

Métodos de Elementos Finitos Estocásticos para Modelos de Escoamento em Meios Porosos

Saulo Pomponet Oliveira

Depto. de Matemática, UFPR, 81531-990, Curitiba, PR e-mail: saulopo@ufpr.br

Resumo- Este texto descreve alguns dos métodos de elementos finitos estocásticos mais conhecidos: o método de elementos finitos acoplado com o método de Monte Carlo, o método de Galerkin espectral, o método de momentos acoplado com a expansão de Karhunen-Loève e o método da colocação, ilustrando-os com experimentos numéricos de escoamento em meios porosos saturados em regime permanente, assumindo que a condutividade hidráulica segue uma distribuição de probabilidade lognormal.

Palavras-chave: Karhunen-Loève, método de elementos finitos, método da colocação

STOCHASTIC FINITE ELEMENT METHODS FOR MODELS OF FLOW IN POROUS MEDIA

Abstract- This survey describes some stochastic finite element methods, namely the finite element method coupled with the Monte Carlo method; the spectral Galerkin method; the Karhunen-Loève moment-equation method; and the stochastic collocation method, which are illustrated with numerical experiments of steady flow in saturated media, assuming that the hydraulic conductivity follows a lognormal distribution.

KeyWord: Karhunen-Loève, finite element method, stochastic collocation

1. INTRODUÇÃO

A modelagem matemática de fenômenos físicos em meios cujas propriedades materiais não são inteiramente conhecidas pode ser realizada utilizando modelos probabilísticos de tais propriedades. Os modelos probabilísticos compensam a escassez de dados e fornecem margens de erros para os resultados calculados.

O escoamento em meios porosos é um dos fenômenos que se encaixam neste perfil. Propriedades como a porosidade e a condutividade hidráulica são estimadas por exemplo por meio de amostras recolhidas de poços. Resultados experimentais sugerem que a distribuição lognormal representa satisfatoriamente estas propriedades (Zhang, 2002).

Quando os modelos probabilísticos das propriedades materiais são acoplados às equações diferenciais que governam o escoamento de fluidos, o modelo completo passa a ser descrito por *equações diferenciais estocásticas*.

Esta apresentação é uma breve revisão de alguns métodos numéricos para a solução de equações diferenciais estocásticas associadas a problemas de escoamento em meios porosos (vide Aquilar (2008) e Azevedo (2009) para uma descrição mais abrangente).

Vamos considerar o seguinte problema de valores de

contorno (PVC) associado ao escoamento num meio poroso saturado em regime permanente: encontrar o potencial hidráulico $u = u(\mathbf{x}; \omega)$ tal que

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\kappa(\mathbf{x}; \omega) \nabla u) = f(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D \subset \mathbb{R}^2; \\ u(\mathbf{x}; \omega) = 0 & \mathbf{x} \in \partial D, \end{cases} \quad (1)$$

em que $f(\mathbf{x})$ representa as forças externas (podendo também incorporar condições de contorno não-homogêneas) e $\kappa(\mathbf{x}; \omega)$ representa a condutividade hidráulica do meio. A variável ω representa um evento arbitrário em um espaço de probabilidade (Ω, \mathcal{B}, P) .

Seja $\kappa(\mathbf{x}; \omega) = \kappa_0(\mathbf{x}) \exp(Y(\mathbf{x}; \omega))$, em que Y é um processo estocástico gaussiano com média $E[Y] = 0$ e covariância

$$E[(Y(\mathbf{x}; \omega) - E[Y])(Y(\mathbf{y}; \omega) - E[Y])] = C(\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

2. MÉTODOS

O primeiro método descrito, o método de Monte Carlo (MC), é um método conceitualmente simples que consiste na geração de um número elevado de amostras $\kappa_1(\mathbf{x}), \kappa_2(\mathbf{x}), \dots, \kappa_N(\mathbf{x})$ da condutividade hidráulica $\kappa(\mathbf{x}; \omega)$ e no cálculo das amostras

$u_1(\mathbf{x}), u_2(\mathbf{x}), \dots, u_N(\mathbf{x})$ tais que

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\kappa_i(\mathbf{x}) \nabla u_i) = f(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D; \\ u_i(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \in \partial D, \quad i = 1, \dots, N. \end{cases}$$

Note que o cálculo da amostra u_i envolve a solução de um PVC determinístico, que pode ser resolvido por diversos métodos existentes. Nos experimentos a seguir, o método de elementos finitos será utilizado.

Os métodos a seguir são construídos a partir da expansão de Karhunen-Loève do processo $Y = \log(\kappa/\kappa_0)$:

$$Y(\mathbf{x}; \omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} \varphi_n(\mathbf{x}) \xi_n, \quad (2)$$

sendo $\xi_1, \dots, \xi_n, \dots$ variáveis aleatórias independentes com distribuição $N(0, 1)$ e $\{\lambda_n, \varphi_n(\mathbf{x})\}$ os autopares da decomposição espectral da função de covariância:

$$\int_D C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \varphi_n(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \lambda_n \varphi_n(\mathbf{x}). \quad (3)$$

Esta decomposição em geral não é válida para processos não gaussianos como $\kappa(\mathbf{x}; \omega)$ e a própria solução $u(\mathbf{x}; \omega)$. Consideramos duas formas de aproximar a solução: uma expansão do tipo Taylor construída por um método de perturbação e uma expansão em polinômios ortogonais multi-dimensionais de ξ_1, ξ_2, \dots

A aproximação baseada num método de perturbação é empregada por Zhang e Lu (2004) no o método de momentos acoplado com a expansão de Karhunen-Loève (KLME). Neste método, a equação diferencial é reescrita na forma

$$-\nabla Y(\mathbf{x}; \omega) \cdot \nabla u(\mathbf{x}; \omega) - \Delta u(\mathbf{x}; \omega) = \frac{f(\mathbf{x}) e^{-Y(\mathbf{x}; \omega)}}{\kappa_0},$$

o termo $e^{-Y(\mathbf{x}; \omega)}$ é expandido na forma

$$e^{-Y(\mathbf{x}; \omega)} = 1 - Y(\mathbf{x}; \omega) + \frac{1}{2} Y(\mathbf{x}; \omega)^2 - \dots$$

e a expansão (2) é substituída na equação resultante. Note de (2) que $Y(\mathbf{x}; \omega)^k$ é formado por termos da forma $\xi_{i_1}^{k_1} \xi_{i_2}^{k_2} \dots \xi_{i_l}^{k_l}$ com $k_1 + \dots + k_l = k$. Isto motiva expandir $u(\mathbf{x}; \omega)$ na forma

$$u(\mathbf{x}; \omega) = u^{(0)}(\mathbf{x}) + u^{(1)}(\mathbf{x}; \omega) + u^{(2)}(\mathbf{x}; \omega) + \dots \quad (4)$$

onde $u^{(k)}(\mathbf{x}; \omega)$ é também formado por termos da mesma forma que $Y(\mathbf{x}; \omega)^k$, ou seja:

$$\begin{aligned} u^{(1)}(\mathbf{x}; \omega) &= \sum_{n=1}^{M_1} u_n^{(1)}(\mathbf{x}) \xi_n(\omega) \\ u^{(2)}(\mathbf{x}; \omega) &= \sum_{n=1}^{M_2} \sum_{m=1}^{M_2} u_{n,m}^{(2)}(\mathbf{x}) \xi_n(\omega) \xi_m(\omega) \\ &\dots \end{aligned}$$

Substituindo esta expansão na equação obtida anteriormente e coletando os termos de mesma ordem, obtemos uma sequência recursiva de equações para cada

termo da expansão de $u(\mathbf{x}; \omega)$:

$$\begin{aligned} -\Delta u^{(0)}(\mathbf{x}) &= \frac{f(\mathbf{x})}{\kappa_0} \\ -\Delta u_n^{(1)}(\mathbf{x}) &= \sqrt{\lambda_n} \left(\nabla \phi_n(\mathbf{x}) \nabla u^{(0)}(\mathbf{x}) - \frac{f(\mathbf{x})}{\kappa_0} \phi_n(\mathbf{x}) \right) \\ &\dots \end{aligned}$$

Note que o operador diferencial é o mesmo para todos os termos da expansão. Assim como no método de Monte Carlo, o método de elementos finitos tradicional pode ser utilizado para calcular cada termo separadamente. As séries (2) e (4) são truncadas após M e P termos, respectivamente.

O método de Galerkin espectral (MGE), por sua vez, expande a solução na forma

$$u(\mathbf{x}, \omega) \approx \sum_{k=1}^Q u_k(\mathbf{x}) \psi_k(\xi_1, \dots, \xi_M), \quad (5)$$

onde ψ_k é o k -ésimo polinômio de Hermite multi-dimensional de grau P , com $k = 1, \dots, Q$,

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

Dada uma base global de elementos finitos $\{\phi_1, \dots, \phi_n\}$, cada coeficiente $u_k(\mathbf{x})$ é escrito como uma combinação linear

$$u_k(\mathbf{x}) = u_{k,1}(\mathbf{x}) \phi_1(\mathbf{x}) + u_{k,2}(\mathbf{x}) \phi_2(\mathbf{x}) + \dots + u_{k,n}(\mathbf{x}) \phi_n(\mathbf{x}).$$

O método de Galerkin espectral corresponde ao método de Galerkin aplicado ao seguinte problema variacional: encontrar $u \in V = L^2(\Omega, H_0^1(D))$ tal que

$$\int_{\Omega} \int_D \kappa \nabla u \cdot \nabla v d\mathbf{x} d\Omega = \int_{\Omega} \int_D f v d\mathbf{x} d\Omega \quad \forall v \in V.$$

O subespaço de dimensão finita de V utilizado é

$$V_h = \text{span}\{\phi_i(\mathbf{x}) \psi_j(\xi_1, \dots, \xi_M), 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq Q\}.$$

Impondo a condição de ortogonalidade do resíduo da aproximação (5), obtemos um sistema linear cuja matriz de coeficientes é formada $Q \times Q$ blocos de tamanho n . O cálculo das integrais envolvidas segue a estratégia descrita por Rupert e Miller (2007); vide Azevedo (2009) para mais detalhes.

O último método revisado neste texto é uma versão proposta por Babuška et al (2007) do método de colocação (MCol). Levando-se em conta a fórmula de quadratura

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(\xi) e^{-\xi^2/2} d\xi = \sum_{j=1}^{P+1} p(\xi_j^*) w_j \quad \forall p \in P_{2P+1},$$

sendo ξ_j^* a j -ésima raiz do polinômio de Hermite 1D de grau $P+1$, podemos substituir as funções ψ_k por polinômios de Lagrange multi-dimensionais cujos pontos de colocação são produtos tensoriais das raízes ξ_j^* . Desta forma, se utilizarmos a quadratura acima para avaliar as integrais com respeito a cada uma das variáveis ξ_1, ξ_2, \dots , obtemos um sistema linear em que a matriz dos coeficientes é diagonal por blocos. Assim, o sistema linear desacopla em vários sistemas de ordem n , de modo análogo ao método de Monte Carlo.

2. RESULTADOS

Considere o seguinte experimento apresentado por Zhang e Lu (2004) e estendido por Azevedo (2009): temos um domínio espacial $D = [0, 10] \times [0, 10]$ sujeito às seguintes condições de contorno:

$$\begin{cases} \nabla u(x, y; \omega) \cdot \mathbf{n} = 0, & y = 0, 10 \\ u(x, y; \omega) = 10.5, & x = 0 \\ u(x, y; \omega) = 10.0, & x = 10 \end{cases}$$

Neste exemplo a fonte f é nula e a função de covariância é dada por

$$C_Y(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sigma_Y^2 \exp(-|x_1 - y_1|/\eta - |x_2 - y_2|/\eta).$$

O método de elementos finitos bilineares com uma malha de 40×40 elementos quadrados é utilizado em todos os métodos descritos na seção anterior. A figura 1 apresenta as aproximações de primeira ordem ($P = 1$) da variância do potencial hidráulico obtida pelos métodos MGE, KLME e MCol, considerando como solução de referência o método MC com $N = 5000$ amostras. A figura 2 apresenta as aproximações de segunda ordem destes métodos.

Em geral (Azevedo, 2009), o método KLME é mais robusto com respeito ao coeficiente de correlação (η), enquanto os métodos MGE e MCol são mais robustos com respeito à variância da condutividade log-transformada (σ_Y^2). Além disso, o fato do método MCol ter um desempenho semelhante ao MGE indica que o método da colocação, que possui um custo inferior, é uma boa alternativa ao método de Galerkin espectral.

REFERÊNCIAS

AGUILAR, R. **Quantificação de incertezas por métodos de perturbação estocástica em meios poroelásticos heterogêneos.** Tese de Doutorado, Laboratório Nacional de Computação Científica, 2008

AZEVEDO, J. **Modelagem numérica de escoamento transiente em meios porosos aleatórios saturados usando a expansão de Karhunen-Loève.** Tese de doutorado, Universidade Federal da Bahia, 2009.

BABUŠKA, I; NOBILE, F.; TEMPONE, R. A stochastic collocation method for elliptic partial differential equations with random input data. **SIAM Journal of Numerical Analysis**, V. 45, p. 1005-1034, 2007.

RUPERT, C.; MILLER, C. An analysis of polynomial chaos approximations for modeling single-fluid-phase flow in porous medium systems. **Journal of Computational Physics**, V. 226, p. 2175-2205, 2007.

ZHANG, D. **Stochastic methods for flow in porous media: coping with uncertainties.** Academic Press, San Diego, 2002.

ZHANG, D.; LU, Z. An efficient, high-order perturbation approach for flow in random porous media via Karhunen-Loève and polynomial expansions. **Journal of Computational Physics**, v. 194, p. 773-794, 2004.

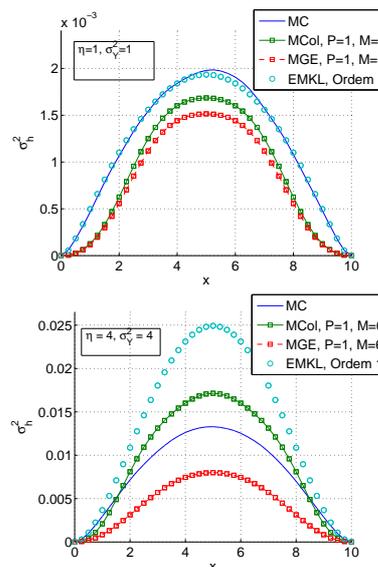


Figura 1: Variância do potencial hidráulico com $P = 1$. Em cima: $\sigma = \eta = 1$; em baixo: $\sigma = \eta = 4$.

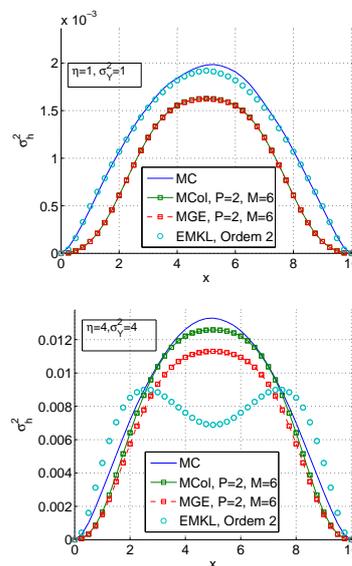


Figura 2: Variância do potencial hidráulico com $P = 2$. Em cima: $\sigma = \eta = 1$; em baixo: $\sigma = \eta = 4$.