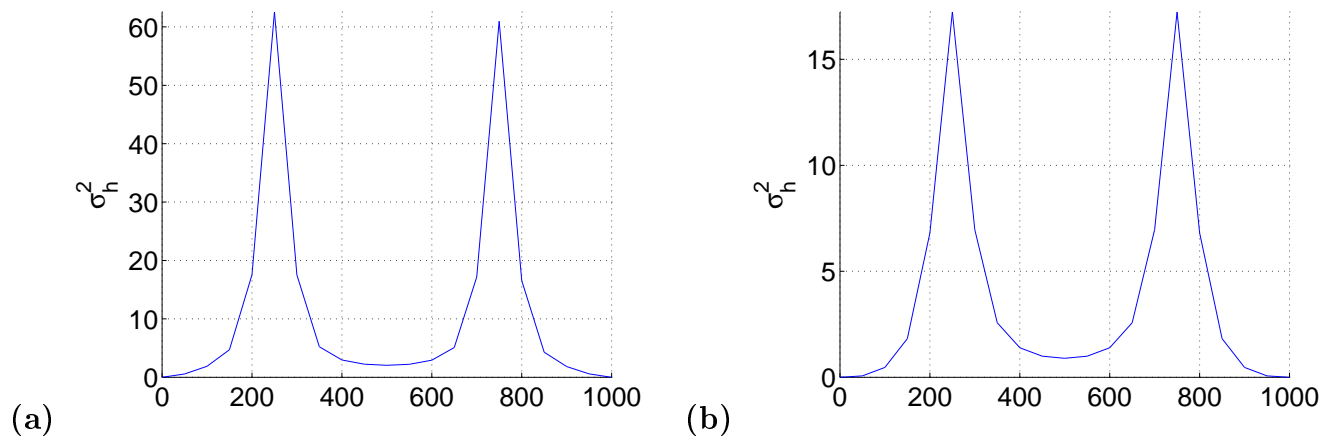


Figura 3.8: Perfis da variância da carga hidráulica gerada pela interferência entre dois poços quando $\eta = 100$. (a) MC (b) MCol.

4

Conclusão

Modelos estocásticos para escoamento transiente em zonas saturadas foram desenvolvidos neste estudo. Estabelecidas as características hidrogeológicas, soluções analíticas aproximadas foram usadas para hidráulica transiente de poços em aquíferos livres e extensos em meios homogêneos e isotrópicos. Depois se ampliou a metodologia para meios heterogêneos com a inclusão de parâmetros aleatórios. Notou-se que as condições de fronteira mantiveram os resultados da média estáveis mesmo sob o baixo comprimento de correlação. Isto porém não se refletiu na variância, que em virtude do baixo valor da dimensão estocástica M , acumulou erros nas simulações. Um dos problemas está relacionado a dimensão estocástica muito baixa, visto que as autofunções de alta frequência são excluídas da expansão de Karhunen-Loève e com isso as variações curtas causadas pelo baixo comprimento de correlação não são capturadas e a variância fica sub-estimada (Le Maître et al., 2003).

O texto se concentrou também na análise dos métodos de elementos finitos estocásticos como critério para quantificar as incertezas das quantidades do potencial dado pelos parâmetros aleatórios da distribuição lognormal. Através destes métodos estudou-se a estatística da solução em meio poroso heterogêneo cujas variáveis espaciais são fortemente ou fracamente correlacionadas.

Em comparação com o MC, que requer um grande número de realizações para a solução

atingir a convergência, os métodos propostos reduzem o esforço computacional substancialmente enquanto mantêm a acurácia desejada. Todavia, para campos aleatórios fracamente correlacionados mais termos na expansão de Karhunen-Loève podem ser requeridos aumentando como isto a dimensionalidade e o esforço computacional. Porém, deve ser observado que nas técnicas de simulação do campo aleatório, a expansão de Karhunen-Loève demanda um número mínimo de variáveis aleatórias padrão, tornando alguns métodos efetivos em determinadas situações.

A comparação dos resultados numéricos entre estes métodos revela que cada método possui suas próprias vantagens e desvantagens, contudo se todos os termos da expansão de perturbação na equação de Momentos fossem considerados, então a EMKL teria a mesma construção do MCol e do MGE. A diferença está na aproximação destes métodos. No caso da EMKL as aproximações do potencial hidráulico são recursivas, isto é, as aproximações de alta ordem dependem das aproximações de baixa ordem. Além disso, o número de termos retido na expansão de Karhunen-Loève referente a condutividade hidráulica é bem maior que o requerido pelo MCol e MGE.

As seguintes observações são feitas em relação ao MCol, MGE e EMKL:

- *Custo Computacional*: O MGE faz somente uma solução do sistema linear para obter a solução estocástica enquanto a EMKL e o MCol necessitam mais de uma solução de um sistema linear do procedimento. Entretanto, o tamanho da matriz no MGE é maior do que nos outros métodos. Por exemplo, se P é a ordem do caos polinomial e M a dimensão estocástica em uma malha de $N \times N$ pontos, então a dimensão matriz do sistema é $NQ \times NQ$ onde

$$Q = 1 + \sum_{s=1}^P \frac{1}{s!} \prod_{r=0}^{s-1} (M + r).$$

Em malhas muito refinadas, o MGE pode se tornar impraticável.

No caso da EMKL de ordem 1 necessitamos de um sistema de ordem $N = 0$ correspondente a matriz $N \times N$ e outro dependente do número de termos na expansão de Karhunen-Loève. Se M_1 é o número de termos desta expansão, então resolvemos M_1

Método	Parâmetros de entrada	Número de soluções	Dimensão da matriz dos coeficientes
MC	5000 amostras	5000	41×41
MGE	$P = 1, M = 6$	1	287×287
	$P = 2, M = 6$	1	1148×1148
MCol	$P = 1, M = 6$	64	41×41
	$P = 2, M = 6$	729	41×41
EMKL	$M_1 = 500$	501	41×41
	$M_1 = 100, M_2 = 40, M_3 = 30$	5881	41×41

Tabela 4.1: Número de equações resolvidas de cada método estocástico.

sistemas lineares de dimensão $N \times N$. Para a EMKL de ordem 2 devemos resolver sistemas de ordem 2 e 3 além dos sistemas de ordem 0 e 1 visto que no cálculo da variância é necessário a solução do sistema de ordem 3. Assim se M_2 e M_3 é o número de termos na expansão de ordem 2 e 3, respectivamente, então teremos de resolver $M_2(M_2 + 1)/2$ e $M_3(M_3 + 2)(M_3 + 2)/6$ sistemas lineares de dimensão $N \times N$ respectivamente (vide Zhang e Lu (2004), pg. 783). Uma característica importante deste método está no fato da matriz dos coeficientes se manter fixa. A única mudança irá ocorrer nos termos fontes, diminuindo consideravelmente o tempo de montagem do sistema em relação a MC.

Já no MCol resolvemos $(P + 1)^M$ sistemas lineares determinísticos independentes de dimensão $N \times N$ totalmente paralelizado semelhante ao MC enquanto o MGE, faz uma aproximação do potencial hidráulico através de sistemas totalmente acoplados. Assim o MCol é mais eficiente que a aproximação de Galerkin. Na Tabela 4.1 sob os parâmetros descritos na Seção 2.6 consideramos o custo computacional em relação a MC.

- *Variabilidade Espacial*: Tanto o MGE quanto o MCol se mostraram estáveis em grande variabilidade espacial. Em moderada variabilidade espacial, o MCol de segunda ordem é suficiente para uma boa acurácia nos resultados. Para uma grande variabilidade espacial termos de alta ordem podem ser necessários. Apesar da EMKL requerer um

grande número de termos na dimensão estocástica, o método se torna ineficiente para meios fortemente heterogêneos;

- *Coefficiente de Correlação*: Com alta ordem assintótica, a EMKL quantifica as incertezas do processo acuradamente em meio fracamente heterogêneo e cujas variáveis espaciais possuem pequena correlação. O mesmo desempenho não foi obtido pelo MGE e MCol que tiveram um erro de aproximação com MC relativamente grande no caso estacionário. Entretanto o MCol quantifica as incertezas do processo acuradamente em meios fortemente heterogêneos onde existe grande correlação entre as variáveis espaciais tanto no caso estacionário como transiente. Isto acontece pelo fato da expansão de Karhunen-Loève necessitar de poucos termos em campos aleatórios fortemente correlacionados.
- *Análise de Sensibilidade*: A análise de sensibilidade na variância de saturação do potencial indica como as variáveis aleatórias afetam o comportamento estocástico do escoamento. Podemos notar que a EMKL apesar de grande valor na dimensão estocástica M e alta correlação entre as variáveis espaciais, os resultados não atingiram a convergência esperada. Além disso, os gráficos de erro demonstram que os métodos estabilizam a variabilidade espacial a partir de certo M , implicando na existência de um M mínimo para valores de erro fixo. Neste caso, o MCol de ordem 2 levou vantagem sobre os demais métodos;

Entretanto as seguintes questões ficaram em aberto:

- *Dimensão dos parâmetros estocásticos*: Melhorar a eficiência do caos polinomial é um problema específico e depende da dimensão do espaço aleatório. Embora a expansão de Karhunen-Loève envolvida nos métodos de elementos finitos estocásticos possam reduzir a dimensão estocástica, a mesma poderá sofrer aumento para sistemas com baixo comprimento de correlação espacial. Isto poderá reduzir a eficiência da expansão do caos polinomial.
- *Convergência*: Estudar a convergência de soluções ótimas com respeito ao aumento da

dimensão estocástica omitindo o fato das variáveis aleatórias serem independentes e identicamente distribuídas.

- *Funções de base estocástica:* Encontrar funções de base estocástica que melhorem a qualidade da aproximação estocástica e ao mesmo tempo não exija grande custo computacional visto que o caos polinomial usado na formulação de Galerkin pode não ser a melhor escolha para avaliar a natureza probabilística de um processo.

Observe que os fenômenos considerados são analisados do ponto de vista da mecânica de fluidos tradicional, ou seja, admitindo a validade da Lei de Darcy. As condições impostas aos processos considerados não afetam significativamente as variações de temperatura, reações químicas ou mudanças de fase além dos processos considerados não serem tomados sobre uma escala molecular. Neste caso, todo tratamento é dado a elementos macroscópicos cuja matriz porosa inclui tanto sólido quanto fluido.

Aplicações podem ser feitas na drenagem e produção de óleo e gás em reservas de petróleo, visto que cada umas destas aplicações envolve a substituição de um fluido por outro, como por exemplo água por ar ou o inverso.

Apesar da metodologia dos métodos estocásticos ter sido direcionada ao problema de escoamento em meios porosos, contribuições podem surgir da química, agricultura, engenharia civil como também da biologia e da matemática aplicada.

Agradecimentos

Agradeço a Deus pela disposição.

Agradeço ao meu orientador e amigo Prof. Dr. Saulo Pomponet Oliveira pelos constantes esclarecimentos e revisões durante o trabalho.

Agradeço ao Prof. Dr. Marcus Vinicius Sarkis Martins pelas sugestões e ajuda no trabalho durante as visitas ao IMPA.

Agradeço aos professores Dr. Márcio Arab Murad, Dr. Abimael Fernando Dourado Loula, Dr. Amin Bassrei e Dr. Olivar Antônio Lima de Lima pelo precioso tempo gasto em ler minha tese e servir a comissão.

Agradeço aos professores do CPGG, em especial ao prof. Dr. Hédison Kiuity Sato pelo apoio fornecido durante minhas viagens.

Agradeço ao CPGG/UFBA, ao IMPA e a CAPES que forneceram as condições para realização deste trabalho.

Agradeço a todos os meus familiares pelo apoio às minhas escolhas.

Agradeço a todos os meus amigos, em especial os que deixaram sua contribuição neste trabalho: Michael Heimer, Eron, Vânia Brito, Flor Alba, Francisco Zambrano, Jusceli, Ednaldo, Leni, Zenilda, Ariston, Genilson, Rosângela, Hugo, Fabiana, Vladimir, Paulo Espinheira, Gary, Michelângelo, Gilclécio e Marco Antônio.

Apêndice **A**

A.1 Formulação Variacional do problema elíptico estocástico

Seguindo a seção 2 do artigo Babuška et al. (2004), vamos considerar a formulação de variacional de EDPs estocásticas onde a permeabilidade e a fonte são funções estocásticas, com covariância limitada e contínua. Neste caso, o problema modelo é um problema de difusão elíptica em um domínio D convexo com coeficiente de permeabilidade estocástico e heterogêneo $\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$, que por simplicidade é tido como isotrópico.

Seja $(\Omega, \mathfrak{B}(\Omega), \mu)$ um espaço de probabilidade finito e $D \subset \mathbb{R}^d$ um conjunto limitado com fronteira de Lipschitz $\Gamma = \partial D$. Assumimos também que $\kappa \in L^\infty(D \times \Omega)$ é estritamente positivo com limite inferior e superior κ_{min} e κ_{max} respectivamente, isto é,

$$\kappa_{min} \leq \kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \leq \kappa_{max}, \quad \forall (\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \in D \times \Omega. \quad (\text{A.1})$$

Desta forma, o problema modelo consiste em encontrar $u : \bar{D} \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ que satisfaz

$$\begin{cases} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla_{\mathbf{x}}(u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}))) = f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}), & \mathbf{x} \in D \\ u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = 0 & \mathbf{x} \in \partial D. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Devemos ter conhecimento das informações a respeito do coeficiente κ , incluindo sua média, o comprimento de correlação e a função de covariância do processo. Valendo-se destas informações e a fonte $f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ poderemos resolver (A.2).

Introduzimos o espaço de Hilbert

$$L^2(\Omega, H_0^1(D))$$

$$= \left\{ v : D \times \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid v \text{ é fortemente mensurável e } \int_{\Omega} \|v(\cdot; \boldsymbol{\omega})\|_{H_0^1(D)}^2 d\mu(\boldsymbol{\omega}) < \infty \right\}.$$

A.1 Observação. $H_0^1(D)$ é o subespaço de $H^1(D)$ consistindo de funções que dissipam-se na fronteira de D no sentido do traço e equipado com a norma

$$\|v\|_{H_0^1(D)}^2 = \int_D |\nabla v|^2 dx.$$

A formulação variacional de (A.2) é dada por: Encontrar $u \in L^2(\Omega, H_0^1(D))$ tal que para todo $v \in L^2(\Omega, H_0^1(D))$

$$\int_{\Omega} \int_D \kappa(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla_{\mathbf{x}} u \nabla_{\mathbf{x}} v d\mathbf{x} d\mu(\boldsymbol{\omega}) = \int_{\Omega} \int_D f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) v(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) d\mathbf{x} d\mu(\boldsymbol{\omega}). \quad (\text{A.3})$$

Considere neste caso, dois pontos $\mathbf{x} \in D$, $\boldsymbol{\omega} \in \Omega$ e o espaço tensorial $H_0^1(D) \otimes L^2(\Omega)$, com produto interno

$$(u, \hat{u})_{L^2(\Omega) \otimes H_0^1(D)} = \int_{\Omega} \left(\int_D \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \nabla_{\mathbf{x}} \hat{u}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) d\mathbf{x} \right) d\mu.$$

Se $u \in H_0^1(D) \otimes L^2(\Omega)$ então $u(\cdot; \boldsymbol{\omega}) \in H_0^1$ em quase todo ponto sobre Ω e $u(\mathbf{x}; \cdot) \in L^2(\Omega)$ para quase todo ponto sobre D . Além disso, dado $v : D \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ fortemente mensurável podemos definir um isomorfismo

$$L^2(\Omega; H^k(D)) \simeq H^k(D) \otimes L^2(\Omega) \simeq H^k(D; L^2(\Omega)), \quad (\text{A.4})$$

tal que os espaços $L^2(\Omega; H^k(D))$ e $H^k(D; L^2(\Omega))$ são definidos por

$$L^2(\Omega; H^k(D)) = \left\{ v : D \times \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\Omega} \|v(\cdot; \boldsymbol{\omega})\|_{H^k(D)}^2 d\mu < \infty \right\},$$

$$H^k(D; L^2(\Omega)) = \left\{ v : D \times \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \forall |\alpha| \leq k, \exists \partial^{\alpha} v \in L^2(\Omega) \otimes L^2(D) \right.$$

$$\left. \text{com } \int_{\Omega} \left(\int_D \partial^{|\alpha|} v(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \varphi(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) d\mathbf{x} \right) d\mu = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} \left(\int_D v(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \partial^{\alpha} \varphi(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) d\mathbf{x} \right) d\mu \right\}.$$

e $\varphi(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega})$ pertence ao espaço das funções infinitamente diferenciáveis com suporte compacto $C_0^{\infty}(D; \Omega)$. Similares construções podem ser feitas para produtos tensoriais de espaços de Banach $C(\Omega; H)$ embora a norma do espaço tensorial usada para obter o completamento

das somas formais tenha de ser definida explicitamente em cada caso. O espaço $C(\Omega; H)$ compreende todas as funções contínuas $u : \Omega \rightarrow H$ com a norma

$$\| u \|_{C(\Omega; H)} = \sup_{\omega \in \Omega} \| u(\mathbf{x}; \omega) \|_H < \infty.$$

Similares definições são aplicadas a subespaços $C^k(\Omega; H)$, $k \geq 1$. Mais detalhes vide Evans (1998) (pag.185).

A fim de introduzir a noção de espaço de Sobolev estocástico recordarmos a definição de derivação fraca a seguir:

Seja $v \in L^2(D) \otimes L^2(\Omega)$. Uma função $v(\mathbf{x}; \omega)$ possui derivada fraca se para qualquer multi-índice $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ existe $\partial^\alpha v \in L^2(D) \otimes L^2(\Omega)$ que satisfaz

$$\int_D \partial^\alpha v(\mathbf{x}; \omega) \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = (-1)^{|\alpha|} \int_D v(\mathbf{x}; \omega) \partial^\alpha \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

para todo $\varphi \in C_0^\infty(D)$.

Neste caso, devemos trabalhar com espaços de Sobolev estocásticos

$$\widetilde{W}_\mu^{s,q}(D) = L_\mu^q(\Omega; W^{s,q}(D)),$$

contendo funções estocásticas $v : D \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ que são mensuráveis com respeito a σ -álgebra do produto $B(D) \otimes \mathfrak{B}(\Omega)$ e equipadas com as normas médias

$$\begin{aligned} \| v \|_{\widetilde{W}_\mu^{s,q}(D)}^q &= \| v \|_{L_\mu^q(\Omega; W^{s,q}(D))}^q \\ &= E \left(\sum_{|\alpha| \leq s} \int_D |\partial^\alpha v|^q d\mathbf{x} \right), \end{aligned}$$

tais que $1 \leq q < \infty$ e $\| v \|_{\widetilde{W}_\mu^{s,\infty}(D)} = \max_{|\alpha| \leq s} (\sup_{D \otimes \Omega} |\partial^\alpha v|)$. Observe que se $v \in \widetilde{W}_\mu^{s,q}(D)$ então, $v(\cdot; \omega) \in W^{s,q}(D)$ e $\partial^\alpha v(\cdot; \omega) \in L^q(D)$ sobre $D \forall, |\alpha| \leq s$. Quando $q = 2$ o espaço acima é o espaço de Hilbert (vide (A.4))

$$\widetilde{H}^s(D) = \widetilde{W}_\mu^{s,2}(D) \simeq H^s(D) \otimes L_\mu^2(\Omega).$$

A.1.1 Existência e unicidade para um problema estocástico linear

Considere o espaço de Hilbert $H = \widetilde{H}_0^1(D) \simeq L_\mu^2(\Omega; H_0^1(D))$ envolvido com o produto interno

$$(u; v)_H = E \left(\int_D \nabla_{\mathbf{x}} u \nabla_{\mathbf{x}} v \, d\mathbf{x} \right).$$

Defina a forma bilinear

$$\mathcal{B}(u; v) = E \left(\int_D \kappa \nabla_{\mathbf{x}} u \nabla_{\mathbf{x}} v \, d\mathbf{x} \right) \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D.$$

De (A.1) segue a continuidade e coercividade, isto é

$$\begin{aligned} |\mathcal{B}(u; v)| &\leq \kappa_{\max} \|u\|_H \cdot \|v\|_H \quad \forall u, v \in H \\ \kappa_{\min} \|v\|_H^2 &\leq \mathcal{B}(v, v) \quad \forall v \in H. \end{aligned}$$

A aplicação direta do Teorema de Lax-Milgram (Evans, 1998) implica a existência e unicidade da solução na formulação variacional (A.3): Encontrar $u \in H$ tal que

$$\mathcal{B}(u; v) = \mathcal{L}(v) \quad \forall v \in H, \quad \mathcal{L}(v) = E \left(\int_D f \cdot v \, d\mathbf{x} \right)$$

Note que o funcional linear $\mathcal{L}(v)$ é limitado se

$$\int_{\Omega} \int_D f^2(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) \, d\mathbf{x} \, d\mu < \infty.$$

Desde que D seja um domínio convexo limitado em \mathbb{R}^d e κ seja uniformemente limitado, contínuo na primeira derivada, ou seja,

$$P \left(\omega \in \Omega \mid \kappa(\cdot; \boldsymbol{\omega}) \in C^1(D) \text{ e } \max_{x \in \overline{D}} |\nabla_{\mathbf{x}} \kappa(\cdot; \boldsymbol{\omega})| < C \right) = 1.$$

A teoria de regularidade elíptica implica que $u(\cdot; \boldsymbol{\omega}) \in H^2 \cap H_0^1$ (Evans, 1998).

A.1.2 Continuidade referente aos coeficientes κ e f

O resultado a seguir quantifica o efeito dos coeficientes κ e f na solução do problema (A.3).

A.2 Proposição. *Seja $(H, (\cdot, \cdot)_H)$ um espaço de Hilbert. Considere duas formas bilineares simétricas*

$$\mathcal{B}, \hat{\mathcal{B}} : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$$

que são H -coercivas e limitadas, isto é, existem constantes reais $0 < \kappa_{\min} < \kappa_{\max} < \infty$ tais que

$$\kappa_{\min} \|v\|_H^2 \leq \min \{ |\mathcal{B}(v; v)|, |\hat{\mathcal{B}}(v; v)| \}, \quad \forall v \in H$$

$$\max \{ |\mathcal{B}(u; v)|, |\hat{\mathcal{B}}(u; v)| \} \leq \kappa_{\max} \|u\|_H \cdot \|v\|_H \quad \forall v, u \in H.$$

Considere dois funcionais lineares limitados, $\mathcal{L}, \hat{\mathcal{L}} \in H'$ (onde H' é o dual de H) e sejam $u, \hat{u} \in H$ soluções dos problemas

$$\mathcal{B}(u; v) = \mathcal{L}(v) \quad \forall v \in H$$

$$\hat{\mathcal{B}}(u; v) = \hat{\mathcal{L}}(v) \quad \forall v \in H.$$

Sejam B_1, B_2 espaços de Banach arbitrários com constantes positivas C, γ tais que $u \in B_2 \subseteq H \subset B_1$, $\|\cdot\|_{B_1} \leq C \|\cdot\|_H$ e

$$|\hat{\mathcal{B}}(u; v) - \mathcal{B}(u; v)| \leq \gamma \|u\|_{B_1} \|v\|_{B_2} \quad \forall u \in H, v \in B_2. \quad (\text{A.5})$$

Então

$$\|u - \hat{u}\|_H \leq \frac{1}{\kappa_{\min}} (\|\mathcal{L} - \hat{\mathcal{L}}\|_{H'} + C\gamma \|v\|_{B_2}) \quad \forall u \in H, v \in B_2. \quad (\text{A.6})$$

Prova. Observando que o operador $\mathcal{B}(u, v)$ é coercivo, limitado e simétrico e aplicando a desigualdade

$$\kappa_{\min} \|u - \hat{u}\|_H^2 \leq \mathcal{B}(u - \hat{u}; u - \hat{u}) + \hat{\mathcal{B}}(u - \hat{u}; u) - \hat{\mathcal{B}}(u - \hat{u}; u),$$

chegamos ao resultado desejado.

A.3 Corolário. *Seja $1 < p < \infty$ com $\frac{1}{q} + \frac{1}{p} = 1$. Considere o espaço de Hilbert $H = \widetilde{H}_0^1 = L^2(\Omega, H_0^1(D))$ e coeficientes $\hat{\kappa}, \hat{f}$, satisfazendo $0 < \kappa_{\min} \leq \hat{\kappa} \leq \kappa_{\max} < \infty$, tal que $\hat{f} \in \widetilde{L}^2(D)$. Sejam \hat{u}, u soluções de*

$$E \left(\int_D \hat{\kappa} \nabla \hat{u} \nabla v \, dx \right) = E \left(\int_D \hat{f} \cdot v \, dx \right) \quad \forall v \in H,$$

$$E \left(\int_D \kappa \nabla u \nabla v \, d\mathbf{x} \right) = E \left(\int_D f \cdot v \, d\mathbf{x} \right) \quad \forall v \in H$$

respectivamente. Além disso, assuma que a solução u pertença ao espaço de Sobolev $\widetilde{W}^{1,2q}(D)$.

Então

$$\| u - \hat{u} \|_{\widetilde{H}_0^1(D)} \leq \frac{1}{\kappa_{\min}} \left(C_D \| f - \hat{f} \|_{\widetilde{L}^2(D)} + \| \kappa - \hat{\kappa} \|_{\widetilde{L}^{2p}(D)} \cdot \| u \|_{\widetilde{W}^{1,2q}(D)} \right) \quad (\text{A.7})$$

em que C_D é uma constante de Poincaré, ou seja,

$$\| v \|_{H_0^1(D)} \leq C_D \| v \|_{L^2(D)} \quad \forall v \in H_0^1(D).$$

Prova. Sejam $B_1 = \widetilde{H}_0^1(D)$ e $B_2 = \widetilde{W}^{1,2q}(D)$. A fim de aplicar (A.6), é suficiente limitar a diferença das formas bilineares, isto é,

$$\begin{aligned} \left| E \left(\int_D (\kappa - \hat{\kappa}) \nabla u \nabla v \, d\mathbf{x} \right) \right| &\leq \left(E \left(\int_D (\kappa - \hat{\kappa})^2 |\nabla u|^2 \, d\mathbf{x} \right) \right)^{1/2} \cdot \left(E \left(\int_D |\nabla v|^2 \, d\mathbf{x} \right) \right)^{1/2} \\ &\leq E \left(\int_D (\kappa - \hat{\kappa})^{2p} \, d\mathbf{x} \right)^{1/2p} \\ &\quad \cdot \left(E \left(\int_D |\nabla u|^{2q} \, d\mathbf{x} \right) \right)^{1/2q} \cdot \left(E \left(\int_D |\nabla v|^2 \, d\mathbf{x} \right) \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Referências Bibliográficas

- Aguilar, R. (2008) Quantificação de Incertezas por Métodos de Perturbação Estocástica em Meios Poroelásticos Heterogêneos, Tese de Doutorado, Laboratório Nacional de Computação Científica.
- Babuška, I.; Tempone, R. e Zouraris, R. (2004) Galerkin finite element approximations of stochastic elliptic partial differential equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **42**(2):800–825.
- Babuška, I.; Nobile, F. e Tempone, R. (2007) A stochastic collocation method for elliptic partial differential equations with random input data, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **45**(3):1005–1034.
- Cameron, R. e Martin, W. (1947) The ortogonal development of nonlinear functionals in series of Fourier-Hermite functionals, *Ann. Math.*, **48**:385–392.
- Cavalcanti, S. (2006) Quantificação dos recursos hídricos subterrâneos do aquífero Recôncavo na Bacia do Rio Capivara, Tese de Doutorado, Universidade Federal da Bahia.
- Chakraborty, S. e Dey, S. (1995) Stochastic finite element method for spatial distribution of material properties and external loading, *Computers and Structures*, **41**:41–45.
- Correa, M. e Loula, A. (2008) Unconditionally stable mixed finite element methods for Darcy flow, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **197**:1525–1540.
- Davis, P. e Rabinowitz, P. (1984) *Methods of Numerical Integration*, Academic Press, San Diego.
- Dutton, S. e Willis, B. (1998) Compararison of outcrop and subsurface sandstone permeability distribution, lower cretaceous fall river formations, South Dakota and Wyoming, *J. Sediment Res*, **68**:890–900.

- Engels, D. (1983) The multiple stochastic integral, *Memoirs of American Mathematical Society*, **38**:230–242.
- Evans, L. (1998) *Partial Differential Equations*, Grad. Stud. Math, 19, AMS, Providence, RI.
- Frauenfelder, P.; Schwab, C. e Todor, R. (2005) Finite elements for elliptic problems with stochastic coefficients, *Numer. Math.*, **195**:205–228.
- Ghanem, R. e Dham, S. (1998) Stochastic finite element analysis for multiphase flow in heterogeneous porous media, *Transport in Porous Media*, **32**:239–262.
- Ghanem, R. e Red-Horse, J. (1999) Propagation of probabilistic uncertainty in complex physical systems using a stochastic finite element approach, *Physica D*, **133**:137–144.
- Ghanem, R. e Spanos, P. (1991) *Stochastic Finite Element: A Spectral Approach*, Springer, New York.
- Gomes-Hernandez, J. e Wen, X.-H. (1998) To be or non to be multi-Gaussian? a reflection on stochastic hydrology, *Adv. Water Resource*, **21**:47–61.
- Hantush, M. (1964) *Hydraulics of wells*, In: *Advances in Hydrosiences*, vol.1, Academic Press, New York.
- Holden, H.; Øksendal, B.; Ubøe, J. e Zhang, T. (1996) *Stochastic Partial Differential Equations: A Modeling White Noise Functional Approach*, Birkhäuser.
- Huang, S.; Mahadevan, S. e Rebba, R. (2007) Collocation-based stochastic finite element analysis for random field problems, *Probabilistic Engineering Mechanics*, **22**:194–205.
- Hunt, B. e Scott, D. (2005) Extension of Hantush and Boulton solutions, *Journal of Hydrologic Engineering*, **10**(3):223–236.
- Imamura, T. e Meecham, W. (1965) Wiener-Hermite expansion in model turbulence in the late decay stage, *Journal of Mathematical Physics*, **6**:707–721.
- Itô, K. (1951) Multiply Wiener integral, *J. Math. Soc. Japan*, **3**:157–169.
- Jahedi, A. e Ahmadi, G. (1983) Application of Wiener-Hermite expansion to nonstationary random vibration of a Duffing oscillator, *ASME*, **50**:436–442.

- Ji, S.-H.; Lee, K.-K. e Park, Y.-C. (2004) Effects of the correlation length on the hydraulic parameters of a fracture network, *Transport in Porous Media*, **55**:153–168.
- Juncosa, M. (1945) An integral equation related to Bessel function, *Duke. Math. J.*, **3**(12):465–471.
- Kallianpur, G. (1980) *Stochastic Filtering Theory*, Springer Verlag, Berlin.
- Le Maître, O.; Knio, O.; Debusschere, B.; Najm, H. e Ghanem, R. (2003) A multigrid solver for two-dimensional stochastic diffusion equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **192**:4723–4744.
- Le Ravalec-Dupin, M. (2005) *Inverse Stochastic Modeling of Flow in Porous Media: Application to Reservoir Characterization*, Editions Technip, Paris.
- Li, H. e Zhang, D. (2007) Probabilistic collocation method for flow in porous media: Comparisons with other stochastic methods, *Water Resources Research*, **43**:1–13.
- Lu, Z. e Zhang, D. (2004) A comparative study on uncertainty quantification for flow in randomly heterogeneous media using Monte Carlo simulation and conventional and KL-based Moment-equation approaches, *SIAM*, **26**(2).
- Mela, K. e Louie, J. (2001) Correlation length and fractal dimension interpretation from seismic data using variograms and power spectra, *Geophysics*, **66**(5):1372–1378.
- Mesquita, M.; Moraes, S. e Corrente, J. (2002) More adequate probability distributions to represent the saturated soil hydraulic conductivity, *Sci. Agr.*, **59**:789–793.
- Mikhlin, S. (1957) *Integral equations*, Pergamon Press, London.
- Paley, G. e Poggio, T. (1977) The Volterra representation and the Wiener expansion: validity and pitfalls, *SIAM J. Appl. Math.*, **33**(2):195–216.
- Paley, R. e Wiener, N. (1937) *Fourier Transforms in the Complex Domain*, Amer. Math. Soc, New York.
- Riesz, F. e Sz.-Nagy, B. (1990) *Functional Analysis*, Dover, New York.
- Rupert, C. e Miller, C. (2007) An analysis of polynomial chaos approximations for modeling

- single-fluid-phase flow in porous medium systems, *Journal of Computational Physics*, **226**:2175–2205.
- Schevenels, M.; Lombaert, G. e Degrand, G. (2004) Application of stochastic finite element method for Gaussian and non-Gaussian systems, In: *Proceedings of ISMA*, vol. 133, pp. 3299–3313.
- Slepian, D. e Pollak, H. (1961) Prolate spheroidal wave functions, *Fourier analysis and uncertainty-i*, *Bell. System Tech. J.*, **40**:43–63.
- Wiener, N. (1938) The homogeneous chaos, *Amer. J. Math.*, **60**:897–936.
- Yang, J.; Zhang, D. e Lu, Z. (2004) Stochastic analysis of saturated-unsaturated flow in heterogeneous media by combining Karhunen-Loève expansion and perturbation method, *Journal of Hydrology*, **294**:18–38.
- Yasui, S. (1979) Stochastic functional Fourier series, Volterra series and nonlinear systems analysis, *IEEE*, **AC-24**:230–242.
- Zhang, D. (2002) *Stochastic Methods for Flow in Porous Media: Coping with Uncertainties*, Academic Press, San Diego.
- Zhang, D. e Lu, Z. (2002) Stochastic analysis of flow in heterogeneous unsaturated-saturated system, *Water Resources Research*, **38**(2):10.1–10.15.
- Zhang, D. e Lu, Z. (2004) An efficient, high-order perturbation approach for flow in random porous media via Karhunen-Loève and polynomial expansions, *Journal of Computational Physics*, **194**:773–794.