

Introdução ao Método de Galerkin Estocástico

Americo Barbosa da Cunha Junior

Departamento de Engenharia Mecânica
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

1 Introdução

A dinâmica de um sistema mecânico depende de certos parâmetros como propriedades físicas, medidas geométricas, carregamentos internos e externos, condições iniciais e de contorno etc. A maioria dos modelos teóricos utilizados para descrever o comportamento de um sistema mecânico assume valores nominais para esses parâmetros, de modo que o modelo fornece uma única resposta para uma determinada entrada. Neste caso, o sistema é determinístico e seu comportamento é descrito por um único conjunto de equações diferenciais. Entretanto, nos sistemas reais, os parâmetros não têm um valor fixo, uma vez que esses sistemas estão sujeitos a incertezas de medição, imperfeições nos processos de fabricação, mudança de propriedades etc. Esta variabilidade no conjunto de parâmetros do sistema leva a um grande número de possíveis respostas do sistema, para uma dada entrada em particular. Agora, o sistema é estocástico e existem vários conjuntos de equações diferenciais (um para cada realização do sistema aleatório) associados ao mesmo. Assim, para caracterizar a dinâmica de um sistema aleatório, é necessário empregar métodos de cálculo estocástico.

Para simular a dinâmica de um sistema aleatório, três abordagens são possíveis. A primeira é um método direto, que utiliza simulações de Monte Carlo (MC) [3] para obter um conjunto de realizações do sistema aleatório e, em seguida, calcular estatísticas do mesmo. A segunda abordagem é possível se a distribuição de probabilidade dos parâmetros aleatórios do sistema for conhecida. Neste caso a decomposição de Karhunen-Lòeve (KL) [2] pode ser utilizada para representar os parâmetros estocásticos do sistema. O terceiro método é aplicável se a distribuição de probabilidade dos parâmetros aleatórios do sistema não for conhecida. Agora a resposta do sistema pode ser representada através de uma expansão em polinômio caos generalizado (gPC) [4].

Este trabalho apresenta um breve introdução aos métodos de representação de campos aleatórios (segunda e terceira abordagens) e ilustra a aplicação dessas técnicas na solução de dois problemas simples que envolvem equações diferenciais estocásticas.

2 Representação de Campos Aletórios

Nesta seção vamos apresentar duas técnicas de representação de um campo estocástico. A primeira é conhecida como decomposição de Karhunen-Lòeve [2] (KLE) e pode ser aplicada quando a distribuição de probabilidade do campo em questão é conhecida. A segunda técnica, polinômio caos generalizado (gPC), é aplicável quando a distribuição de probabilidade do campo é desconhecida [4].

2.1 Decomposição de Karhunen-Lòeve

Seja $u : \mathcal{D} \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ um campo estocástico de quadrado integrável, definido num espaço probabilístico $(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$, onde Ω é o espaço amostral, \mathcal{A} é uma σ -álgebra de eventos em Ω e \mathcal{P} é uma medida de probabilidade. Assuma também que o campo u tenha média μ_u e que sua função de autocovariância $K_u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ seja contínua. Então o campo u pode ser representado pela seguinte série

$$u(\mathbf{x}, \omega) = \mu_u + \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} \phi_i(\mathbf{x}) \xi_i(\omega), \quad (1)$$

onde ξ_i são variáveis aleatórias descorrelacionadas de média zero, λ_i e ϕ_i são os autovalores e autofunções do operador integral de Fredholm cujo núcleo é $K_u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, i.e.,

$$\int_{\mathcal{D}} K_u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \phi_i(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_2 = \lambda_i \phi_i(\mathbf{x}_1). \quad (2)$$

A decomposição de Karhunen-Lòeve permite representar um campo estocástico como uma combinação linear infinita de funções ortogonais. Esta representação é ótima em certo sentido, pois a base ortogonal formada pelas autofunções acima faz com que erro quadrático médio, obtido após o truncamento dessa série, seja mínimo [2].

2.2 Polinômio Caos Generalizado

Seja $u : \mathcal{D} \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ um campo estocástico de quadrado integrável, definido no espaço probabilístico $(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$. Então o campo u pode ser representado pela seguinte série

$$u(\mathbf{x}, \omega) = \sum_{i=1}^{\infty} u_i(\mathbf{x}) \psi_i[\boldsymbol{\xi}(\omega)], \quad (3)$$

onde u_i são funções determinísticas, $\boldsymbol{\xi}$ é um vetor de variáveis aleatórias e ψ_i são polinômios ortogonais com as seguintes propriedades

$$\mathbb{E}[\psi_1] = 1, \quad \mathbb{E}[\psi_i] = 0, \quad i > 1, \quad \mathbb{E}[\psi_i \psi_j] = h_i \delta_{ij}. \quad (4)$$

Na expansão dada pela Eq.(3), $\boldsymbol{\xi}$ e ψ_i são escolhidos de acordo com a natureza das entradas aleatórias do campo u . A tabela 1 fornece uma relação entre o tipo de variável aleatória e o polinômio ortogonal correspondente.

Tabela 1: Correspondência entre variáveis aleatórias e polinômio ortogonais.

ξ	ψ_i
Gaussiana	Hermite
Gama	Laguerre
Beta	Jacobi
Uniforme	Legendre

3 Método de Galerkin Estocástico

3.1 Procedimento Geral

O método de Galerkin estocástico procura por um campo estocástico $u(\mathbf{x}, t, \omega)$, definido no espaço probabilístico $(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$, que seja uma solução aproximada da seguinte equação diferencial estocástica

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, t, \omega; u) = f(\mathbf{x}, t, \omega), \quad (5)$$

onde \mathcal{L} é um operador diferencial que envolve diferenciação no tempo e/ou no espaço e f é um termo fonte.

Inicialmente aproxima-se o campo u por um truncamento da expansão em gPC

$$u(\mathbf{x}, t, \omega) \approx \sum_{i=1}^P u_i(\mathbf{x}, t) \psi_i[\xi(\omega)], \quad (6)$$

e em seguida substitui-se essa expansão na Eq.(5), donde

$$\mathcal{L} \left(\mathbf{x}, t, \omega; \sum_{i=1}^P u_i \psi_i \right) = f(\mathbf{x}, t, \omega). \quad (7)$$

Multiplica-se ambos os lados da Eq.(7) por ψ_j e tomando o valor esperado obtêm-se o seguinte sistema de equações diferenciais determinísticas

$$\mathbb{E} \left[\mathcal{L} \left(\mathbf{x}, t, \omega; \sum_{i=1}^P u_i \psi_i \right) \psi_j \right] = \mathbb{E} [f(\mathbf{x}, t, \omega) \psi_j], \quad j = 1, \dots, P. \quad (8)$$

Esse último procedimento nada mais é do que projetar a Eq.(7) no espaço vetorial gerado pelas funções ψ_j , de forma que o erro gerado pela aproximação dada pela Eq.(6) seja minimizado.

3.2 Exemplo 1: Equação de Poisson

Dado um espaço probabilístico $(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$, considere o problema de valor de contorno estocástico em que se busca um campo $u(x, y, \omega)$ tal que

$$\begin{aligned} \alpha \nabla^2 u &= 1 & (x, y, \omega) \in \mathcal{D} \times \Omega \\ u &= 0 & (x, y, \omega) \in \partial \mathcal{D} \times \Omega, \end{aligned} \quad (9)$$

onde α é uma variável aleatória uniformemente distribuída em $[1, 3]$ e $\mathcal{D} = [-1, 1]^2$.

Neste problema a variável aleatória α é parametrizada da seguinte forma

$$\alpha = \xi + 2, \quad (10)$$

onde ξ é uniformemente distribuída em $[-1, 1]$. Já o campo u é aproximado por uma expansão em gPC da forma

$$u(x, \omega) \approx \sum_{i=1}^P u_i(x, y) \psi_i(\xi), \quad (11)$$

onde $u_i(x, y)$ são funções determinísticas, ψ_i são polinômios de Legendre e $P = (K+1)!/K!$, sendo K o grau máximo dos polinômios de Legendre.

Seguindo o procedimento da seção anterior obtêm-se o seguinte sistema de equações diferenciais

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^P ((u_i)_{xx} + (u_i)_{yy}) \mathbb{E} [\psi_i(\xi + 2) \psi_j] &= \mathbb{E} [\psi_j] & (x, y) \in \mathcal{D} \\ u_j &= 0 & (x, y) \in \partial \mathcal{D}, \end{aligned} \quad (12)$$

para $j = 1, \dots, P$.

Esse sistema de equações pode ser resolvido utilizando-se, por exemplo, o método de diferenças finitas. Essa formulação está implementada no código `Poisson_2D` [1], que foi utilizado para obter os resultados reportados a seguir.

Nas figuras 1 e 2 são respectivamente apresentados os valor médio e o desvio padrão das soluções obtidas por MC e gPC. Em ambos os casos pouca diferença pode ser notada. Isso é um indicativo da acurácia da expansão em gPC.

A acurácia do método de expansão em gPC também pode ser observada na tabela 2. Esta tabela apresenta, em função de K , os valores da norma do máximo, das estatísticas da diferença entre as soluções da equação de Poisson obtidas por MC e gPC. Nota-se que a norma da diferença decai monotonicamente com o aumento de K . Também é possível notar que existe um valor limite para K , tal que nenhuma melhora nos resultados é obtida se K for tomado acima desse valor. Neste caso, $K = 10$.

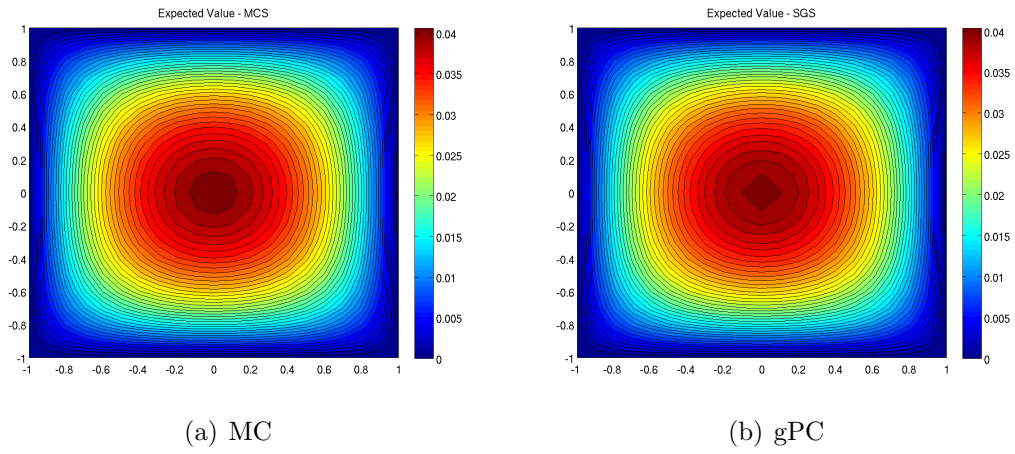


Figura 1: Média das soluções da equação de Poisson obtidas por MC e gPC.

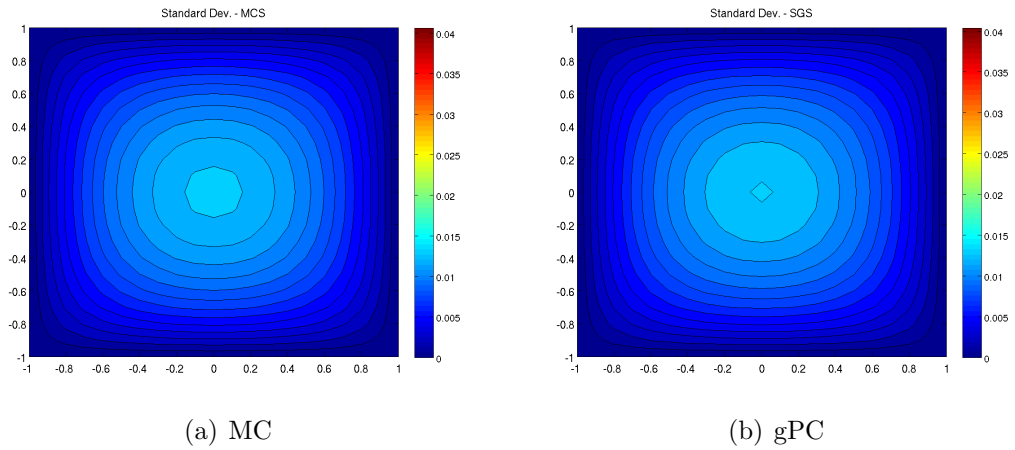


Figura 2: Desvio padrão das soluções da equação de Poisson obtidas por MC e gPC.

Tabela 2: Norma do máximo (em função de K) das estatísticas da diferença entre as soluções da equação de Poisson obtidas por MC e gPC.

K	média	desvio padrão
3	0.00026079	0.00040902
5	0.00023984	0.00023604
7	0.00023973	0.00023440
10	0.00023972	0.00023439
20	0.00023972	0.00023439

A simulação de Monte Carlo reportada nos resultados acima utilizou 2600 realizações da variável aleatória α e levou 10.3 s para ser executada. O método de expansão em gPC oferece grande vantagem em termos de tempo de processamento, como pode ser observado na tabela 3. Para valores baixos de K , a simulação utilizando gPC apresenta ganhos de tempo bem significativos. O ganho de tempo é medido em termos do *speed-up*, definido como a razão entre os tempos gasto por MC e gPC respectivamente. Mesmo quando se utiliza polinômios de grau 20 a simulação com gPC ainda se mostra vantajosa.

Tabela 3: Ganho de tempo (em função de K) da simulação da equação de Poisson utilizando gPC em relação a simulação que utiliza MC.

K	tempo gasto (s)	speed-up
MC	10.3	
3	2.5	4.1
5	2.7	3.7
7	2.9	3.5
10	5.1	2.0
20	7.8	1.3

3.3 Exemplo 2: Equação do Calor

Dado um espaço probabilístico $(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$, considere o problema que consiste em encontrar um campo $u(x, t, \omega)$ tal que

$$u_t = (\alpha u_x)_x + 1 \quad x \in [-1, 1], \quad t \in [0, T], \quad \omega \in \Omega, \quad (13)$$

com condições de contorno $u(-1, t, \omega) = u(1, t, \omega) = 0$ e condição inicial $u(x, 0, \omega) = 0$. Neste problema $\alpha : [-1, 1] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ é um campo aleatório de média $\mu_\alpha = 10$ e autocovariância

$$K_\alpha(x_1, x_2) = \exp(-|x_1 - x_2|), \quad x_1, x_2 \in [-1, 1]. \quad (14)$$

Primeiramente o campo α é aproximado pelo truncamento da decomposição KL

$$\alpha(x, \omega) = \mu_\alpha + \sum_{i=1}^N \sqrt{\lambda_i} \phi_i(\mathbf{x}) \xi_i(\omega), \quad (15)$$

onde ξ_i são variáveis aleatórias uniformemente distribuídas em $[-1, 1]$ e $\{\lambda_i, \phi_i\}$ são soluções da equação

$$\int_{-1}^1 \exp(-|x_1 - x_2|) \phi_i(x_2) dx_2 = \lambda_i \phi_i(x_1). \quad (16)$$

Essa equação integral possui solução analítica, que pode ser encontrada em [2].

Em seguida o campo u é aproximado por uma expansão em gPC da forma

$$u(x, t, \omega) \approx \sum_{i=1}^P u_i(x, t) \psi_i(\xi), \quad (17)$$

onde $u_i(x, t)$ são funções determinísticas, ψ_i são polinômios de Legendre e $P = (K + N)!/(K!N!)$, sendo K o grau máximo dos polinômios de Legendre.

Seguindo-se o procedimento geral descrito na seção 3.1 obtêm-se o seguinte sistema de equações diferenciais

$$\begin{aligned} \mathbb{E} [\psi_j^2] (u_k)_t = \sum_{i=1}^P (u_i)_{xx} \left(\mu_\alpha \mathbb{E} [\psi_k^2] + \sum_{j=1}^N \mathbb{E} [\psi_k \xi_j \psi_i] \sqrt{\lambda_j} \phi_j \right) + \\ \sum_{i=1}^P (u_i)_x \left(\sum_{j=1}^N \mathbb{E} [\psi_k \xi_j \psi_i] \sqrt{\lambda_j} (\phi_j)_x \right) + \mathbb{E} [\psi_k], \end{aligned} \quad (18)$$

para $k = 1, \dots, P$. Esse sistema é resolvido utilizando-se o código `Heat_1D` [1], que utiliza um esquema numérico tipo Crank-Nicolson.

A figura 3 apresenta uma comparação entre a média e o desvio padrão das soluções obtidas por MC e gPC. Em ambos os casos pode-se notar um bom acordo dos resultados.

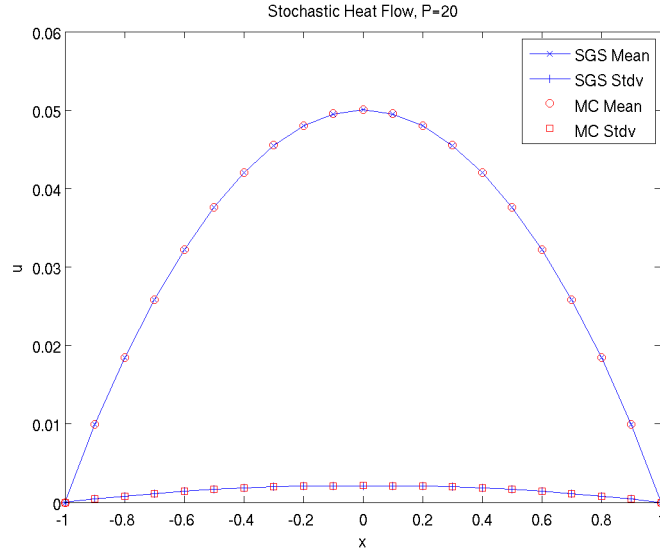


Figura 3: Estatísticas das soluções da equação do calor obtidas por MC e gPC.

Novamente o método de expansão em gPC se mostrou bem preciso, como pode ser visto na tabela 4, que apresenta uma comparação, em termos de K , da norma do máximo da diferença entre as soluções por MC e gPC.

Tabela 4: Norma do máximo (em função de K) das estatísticas da diferença entre as soluções da equação do calor obtidas por MC e gPC.

K	média	desvio padrão
3	3.6956×10^{-5}	4.4778×10^{-5}
4	3.6918×10^{-5}	3.7744×10^{-6}
5	3.6956×10^{-5}	4.4780×10^{-5}

Entretanto, nesse novo problema, o método de expansão em gPC não obteve ganhos em termos de tempo de processamento, como pode ser visto na tabela 5. Tal ineficácia do código `Heat_1D` é explicada pelo uso de técnicas de integração simbólica no meio do programa. Embora essas técnicas forneçam resultados analíticos, demandam muito tempo de processamento.

Tabela 5: Ganho de tempo (em função de K) da simulação da equação do calor utilizando gPC em relação a simulação que utiliza MC.

K	tempo gasto (s)	speed-up
MC	1.0	
3	15.2	6.6×10^{-2}
4	47.2	2.1×10^{-2}
5	122.5	8.1×10^{-3}

4 Comentários Finais

Este trabalho apresentou dois métodos de representação de campos aleatórios, a expansão em polinômio caos generalizado (gPC) e a decomposição de Karhunen-Lòeve (KL). Esses métodos surgem como alternativas para simulação de Monte Carlo (MC), pois tem boa acurácia e demandam um tempo de processamento bem menor que a mesma. A aplicação dessas técnicas na solução de equações diferenciais estocásticas foi ilustrada em dois exemplos simples. Os resultados permitiram caracterizar a acurácia do método de expansão em gPC e sua boa performance em termos de tempo de processamento.

Referências

- [1] Constantine, P. **A Primer on Stochastic Galerkin Methods**. Lecture Notes, 2007.
- [2] Ghanem, R.; Spanos, P., **Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach**. New York: Dover Publications, 2003.
- [3] Shonkwiler, R. W.; and Mendivil, F., **Explorations in Monte Carlo Methods**. New York: Springer, 2009.
- [4] Xiu. D.; Karniadakis, G., The Wiener-Askey Polynomial Chaos for Stochastic Differential Equations. **SIAM Journal on Scientific Computing**, Vol. 24, pp. 619-644, 2002.