

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

Jairson Alberto Sami

Laboratório Nacional de Computação Científica

18 de dezembro de 2025

Sumário

- 1 Sumário
- 2 Introdução
- 3 Conceitos Fundamentais
- 4 Formulação Matemática
- 5 Metodologia
- 6 Arquitetura DeepONet
- 7 Resultados
- 8 Discussão e Conclusão

Introdução e Motivação

Contexto:

- Escoamento em meios porosos é vital para: reservatórios de petróleo, aquíferos e remediação ambiental.
- A **Lei de Darcy** governa o fluxo, relacionando gradiente de pressão e fluxo via permeabilidade.

O Desafio:

- Permeabilidade natural é **altamente heterogênea** e multiescalar.
- Simulações diretas (FEM) em alta resolução são **computacionalmente caras**.

Objetivo

Resolver a equação de Darcy via FEM e treinar uma **DeepONet** para aprender o operador que mapeia campos de permeabilidade heterogêneos em permeabilidades efetivas (K_{eff}).

O que é Upscaling?

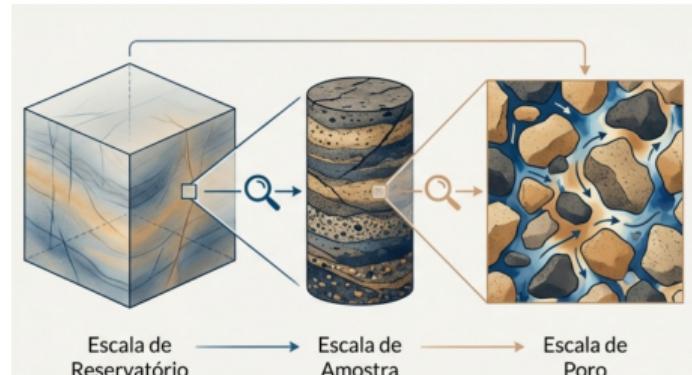
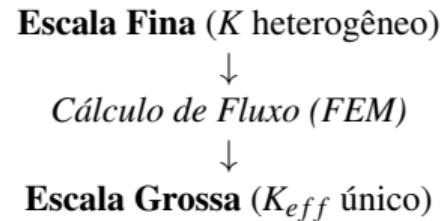
Definição:

- **Objetivo:** Reduzir a complexidade computacional de modelos geológicos multiescalares.
- **Processo:** Mapear propriedades da *Escala Fina* (Poro/Amostra) para a *Escala Grossa* (Bloco/Reservatório).
- **Parâmetro Chave:** Determinação da **Permeabilidade Efetiva (K_{eff})**.

Premissa Fundamental

O fluxo total (Φ) que atravessa o bloco simplificado deve ser numericamente equivalente ao fluxo no bloco original detalhado.

Esquema de Escalas



Formulação Matemática: Equação de Darcy

Considerando meio poroso rígido, totalmente saturado e regime estacionário, o escoamento no domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ é regido por:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = -\mathbf{K}(\mathbf{x})\nabla p(\mathbf{x}) \quad (4.1)$$

$$-\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0 \quad (4.2)$$

Anisotropia e Tensor de Permeabilidade

A estrutura do meio justifica a adoção de um tensor estritamente diagonal (sem termos cruzados), onde a permeabilidade varia independentemente em x e y :

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} K_{xx}(x,y) & 0 \\ 0 & K_{yy}(x,y) \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Isso permite modelar a heterogeneidade direcional típica de reservatórios geológicos.

Condições de Contorno e Discretização

1. Condições de Contorno

- **Dirichlet (Γ_D):** Pressão prescrita ($p = p_D$) nas faces de entrada/saída.
- **Neumann (Γ_N):** Fluxo nulo ($-\mathbf{K}\nabla p \cdot \mathbf{n} = 0$) nas paredes laterais.

2. Formulação Fraca (Variacional)

Multiplicando por uma função teste $v \in V_0$ e integrando por partes, buscamos p tal que:

$$\int_{\Omega} \left(K_{xx} \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + K_{yy} \frac{\partial p}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) d\Omega = 0, \quad \forall v \in V_0 \quad (4.4)$$

3. Discretização Numérica (Firedrake)

- **Pressão (p):** Espaço CG_1 (Lagrange Contínuo - Linear).
- **Permeabilidade (K):** Espaço DG_0 (Descontínuo - Constante por elemento).

Condições de Contorno e Discretização

1. Condições de Contorno

- **Dirichlet (Γ_D):**

Pressão prescrita.

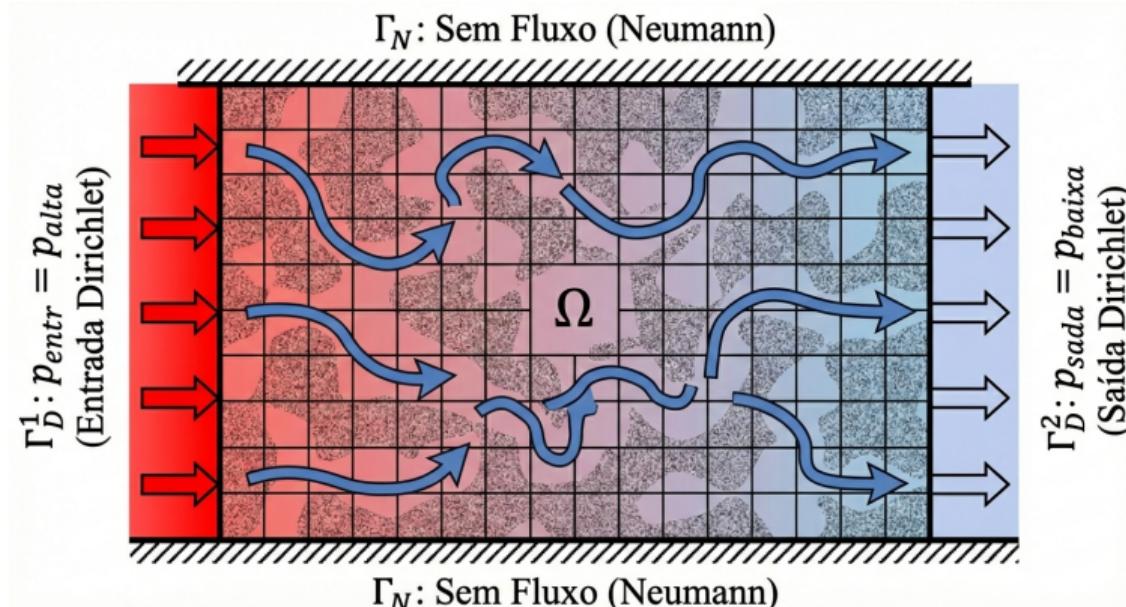
$p = 1$ (Entrada)

$p = 0$ (Saída).

- **Neumann (Γ_N):**

Fluxo nulo (paredes).

Impermeável.



Detalhes da Discretização Numérica

Configuração do Problema Discreto

Parâmetro	Símbolo	Valor / Descrição
Número de Elementos	$ \mathcal{T}_h $	800 células
Espaço Funcional	V_h	DG_0 (Constante por partes)
Norma Associada	–	$L^2(\Omega)$
Graus de Liberdade	DoFs	800

Nota sobre a Formulação

A escolha do espaço DG_0 (constante por elemento) implica que o número de DoFs é exatamente igual ao número de elementos da malha, simplificando o mapeamento para a rede neural.

Geração Estocástica de Campos

Para treinar a rede, geraram-se **10.000 campos** sintéticos.

Síntese Trigonométrica

Campos baseados em séries de Fourier aleatórias para garantir heterogeneidade:

$$\Psi_\alpha \propto A_1 \sin(\omega_x \pi x) \cos(\omega_y \pi y) + A_2 \cos(\dots) \quad (5.1)$$

Transformação Final (Positividade):

$$K_\alpha(\mathbf{x}) = 0.1 + 0.9 |\Psi_\alpha(\mathbf{x})| \quad (5.2)$$

- Garante variabilidade espacial e contraste físico.
- Parâmetros (ω, A, ϕ) amostrados independentemente para x e y .

Cálculo da Permeabilidade Efetiva (K_{eff})

O modelo mapeia a heterogeneidade local para valores macroscópicos, garantindo a conservação do fluxo através do domínio.

Fluxo Longitudinal (x)

Condição: ΔP em x , faces laterais seladas.

Fluxo Total (Φ_x):

$$\Phi_x = \int_{\Gamma_{out}^x} -K_{local} \nabla p \cdot \mathbf{n} dS \quad (5.3)$$

Permeabilidade Efetiva:

$$K_{xx}^{eff} = \frac{\Phi_x \cdot L_x}{A_x \cdot \Delta P} \quad (5.4)$$

Fluxo Transversal (y)

Condição: ΔP em y , faces laterais seladas.

Fluxo Total (Φ_y):

$$\Phi_y = \int_{\Gamma_{out}^y} -K_{local} \nabla p \cdot \mathbf{n} dS \quad (5.5)$$

Permeabilidade Efetiva:

$$K_{yy}^{eff} = \frac{\Phi_y \cdot L_y}{A_y \cdot \Delta P} \quad (5.6)$$

Arquitetura da Rede Neural: DeepONet

A DeepONet aproxima operadores não-lineares através de duas redes neurais paralelas:

Objetivo: Aprender o operador $G : u \mapsto K^{eff}$.

1. Branch Net

Codifica o campo de entrada (permeabilidade)

Input: \mathbf{u} (Sensores)



Output: $\mathbf{b} = [b_1, b_2, \dots, b_p]$

2. Trunk Net

Codifica a geometria do domínio

Input: $\mathbf{x} = (x, y)$



Output: $\mathbf{t} = [t_1, t_2, \dots, t_p]$

3. Mecanismo de Fusão e Predição

Combina as representações aprendidas via produto de Hadamard (\odot):

$$\mathbf{h}_{fuse} = \mathbf{b}(\mathbf{u}) \odot \mathbf{t}(\mathbf{x}) \xrightarrow{\text{Média Global}} K^{eff} \quad (6.1)$$

Preparação e Treinamento

Particionamento dos Dados (10.000 amostras):

- **Treino:** 67,5%
- **Validação:** 22,5%
- **Teste:** 10%

Pré-processamento:

- Normalização Z-score ($\hat{x} = \frac{x-\mu}{\sigma}$) para estabilidade do Gradiente Descendente.

Métrica de Perda:

- Minimização do MSE (Erro Quadrático Médio).

Caracterização do Problema Físico

Exemplo de um campo gerado e sua resposta de pressão.

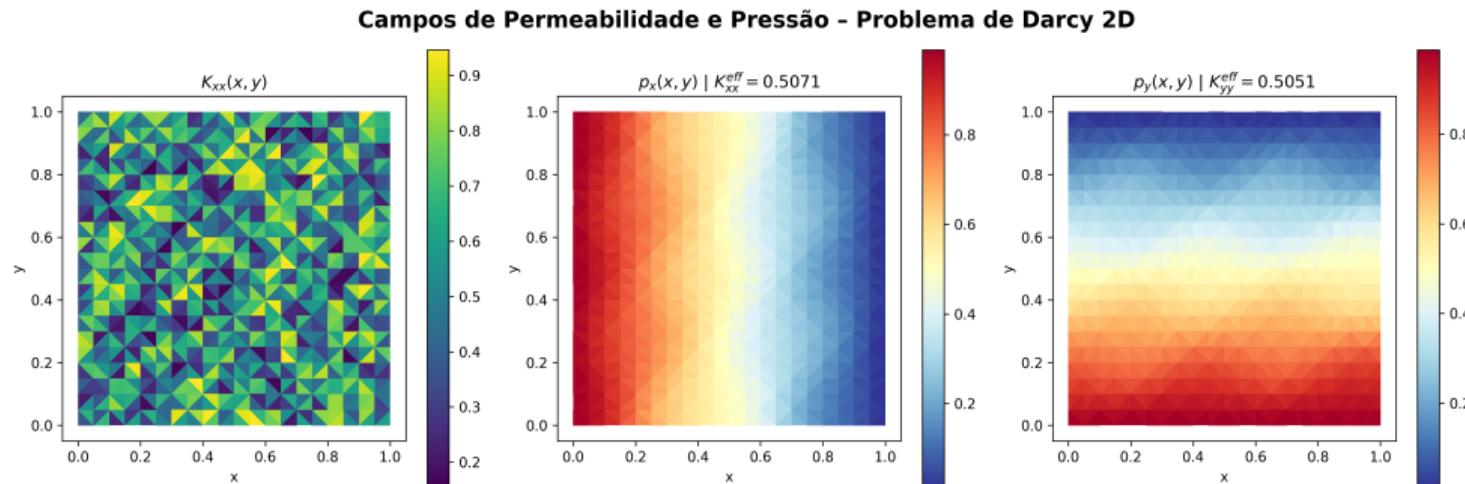


Figura: Esq: Campo $K_{x,y}$ heterogêneo. Centro/Dir: Campos de pressão p_x e p_y .

Nota-se a tortuosidade das isóbaras, indicando que o fluido contorna zonas de baixa permeabilidade.

Convergência do Treinamento

Evolução da função de perda (MSE) durante 500 épocas.

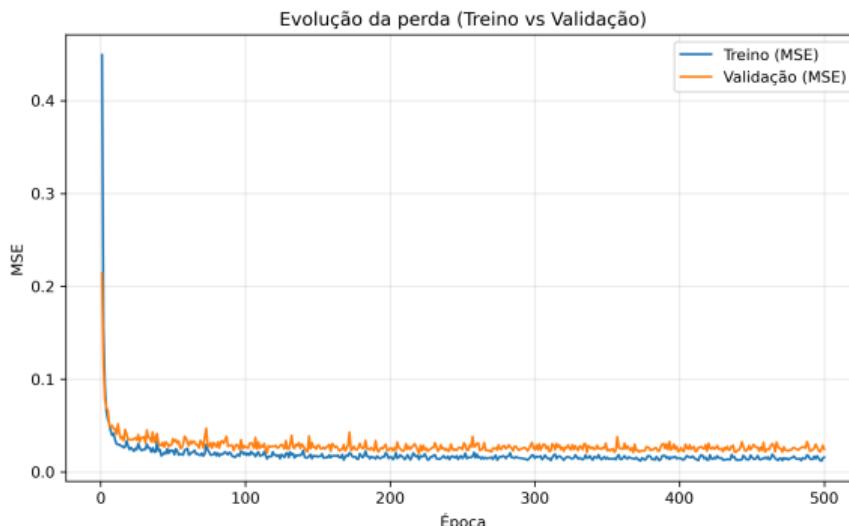


Figura: Histórico de perda para treino e validação.

- Decaimento rápido inicial.
- **Sem overfitting:** Curva de validação acompanha o treino consistentemente.

Análise Estatística dos Resíduos

Histograma dos erros ($K_{real} - K_{pred}$) no conjunto de teste.

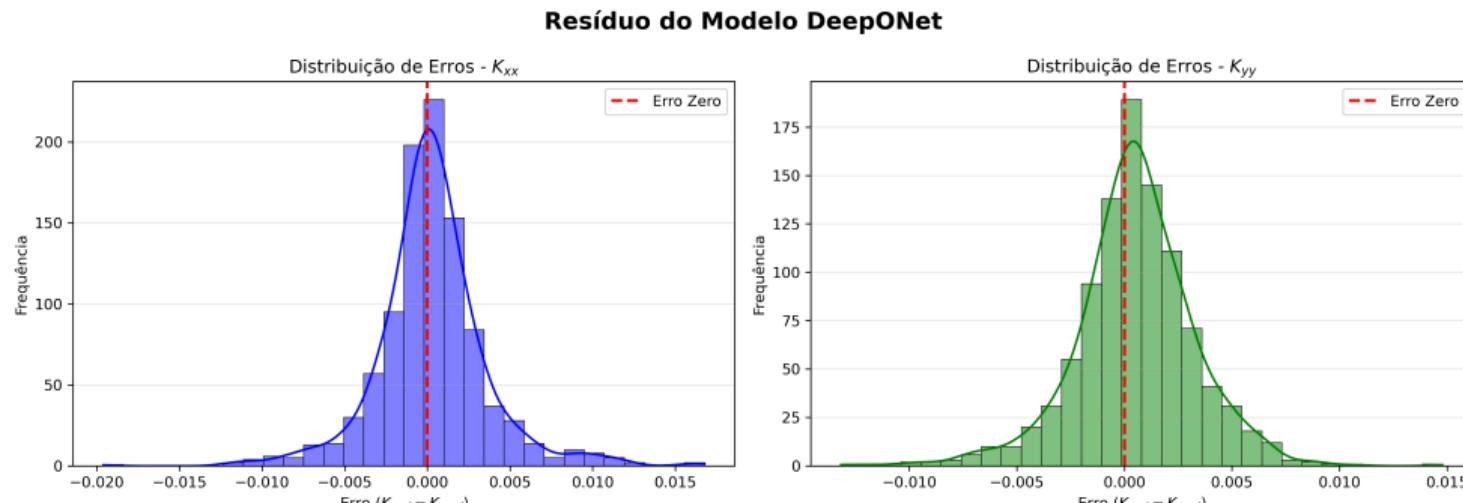


Figura: Distribuição dos resíduos para K_{xx} e K_{yy} .

- Distribuição centrada em zero (modelo **não-viesado**).
- Baixa variância (erros confinados entre ± 0.005).

Desempenho de Predição (Regressão)

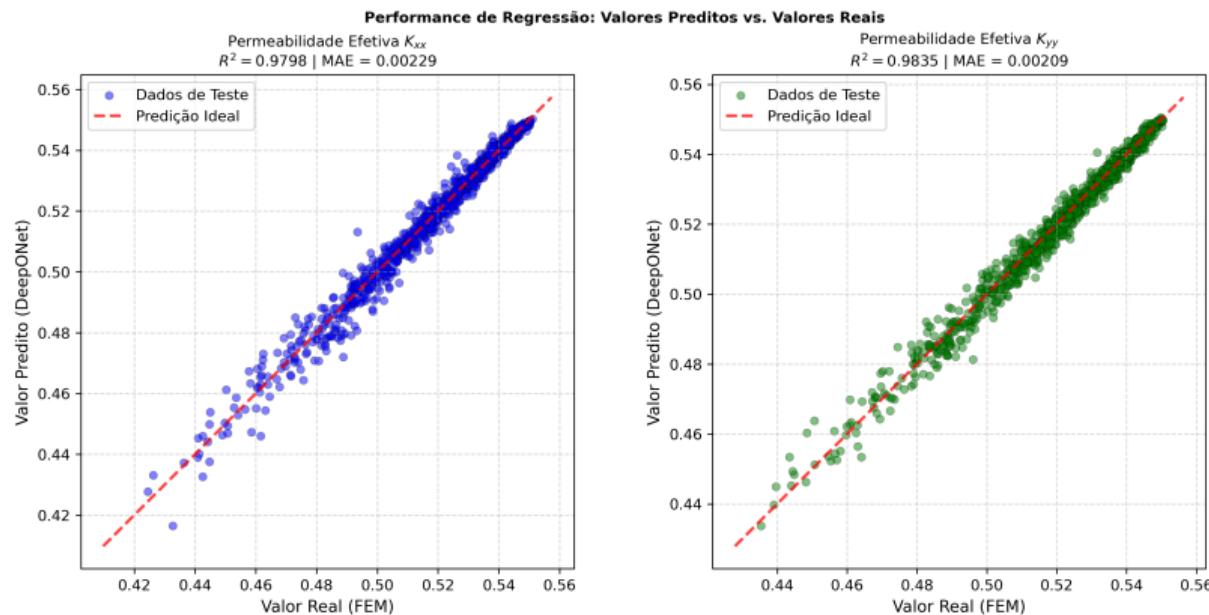


Figura: Scatter plot com Coeficiente de Determinação - $R^2 > 0.97$ para ambas direções.

A precisão do modelo mantém-se consistente ao longo de toda a faixa de permeabilidades, incluindo valores baixos e elevados.

Comparação com Baseline

DeepONet vs. Predictor de Média Simples (Baseline).

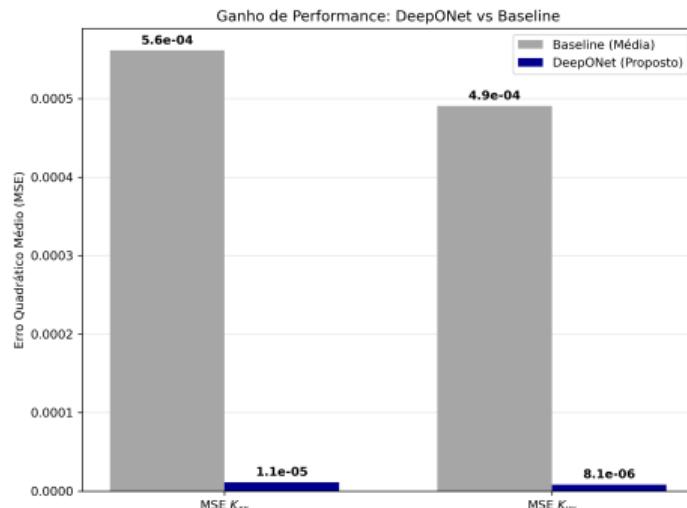


Figura: Erro Quadrático Médio (MSE).

- **Baseline:** MSE ordem 10^{-4} .
- **DeepONet:** MSE ordem 10^{-5} a 10^{-6} .
- Redução de erro de aprox. **50 a 60 vezes.**

Discussão dos Resultados

1. Fidelidade Física:

- O modelo capturou a relação complexa entre microestrutura e fluxo macroscópico.
- Erro Médio Absoluto (MAE) ≈ 0.002 , desprezível frente à magnitude dos dados (0.4 – 0.5).

2. Eficiência Computacional:

- O custo computacional foi concentrado no treinamento.
- A inferência é **instantânea**, viabilizando análises de incerteza em tempo real.

Conclusão

Principais Conclusões

- ① **Validação:** Redes neurais de operadores são eficazes para *upsampling* em meios porosos heterogêneos.
- ② **Precisão:** Coeficiente $R^2 \approx 0.98$ supera estimadores estatísticos clássicos.
- ③ **Generalização:** O modelo generaliza bem para novas geometrias não vistas no treino.

A metodologia estabelece um framework sólido para *Modelo de Resposta Rápida* em geociências e engenharia de reservatórios.

Obrigado!

Perguntas?

Código e Reprodutibilidade:

O projeto completo está disponível em:

github.com/JairsonAlbertoSami/projeto-fem-mec-continuo

Laboratório Nacional de Computação Científica