

Resolução da Equação de Darcy em 2D via FEM e Aprendizado de Operadores com DeepONet Incorporando Upscaling

Jairson Alberto Sami

15 de dezembro de 2025

Resumo

A caracterização de propriedades efetivas em meios porosos heterogêneos é fundamental para a modelagem de reservatórios e aquíferos, mas a resolução direta das equações de fluxo em alta resolução espacial impõe um custo computacional proibitivo. Este trabalho propõe uma abordagem baseada em aprendizado profundo de operadores (*Deep Operator Networks* – DeepONet) para acelerar o processo de *upscaling* da permeabilidade absoluta. Utilizando o Método dos Elementos Finitos (FEM), foi gerada uma base de dados massiva contendo 10.000 simulações da equação de Darcy em domínios bidimensionais com campos de permeabilidade estocásticos e anisotrópicos. A arquitetura DeepONet foi treinada para aprender o operador não-linear que mapeia a microestrutura heterogênea diretamente para as permeabilidades efetivas (K_{eff}) nas direções principais. Os resultados demonstram que o modelo atua como um modelo substituto robusto, alcançando coeficientes de determinação (R^2) superiores a 0,97 e erros médios absolutos desprezíveis quando comparado à solução numérica de referência. A abordagem valida o uso de redes neurais como uma alternativa computacionalmente eficiente para a quantificação de propriedades macroscópicas, preservando a física do escoamento com drástica redução no tempo de inferência.

1 Introdução

O escoamento de fluidos em meios porosos desempenha um papel central em diversas áreas das geociências e da engenharia, incluindo reservatórios de petróleo, aquíferos, remediação ambiental e transporte de contaminantes [BHM⁺07, JAT⁺19]. A formulação matemática clássica que descreve esses fenômenos é baseada na equação de Darcy, a qual relaciona o gradiente de pressão ao fluxo em meios permeáveis [PMM23]. Em meios naturais, entretanto, a permeabilidade apresenta elevada variabilidade espacial, frequentemente distribuída de forma altamente heterogênea e multiescalar. Essa heterogeneidade influencia de maneira decisiva o comportamento global do escoamento, tornando essencial o uso de ferramentas que permitam representar adequadamente tais efeitos em escalas maiores [RA22, PMM23].

A resolução direta da equação de Darcy em alta resolução espacial é, em geral, computacionalmente cara. Simulações de elementos finitos em malhas refinadas exigem grande capacidade computacional, especialmente quando se pretende avaliar múltiplas realizações estocásticas de campos de permeabilidade. Além disso, a incorporação explícita de heterogeneidades finas pode se tornar impraticável em modelos de larga escala, o que motiva o desenvolvimento de técnicas de *upscaling* para obter parâmetros efetivos que representem o comportamento médio do meio poroso. Entre esses parâmetros, a permeabilidade efetiva é fundamental para preservar, em escala macroscópica, os efeitos do campo microscópico [RA22].

Nos últimos anos, métodos de aprendizado profundo vêm emergindo como alternativas promissoras para reduzir o custo computacional e ampliar a capacidade de generalização

de modelos aplicados a problemas multiescalares [PMM23]. Em particular, as arquiteturas do tipo *operator learning*, como a Deep Operator Network (DeepONet), apresentada por [LJP⁺21] têm se destacado por sua habilidade em aprender operadores que mapeiam funções de entrada para funções de saída, capturando relações complexas entre campos espaciais. Essa abordagem oferece uma via eficiente para aproximar soluções de equações diferenciais parciais, especialmente quando as entradas apresentam alto grau de variabilidade, como ocorre nos campos de permeabilidade [PMM23].

Neste trabalho, propõe-se resolver a equação de Darcy bidimensional utilizando o Método dos Elementos Finitos (FEM), gerar dados para o procedimento de *upscaling* de permeabilidade e treinar uma DeepONet capaz de aprender o operador que relaciona um campo de permeabilidade heterogêneo às suas permeabilidades efetivas. Especificamente, busca-se construir conjuntos de dados contendo campos de permeabilidade fina e suas respectivas permeabilidades efetivas nas direções principais, avaliar a eficiência do *upscaling* em termos da preservação da resposta hidráulica global e investigar a capacidade da DeepONet de generalizar o operador que mapeia campos de permeabilidade para k_{eff} quando exposta a novos campos não utilizados no treinamento. Essa integração entre modelagem numérica tradicional e métodos modernos de aprendizado de operadores visa desenvolver estratégias híbridas, computacionalmente eficientes e adequadas para lidar com a complexidade associada à heterogeneidade dos meios porosos.

2 Formulação Matemática

2.1 Equação de Darcy em Meio Anisotrópico

O escoamento de fluidos em meios porosos rígidos e totalmente saturados, sob a hipótese de regime estacionário, é descrito pela combinação da lei de Darcy com a equação da continuidade para fluidos incompressíveis. Considerando que o meio geológico apresenta anisotropia intrínseca, a equação governante no domínio $\Omega \subset R^2$ assume a forma elíptica clássica:

$$-\nabla \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{x})\nabla p(\mathbf{x})) = f(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Omega. \quad (2.1.1)$$

Definições:

- $p(\mathbf{x})$: campo escalar de pressão [Pa];
- $f(\mathbf{x})$: termo fonte ou sumidouro (aqui assumido nulo);
- $\mathbf{K}(\mathbf{x})$: tensor de permeabilidade de segunda ordem.

A estrutura geométrica da microescala e a malha estruturada empregada e por simplificação da equação justificam a adoção de um tensor de permeabilidade estritamente diagonal:

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} K_{xx}(x, y) & 0 \\ 0 & K_{yy}(x, y) \end{bmatrix}, \quad (2.1.2)$$

com permeabilidades distintas nas direções principais ($K_{xx} \neq K_{yy}$) e ausência de termos cruzados ($K_{xy} = 0$), caracterizando explicitamente a anisotropia do meio.

2.2 Condições de Contorno

O domínio computacional é o quadrado unitário $\Omega = [0, 1]^2$. As condições de contorno são divididas entre Dirichlet e Neumann homogêneas:

$$\begin{aligned} p &= p_D \quad \text{em } \Gamma_D, \\ -(\mathbf{K}\nabla p) \cdot \mathbf{n} &= 0 \quad \text{em } \Gamma_N, \end{aligned}$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário exterior. A configuração exata de Γ_D e Γ_N varia conforme o experimento (fluxo horizontal ou vertical).

2.2.1 Formulação Fraca

Seja V o espaço de funções admissíveis e V_0 o espaço de funções teste que se anulam em Γ_D . Multiplicando (2.1.1) por $v \in V_0$ e aplicando o Teorema da Divergência, obtém-se:

$$\int_{\Omega} \nabla v \cdot (\mathbf{K}\nabla p) \, d\Omega = \int_{\Omega} v f \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} v (\mathbf{K}\nabla p \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma.$$

Dado que $f = 0$ e que as condições de Neumann são homogêneas, resta:

$$\int_{\Omega} \nabla v \cdot (\mathbf{K}\nabla p) \, d\Omega = 0 \quad \forall v \in V_0.$$

Expandindo com o tensor diagonal:

$$a(p, v) = \int_{\Omega} \left(K_{xx} \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + K_{yy} \frac{\partial p}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) d\Omega = 0. \quad (2.2.1)$$

2.2.2 Discretização por Elementos Finitos

A pressão p é aproximada no espaço CG_1 (funções contínuas lineares por partes), enquanto o campo de permeabilidade é representado em DG_0 (funções constantes por elemento). O sistema linear resultante é:

$$A_{ij} = \int_{\Omega} [K_{xx} \nabla_x \phi_i \nabla_x \phi_j + K_{yy} \nabla_y \phi_i \nabla_y \phi_j] \, d\Omega.$$

2.3 Regime Estacionário e Malha

Adota-se regime estacionário, de modo que $\partial p / \partial t = 0$. A malha é um particionamento triangular uniforme do quadrado unitário com resolução 20×20 , resultando em 800 elementos e 441 nós. Esse tamanho foi escolhido para viabilizar a execução de um conjunto massivo de experimentos numéricos: **10.000 simulações independentes**, cada uma com um campo distinto de permeabilidade anisotrópica.

3 Metodologia

3.1 Geração dos Campos de Permeabilidade Anisotrópica

Os campos de permeabilidade K_{xx} e K_{yy} são sintetizados por meio de uma *síntese trigonométrica estocástica*, projetada para reproduzir heterogeneidades espaciais complexas e anisotrópicas. Para cada realização, define-se:

$$\Psi_{\alpha}(x, y) = 0.5 + 0.5 [A_1 \sin(\omega_x \pi x + \phi_x) \cos(\omega_y \pi y + \phi_y) + A_2 \cos(\omega_x \pi x) \sin(\omega_y \pi y)],$$

com $\alpha \in \{xx, yy\}$. As frequências $\omega_{x,y} \sim \mathcal{U}[2, 6]$, amplitudes $A_{1,2} \sim \mathcal{U}[0.3, 0.8]$ e fases $\phi_{x,y}$ são amostradas de forma independente para cada direção, garantindo ausência de isotropia artificial.

A permeabilidade final é obtida através da transformação:

$$K_\alpha(\mathbf{x}) = 0.1 + 0.9 |\Psi_\alpha(\mathbf{x})|,$$

a qual assegura positividade, variabilidade e contraste físico-realista. Os campos resultantes são então projetados no espaço funcional DG_0 .

3.2 Resolução Numérica com Firedrake

As simulações foram realizadas utilizando o framework *Firedrake*. A malha é construída via `UnitSquareMesh` e a formulação fraca é compilada automaticamente através do *Unified Form Language* (UFL).

3.2.1 Solver

A solução do sistema linear utiliza:

- método iterativo do Gradiente Conjugado (CG);
- pré-condicionador multigrid algebraico BoomerAMG (Hypre).

Esta combinação é eficiente para problemas elípticos com coeficientes heterogêneos.

3.3 Procedimento de Upscaling

3.3.1 Objetivo

O *upscaling* visa determinar o tensor efetivo de permeabilidade \mathbf{K}^{eff} que reproduz o fluxo médio do meio heterogêneo. Foram realizadas **10.000 simulações completas**, cada uma correspondendo a uma microestrutura distinta, para construção da base de dados necessária ao treinamento do modelo DeepONet.

3.3.2 Cálculo da Permeabilidade Efetiva

Para cada campo de permeabilidade são conduzidos dois experimentos independentes:

1. Fluxo Horizontal (K_{xx}^{eff}):

$$p = 1 \text{ em } x = 0, \quad p = 0 \text{ em } x = 1, \quad \nabla p \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ em } y = 0, 1.$$

2. Fluxo Vertical (K_{yy}^{eff}):

$$p = 1 \text{ em } y = 0, \quad p = 0 \text{ em } y = 1, \quad \nabla p \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ em } x = 0, 1.$$

O fluxo médio na fronteira de saída é calculado a partir da integral do fluxo normal.

Para o **fluxo vertical**, a saída ocorre em $y = 1$ (Γ_{out}^y):

$$\Phi_y = \int_{\Gamma_{out}^y} -K_{yy}(\mathbf{x}) \nabla p_y \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.3.1)$$

Para o **fluxo horizontal**, a saída ocorre em $x = 1$ (Γ_{out}^x):

$$\Phi_x = \int_{\Gamma_{out}^x} -K_{xx}(\mathbf{x}) \nabla p_x \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.3.2)$$

A permeabilidade efetiva na direção vertical é definida por:

$$K_{yy}^{eff} = \left| \frac{\Phi_y L}{A \Delta P} \right|. \quad (3.3.3)$$

E na direção horizontal por:

$$K_{xx}^{eff} = \left| \frac{\Phi_x L}{A \Delta P} \right|. \quad (3.3.4)$$

Como o domínio é unitário ($L = 1$, $A = 1$) e o gradiente imposto é $\Delta P = 1$, obtém-se as formas simplificadas:

$$K_{yy}^{eff} = |\Phi_y| \quad \text{e} \quad K_{xx}^{eff} = |\Phi_x|. \quad (3.3.5)$$

3.3.3 Base de Dados

Toda a base gerada com 10.000 amostras é salva no formato `npz`, contendo:

- **Entrada (Branch):** tensores contendo K_{xx} e K_{yy} ;
- **Saída (Target):** vetores contendo $(K_{xx}^{eff}, K_{yy}^{eff})$.

3.4 Particionamento e Preparação dos Dados para DeepONet

Para assegurar a capacidade de generalização do modelo e mitigar o risco de sobreajuste (*overfitting*), o conjunto total de dados D foi submetido a um particionamento aleatório do tipo *randomized hold-out*. O procedimento foi conduzido em duas etapas, utilizando sementes pseudoaleatórias fixas para garantir a reprodutibilidade dos resultados:

1. **Separação do conjunto de teste:** Inicialmente, 10% das amostras foram isoladas para compor o conjunto de teste (D_{test}), reservado exclusivamente para a avaliação final do desempenho do modelo.
2. **Divisão entre treinamento e validação:** O subconjunto remanescente, correspondente a 90% dos dados, foi subdividido na proporção 3:1, resultando em um conjunto de treinamento (D_{train}) com 67,5% do total de amostras e um conjunto de validação (D_{val}) com 22,5%.

Dessa forma, a distribuição final das amostras corresponde a 67,5%, 22,5% e 10% para os conjuntos de treinamento, validação e teste, respectivamente.

3.5 Pré-processamento e Normalização

Devido à disparidade de magnitude entre os dados brutos de permeabilidade e as coordenadas espaciais, aplicou-se uma normalização *Z-score* (*standardization*) para promover estabilidade numérica e acelerar a convergência do algoritmo de otimização baseado em gradiente descendente. A transformação é definida como:

$$\hat{x} = \frac{x - \mu_{train}}{\sigma_{train}}, \quad (3.5.1)$$

onde μ_{train} e σ_{train} representam a média e o desvio padrão amostrais do conjunto de treinamento D_{train} . Para evitar vazamento de dados (*data leakage*), esses parâmetros foram calculados exclusivamente em D_{train} e aplicados posteriormente aos conjuntos de validação e teste. O protocolo foi implementado separadamente para o tensor de entrada da rede de Branch (sensores), o tensor da rede de Trunk (coordenadas) e as variáveis alvo (K_{eff}).

3.6 Arquitetura da Rede Neural: DeepONet

A arquitetura empregada baseia-se na *DeepONet*, projetada para aproximar operadores não-lineares que mapeiam funções de entrada paramétrica para quantidades de interesse no domínio físico. O modelo consiste em duas redes neurais profundas paralelas, cujas saídas são posteriormente combinadas para realizar a inferência [LJP⁺21].

3.6.1 Rede de Branch (*Branch Net*)

A Rede de Branch, \mathcal{N}_{branch} , codifica o espaço de entrada, representado pelo mapa de permeabilidade discretizado:

- **Entrada:** Vetor $\mathbf{u} \in R^{d_{in}}$, obtido pelo achatamento (*flattening*) dos dados dos sensores, com $d_{in} = 2 \times n_{sensores}$.
- **Estrutura:** MLP com três camadas ocultas. Para cada camada l , a operação é:

$$\mathbf{h}^{(l)} = \sigma(\mathbf{W}^{(l)}\mathbf{h}^{(l-1)} + \mathbf{b}^{(l)}), \quad (3.6.1)$$

onde $\sigma(\cdot)$ é a função de ativação ReLU (*Rectified Linear Unit*).

- **Espaço Latente:** A saída final projeta a entrada em um espaço de características latentes de dimensão $p = 128$, produzindo o vetor de coeficientes $\mathbf{b} \in R^p$.

3.6.2 Rede de Trunk (*Trunk Net*)

A Rede de Trunk, \mathcal{N}_{trunk} , codifica a geometria do domínio físico contínuo:

- **Entrada:** Coordenadas espaciais $\mathbf{x} = (x, y) \in R^2$ de cada ponto da malha.
- **Estrutura:** MLP com camadas densas de 128 neurônios e ativação ReLU.
- **Espaço Latente:** Produz um vetor de características $\mathbf{t}(\mathbf{x}) \in R^p$ compatível com a dimensão de saída da rede de Branch.

3.6.3 Mecanismo de Fusão e Predição Global

Diferentemente da formulação clássica da DeepONet, que utiliza produto escalar simples, implementou-se fusão via produto de Hadamard (elemento a elemento), seguido por camada linear de predição e agregação global. Para uma amostra de entrada \mathbf{u} e ponto de coordenadas $\mathbf{x}_k \in P$:

$$\mathbf{h}_{fuse}(\mathbf{u}, \mathbf{x}_k) = \mathcal{N}_{branch}(\mathbf{u}) \odot \mathcal{N}_{trunk}(\mathbf{x}_k), \quad (3.6.2)$$

onde \odot denota o produto de Hadamard. O vetor fundido é processado por uma camada linear final (*head*) para gerar as componentes locais de permeabilidade. A propriedade efetiva macroscópica (K^{eff}) é obtida pela média global sobre todos os pontos do domínio:

$$\hat{\mathbf{y}} = \frac{1}{|P|} \sum_{k=1}^{|P|} (\mathbf{W}_{head} \cdot \mathbf{h}_{fuse}(\mathbf{u}, \mathbf{x}_k)) + \beta, \quad (3.6.3)$$

onde $\mathbf{W}_{head} \in R^{2 \times p}$ e β representam os pesos e viés aprendíveis da camada de saída, produzindo simultaneamente \hat{K}_{xx}^{eff} e \hat{K}_{yy}^{eff} .

3.7 Avaliação de Desempenho

A avaliação do modelo DeepONet foi realizada por meio de métricas de erro clássicas para problemas de regressão. Durante o treinamento, a otimização dos parâmetros da rede neural minimizou a função de perda de Erro Quadrático Médio (MSE), escolhida por sua sensibilidade a grandes desvios e adequação a problemas contínuos.

Para a avaliação final no conjunto de teste, foram adotadas duas métricas complementares:

- **Erro Quadrático Médio (MSE)**: penaliza erros de maior magnitude, fornecendo uma medida global da variância residual;
- **Erro Absoluto Médio (MAE)**: oferece uma interpretação direta do erro médio absoluto, sendo menos sensível a valores extremos.

Estas métricas são definidas, respectivamente, como:

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{y}}_i\|_2^2, \quad \text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{y}}_i|, \quad (3.7.1)$$

em que N é o número de amostras, \mathbf{y}_i são os valores de referência obtidos por simulação numérica e $\hat{\mathbf{y}}_i$ são as previsões do DeepONet.

Além disso, o desempenho do modelo foi comparado a uma abordagem de referência (*baseline*), definida como um preditor constante baseado na média global das saídas do conjunto de treinamento. Formalmente, calcula-se:

$$\bar{\mathbf{y}} = \frac{1}{N_{\text{train}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{train}}} \mathbf{y}_i, \quad (3.7.2)$$

e utiliza-se esse valor para prever todas as amostras, independentemente da entrada:

$$\hat{\mathbf{y}}_i^{\text{baseline}} = \bar{\mathbf{y}}, \quad \forall i. \quad (3.7.3)$$

Essa comparação permite quantificar o ganho efetivo proporcionado pelo aprendizado de operadores em relação a um estimador estatístico simples, assegurando uma avaliação consistente da capacidade de generalização do modelo.

4 Resultados e Discussão

4.1 Caracterização do Problema Físico

A distribuição espacial das propriedades do meio poroso e a resposta hidrodinâmica associada são detalhadas na Figura 1.

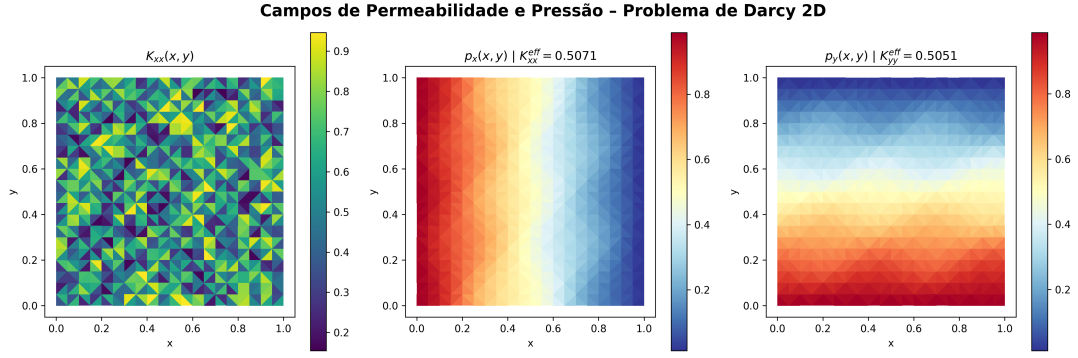


Figura 1: À esquerda, o campo de permeabilidade heterogêneo. Ao centro e à direita, os campos de pressão resultantes (p_x e p_y) utilizados para o cálculo das permeabilidades efetivas.

O primeiro painel ilustra o campo estocástico de permeabilidade, $K_{xx}(x, y)$, mapeado sobre uma malha de elementos finitos triangulares no domínio unitário. Observa-se uma heterogeneidade significativa, com a condutividade hidráulica local oscilando entre regiões de alta e baixa permeabilidade, o que representa a microestrutura desordenada do material.

Ao resolver a equação de Darcy para este meio heterogêneo, obtiveram-se os campos de pressão apresentados nos painéis central e direito. Para o caso do fluxo horizontal induzido (p_x), a permeabilidade efetiva calculada foi $K_{xx}^{\text{eff}} = 0.5071$. Analogamente, para o fluxo vertical (p_y), obteve-se $K_{yy}^{\text{eff}} = 0.5051$.

A análise visual das isóbaras revela distorções locais (tortuosidade), evidenciando que o fluido percorre caminhos preferenciais de menor resistência, contornando as zonas de baixa permeabilidade. Contudo, a proximidade numérica entre os valores efetivos ($K_{xx}^{\text{eff}} \approx K_{yy}^{\text{eff}}$) sugere um resultado importante que apesar da forte variabilidade local e da aleatoriedade na malha, o meio comporta-se de maneira macroscopicamente isotrópica na escala do Volume Elementar Representativo (REV) analisado.

4.2 Convergência e Estabilidade do Treinamento

A evolução temporal da função de perda Figura 2, monitorada através do MSE ao longo de 500 épocas, revela um comportamento de convergência robusto. Observa-se um decaimento abrupto da métrica de erro nas primeiras 50 iterações, indicando uma fase de aprendizado acelerado das características fundamentais dos dados, seguida por um regime de estabilidade assintótica onde as curvas atingem um platô com valores de perda próximos a zero.

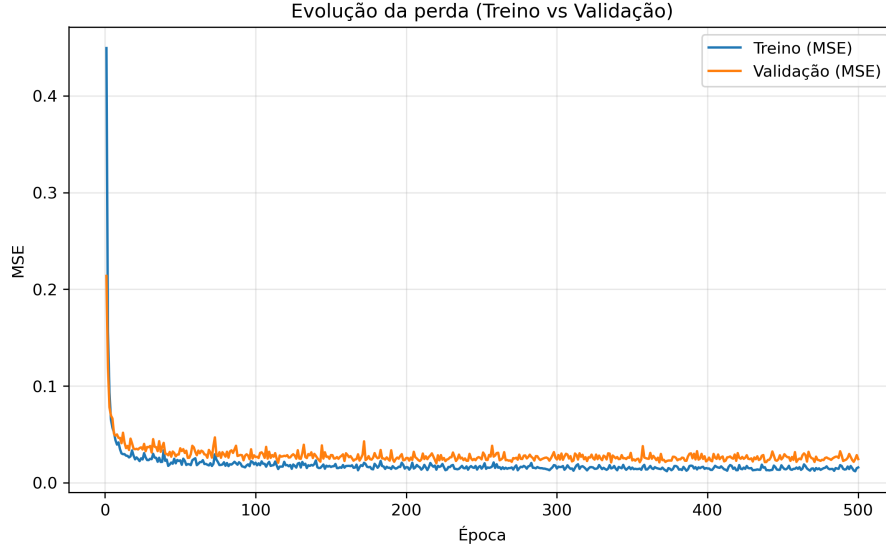


Figura 2: Histórico de convergência da função de perda (MSE) para os conjuntos de treino e validação ao longo de 500 épocas.

Crucialmente, a análise comparativa entre os conjuntos de treino e validação demonstra uma excelente capacidade de generalização do modelo. A curva de validação acompanha consistentemente a trajetória de treinamento com um espaçamento marginal e constante, sem apresentar divergência ou aumento do erro nas épocas finais; este comportamento descarta a ocorrência de *overfitting* e confirma que a arquitetura da rede foi capaz de extrair padrões relevantes sem memorizar o ruído estatístico do conjunto de dados.

4.3 Análise Estatística de Erros e Resíduos

A avaliação da precisão do modelo DeepONet é apresentada na Figura 3, através da análise estatística dos resíduos para as componentes de permeabilidade K_{xx} e K_{yy} . Definindo o erro como a diferença entre o valor real e o valor predito ($K_{real} - K_{pred}$), observa-se que ambas as distribuições exibem uma acentuada tendência central alinhada à linha de referência de erro nulo (tracejado vermelho). A simetria das curvas de densidade de probabilidade em torno da origem demonstra que o modelo é não-viesado, ou seja, não apresenta tendências sistemáticas de superestimação ou subestimação das propriedades físicas do meio poroso.

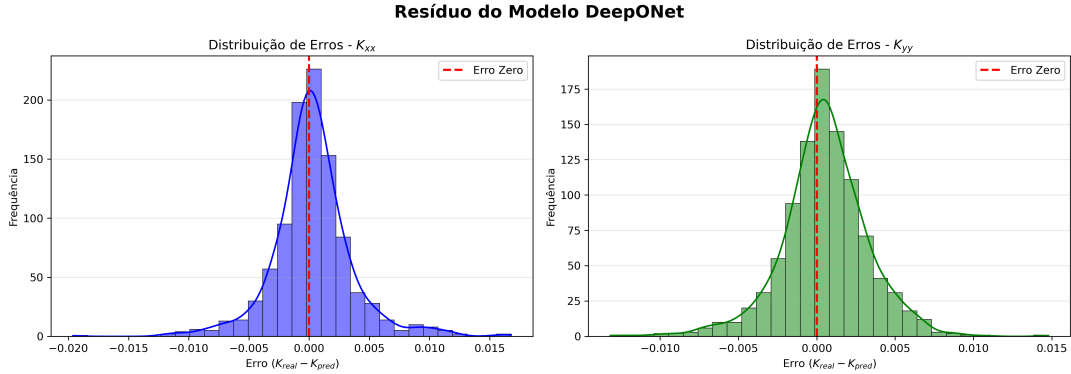


Figura 3: Histograma dos resíduos ($K_{real} - K_{pred}$) para K_{xx} e K_{yy} , indicando distribuição centrada em zero e ausência de viés sistemático.

Além da ausência de viés, a análise da dispersão confirma a robustez das previsões.

A massa principal dos erros concentra-se em um intervalo extremamente estreito (majoritariamente entre -0.005 e 0.005), indicando uma variância residual baixa e alta precisão do regressor. A morfologia das distribuições, próxima de uma gaussiana com pico elevado e caudas curtas, sugere que o modelo DeepONet foi capaz de capturar a relação entre a microestrutura e a permeabilidade efetiva de forma consistente para a vasta maioria das amostras do conjunto de teste.

4.4 Desempenho de Generalização e Comparação com Baseline

A eficácia do DeepONet 4 em capturar a física do problema é quantitativamente evidenciada pelos coeficientes de determinação (R^2) próximos à unidade. Com valores de $R^2 = 0.9798$ para K_{xx} e $R^2 = 0.9835$ para K_{yy} , o modelo demonstra capacidade de explicar aproximadamente 98% da variância dos dados de referência. Essa alta correlação linear confirma que a arquitetura neural conseguiu codificar com sucesso o mapeamento complexo entre a microestrutura estocástica e as propriedades macroscópicas, minimizando a perda de informação estatística relevante durante o processo de regressão.

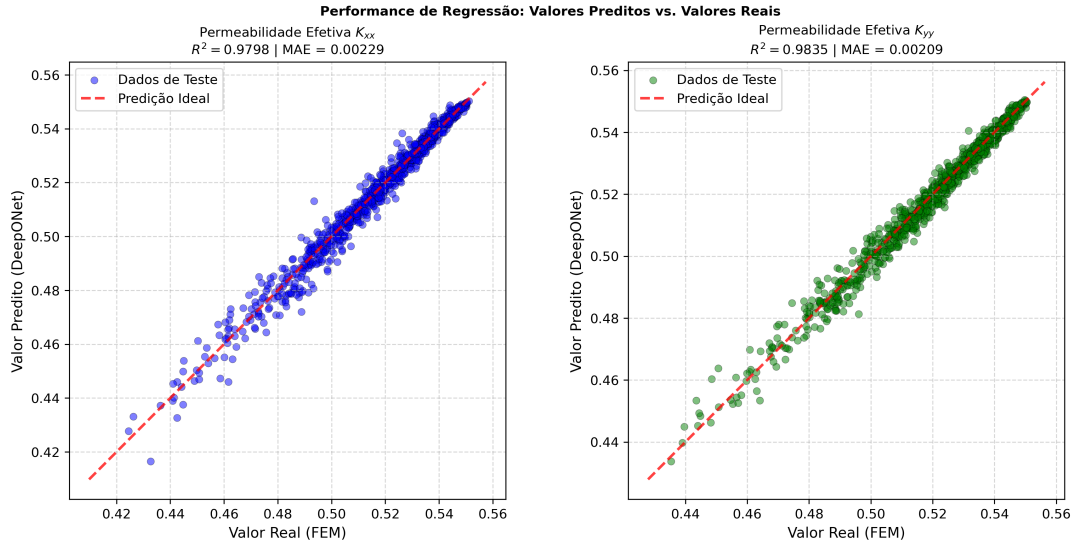


Figura 4: Predito vs. real (FEM), com alto coeficiente de determinação ($R^2 > 0,97$).

Em termos de precisão absoluta, a análise do Erro Médio Absoluto (MAE) reforça a validade do modelo como um substituto numérico robusto. Os valores de MAE obtidos 0.00229 para o fluxo horizontal e 0.00209 para o vertical são ordens de magnitude inferiores à escala dos valores de permeabilidade preditos (que variam entre 0.40 e 0.56). Isso implica que o erro médio de predição é fisicamente desprezível para aplicações práticas de engenharia, garantindo que as estimativas fornecidas pelo modelo substituto mantêm a fidelidade necessária em relação às simulações de elementos finitos.

Adicionalmente, a distribuição dos pontos ao longo da diagonal ideal sugere um comportamento homoscedástico, onde a precisão do modelo se mantém consistente em todo o intervalo de permeabilidades analisado 4. Não se observam desvios condicionais ou saturação nas extremidades (valores muito altos ou baixos), o que indica que o DeepONet não sofre de vieses locais e generaliza bem tanto para geometrias pouco permeáveis quanto para as altamente permeáveis, consolidando sua aplicabilidade em cenários heterogêneos variados.

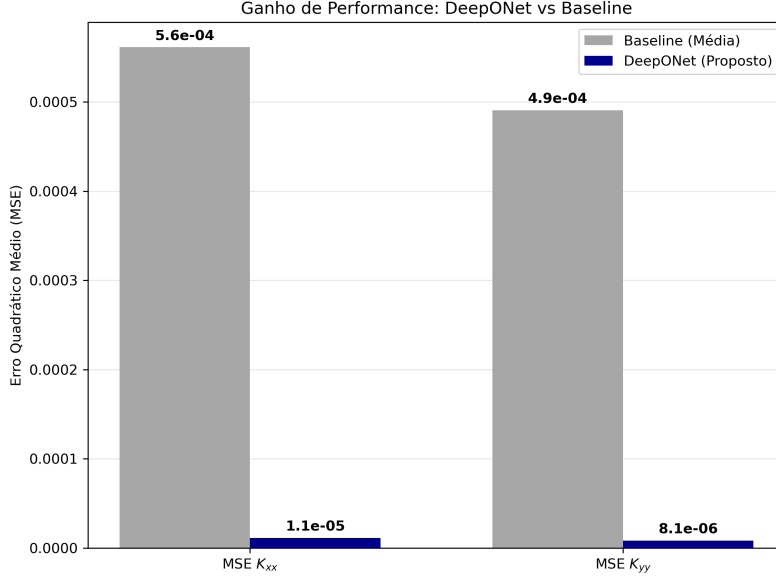


Figura 5: Comparação do MSE entre o modelo baseline e a DeepONet, indicando desempenho superior da abordagem proposta.

Para quantificar o ganho real de desempenho proporcionado pela abordagem de aprendizado profundo, o modelo DeepONet foi comparado contra uma *baseline* estatística ingênua, definida como a previsão constante da média do conjunto de treinamento. Os resultados, detalhados na Figura 5, demonstram a superioridade da rede neural proposta. Enquanto a *baseline* apresenta um Erro Quadrático Médio (MSE) estagnado na ordem de 5.6×10^{-4} para K_{xx} e 4.9×10^{-4} para K_{yy} , o DeepONet reduz drasticamente esses valores para 1.1×10^{-5} e 8.1×10^{-6} , respectivamente.

Essa redução de erro, que atinge quase duas ordens de magnitude (aproximadamente 50 vezes menor para K_{xx} e 60 vezes para K_{yy}), confirma que o modelo não está apenas memorizando estatísticas globais, mas sim capturando as complexas flutuações locais da permeabilidade induzidas pela microestrutura. O contraste visual entre as barras cinzas (média) e azuis (DeepONet) evidencia que a variância explicada pelo modelo é significativa, validando sua eficácia como um *surrogate* de alta fidelidade em comparação a estimadores triviais.

5 Conclusão

O presente trabalho validou com êxito a aplicação de redes neurais baseadas em operadores como uma estratégia de *upscaling* computacionalmente eficiente para meios porosos heterogêneos. A integração entre a geração massiva de dados via Método dos Elementos Finitos e o treinamento da rede resultou em um modelo capaz de capturar a complexidade do mapeamento entre a microestrutura estocástica e a permeabilidade efetiva, alcançando coeficientes de determinação superiores a 0,97 para ambas as direções principais. A análise estatística dos resíduos, caracterizada pela ausência de viés e por uma variância marginal, confirma que a arquitetura proposta reproduz a física do escoamento de Darcy com elevada fidelidade, superando em ordens de magnitude a precisão de estimadores estatísticos convencionais.

Dessa forma, a metodologia desenvolvida estabelece um *framework* sólido para a construção de modelos substitutos em geociências, permitindo a substituição de simulações numéricas caras por inferências instantâneas sem prejuízo à precisão. A capacidade da DeepONet de generalizar o comportamento hidráulico para campos de permeabilidade de-

monstra que o aprendizado de operadores é uma ferramenta viável para lidar com a variabilidade multiescalar intrínseca aos reservatórios naturais. Tais avanços abrem perspectivas promissoras para a quantificação de incertezas em larga escala e para a otimização de processos de fluxo em tempo real, cenários onde o custo computacional das abordagens clássicas seria proibitivo.

O código-fonte completo, incluindo os procedimentos para reprodutibilidade dos resultados, está disponível em: [GitHub – projeto-fem-mec-continuo](#).

Referências

- [BHM⁺07] Jaco H. Baas, Ernie A. Hailwood, William D. McCaffrey, Mike Kay, and Richard Jones. Directional petrological characterisation of deep-marine sandstones using grain fabric and permeability anisotropy: Methodologies, theory, application and suggestions for integration. *Earth-Science Reviews*, 82(1):101–142, 2007.
- [JAT⁺19] M. S. Jouini, A. AlSumaiti, M. Tembely, F. Hjouj, and K. Rahimov. Ampliação de permeabilidade em amostras complexas de carbonato usando texturas de imagens de tomografia microcomputorizada. *International Journal of Modelling and Simulation*, 40(4):245–259, 2019.
- [LJP⁺21] Lu Lu, Pengzhan Jin, Guofei Pang, Zhongqiang Zhang, and George Em Karniadakis. Learning nonlinear operators via deeponet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3(3), 3 2021.
- [PMM23] Mayur Pal, Pijus Makauskas, and Shruti Malik. Upscaling porous media using neural networks: A deep learning approach to homogenization and averaging. *Processes*, 11(2), 2023.
- [RA22] Philippe Renard and Rachid Ababou. Equivalent permeability tensor of heterogeneous media: Upscaling methods and criteria (review and analyses). *Geosciences*, 12(7), 2022.