UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

**COMPARAÇÃO DE MÉTODOS INVERSOS
GEOESTATÍSTICOS APLICADOS AO
MODELAMENTO HIDROGEOLÓGICO A PARTIR DA
ANÁLISE DA INCERTEZA SEMI-QUANTITATIVA
POR ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS DE
PROCESSO E ANÁLISE Q-FATORIAL**

Alvaro Bueno Buoro

Orientador: Prof. Dr. Gilberto Amaral

TESE DE DOUTORAMENTO

Programa de Pós-Graduação em Recursos Minerais e Hidrogeologia

SÃO PAULO
1999

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

COMPARAÇÃO DE MÉTODOS INVERSOS GEOESTATÍSTICOS
APLICADOS AO MODELAMENTO HIDROGEOLÓGICO A PARTIR
DA ANÁLISE DA INCERTEZA SEMI-QUANTITATIVA POR
ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS DE PROCESSO E
ANÁLISE Q-FATORIAL

ALVARO BUENO BUORO

Orientador: Prof. Dr. Gilberto Amaral

TESE DE DOUTORAMENTO

COMISSÃO JULGADORA

Nome

Assinatura

Presidente: Prof. Dr. Gilberto Amaral

Examinadores: Prof. Dr. Ghislain de Marsily

Prof. Dr. Jorge Kazuo Yamamoto

Prof. Dr. Paulo Milton Barbosa Landim

Prof. Dr. Wladimir Shukowsky

Assinaturas manuscritas em azul sobre linhas horizontais, correspondendo aos membros da comissão julgadora.

SÃO PAULO
1999

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS**

**COMPARAÇÃO DE MÉTODOS INVERSOS
GEOESTATÍSTICOS APLICADOS AO MODELAMENTO
HIDROGEOLÓGICO A PARTIR DA ANÁLISE DA
INCERTEZA SEMI-QUANTITATIVA POR ANÁLISE DE
COMPONENTES PRINCIPAIS DE PROCESSO E
ANÁLISE Q-FATORIAL**

Alvaro Bueno Buoro

Orientador: Prof. Dr. Gilberto Amaral

TESE DE DOUTORAMENTO

Programa de Pós-Graduação em Recursos Minerais e Hidrogeologia

São Paulo

1999

Agradecimentos

Ao Gilberto por ter me aberto algumas portas e me dado liberdade.

Ao G. de Marsily pela acolhimento humano e caloroso em seu laboratório, pelas muitas oportunidades de discussão, cursos e reuniões que pude participar por seu intermédio com pesquisadores do mais alto gabarito, e pelos contatos e dados que permitam a realização desta tese.

Ao F. Delay pela amigável disposição com que passamos discutindo tardes e tardes sobre inversão, geoestatística, entropia e outros tópicos que não chegaram a ser desenvolvidos no manuscrito.

A Tony Zimmerman pela disponibilidade e simpatia com que organizou e me enviou os 400 Mb de dados utilizados nos testes sintéticos desta tese.

A M. LaVenue pelos dados e programas utilizados nos testes sobre dados reais e pela disponibilidade com que discutimos a adaptação dos programas cedidos aos meios computacionais disponíveis

A I. Braud e Ch; Obled por terem gentilmente cedido a versão de base da ACPP aqui utilizada.

A João B. Correa, Andrea , Luciana e Vanessa pela atenta leitura de partes deste manuscrito.

A Sophie Violette pelo suporte computacional em Unix.

A Rita Conde pela sorridente ajuda, sem a qual muitas coisas não teriam acontecido.

A meus pais.

A minha mulher e meu filho

ÍNDICE

Agradecimentos.....	I
ÍNDICE.....	II
ÍNDICE DAS FIGURAS E TABELAS	V
RESUMO.....	IX
ABSTRACT	X
I. INTRODUÇÃO	1
I.1 EXPOSIÇÃO DO PROBLEMA	1
I.2 OBJETIVOS.....	4
I.3 APRESENTAÇÃO DOS CAPÍTULOS.....	6
II. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	8
II.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA DIRETO E DO PROBLEMA INVERSO.....	8
II.1.1 Maneiras de abordar o problema inverso.....	9
II.1.2 Caracterização do problema inverso.....	10
II.1.3 Tipos de Solução do problema inverso.....	11
II.1.3.1 A formulação direta.....	11
II.1.3.2 A formulação indireta	12
II.1.3.2.a A formulação geoestatística	15
II.1.4 Parametrização.....	16
II.2 A ESTIMAÇÃO DA INCERTEZA NO MODELAMENTO HIDROGEOLÓGICO...19	
II.2.1 Caracterização da incerteza dos parâmetros	21
II.2.2 Caracterização da incerteza do resultado do modelamento	22
II.2.2.1 Métodos de Monte Carlo.....	22
II.2.2.2 Análise de Sensibilidade	23
II.2.2.3 Métodos baseados na solução de equações parciais estocásticas	25
II.2.2.4 Métodos de teste de hipóteses	25
II.2.3 Caracterização da influência dos parâmetros através da incerteza da solução.....	26
III. MÉTODOS E MATERIAIS.....	28
III.1 MÉTODOS UTILIZADOS NA CARACTERIZAÇÃO E COMPARAÇÃO DA INCERTEZA	28
III.1.1 Análise em Componentes Principais de Processo (ACPP).....	28
III.1.1.1 Metodologia.....	29
III.1.1.1.1 Cálculo numérico adotado	32
III.1.1.1.2. Escolha da função-base da interpolação ($e_i(x)$)	33
III.1.1.1.3. Amostragem estatística da Covariância empírica	33
III.1.1.1.4 Adensamento da grade de resimulação.....	34
III.1.2 Realização de novas simulações - resimulações.....	35
III.1.2.1 Metodologia.....	36

III.1.2.2. Condicionamento da resimulação	38
III.1.3 Análise Fatorial	40
III.1.3.1 Metodologia da Análise Q-fatorial	41
III.2. MÉTODOS INVERSOS GEOESTATÍSTICOS COMPARADOS	44
III.2.1 Simulação Fractal (SF)	44
III.2.2. Transformada Fourier (TF)	46
III.2.3. Cokrigagem Linear (CL)	46
III.2.4 Máxima Verosimilhança (MV)	48
III.2.5. Pontos Pilotos (PP)	50
III.2.6. Simulação Sequencial (SS)	51
III.3. MATERIAIS UTILIZADOS (DADOS)	55
III.3.1. Descrição dos dados sintéticos utilizados	55
III.3.2. Descrição dos dados reais utilizados	59
IV. RESULTADOS E DISCUSSÕES	65
IV.1. RESULTADOS DOS TESTES SOBRE TP 1	65
IV.1.1 Amostragem estatística e reamostragem	67
IV.1.2. Decomposição espectral	70
IV.1.3 Volume do hiperespaço de parâmetros admissíveis	71
IV.1.4. Localização espacial da maior incerteza	73
IV.1.5. Análise Q-fatorial	76
IV.1.6. Análise do caráter multinormal das simulações	78
IV.1.7. Testes numéricos de resimulação	84
IV.1.8. Aplicação da resimulação para ajuste da piezometria de TP1	96
IV.2. RESULTADOS DOS TESTES SOBRE TP 4	98
IV.2.1 .Amostragem estatística e reamostragem	100
IV.2.2 Decomposição espectral	102
IV.2.3 Volume do hiperespaço de parâmetros admissíveis	103
IV.2.4 Localização espacial da maior incerteza	104
IV.2.5 Análise Q-fatorial	105
IV.3 RESULTADOS DOS TESTES SOBRE WIPP REAL	106
IV.3.1 Reamostragem e condicionamento	107
IV.3.2 Localização espacial da maior incerteza	108
IV.3.3 Teste numérico do uso da resimulação para solução do problema inverso.	109
V. CONCLUSÃO	112
VI. BIBLIOGRAFIA	115
ANEXO A: KRIGAGEM	122
ANEXO B: SIMULAÇÃO CONDICIONAL DE CAMPOS ALEATÓRIOS	124
B.1 CONDICIONAMENTO POR KRIGAGEM	124

B.2 DECOMPOSIÇÃO LU COMBINADA COM OBSERVAÇÕES	125
B.3. RESFRIAMENTO SIMULADO OU 'SIMULATED ANNEALING'	125
B.4 SIMULAÇÃO SEQUENCIAL GAUSSIANA.....	126
B.5 SIMULAÇÃO SEQUENCIAL DE INDICATRIZES	127
ANEXO C: CÁLCULO DA ENTROPIA BIVARIADA	130
ANEXO D: DADOS ORIGINAIS DO TESTE SINTÉTICO	131
ANEXO E: CÁLCULO ROBUSTO DO HIPERELIPSÓIDE DE DISPERSÃO	140

INDICE DAS FIGURAS E TABELAS

FIGURA I-1 : Relação entre o mínimo global da função objetivo e a região aceitável no espaço de parâmetros devido as aproximações no sistema (modelo mais dados).	3
FIGURA II-1: Definição do problema direto e inverso (adaptado de McLaughlin & Townley 1996)	9
FIGURA II-2 : Esquematização da resolução indireta do problema inverso (modificado de Marsily et al. 1984)	13
FIGURA II-3: Diferentes formas de parametrização utilizadas na modelagem, ver descrição no texto (modificado de McLaughlin & Townley 1996).	18
FIGURA III-1: Funções de base $e_i(x)$. a) linear por pedaço b) linear por face.	33
FIGURA III-2: Variograma para os 10 primeiros autovetores. "av" indica autovetor	35
FIGURA III-3: Escolha do termo aleatório a da resimulação para cada um dos k autovetores indicados no eixo das abscissas para cada uma das escolhas aleatórias definidas por uma série	37
TABELA III-1: Comparação entre AACP e análise fatorial	41
FIGURA III-4: Representação do posicionamento dos autovetores no espaço de soluções onde cada ponto representa o valor de um parâmetro.	42
FIGURA III-5: Cargas da solução 1 nos fatores I e II (CI 1 e CII 1 respectivamente) e na solução 2, sob os mesmos fatores (CI 2 e CII 2 respectivamente)	43
FIGURA III-6: Determinação dos parâmetros mais influentes na incerteza pela ordenação das cargas de cada parâmetro em relação ao primeiro fator. os parâmetros com comportamento aleatório no entorno de um valor qualquer não influenciam na determinação da maior incerteza	43
FIGURA III-7: Definição da posição das condições limites segundo os segmentos definidos pelos pontos extremos ABCD, para o condicionamento das simulações do método SF	45
TABELA III-2: Comparação dos métodos inversos de simulação geoestatística usados em hidrogeologia.	54
FIGURA III-8: Correlação entre erros em carga hidráulica com erros em Log T para todos os métodos em todos os TPs, considerando todos os pontos dentro do domínio simulado por cada método. (de Zimmerman et al. 1998)	58
FIGURA III-9 : Localização de WIPP a sudoeste dos estados unidos da América (de Lavenue et al. 1995).	60
FIGURA III-10 : Corte geológico na direção SO – NE mostrando o nível do repositório radiativo e da formação Culebra cujo comportamento foi simulado pelo modelo real (de Lavenue et al. 1995).	61
FIGURA III-11 : Transmissividades em Log_{10} Krigadas a partir de um variograma linear no Dolomito de Culebra à partir dos dados disponíveis (+)	62
FIGURA III-12 : Carga hidráulica no Dolomito de Culebra, isolinhas em metros (de Lavenue et al. 1995).	63
FIGURA III-13 : Histograma dos dados de transmissividade disponíveis na formação Culebra.	64
TABELA IV-1 - Características dos dados originais e reamostrados para TP1	65
FIGURA IV-1 Variograma experimental de todas as simulações feitas por cada método inverso sobre TP1 (de Zimmerman et al. 1998).	66
FIGURA IV-2: Posicionamento da reamostragem feita segundo características de cada método	68
FIGURA IV-3 : Três reamostragens para o método CL feitas a partir de três pontos de base diferentes	69

FIGURA IV-4: Maior zona de incerteza para o método CL segundo três amostragens contíguas, base1, base2 e base3.....	69
FIGURA IV-5 : Porcentagem de variância explicada pelos autovetores para cada um dos métodos. o método aleatório baseado num conjunto de 100 simulações geradas sem estruturação com a mesma média e variância que os dados de controle.....	70
FIGURA IV-6 : Entropia bivariada média sobre 5 simulações de cada método.....	71
TABELA IV-2: Volume do hiperelipsóide representando a dimensão do espaço de soluções aceitáveis caracterizado por cada método.....	71
FIGURA IV-7: Distribuição dos autovalores em termos absolutos, indicando sob a curva o volume do hiperelipsóide contendo todas as simulações.....	72
FIGURA IV-8 : Posicionamento da região de maior contribuição no primeiro autovetor para TP1	74
FIGURA IV-9 : Composição percentual dos dois primeiros autovalores para TP1	74
FIGURA IV-10: Variância de krigagem utilizando-se somente os pontos de condicionamento em Log T (indicado por +). feito com variograma exponencial com alcance de 2808 metros.....	75
FIGURA IV-11: Delimitação da região com inclinação superior a duas vezes o desvio padrão das inclinações de cada método.....	76
FIGURA IV-12: Inclinação da reta ajustada aos fatores ordenados segundo o primeiro fator dentro da análise Q-fatorial. para os métodos a)TF, b)SF, c)CL d)MV, e)PP, f)SS.....	77
FIGURA IV-13: Histogramas em alguns pontos para os métodos a) SS, b)CL, c) MV. o número do ponto (pto #) nos histogramas indica, na planta abaixo à direita, sua localização espacial para aquele método.....	79
FIGURA IV-14: Distância de Mahalanobis e robusta em relação ao centro do hiperelipsóide. as simulações de número 25, 32, 84 são extremas segunda a distância robusta para o método CL.....	83
FIGURA IV-15: Variação do volume definido pelo hiperelipsóide com a eliminação de uma, duas ou três simulações. o eixo das abscissas indica qual dentre as cem simulações disponíveis foi retirada para o cálculo do volume indicado nas ordenadas.....	83
FIGURA IV-16: Para o método CL no TP1 : a) campo médio sobre as 100 simulações na escala de cinza-e valor nos pontos de controle nos símbolos. notar que no símbolo quadrado estão representados todos os tons de cinza, indicando um condicionamento somente parcial deste método. b) desvio padrão sobre as 100 simulações. todos os valores em Log T.....	86
FIGURA IV-17: a) uma simulação original método CL; b) resimulação feita com 99% de variância retida, sem adição de ruído branco e com condicionamento aceitando desvios de até ± 1.4 Log T. notar que o condicionamento na resimulação induziu maior proximidade com os valores condicionantes (malhas mais claras ao norte e ao centro), regiões mal condicionadas nas simulações originais.....	87
FIGURA IV-18: Diferença entre valor médio sobre 100 simulações e valores condicionantes	88
FIGURA IV-19: Histogramas do resíduo entre dados condicionantes e : a) simulação original , b) resimulação a 99% variância, c) resimulação a 95% da variância.....	88
FIGURA IV-20: Duas resimulações feitas com diferentes maneiras de adicionar a variância descartada no corte a k autovalores para: a) corte a 95% + 5% ruído branco, b) corte a 95%, c) corte a 95 % + 5 % como um autovetor extra.....	89
FIGURA IV-21: Para o método SS no TP1 : a) campo médio sobre as 100 simulações na escala de cinza-e valor nos pontos de controle nos símbolos; todos os valores em Log T. b) desvio padrão sobre as 100 simulações. c) uma simulação original.....	93

FIGURA IV-22: Duas resimulações mostrando a variação das dimensões do espaço de busca do hiperelipsóide a partir da utilização do termo aleatório no intervalo: a) $\pm \sqrt{\lambda_k}$, B) $\pm \sqrt{3\lambda_k}$ C) $\pm \sqrt{4\lambda_k}$.. todos os valores em Log T resimulados com um corte a 99% da variância total.	94
FIGURA IV-23: Diferença para o quartil 25% (dif25), a média (dif med) e o quartil 75% (dif75) calculadas entre 100 simulações e 100 resimulações, para os diferentes métodos.	95
FIGURA IV-24: Erro médio em carga hidráulica nos pontos de controle, e1=erro médio, abs= erro médio absoluto, e2= erro médio quadrático.	97
FIGURA IV-25: Velocidade máxima média segundo a solução do problema direto e o método inverso utilizado para a obtenção do campo de Log T.	97
FIGURA IV-26: Erro de ajuste da carga hidráulica para o método MV em 10 simulações para TP1 (numeradas) e 10 resimulações (acpp 1... 10).	97
FIGURA IV-27: Variograma experimental médio de todas as simulações feitas por cada método inverso sobre TP4 (de Zimmerman et al. 1998).	98
FIGURA IV-28: Amostragem realizada sobre TP4 para todos os métodos.	101
FIGURA IV-29: Percentagem de variância total explicado pelos autovetores expressos em percentual.	102
TABELA IV-4: Volume do hiperelipsóide definido pelos parâmetros das soluções equiprováveis.	103
FIGURA IV-30: Valor absoluto do autovalor em função do seu índice.	103
FIGURA IV-31: Posicionamento da região de maior contribuição no primeiro valor para TP4. só os 5% extremos da distribuição de cada método são mostrados.	104
FIGURA IV-32: Delimitação da região mais influente segundo a indicação da análise Q-fatorial.	105
FIGURA IV-33: Campo médio de Log Te desvio padrão sobre 100 soluções inversas de WIPP.	106
FIGURA IV-34: Reamostragem adotada sobre a grade irregular inicial e pontos de condicionamento efetivamente utilizados na resimulação.	107
FIGURA IV-35: Delimitação da zona mais influente na incerteza segundo análise ACPM marcadas * e segundo a análise Q-fatorial marcadas ∇, os pontos de controle são marcados +.	108
FIGURA IV-36: Resimulação feita a partir da média calculada por krigagem.	109
FIGURA IV-37: Resimulação baseada sobre a média geral das simulações.	110
FIGURA IV-38: Variação da função-objetivo para diferentes tipos de campos de Log Tem função do índice das iterações, representando cada uma um ponto piloto adicionado para a solução do problema inverso. ...	111
FIGURA IV-39: resultado do problema inverso com a utilização da resimulação tipo 2 como campo de Log T inicial.	111
FIGURA A-1: Amostragem espacial do processo $X(\xi, x)$ num contexto de multirealizações (ξ).	122
FIGURA B-1: Diferenças entre estimação e simulação condicionada e não condicionada obtida a partir dos mesmos pontos de medida.	128
FIGURA B-2: A partir da superposição da krigagem sobre as medidas e da krigagem sobre o valor simulado nos pontos de medida, obtém-se o condicionamento de uma simulação por Krigagem.	129
TABELA D-1: Dados de construção e amostrados da realidade sintética.	131
TABELA D-2: Dados fornecidos aos participantes.	131

FIGURA D-1: Campo de Log T sintético (representando a realidade), os quadrados são os pontos de amostragem passados aos participantes, os valores de Log T representados vão de 10^{-7} a 10^{-6} para o escuro, 10^{-6} a 10^{-5} , 10^{-5} a 10^{-4} , 10^{-4} a 10^{-3} e menores que 10^{-3} para o mais claro. a linha saindo do quadrado ao centro da figura representa a trajetória de um partícula saindo dos limite do site de WIPP	132
FIGURA D-2: Mapas de Log Transmissividade e carga hidráulica feitos com variograma linear a partir dos dados amostrados a) relativo a TP 1, b) relativo a TP4.	133
FIGURA D-3: Para TP 1 campo médio de Log T na parte superior, no centro uma realização qualquer com o percurso de uma partícula para aquela realização, abaixo a cdf do tempo de trânsito com os envelopes de 95% dos casos, a linha grossa foi obtida a partir do campo sintético e representa a 'realidade'	134-136
FIGURA D-4: Para TP 4 campo médio de Log T na parte superior, no centro uma realização qualquer com o percurso de uma partícula para aquela realização, abaixo a cdf do tempo de trânsito com os envelopes de 95% dos casos, a linha grossa foi obtida a partir do campo sintético e representa a 'realidade'	137-139
FIGURA E-1: Gráfico do log do peso do cérebro por log peso do corpo com elipses de tolerância a 97.5% usando a média e a covariância clássicas (linha tracejada) e estas calculadas por estimador robusto (linha cheia). pontos 6,16 e 25 são dinossauros, pontos 14 e 17 são respectivamente o homem e o macaco.	141

RESUMO

Como uma resposta a necessidade de gerar campos de condutividade mais complexos, foram desenvolvidos métodos que condicionados tanto a carga hidráulica quanto aos dados de condutividade são capazes de produzir soluções equiprováveis. Estas técnicas utilizam-se não somente da informação estrutural, mas também da informação física (fluxo), permitindo modificações de uma simulação original para um melhor ajuste da solução inversa. Isto permite uma visualização da incerteza do modelo através do espaço dos parâmetros, uma vez que centenas de simulações equiprováveis (um conjunto), todas condicionadas aos dados disponíveis respondem satisfatoriamente ao problema inverso.

Procurando uma maneira mais fácil de visualizar esta incerteza, procurou-se métodos que fossem capazes de trabalhar com as principais características do conjunto. Assim fez-se uma Análise de Componentes Principais de Processo (ACPP) que constrói uma decomposição ortogonal da matriz de covariância empírica. Neste caso determinar o sub-domínio onde a primeira função própria tem maior influência é equivalente a encontrar a localização espacial da maior incerteza do conjunto como um todo. Esta localização está relacionada às características hidráulicas do problema, assim como a distribuição espacial dos dados. Alternativamente, para fins de comparação, fez-se uma análise Q-fatorial, que é menos restrita à necessidade da linearidade da relação entre os parâmetros do modelo.

Ambas as metodologias foram usadas sobre dados de 6 métodos inversos geoestatísticos em dois problemas sintéticos, e para um destes métodos num problema real. Os resultados mostram que com poucas exceções, ambas as metodologias acessam a mesma região como a mais incerta. Além do mais, a ACPP pode ser utilizada para comparar qualitativamente diferentes modelos através da energia, ou do espalhamento do conjunto no espaço de parâmetros.

A ACPP também permite, como um subproduto, a geração de novas simulações de maneira mais rápida. Elas mantêm a principal característica estrutural do conjunto inicial pois são calculadas por uma composição aleatória limitada pela variância dos autovalores. Elas foram utilizadas sem problemas para explorar novas regiões do espaço de parâmetros e para agregar novas informações como novos pontos de condicionamentos. No exemplo real tratado, estas simulações foram satisfatoriamente utilizadas como um campo inicial na solução do problema inverso pelo método inverso geoestatístico dos Pontos Pilotos.

São discutidas também algumas dificuldades relativas a limitada quantidade de dados para a obtenção de uma amostragem satisfatória da matriz de covariância e são propostas alternativas como a amostragem dos dados e a Krigagem dos autovetores.

Outros métodos como a entropia bivariada para o cálculo da energia e o Mínimo Volume do Elipsóide para a detecção de simulações extremas são apresentados

ABSTRACT

As an answer to the needs for the generation of more complex simulated conductivity fields, inverse geostatistical methods can now be constrained by head and conductivity data to generate equiprobable solutions. These techniques use not only the structural characteristics of the data, but also the physical information (flux), that allows the modifications of the original simulation for a better adjustment of the inverse problem solution. This gives an insight to the uncertainty of the model since hundreds of equiprobable simulations (an ensemble), all conditioned by the available data, answer satisfyingly to the inverse problem.

Searching for an easier way to visualize this uncertainty we have looked for a method able to work with the main characteristics of the ensemble. Therefore we have made an analysis by Empirical Orthogonal Functions EOF¹ which builds an orthogonal decomposition of the empirical covariance matrix. Determining the sub-domain where the first eigenfunction is of larger influence is equivalent to finding the spatial location of larger uncertainty in the ensemble. This location is related to the specific hydraulic characteristics of the problem, and to the distribution of the available data. Alternatively, for comparison, we have made a Q-factorial decomposition, which is less restricted by linear relations between the parameters of the model.

Both methodologies were used on the data of 6 ensembles of inverse geostatistical methods, on two synthetic test problem, and one real problem. The results shows that with few exceptions both methodologies access the same zone as the more uncertain. Moreover the EOF can be used to compare in a qualitative way the different models through their energy or the spreading of the ensemble in the parameters space.

The EOF also permits, as a by-product, the generation of more and faster new simulations. The latter are calculated by a random composition of the weight of each eigenfunction given by the EOF. These new simulations keep the main structural characteristics of the initial ensemble. They were successfully used to explore new regions of the parameters space and to aggregate new conditioning information in the simulations. In the real field problem these simulations were successfully used as a new initial field in the inverse solution by the Pilot Point inverse method.

We discuss also some difficulties due to the relative limited amount of data for the analysis and propose some alternatives as sampling the data, and kriging the eigenfunctions.

Other methods as the bivariate entropy for the calculation of the energy or the Minimum Volume Elipsoide for the outlier detection, were also presented.

¹ Also called ACPP or Karhunen-Loeve expansion

I INTRODUÇÃO

I.1 Exposição do problema

A água sempre esteve associada a vida. Enquanto matéria essencial ao equilíbrio orgânico, ou como símbolo da presença emocional (Colbeau, 1997). No mundo atual porém, esta visão da água restrita a sua presença física-emocional não é mais considerada satisfatória e uma compreensão intelectual mais aprofundada é exigida como primeiro passo para o controle mais efetivo deste recurso natural.

A utilização otimizada destes recursos num mundo em que se estabeleceram sociedades de consumo é hoje a única solução para que a Terra seja respeitada enquanto patrimônio indispensável à sobrevivência e ainda comporte as necessidades cada vez mais especializadas da população humana em crescimento.

O hidrogeólogo contemporâneo se encontra diante de uma responsabilidade muitas vezes negligenciada em tempos passados. Cabe a ele o trabalho de precisar os conhecimentos disponíveis anteriormente fazendo para isso ensaios realistas e que não apresentem riscos de degradar o meio natural. Essa necessidade proporcionou o desenvolvimento de metodologias recentes que se caracterizam pela utilização de modelos que tentam simular numericamente a grande complexidade dos meios geológicos reais.

O uso crescente de modelos numéricos de simulação de fluxo e transporte de massa em meio poroso, se deve tanto as novas tecnologias aplicadas aos meios de cálculo - hardware e software-, como a potencial complexidade que os modelos numéricos podem comportar no que se refere entre outros, a modelagem de domínios irregulares, diferenciando-os assim dos modelos analíticos desenvolvidos até hoje. Este tipo de modelo permite também o estudo de situações de risco potencial de maneira mais simples, como por exemplo, a implicação de um vazamento poluente numa posição x_2 ao invés de x_1 .

Entende-se aqui por modelo a tradução conceptual de uma dependência entre a excitação do sistema como as entradas e saídas de água naturais, ou os testes de bombeamento, e sua resposta, quer dizer as variações espaço-temporais da carga hidráulica - também chamada potencial ou piezometria - em função de um certo número de parâmetros representando as propriedades físicas do meio, aproximadamente conhecidas.

Historicamente os modelos reduzidos em caixas de areia, ou modelos funcionando por analogia elétrica - os chamados modelos físicos - foram os primeiros a mostrar que para

ajustar o potencial hidráulico medido, ou seja, o reflexo concreto do mundo subterrâneo desconhecido mais facilmente mensurável, deveria variar-se de um ponto ao outro suas características físicas, ou seja os parâmetros do meio poroso. As características mais sensíveis a esta variação são a condutividade hidráulica e o coeficiente de armazenamento, caracterizando respectivamente a facilidade de circulação de água e a capacidade de armazenamento do meio poroso.

Atualmente a crescente pressão ecológica exercida pelas leis cada vez mais rigorosas contra a poluição, exige dos hidrogeólogos a utilização consciente e crítica das ferramentas disponíveis para o estudo do transporte de massa nos meios porosos. Estas ferramentas necessitam entretanto de um estudo anterior que caracterize o fluxo de maneira a mais detalhada possível, neste sentido, fazendo eco a outros pesquisadores na área de ciências da terra Poeter & Hill (1997) diz: "A escassez de dados e a não linearidade da regressão dos sistemas físicos produzem dificuldades substanciais. A obtenção de modelos tratáveis que sejam suficientemente representativos do verdadeiro sistema para produzir resultados utilizáveis é presumivelmente o mais importante problema neste campo do conhecimento".

Ströet (1995) destaca as seguintes dificuldades que a modelização enfrenta para descrever a realidade:

As variáveis e os parâmetros utilizados no modelo hidrogeológico são obtidos como médias sobre volumes finitos, enquanto a maior parte dos dados são obtidos em pontos discretos. Renard (1997) revisa os vários métodos utilizados para se fazer esta mudança de escala e os erros daí decorrentes.

As condições no limite e as forças externas são geralmente conhecidas apenas aproximadamente, e poucos estudos (ver Roth 1995) tratam desta incerteza no modelamento.

Na maior parte das aplicações, a quantidade de informação disponível é muito pequena em relação as necessidades teóricas, existindo falta de informação sobre a variabilidade dos parâmetros.

Tomar portanto como único objetivo a calibração de um modelo*, sem considerar-se as incertezas inerentes a nossa impossibilidade de conhecer e representar toda a complexidade dos meios naturais reais, pode levar a aceitar uma resolução numérica aproximada (e talvez muito simplista) da realidade como "A" solução. Negligenciando-se assim que a solução final, mesmo no caso desta ter sido otimizada por algum algoritmo inverso, é na verdade apenas uma dentre muitas possíveis.

* Compreendida aqui como o a escolha do modelo adequado e ajuste dos seus parâmetros de maneira que sua solução corresponda a todos os dados disponíveis dentro do erro considerado aceitável.

Os trabalhos de Gailey & Gorelick. (1991), Konikow & Bredehoeft (1992), Marsily et al. (1992) já chamam a atenção para este ponto.

No estágio atual de conhecimento já é possível entretanto dispor-se de métodos que não só consideraram esquematizações da distribuição dos parâmetros cada vez mais complexas, mas também produzem resoluções equiprováveis sobre uma mesma grade adotada pelo modelo, considerando o conhecimento limitado da realidade de que dispomos. Isto não somente nos abre novas possibilidades de compreensão e visualização das interações consideradas no modelo em estudo, como também permite uma transparência à comunidade em geral das dificuldades e limitações específicas que implica o uso de modelos em ciências da terra e mais especificamente em hidrogeologia.

Na figura I-1 vemos uma descrição esquemática desta região aceitável que pode ser acessada através da utilização de simulações equiprováveis, uma vez que estas dentro de uma faixa de erro aceitável considerando tanto os erros devido as aproximações do modelo quanto a escassez e incerteza dos dados).

O mapeamento de toda a região do espaço de parâmetros aceitável permite uma visão mais global das incertezas do sistema. Na figura I-1 representa-se em uma dimensão um espaço que na verdade tem a dimensão do número de parâmetros do modelo.

Figura I-1 : Relação entre o mínimo global da função objetivo e a região aceitável no espaço de parâmetros devido as aproximações no sistema (modelo mais dados).

I.2 Objetivos

Dada portanto a impossibilidade de uma descrição exata da realidade através dos modelos, é importante se questionar sobre a incerteza dos modelos utilizados em hidrogeologia.

Com a conscientização da estruturação complexa das formações geológicas, vários métodos geoestatísticos se desenvolveram visando utilizar da melhor maneira, tanto a disposição espacial dos dados, quanto a estrutura espacial da variação entre os parâmetros.

Estes modelos geram portanto uma distribuição de parâmetros, variável a cada malha da grade discreta do modelo, que responde concomitantemente aos dados e a uma certa função de covariância que define a estruturação espacial de sua variabilidade.

Para a análise da incerteza dos modelos de fluxo mais complexos, simulações geoestatísticas equiprováveis vem sendo utilizadas, tanto através de um conjunto de mapas de parâmetros (i.e. a condutividade como em Ramarao & LaVenue 1992), quanto através dos traços de percurso possíveis sobre todas as realizações, à partir de uma mesma posição espacial (Wen et al. 1996), ou a partir da função distribuição cumulada (fdc) do tempo de trânsito de todas as realizações a partir de alguns pontos aleatórios no domínio (Zimmerman et al. 1998).

Partindo de um conjunto de simulações equiprováveis, o objetivo desta tese é triplo:

1. Propor uma maneira de concentrar a informação de um conjunto de soluções equiprováveis, que traduza de maneira compacta as zonas de maior ou menor incerteza do modelo e indiretamente a incerteza do fluxo, e através desta concentração propor métodos semi-quantitativos de inter-comparação entre métodos inversos geoestatísticos, baseando-se somente na variabilidade do parâmetro condutividade.
2. Utilizar a informação de um primeiro conjunto equiprovável para direcionar uma nova varredura do espaço de parâmetros, em busca de novas soluções potenciais do modelo.
3. Comparar duas metodologias para a determinação semi-quantitativa das zonas onde os parâmetros são mais influentes na composição da incerteza global do domínio.

Com isso espera-se propor alternativas de estudo da incerteza dos resultados de um modelo complexo, considerando todo o domínio de estudo de uma só vez.

Para este fim a viabilidade de duas metodologias foram testadas:

A Análise por Componentes Principais de Processo (ACPP) (Braud 1990) que, fazendo uma decomposição dos parâmetros sobre uma nova base ortogonal, permite uma análise mais condensada do conjunto de soluções equiprováveis e da zona com maior peso na incerteza dos parâmetros, permitindo também a elaboração de novas simulações de maneira mais rápida.

A Análise Q-fatorial (Buoro & Silva 1994) que através de uma análise da similaridade entre as soluções equiprováveis procura os parâmetros mais influentes para a incerteza do modelo.

I.3 Apresentação dos capítulos

Após a introdução que situa as dificuldades inerentes a descrição dos meios geológicos e o interesse de procurar caracterizar a incerteza desta descrição, esta memória se desenvolve em outros quatro capítulos, a saber:

No capítulo II - Fundamentação Teórica - é feita uma breve descrição da base teórica necessária para compreender a relevância da modelagem inversa em hidrogeologia. No § II.1 explica-se a diferença e o interesse do estabelecimento do problema direto e do problema inverso, situa-se também neste parágrafo a formulação geoestatística inversa dentro do tópico mais abrangente dos métodos inversos, uma vez que os métodos inversos que serão utilizados posteriormente se encaixam dentro desta definição. Ainda neste parágrafo é salientado o papel da parametrização, que através da definição de uma escala de representação dos dados permite uma melhor compreensão das separações entre métodos inversos e métodos geoestatísticos. No § II.2 é feita uma revisão, em termos gerais, de alguns dos métodos utilizados para a caracterização da incerteza quer seja diretamente através dos parâmetros, quer seja através do resultado do modelo. Procura-se neste parágrafo salientar-se as aproximações e limitações de cada uma das metodologias apresentadas e o interesse de se propor as análises ACPP e Q-fatorial para a caracterização da incerteza através da análise 'à posteriori' de um conjunto de soluções equiprováveis.

No capítulo III - Métodos e Materiais - é feita no § III.1 uma descrição detalhada da base teórica das metodologias de Análise de Componentes Principais de Processo (ACPP) e Q-fatorial, comparando as duas. Descreve-se também a metodologia a ser empregada para a geração de novas simulações baseadas no conjunto inicial - chamadas aqui resimulação - e as suas possibilidades de condicionamento. No § III.2 são apresentadas as bases teóricas dos métodos inversos geoestatísticos que foram aqui utilizados para testar as metodologias propostas. Estes métodos foram escolhidos em função de se dispor, para eles, de um conjunto suficiente de realizações produzidas sobre um mesmo problema sintético, o que permitiu a utilização das metodologias propostas também como ferramenta de comparação entre os métodos. No § III.3 é descrita a origem dos dados, tanto dos problemas sintéticos propostos - TP1 e TP4 -, bem como do problema real que analisou um conjunto de simulações equiprováveis feitas sobre os dados de WIPP, um local de estocagem de rejeitos de material radioativo no subsolo dos Estados Unidos.

No capítulo IV - Resultados e Discussões - é discutido no §IV.1 os resultados das análises sobre TP1, abordando os seguintes tópicos:

As limitações impostas pela limitada quantidade de simulações em relação à quantidade de parâmetros e a reamostragem proposta para contornar este problema.

As possibilidades de utilização da ACPP e do cálculo da entropia bivariada para analisar qualitativamente a distribuição de energia entre os métodos inversos.

O cálculo do volume do hiperelipsóide, definido pelos autovalores e autovetores da ACPP, para fazer uma comparação entre os métodos inversos a partir do volume do espaço de parâmetros varrido pelo conjunto equiprovável.

A localização espacial segundo cada método inverso da zona mais influente na incerteza definida pela ACPP e sua comparação com a zona mais incerta definida pela análise Q-fatorial.

A limitação imposta pela suposição de multinormalidade na análise ACPP, a dificuldade de seu cálculo e a possibilidade da utilização desta informação.

A experimentação numérica da resimulação para a geração de campos de transmissividade sobre dois métodos inversos, explorando algumas de suas vantagens e desvantagens.

A experimentação numérica da aplicação da resimulação diretamente como solução de um problema inverso, comparando o ajuste em carga hidráulica para todos os métodos inversos estudados.

No § IV.2 discute-se os resultados das análises sobre TP4, teste sintético mais complexo que TP1. Concentrou-se aqui a discutir-se os seguintes tópicos:

A dificuldade imposta pela reamostragem num caso onde a disponibilidade de dados era comparativamente mais restrita que para TP1.

A comparação da zona mais incerta através das análises ACPP e Q-fatorial

A comparação entre os métodos inversos através das ferramentas propiciadas pela análise ACPP.

No § IV.3 discute-se os resultados das análises sobre os dados de reais de WIPP, concentrando-se na caracterização da zona mais incerta, na detecção de simulações anormais e na aplicação da resimulação como alternativa à simulação geoestatística como campo de condutividade inicial utilizado na solução inversa do método dos Pontos Pilotos.

Finalmente no §V – Conclusão - são apresentados as principais conclusões, dificuldades e possibilidades de trabalhos futuros.

Como apoio a leitura, nos anexos são apresentados sucintamente alguns dos métodos utilizados durante a tese mas não extensamente desenvolvidos.

II FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Um modelo é a simplificação de uma realidade mais complexa expressa através de leis físicas. As variáveis deste modelo são chamadas parâmetros e normalmente são difíceis a medir, mas são elas que tem significado físico. A este modelo chamamos modelo direto e a variável determinada por ele, variável dependente. No caso da hidrogeologia a variável dependente é a carga hidráulica, e os parâmetros mais comumente considerados são a condutividade, o armazenamento e estresses do sistema (testes de bombeamento, recarga).

À determinação da carga hidráulica dada uma distribuição de parâmetros chama-se problema direto, já à determinação dos parâmetros a partir de dados da carga hidráulica é chamado problema inverso.

II.1 Definição do problema direto e do problema inverso

O Problema direto consiste na solução da equação de fluxo em regime permanente para um fluido com densidade constante, obtida a partir da equação de conservação de massa $\nabla \cdot q = Q$ e da equação de Darcy $q = -T\nabla h$, na qual “q” define o fluxo. No caso em que uma aproximação bidimensional é possível (o que será o caso nesta tese), teremos para um aquífero confinado em regime permanente:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial h}{\partial y} \right) = Q \quad (\text{II-1})$$

sendo: T a Transmissividade, obtida como $T = \int_0^e k dz$, em que k é a condutividade hidráulica e “e” a espessura do aquífero; h a carga hidráulica; e Q fontes ou sumidouros de água.

Esta equação pode ser resolvida numericamente dadas as condições limites e a distribuição dos parâmetros T e Q dentro do domínio de estudo definido.

Entretanto, somente nos casos de geologia mais simples uma aproximação de que os parâmetros são homogêneos na zona de estudo é possível. Só nestes casos é possível com dados pontuais sobre estes parâmetros obter-se um modelo que represente satisfatoriamente a realidade.

Considerando-se entretanto a complexidade de grande parte dos meios naturais, é necessário utilizar-se uma descrição mais detalhada da variabilidade espacial dos parâmetros para que o modelo se aproxime mais da realidade, e assim seu resultado numérico seja efetivamente representativo do meio estudado.

Na verdade esta aproximação da realidade vai desde a escolha das equações utilizadas no modelo, até a variabilidade dos parâmetros e dos estresses considerados no modelamento (McLaughlin & Townley 1996, Peck et al. 1987).

Na prática, obter a partir dos escassos dados de campo sobre os parâmetros, a inferência direta destes na grade utilizada num modelo complexo é um grande desafio

Em hidrogeologia o parâmetro cuja variabilidade é mais difícil de quantificar e cuja determinação tem mais influência no modelo é a condutividade hidráulica (Zimmerman et al. 1998, Ackerer et al. 1994). Busca-se então a estimação espacial da condutividade sobre todo o domínio através da carga hidráulica, a variável dependente mais fácil a medir e mais robusta uma vez suas flutuações são mais suaves que as da condutividade. A esta formulação do problema denominamos um problema inverso.

Na figura II-1 tem-se a definição do problema direto através do operador $F(\alpha)$ sobre o espaço de parâmetros A , e do erro de medidas v referente ao espaço de medidas Z . O problema inverso é definido pelo operador $G(z,v)$, que mapeia o espaço $\hat{\alpha}$ das estimativas admissíveis dos parâmetros, através do espaço de medidas Z .

Figura II-1: Definição do problema direto e inverso (adaptado de McLaughlin & Townley 1996)

II.1.1 Maneiras de abordar o problema inverso

Três maneiras de abordar o problema inverso podem ser sublinhadas, considerando-se um contexto mais global.

1) De um ponto de vista puramente matemático, o problema inverso tal como descrito na figura II-1 poderia ser resolvido tomando-se G como F^{-1} , mas caso existam erros nas medidas ou caso o operador direto não for invertível, a estimativa de α não será exata e

poderá ser extremamente instável.

A maneira como o problema inverso é formulado matematicamente influenciará a plausibilidade da solução encontrada, por isso define-se um problema bem posto (Tikhonov & Arsenin 1977) quando este satisfaz as seguintes condições :

- Para cada medida do vetor $z \in Z$ existe uma solução do parâmetro $\alpha \in A_{ad}$.
- A solução do parâmetro é única.
- O problema inverso é estável nos espaços (A_{ad}, Z) , quer dizer pequenas mudanças nas medidas produzem pequenas mudanças no espaço de soluções.

Um problema mal posto pode entretanto ser transformado em um bem posto, se as definições de F , A_{ad} e/ou Z forem modificadas (McLaughlin & Townley 1996).

2) Sob um ponto de vista de pesquisa aplicada, os limites rigorosamente matemáticos são indefinidos. Neste caso mesmo se utilizando de complexos desenvolvimentos matemáticos o pesquisador tem preocupações como a identificação da incerteza, tentativas de redução dos problemas, e determinação dos limites práticos de aplicação do desenvolvimento teórico.

Em hidrogeologia isto é feito na prática através, por exemplo, da imposição de estresse ao sistema com o uso de bombeamento e o conseqüente uso desta informação temporal, ou da adição de mais ou de diferentes tipos de medidas, como por exemplo informações geofísicas, ou com a imposição de limites ou de uma estruturação ao espaço de soluções admissíveis como será discutido nos métodos inversos geoestatísticos mais adiante.

Refletindo sobre a figura II-1, esta transformação da colocação do problema pode ser compreendida como um aumento na dimensão do espaço Z no caso da inclusão da informação temporal, ou na limitação do espaço A_{ad} imposta por uma estruturação definida em G .

3) Um terceiro ponto de vista é o do modelador prático. Geralmente os resultados anteriores são dificilmente aplicáveis dada a complexidade de sua efetiva utilização e aos limites de sua aplicabilidade. Neste caso utiliza-se a intuição afinada pela experiência, esta ainda mais efetiva quando se deve ajustar parâmetros inter-relacionados assegurando uma coerência global. Os resultados neste caso, mesmo que julgados bons, são intrinsecamente subjetivos ao modelador, como por exemplo saber como e quando parar uma calibração.

II.1.2 Caracterização do problema inverso

Muitas revisões sobre o problema inverso existem na literatura Carrera & Neuman (1986a), Yeh (1986), Ginn & Cushman (1990), Certes (1990), Carrera et al. (1993), Sun

(1994), McLaughlin & Townley (1996). Segue-se uma discussão baseada neste último.

O problema inverso pode ser caracterizado segundo quatro pontos principais :

1) A equação direta adotada para relacionar os parâmetros às medidas (i.e. modelo bidimensional, confinado, com resolução por elementos finitos da equação de Darcy para regime permanente ou transitório).

Isto implica a caracterização dos principais processos dentro do domínio de estudo, as equações que os caracterizam, e os dados iniciais necessários. Esta é uma questão a ser abordada caso a caso e que exige não só conhecimento local como a eventual adaptação deste aos meios de cálculo disponíveis. Uma discussão mais aprofundada com algumas indicações práticas podem ser encontradas em Peck et al. 1988, Townley & Wilson 1989, McLaughlin et al. 1993.

2) A maneira como é descrita a variabilidade espacial, ou seja a parametrização adotada, por exemplo considerando-se a variabilidade da condutividade por blocos ou geoestatística.

Este é um ponto importante na compreensão da importância dos métodos geoestatísticos em hidrogeologia, uma vez que trata tanto das questões de parametrização, quanto de identificação e representatividade. Ele será desenvolvido separadamente no § II.1.4

3) O critério de performance adotado para definir uma boa estimativa, por exemplo a definição da função-objetivo a partir da utilização de mínimos quadrados para minimização do erro em carga hidráulica.

4) A solução técnica adotada para se encontrar estas estimativas, como a utilização de métodos de gradiente para encontrar o mínimo da função-objetivo.

O terceiro e o quarto pontos são os que diferenciam a maior parte dos programas inversos desenvolvidos, sendo por isso descrito detalhadamente no § II.1.3

II.1.3 Tipos de Solução do problema inverso

O problema inverso em hidrogeologia se traduz principalmente pelo problema de identificação do campo de transmissividade e mais raramente se estende a outros parâmetros como armazenamento, recarga, condições limites. Será considerando somente a identificação espacial da transmissividade que desenvolveremos os próximos parágrafos.

Duas formulações do problema inverso são normalmente delineadas nas revisões bibliográficas: A direta e a indireta.

II.1.3.1 A formulação direta

A formulação direta, tratando o parâmetro Transmissividade (T) como a variável dependente na equação II-1, requer o conhecimento da carga hidráulica em todo o domínio de estudo (Nelson 1960, Giudici et al. 1995, Emsellem & Marsily 1971, Neuman 1973).

Devido à quantidade limitada de medidas pontuais da carga hidráulica, via de regra disponível, esta é estimada através de uma interpolação como por exemplo uma krigagem. Esta formulação procura então a solução do sistema linear assim obtido, através da minimização do erro de equação (compreendendo erros de interpolação de carga e erros de medida desta) sobre todas as malhas do modelo. A maior crítica a esta formulação é devido a carga hidráulica aparecer como derivada nos cálculos das transmissividades, tornando os cálculos sensíveis a pequenos erros nos dados de carga hidráulica.

No recente desenvolvimento de Giudici et al. (1995), tenta-se contornar este problema através do uso de dois conjuntos linearmente independentes de medidas de carga hidráulica, tomados por exemplo, a dois períodos do ano ou sob estresses diferentes. Neste caso estudos preliminares sob dados sintéticos indicam uma boa recomposição da transmissividade a partir de um valor conhecido (exato) de transmissividade, e a informação da carga sob todo o domínio. Rosazza (1997) detectou que mesmo nos casos onde a informação da carga é bem distribuída sobre o domínio podem-se obter valores sem significação física em algumas malhas(i.e. Log T negativo), o que indica que o problema ainda pode ser instável. Pesquisas recentes (Delay, comunicação pessoal) indicam que este problema pode ser contornado impondo-se que Log T seja positivo durante o processo iterativo de solução numérica.

A solução direta pode ser adaptada à caracterização de estudos em escala regional (Certes, 1990), mas seus inconvenientes fizeram que seu uso tenha praticamente desaparecido da metade dos anos 80 até os recentes trabalhos de Giudici et al. (1995).

Neste período ocorreu o maior desenvolvimento dos métodos indiretos, que, considerando o erro do ajuste por mínimos quadrados da carga hidráulica somente sobre os pontos de observação parece conduzir a melhores soluções, ou pelo menos mais estáveis. Carrera & Neuman (1986 a) notam que o uso de mínimos quadrados sobre os resíduos pontuais de carga são sempre capazes de filtrar parte do ruído dos dados, o que o método direto tem muita dificuldade de realizar.

II.1.3.2 A formulação indireta

A formulação indireta, da qual a calagem de modelos por tentativa e erro é uma versão não automatizada, é utilizada não só devido à menor sensibilidade aos erros em carga, mas

também por serem mais adaptadas a trabalharem com escassez de dados.

Esquemáticamente pode-se descreve-la como mostra a figura II-2. Uma estimativa inicial dos parâmetros (i.e. condutividade, porosidade, armazenamento, recarga, condições no limite) é gerada com ou sem o uso de geoestatística; resolve-se (por diferenças finitas ou elementos finitos, ou outro método) a equação de fluxo com os parâmetros estipulados; calcula-se o resíduo entre a carga calculada e a observada através da função-objetivo (normalmente definida como o resíduo calculado por mínimos quadrados sobre a carga somente nos pontos de medida, mas podendo conter também outros termos regularizadores); caso o resíduo seja considerado aceitável termina-se o processo obtendo-se uma distribuição de parâmetros aceitável pelos critérios estipulados; se o resíduo for muito grande calcula-se a direção de modificação dos parâmetros segundo a indicação do gradiente da função-objetivo; modificam-se os parâmetros utilizados na iteração precedente segundo esta direção (podendo-se ou não regularizar-se as modificações através da geoestatística), retorna-se à solução da equação de fluxo com este novo conjunto de parâmetros. Este ciclo se repete até que o resíduo esteja dentro do limite de aceitação.

Figura II-2 : Esquematisação da resolução indireta do problema inverso (modificado de Marsily 1984)

Como se pode notar, não é necessário o cálculo da primeira e da segunda derivada da carga hidráulica como na resolução direta, necessita-se aqui do gradiente da função-objetivo, que na maioria dos casos comporta somente o campo de transmissividade.

É possível ressaltar-se uma primeira diferença entre os métodos inversos existentes hoje através da função-objetivo de mínimos quadrados generalizados, que deverá ser minimizada:

$$F_{obj}(\hat{p}) = (h_m - h(\hat{p}))^t C_h^{-1} (h_m - h(\hat{p})) + \lambda_p (p_m - \hat{p})^t C_p^{-1} (p_m - \hat{p}) \quad (II-2)$$

em que: h_m é a carga hidráulica medida; $h(\hat{p})$ a carga calculada com o jogo de parâmetros $\hat{p}$; p_m um valor médio ou uma estimativa 'a priori' dos parâmetros; $\hat{p}$ uma estimativa de p , o vetor de parâmetros desconhecido que minimiza esta equação; C_h e C_p as matrizes de confiabilidade das cargas e da estimativa inicial de p respectivamente (poderá ser a matriz de covariância dos erros da estimativa inicial); λ_p é um termo de ponderação entre o ajuste das cargas - definido no primeiro termo - e uma estimativa inicial de p .

Quando se consideram as soluções por mínimos quadrados, a função-objetivo é definida como o primeiro termo na equação II-2. Neste caso só se consideram resíduos sobre a carga nos pontos de observação. Outra possibilidade de mínimos quadrados foi descrita por Clifton & Neuman (1982) considerando-se também a ponderação descrita no segundo termo através da krigagem dos parâmetros iniciais, tem-se então uma versão de mínimos quadrados regularizados. Implicitamente neste caso é considerado que os erros são caracterizados por sua média e covariância, e que sua esperança é zero. As soluções por mínimos quadrados descritas aqui se encaixam nos métodos chamados deterministas, que consideram a existência de um campo de parâmetros exato, sendo a incerteza decorrente da nossa inabilidade em descrevê-lo.

Considerando-se a existência de erros no modelo, pode-se estimar o conjunto de parâmetros por máxima verosimilhança assumindo-se que os erros seguem uma distribuição gaussiana (Carrera & Neuman 1986a, b, c), aqui os parâmetros a se determinar são determinísticos mas desconhecidos. A função-objetivo será descrita pela equação II-2 completa, mas agora λ_p não é mais definido a priori pelo modelador, mas estimado de maneira iterativa para uma gama de valores possíveis até que seu valor se estabilize. Um desenvolvimento mais detalhado desta metodologia se encontra no § III.2.4

Outra maneira de considerar o problema inverso, conhecida como Baysiana, define o vetor de parâmetros ($\hat{p}$) como uma realização de uma função aleatória cuja média é conhecida e que segue uma certa covariância. A estimativa então se fará a partir de uma

estimativa inicial de p que indicará a média conhecida. Desta maneira a função-objetivo terá a mesma forma da equação II-2 considerando $\lambda_p=1$, com o primeiro termo indicando o ajuste de carga e o segundo termo penalizando as modificações da estimativa inicial de p .

McLaughlin & Townley (1996) provam matematicamente que as visões determinista e estocástica são equivalentes uma vez que o critério de mínimos quadrados - utilizado via de regra - pode ser obtido de forma probabilista, com a introdução Baysiana de informação a priori, ou deterministicamente, com a imposição de uma condição de suavidade. Estes mesmos autores notam que todos os métodos inversos propostos usam a suposição de que o erro é gaussiano explícita ou implicitamente.

II.1.3.2.1 A formulação geoestatística

Diferentemente das formulações anteriores onde a solução é considerada determinista e o caráter estocástico advém somente do erro sobre o modelo, a informação a priori, e as cargas (Certes 1990), a estimativa geoestatística considera o parâmetro p representando a condutividade hidráulica ou a transmissividade, como a realização de um processo aleatório. Esta formulação procura então caracterizar este processo aleatório estruturado no espaço através de poucos parâmetros, o que é feito através do ajuste do variograma^{*} ou da função de covariância dos parâmetros (Kitanidis & Vomvoris 1983, Marsily 1984, Hoeksema & Kitanidis 1984).

A formulação geoestatística inversa não se limita a estimar os parâmetros p através de uma interpolação por krigagem, considerando somente os dados de transmissividade, ou através de cokrigagem, correlacionando os dados de transmissividade e de carga hidráulica. O que a formulação geoestatística inversa tem de específico é que além de poder se utilizar destas ferramentas, ela se utiliza também das equações físicas que relacionam carga hidráulica e transmissividade (i.e. equação II-1) agregando assim a informação das leis físicas e a consistência conjunta de todos os demais parâmetros utilizados no modelo como recarga e condições ao limite.

Obtém-se assim uma consistência global do modelo físico condicionado também a informação estrutural dos parâmetros (i.e. transmissividade e/ou carga hidráulica)

Esta formulação exige entretanto que uma quantidade mínima de informação sobre o parâmetro (por exemplo 40 pontos de medida de transmissividade) esteja disponível para a caracterização do variograma. Isto permitirá então a geração de múltiplos campos de

^{*} O variograma tem a mesma aplicação que a covariância, mas exige hipóteses menos restritivas que esta para existir. Com isto é possível caracterizar-se a relação entre os parâmetros baseando-se apenas nos primeiros dois momentos da fdp, sem precisar definir a natureza desta.

transmissividade através de métodos de simulação (ver § III.2) utilizados dentro dos métodos inversos geoestatísticos.

II.1.4 Parametrização

Para se estabelecer um modelo numérico é preciso definir a escala sobre a qual definem-se os parâmetros, ou seja a densidade da grade discreta e variabilidade entre cada malha da grade. A isto chama-se parametrização.

A parametrização é estabelecida a partir de dois fatores quase sempre antagônicos, de um lado a disponibilidade de informação, e de outro a necessidade de considerar malhas suficientemente pequenas para que exista uma representatividade equivalente à complexidade que supõe-se encontrar na realidade.

Destes dois fatores pelo menos duas maneiras distintas de definir a grade de simulação podem ser exemplificadas nos métodos inversos comparados nesta tese, uma que considera prioritariamente a disponibilidade de informação refinando a grade onde existe mais informação (vide região central do método PP no anexo C), e outra que define uma grade homogênea sobre todo o domínio, neste caso implicitamente supõe-se que a informação obtida na região aonde se concentram os dados é representativa também das regiões sem informação.

Os parâmetros assim definidos e utilizados na resolução do problema inverso serão parâmetros efetivos nesta escala (McLaughlin & Townley 1996).

Na figura II-3 vemos diversas possibilidades de parametrização: nos itens a) e b) a parametrização é feita considerando cada malha do modelo independentemente sem a definição de nenhuma estruturação entre elas, já no item c) a variação dos parâmetros ocorre entre blocos contendo varias malhas, estes podem ser definidos, por exemplo, a partir da geologia ou a critério do modelador, no item d) a parametrização se faz buscando-se variações suaves, o que é obtido por funções 'spline' ou polinomiais caracterizadas por poucos valores. No item e) a parametrização se faz através de funções de covariância que determinam zonas de influência ao redor de cada valor medido.

A nível prático a parametrização por blocos ou regionalizada (c) é normalmente utilizada na resolução do problema inverso por "tentativa e erro" ou "multi-escala" (Ackerer, comunicação pessoal), enquanto que a função de correlação (e) é utilizada nos métodos geoestatísticos inversos.

A escolha da parametrização se relaciona também à maneira como o problema inverso é colocado e ao tipo de informação a priori que é inserida no problema, com isso alguns tipos

de parametrização não são utilizados por certos métodos inversos devido a maneira como este foi desenvolvido. Por exemplo métodos que usam a krigagem como uma maneira de regularizar o problema inverso estão usando a parametrização por correlação (e), e precisariam de outra formulação para poder usar a informação a priori dada por uma estruturação geológica, facilmente adaptada a parametrização (c).

Um ponto importante a ressaltar está na relação entre a parametrização escolhida e a quantidade de informação disponibilizada ao modelo quer seja através: das medidas disponíveis, da informação a priori sobre os parâmetros ou da regularização introduzida, por exemplo através da eventual utilização de funções de covariância na determinação dos parâmetros.

Existe uma certa quantidade de parâmetros plausíveis de serem bem determinados segundo a definição de cada problema. De maneira geral quanto maior a demanda de informação do modelo –compreendida aqui como a quantidade de parâmetros a serem definidos pela solução do problema inverso- em relação a quantidade de informação condicionada pelos dados, maior a incerteza na determinação destes parâmetros (Menke 1984, McLaughlin & Townley 1996).

Entretanto se a quantidade de parâmetros a ser definida não for suficiente para aproximar a real complexidade da geologia, a representatividade do modelo enquanto instrumento de predição será prejudicada, mesmo que estes parâmetros sejam relativamente bem definidos. Existe portanto um compromisso a ser encontrado caso a caso.

Neste sentido a utilização de métodos geoestatísticos inversos é interessante pois permite a descrição de meios complexos com uma estruturação interna, sem uma parametrização excessiva.

Na medida porém, que esta complexidade é gerada a partir de duas ou três variáveis da função de covariância (ou, segundo as hipóteses feitas, do variograma, ver discussão § seguinte), estas variáveis são extremamente influentes e sua determinação, ou melhor dizendo, sua estimação a partir dos dados deve ser feita com cautela.

(a) Pixel (Baseado na célula)

(b) Linear por trechos (baseado no nó)

(c) Regionalizado

(d) Polinomial / Spline

(e) Correlação

Figura II-3: Diferentes formas de parametrização utilizadas na modelagem, ver descrição no texto (modificado de McLaughlin & Townley 1996).

II.2 A estimação da incerteza no modelamento hidrogeológico

A definição do problema inverso e sua solução visam obter o melhor conhecimento possível dos parâmetros a partir dos dados disponíveis. A utilidade da modelagem está nas respostas que estes parâmetros produzirão dentro do modelo a perguntas tais como: Qual o trajeto esperado de uma partícula de água saindo de um ponto x_1 ?; Qual o tempo de trânsito desta mesma partícula para percorrer 5 quilômetros?

Dada a conscientização de todas as fontes potenciais de erro inerentes aos modelos utilizados em hidrogeologia, a incerteza no resultado final do modelo é uma preocupação crescente do modelador.

Idealmente a incerteza da modelagem considera todos os resultados possíveis de um modelo caracterizando-o através de uma função densidade de probabilidade (fdp) conjunta (Peck et al. 1988). Quer dizer, depois da definição das equações e da parametrização, dada uma escolha dos parâmetros calcula-se através desta fdp conjunta a probabilidade de obter-se uma determinada solução do modelo. Isto entretanto demanda o conhecimento da fdp de cada parâmetro e da função de covariância global entre todos os parâmetros.

A obtenção desta fdp conjunta pode ser feita a priori através de suposições estatísticas (fortes) da relação entre os parâmetros ou a posteriori através da análise de um conjunto de soluções. Considerando o estabelecimento a priori da fdp pode-se facilmente restringir demais o modelo sobre uma idéia pré concebida do meio físico, provavelmente mais ligada a uma facilidade de cálculo do que a uma real descrição do meio. Já no caso do estabelecimento a posteriori da fdp, é necessário trabalhar-se, ou com modelos utilizando bem poucos parâmetros -que não mimetizam a complexidade de muitos meios naturais -, ou com um número de soluções equiprováveis superior ao número de parâmetros, o que pode representar um tempo de cálculo muito elevado.

No caso, mais realista, em que não se dispõe da informação necessária para estabelecer a fdp conjunta, nem a priori nem a posteriori, uma das seguintes alternativas (apresentadas em ordem decrescente de complexidade) é normalmente utilizada :

- Quando se dispõe de apenas uma solução do modelo obtida quer por ajuste manual quer por algum método inverso, calcula-se o coeficiente de sensibilidade $S_{ij} = \delta s_i / \delta p_j$ entre uma solução s_i e um parâmetro p_j . Por exemplo calcula-se a variação entre a carga h_i numa malha i para a variação δp_j de um parâmetro numa malha j , ou seja

$S_{ij} = \delta h_i / \delta p_j \approx (\delta h_i / h_i) / (\delta p_j / p_j)$. Assumindo-se então que a variação do parâmetro j é suficientemente pequena para considerar que S_{ij} é constante (ou que o modelo é aproximadamente linear neste ponto do hiperespaço de parâmetros), tem-se que a incerteza da carga h_i devido a incerteza de p_j é $h_i \pm S_{ij} \delta p_j$.

Esta aproximação da incerteza só é válida no entorno da solução considerada e não integra a incerteza devida a outras soluções potenciais, obtidas a partir de um conjunto de parâmetros diferentes.

- Se existir a quantidade suficiente de informação (dada ou por um certo número de soluções, ou por certas suposições estatísticas como a normalidade), calcula-se somente os dois primeiros momentos da fdp, ou seja, a média e a covariância (ou a variância) do resultado desejado do modelo. Por exemplo, a carga numa malha i será definida por seu valor médio $H_i = E(h_i)^{\dagger}$ e por sua variância $\text{Var } h_i = E[(h_i - H_i)^2]$.

A incerteza neste caso é caracterizada somente por uma descrição estatística resumida, relativa à variação das soluções, não descrevendo a relação desta com a incerteza dos parâmetros.

- Fixa-se o valor de todas as classes de parâmetros exceto uma. Variam-se então os parâmetros dentro daquela classe a fim de calcular independentemente a fdp monovariada de algum resultado particular do modelo. Por exemplo, dada a condição de borda e a recarga num aquífero confinado, calcula-se a probabilidade que a carga média num determinado ponto seja H_i , ou calcula-se a fdp do tempo de trânsito para cumprir uma certa distância a partir de um determinado ponto variando-se somente o campo de condutividade.

A incerteza neste caso é caracterizada por uma descrição estatística mais completa relativa à variação das soluções, mas não descrevendo a relação desta com a incerteza dos parâmetros e ignorando explicitamente a inter-relação entre classes de parâmetros diferentes.

No caso dos modelos utilizados em hidrogeologia, a estimação da incerteza na determinação dos parâmetros tem um interesse próprio devido não só a interpretação física destes, mas também a repartição normalmente heterogênea dos dados disponíveis. Nos parágrafos seguintes apresentam-se sucintamente algumas soluções normalmente adotadas

[†] $E[-]$ é a esperança matemática.

para caracterizar esta incerteza.

II.2.1 Caracterização da incerteza dos parâmetros

A princípio a caracterização conjunta da incerteza de todos os parâmetros de um modelo hidrogeológico implicaria o conhecimento de toda a inter-relação entre diferentes tipos de parâmetros. A fim de simplificar este cálculo e devido a escassez de informação normalmente disponível, é comum considerar-se somente a incerteza relativa ao parâmetro mais influente para o fluxo, a transmissividade (T). Além disso comumente trabalha-se com $Y = \log T$ a fim de aproximar a distribuição dos parâmetros de uma distribuição normal (Carrera & Neuman 1986b).

Desconsiderando-se portanto as incertezas de outros parâmetros que resultariam da solução de um inverso- como por exemplo condições de borda, armazenamento e recarga - a descrição das propriedades estocásticas dos parâmetros pode ser feita através de uma das seguintes possibilidades:

- Escolhe-se uma fdp única que definirá a partir de seus coeficientes uma fdp multinormal. Estes coeficientes poderiam ser no caso da transmissividade, sua média $E(Y_i)$ e uma função de covariância U .

- Supõe-se estacionaridade, ou seja, diz-se que a média $E(Y_i)$, a variância e a covariância $C(Y_i, Y_j) = E[(Y_i - E(Y_i))(Y_j - E(Y_j))]$ são invariantes por translação. Com isso assume-se um fdp monovariada para Y , por exemplo uma distribuição normal, que é então definida somente a partir da esperança e das funções de covariância e variância.

- Supõe-se estacionaridade de segunda ordem dos incrementos, ou seja $E(Y_i - Y_j)$ e $\text{Var}(Y_i - Y_j)$ são assumidos como invariantes por translação, o que é conhecido como hipótese intrínseca e largamente utilizada em hidrogeologia. Geralmente se assume também que $E(Y_i - Y_j) = 0$, ou seja $E(Y_i) = E(Y_j) = m_Y$ (a esperança é estacionária). Calcula-se então o variograma $\gamma(h_{ij}) = \frac{1}{2} E[(Y_i - Y_j)^2]$ onde h_{ij} é a distância entre os pontos i e j .

Nestes casos os dados são utilizados para a inferência de uma descrição estocástica única do parâmetro para todo o domínio.

A partir desta descrição é possível se estabelecer estimadores - i.e. krigagem ou métodos de simulação sequencial - que permitem não só interpolar ou simular parâmetros (ver detalhes da diferença no anexo B) em pontos aonde não se disponha de dados, mas também obter uma descrição da incerteza neste ponto.

O cálculo do valor do parâmetro Y em todo ponto do espaço a partir da caracterização

preliminar dos parâmetros estatísticos, considerando também a distribuição espacial dos dados disponíveis pode ser feito pelo menos de duas maneiras. Através da krigagem (Matheron 1970, ver também Marsily 1986), ou através de métodos de simulação condicional (como os descrito no anexo B). Em ambos os casos é possível também um cálculo da incerteza da estimação de Y_i em cada malha i do modelo.

É interessante notar que neste caso a incerteza não será mais simplesmente a variância de uma medida (menor mais próxima dos dados), mas também uma estimativa da dificuldade de se interpolar um valor naquele ponto.

II.2.2 Caracterização da incerteza do resultado do modelamento

A caracterização da incerteza final do modelamento pode ser feita considerando-se diferentes perspectivas, descritas nos parágrafos a seguir resumidamente e mais detalhadamente nos itens correspondentes que se seguem.

- Usando métodos de Monte Carlo buscando caracterizar-se todo o espaço de parâmetros que satisfaz os dados para o modelo adotado (i.e. A_{ad} na figura II-1). A fdp das soluções produzidas definirá qual a probabilidade de obter uma dada solução, caracterizando de uma certa forma a incerteza.
- Através da análise da sensibilidade, estudando a variação dos parâmetros no entorno de uma solução ótima. Define-se assim quais parâmetros são os mais influentes na determinação da solução, mas este método só é valido no entorno da solução ótima e sob suposição de linearidade da solução nesta região.
- Definindo as equações do modelo de forma estocástica, possibilitando com isso a definição direta da fdp da solução a partir da fdp dos parâmetros. A definição da fdp é entretanto sujeita a restrições da validade da linearização necessária as equações do modelo.
- Procurando validar o modelo segundo testes de hipóteses, considerando inclusive os erros do modelo, como será descrito nos métodos de teste de hipóteses. Pode-se assim definir a incerteza sob um amplo espectro, considerando inclusive erros do modelo adotado, mas isto exige muitas hipóteses simplificadoras na definição dos testes estatísticos.

II.2.2.1 Métodos de Monte Carlo

Dentro destes método agregam-se muitas metodologias que tem como característica comum a busca de soluções através da varredura aleatória do espaço de parâmetros. Estes métodos geram muitas soluções possíveis permitindo assim acessar a fdp dos resultados de

um modelo. Apesar de muito custoso em tempo de cálculo é relativamente simples, podendo ser utilizado quando muitas classes de parâmetros são incertas.

O método consiste na suposição (seria melhor poder dizer no conhecimento) da fdp de cada um dos N parâmetros do modelo considerados, estes podem pertencer a diferentes classes (i.e. transmissividade, porosidade, recarga). Toma-se então um valor da fdp de cada parâmetro aleatoriamente. Na grande maioria das aplicações não se considera a correlação entre eles §, a partir desta tiragem aleatória de parâmetros faz-se o cálculo do problema direto (determinação do fluxo, campo de velocidades, etc.) e obtém-se então, a partir de um grande número destas simulações, a fdp do resultado do modelo dada a escolha inicial da fdp dos parâmetros (i.e. uniforme ou gaussiana).

O número necessário de simulações para se obter a estabilidade da estimativa da fdp é relativo ao caso analisado e ao erro considerado aceitável na estimativa da fdp, mas pode-se considerar que por uma regra empírica a caracterização deveria contar com, pelo menos, cem realizações por parâmetro. Isto nos casos de modelos hidrogeológicos complexos com milhares de malhas de cálculo, pode ser proibitivamente excessivo.

De qualquer maneira obtém-se mais rapidamente uma estimativa da media da fdp que sua variância, e desta em relação aos momentos de ordem mais elevados. É interessante notar que segundo Robinson & Hodgkinson (1986) (in Peck 1988), pode existir uma falsa estabilidade da estimativa da fdp antes de se atingir um certo número mínimo de simulações. Métodos como o 'Latim Hypercube Sampling' (McWilliams 1987) podem ser utilizados para uma otimização dos resultados em relação a quantidade de cálculos feitos.

II.2.2.2 Análise de Sensibilidade

A sensibilidade é definida como $S_i = \delta R / \delta p_i$, onde R é o resultado de um modelo. Ela está ligada à incerteza na solução de um modelo em relação ao parâmetro p_i através do produto $S_i * \Delta p_i$, onde Δp_i indica os limites da variação do parâmetro i.

No caso de existir mais de um parâmetro incerto é necessário se adotar um conjunto de valores (um valor para cada parâmetro) no entorno do qual se fará análise da sensibilidade, mas a análise só será válida no entorno deste conjunto. Caso se deseje considerar a correlação entre os parâmetros a análise se tornará rapidamente complexa, indicando-se então o uso de técnicas de Monte Carlo.

Diversas maneiras podem ser utilizadas para seu cálculo :

A maneira mais simples consiste em variar-se um parâmetro p_i de δp_i e se analisar a

variação δR , assim $S_i = \delta R / \delta p_i$. Esta solução entretanto só é possível quando o número de parâmetros considerados é tal que S seja sensível a variação de cada valor de p . Nos casos em que a parametrização definiu um grande número de parâmetros, a sensibilidade à variação de cada parâmetro individualmente pode ser praticamente nula.

Outra maneira é calcular-se então a sensibilidade para os parâmetros considerados os mais prováveis, obtidos por exemplo por métodos inversos que buscam o mínimo da função-objetivo. Separa-se então os parâmetros em duas classes, uma com sensibilidade positiva e outra com sensibilidade negativa. Calcula-se a sensibilidade tomando-se o maior valor aceitável da classe positiva ao mesmo tempo que o menor valor aceitável da classe negativa, e depois recalcula-se a sensibilidade tomando o inverso de cada classe. Obtém-se assim três estimativas: a mais provável através do conjunto mais provável de parâmetros, e dois casos extremos obtidos a partir das duas classes de parâmetros com sensibilidade de mesmo sinal. No caso de não se dispor de informação da fdp para se utilizar Monte Carlo, este método é uma boa alternativa.

O cálculo da sensibilidade pode ser excessivamente custoso em tempo de cálculo. Por exemplo, no caso de um modelo com p parâmetros, seria necessário, no método clássico, recalcula-se o modelo $p+1$ vezes para se obter a sensibilidade S aos p parâmetros. Por isso algumas maneiras mais econômicas de calculá-lo podem ser utilizadas:

- Chavent (1971) desenvolveu o método conhecido como "Estado Adjunto". Ele consiste de uma transformação matemática das equações originais do modelo que caracterizam então um novo problema, chamado adjunto. No caso de um modelo transitório por exemplo o modelo adjunto consiste a resolver as equações no sentido inverso do tempo e com a adição de um termo fonte a mais. Depois de se solucionar estes dois conjuntos de equações, referentes ao modelo normal e ao modelo adjunto, bastará um pouco de álgebra simples para se obter as sensibilidades a todos os parâmetros. Com isso passa-se do cálculo de $p+1$ soluções do modelo a 2 soluções mais alguma álgebra simples.

- Outro método utilizado neste sentido chama-se análise da "Primeira ordem e segundo momento" (Townley & Wilson, 1985). Ele consiste na aproximação de primeira ordem de Taylor ** da carga hidráulica obtido como $h(p + \Delta p) \cong h(p) + J \Delta p$, onde p representa o vetor do modelo médio dos parâmetros, $h(p)$ representa o vetor médio das predições (i.e. carga ou concentração) do modelo em função de p , Δp uma perturbação do vetor p e J representa o

[§]Iman et al.1980, propõe uma alternativa para considerar correlações

** Uma expansão em série de Taylor é descrita como: $f(\bar{p} + \Delta p) = f(\bar{p}) + (\delta f / \delta p) \Delta p + \dots$ (termos de ordem superior)

Jacobiano ou a matriz de sensibilidade local calculada em p . O segundo momento é dado por $C(h) \equiv J C(p) J^T$, onde J^T é a transposta de J . Este método relaciona então a covariância da carga hidráulica à covariância da estimativa dos parâmetros e à sensibilidade da carga com relação aos parâmetros adotados no modelo.

II.2.2.3 Métodos baseados na solução de equações parciais estocásticas

Diferentemente dos modelos clássicos, onde os parâmetros e as variáveis (representando a solução das equações) utilizados nas equações que definem o modelo são determinísticos, estes métodos definem as variáveis e os parâmetros como um valor médio e uma pequena flutuação - f ou h - no entorno deste, ou seja:

$$Y = F + f \quad \text{com } F = E[Y] \text{ e } E[f] = 0 \quad \text{sendo } Y = \ln T \quad (\text{II-3})$$

$$\phi = H + h \quad \text{com } H = E[\phi] \text{ e } E[h] = 0 \quad \text{sendo } \phi \text{ a carga hidráulica} \quad (\text{II-4}).$$

Introduz-se II-3 e II-4 na equação II-1, e desenvolve-se em potência de f e h para um meio infinito sem termos fonte, onde supõe-se que o fluxo é globalmente paralelo (i.e. o gradiente hidráulico médio não varia) e que a variância de Y é pequena (ela é válida aproximadamente até 1). Obtém-se, depois de descartados os termos superiores em f e h , duas equações, uma determinista que dá a esperança H de ϕ :

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} = 0, \quad (\text{II-5})$$

e uma estocástica que fornece uma relação entre as flutuações:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial y} \frac{\partial F}{\partial y} \quad (\text{II-6})$$

Pode-se então deduzir a partir da equação II-6 a relação entre os momentos de f e h . Assim a partir da função de covariância de f pode-se deduzir a função de covariância de h e a covariância cruzada entre f e h . Soluções analíticas foram propostas por Dagan (1986) e soluções por métodos espectrais por Gelhar (1986), Gutjahr et al. (1994).

Dentro das aproximações salientadas anteriormente na linearização da equação do fluxo, as expressões desenvolvidas podem então ser utilizadas para estimar diretamente a incerteza das variáveis, representada por sua covariância, dada a incerteza dos parâmetros.

II.2.2.4 Métodos de teste de hipóteses

Alguns autores (Ababou et al. 1992, Luis & McLaughlin 1992) propuseram maneiras de testar a validade dos modelos, considerando desde a validade das equações escolhidas até a parametrização adotada.

Uma das maneiras de se fazer uma descrição estatística dos erros considera a incerteza do modelamento segundo erros em três fontes distintas, erros do modelo, de medida, e a descrição da heterogeneidade espacial. Fazendo uma descrição estatística destes erros a validação dos modelos pode ser vista como um teste de hipóteses, cuja hipótese nula é de que o erro do modelo é zero. Para tanto deve-se supor que o residual médio é zero, e que os erros de medida são não correlacionados com a heterogeneidade espacial. Desta forma pode-se testar tanto se existe uma tendência sistemática das soluções, quanto se o ajuste geral é satisfatório e mesmo se existem estruturas espaciais sutis.

Esta descrição entretanto assume um conhecimento perfeito da média, variância e escala de correlação dos parâmetros. Além disso dado as características dos parâmetros utilizados no modelamento em hidrogeologia, fica muito difícil produzir uma resposta inequívoca do teste (Luis & McLaughlin 1992).

II.2.3 Caracterização da influência dos parâmetros através da incerteza da solução

Os métodos descritos acima, são comumente utilizados para se caracterizar a incerteza a partir de uma solução ótima e da análise da sensibilidade sobre esta solução (Carrera & Neuman 1986c, Kauffman 1990), ou a dos métodos de Monte Carlo que não consideram a covariância entre os parâmetros (Shrestha & Loganathan, 1994; Vasco et al. 1993).

Nos casos onde a geologia é mais complexa, os métodos de inversão geoestatística permitem através de realizações equiprováveis acessar de forma mais realista a incerteza, tanto em relação aos dados disponíveis, quanto em relação à posição e à quantidade dos dados. Estes métodos permitem a descrição de estruturas relativamente detalhadas através do variograma ajustado inicialmente aos dados. Esta estruturação inicial é então modificada para permitir um melhor ajuste do modelo aos dados.

Como esta modificação da estruturação é feita segundo critérios internos a cada método, não se sabe 'a priori' se o conjunto de realizações equiprováveis contém características particulares da estruturação dos parâmetros geradas pela informação agregada através da solução do problema inverso. Por isso uma análise da incerteza dos parâmetros através deste tipo de solução inversa pode revelar zonas onde a incerteza é maior, gerando uma nova informação sobre o meio modelado.

Este tipo de análise da incerteza, acessada através de gerações equiprováveis dentro das incertezas das medidas e do modelo, vem sendo utilizada em estudos mais complexos, através de um conjunto de mapas de parâmetros (via de regra a condutividade) ou através dos traços de percurso possíveis em todas as realizações a partir de um dado ponto ou a partir do tempo

médio de trânsito de todas as realizações a partir de alguns pontos (Zimmerman et al. 1998 ; Wen et al. 1996; LaVenue et al. 1995).

Nos próximos capítulos serão desenvolvidos a base teórica e aplicações da análise ACPP e Q-fatorial como ferramentas para a detecção semi-quantitativa da zona mais incerta. Serão desenvolvidas também outras aplicações possíveis, decorrentes da ordenação da variabilidade obtida através da decomposição ACPP.

III MÉTODOS E MATERIAIS

III.1 Métodos utilizados na caracterização e comparação da incerteza

III.1.1 Análise em Componentes Principais de Processo (ACPP)

A ACPP busca uma composição linear dos parâmetros, definindo novas combinações de parâmetros, chamados autovetores. Esta decomposição tem como característica:

- Ortogonalidade, quer dizer cada autovetores é independente dos demais.
- Os autovetores são ordenados de forma que indicam direções de variância decrescentes, quer dizer o primeiro autovalor indicará a maior direção de variação dos parâmetros originais.
- Supõe-se que os parâmetros são centralizados (i.e. a média removida) e tem distribuição gaussiana.
- Não necessita de suposição de estacionaridade (i.e. invariância espacial da variância dos parâmetros) .

Tanto a ACPP quanto a análise Q-fatorial (§ III.1.3) partem da matriz X do conjunto de soluções equiprováveis proposto por um método inverso definida como:

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1P} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & \cdots & x_{NP} \end{bmatrix} \quad (\text{III-1})$$

onde P é o número de parâmetros do modelo em estudo e N o número de soluções equiprováveis que será analisado em conjunto; ou seja X_{ij} contém em cada linha i uma simulação e em cada coluna j todos os valores que um parâmetro j assumiu nas diversas simulações.

Partindo-se de uma descrição estocástica do conjunto de soluções equiprováveis será demonstrado no parágrafo seguinte que se pode obter uma representação resumida deste por ACPP que nos permitirá analisar grandes direções de incerteza, distribuição comparativa de energia e geração de novas simulações rapidamente.

A passagem do espaço de parâmetros para o espaço bidimensional onde é definida a função aleatória necessária para uma descrição estocástica dos parâmetros do modelo se faz naturalmente, uma vez que nos dados aqui analisados existe uma correspondência unívoca

entre o parâmetro e a posição espacial onde este é definido.

III.1.1.1 Metodologia

Considerando uma função aleatória $X(\xi, \underline{x})$, onde ξ é o índice da realização (nos colocamos aqui numa situação de multi-realizações) e $\underline{x}$ é a posição no espaço Euclidiano (a uma ou várias dimensões), é interessante procurar uma decomposição que separe uma parte de característica estrutural de espaço e outra parte puramente aleatória. Por isso procura-se decompor X como:

$$X(\xi, \underline{x}) = \sum_{k=1}^{\infty} Z_k(\xi) F_k(\underline{x}) \quad (\text{III-2})$$

onde : $F_k(\underline{x})$ são funções de forma (ou autovetores) que dependem somente da localização $\underline{x}$ e $Z_k(\xi)$ são variáveis aleatórias da realização ξ .

Ambos, o termo determinista $F_k(\underline{x})$, e a variável aleatória $Z_k(\xi)$, são determinadas para que haja o menor erro quadrático entre $X(\xi, \underline{x})$ e $X_k(\xi, \underline{x})$, a série truncada aos primeiros K termos, sucessivamente para $K=1, K=2, \dots, K=\infty$. Ou seja:

$$E\left[\int_D \{X(\xi, \underline{x}) - X_k(\xi, \underline{x})\}^2 d\underline{x}\right] \quad \min \quad (\text{III-3})$$

onde D é o espaço Euclidiano onde se definem $X(\cdot)$ e $X_k(\cdot)$

Uma condição de normalização dos $F_k(\underline{x})$ é adicionada para assegurar a unicidade da solução

$$\int_D F_k^2(\underline{x}).d\underline{x} = 1. \quad (\text{III-4})$$

Pode-se mostrar (Braud, 1990) que:

Os $F_k(\underline{x})$ são funções ortonormais definidas em D e são derivadas dos autovalores e autovetores obtidos do Kernel de covariância $C(\underline{x}, \underline{x}') = E[X(\xi, \underline{x}) \cdot X(\xi, \underline{x}')]$ como:

$$\int_D C(\underline{x}, \underline{x}').F_k(\underline{x}').d\underline{x}' = \lambda_k F_k(\underline{x}) \quad (\text{III-5})$$

Os $Z_k(\xi)$ são variáveis aleatórias, chamadas componentes principais, descorrelacionadas, de variância λ_k decrescente.

$$E[Z_k(\xi)Z_m(\xi)] = \lambda_k \delta_{km}^* \quad (\text{III-6})$$

Elas são obtidas pela projeção de $X(\xi, \underline{x})$ sobre o K -ésimo autovetor.

$$Z_k(\xi) = \int_D X(\xi, \underline{x}).F_k(\underline{x}).d\underline{x} \quad (\text{III-7})$$

Então $C(\underline{x}, \underline{x}')$ pode ser expandido sobre a base dos autovetores como :

* $\delta_{km} = 0$ para $k \neq m$, e $\delta_{km} = 1$ para $k=m$

$$C(\underline{x}, \underline{x}') = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k F_k(\underline{x}) F_k(\underline{x}') \quad (\text{III-8})$$

Ou no caso de reterem-se somente os K maiores autovalores teremos :

$$C_k(\underline{x}, \underline{x}') = \sum_{k=1}^K \lambda_k F_k(\underline{x}) F_k(\underline{x}') \quad (\text{III-9})$$

A partir deste modelo truncado existe uma analogia com a Krigagem feita sobre dados com erro. Neste caso o truncamento da equação III-9 pode representar uma filtragem destes erros (Obled & Braud 1989).

No caso dos autovalores e autovetores serem ordenados decrescentemente segundo os autovalores[†] λ_k , e retendo-se apenas os K primeiros autovetores, a ACP garante que tem-se a representação da maior variabilidade possível neste espaço K-dimensional definido pelos autovetores.

Como X não é conhecido em todos os pontos de D, mas é espacialmente discretizado, ou seja, conhecido em P pontos de medidas ($\underline{x}$), não pode-se calcular mais do que P autovetores. Para aproximar as funções contínuas descritas acima à realidade discreta dos dados disponíveis, é necessário então interpolar as funções sobre uma base discreta.

Para isto escolhem-se as funções-base ($e_i(\underline{x})$, $i = 1, \dots, P$) tendo a estrutura de espaço vetorial sobre D, onde $X(\xi, \underline{x})$ é interpolado. Sendo $\underline{x}$ os pontos de medida, pode-se escolher os $e_i(\underline{x})$ de forma canônica, quer dizer tal que $e_i(\underline{x}_j) = \delta_{ij}$. Assim $X^*(\xi, \underline{x})$, o processo interpolado, será dado por :

$$X^*(\xi, \underline{x}) = \sum_{i=1}^P X(\xi, \underline{x}_i) e_i(\underline{x}) \quad (\text{III-10})$$

onde $X(\xi, \underline{x}_i)$ são os valores de X medidos nas P estações.

Tomando-se $X(\xi, \underline{x})$ como já centrado, a função de covariância $C(\underline{x}, \underline{x}')$ do processo interpolado $X^*(\xi, \underline{x})$ é dada pela dupla interpolação:

$$C^*(\underline{x}, \underline{x}') = \sum_{i=1}^P \sum_{j=1}^P C(\underline{x}_i, \underline{x}_j) e_i(\underline{x}) e_j(\underline{x}') \quad (\text{III-11})$$

Onde $C(\underline{x}, \underline{x}')$ é a covariância verdadeira do processo entre dois pontos de D. Na prática as covariâncias são estimadas sobre uma N amostragem, o que introduzirá erros se a amostragem não for estatisticamente representativa – vide §III.1.2.c -, mas aqui estamos discutindo somente a discretização espacial do processo.

[†] O que é o procedimento padrão nas análises ACP e ACP.

Pode-se mostrar (Braud 1990) que $C^*(\underline{x}, \underline{x}')$, função de covariância do processo interpolado é definida positiva, quer dizer um modelo de covariância admissível (Matheron 1970).

Os autovetores $F_k(\underline{x})$, determinados como a solução da equação III-5, são aproximados sobre a base dos $e_i(\underline{x})$ por intermédio dos coeficientes f_{ik} , $i = 1..P$, a determinar (f_{ik} representa o valor da função $F_k(\underline{x})$ no ponto $\underline{x}_i$).

$$F_k^*(\underline{x}) = \sum_{i=1}^P f_{ik} e_i(\underline{x}) \quad (\text{III-12})$$

substituindo-se então III-11 e III-12 na equação III-5 tem-se :

$$\int_D \left\{ \sum_{i=1}^P \sum_{j=1}^P C(\underline{x}_i, \underline{x}_j) e_i(\underline{x}) e_j(\underline{x}') \right\} \left\{ \sum_{m=1}^P f_{mk} e_m(\underline{x}') \right\} d\underline{x}' = \lambda_k \sum_{i=1}^P f_{ik} e_i(\underline{x}) \quad (\text{III-13})$$

como os $e_i(\underline{x})$ formam uma base do hiperespaço, vê-se, pela equação abaixo, que o termo entre chaves deve ser zero.

$$\sum_{i=1}^P \left\{ \sum_{j=1}^P \sum_{m=1}^P C(\underline{x}_i, \underline{x}_j) \int_D e_j(\underline{x}') e_m(\underline{x}') d\underline{x}' f_{mk} - \lambda_k f_{ik} \right\} e_i(\underline{x}) = 0 \quad (\text{III-14})$$

impondo então que $E_{jm} = \int_D e_j(\underline{x}') \cdot e_m(\underline{x}') \cdot d\underline{x}'$ temos de III-14 que :

$$\sum_{j=1}^P \sum_{m=1}^P C(\underline{x}_i, \underline{x}_j) \cdot E_{jm} \cdot f_{mk} = \lambda_k \cdot f_{ik}, \quad i=1..P \quad (\text{III-15})$$

O que escrito sob forma matricial nos leva a seguinte equação:

$$C \cdot E \cdot F = F \cdot \Lambda \quad (\text{III-16})$$

onde: $C = [C(\underline{x}_i, \underline{x}_j)]$, $i = 1..P$, $j = 1..P \rightarrow$ Matriz quadrada de covariância entre 2 pontos de medida.

$E = [E_{jm}]$, $j = 1..P$, $m = 1..P \rightarrow$ Matriz simétrica de produtos escalares construídos a partir de $e_i(\underline{x})$.

$F = [f_{mk}]$, $m = 1..P$, $k = 1..P \rightarrow$ Matriz dos autovetores nos pontos de medida.

$\Lambda \rightarrow$ Matriz diagonal dos autovalores λ_k , $k = 1..P$.

Esquemáticamente temos portanto:

O que indica que a ACPP difere numericamente da ACP clássica pela introdução da matriz **E** que considera explicitamente o domínio de estudo. Esta metodologia daria portanto resultados iguais aos da análise de componentes principais clássicas quando esta última é aplicada sob dados não normalizados, o que só é possível quando todos os parâmetros variam dentro da mesma ordem de grandeza, e quando a representatividade espacial dos dados é homogênea no domínio- e entre métodos no caso de se desejar compará-los -.

Uma vez calculada **F**, caso se esteja interessado no cálculo das componentes principais, utilizando as aproximações III-10 e III-12 em III-7 obtém-se a seguinte equação matricial:

$$Z = X \cdot E \cdot F \quad (III-17)$$

com : $X = [X(\xi_i, \underline{x}_j)]$, $i = 1 \dots N$, $j = 1 \dots P \rightarrow$ Matriz das N realizações do processo $X(\xi, \underline{x})$

$Z = [Z_k(\xi_i)]$, $i = 1 \dots N$, $k = 1 \dots P \rightarrow$ Matriz das componentes principais

III.1.1.1.1 Cálculo numérico adotado

A matriz de covariância empírica é calculada a partir de **X** centrado como :

$$C = \frac{1}{N} X^t \cdot X \quad (III-18)$$

Para resolver III-16 os algoritmos são mais eficientes quando **C.E** é simétrico, o que não é o caso mesmo que **C** e **E** o sejam separadamente. Sabendo então que **E** é simétrica, ela pode se decompor em $E = Q \cdot Q^t$, utilizando-se de uma decomposição de Cholesky de **E** obtendo-se então **Q** como matriz triangular inferior. Multiplicando-se então III-16 a esquerda por Q^t teremos:

$$Q^t \cdot C \cdot Q \cdot Q^t \cdot F = Q^t \cdot F \cdot \Lambda \quad (III-19)$$

e impondo $V = Q^t \cdot F$ tem-se:

$$(Q^t \cdot C \cdot Q) \cdot V = V \cdot \Lambda \quad (III-20)$$

agora o termo $(Q^t \cdot C \cdot Q)$ é simétrico e pode-se calcular seus autovetores **V** através de algoritmos clássicos (Reyment & Jöreskog 1993). Para retornar aos autovetores **F** toma-se

$$F = (Q^t)^{-1} \quad (III-21)$$

Como Q^t é triangular superior sua inversão é rápida.

III.1.1.1.2 Escolha da função-base da interpolação ($e_i(x)$)

A principal diferença entre a ACP e a ACPP consiste na introdução da matriz E que contém o produto escalar das funções-base. A duas dimensões, dois tipos de função podem ser utilizadas (vide figura III-1):

- i) Funções constantes por pedaço: Neste caso $e_i(x)$ vale 1 no polígono contendo os pontos mais próximos de x_i e zero no resto do domínio (figura III-1.a). Com isso E é diagonal e os termos diagonais são iguais à superfície do polígono.
- ii) Funções lineares por face: Neste caso $e_i(x)$ vale 1 no ponto x_i e zero nos demais pontos, com decréscimo linear nas faces ligando os pontos mais próximos (figura III-1.b). Aqui é necessário estabelecer uma triangularização da grade de dados e o cálculo de E se fará por elementos finitos (detalhes em Obled & Creutin 1986).

Figura III-1: Funções de base $e_i(x)$. a) Linear por pedaço b) Linear por face.

Como os dados de que dispomos foram produzidos sobre uma grade regular só utilizou-se, nas análises aqui feitas, da base definida pelas funções constantes por pedaço, que neste caso se utiliza da grade já definida pelos dados.

A utilização da base definida por funções lineares por faceta poderia, eventualmente, ser uma alternativa à interpolação dos autovetores como será discutido no § III.1.1.1.d. Esta alternativa não chegou a ser testada aqui, uma vez que muito mais trabalhosa a instalar do que as opções descritas no referido parágrafo, que portanto, tem mais chances de ser efetivamente utilizada na prática. Além do mais, com a variação observada nos autovetores e a regularidade dos dados as diversas possibilidades de interpolação não devem variar muito.

III.1.1.1.3 Amostragem estatística da Covariância empírica

A precisão da ACPP foi estudada por Braud (1990) através de uma comparação entre

soluções analíticas e sua aproximação numérica. O resultado mostrou que a discretização espacial tem pequena influência quando a densidade da grade (i.e. o número de pontos de observação P) é grande o suficiente para amostrar o alcance de correlação, e quando a grade é regular (o caso neste estudo), ao invés de aleatória (que seria o caso se a grade de dados fosse por exemplo triangular).

Entretanto a amostragem estatística, quer dizer o número finito de realizações N , usado para determinar a função de covariância empírica C pode produzir perdas de precisão na definição de cada autovetor se a amostragem for muito pequena. Este ponto voltará a ser desenvolvido no §IV.1.1 quando será discutida a reamostragem.

III.1.1.1.4 Adensamento da grade de resimulação

Na medida em que este trabalho se utiliza de uma função de covariância empírica calculada sobre o conjunto de simulações equiprováveis, e que se reamostrou os dados inicialmente disponíveis para reduzir os problemas de amostragem estatística de C , discute-se aqui a possibilidade de retornar a densidade original da grade dos dados. Para isto duas possibilidades foram testadas:

1- Interpolar os autovetores (por exemplo por Krigagem) sobre a grade desejada, e fazer a resimulação sobre esta base interpolada, como descrito nos testes sobre funções de covariância teórica por Kitterrod & Gottschalk (1997).

A princípio esta possibilidade pode parecer extremamente trabalhosa uma vez que poderia necessitar o cálculo de K (K = o número de autovetores retido) variogramas e suas krigagens associadas. Dada entretanto a homogeneidade do alcance e da variância dos k variogramas dos autovetores (vide figura III-2), pode-se obter uma boa interpolação calculando somente um variograma médio sobre a nuvem de todos os autovetores, ou alternativamente um para o primeiro autovetor e um médio para os demais.

Na prática devido a quase destruturação observada nos autovetores, um variograma linear permite um fácil ajuste. Se este for utilizado numa Krigagem ordinária considerando somente os 4 pontos mais próximos, a interpolação será feita de maneira rápida e eficiente. Isto pode ser compreendido quando se reflete na krigagem como uma ponderação de um valor através de valores conhecidos ao redor (vide anexo A), neste caso vê-se que como não há mudança de posicionamento entre um autovetor e os demais e como o variograma é o mesmo, não há necessidade de recalcular-se os fatores de ponderação a cada autovetor, basta guardar o primeiro calculado e simplesmente multiplicar cada novo autovetor pelos mesmos ponderadores.

Figura III-2: Variograma para os 10 primeiros autovetores. "AV" indica autovetor

Esta interpolação, feita considerando somente a interpolação a partir do ponto mais próximo, é muito semelhante a que se obteria utilizando-se diretamente uma interpolação através de uma base linear por face (vide figura III-1b). Esta possibilidade entretanto não foi utilizada pois esta escolha de base é mais adaptada a malhagens irregulares, além disso preferiu-se optar por opções de cálculo que fossem de mais fácil implantação.

2- Utilizar-se da propriedade de independência espacial dos autovetores, calculando varias decomposições ACPP (sobre diferentes pontos base) com a amostragem feita de maneira complementar, ou seja a união delas restituiria a grade original.

Neste caso necessita-se de alguns cuidados na escolha do termo aleatório $A_k(\xi)$ entre as diversas bases a fim de dar uma continuidade espacial à resimulação. Uma solução possível é fazer a escolha de ξ (vide § III.1.2.1) para a primeira base, e para as demais impor esta primeira escolha aleatória, de forma que a composição entre os diversos autovetores se faça com as mesmas proporções para as diferentes bases dadas pelos autovetores. Nos testes numéricos entretanto, esta possibilidade de recompor a grade original apresentou efeitos espúrios, provavelmente devido ao intercâmbio dos sinais positivos e negativos na definição dos autovetores, sendo por isso descartada.

III.1.2 Realização de novas simulações - resimulações

Dado o alto custo das simulações geoestatísticas, onde alguns métodos calculam o gradiente da função objetivo milhares de vezes por simulação, pode ser interessante utilizar a informação de um primeiro conjunto de realizações equiprováveis feitas através de inversão geoestatística para gerar novas simulações. Chama-se aqui de resimulação a uma simulação feita a partir de uma decomposição ACPP sobre um primeiro conjunto de simulações equiprováveis. Ela se faz dentro das mesmas características do conjunto inicial, uma vez que

re-amostra pontos no espaço de parâmetros dentro do hiperelipsóide de espalhamento das soluções. É um método extremamente rápido uma vez calculados os autovalores e autovetores do conjunto inicial.

Além disso a recomposição ACPP não necessita de suposições de estacionaridade de ordem dois, como os métodos clássicos de simulação. Isto é detalhado em Obled & Braud (1989) que demonstram a existência de uma analogia formal entre a ACPP e a Krigagem de dados com erro. Na Krigagem este erro é associado a incerteza das medidas e na ACPP ele está associado ao corte aos K primeiros autovalores. Esta analogia indica que o modelo de covariância utilizado pela ACPP é diferente dos modelos clássicos - exponenciais, esféricos, lineares, etc. -, uma vez que é descrito como (ver definição dos termos na equação III-16):

$$C_k(\underline{x}, \underline{x}') = \sum_{k=1}^K \lambda_k \cdot F_k(\underline{x}) \cdot F_k(\underline{x}') \quad (\text{III-22})$$

Dada a ortogonalidade dos autovetores F e a independência espacial entre os autovetores em duas posições $\underline{x}$ e $\underline{x}'$, pode-se verificar a não necessidade da suposição de estacionaridade de ordem dois.

Partindo-se portanto de uma decomposição ACPP em autovalores e autovetores, e sem a necessidade de intervir ajustando um variograma, pode-se gerar resimulações que mantêm, em esperança, a média e variância do conjunto inicial, e que podem ser condicionadas dentro de certos limites (discutidos no § III.1.2.2).

Uma aplicação que decorre da resimulação é o estudo de novos cenários. Por exemplo, no caso da realização de novas medidas de transmissividade e sem a necessidade de refazer inteiramente o problema inverso, pode-se aproveitar o primeiro conjunto de simulações já disponível e realizar-se então as resimulações com a adição das novas medidas como novos pontos de condicionamento.

Estas resimulações poderiam ser utilizadas então como uma estimativa inicial dos parâmetros a ser usada num problema inverso. A resimulação será então modificada no decorrer da inversão, como proposto na metodologia de alguns métodos como Pontos Pilotos e Simulação Sequencial. O fato desta se basear num espaço de soluções possíveis anteriormente determinado poderá acelerar a convergência para uma nova solução aceitável (vide exemplo no §IV.3.3).

III.1.2.1 Metodologia

Pode-se resimular um processo $X_{rs}(\xi, \underline{x})$ tanto a partir de uma função de covariância teórica, quanto a partir de uma função de covariância empírica, bastando para isso que tenha-

se calculado a sua decomposição em autovalores e autovetores.

A resimulação se faz então a cada posição como a composição dos autovetores segundo:

$$X_{rs}(\xi, \underline{x}) = \sum_{k=1}^K A_k(\xi) F_k(\underline{x}) + \epsilon(\xi, \underline{x}) \quad (\text{III-23})$$

onde: $A_k(\xi)$ é uma variável aleatória com variância igual ao autovalor λ_k ,

$F_k(\underline{x})$ é a k-ésima função própria de X (o processo original) na posição espacial $\underline{x}$,

K é o número de autovalores necessários para representar-se nos autovalores a porcentagem da variância inicial desejada (por exemplo 95 %),

$\epsilon(\xi, \underline{x})$ é um ruído branco adicionado para compensar a variância descartada com o corte aos K primeiros autovalores,

ξ é o índice da realização representando uma escolha aleatória única para todas as posições a se resimular no domínio, sendo $E[\xi] = 0$ uma vez que $X(\xi, \underline{x})$ é centrado.

A resimulação pode ser compreendida como a amostragem, dentro do volume total do hiperelipsóide, de um ponto no espaço de parâmetros. O termo aleatório A_k pode ser compreendido então como a posição amostrada segundo a direção dada pelo k-ésimo autovetor. Na figura III-3 tem-se um exemplo de escolha do termo A para um corte a $K=30$, cada uma das séries mostradas representa uma escolha do termo aleatório ξ diferente, ou seja cada uma das séries representa a posição relativa no autovetor, indicado pelo índice no eixo das abscissas, que é mantida para todos os pontos do domínio.

Figura III-3: Escolha do termo aleatório A da resimulação para cada um dos k autovetores indicados no eixo das abscissas para cada uma das escolhas aleatórias definidas por uma série.

Como o ajuste dos eixos do hiperelipsóide só impõe que uma certa variância – definida pelo corte a K autovetores- esteja contida no volume interior do hiperelipsóide, a

escolha dos termos da resimulação poderá amostrar posições do espaço de parâmetros não descritas no conjunto inicial de soluções. Pode ocorrer, neste caso, que a resimulação não seja uma solução do problema inicial. Uma maneira de minimizar na própria resimulação este eventual problema é a utilização do condicionamento como será descrito no § III.1.2.2.

Braud & Obled (1991), trabalhando sobre funções de covariância teórica, enfatizam que para obter-se uma boa restituição do modelo alvo segundo a equação III-23 é suficiente a escolha de K tal que mais de 90% da variância total esteja representada nos autovalores e autovetores, com isso a hipótese que ϵ seja um ruído branco é satisfeita. Eles notam também que quanto mais energético o modelo alvo mais autovetores são necessários para a representação da mesma porcentagem da variância inicial, ou seja quanto menor a distância de correlação entre os parâmetros maior deve ser o valor de K . Segundo os estudos destes autores sobre funções de covariância teórica, podem aparecer eventualmente alguns problemas de borda e de anisotropia na resimulação, problemas que não ficaram claros nos testes feitos, aqui sobre funções de covariância empírica.

III.1.2.2 Condicionamento da resimulação

Considerando a resimulação de todo o domínio simulado, e não mais a descrição do valor resimulado num dado ponto como descrito na equação III-23, a escolha do termo aleatório ξ se faz uma única vez para cada um dos autovetores, e não a cada um dos pontos. Desta forma a conexão entre os diversos pontos do domínio não é afetada pela escolha do termo aleatório, mas sim garantida pela consistência da decomposição dos autovetores no domínio.

Desta forma o condicionamento implicará em selecionar uma certa combinação de termos aleatórios, ou seja novas ponderações entre os autovetores, que satisfaçam os critérios condicionantes em determinados pontos. É importante frisar que não se pode modificar uma escolha aleatória num ponto sem alterar os demais pontos.

Propõe-se então três maneiras de condicionar a resimulação, explorando as seguintes características:

1) Reter somente as escolhas de ξ que permitem, nos pontos de controle, um resíduo entre o valor resimulado e o valor condicionante menor que um certo valor predefinido. O que matematicamente é obtido pelo respeito da desigualdade (III-24) abaixo em todos os j pontos condicionantes.

$$\left[\sum_{k=1}^K A_k(\xi) \cdot F_k(\underline{x}_j) + \epsilon(\xi, \underline{x}_j) \right] - X_c(\underline{x}_j) < \sigma_j \quad (\text{III-24})$$

sendo X_c o valor condicionante na posição $\underline{x}_j$, σ_j o resíduo aceito naquele ponto que pode ser função do desvio padrão, e j o índice que varre o número de pontos condicionantes.

2) Utilizar o termo $\epsilon(\xi, \underline{x})$ como uma correção à resimulação na direção que permite uma redução do resíduo, neste caso o sinal deste termo deixa de ser aleatório e passa a ser definido pelo gradiente do resíduo, neste caso a verificação de não tendenciosidade do ruído é garantida pela imposição inicial de $X(\xi, \underline{x})$ ser centrado, o que garante que $E[\epsilon(\xi, \underline{x})] = 0$ sobre o domínio. Se esta correção, limitada pelo valor máximo de $\epsilon(\xi, \underline{x})$, ainda não for suficiente, então abandona-se esta escolha de ξ e faz-se outra.

Matematicamente isto implica o respeito da seguinte desigualdade para todos os pontos j :

$$\left| \sum_{k=1}^K A_k(\xi) \cdot F_k(\underline{x}_j) - X_c(\underline{x}_j) \right| \pm |\epsilon(\xi, \underline{x}_j)| < \sigma_j \quad (\text{III-25})$$

3) A escolha do ruído branco para $\epsilon(\xi, \underline{x})$, como descrita nos dois itens anteriores, pode produzir imagens irrealistas quando comparadas às simulações originais – elas podem parecer muito mais energéticas -. Isto decorre da esperança do ruído, $E[\epsilon(\xi, \underline{x})]$, ser tomada para todo para o domínio, com média zero e com variância a ser dada pela concentração da informação dos $N-K$ autovalores descartados (i.e. $\sum_{k=K+1}^N \lambda_k$). Pode-se obter assim uma certa desestruturação da resimulação principalmente quando o corte a K autovalores deixa uma variância residual próxima de 5% como será visto no § IV.1.6.

Pensando em manter a mesma variância global que as simulações iniciais, sem entretanto esta desestruturação produzida pela consideração da esperança sobre todo o domínio, pode-se condicionar a resimulação impondo que ainda existe uma certa estruturação no ruído como:

$$\left| \left[\sum_{k=1}^K A_k(\xi) \cdot F_k(\underline{x}_j) \right] + A_{K+1}(\xi) \cdot F_{K+1}(\underline{x}_j) - X_c(\underline{x}_j) \right| < \sigma_j \quad (\text{III-26})$$

Desta forma tem-se a incorporação da variância dos $N-K$ autovalores descartados não mais como um ruído branco, mas como uma contribuição estruturada. Esta estruturação é descrita no termo F_{K+1} , o primeiro autovetor descartado, e sua variância corresponde a variância descartada pelo corte a K autovalores.

Neste caso, como nos outros dois descritos, obtém-se para um conjunto de resimulações que $E[X_{rs}] = E[X]$ e $E[\text{Var}(X_{rs})] = E[\text{Var}(X)]$.

Como base para comparações é interessante ressaltar que existem algumas maneiras clássicas de se fazer o condicionamento de simulações, as cinco mais conhecidas são descritas no anexo B.

O condicionamento numa resimulação é um novo desenvolvimento que permite diretamente na simulação manter a estruturação, e guardar o condicionamento dentro dos limites impostos pela simulação inicial – ou seja a média próxima ao valor de controle na malha correspondente - e/ou pela variância descartada na escolha dos autovalores e autovetores.

III.1.3 Análise Fatorial

A análise fatorial é um termo genérico utilizado para descrever vários métodos desenvolvidos para analisar a inter-relação entre variáveis (i.e. parâmetros) ou objetos (estes descritos pelas variáveis, como por exemplo simulações). Estes métodos tem em comum a procura de novas variáveis hipotéticas (em alguns casos elas podem traduzir realidades físicas), chamadas fatores, que contém o essencial da informação descrita nos dados.

O modelo matemático da análise fatorial é dado por:

$$\mathbf{X} = \mathbf{F} \mathbf{A} + \mathbf{E} \quad (\text{III-27})$$

onde $\mathbf{X}_{NP}$ é a matriz com as N simulações e os P parâmetros de cada simulação (ver também equação III-1), $\mathbf{F}_{NK}$ é a matriz contendo os K fatores retidos, $\mathbf{A}_{KP}$ é a matriz das cargas (não confundir com carga hidráulica) e $\mathbf{E}_{NP}$ a matriz de resíduos. Uma descrição mais detalhada destes termos é dada no § III.1.3.1.

Pode-se observar a partir de $\mathbf{X}$ a inter-relação entre os parâmetros do modelo, analisando a dispersão conjunta de suas colunas a partir da decomposição em autovetores de $\mathbf{X}^t \mathbf{X}$, chamada análise R-modal, e também a similaridade entre as soluções analisando-se suas linhas, calculando-se a decomposição em autovetores de $\mathbf{X} \mathbf{X}^t$, chamada análise Q-modal – chamada na sequência do texto de Q-fatorial -.

Para fazer uma distinção mais clara entre a ACP (cuja similaridade com a ACPP já foi salientada), e a análise fatorial, deve-se considerar que só se dispõe de uma amostragem da verdadeira população que é descrita pelos parâmetros. Pode-se considerar então a equação III-27 em termos de variâncias e covariâncias (Reyment & Jöreskog 1993) como $\Sigma = \mathbf{A} \Phi \mathbf{A}^t + \Psi$.

Dispondo-se de um número suficiente de simulações para aproximar a população, tem-se que Σ_{pp} é a matriz de covariância da população, $\mathbf{A}_{pk}$ é a matriz das cargas dos fatores, Φ_{kk} é matriz de covariância dos fatores, e Ψ_{pp} é a matriz da covariância residual. Esta

comparação entretanto só é pertinente para o caso R-fatorial porque não faz sentido falar em variância das observações ao longo dos parâmetros.

Na ACP os resíduos em Ψ são assumidos ser pequenos e com isso $\Sigma \cong A\Phi A^t$, o que implica que Σ é aproximadamente de posto K. Na análise fatorial Ψ é uma matriz diagonal pois a correlação entre residuais é zero e com isso Σ é a soma de $A\Phi A^t$, uma matriz de posto exatamente K e uma matriz diagonal Ψ ; os elementos fora da diagonal de Σ e $A\Phi A^t$ são os mesmos. Ou seja na ACP o objetivo é ajustar toda a matriz de covariância Σ , enquanto que na análise fatorial o objetivo é ajustar somente os elementos fora da diagonal, quer dizer, eles consideram a covariância mas não a variância.

Na tabela III-1 temos um resumo das principais diferenças entre ACP e Análise Fatorial.

Tabela III-1: Comparação entre ACP e Análise Fatorial

Método	Análise de Componentes Principais	Análise Fatorial
Correlação entre residuais	Nenhuma suposição	Residuais não correlacionados
Suposição sobre o termo residual	Supõe-se pequeno	Nenhuma suposição
Principal orientação	Ajustar toda a variância dos dados	Obter o máximo de inter-correlação entre as variáveis

III.1.3.1 Metodologia da Análise Q-fatorial

A análise Q-fatorial se faz sobre o ângulo entre as diferentes simulações, procurando indireta e semi-quantitativamente os parâmetros responsáveis pela maior dispersão das simulações. Utilizou-se esta análise para comparar a sensibilidade dos dados à não linearidade, uma vez que a análise Q-fatorial não pressupõe linearidade (Buoro & Silva 1994) na decomposição em fatores.

Partindo-se da matriz X definida na equação III-1 é possível se analisar o grau de similitude entre as soluções, o que é chamado de análise Q-fatorial. Para obter uma medida do ângulo entre cada uma das soluções, constrói-se a matriz de similaridade S_{NN} , como:

$$S = W W^t \quad (III-28)$$

em que: $W_{NP} = D^{-1/2} X$ corresponde a normalização das linhas de X , e

$$D_{NN} = \text{diagonal}(X X^t).$$

Se cada simulação for considerada como um vetor no espaço dos parâmetros, obtém-se que o elemento S_{ij} de S definirá então o coseno do ângulo entre as simulações i e j .

expressando a similaridade entre pares de soluções. Ou seja quanto menor o ângulo maior a similaridade e inversamente.

Como a complexidade de S está diretamente ligada ao tamanho da amostragem disponível (S é simétrica e tem portanto $[N*N + N]/2$ cosenos entre parâmetros), pode simplificar-se a análise encontrando-se a estrutura básica de S . Isto se faz baseando-se no decaimento entre autovalores sucessivos. Quando este decaimento é brusco, desprezam-se os fatores subsequentes, desta forma S é aproximada somente pelos autovetores e autovalores correspondentes a este número de fatores. Os fatores são definidos com direção dada pelos autovetores de S e módulo proporcional à raiz quadrada do autovalor correspondente, como pode ser visto na figura III-4 para um espaço bidimensional (i.e. definido por duas soluções).

Figura III-4: Representação do posicionamento dos autovetores no espaço de soluções onde cada ponto representa o valor de um parâmetro.

Os fatores definem uma nova base deste espaço de soluções, indicando também os eixos do hiperelipsóide de espalhamento. Estes eixos estão relacionados aos eixos originais através das cargas das soluções. A carga de uma solução j num fator i é dada pela projeção do fator i no eixo j (vide figura III-5). Abandonam-se então a maior parte dos eixos (Buoro & Silva 1994), guardando somente os que detêm mais de 1% da informação original. Retendo-se por exemplo dois fatores, o hiperelipsóide é reduzido a uma elipse, o que normalmente neste trabalho, já foi suficiente para representar de 95% a 99% da informação original. Assim as soluções com maior e menor carga (projeção) no maior fator são extremas ao longo da principal direção de variação.

Analisando agora a variação dos valores de cada parâmetro ao longo das soluções ordenadas segundo as cargas no fator I (que indica a maior direção de variação), é possível se avaliar os parâmetros mais influentes na sua composição e portanto os mais influentes na

determinação da maior direção de variação.

Figura III-5: Cargas da solução 1 nos fatores I e II (C_{I1} e C_{II1} respectivamente) e na solução 2, sob os mesmos fatores (C_{I2} e C_{II2} respectivamente)

Os parâmetros que tenham uma variação média crescente ou decrescente ao longo das soluções ordenadas serão os mais influentes na incerteza, ao passo que os demais deverão apresentar um comportamento oscilatório no entorno de um valor constante (vide exemplo na figura III-6).

Figura III-6: Determinação dos parâmetros mais influentes na incerteza pela ordenação das cargas de cada parâmetro em relação ao primeiro fator. Os parâmetros com comportamento aleatório no entorno de um valor qualquer não influenciam na determinação da maior incerteza.

No caso de muitos parâmetros estarem sendo estudados, isto pode ser observado pela inclinação da reta ajustada por mínimos quadrados ($Incl_j^{\dagger}$), sobre cada um dos j parâmetros ordenados segundo o primeiro fator, o que é dado pela seguinte fórmula:

$$Incl_j = \frac{n \sum_{k=1}^n k \cdot X'_{kj} - \sum_{k=1}^n X'_{kj} \sum_{k=1}^n k}{n \sum_{k=1}^n [X'_{kj}]^2 - \left[\sum_{k=1}^n X'_{kj} \right]^2}, \quad j=1,2,\dots,P \quad (III-29)$$

em que X' representa a matriz X com as colunas ordenadas tal que os parâmetros

[†] Esta inclinação é expressa em percentual se a equação III-29 for multiplicada por 100, nas demais figuras da tese a inclinação é expressa em percentual.

(armazenados cada um numa coluna) correspondam à ordem das soluções segundo as cargas no maior autovetor; n é o numero de simulações disponíveis; P é o numero de parâmetros; e k é o índice das soluções ordenadas.

Desta forma pode-se obter uma medida semi-quantitativa da influência de cada parâmetro na incerteza. No caso estudado aqui, como cada parâmetro corresponde a uma posição pode-se fazer uma carta onde representa-se a inclinação ajustada para o parâmetro correspondente aquela posição, como será observado no § IV.1.4.

III.2 Métodos inversos geoestatísticos comparados

Uma das motivações desta tese é de estudar a incerteza inerente aos modelos de fluxo nos casos onde se dispõe de uma quantidade mínima de dados suficiente para se fazer uma primeira caracterização da estruturação espacial da transmissividade.

A maioria dos métodos descritos abaixo se baseiam numa descrição desta estruturação através de um variograma. Zimmerman et al. (1998) denotam os métodos descritos a seguir como métodos inversos geoestatísticos. Preferimos manter esta denominação geral, apesar de nem todos se enquadrarem nesta categoria segundo a discussão do §II pois não utilizam a informação simultânea entre carga hidráulica e transmissividade.

A tabela III-2 apresenta uma comparação resumida entre estes métodos no final desta seção.

III.2.1 Simulação Fractal (SF)

Gringrod & Impey (1990) buscando uma descrição do campo de Log T com propriedades de invariância de escala, desenvolveram o método 'Fractal Simulation' (SF) gerando um campo com propriedades fractais. A principal motivação da geração de um campo fractal advém, segundo os autores, desta ser uma maneira apropriada para representar, uma grande variedade de feições geológicas (através de sua transmissividade) em diferentes escalas. Esta característica de invariância de escala pode ser compreendida pela necessidade de colocar objetos com referência de escala nas fotografias de formações geológicas.

Idealmente esta característica representaria que caso feita uma simulação com este método numa grade suficientemente detalhada, não seriam necessárias interpolações posteriores para a representação de pequena escala. Neste caso, considerando o transporte de massa, a utilização de termos dispersivos para corrigir as imprecisões geradas pela precária descrição das variáveis de pequena escala na discretização da equação de transporte não

seriam necessários, uma vez que elas estão compreendidas nas variações de pequena escala simulada

O método SF consiste basicamente dos seguintes passos:

1) Ajuste da lei de escala Γ do campo $Y = \text{Log } T$, definida para as classes de inter-distância (euclidiana), h , segundo os parâmetros a e p^* como:

$$\Gamma_Y(x) = ah^{2p} \quad 0 < p < 1 \quad (\text{III-30})$$

através de mínimos quadrados dentro de N classes de inter-distância.

Isto corresponde de fato ao ajuste de um variograma linear sobre os dados!

2) Geração de campos fractais não condicionados através de 'FFT' (Transformada Rápida de Fourier) como:

$$Y(x) = \sum_{|k| < N} a_k e^{2\pi i k x}, \quad \text{com} \quad \langle |a_k|^2 \rangle \cong |k|^{-(2+2p)} \quad (\text{III-31})$$

3) Condicionamento aos valores de Y medidos por superposição de vários campos não condicionados. Estes campos são gerados modificando somente a fase que, no item 2 definida por p . Esta superposição é feita pela definição de um sistema linear com tantas equações quanto pontos de condicionamento em Y , procura-se então a ponderação ideal das simulações não condicionadas que satisfazem por mínimos quadrados o resíduo em relação ao valor das observações de Y para todas as equações conjuntamente.

4) Para o condicionamento das cargas, o campo de Y condicionado obtido no item 3 é resolvido diretamente através da superposição de 8 diferentes condições ao limite, sendo 4 com variação linear entre os pontos extremos AB, BC, CD, DA e 4 com variação quadrática sobre os mesmo pontos de base AB, BC, CD, DA (vide figura III-7). Isto leva a um novo sistema de equações, agora para a carga hidráulica, onde procura-se minimizar o resíduo das cargas utilizando-se os valores nos quatro cantos extremos como incógnitas.

O condicionamento de carga e transmissividade se faz portanto independentemente, sem troca de informação entre eles.

Figura III-7: Definição da posição das condições limites segundo os segmentos definidos pelos pontos extremos ABCD, para o condicionamento das simulações do método SF.

^{*} p também é conhecido por coeficiente de Hurst, sendo relacionado a dimensão fractal D_f por $D_f = n+1-p$, sendo n a dimensão topológica.

III.2.2 Transformada Fourier (TF)

Gutjahr et al. (1994) desenvolveram o método conhecido como 'Fast Fourier Transform' no programa CSIMFFT que é capaz de gerar simulações condicionadas em 2D para o regime de fluxo permanente. Este método se baseia numa aproximação linear da equação do fluxo a partir da descrição da carga e do logaritmo da transmissividade, como um valor médio e uma perturbação no entorno deste ($H=H_m+h$; $Y=Y_m+f$). Nesta aproximação supõe-se e que o gradiente da carga hidráulica é constante e que as perturbações da carga hidráulica, h , e da transmissividade, f , são pequenas. O método consiste nos seguintes passos (ver também aplicação simples em Marsily, 1986):

1) Partindo-se da equação linearizada pode-se definir um processo complexo associado Z , tanto para h , quanto para f , como ($Z \in C$ se $Y \in R$):

$$\alpha(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dZ_{\alpha}(k) \quad \text{com } \alpha = h, f \quad (\text{III-32})$$

satisfazendo $E[dZ(k_1) dZ^*(k_2)] = 0$ se $k_1 \neq k_2$, onde $*$ indica o complexo conjugado

$$E[dZ(k_1) dZ^*(k_1)] = \varphi(k_1) \quad \text{se } k_1 = k_2$$

2) A partir da unicidade da representação do espectro e da definição de duas equações como III-32, uma para f e outra para h , pode-se obter o espectro da carga e os espectros cruzados de carga e transmissividade a partir do espectro de f e da posição $\underline{x}$ como:

$$\varphi(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iks} \text{cov}[Y(\underline{x} + s), Y(\underline{x})] ds \quad (\text{III-33})$$

3) Utilizando-se então a transformada inversa de Fourier obtém-se a expressão da transmissividade e da carga hidráulica relacionada à função de covariância de Y . O condicionamento pode ser feito pelos métodos clássicos (ver anexo B) ou alternativamente no domínio espectral, baseando-se nos dados espaciais. Neste caso que correspondente a uma cokrigagem no domínio espectral baseando-se nos dados espaciais, e uma posterior transformada inversa para o domínio espacial.

III.2.3 Cokrigagem Linear (CL)

Kitanidis & Vomvoris (1983), Kitanidis & Lane (1985) implementaram no programa GEOINVS esta técnica linear, chamada 'Linearized Cokriging'. Ela estima por máxima verosimilhança os parâmetros estruturais da covariância de Y baseando-se tanto em dados de Y quanto de carga hidráulica.

O método consiste em duas etapas: a primeira consistindo da análise estrutural quando os parâmetros que definirão a estrutura geoestatística do modelo são determinados a partir dos dados disponíveis (i.e. Y e carga hidráulica). A linearização da equação do fluxo como descrita no § II.2.2.3 permite então estabelecer as covariâncias cruzadas entre a carga e a transmissividade. Na segunda etapa utilizam-se estas covariâncias e os dados condicionantes para estimar por cokrigagem uma estimativa condicionada de Y. Para a simulação de um conjunto de realizações equiprováveis utiliza-se então o método de Cholesky sobre a matriz de covariância dos erros (ver anexo B-2).

A primeira etapa implica a minimização da função log-verosimilhança dada por:

$$L(z/\theta) = -\ln p(z/\theta) = \frac{N}{2} \ln(2\pi) + \frac{1}{2} \ln|Q| + \frac{1}{2} (z - \mu)^t Q^{-1} (z - \mu) \quad (\text{III-34})$$

em que z é o vetor das N medidas disponíveis; θ o vetor de parâmetros estruturais; $|Q|$ o determinante; μ é a média das medidas de carga e Y; Q é o vetor de covariância e covariância cruzada para carga e Y ($Q = E[(z - \mu)(z - \mu)^t / \theta]$), sendo a forma de μ e Q definidas na escolha do modelo de covariância (i.e. se a média é constante ou linear se o modelo é exponencial ou esférico).

Através da minimização de III-34, por Gauss-Newton obtém-se μ e Q , uma vez que a linearização da equação de fluxo permite a expressão das covariâncias e covariâncias cruzadas em função do vetor estrutural θ .

A segunda etapa consiste na estimação por cokrigagem dos valores de $\hat{Y}$ como:

$$\hat{Y} = \sum_{i=1}^m \lambda_i Y_i + \sum_{j=1}^n \gamma_j (\phi_j - H_j) \quad (\text{III-35})$$

em que Y_i é o valor de Log T nos m pontos de medida; ϕ_j é a medida de carga nas n posições; H_j é a carga hidráulica média no ponto de medida j ; λ_i e γ_j são os pesos de Krigagem associados às medidas de Y e carga dada a localização do valor interpolado $\hat{Y}$. As covariâncias de Y e H e suas covariâncias cruzadas afetam os pesos de Krigagem através da solução do seguinte sistema linear:

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i Q_{YY}(i, k) + \sum_{j=1}^n \gamma_j Q_{Y\phi}(k, j) - v = \text{Cov}(Y, Y_k) \quad k=1, \dots, m \quad (\text{III-36})$$

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i Q_{\phi Y}(l, i) + \sum_{j=1}^n \gamma_j Q_{\phi\phi}(j, l) - \beta = \text{Cov}(Y, \phi_l) \quad l=1, \dots, n \quad (\text{III-37})$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m \lambda_i &= 1 \\ \sum_{j=1}^n \gamma_j &= 0 \end{aligned} \quad (\text{III-38})$$

em que Q representa a covariância e a covariância cruzada entre carga e transmissividade para os pontos de medida; Cov a covariância entre pontos de medidas e pontos de estimação; v e β os parâmetros de Lagrange, adicionados para filtrar a média local de Y e preservar a estacionaridade.

Uma vez estimado Y os resultados podem ser usados na equação de fluxo para obterem-se as cargas sobre o domínio de estudo.

III.2.4 Máxima Verosimilhança (MV)

Dentro de um contexto de máxima verosimilhança Carrera & Neuman (1986a, b, c) propuseram um método não linear sob regime transitório, que pode estimar simultaneamente condutividade, armazenamento, recarga, condições limite e parâmetros que controlam a estrutura de erro dos dados. Este método, conhecido como 'Maximum Likelihood', vem recebendo aprimoramentos dentro do programa INVERT (Carrera 1994).

O problema inverso é expresso através de um vetor β compreendendo os parâmetros desconhecidos do modelo α_i (i.e. sendo i : condutividade (k), armazenamento (S), fontes (q), limites de carga impostos (H), limites de fluxo imposto (Q)) e parâmetros estatísticos. O objetivo é estimar β dadas as medidas de carga, h_{ob} e estimativas a priori dos parâmetros do modelo α^* . A estimativa da máxima verosimilhança de β dado $z^* = (h_{ob}, \alpha^*)$ maximiza a densidade de probabilidade de z^* se β estiver correto. A função de verosimilhança se expressa como:

$$L(\beta/z^*) = \frac{1}{[(2\pi)C_z]^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (z^* - z)^t C_z^{-1} (z^* - z) \right] \quad (\text{III-39})$$

em que C_z é uma matriz diagonal composta de C_h e C_α , que são as estimativas iniciais das covariâncias ($\sigma_h^2 V_h$ e $\sigma_\alpha^2 V_\alpha$) para a carga e parâmetros do modelo respectivamente. Mais especificamente σ_h^2 e σ_α^2 são escalares positivos que podem ser incógnitas ou não. No caso de se conhecer a magnitude da variância de h e α , V_h e V_α são matrizes definidas positivas de covariâncias de h e α a diferentes posições e tempos.

O método consiste da maximização da equação acima com respeito aos parâmetros do

modelos σ_h^2 e σ_α^2 . Na prática isto é feito de maneira equivalente pela minimização da expressão $-2(\ln L(\beta/z^*))$, o que depois de descartar os termos dependendo somente de parâmetros estatísticos leva ao seguinte conjunto de equações

$$J = J_h - \lambda J_\alpha \quad (\text{III-40})$$

$$\text{onde : } J_h(\hat{\alpha}) = (h * -\hat{h})^t V_h^{-1} (h * -\hat{h}) \quad (\text{III-41})$$

$$J_\alpha(\hat{\alpha}) = (\alpha * -\hat{\alpha})^t V_\alpha^{-1} (\alpha * -\hat{\alpha}) \quad (\text{III-42})$$

Procura-se então a relação ótima de $\lambda = \sigma_h^2 / \sigma_i^2$ (com i representando o tipo de parâmetro) dado V_h e V_α .

Sendo $\sigma_h^2 = J_h / N_h$ onde N_h é o numero de medidas de carga e

$\sigma_i^2 = J_i / N_i$ onde N_i é o numero de parâmetros a estimar.

Para tanto é proposto um processo iterativo como:

1. Começo com $\lambda=1$ e J
2. Minimização de J (α_i, λ)
3. Novo calculo de λ com os α_i determinados pelo mínimo do item 2
4. Volta ao item 1, ou caso λ se estabilize final do processo.

Algumas conclusões gerais sobre a solução do problema inverso são apresentadas por Carrera & Neuman (1986a):

A maior redução no erro de estimativa ocorre quando uma calibração simultânea entre regime permanente e transitório é feita, isto entretanto é relativo ao caso estudado.

Pode ocorrer que a adição de informação transiente não melhore muito a estimativa dos parâmetros, assim como dobrando a quantidade de informação estática sob o mesmo regime melhora pouco a qualidade das estimativas.

O uso de informação a priori é reforçado no sentido que a sua não utilização pode levar a erros maiores dos que os associados a erros na informação a priori.

A inadequada representação da estrutura do modelo pode ser muito mais prejudicial a solução do problema inverso do que o uso de dados ruidosos.

A geração de simulações equiprováveis é feita (Carrera informação pessoal, pois não é documentado na bibliografia), após a determinação de λ e de α , quando se conhece a matriz de covariância dos erros. Produz-se então por decomposição de Cholesky desta matriz de erros estimativas equiprováveis como descrito no anexo B.

III.2.5 Pontos Pilotos (PP)

Apresentado pela primeira vez por Marsily (1978), este método, conhecido como 'Pilot Points', consiste na modificação de um campo de Y inicial, obtido sob uma grade de elementos finitos por Krigagem (como em Marsily et al. 1984) ou por simulação gaussiana (como em LaVenue et al. 1995) em pontos específicos chamados pontos pilotos.

A posição destes pontos pilotos podendo ser decidida pelo modelador (com indicações dadas em Marsily 1978, Certes 1990, Certes & Marsily 1992) ou definida matematicamente nos pontos onde a sensibilidade da função-objetivo (F_{obj}) em relação as modificações de Log T for máxima (como em Ramarao & LaVenue 1992, LaVenue et al. 1995, Ramarao et al. 1995, ou LaVenue 1998).

A inclusão de um ponto piloto define uma iteração exterior ao final da qual é estimada a F_{obj} e a necessidade de mais iterações, ou seja, a inclusão de um novo ponto piloto. O critério de parada da iteração exterior é definido tanto por um limite mínimo para F_{obj} definido à priori, quanto por um número máximo de iterações que se traduzem por um máximo de pontos pilotos incluídos.

Dentro de cada iteração exterior com a escolha do ponto piloto, a alteração do valor de Y nesta malha é feito por um segundo algoritmo iterativo. Se chamarmos a esta iteração interna 'i' a modificação de Y se fará segundo: $Y_{i+1} = Y_i + \beta_i d_i$, em que d_i é o vetor que indica a direção da modificação obtido segundo algoritmos como Broyden, Fletcher-Reeves (Carrera & Neuman 1986b, Ramarao & LaVenue 1992); β_i é o vetor que indica a magnitude

da modificação naquela iteração, obtido através de $\frac{\partial F_{obj}(Y_{i+1})}{\partial \beta_i} = 0$.

Ao final deste processo de iteração interna para a escolha do valor do parâmetro no ponto piloto é realizada uma Krigagem, que propagará então a modificação da malha na qual foi definida a escolha do ponto piloto ao resto do domínio. A Krigagem é feita sempre com um variograma definido a priori e com todos os pontos de dados mais todos os pontos pilotos introduzidos até aquela iteração como:

$$Y_m^* = \sum_{k=1}^N \gamma_{m,k} Y_k + \gamma_{m,p} Y_p \quad (III-43)$$

em que Y_m^* é a estimativa de Krigagem de Y no centro da malha m; k é o índice para um ponto de observação; p é o índice para um ponto piloto; $\gamma_{m,k}$ é o peso de Krigagem entre um ponto de interpolação m e um ponto de dados k; $\gamma_{m,p}$ é o peso de Krigagem entre um ponto

de interpolação m e um ponto piloto p .

O método foi implantado no programa GRASP (Ramarao & Reeves 1990), que resolve a equação de fluxo completa e permite também o ajuste de informação transiente, como os fornecidos por ensaios de bombeamento. Neste caso a F_{obj} é definida como:

$$F_{obj} = f_p F_{obj\ p} + F_{obj\ t} \quad (III-44)$$

em que f_p é um fator de ponderação entre a função-objetivo permanente $F_{obj\ p}$ e a função-objetivo transitória $F_{obj\ t}$, esta definida como:

$$F_{obj\ t} = \sum_{t=t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n w_{i,t} (p_{i,t} - p_{obs,t})^2 \quad (III-45)$$

em que t_1 é o começo da janela temporal e t_2 é o final; $w_{i,t}$ são os pesos associados a cada ponto de controle i num tempo t ; $p_{i,t}$ é a pressão (pode-se compreendê-la aqui como a carga hidráulica) num local i num tempo t ; $p_{obs,t}$ é a pressão observada (controlada) no tempo t .

Obtém-se $F_{obj\ p}$ utilizando-se a soma em III-45 para um só tempo t_1 .

Neste método o número de pontos pilotos é equivalente ao número de zonas numa parametrização por zonas (Keidser & Rosbjerg 1991). No caso de uma formulação do método com o cálculo automático da posição dos pontos pilotos (como usado em WIPP, ver § IV.3), a questão ligada à super-parametrização e sua associada super-calibração podem ser controladas. Isto uma vez que os pontos pilotos são adicionados um a um e o processo pode ser interrompido, ou pelos critérios definidos matematicamente acima, ou se o modelador decidir que os graus de liberdades adicionais dados à solução pela inclusão dos pontos pilotos já superou a quantidade de informação dos dados e começando-se então a deteriorar a plausibilidade da solução (ver discussão §II.1.4).

III.2.6 Simulação Seqüencial (SS)

Weng & Gomez-Hernandez (1996), Gomez-Hernandez et al. (1997) descrevem este método, conhecido como 'Sequential Self-Calibrated' ou 'Master Points'. Ele consiste nos seguintes passos:

A escolha de uma grade paralela a direção geral do fluxo no domínio de estudo. Estimção da variância de Krigagem para cada malha de cálculo a partir do variograma ajustado aos dados originais.

Simula-se então um campo de Y condicionado aos dados de acordo com o método escolhido, simulação gaussiana ou de indicatrizes (ver anexo B). Este campo é então perturbado nas chamadas localizações 'master', ou seja em posições pré definidas de uma

grade regular com pelo menos 2 pontos por alcance do variograma. Isto é feito a fim de reproduzir as medidas de carga dentro da variância de Krigagem definida anteriormente para cada malha da grade.

Este campo perturbado, é então Krigado a partir das malhas com observações de Y mais as malhas onde se definiram as localizações 'master', para que as perturbações se façam sentir no resto da grade.

Este era o único método (LaVenue 1998 descreve modificações neste sentido a PP) que no momento da realização destes Testes Problemas (vide §III.3) era capaz de gerar simulações baseadas em funções aleatórias tanto multigaussianas quanto não gaussianas. Esta última através da utilização da Krigagem das Indicatrizes, o que lhe permite utilizar os histogramas originais dos dados, sem necessidade de transformações, bem como a utilização de várias populações de Y , cada uma com sua distribuição.

Dadas as semelhanças entre os métodos SS e PP, apresenta-se aqui uma organograma esquemático para os dois métodos salientando as principais diferenças entre eles.

Na tabela a seguir apresenta-se um resumo das principais características e limitações dos métodos apresentados.

Tabela III-2: Comparação dos métodos inversos de simulação geoestatística usados em hidrogeologia.

Método	Simulação Fractal (SF)	Transformada de Fourier (TF)	Cokrigagem Linear (CL)	(MV) Máxima Verosimilhança	Pontos Pilotos (PP)	Simulação Sequencial (SS)
Linearização da equação de Fluxo ?	Não	Sim	Sim	Não	Não	Só para a otimização de Log T
Procura solução ótima ou a melhor modificação de uma simulação inicial ?	Simulação a partir de variograma linear	Otimização	Otimização	Otimização	Modificação de campo inicial	Modificação de campo inicial
Condicionamento de Log T	Superposição linear de simulações não condicionadas	Mesmo espectro que função de covariância ajustada	Por Cokrigagem	Como termo de penalização na função objetivo	Acoplada a Krigagem	Acoplado a Krigagem
Possibilidade de modelar regime transitório ?	Não	Não	Não	Sim	Sim	Sim
Pode considerar outros parâmetros como recarga, armazenamento?	Não	Não	Não	Sim	Sim	Sim
Otimização de Log T e carga hidráulica conjuntamente?	Não, ajuste de Log T e carga não interagem	Sim	Sim, desde a escolha do variograma	Sim	Sim	Sim
Restrições	Variograma linear deve ajustar dados	Validade da aproximação linear (Var (Log T <1))	Estacionaridade de ordem dois e aproximação linear		Tempo de calculo longo	
Observações	Pode gerar simulações não plausíveis por necessitar perturbar demais condições de borda para ajustar carga hidráulica	Transformada de Fourier implica limite exterior longe da zona de interesse no centro do domínio e *	Ajuste automático do variograma pode desconsiderar pontos com informação muito diferente e *	*	Pode gerar feições sistematicamente circulares ao redor dos pontos pilotos	Pode facilmente gerar super-parametrização por adicionar muitos pontos 'master' em relação a quantidade de dados

* Restrições do mapeamento do espaço de soluções possíveis por basear busca de soluções equiprováveis sob o ponto ótimo

III.3 Materiais Utilizados (dados)

Visando caracterizar a incerteza sobre o espaço de soluções admissíveis, procuraram-se métodos que parametrizem este espaço através de funções de correlação, por considerar que estes métodos permitem um melhor aproveitamento dos dados ao mesmo tempo que permitem simular situações geológicas complexas. A fim de comparar a decomposição ACPP e Q-fatorial, aqui usadas para tentar caracterizar a incerteza, fez-se uso de um conjunto de soluções equiprováveis gerado por vários métodos inversos geoestatísticos sobre um mesmo conjunto de medidas.

Dentro do programa Norte Americano de armazenamento de rejeitos radiativos de longa vida é exigida pela agência de proteção ambiental (EPA), a caracterização das eventuais formações geológicas que poderiam conduzir, no caso de um eventual vazamento, ao contato do material radiativo com seres humanos através dos aquíferos e do consumo de sua água. Esta caracterização deve ser feita de forma estocástica, acomodando toda a informação disponível bem como seu grau de incerteza. Atualmente ela inclui a correlação de parâmetros, considerando a correlação espacial e o condicionamento sobre os dados amostrais (Sandia National Laboratories 1992).

III.3.1 Descrição dos dados sintéticos utilizados

Dentro de um projeto que durou 3 anos e envolveu diversos grupos de pesquisadores, a Sandia National Laboratories desenvolveu vários "Teste Problema" (TP) visando comparar 7 métodos geoestatísticos inversos (ver § III.2), a fim de avaliar qual a técnica inversa melhor se adapta para cumprir as exigências legais de caracterização estocástica.

O objetivo final foi determinar dentro de uma realidade conhecida, uma vez que gerada artificialmente, qual técnica ou grupo de técnicas melhor se adaptariam à determinação estocástica da incerteza nos tempos de trânsito, quando a variabilidade e a incerteza das propriedades hidrogeológicas é grande (dada a pouca quantidade de dados por área e variações dos parâmetros em mais de 4 ordens de grandeza em alguns casos) (Zimmerman et al. 1993, 1996).

Os Testes Problemas foram propostos para um aquífero bidimensional confinado. Por esta razão as simulações se fizeram efetivamente sobre o logaritmo em base 10 da transmissividade (Log T), método habitualmente utilizado nas simulações geoestatísticas por ajudar a linearizar a distribuição de T (Carrera & Neuman 1986b).

O “Teste Problema” (TP) consistiu da comparação entre diferentes métodos inversos baseada em quatro problemas “tipo WIPP” (TP1, TP2, TP3, TP4). Dados sintéticos foram gerados numa escala, com malhas de 20x20 a 40x40 metros segundo o TP e com as seguintes características: distribuição da amostragem (em Log T e carga hidráulica), variância de Log T e simulação das características geológicas similares às encontradas no verdadeiro WIPP (vide §III.3.2), no anexo D encontra-se uma descrição sucinta dos dados estatísticos do campo sintético e dos dados passados aos participantes.

Entre os 7 métodos comparados nos TPs não foi utilizado aqui o método Linearizado Semi Analítico (Rubin & Dagan 1992), por produzir diretamente a função densidade acumulada do tempo de transito sem passar pela geração do campo de Log T, sem o qual não podemos fazer as análises aqui propostas.

Quanto aos 6 métodos aqui comparados, 3 são lineares (SF, CL, TF), sendo que uma descrição de cada um deles é dada no § III.2. Ver também o anexo D para os mapas dos dados sintéticos e das simulações produzidas.

Nas análises feitas utilizaram-se somente os TP1 e TP4, não se utilizou TP2 devido a similaridade entre TP1 e TP2 como mostram os resultados estatísticos apresentados em Zimmerman et al. (1998), já o TP4 foi escolhido por simular feições mais complexas, similares a paleocanais, sem no entanto apresentar dificuldades intransponíveis. Quanto a não utilização de TP3 ela se deve a dificuldade apresentada por este problema que, simulando feições típicas de fraturas incrustadas num campo menos transmissivo, fez com que as simulações produzidas pela maioria dos métodos contivessem erros e dispersões muito importantes, mascarando a comparação nos termos definidos neste trabalho. Pode-se constatar pela figura III-8 a relação entre a correlação dos erros em carga hidráulica e em Log T para todos os métodos sobre todos os TPs, vê-se, através do erros significativamente maiores, a dificuldade significativamente maior do TP3 à maioria dos métodos.

Cada um dos TPs foi solucionado pelo próprio desenvolvedor do método, que teve acesso somente a informação relativa a posição e ao valor de Log T e da carga hidráulica em alguns pontos (vide tabela D-2, no anexo D). A definição das condições de borda, do domínio de estudo e da forma e nível de parametrização (forma da grade de cálculo) foi feita a critério de cada modelador.

As comparações se fizeram sobre diversos aspectos, dos quais se destacam:

i) A estimação da fdc (função distribuição cumulada) do tempo de trânsito de partículas dispostas em 40 pontos aleatórios do domínio e sua comparação com o tempo “verdadeiro” (i.e. calculado sobre o campo sintético). Os testes visaram acessar não apenas a

capacidade do método para caracterizar corretamente a fdc mas também para caracterizar a dispersão desta, penalizando desta forma tanto as muito confiantes quanto as muito dispersivas. O mesmo tipo de teste foi feito com relação ao percurso feito por estas partículas.

ii) A caracterização do campo de Log T através de comparações sobre todo o domínio definido pelo modelador com a “verdade” de Log T e da carga hidráulica bem como de comparações dos variogramas médios calculados sobre 600 pontos na totalidade das simulações realizadas com o variograma exaustivo calculado sobre a “verdade”.

As principais conclusões dos testes problemas apresentados por Zimmerman et al. (1998) são:

- A magnitude da variância dos campos de Transmissividade propostos, que chegou a ser 10 vezes maior do que a variação idealmente aceitável aos métodos lineares, não pareceu ser um problema para estes.
- A não estacionaridade do campo de Transmissividade “verdadeiro” ou a presença de anomalias como zonas de fraturas com alta permeabilidade foram problemáticas aos métodos lineares.
- A importância da seleção correta do variograma do campo de Log T, ou a habilidade do método de iterativamente otimizar esta informação, teve grandes repercussões no resultado da análise, ou seja, os métodos que pior determinaram o variograma obtiveram pior desempenho. Este é o caso por exemplo das simulações extremamente variáveis do PP no TP1 devido a uma escolha errada do variograma inicial.
- O uso da informação transiente para os métodos que tinham esta capacidade não resultou em grandes mudanças nas soluções, mas isto foi considerado algo específico à maneira como eles foram analisados e aos problemas propostos, uma vez que pouca informação nova podia ser obtida através dos testes de bombeamento fornecidos aos participantes.
- A definição de uma grade mais fina não foi responsável por uma melhor representatividade da variabilidade, ou seja os métodos com melhor resultados não foram os de parametrização mais fina.

Além destas conclusões mais quantitativas, constatou-se que outros 3 fatores estão intimamente incluídos nestas comparações :

1. A teoria de base do método
2. As limitações do programa utilizado independente da base teórica do mesmo,

e acima de tudo

3. A experiência, o esforço e o tempo despendido pelo utilizador do método em cada TP.

Em relação ao objetivo do exercício (TP), a saber: determinar qual técnica inversa melhor se adapta para fazer previsões probabilistas do transporte de solutos num aquífero extremamente variável cujas propriedades hidrogeológicas são incertas, Zimmerman et al. (1998) conclui que quatro métodos – Linearizado Semi-Analítico, Máxima Verosimilhança, Pontos Pilotos e Simulação Sequencial – são aproximadamente equivalentes para os problemas específicos propostos.

Figura III-8: Correlação entre erros em carga hidráulica com erros em Log T para todos os métodos em todos os TPs, considerando todos os pontos dentro do domínio simulado por cada método. (de Zimmerman et al. 1998)

III.3.2 Descrição dos dados reais utilizados

A metodologia proposta foi testada sobre um conjunto de simulações equiprováveis baseado numa realidade de terreno complexa, onde já se dispunha da quantidade mínima de informação necessária a solução do problema inverso pelo método dos Pontos Pilotos. Os dados analisados referem-se ao Projeto Piloto de Isolamento de Rejeitos, conhecido como 'WIPP' (Waste Isolation Pilot Plant). Os dados sintéticos anteriormente descritos visaram gerar sinteticamente as feições e distribuição dos dados de WIPP a diferentes níveis de complexidade. Este é o primeiro local de armazenamento de rejeitos radiativos de longo termo a começar a ser utilizado nos Estados Unidos, ele se localiza no sul do Novo México (EUA) como mostra a figura III-9 (veja também <http://www.wipp.carlsbad.nm.us/>).

Um corte geológico, visto na figura III-10, mostra a localização do repositório de material radiativo dentro de uma espessa camada de sal - Formação Salado -, acima da qual se localiza a Formação Rustler. Esta formação é composta de quatro membros separados por litologia, Halita, Siltito, Anidrita e Dolomita, esta última chamada de Dolomita de Culebra, tida como a mais transmissiva e lateralmente contínua unidade hidrogeológica, e portanto a mais importante condutora no caso de um eventual vazamento radiativo.

Baseado em dados de afloramentos, amostras de poço e estudos de fraturas, o Dolomito de Culebra foi caracterizado localmente como um meio fraturado, com uma variação de transmissividade em direção oeste, que acompanha o aumento de fraturamento, como mostra a figura III-11. A carga hidráulica, como mostra a figura III-12, indica um fluxo predominante na direção sul dentro do quadrado que delimita a região de armazenamento, enquanto ao sul desta, a direção predominante é oeste.

Vários modelos hidrogeológicos visando uma melhor compreensão desta formação foram realizados desde 1986 (LaVenue & Pickens 1992, LaVenue et al. 1995), o mais recente (LaVenue 1998), e que agrega a informação de todos os demais, foi o que se utilizou aqui.

O Dolomito de Culebra é considerado confinado acima e abaixo por camadas pouco permeáveis, por isso não se considerou fluxos verticais neste modelo. O modelo numérico bidimensional adotado considera também todas as demais informações relevantes, como por exemplo a variação de salinidade da água e os dados sobre o armazenamento e testes de bombeamento.

Os dados de transmissividade indicam uma distribuição bi-modal - vide histograma na figura III-13 com mediana a -5.95 ($\text{Log}_{10} \text{ m}^2/\text{s}$)-, isto indica que a utilização de duas populações dentro do domínio é mais representativa (LaVenue 1998). Por isso o modelo

numérico (GRASP-INV v2.0) começa com uma simulação inicial em duas categorias, separadas pela mediana, representando zonas de fraturamento diferentes, uma de alta transmissividade e outra de baixa.

A simulação inicial se produziu primeiramente como uma simulação de indicatrizes, e em seguida uma simulação gaussiana para cada uma das categorias (ver LaVenue 1998 ou um resumo das técnicas no anexo B). Uma vez simulado a qual categoria pertence cada uma das malhas, com a definição de um grupo de indicatrizes para as altas transmissividades e outro para as baixas, faz-se uma simulação gaussiana para cada categoria considerando todos os dados.

Este campo inicial condicionado aos dados de Log T será então modificado para um ajuste das cargas hidráulicas seguindo as indicações do § III.2.5.

Foram realizadas 100 soluções deste problema inverso. Cada uma delas partindo da definição de um único variograma das indicatrizes, que define a probabilidade de mudança em função da distância, e em dois variogramas realizados sobre os dados normalizados -para ter média zero e variância unitária - para a simulação gaussiana dos dois grupos de transmissividade.

O variograma das indicatrizes utilizado foi esférico com alcance de 2 quilômetros e patamar de 0.25, já o variograma esférico das altas transmissividades teve patamar de 0.95, alcance de 5.9 quilômetros e efeito de pepita de 0.05, enquanto o variograma para as baixas transmissividades teve patamar de 0.89, alcance de 2.1 quilômetros e efeito de pepita de 0.11.

Figura III-9 : Localização de WIPP a Sudoeste dos Estados Unidos da América (de LaVenue et al. 1995).

Figura III-10 : Corte geológico na direção SO – NE mostrando o nível do repositório radiativo e da formação Culebra cujo comportamento foi simulado pelo modelo real (de LaVenue et al. 1995).

Figura III-11 : Transmissividades em Log_{10} Krigadas a partir de um variograma linear no Dolomito de Culebra à partir dos dados disponíveis (+) .

Figura III-12 : Carga hidráulica no dolomito de Culebra, isolinhas em metros (de LaVenu et al. 1995).

Figura III-13 : Histograma dos dados de transmissividade disponíveis na formação Culebra.

IV RESULTADOS E DISCUSSÕES

Começamos por analisar as diferentes decomposições produzidas pela ACPD sobre o TP1, ou seja, o mais simples dos “testes problema” no sentido de ser o mais próximo de uma realidade plausível de ser descrita por modelos lineares.

IV.1 Resultados dos testes sobre TP 1

Na tabela IV-1 encontra-se uma síntese das características de construção e dos resultados de cada um dos 6 métodos aqui utilizados. É interessante notar que não só a escolha do tamanho da malha, definindo o volume elementar representativo, bem como a extensão modelada, variam entre os métodos comparados.

Tabela IV-1 - Características dos dados originais e reamostrados para TP1

Método ⁺	TF	SF	CL	MV	SS	PP
Número simulações equiprováveis	100	50	100	100	100	50
Número total de malhas	3648	16384	1216	4864	3240	2068
Porcentagem de malhas no domínio	89%	100%	100%	24%	90%	82%
Número efetivo de malhas utilizado	240	256	143	304	210	132
Número de malhas (% da inicial) após reamostragem	5.9%	1.6%	11.8%	1.5%	5.8%	5.3%
Número de Linhas/Colunas originais	64 / 64	128 / 128	32 / 38	148 / 136	60 / 60	44 / 57
Número Linhas/Colunas reamostradas	15 / 16	16 / 16	11 / 13	16 / 19	14 / 15	12 / 11
Tamanho original da malha na direção X (metros) (leste)	281.25	125	500	250	300	de 200 a 700
Tamanho original da malha na direção Y (metros) (norte)	296.88	148	500	250	300	de 200 a 850
Tamanho reamostrado da malha na direção X	1125.0	1000	1500	1000	1200	≈750
Tamanho reamostrado da malha na direção Y	1187.5	1184	1500	1000	1200	≈750
Erro quadrático em carga hidráulica maior 1 metro (% de simulações)	55%	32%	1%	não disponível	0%	10%
Amostras por alcance do variograma	2.5	3.5	1	3.3	2.3	3.5
Patamar do variograma exponencial*	0.79	2.41	0.29	1.26	1.28	1.52
Alcance do variograma exponencial* (metros)	4074	5503	2142	4730	3995	3767

+ TF – Transformada de Fourier, SF – Simulação Fractal, CL – Cokrigagem Linear, MV – Máxima Verossimilhança, SS – Simulação Sequencial, PP – Pontos Pilotos.

*Para o variograma sobre os dados verdadeiros o ajuste indica: patamar $\log T = 1.66[m^2/s]$ e alcance = 2808[m]

Como estamos interessados especificamente em comparar as diferentes estruturas do campo de Log T condicionado, definiu-se uma área de inter-comparação comum a todos os métodos[†] que é representada na tabela como o domínio.

Para o cálculo dos parâmetros do variograma experimental final (figura IV-1), tomou-se a média sobre o conjunto de realizações equiprováveis a partir de 600 pontos aleatórios em cada simulação. O erro quadrático da carga hidráulica reflete a habilidade de cada método em ajustar a estrutura da transmissividade dentro da solução numérica para minimizar o erro nos pontos de controle. Esta solução numérica implica a escolha das condições nas bordas e do algoritmo numérico adotado. Pode ocorrer que o erro apresentado seja devido aos limites do algoritmo, que não estão entretanto necessariamente ligadas aos limites do método em si.

Figura IV-1 Variograma experimental de todas as simulações feitas por cada método inverso sobre TP1 (de Zimmerman et al. 1998).

Uma das razões que nos levou a escolher a ACPP para a comparação entre métodos foi que esta se utiliza não somente da distribuição espacial de cada parâmetro mas também do volume relativo à esta informação, de maneira que a diferença de tamanho entre as diferentes grades é considerada na comparação.

[†] No trabalho de Zimmerman et al. (1998) utilizando os mesmos dados, comparou-se toda a região modelada por cada método com a realidade sintética. Pensando na comparação entre os métodos, isto pode ter prejudicado quem simulou sob uma extensão maior, compreendendo posições mais distantes dos pontos de condicionamento.

IV.1.1 Amostragem estatística e reamostragem

Definiu-se uma nova amostragem sobre os dados devido ao erro potencial que decorre de uma amostragem estatística insuficiente da matriz de covariância C . Segundo Rousseeuw & Zomeren (1990) deve-se ter pelo menos 5 vezes, e segundo Obled (1979) 10 vezes mais amostras – representadas pelas simulações - do que parâmetros para que exista uma amostragem suficientemente estável da matriz de covariância.

Esta nova amostragem visou gerar uma grade regular consistindo, em cada direção, de 2 a 4 vezes menos parâmetros em relação aos dados originais. A escolha de tomar uma malha e saltar as próximas duas em cada uma das direções foi feita em função das disponibilidades de simulações e do alcance do variograma experimental calculado, buscando obter ao menos duas amostras dentro do alcance (vide figura IV-2 para o resultado final de todos os métodos e figura IV-3 para um detalhe do método CL). A escolha da grade regular foi feita por ser esta a que melhor se adapta à análise ACPP, no caso de se dispor de dados regularmente espaçados. Como mostraram os estudos teóricos descritos em Braud (1990).

Procurou-se desta maneira reduzir os problemas de amostragem estatística sem suavizar a variação encontrada na passagem de uma malha para a sua vizinha. Esta suavização aconteceria caso se decidisse adotar por exemplo uma grade única para todos os métodos, interpolando os valores na passagem para esta nova grade. Neste caso, analisar-se-ia a dispersão do hiperelipsóide regularizado por algum tipo de mudança de escala relativa à passagem para uma grade única. Optou-se por analisar uma amostragem do hiperelipsóide sem regularização mesmo não havendo uma correspondência perfeita do posicionamento dos parâmetros entre os diferentes métodos, pois o que nos interessa é destacar informações globais do envelope exterior da dispersão dos parâmetros, e não informações precisas da posição dos parâmetros suavizados.

A questão da amostragem estatística na decomposição ACPP aparece principalmente no caso em que se deseje uma boa diferenciação entre os diversos autovalores. Como só se ateve aqui a interpretar o primeiro autovetor, a determinação precisa de cada autovalor não é tão importante, uma vez que o conjunto dos autovalores contém a mesma informação que os dados originais. Por outro lado, assim que uma matriz de covariância é estimada sobre uma amostragem finita de N elementos, existe uma tendência sistemática de superestimação do primeiro autovalor e, conseqüentemente, uma subestimação dos demais (Von Storch & Hannoschöck, 1985), o que leva a uma diferenciação mais clara do primeiro autovalor que é o único interpretado separadamente aqui. Portanto, mesmo não se trabalhando com as

amostragens ideais, trabalhar a partir de numa situação numericamente mais estável já é suficiente, uma vez que o interesse não é a interpretação de cada autovetor separadamente.

Buscando uma confirmação numérica da estabilidade da interpretação da ACPP à reamostragem, fez-se para o método CL três análises sobre o mesmo domínio. A reamostragem foi construída a partir de um ponto base no extremo inferior esquerdo do domínio, e a partir deste ponto amostrou-se tomando uma malha a cada três, nas duas direções (leste e norte). As três reamostragens (base 1, base 2 e base 3) diferenciam-se pelo ponto base, de maneira que não há superposição na reamostragem, como pode ser visto na figura IV-3.

Figura IV-2: Posicionamento da reamostragem feita segundo características de cada método

Realizou-se então uma análise ACPP para cada uma das amostragens definindo-se a região de maior incerteza (vide §IV.1.4). Observa-se na figura IV-4 que todas as reamostragens indicam a mesma região, o que indica a robustez da análise em relação a reamostragem.

Figura IV-3 : Três reamostragens para o método CL feitas a partir de três pontos de base diferentes

Figura IV-4: Maior zona de incerteza para o método CL segundo três amostragens contíguas, base1, base2 e base3.

IV.1.2 Decomposição espectral

Além da determinação da zona de maior incerteza, uma outra aplicação da ACPP é a análise comparativa da distribuição energética. O gráfico da distribuição da variância explicativa dos autovalores pelo número de autovalores permite esta análise.

Uma vez que comparamos métodos com 50 e outros com 100 realizações teremos métodos com 50 e outros com 100 autovalores (o número de autovalores é no máximo igual ao posto da matriz C). A fim de apresentá-los no mesmo gráfico transformou-se o número de autovalores para o de percentagem de autovalores utilizados no eixo das abcissas, mesmo sabendo que isto pode distorcer a comparação, adotou-se esta aproximação uma vez que a análise da energia entre os métodos se faz de maneira qualitativa.

Na figura IV-5 podemos ver esta decomposição espectral. Os métodos SS e SF são os mais próximos da decomposição espectral de uma simulação puramente aleatória³, interpreta-se neste caso que a energia é distribuída de maneira mais homogênea entre os autovetores. Nos demais métodos a energia se concentra em menos componentes. A variabilidade neste caso é gerada prioritariamente segundo os maiores eixos do hiperelipsóide, ou seja, preferencialmente segundo as componentes de maior amplitude.

Figura IV-5 : Percentagem de variância explicada pelos autovetores para cada um dos métodos. O método aleatório baseado num conjunto de 100 simulações geradas sem estruturação com a mesma média e variância que os dados de controle.

³ Gerada com a média e a variância dos dados originais (condicionantes) mas sem nenhuma estruturação espacial

Calculamos também a entropia bivariada (ver anexo C e Journal & Deutsch 1993, Delay et al. 1999) das simulações reamostadas como forma de comparar nossas conclusões sobre a distribuição de energia. A figura IV-6 mostra a decomposição média sobre 5 simulações, neste caso a imagem mais energética é a que se aproxima de 1 mais rapidamente. A análise destas figuras mostra que qualitativamente as duas possibilidades de se analisar a distribuição energética indicam consistência na interpretação, ou seja SS e SF são mais energéticos que os demais métodos.

Figura IV-6 : Entropia bivariada média sobre 5 simulações de cada método.

É interessante notar que o cálculo da entropia é feito simulação a simulação e é bastante custoso em tempo de cálculo, já a ACPP permite acessar o mesmo tipo de informação considerando todo o conjunto das simulações. Além disso quando se calcula a entropia bivariada para grades com mais de 400 malhas a energia cresce rápido demais, não permitindo uma diferenciação energética clara entre duas simulações quaisquer, por isso deixamos de utilizar este método na sequência do trabalho.

IV.1.3 Volume do hiperespaço de parâmetros admissíveis

Uma outra comparação entre os métodos pode se fazer com base no volume do hiperelipsóide definido pela ACPP, visto como a integral sob a curva na figura IV-7 e numericamente na tabela IV-2.

Tabela IV-2: Volume do hiperelipsóide representando a dimensão do espaço de soluções aceitáveis caracterizado por cada método.

Método	*SF	SS	TF	MV	CL	PP
Volume Hiperelipsóide	5.8	5.9	8.4	8.7	9.1	53.8

Quanto maior o volume, maior a região de incerteza explorada pelas soluções

equiprováveis, o que não guarda nenhuma relação com a distribuição energética, nem com a probabilidade acumulada (fdc) do tempo de trânsito de partículas. A primeira relacionando mais o tamanho relativo dos eixos do hiperelipsóide e a segunda relacionando mais a continuidade espacial das transmissividades mais altas, como pode-se ver comparando-se as figuras IV-5 e IV-7 com a figura C-3 relativa a fdc de cada método apresentadas no anexo C.

O volume é portanto uma outra indicação de fácil cálculo para uma comparação relativa considerando num único valor uma estimativa do espaço de soluções possíveis definida por cada método para este problema específico. Deve-se ressaltar entretanto que só uma interpretação geral sobre o volume assim definido é possível devido a sensibilidade à densidade da grade escolhida e à influência de poucas simulações anormais no sentido destas estarem fora de uma distribuição normal (vide discussão no §IV.1.5).

Figura IV-7: Distribuição dos autovalores em termos absolutos, indicando sob a curva o volume do hiperelipsóide contendo todas as simulações.

Chama a atenção na figura IV-7 o comportamento do método PP com a definição de um volume pelo menos 6 vezes maior que os demais. Isto ocorreu devido a um excesso de confiança do modelador no método. Ele considerou que a metodologia corrigiria eventuais distorções devido a um erro na escolha de um variograma sob os dados, fazendo com que ele não desse a devida atenção a sua escolha. Entretanto o que aconteceu foi que esta escolha desatenta de um variograma - linear com longo alcance - expandiu a dimensão do espaço de soluções admissíveis. Isto ocorreu pois este método se utiliza da krigagem tanto na definição dos limites de modificações em cada ponto, quanto na propagação das modificações deste ponto aos demais. Assim o variograma utilizado na krigagem foi preponderante às correções trazidas pelos pontos pilotos no decorrer da resolução do problema inverso. Posteriormente à

apresentação destes resultados foi pedido ao modelador refazer os cálculos com uma nova escolha de variograma – desta vez exponencial com alcance menor que anteriormente -, o que fez com que os novos resultados se aproximassem dos demais métodos (vide figura IV-1 “PP com ‘bom’ variograma”). Estes dados entretanto não foram analisados aqui pois só foram realizadas 30 simulações com este novo variograma, o que dificulta demais uma boa amostragem estatística da matriz de covariância.

Vê-se, por esta discussão, a importância de uma decisão criteriosa sobre a estruturação inicial do espaço de parâmetros, uma vez que ela define a dimensão dos espaço de parâmetros admissíveis, juntamente com erro aceitável do modelo.

IV.1.4 Localização espacial da maior incerteza

Sabendo que o autovetor associado ao maior autovalor indica a direção de maior comprimento no hiperelipsóide definido pelos autovetores, o gráfico da contribuição dos parâmetros do modelo neste autovetor indicará qual a posição espacial mais influente na definição da região de incerteza.

Na figura IV-8 pode-se ver a representatividade da região mais incerta para todos os métodos, nela foram plotados num mesmo gráfico somente os parâmetros cujo valor absoluto foi superior a duas vezes o desvio padrão da distribuição do primeiro autovalor para cada método. Esta escolha visou definir estatisticamente os 5% dos autovetores mais influentes, forçando uma diferenciação matematicamente mais clara da região de maior contribuição ao primeiro autovetor. Uma definição visual, qualitativa, desta região poderia ser feita alternativamente.

Pode-se notar que a região onde se concentra a maior contribuição dos parâmetros é a região sem condicionamento de transmissividade a noroeste do domínio, o que permite a estes métodos maior variabilidade local, sem restrição de condicionamento às medidas.

A exceção fica por conta dos métodos TF, SS e menos no SF. Estes métodos tem como característica comum uma menor composição percentual do primeiro autovalor e uma diferença entre o primeiro e o segundo autovalor mais sutil que os demais métodos (vide figura IV-9), com isso a definição desta zona de maior influência fica mais diluída pelos autovalores, principalmente os dois primeiros nos caso do TF e SF. Já para o SS provavelmente também devido as características particulares deste método na geração do campo, ela não chega a definir uma região preferencial de variabilidade - lembrando que SS gera perturbações a cada iteração em todos os pontos de uma grade regular predefinida. Como

neste caso utilizaram-se mais de 100 pontos nesta grade, pode-se supor que a razão do seu comportamento particular esteja ligada a excessiva parametrização adotada em relação aos demais métodos.

Figura IV-8 : Posicionamento da região de maior contribuição no primeiro autovetor para TP1

Figura IV-9 : Composição percentual dos dois primeiros autovalores para TP1

A distribuição espacial das medidas condicionantes e a distância de cada parâmetro a este condicionamento certamente são fatores condicionantes da variabilidade. Analisando entretanto somente a variância de krigagem (figura IV-10), que considera a dificuldade de se interpolar um ponto a partir do variograma e das medidas condicionantes, observam-se zonas

de forte variância condizente com a que é indicada pela ACP, além de uma outra região contígua, a leste do domínio.

Deve-se notar que a ACP se utiliza de dados que passaram por um duplo condicionamento, tanto de Log T quanto de carga hidráulica, e portanto analisa não só a dificuldade de estimação devido a distância dos pontos condicionantes, mas também a metodologia empregada para resolver o problema inverso. Isto permite análises mais específicas ao método empregado e a cada problema específico, onde a informação relevante trazida pela carga hidráulica (ou mesmo outra informação, como geofísica) em relação a dada pelo Log T é variável.

Com relação ao último ponto existem trabalhos (Wen et al. 1996, Capilla et al. 1998) mostrando que a carga hidráulica traz informação relevante à resolução do inverso até um certo ponto, a partir deste ponto não existe mais ganho de informação com a adição de mais informação em carga hidráulica.

A análise da variabilidade pela ACP utiliza concomitantemente toda a informação disponível, o que permite uma definição mais abrangente das causas da incerteza.

Figura IV-10: Variância de krigagem utilizando-se somente os pontos de condicionamento em Log T (indicado por +). Feito com variograma exponencial com alcance de 2808 metros.

A determinação da região de maior variabilidade é portanto não só uma característica

da distribuição espacial das medidas condicionantes, mas também da maneira como o método modifica a informação original dos parâmetros para minimizar a função objetivo.

IV.1.5 Análise Q-fatorial

A análise da inclinação da reta ajustada a cada parâmetro segundo a ordenação dada pelo primeiro fator na análise Q-fatorial (§ III.1.3.1) é resumida na figura IV-11 para os parâmetros cuja inclinação foi maior que 2 vezes o desvio padrão da inclinação de todos os parâmetros, para cada método respectivamente.

Comparando esta figura com a figura IV-8, estabelecida segundo os mesmos critérios estatísticos na análise ACPP, vê-se que pelo menos 5 dos métodos inversos apontam aproximadamente a mesma região de incerteza, com exceção do método CL, que não tem parâmetros dentro deste critério na análise Q-fatorial.

Figura IV-11: Delimitação da região com inclinação superior a duas vezes o desvio padrão das inclinações de cada método.

Analisando entretanto o valor absoluto da inclinação (figura IV-12) vê-se que para CL a variação total da inclinação não chega a ser superior a 2 ($=1-(-1)$) por cento, o que pode ser interpretado como uma indicação que não existe nestes casos nenhum parâmetro que contribua especialmente a incerteza.

Figura IV-12: Inclinação da reta ajustada aos fatores ordenados segundo o primeiro fator dentro da análise Q-fatorial.
Para os métodos a)TF, b)SF, c)CL, d)MV, e)PP, f)SS.

As duas análises ACPP e Q-fatorial neste caso nos levam a conclusões semelhantes:

- Existe uma zona a NW do domínio onde para a maioria dos métodos analisados a incerteza é maior.
- A zona de maior incerteza é também função do método inverso empregado.

IV.1.6 Análise do caráter multinormal das simulações

A ACPP procura os eixos do hiperelipsóide de espalhamento através de mínimos quadrados (equação III-3), a exatidão da representação implica portanto a suposição de uma distribuição multinormal[§] das simulações utilizadas (Preisendorfer 1988; Menke 1984).

Considerando a pequena amostragem estatística, os critérios matemáticos rígidos que definem a multinormalidade não podem ser verificados. Uma aproximação usualmente utilizada em geoestatística é testar a normalidade da distribuição para alguns parâmetros, verificando o caráter normal do histograma ou a dispersão para pares de parâmetros em alguns pontos do domínio.

Na figura IV-13 pode-se observar os histogramas de Log T para alguns dos métodos, na maioria dos pontos analisados a distribuição poderia ser grosseiramente aproximada por uma gaussiana, o que nos indica que a aproximação de normalidade não é tão ruim considerando cada ponto separadamente. Quanto a relação multidimensional, tentou-se abordá-la de duas maneiras.

A primeira procurou caracterizar a normalidade como fez Vasco et al. (1993) (ver metodologia também em Gnanadesikan 1977), que entretanto se baseou numa nuvem de dispersão mais abrangente, pois gerada por Monte Carlo sem restrições de condicionamento e estruturação. A técnica descrita se utiliza da plotagem do Raio Vetor contra o quartil da distribuição de Chi-quadrado, sendo considerada multinormal a distribuição em que este gráfico é bem ajustado por uma reta. O Raio Vector (rv) é definido como $rv = X^t C^{-1} X$, onde X é a matriz de dados já definida no § III-1 e C é a matriz de covariância. O problema que tivemos aqui é que a matriz de covariância no caso dos métodos analisados no TP1, é próxima de singular, de maneira que não podemos invertê-la.

A outra metodologia utilizada visa testar a influência da divergência da normalidade nas análises ACPP e Q-fatorial, tentando estudar o que pode ocorrer quando esta hipótese de multinormalidade não é respeitada. Para isto utilizamos um método robusto do cálculo do volume do hiperelipsóide, ou seja menos sensível a valores extremos. Este método é chamado

[§] A multinormalidade implica que todas as combinações lineares de parâmetros são normais.

“Mínimo Volume do Elipsóide” (MVE) pois determina as simulações que eventualmente aumentam demais o volume do hiperelipsóide, e que podem portando serem consideradas extremas com relação ao resto da nuvem de dispersão. Um desenvolvimento mais detalhado desta metodologia se encontra no anexo E.

Pontos de amostragem do histograma de Log T +
Pontos de controle em Log T ★

a) Histogramas para o método SS

Figura IV-13: Histogramas em alguns pontos para os métodos a) SS, b) CL, c) MV. O número do ponto (Pto #) nos histogramas indica, na planta abaixo à direita, sua localização espacial para aquele método.

Pontos de amostragem do histograma de Log T +
Pontos de controle em Log T ★

b) Histogramas para o método CL

Pontos de amostragem do histograma de Log T +
Pontos de controle em Log T ★

c) Histogramas para o método MV

Lembrando que todas as simulações utilizadas na análise são equiprováveis uma simulação anormal, no sentido de estar muito distante do centro do hiperelipsóide, pode indicar uma zona do hiperespaço de parâmetros possíveis diferente e pouco explorada. Num caso hipotético com duas zonas distintas, pode-se visualizá-la como na figura I-1, a notar, mais precisamente, as duas zonas distintas no eixo dos parâmetros que correspondem à zona hachurada no eixo y.

As implicações possíveis da existência deste tipo de simulação dentro do conjunto equiprovável são:

- 1- A ACPP superestima o volume do hiperelipsóide influenciada por uma observação que foge a normalidade. Com isso o espaço de parâmetros possíveis explorado quando se fazem resimulações é maior, podendo conter também zonas que não satisfaçam o modelo (veja novamente a figura I-1, por exemplo entre as duas zonas possíveis de parâmetros).
- 2- Por outro lado uma nova zona do espaço admissível dos parâmetros poderá ser explorada após a separação do conjunto inicial de simulações em dois conjuntos distintos de soluções possíveis. Considerando por exemplo resimulações utilizando como campo médio não mais a média global de todas as simulações, mas o baricentro de cada uma destas regiões definidas por seu subconjunto de simulações.

Procurou-se então a partir da determinação destas simulações anormais por MVE recalcular-se o volume do hiperelipsóide por ACPP sem estas simulações, a fim de confirmar que o decaimento do volume é substancialmente maior para estas simulações do que para as demais.

Na figura IV-14 apresenta-se para o método CL o cálculo das distâncias de Mahalanobis e Robusta (vide anexo E), indicando que a simulação de número 25 é uma simulação anormal pela indicação robusta enquanto as de número 32 e 84 poderiam eventualmente serem consideradas como anormais pois estão no limite dos 2.5% extremos da distribuição a partir do centro do hiperelipsóide calculado de maneira robusta.

Na figura IV-15 apresenta-se o volume do hiperelipsóide calculado pela ACPP com a eliminação de algumas simulações (cujo numero é dado no eixo das ordenadas) do conjunto inicial.

Como se pode comprovar, o volume diminui mais fortemente com a eliminação das simulações indicadas pelo MVE do que para outras simulações tomadas aleatoriamente. Isto indica que mesmo com uma relação entre quantidade de parâmetros e simulações

desfavorável (imposta pelos dados de que dispomos) é possível, após reamostragem e análise MVE, detectar e explorar duas regiões não contíguas do hiperespaço de parâmetros possíveis.

Figura IV-14: Distância de Mahalanobis e Robusta em relação ao centro do hiperelipsóide. As simulações de número 25, 32, 84 são extremas segunda a distância robusta para o método CL.

Figura IV-15: Variação do volume definido pelo hiperelipsóide com a eliminação de uma, duas ou três simulações. O eixo das abscissas indica qual dentre as cem simulações disponíveis foi retirada para o cálculo do volume indicado nas ordenadas.

Fazendo o mesmo tipo de análise para os demais métodos tem-se a indicação de 3 a 6 simulações que se situam além da nuvem contendo 97.5% dos casos.

Este parágrafo nos mostrou que através de uma estimativa robusta da distância em relação ao centro da nuvem de dispersão definida pelo hiperelipsóide pode-se detectar simulações que comprometem a multinormalidade do conjunto. A existência de tais soluções pode levar a uma superestimação da incerteza de um lado e a exploração de uma nova região do espaço de parâmetros possíveis de outro.

IV.1.7 Testes numéricos de resimulação

A fim de deixar mais claro cada um dos passos intermediários necessários à realização de uma resimulação segue um fluxograma esquemático que reflete também os diversos programas de computador que foram desenvolvidos ao longo desta tese. Acompanha uma aplicação com figuras referentes ao método CL no TP1.

- 1) Preparação dos dados para a análise ACPP com a escolha da reamostragem a ser utilizada em função da disponibilidade de simulações equiprováveis. Vide figura IV-3 “reamostragem base 1”. Cálculo também da média e variância sobre a grade original para posterior utilização na resimulação. Vide figura IV-16.
- 2) Realização da análise ACPP com a determinação dos autovetores e seus autovalores associados. Interpretação dos resultados sobre a incerteza.
- 3) Estudo variográfico dos autovetores com a definição do variograma (vide § III.1.2.1.d) que será utilizado para a interpolação de todos os autovetores na mesma grade que os dados originais. Vide figura III-2 para os 10 primeiros autovetores.
- 4) Interpolação dos autovetores sobre a grade original através de Krigagem ordinária sobre os 4 pontos mais próximos utilizando o variograma definido no item 3.
- 5) Definição do percentual da variância original a ser retido com o corte aos K primeiros autovetores e escolha da variabilidade desejada na resimulação pela inclusão ou não do ruído branco (o termo $\varepsilon(\xi, \underline{x})$ na equação III-23). Caso se deseje uma resimulação condicionada deve se escolher também o desvio aceito em cada ponto de controle (o termo σ_j na equação III-24 e III-25).
- 6) Realização da resimulação com rejeição das tentativas que não satisfazem o condicionamento. Vide figura IV-17 b para $\varepsilon(\xi, \underline{x}) = 0$ e $\sigma_j = 1.3$ com 99% da variância retida nos K primeiros autovetores.

A diferença observada entre a simulação original e a resimulada, respectivamente representadas na figura IV-17a e 17b, decorre neste caso do ajuste automático do variograma por mínimos quadrados, o que é uma característica particular do método CL. Este ajuste levou a não consideração de alguns pontos com valores numéricos distantes da média geral dos valores condicionantes, vide os símbolos *, †, X na figura IV-18.

Considerou-se entretanto que estes pontos deveriam ser considerados na resimulação pois contém informação relevante, principalmente por estarem caracterizando zonas de

poucos dados. Esta discrepância local entre o campo médio e os valores condicionantes dificulta o condicionamento na resimulação ao gerar diferenças entre estes campos que chegam em alguns pontos a ser superiores a duas vezes o desvio padrão em Log T, vide figura IV-18 conjuntamente com IV-16b. Por este motivo o limite de aceitação de σ_j utilizado passou de um fator multiplicativo do desvio padrão a cada ponto para um valor fixo** de 1.3 Log T, a fim de permitir que o condicionamento tivesse uma margem de aceitação mais larga ao redor da média (vide equação III-24).

Observa-se nas figuras IV-17 e IV-19a,b,c que a resimulação condicionada alterou as feições originais, modificando também o histograma dos resíduos no sentido de diminuir as grandes discrepâncias com os pontos de condicionamento. Isto se realiza de maneira mais fácil quando deixa-se uma maior margem de manobra para a resimulação, realizando o corte a 95% (IV-19c). Estas diferenças se repercutem mais significativamente em algumas regiões, vide figuras IV-17a e 17b na região central ao norte, aproximando a resimulação dos valores condicionantes. Isto é um resultado interessante, ainda mais com este valor a princípio elevado de aceitação da diferença entre a média e o valor resimulado!

Como dito anteriormente, a utilização do ruído branco para completar a variância descartada no corte aos K primeiros autovetores, segundo a equação III-24 pode levar a geração de resimulações muito energéticas. Na figura IV-20 vê-se duas resimulações com adição do ruído branco considerando no item a) um corte com K autovetores representando 95% da variância original e adição dos 5% restantes através de um ruído branco com esta variância, a resimulação neste caso é visivelmente muito energética; no item b) representa-se somente 95% da variância, neste caso pode-se considerar que a resimulação filtra uma parte das variações de pequena escala; no item c) representa-se 95% da variância mais 5% contidos num único autovetor extra (vide equação III-26 no §III.1.2.2), com isso pode-se obter a mesma variância que o processo original sem a geração de imagens muito energéticas.

Se for estipulado como objetivo a obtenção de resimulações condicionadas que tenham, num conjunto de realizações, a mesma variância que as simulações, então a melhor maneira será utilizar, ou a maneira proposta na equação III-26, ou aumentar para pelo menos 99% de representatividade nos autovetores mantidos.

Além destas maneiras já discutidas de se realizar a resimulação uma outra integrando a solução de um sistema de equações e uma certa aleatoriedade foi imaginada, entretanto por falta de tempo para seu desenvolvimento ela foi deixada para um trabalho posterior.

** Este limite foi definido por tentativa e erro em função da obtenção de condicionamento, sendo descartados os limites que após 5000 conjuntos aleatórios testados não possibilitaram o condicionamento.

Figura IV-16: Para o método CL no TP1: a) Campo médio sobre as 100 simulações na escala de cinza- e valor nos pontos de controle nos símbolos. Notar que no símbolo quadrado estão representados todos os tons de cinza, indicando um condicionamento somente parcial deste método. b) Desvio padrão sobre as 100 simulações. Todos os valores em Log T.

a) Uma simulação original

b) Uma resimulação

Figura IV-17: a) Uma simulação original método CL; b) Resimulação feita com 99% de variância retida, sem adição de ruído branco e com condicionamento aceitando desvios de até ± 1.4 Log T. Notar que o condicionamento na resimulação induziu maior proximidade com os valores condicionantes (malhas mais claras ao norte e ao centro), regiões mal condicionadas nas simulações originais.

Figura IV-18: Diferença entre valor médio sobre 100 simulações e valores condicionantes

Figura IV-19: Histogramas do resíduo entre dados condicionantes e : a) simulação original , b) resimulação a 99% variância, c) resimulação a 95% da variância.

a) Resimulações com corte a 95% e ruído branco completando 5% de variância

b) Resimulações com corte a 95% sem adição de ruído branco

c) Resimulações com corte a 95% com adição de 5% como mais um autovetor

Figura IV-20: Duas resimulações feitas com diferentes maneiras de adicionar a variância descartada no corte a K autovalores para: a) Corte a 95% + 5% ruído branco, b) Corte a 95%, c) Corte a 95% + 5% como um autovetor extra.

Escolhemos o método SS como exemplo para explorar outros detalhes da elaboração da resimulação pelo bom ajuste que este método conseguiu nos pontos de controle em contraste ao método CL citado anteriormente.

Pode-se observar na figura IV-21 o bom ajuste expresso pelos baixos resíduos do campo médio em relação aos pontos de controle (item a), bem como a feição característica do desvio padrão para este método (item b) fruto da metodologia adotada (vide § III.2.6) e no item c, um exemplo de simulação que servirá como termo de comparação visual com as resimulações.

A possibilidade de explorar o hiperespaço de parâmetros em busca de novas soluções para o problema inverso por resimulação é certamente limitada, uma vez que esta está restrita a variar, ou o centro do hiperelipsóide através da mudança do campo médio, ou a dimensão do mesmo variando o comprimento dos eixos do hiperelipsóide, a direção destes eixos uma vez calculada é mantida fixa.

Dada entretanto a rapidez com que se realiza a exploração deste espaço pela resimulação, esta possibilidade de exploração direcionada do espaço de parâmetros pode ser interessante por duas razões:

- Em busca de outras simulações que tenham a possibilidade de responder aos critérios de condicionamento em Log T gerando posteriormente soluções do problema inverso
- Como uma maneira de conhecer as limitações das simulações iniciais face a novos dados de condicionamento ou novos critérios de aceitação.

Para explorar o espaço de parâmetros além dos limites do hiperelipsóide inicial, pensou-se em explorar o termo aleatório "A" na equação III-23, que define a variância das resimulações através do dimensionamento dos eixos do hiperelipsóide. A princípio este termo é gerado com distribuição uniforme^{††} dentro do intervalo $[-\sqrt{3\lambda_k}, \sqrt{3\lambda_k}]$ para que as resimulações tenham, em esperança num conjunto de realizações, a mesma variância que as simulações. Este termo poderia então passar a variar entre $[-\sqrt{4\lambda_k}, \sqrt{4\lambda_k}]$ caso se deseje explorar uma zona maior do espaço de parâmetros, ou $[-\sqrt{\lambda_k}, \sqrt{\lambda_k}]$ no caso de ser interessante restringir a busca nas proximidades das simulações iniciais.

Na figura IV-22 vê-se três grupos de duas resimulações para o método SS representando estas três possibilidades. Todas elas foram ajustadas com um erro máximo nos

^{††} Uma variação gaussiana com variância equivalente praticamente não altera a distribuição final da variável resimulada.

pontos de controle de $0.5 \log T$ e a recomposição feita a partir de um corte a 99% da variância nos autovetores. Percebe-se a existência de uma diferença clara entre o uso de uma variância menor (IV-22 a) com uma imagem mais suave, e as duas outras possibilidades mostradas (IV-22 b, c), estas mais semelhantes entre si. Como se vê, o uso de uma variância superior a necessária para obter em esperança a mesma variância não alterou as imagens de forma considerável. Entretanto o esforço computacional despendido para encontrar estas soluções foi bem superior, como indica o número de resimulações recusadas para a obtenção de duas resimulações condicionadas: Zero para a resimulação com A variando a $\pm \sqrt{\lambda_k}$, 53 para a resimulação com A variando a $\pm \sqrt{3\lambda_k}$, e 3373 vezes para a resimulação com A variando a $\pm \sqrt{4\lambda_k}$. Note-se que neste último caso o tempo de cálculo num PC com pentium a 166Mhz foi de 13 minutos, enquanto para as outras foi de segundos.

O custo implicado numa busca de soluções num hiperespaço maior –fator multiplicativo de λ maior - e os benefícios que podem daí decorrer devem ser analisados caso a caso. Enquanto no exemplo citado para SS, onde o ajuste inicial das simulações é satisfatório e a variância dos parâmetros pequena, tem-se dificuldade de se encontrar resimulações condicionadas, para o método CL ocorre o inverso. Ou seja, o ajuste inicial é ruim e para um ajuste a $1.3 \log T$ a 99% da variância nos autovetores, o número de resimulações recusadas, é invertido em relação ao caso precedente: 166 tentativas para $\pm \sqrt{4\lambda_k}$, 4449 para $\pm \sqrt{3\lambda_k}$ e mais de 5000 (não convergiu segundo critérios de variância permitido) para $\pm \sqrt{\lambda_k}$.

A partir destes dois exemplos vê-se que existem vantagens e desvantagens de aumentar o hiperespaço de busca de soluções, que dependem do ajuste inicial e do ajuste possível nas resimulações.

Pode-se interpretar esta diferença considerando que o método SS encontrou um mínimo da função-objetivo pronunciado a partir da estruturação dada a seus parâmetros, e portanto as regiões vizinhas não satisfazem tão bem ao condicionamento, enquanto CL com a sua estruturação, ainda está num patamar de ajuste da função-objetivo mais grosseiro, onde outras boas soluções alternativas com esta estruturação se localizam mais distantes da média inicial das simulações.

Para se ter uma idéia da variabilidade gerada num conjunto de resimulações apresenta-se na figura IV-23 a diferença entre um conjunto de 100 simulações e 100

resimulações para a média, o quartil^{§§} de 25% e o de 75%. Para facilitar a visualização são mostrados somente alguns pontos aleatoriamente distribuídos que foram numerados e apresentados como uma curva contínua, mesmo se eles representam pontos dispersos e não contíguos no domínio espacial.

A interpretação destas curvas indica que a diferença nestes três pontos da distribuição é baixa – inferior a 0.3 em Log T- para todos os métodos exceto para o PP. Neste caso devido a grande variabilidade gerada por este método neste TP (veja discussão no §IV.1.3).

Pode-se observar também que efetivamente a diferença da esperança de cada malha sobre um conjunto de simulações e de resimulações é próxima de zero.

^{§§} O quartil indica o valor em que a fdc alcança uma certa porcentagem dos dados. Por exemplo se o quartile de 25% ≈ 2.3 então 25% das amostras são inferiores a 2.3.

Figura IV-21: Para o método SS no TP1: a) Campo médio sobre as 100 simulações na escala de cinza- e valor nos pontos de controle nos símbolos; todos os valores em Log T. b) Desvio padrão sobre as 100 simulações. c) Uma simulação original.

a) Resimulação com variância menor que simulação

b) Resimulação com mesma variância que simulação

c) Resimulação com variância maior que simulação

Figura IV-22: Duas resimulações mostrando a variação das dimensões do espaço de busca do hiperelipsóide a partir da utilização do termo aleatório no intervalo: a) $\pm \sqrt{\lambda_k}$, b) $\pm \sqrt{3\lambda_k}$ c) $\pm \sqrt{4\lambda_k}$. Todos os valores em Log T resimulados com um corte a 99% da variância total.

Figura IV-23: Diferença para o quartil 25% (dif25), a média (dif med) e o quartil 75% (dif75) calculadas entre 100 simulações e 100 resimulações, para os diferentes métodos.

IV.1.8 Aplicação da resimulação para ajuste da piezometria de TP1

A possibilidade de utilização das resimulações diretamente como uma possível solução do problema inverso foi testada através da solução do problema direto^{§§}.

Para homogeneizar a comparação estipulou-se o domínio do modelo como o domínio já definido para a inter-comparação, as condições limites foram escolhidas então diretamente a partir dos dados de carga hidráulica disponíveis inicialmente ao participantes do TP1, tomou-se, como fizeram todos os métodos, condições de potencial imposto, ou seja condições de contorno de Dirichlet. Obtiveram-se assim para cada um dos métodos sob as mesmas condições, 10 soluções diretas para as simulações produzidas para o TP1 e 10 para as resimulações produzidas a partir destas.

Na figura IV-24 tem-se os resultados médios obtidos para o erro médio(e_1), o erro absoluto, quer dizer em módulo (abs), e o erro quadrático (e_2) da carga hidráulica, somente nos pontos de controle, e na figura IV-25 a velocidade máxima média. Estas figuras nos mostram a pequena variação média entre as soluções em carga hidráulica obtidas a partir das simulações originais (descritas somente pelo Nome) e a partir das resimulações (descritas por Nome-acpp). Como para cada método separadamente observa-se que as linhas são paralelas, conclui-se de um comportamento equivalente entre os dois grupos de simulações, quer dizer, ambas satisfazem os critérios de erro adotados de maneira equivalente.

Na figura IV-26, tem-se um exemplo relativo ao método MV da variabilidade que pode ocorrer entre campos no resíduo em carga hidráulica entre diferentes campos de Log T, simulados pelo inverso geoestatístico e pelas resimulações.

Analisando-se entretanto o comportamento global destas figuras observa-se que existe uma grande variabilidade entre os métodos. Percebeu-se que ela não está associada somente a capacidade do método em encontrar um bom campo de Log T, mas também no acoplamento dado por cada método entre a resolução numérica do fluxo e a determinação do domínio modelado com suas condições de borda.

Assim não se considerou possível realizar-se uma comparação entre os métodos a partir de um mesmo domínio com as mesmas condições ao limite, uma vez que o campo de Log T de cada método proposto foi gerado para ajustar aos dados na suas condições de borda. A comparação apresentada deve ser vista portanto de forma mais qualitativa.

^{§§} Desenvolveu-se para isso um programa de interface que gerou as condutividades correspondentes a cada malha do programa VisualModflow que realizava então a solução do problema direto.

Figura IV-24: Erro médio em carga hidráulica nos pontos de controle, e1=erro médio, abs= erro médio absoluto, e2= erro médio quadrático.

Figura IV-25: Velocidade máxima média segundo a solução do problema direto e o método inverso utilizado para a obtenção do campo de Log T.

Figura IV-26: Erro de ajuste da carga hidráulica para o método MV em 10 simulações para TP1 (numeradas) e 10 resimulações (acpp 1...10).

IV.2 Resultados dos testes sobre TP 4

A elaboração sintética deste TP visou gerar feições de maior condutividade hidráulica com dimensões relativamente pequenas, dentro de um meio menos condutivo de maior dimensão (vide anexo C para as feições do campo sintético). Geologicamente isto representa um cenário de paleocanais com uma sedimentação condutiva cortando uma outra formação geológica menos condutiva. No variograma médio estas feições aparecem na rápida subida até o patamar de variância como pode ser visto na figura IV-27.

Os participantes deste TP dispunham, neste caso, além da informação de 41 pontos de Log T e 41 de carga hidráulica, de dados relativos a testes de bombeamento sintéticos, os dados referentes a realidade sintética gerada estão na tabela C-1 no anexo C. Diferentemente do TP1, aqui os dados relativos à carga hidráulica foram gerados considerando também uma zona de recarga que poderia ser interpretada a partir da análise dos 41 pontos de medidas da carga hidráulica. Na tabela IV-3 apresentam-se os dados de construção original das simulações e os dados das reamostragens utilizadas.

Devido a drástica redução na quantidade de parâmetros analisada – após a reamostragem analisa-se em alguns casos menos de 0.1% dos parâmetros originais– é possível que as interpretações contenham algum artifício aleatório que desapareceria numa amostragem maior.

Figura IV-27: Variograma experimental médio de todas as simulações feitas por cada método inverso sobre TP4 (de Zimmerman et al. 1998).

Tabela IV-3 - Características dos dados originais e reamostrados para TP4

Método ⁺	TF	SF	CL	MV	SS	PP
Número simulações equiprováveis	50	50	100	100	75	75
Número total de malhas	16384	16384	1764	24264	3600	6724
Percentual de malhas no domínio	65%	65%	70%	60%	78%	66%
Número efetivo de malhas utilizado	99	99	88	192	85	72
Número de malhas (% da inicial) após reamostragem	0.6%	0.6%	5%	0.07%	2.3%	1%
Número de Linhas/Colunas originais	128 / 128	128 / 128	42/42	162 / 152	60 / 60	82 / 82
Número Linhas/Colunas reamostradas	9/10	9/10	-	12 / 16	-	11 / 12
Tamanho original da malha na direção X (metros) (leste)	234.4	234.4	600	200	400	de 250 a 650
Tamanho original da malha na direção Y (metros) (norte)	234.4	234.4	600	250	400	de 250 a 1150
Tamanho reamostrado da malha na direção X	2578.4	2578.4	2400	1600	2400	de 2000 a 5200
Tamanho reamostrado da malha na direção Y	2578.4	2578.4	2400	2000	2400	de 2000 a 9300
Amostras por alcance do variograma	1.33	1.94	1.02	0.57	0.88	2.03
Patamar do variograma exponencial*	6.28	3.98	2.12	1.97	2.09	2.99
Alcance do variograma exponencial* (metros)	3320	2715	2128	1046	1497	3044

+ TF – Transformada de Fourier, SF – Simulação Fractal, CL – Cokrigagem Linear, MV – Máxima Verosimilhança, SS – Simulação Sequencial, PP – Pontos Pilotos.

*Para o variograma sobre os dados verdadeiros o ajuste indica, considerando o ajuste de uma função exponencial um patamar de $\text{Log } T = 2.18[\text{m}^2/\text{s}]$ e alcance = 2063[m]; e considerando o ajuste de uma função de Bessel um patamar de $\text{Log } T = 2.15[\text{m}^2/\text{s}]$ e alcance = 1400[m]

IV.2.1 Amostragem estatística e reamostragem

A definição da amostragem neste TP foi mais difícil pois os variogramas indicam numericamente um alcance menor que no TP1 (vide figura IV-27 e figura IV-1). Neste caso a amostragem deve tentar equilibrar duas relações que apontam direções opostas : número de simulações por amostragem dos parâmetros e número de parâmetros por amostragem do alcance do variograma. A primeira, limitada pelo número fixo de simulações disponíveis, indica que quanto menos parâmetros melhor a amostragem global sobre o domínio, já a segunda, limitada pelo alcance do variograma nas simulações, indica que quanto mais parâmetros incluir melhor a representatividade do variograma (e seu alcance). Se no TP1 os dados permitiam uma melhor definição do alcance do variograma com os dados amostrados, no TP4 isto não acontece para alguns dos métodos. Com isso no TP4, adotou-se uma relação de compromisso diferente para cada método na escolha da reamostragem, como pode ser visto na tabela IV-3 e na figura IV-28 – a notar que SS e LC simularam sobre uma grade rotacionada de aproximadamente 45 graus em relação aos eixos -.

Em casos futuros, o ideal será poder ou obter-se mais simulações para começar a análise, principalmente quando o alcance do variograma é relativamente pequeno em relação ao tamanho do domínio, ou alternativamente diminuir o tamanho do domínio de interesse, considerando-se que o tamanho da grade resta fixo uma vez que é a escolha 'a priori' que melhor representa a realidade.

T2759

Figura IV-28: Amostragem realizada sobre TP4 para todos os métodos

IV.2.2 Decomposição espectral

Na figura IV-29 temos a decomposição espectral relativa a TP4, observa-se que o comportamento entre os diferentes métodos não segue a mesma ordem que no TP1. SS continua a ser o método que melhor distribui a energia, CL e TF seguem próximos deixando MV, SF e PP como um grupo que distribui a variância de maneira mais concentrada em poucas direções do espaço de parâmetros. Entretanto, como a ordem crescente de distribuição varia em função do percentual de variância analisado, uma análise mais detalhada da distribuição da variância fica complicada, ainda mais considerando a distorção provocada para ajustar todos os métodos sobre o mesmo gráfico.

Figura IV-29: Percentagem de variância total explicado pelos autovetores expressos em percentual

IV.2.3 Volume do hiperespaço de parâmetros admissíveis

O volume do hiperelipsóide (vide tabela IV-4) indica novamente que PP é o método que encontra soluções dentro do hiperespaço de parâmetros mais amplo, e neste caso não pode-se dizer que isto seja devido a uma escolha errada de variograma como no TP1. Isto leva a interpretar esta característica, de encontrar soluções equiprováveis o mais distantes entre si, como algo intrínseco ao método.

Os demais métodos definem volumes que são muito mais variáveis entre si do que no TP1, onde após PP todos os métodos estão próximos o suficiente para não se notar diferenças significativas com relação ao espaço de soluções possíveis encontrado.

Tabela IV-4: Volume do hiperelipsóide definido pelos parâmetros das soluções equiprováveis

Método	MV	TF	SS	SF	CL	PP
Volume do hiperelipsóide	4.3	12.3	16	28	50	102

Na figura IV-30 tem-se uma representação gráfica da composição do volume do hiperelipsóide, detalhando a contribuição de cada autovalor. Pode-se notar aqui também a diferença no comportamento dos diferentes métodos em relação ao índice dos autovalores.

Figura IV-30: Valor absoluto do autovalor em função do seu índice

IV.2.4 Localização espacial da maior incerteza

Na figura IV-31 pode-se ver a localização espacial das regiões mais influentes na variabilidade das simulações, existe uma certa consistência na indicação de todos os métodos na região oeste.

Existem entretanto questões abertas considerando a explicação do comportamento de PP, que apesar de conter 30% da variabilidade no primeiro autovalor indica zonas próxima a pontos de medida e não contíguas.

Figura IV-31: Posicionamento da região de maior contribuição no primeiro valor para TP4. Só os 5% extremos da distribuição de cada método são mostrados.

IV.2.5 Análise Q-fatorial

Na figura IV-32 tem-se para todos os métodos a localização dos parâmetros cuja inclinação da reta ajustada aos fatores (ordenados segundo o maior fator na análise Q-fatorial), foi superior a duas vezes o desvio padrão. Ela nos indica a mesma região a oeste que a análise segundo o maior autovetor da decomposição ACPP. A exceção vem novamente do método PP, que tem entretanto valores de inclinação muito baixos (de -0.4% a 0.4%), o que representa que nenhum parâmetro se sobressaiu enquanto o mais incerto.

Figura IV-32: Delimitação da região mais influente segundo a indicação da análise Q-fatorial.

A análise Q-fatorial parece ter dificuldades em extrair zonas de maior incerteza dos conjuntos equiprováveis menos energéticos, como ocorreu para os métodos CL no TP1 e aqui para PP. Exceto por estes dois casos, vê-se uma consistência na delimitação da zona mais incerta segundo as análises ACPP e Q-fatorial, indicando que a questão da não linearidade mais ou menos forte dos dados não foi suficiente para que uma das metodologias se sobressaísse na detecção da zona mais incerta.

IV.3 Resultados dos testes sobre WIPP Real

Todos os testes foram realizados a partir do ultimo conjunto equiprovável realizado para cumprir as exigências legais sobre WIPP.

Na figura IV-33 pode-se analisar as características do campo médio de Log T deste conjunto, bem como o desvio padrão de cada malha individualmente.

Figura IV-33: Campo médio de Log T e desvio padrão sobre 100 soluções inversas de WIPP. Pontos de condicionamento marcados com +.

IV.3.1 Reamostragem e condicionamento

O modelo adotado continha 10800 malhas de dimensões variando entre 100 e 800 metros, tanto na direção X quanto Y. Seguindo a mesma metodologia discutida no § IV.1.1 realizou-se a reamostragem mostrada na figura IV-34 que contém 182 malhas. Nela pode-se notar não só a diferença no espaçamento, mas também os pontos de condicionamento, simbolizados de maneiras diferentes caso estivessem a mais de 100 metros de um ponto amostrado. Neste caso considerou-se que o condicionamento da resimulação dificilmente corresponderia à média das maiores grades, deixando-se assim estes pontos sem controle de condicionamento.

Figura IV-34: Reamostragem adotada sobre a grade irregular inicial e pontos de condicionamento efetivamente utilizados na resimulação

IV.3.2 Localização espacial da maior incerteza

Realizou-se as análises ACPP e Q-fatorial, apesar da dificuldade decorrente da possibilidade limitada de obter ao mesmo tempo uma amostragem satisfatória tanto da amostragem estatística da função de covariância quanto das menores feições. Como já discutido no §IV.2.1, isto fica mais crítico nos casos onde a disponibilidade de simulações é duas ordens de grandeza menor que a quantidade de parâmetros utilizadas no modelamento. A interpretação nestes casos deve ser mais qualitativa que quantitativa.

Na figura IV-35 vê-se num mesmo gráfico as zonas mais influentes segundo a análise ACPP marcadas *, e as zonas mais influentes segundo a análise Q-fatorial marcadas ▲. As duas zonas delimitam a grosso modo a região que flutua, nas diversas simulações, entre a zona de alta e de baixa transmissividade, cada uma simulada com um variograma de alcance diferente (vide §III.3.2).

Um dos pontos indicados pela análise ACPP no centro, corresponde a uma região de alta transmissividade delimitada pela informação transiente ao redor do poço vizinho (um dos pontos de controle)(LaVenue 1998). Esta região aparece também na figura IV-33, no desvio padrão dos parâmetros, indicando a influência desta região na incerteza global do modelo.

Figura IV-35: Delimitação da zona mais influente na incerteza segundo análise ACPP marcadas * e segundo a análise Q-fatorial marcadas ▲, os pontos de controle são marcados +

IV.3.3 Teste numérico do uso da resimulação para solução do problema inverso.

Diversos tipos de resimulações diferentes foram feitas visando testar se certas características específicas teriam um interesse particular para serem usadas como campo inicial na solução do problema inverso pelo método dos Pontos Pilotos. O decaimento da função-objetivo, calculada como o resíduo sobre as cargas hidráulicas nos pontos de controle, foi o critério utilizado para avaliar o interesse de cada uma destas resimulações na solução do problema inverso.

Todas as resimulações ACPP, aqui discutidas, foram geradas após ter sido realizada a reamostragem, a decomposição nos autovalores e autovetores - mantendo os autovetores até 99% da variância total -, e a krigagem dos autovetores para readquirir a mesma densidade de malhas da amostragem inicial.

Utilizou-se primeiramente um campo de Log T Krigado - somente a partir dos dados condicionantes -, como valor médio utilizado na resimulação. Quer dizer, o ponto no hiperespaço dos parâmetros que define o centro do hiperelipsóide de espalhamento das soluções deixou de ser dado pela média do conjunto das simulações equiprováveis, e passou a ser dado pelo campo krigado. Um exemplo de resimulação é dado na figura IV-36.

Figura IV-36: Resimulação feita a partir da média calculada por Krigagem.

Uma segunda tentativa de resimulação foi feita utilizando-se agora a média de todas as simulações equiprováveis como o centro do hiperelipsóide, da mesma maneira que descrito no §III.1.2. Na figura IV-37 tem-se um exemplo de resimulação assim gerada aceitando um desvio de até 3 vezes o desvio padrão de cada parâmetro. Para condicionar duas destas resimulações com o uso do ruído branco cobrindo somente 1% da variância necessitou-se de 615 tentativas, o que tomou 10 minutos num PC166 Hz.

Figura IV-37: Resimulação baseada sobre a média geral das simulações

Pode-se notar neste caso, chamado resimulação tipo 2, que há um ganho de variabilidade em relação a resimulação anterior, chamada resimulação tipo 1.

Com relação ao decaimento da função-objetivo tem-se na figura IV-38 a variação desta para diferentes tipos de campos de Log T em função do índice das iterações, representando cada uma um ponto piloto adicionado para a solução do problema inverso. Pode-se notar que a simulação - feita segundo a explicação do § III.3.2 - começa com o menor valor da função-objetivo, mas a resimulação tipo 2 após 3 iterações, e a tipo 1 após 11 iterações, já estão mais próximas da convergência. Esta entretanto só se fará nos três casos após 50 iterações. Isto nos indica que os dois tipos de resimulações podem ser utilizados como campo inicial satisfatoriamente.

Figura IV-38: Variação da função-objetivo para diferentes tipos de campos de $\text{Log } T$ em função do índice das iterações, representando cada uma um ponto piloto adicionado para a solução do problema inverso.

A solução final do problema inverso com a utilização da resimulação tipo 2 é apresentado na figura IV-39.

Figura IV-39: Resultado do problema inverso com a utilização da resimulação tipo 2 como campo de $\text{Log } T$ inicial.

V CONCLUSÃO

Dada a impossibilidade de obter em hidrogeologia uma descrição exata do fluxo da água nos aquíferos, este trabalho mostrou o interesse de definir a caracterização do meio geológico através de um problema inverso. Dentro dos métodos existentes para sua solução interessou-se especialmente pelos métodos inversos geoestatísticos. Estes métodos caracterizam a estruturação da condutividade hidráulica por funções de covariância, mimetizando meios complexos e permitindo a geração de um conjunto equiprovável de simulações que satisfazem tanto as medidas de condutividade quanto de carga hidráulica.

Fez-se uma breve revisão de alguns métodos utilizados para acessar a incerteza de um modelo, situando-se a particularidade das análises ACPP e Q-fatorial de trabalhar diretamente com a matriz de covariância empírica C , destacando comportamentos globais de um conjunto de soluções equiprováveis.

A partir de conjuntos equiprováveis de soluções inversas geoestatísticas foram feitas decomposições ortogonais através da Análise de Componentes Principais de Processo (ACPP) e de uma análise Q-fatorial, em ambos, os parâmetros analisados definem a transmissividade em cada malha do modelo discreto.

A ACPP, considerando concomitantemente o volume representativo de cada parâmetro, estabelece como uma combinação linear dos parâmetros iniciais novos parâmetros de variância decrescente através dos autovetores e autovalores de C . A análise do maior autovetor permite então a detecção dos principais eixos de dispersão dos parâmetros iniciais de maneira compacta e rápida. A análise fatorial Q-modal ordena as soluções segundo a direção de maior incerteza, analisando através do comportamento dos parâmetros dentro desta ordenação, quais aqueles que contribuem mais fortemente para a incerteza.

Ambas estas análises foram aplicadas a seis métodos inversos (CL, TF, SF, SS, PP, MV) em dois problemas sintéticos (TP1 e TP4). Em quase todos os casos estas análises foram semelhantes quanto a indicação das zonas mais incertas. Estas zonas se encontraram distantes dos pontos de medidas e se mostraram consistentes às características particulares de cada método na geração do conjunto de soluções equiprováveis. Esta interpretação mostra que ambas as metodologias não são muito sensíveis a uma eventual não linearidade nos dados. A análise Q-fatorial entretanto mostrou dificuldades em extrair zonas de maior incerteza dos conjuntos equiprováveis cuja variabilidade se concentra em componentes de maior período, ou seja menos energéticas como ocorreu para os métodos CL no TP1 e PP no TP4.

Devido a pouca disponibilidade relativa de informação para um cálculo mais preciso de C, expressa pelo pequeno número de simulações (entre 50 e 100) em relação ao número de parâmetros do modelo (entre 1210 e 16384 segundo o método), esta análise foi aplicada sobre uma amostragem regular dos parâmetros simulados inicialmente. Mostrou-se que mesmo analisando uma fração (de 0.6 a 10%) dos dados a zona de maior incerteza permanece estável, desde que a amostragem tome ao menos um parâmetro por alcance do variograma. Isto decorre da estruturação geoestatística imposta ao conjunto equiprovável e ao fato desta análise ser semi-quantitativa. Para a recomposição da mesma grade original, foi proposta a utilização da krigagem ordinária dos autovetores a partir dos 4 pontos mais próximos.

A comparação entre diferentes modelos através da análise da distribuição da energia pelos autovetores é outra aplicação possível da ACPP. Mostrou-se que analogamente a entropia bivariada, mas com cálculo mais rápido que esta, o espectro de distribuição da variância pelo índice dos autovalores pode indicar quais conjuntos são mais energéticos, no sentido de distribuir a variância total em componentes de menor amplitude, ou seja de maior variação de pequena escala.

A questão da necessidade da multinormalidade do conjunto equiprovável para uma representação precisa deste conjunto pelas análises ACPP e Q-fatorial, foi discutida segundo diversas óticas. Mostrou-se que o cálculo do 'Mínimo Volume do Elipsóide' através de uma estimativa robusta da distância em relação ao centro da nuvem de dispersão definida pelo hiperelipsóide, pode detectar simulações que comprometem a multinormalidade do conjunto. A existência de tais soluções pode levar a uma superestimação da incerteza de um lado ou, utilizando-se a resimulação, permite explorar uma nova região do espaço de parâmetros.

Foram propostas diversas maneiras de utilizar a informação de um primeiro conjunto equiprovável para direcionar uma nova varredura do espaço de parâmetros em busca de novas soluções condicionadas, aqui chamadas resimulações. Estas mantêm sobre um conjunto de resimulações a mesma esperança e variância que o conjunto de simulações inicial, e possibilitam explorar rapidamente o hiperespaço de parâmetros, no entorno da média do conjunto inicial, segundo as direções de maior variação dos parâmetros dadas pelos autovetores. Os autovetores indicam neste caso o limite de variabilidade gerado nas resimulações, através do qual pode-se concentrar a exploração do hiperespaço mais próximo ou mais distante da média do conjunto inicial. Os exemplos apresentados demonstram que estas duas possibilidades são possíveis mas dependentes das características do conjunto inicial, quer dizer, nos conjuntos cujas soluções se concentram ao redor de um forte mínimo da função-objetivo tem-se mais dificuldade de gerar-se resimulações distantes deste mínimo,

e inversamente conjuntos cujo ajuste se dá num patamar mais elevado da função-objetivo permitem resimulações mais distantes da média do conjunto inicial.

Apresentaram-se três maneiras de se realizar o condicionamento das resimulações sobre as medidas de transmissividade, a escolha mais apropriada deve se fazer em função da energia que se deseja obter nas resimulações. Esta é função não só do conjunto equiprovável inicial, mas também do corte imposto aos autovetores, do resíduo aceito nos pontos de controle nas resimulações, e da maneira como é feita a resimulação.

A partir da definição de um domínio e de condições de borda comum a todos os métodos, resimulações dos seis métodos inversos para TP1 foram utilizadas diretamente como uma possível solução do problema inverso. O resíduo da carga hidráulica nos pontos de controle apresentado pelas simulações e pelas resimulações foram semelhantes, indicando que neste caso as resimulações também poderiam ser utilizadas como soluções do problema inverso. A comparação entre os diferentes métodos entretanto só foi possível de forma qualitativa, uma vez que a carga hidráulica obtida não está associada somente a capacidade do método em encontrar um bom campo de Log T, mas também no acoplamento dado por cada método entre a resolução numérica do fluxo e a determinação do domínio modelado com suas condições de borda.

Foram feitas as análises ACPP e Q-fatorial sobre um problema real cuja solução inversa foi obtida pelo método dos Pontos Pilotos. A zona de maior incerteza analisada qualitativamente indica consistência com a maneira com que foram gerados os campos iniciais utilizados na entrada do problema inverso, ou seja existe maior incerteza na região que flutua entre as duas zonas (relativa aos dois indicadores) de alta e baixa transmissividade.

Realizaram-se também testes para analisar o uso de diferentes tipos de resimulações como campo inicial na solução inversa. Os resultados indicam a convergência para uma solução do problema inverso a partir de uma resimulação utilizando como centro do hiperelipsóide tanto um campo de Log T Krigado sobre os dados, quanto o campo médio do conjunto de soluções inversas. Este segundo apresenta um decréscimo mais acentuado da função-objetivo nas primeiras iterações (cada iteração implica a adição de um ponto piloto) assim como maior variabilidade do que o primeiro.

Como possibilidade de trabalhos futuros pode-se citar: o desenvolvimento de outras possibilidades de condicionamento das resimulações integrando a solução de um sistema de equações com uma componente aleatória; o estudo da influência da unidade de medida da superfície representativa de cada parâmetros na comparação entre as análises ACPP e Q-fatorial; o estudo da possibilidade de usar a informação da carga hidráulica na resimulação.

VI BIBLIOGRAFIA

- ABABOU, R.; SAGAR., B.; WITTMAYER, G.-1992-Testing procedures for spatially distributed flow models-Advances in Water Resources-v 15 pg 181-198
- ACKERER, P. ; BLASCHKE, A.P. ; BLOSCHL, G.-1994-Calibrating Groundwater Flow Models - A review-Workshop Water Down Under - Adelaide - november
- ALABERT, F.-1987-The practice of fast conditional simulations through the LU decomposition of the covariance matrix-Mathematical Geology- v 19 n° 5 pg 369-386
- BRAUD, I. ; OBLED, CH-1991-On the use of empirical orthogonal function (EOF) analysis in the simulation of random fields-Stochastic Hydrology Hydraulics-v 5 pg 125-134
- BRAUD, I.-1990-Etude méthodologique de l'analyse en composantes principales de processus bidimensionnels. Effets des approximations numériques et de l'échantillonnage et utilisation pour la simulation de champs aléatoires. Application au traitement des températures mensuelles de surface de la mer sur l'Atlantique intertropical.- Thèse - Institut National Polytechnique de Grenoble- 211 pg
- BUORO, A.B.; SILVA, J.B.C.-1994-Ambiguity Analysis of Well-log data-Geophysics- v 59 n° 3 pg 336-344
- CAPILLA, J. E.; RODRIGO, J.; GOMEZ-HERNANDEZ, J.J.-1998-Worth of secondary data compared to piezometric data for the probabilistic assessment of radionuclide migration-Stochastic Hydrology Hydraulics-v 12 (3) pg 180-190
- CARRERA, J.-1994-INVERT-4: A Fortran program for solving the groundwater flow inverse problem-Report, Cent. De int. De Metod. Numer. En Eng., Barcelona, Spain-
- CARRERA, J. ; MEDINA, A. ; GALARZA, G.-1993-Groundwater inverse problem. Discussion on geostatistical formulations and validation-Hydrogéologie- n° 4 pg 313-324
- CARRERA, J. ; NEUMAN, S.P.-1986a-Estimation of Aquifer Parameters Under Transient and Steady State Conditions : 1. Maximum Likelihood Method Incorporating Prior Information -Water Resources Research- v 22 n° 2 pg 199-210
- CARRERA, J. ; NEUMAN, S.P.-1986b-Estimation of Aquifer Parameters Under Transient and Steady State Conditions : 2. Uniqueness, Stability, and solution algorithms-Water Resources Research- v 22 n° 2 pg 211-227
- CARRERA, J. ; NEUMAN, S.P.-1986c-Estimation of Aquifer Parameters Under Transient and Steady State Conditions :

- 3.Application to synthetic and field data-
Water Resources Research- v 22 n° 2 pg 228-241
- CERTES, C.-1990-Analyse et résolution du problème d'identification de paramètres spatialement repartis dans le modèles d'écoulement souterrain- Thèse - Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris-280 pg
- CERTES, C. ; MARSILY, G.-1991-Application of the Pilot Point Method to the Identification of Aquifer Transmissivities-Advances in Water Resources- v 14 n° 5 pg 284-300
- CHAVENT, G.-1971-Analyse fonctionnelle et identification des les équation aux dérivées partielles- Thèse de docteur en Sciences. Université Paris VI-
- CLIFTON, P. ; NEUMAN, S.P.-1982-Effects of kriging and inverse modeling on conditional simulation of the Avra valley in southern Arizona-Water Resources Research- v 18 n° 4 pg 1215-1234
- COLBEAU, J. L.-1997-Les citadins et l'eau, perceptions et comportement en milieu urbain - Palestra proferida em 9 outubro no LGA, U. Paris VI- Laboratoire de psychologie de l'environnement, U. Paris V
- CRESSIE, N.A.C.-1993 -Statistics for spatial data-John Wiley & Sons-900 pg
- DAGAN, G.-1986-Statistical theory of groundwater flow and transport: pore to laboratory, laboratory to formation, and formation to regional scale-Water Resources Research- v 22 n° 9 pg120-134
- DAVIS, M.W.-1987-Production of conditional simulations via the LU triangular decomposition of the covariance matrix-Mathematical Geology- v 19 n° 2 pg 91-98
- DELAY, F. ; POREL, G.; BANTON, O.-1999-Numerical simulations of geological reservoirs: improving their conditioning through the use of entropy-Computational Geosciences-in press
- DELHOMME, J.P.-1979-Spatial Variability and Uncertainty in Groundwater Flow Parameters : A geostatistical Approach-Water Resources Research- v 15 n° 2 pg 269- 280
- DEUTCH, C.V. ; JOURNEL, A.G.-1994-The application of simulated annealing to stochastic reservoir modeling-SPE advanced technology series-v 2 n° 2 pg 222-227
- DEUTSCH, C.V.; JOURNEL, A.G.-1994-Annealing Techniques applied to the integration of geological and engineering data-Report of Stanford Center for reservoir forecasting , Stanford University-118 pg
- DEUTSCH, C.V; COCKERAHM, P.W.-1994-Practical Considerations in the application of simulated annealing to stochastic simulation-Mathematical Geology- v 26 n° 1 pg 67-82
- DOWD, P.A.-1991-A review of recent developments in geostatistics-Computers & Geosciences-v 17 n° 10 pg 1481-1500
- EMSELLEM,Y; MARSILY, G. DE-1971-An automatic solution for the inverse problem-Water Resources Research-V 7 n° 5 pg 1264-1283

- GAILEY, R.M. ; GORELICK, S.M.-1991-Coupled process parameter estimation and prediction uncertainty using hydraulic head and Concentration data-Advances in Water Resources-v 14 n° 5 pg 301-314
- GELHAR, L.H.-1986-Stochastic Subsurface hydrology from theory to applications-Water Resources Research- v 22 n° 9 pg135s-145s
- GINN, I.R. ; CUSHMAN -1990-Inverse methods for subsurface flow : A critical review of stochastic techniques-Stochastics Hydrology Hydraulics-v 4 pg 1-26
- GIUDICI, M. ; MOROSI, G. ; PARRAVICINI, G. ; PONZINI, G.-1995-A new method for the identification of distributed Transmissivities-Water Resources Research-v 31 n° 8 pg 1969 - 1988
- GNANADESIKAN, R.-1977-Methods for statistical data analysis of multivariate observations-John Wiley & Sons, New York-212 pg
- GOMEZ-HERNANDES, J.J. ; JOURNEL, A.G.-1992-Joint Sequential simulation of multigaussian fields-Geostatistics Troia, Kluwer Acad. Pub. Amilcar Soares (ed.)- pg 82 -94
- GOMEZ-HERNANDES, J.J. ; SRIVASTAVA, R.M.-1990-ISIM3D : an ANSI-C three-dimensional multiple indicator conditional simulation program-Computers & Geosciences- v 16 n° 4 pg 395-440
- GOMEZ-HERNANDEZ, J.J. ; SAHUQUILLO, A. ; CAPILLA J.E.-1997-Stochastic simulation of Transmissivity fields conditional to both Transmissivity and piezometric data-Journal of hydrology-v 203 pg 162-174
- GRINDROD, P. ; IMPEY, M.D.-1991-Fractal field simulations of tracer migration within the WIPP Culebra Dolomite-Report, Intera Information Technologies, Dec-
- GUTJAHR, A. ; BULLARD, B. ; HATCH, S. ; HUGSON, L.-1994-Joint conditional simulations and the spectral approach for flow modeling-Stochastic Hydrology Hydraulics-v 8 n° 1 pg 79-108
- HOEKSEMA, R.J. ; KITANIDIS, P.-1984-An application of the geostatistical approach to the inverse problem in two-dimensional ground-water modeling-Water Resources Research-v 20 n° 7 pg 1003-1020
- IMAN, R.L. ET AL.-1980-Risk methodology for geological disposal of radioactive waste. a distribution free approach to include rank correlation among input variables for simulation studies- Sandia Report SAND 80-0157-NUREG-CR-1262-
- JOURNEL, A.C. ; HUIJBREGTS, C.J.-1978 -Mining Geostatistics-Academic Press, New York, NY-600 pg
- JOURNEL, A.C. ; ALABERT, F.-1989-Non - Gaussian data expansion in the earth sciences-Terra Nova-v 1 pg 123- 134
- JOURNEL, A.G. ; DEUTSCH, C.V.-1993-Entropy and Spatial disorder-Mathematical Geology- v 25 n° 3 pg 329-354
- KAUFFMANN, C.-1990-Méthodologie d'application des techniques d'estimation de paramètres au calage de modèles de propagation de polluant dans les

- aquifères et optimisation des stratégies de dépollution- Thèse - Université Louis Pasteur de Strasbourg-164 pg
- KEIDSER, A. ; ROSBJERG, D.-1991-A comparison of four inverse approaches to groundwater flow and transport parameter identification-Water Resources Research-v 27 n° 9 pg 2219 - 2232
- KITANIDIS, P. ; LANE, R.-1985-Maximum likelihood parameter estimation of hydrologic spatial processes by the Gauss-Newton method-Journal of Hydrology- v 79 pg 53-71
- KITANIDIS, P.K. ; VOMVORIS, E.G.-1983-A geostatistical Approach to the inverse Problem in Groundwater Modeling (steady state) and one-dimensional Simulations-Water Resources Research- v 19 n° 3 pg 677-690
- KITTERROD, N.O ; GOTTSCHALK, L.-1997-Simulation of normal distributed smooth fields by Karhunen-Loeve expansion in combination with kriging-Stochastics Hydrology Hydraulics-v 11 n 6 pg 458-482
- KONIKOW, L.F. ; BREDEHOEFT, J.D.-1992-Groundwater models can not be validated-Advances in Water Resources- v 15 pg 75-83
- LAVENUE, A. M.-1998-A new Pilot Point method for solving the inverse problem in hydrogeology; Generating an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields- Thèse de École des Mines de Paris-350 pg
- LAVENUE, A.M.; PICKENS, J.F.-1992-Application of a coupled adjoint sensitivity and kriging approach to calibrate a groundwater flow model-Water Resources Research-v 28 n° 6 pg 1543-1569
- LAVENUE, A.M; RAMARAO, B.S. ; MARSILY, G. DE; MARIETTA M.G.-1995-Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated Transmissivity fields 2.Application-Water Resources Research-v 31 n° 3 pg 495-516
- LUIS, S.J. ; MCLAUGHLIN, D.-1992-A stochastic approach to model validation-Advances in Water Resources-v 15 pg 15-32
- MARSILY, G DE-1978-De l'identification des systèmes hydrogéologiques - Thèse Université Paris VI-400pg
- MARSILY, G. DE-1984-Spatial variability of properties in porous media: A stochastic approach-Fundamentals of transport in Porous Media, ed. J. Bear and M.Y. Corapcioglu, Martinus Nijhoff, Boston-pg 719-769
- MARSILY, G. de-1986 -Quantitative Hydrogeology-Academic Press-266 pg
- MARSILY, G. ; COMBES, P. ; GOBLET, P.-1992-Comment on "Ground Water models can not be validated" by LF Konikow, and JD Bredenhof-Advances in Water Resources- v 15 pg 367-363
- MATHERON, G.-1970-La théorie des variables régionalisées et ses applications- Les cahiers du centre de morphologie mathématique de Fontainebleau, F.5, Ecole des Mines de Paris-212 pg
- MCLAUGHLIN, D. ; KINZELBACH W. ; GHASSEMI, F.-1993-Modeling subsurface flow and transport : where do we stand ?-Hydrogéologie- n° 4 pg 269-280

- MCLAUGHLIN, D.; TOWNLEY, L.R.-1996-A reassessment of the groundwater inverse problem-Water Resources Research- v 32 n° 5 pg 1131-1161
- MCWILLIAMS, T.P.-1987-Sensitivity analysis of geologic computer models : a formal procedure based on Latin hypercube sampling-Mathematical Geology- v 19 n° 2 pg 81-90
- MENKE W.-1984-Geophysical data analysis: discrete inverse theory-Academic Press Inc-260 pg
- NELSON, R.W.-1960-In place measurements of permeability in heterogeneous media 1. Theory of a proposed method-J. Geophys. Res.-v 65 n° 6 pg 1753-1758
- NEUMAN, S.P.-1993-Calibration of distributed parameter groundwater flow models viewed as a multiple objective decision under uncertainty-Water Resources Research-v 9 (4) pg 1006-1021
- OBLÉD, CH -1979-Contribution à l'analyse des données en Hydrométéorologie : la prévision des phénomènes accidentels et l'analyse des champs spatiaux- Thèse de Doctorat d'état des sciences physiques, INPG-USMG-256pg
- OBLÉD, CH ; BRAUD, I.-1989-Analogies entre géostatistique et analyse en composantes principales de processus ou analyse EOF-Geostatistics vol. I , M. Armstrong (ed.)- pg 177-188
- OBLÉD, CH.; CREUTIN, J.D.-1986-Some developments in the use of Empirical Orthogonal Functions for mapping meteorological fields-Journal of applied meteorology-v 15 n° 9 pg 1189-1204
- PECK, A.; GORELICK, S. ; MARSILY, G. DE; FOSTER, S.; KOVALEVSKY-1988-Consequences of spatial variability in aquifer properties and data limitations for groundwater modeling practice-Workshop on spatial variability. IAH Pub. 175- August - Vancouver British Columbia-157 pg
- POETER, E.P.; HILL, M.-1997-Inverse models: A necessary next step in groundwater modeling-Ground Water-v 35 (2)
- PREISENDORFER, R.W.-1988-Principal component analysis in meteorology and oceanography-Developments in atmospheric science, 17 , Elsevier science pub.-425 pg
- RAMARAO, B.S. ; LAVENUE, A.M. -1992-A modeling approach to address spatial variability within the Culebra Dolomite Transmissivity field-Sandia Report SAND92-7306-114 pg
- RAMARAO, B.S. ; LAVENUE, A.M. ; DE MARSILY, G. ; MARIETTA M.G.-1995-Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated Transmissivity fields 1. Theory and computational experiments-Water Resources Research-v 31 n° 3 pg 475-493
- RAMARAO, B.S. ; REEVES, M.-1990-Theory and verification for the GRASP-II code for adjoint-sensitivity analysis of steady-state and transient groundwater flow-Sandia Report SAND89-7143J, Sandia National Lab., Albuquerque, N.M.-

- RENARD, P.-1997-Modélisation des écoulements en milieux poreux hétérogènes-
Thèse - Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris-246 pg
- REYMENT, R.; JÖRESKOG, K.G.-1993-Applied factor analysis in the natural
sciences-Cambridge University Press-371 pg
- ROBINSON, P.C.; HODGKINSON -1986-Exact solutions for radio nuclide
transport in the presence of parameter uncertainty-Report AERE R 12125.
Theoretical physics division, Harwell Lab. Oxfordshire, UK-
- ROSAZZA, A. -1997-Interpolazione di dati potenziale e identificazione dei parametri
del modello di flusso di un acquifero con un metodo diretto di inversione, -
Tesi di Laurea , Università di Milano, Italia-240p.
- ROTH, C.-1995-Contribution de la géostatistique à la résolution du problème inverse
en hydrogéologie- Thèse - Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris-
195 pg
- ROUSSEUW, P.J.; ZOMEREN, B.C.-1990-Unmasking multivariate outliers and
leverage points-Journal of the Statistical Association-v 85 (441) pg 633-651
- ROUSSEUW, P.J; LEROY, A.M.-1987-Robust regression and outlier detection-
John Wiley & Sons, series in probability and mathematical statistics-320 pg
- RUBIN, Y. ; DAGAN, G.-1992-Conditional Estimation of solute travel time in
heterogeneous formations : impact of Transmissivity measurements-Water
Resources Research- v 28 n° 4 pg 1033-1040
- SANDIA NATIONAL LABORATORIES-1992-Preliminary performance
Assessment for the Waste Isolation Pilot Plant-SAND92-0700/3, Dec.-vol I,
Third comparison with 40 CFR 191, Subpart B
- SHRESTHA, S.P. ; LOGANATHAN, G.V.-1994-Monte Carlo simulation and
effective medium approximation in subsurface flow modeling -Ground Water
-v 32 n° 6 pg 929-936
- SRIVASTAVA, R. M.-1994-An overview of stochastic methods for reservoir
characterization-Stochastic modeling and Geostatistics, principles, methods
and case studies, ed. By Yarus, J. and Chambers, R.L., AAPG computers
application in geology n. 3-Cap. 3
- STRÖET, T.C.-1995-Calibration of stochastic groundwater flow models-Ph.D.
University of Delft-207 pg
- SUN N. Z.-1994-Inverse problems in groundwater modeling-Kluwer academic
publishers
- TIKHONOV, A.N ; ARSENIN, V.Y.-1977-Solutions of Ill-posed problems-Halsted
Press/Wiley, New York
- TOWNLEY, L.R.; WILSON, J.L.-1985-Computationally efficient algorithms for
parameter estimation and uncertainty propagation in numerical models of
groundwater flow-Water Resources Research- v 21 n° 12 pg 1851-1860
- TOWNLEY, L.R. ; WILSON, J.L.-1989-Estimation of boundary values and
identification of boundary type for numerical models of aquifer flow-Trans.
Por. Media- v 4 pg 567-584

- VASCO, D.W.; JOHNSON, L.R.; MAJER, E.L.-1993-Ensemble inference in geophysical inverse problems-Geophysics, J. Int.-v 115 pg 711-728
- VON STORCH, H. ; HANNOSCHÖCK, G.-1985-Statistical aspects of estimated principal vectors (EOFs) based on small samples sizes-Journal of climate and applied meteorology-v 24, pg 716-724
- WEN, X.; GOMEZ-HERNANDES, J.J; CAPILLA, J.E.; SAHUQUILLO, A.-1996-Significance of conditioning to piezometric head data for prediction of mass transport in groundwater modeling-Mathematical Geology-v 28 n° 7 pg 951-968
- YEH, W.W.G.-1986-Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology : The Inverse Problem -Water Resources Research- v 22 n° 2 pg 95-108.
- ZIMMERMAN, D.A.; GALLEGOS, D.P.-1993-A comparison of geostatistically-based inverse techniques for use in performance assessment analyses at the WIPP site results from test case no. 1-High level radioactive waste management - Proceedings 4th international conference Nevada, April 26-30- pg 1426-1436
- ZIMMERMAN,D.A.; AXNESS,C.L.; MARSILY, G. de ; MARIETTA,M.G.; GOTWAY,C.A.-1996-Results from a comparison of geostatistical inverse techniques for groundwater flow-Parameter Identification and inverse problems in Hydrology, Geology and Ecology. Ed Gottlieb, J.; Duchateau. P. Kluwer Academic Pub. Dordrecht
- ZIMMERMAN,D.A.; AXNESS,C.L.; MARSILY;G. DE ; MARIETTA,M.G.; GOTWAY,C.A.;BEAUHEIM, R.; BRASS, R.; CARRERA, J.; DAGAN,G.; DAVIES, P.B.; GALLEGOS,D.P.; GALLI, A.; GOMEZ-HERNANDEZ,J.; GORELICK, S.M.; GRINDROD,P.; GUTJAHR,A.L.; KITANIDIS,P.K.; LAVENUE,A.M.; MCLAUGHLIN, D.; NEUMAN,S.P.; ,B.S.; RAVENNE,C.; RUBIN, Y.-1998-A comparison of seven geostatistically-based inverse approaches for modeling advective transport by groundwater flow-Water Resources Research-v 34 (6) pg. 1373-1414

ANEXO A: KRIGAGEM

Este método visa a partir de um processo $X(\xi, \underline{x})$ centrado ($E[X(\xi, \underline{x})] = 0$), amostrado em P pontos $\underline{x}_j$, $j=1, \dots, P$ de um domínio definido de R^2 estimar o valor num ponto $\underline{x}_0$, que não foi medido $\hat{X}(\xi, \underline{x}_0)$, através da seguinte ponderação linear dos valores medidos $X(\xi, \underline{x}_i)$:

$$\hat{X}(\xi, \underline{x}_0) = \sum_{i=1}^P \mu_i \cdot X(\xi, \underline{x}_i) \quad (A-1)$$

Tendo-se um conjunto de realizações deste processo, indexados por ξ (vide figura A-1), nos permitirá estimar as esperanças e covariâncias do processo.

Figura A-1: Amostragem espacial do processo $X(\xi, \underline{x})$ num contexto de multirealizações (ξ).

A construção do estimador de Krigagem, que permitirá definir o cálculo de μ , é feita então (Martheron, 1970) a partir da imposição de duas características básicas:

- O estimador deve ser não tendencioso, quer dizer $E[X(\xi, \underline{x}) - \hat{X}(\xi, \underline{x})] = 0$.
- O estimador deve ser ótimo no sentido de minimizar a variância do erro de estimação.

Com isto a otimização com relação ao ponderador μ leva a resolução do seguinte sistema linear:

$$\sum_{i=1}^P \mu_i \cdot C(\underline{x}_i, \underline{x}_j) = C(\underline{x}_j, \underline{x}_0) \quad (A-2)$$

ou descrito de maneira matricial:

$$\mathbf{C} \boldsymbol{\mu} = \mathbf{C}_0 \quad (A-3)$$

sendo $\mathbf{C} = [C(\underline{x}_i, \underline{x}_j)]$, $i=1 \dots P$, $j=1 \dots P$, a matriz de covariância calculada entre dois pontos da grade de medida; $\boldsymbol{\mu}$ o vetor das ponderações desconhecido; $\mathbf{C}_0$ o vetor das covariâncias

entre o ponto a interpolar $\underline{x}_0$ e um ponto qualquer da grade de medida. Na prática C é calculado a partir dos dados disponíveis enquanto que C_0 é estimado com a ajuda de uma função de covariância ajustada sobre os dados disponíveis, uma vez que não se dispõe de dados em $\underline{x}_0$. Desta forma o sistema A-3 poderá ser resolvido obtendo-se μ . É interessante notar que uma vez o ponderador obtido, o cálculo do valor no ponto $\underline{x}_0$ é feito facilmente através de A-1. Num caso como discutido no §III.1.2.1.d onde C_0 não varia entre os autovetores, só é necessário resolver o sistema A-2 uma vez, e a partir daí pode-se utilizar diretamente os valores μ e a equação A-1.

Esta formulação clássica da Krigagem obtém portanto o estimador como uma ponderação dos dados disponíveis, existe uma outra formulação possível, obtendo-se desta vez o estimador como uma interpolação sobre uma base de funções (Matheron 1970), que se assemelha então a maneira descrita para o cálculo da ACPP.

Tomando-se A-1 de forma matricial :

$$\hat{X}(\underline{\xi}, \underline{x}_0) = [X(\underline{\xi})]^t \cdot \hat{\mu} \quad (A-4)$$

com $[X(\underline{\xi})]^t = [X(\underline{\xi}, \underline{x}_1), \dots, X(\underline{\xi}, \underline{x}_P)]^t$ e tomando de A-3 $\mu = C^{-1} C_0$ temos:

$$\hat{X}(\underline{\xi}, \underline{x}_0) = [X(\underline{\xi})]^t \cdot C^{-1} \cdot C_0 = B^t \cdot C_0 \quad (A-5)$$

sendo $B^t = [X(\underline{\xi})]^t \cdot C^{-1} = [b_1, \dots, b_P]^t$.

Vê-se assim em A-5, que a interpolação de $\hat{X}(\underline{\xi}, \underline{x}_0)$ se fez sobre uma base de funções formada das covariâncias $C(\underline{x}_i, \underline{x}_0)$, $i = 1, \dots, P$ entre os pontos de medida, e o ponto a estimar $\underline{x}_0$.

Os coeficientes de interpolações (b_i) no estimador expresso como uma função de base fica portanto:

$$\hat{X}(\underline{\xi}, \underline{x}_0) = \sum_{i=1}^P b_i \cdot C(\underline{x}_i, \underline{x}_0) \quad (A-6)$$

ANEXO B: SIMULAÇÃO CONDICIONAL DE CAMPOS ALEATÓRIOS

Em muitas situações a interpolação a estimação não é suficiente para gerar a variabilidade necessária num modelo. Através da figura B-1 faz-se uma pequena introdução visual do interesse e da necessidade de se fazer uma simulação condicional ou simulação não condicional, em oposição a uma interpolação; neste caso utilizando-se a Krigagem.

No que se refere aos métodos de condicionamento de simulações clássicos, eles partem todos da escolha de uma função de covariância sobre os dados.

A simulação pode se realizar então de uma das seguintes maneiras:

B.1 Condicionamento por Krigagem

Delhome (1979), Journel & Huijbregts (1978) descrevem como proceder para condicionar uma campo aleatório a um conjunto de observações através da propriedade da Krigagem de gerar os erros de maneira isomorfica.

Sendo $Z(\underline{x})$ o valor real (desconhecido) num ponto $\underline{x}$ pode-se decompor $Z(\underline{x})$ como :

$$Z(\underline{x}) = Z_{OK}(\underline{x}) + [Z(\underline{x}) - Z_{OK}(\underline{x})] \quad (B-1)$$

em que Z_{OK} é o valor krigado estimado em $\underline{x}$ baseado nos valores de Z nos pontos de observação, o termo entre colchetes é o erro de Krigagem, e é desconhecido uma vez que o valor real de $Z(\underline{x})$ é desconhecido. É possível entretanto simular este erro a partir de uma simulação não condicionada Z_{NC} onde se faz uma Krigagem tomando-se somente os pontos de observação de forma que

$$Z_{NC}(\underline{x}) = Z_{NK}(\underline{x}) + [Z_{NC}(\underline{x}) - Z_{NK}(\underline{x})] \quad (B-2)$$

onde o termo entre colchetes é o erro de Krigagem, desta vez conhecido, uma vez que se dispõe do valor simulado (não condicionado) neste ponto Z_{NC} . Assim substituindo-se o erro de Krigagem de (B-2) em (B-1), o que é possível uma vez que o erro é independente do valor calculado no ponto, temos a simulação condicionada $Z_{SC}(\underline{x})$ dada por:

$$Z_{SC}(\underline{x}) \approx Z_{OK}(\underline{x}) + [Z_{NC}(\underline{x}) - Z_{NK}(\underline{x})] \quad (B-3)$$

Na figura B-2 pode-se ver uma descrição gráfica da superposição dos três diferentes campos utilizados para gerar uma simulação condicional (Z_{sc}) a partir de uma simulação incondicional (Z_{nc}) e do erro de Krigagem.

B. 2 Decomposição LU combinada com observações

Para a geração de uma simulação não condicionada Davis (1987), Cressie (1993), Alabert (1987) propõem uma decomposição da matriz de covariância C dos dados centralizados. Em outras palavras eles propõem a decomposição matriz de covariância dos erros.

Obtém-se então através uma decomposição de Cholesky a expressão de C no produto de uma matriz triangular inferior L e outra triangular superior U . Tomando-se então um vetor aleatório A com uma distribuição normal dada por $N(0, \sigma)$, pode-se simular um processo X_s com as mesmas características de C como :

$$X_s = L \cdot A \quad (B-4)$$

Para obter-se o condicionamento aos dados Davis (1987), e Alabert (1987) propõem uma construção particular de C e a obtenção de sua decomposição L e U como:

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} = LU = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & U_{22} \end{bmatrix} \quad (B-5)$$

em que C_{11} : covariância entre a localização das observações

C_{21} : covariância entre a localização das observações e a localização da malha onde se deseja simular

C_{22} : covariância entre as localização da malha a simular

Uma simulação condicional pode ser obtida então através de :

$$\begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{11}^{-1} z \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z \\ L_{21} L_{11}^{-1} z + L_{22} w \end{bmatrix} \quad (B-6)$$

em que z : vetor com o valor das observações

w : vetor aleatório normal $N(0, \sigma)$

B.3 Resfriamento Simulado ou 'Simulated Annealing'

Srivasta (1994), Deutsch & Cockerham (1994), Deutch & Journel (1994) utilizaram-se do algoritmo de otimização conhecido como 'Simulated Annealing', para a partir de uma simulação inicial condicioná-la às observações e a outros tipos de informação, como estatísticas multipontuais e variogramas.

Este algoritmo se baseia na permutação iterativa do valor em dois pontos, esta permutação será aceita ou não baseando-se no cálculo de uma função-objetivo (F_{obj}), definida

antes de depois da permutação respectivamente como F_{obj}^N e F_{obj}^V a partir das estatísticas que se deseja condicionar.

A aceitação da permutação será dada por exemplo, pela probabilidade:

$$p(\text{aceitação}) = 1 \quad \dots\dots\dots \text{se } F_{obj}^N < F_{obj}^V$$

$$p(\text{aceitação}) = e^{-\frac{F_{obj}^N - F_{obj}^V}{t}} \quad \dots\dots\dots \text{se } F_{obj}^N > F_{obj}^V,$$

em que t indica o número da permutação (equivalente ao tempo do resfriamento).

Esta função faz com que sejam aceitas, todas as permutações que abaixem a função-objetivo, e segundo uma determinada probabilidade, certas permutações mesmo que a função-objetivo aumente. No decorrer das iterações entretanto estas permutações que fazem a função-objetivo crescer vão se tornando cada vez menos prováveis. Isto visa evitar que o método pare em mínimos locais, especialmente no começo das permutações.

O condicionamento pode se fazer com a definição dos pontos de observações como pontos imutáveis (iguais ao valor observado), ou como parte da função-objetivo dentro de um segundo termo, ponderado mais fortemente que o primeiro que define a estatística desejada no final do processo.

A nível computacional, para que o custo das permutações não seja excessivo, é preciso definir-se a função-objetivo de maneira que ela seja facilmente recalculada, utilizando-se por exemplo a cada permutação uma correção da função-objetivo inicial, função somente do valor local dos pontos permutados.

B.4 Simulação Sequencial Gaussiana

Gomez-Hernandes & Journel (1992), Dowd (1991) descrevem este método que se baseia na Krigagem sequencial de pontos a partir das observações. O método consiste nas seguintes etapas:

- Transformação das observações em variáveis gaussianas com $N(0, 1)$
- Modelamento do variograma destes dados transformados
- Definição de um percurso aleatório entre os pontos a serem simulados
- Em cada um destes pontos fazer a Krigagem baseando se nas observações e nos valores já krigados
- Em cada um destes pontos adotar um valor dentro do intervalo, cuja média é dada pelo valor Krigado e sua variância pela variância de Krigagem, segundo uma distribuição aleatoria

- Quando todos os pontos forem simulados fazer a transformação inversa dos valores simulados.

B.5 Simulação Sequencial de Indicatrizes

Gomez-Hernandes & Srivastava (1990), Journel & Alabert (1989), Dowd (1991) se utilizaram de indicadores, a fim de evitar a imposição de multigaussianidade da simulação sequencial gaussiana (SSG).

O método segue basicamente a mesma seqüência que a SSG, mas aqui :

- Definem-se classes de indicadores, com cada classe sendo dada por intervalos não superpostos.
- Codifica-se então as observações segundo estas classes, quer dizer, se uma observação tem valor 5.3, ela será codificada no indicador definido pelo intervalo [5,6].
- Define-se o variograma de cada classe à partir do variograma das observações correspondentes aquele indicador.
- Estabelece-se um percurso aleatório entre todos os pontos a serem simulados
- Kriga-se o valor do indicador em cada um destes pontos para todos os indicadores definidos
- Escolhe-se aleatoriamente um valor entre estes indicadores
- Repete-se este processo adicionando-se o valor que acabou de ser escolhido a sua respectiva classe, até que todos os pontos tenham sido estimados.

Realidade, Pontos de Medida e Krigagem (estimação)

Realidade e Simulação não condicional

Realidade, Pontos de Medida e Simulação Condicional

Figura B-1: Diferenças entre estimação e simulação condicionada e não condicionada obtida a partir dos mesmos pontos de medida.

$$Z_{sc}(x) \approx Z_{ok}(x) + [Z_{nc}(x) - Z_{sk}(x)]$$

Figura B-2: A partir da superposição da Krigagem sobre as medidas e da Krigagem sobre o valor simulado nos pontos de medida, obtém-se o condicionamento de uma simulação por Krigagem.

ANEXO C: CALCULO DA ENTROPIA BIVARIADA

A noção de entropia pode ser usada para caracterizar a suavidade de um campo simulado (Journel & Deutsch 1993, Delay et al. 1999). Ele pode ser definido como a esperança matemática do logaritmo da função densidade de probabilidade (fdp) de um conjunto de variáveis aleatórias.

Para uma única variável aleatória $Z(\underline{x})$, num ponto $\underline{x}$ do espaço com uma fdp dada por $f(v)=\text{prob}[Z(\underline{x})=v]$, a entropia monovariada é definida como:

$$S_f = - \int_{-\infty}^{\infty} \ln(f(v))f(v)dv \quad (C-1)$$

Tomando agora duas variáveis aleatórias $Z(\underline{x})$, $Z(\underline{x}+h)$, separadas de uma distância h , com uma fdp bivariada $f(v,w)=\text{prob}[Z(\underline{x})=v \text{ e } Z(\underline{x}+h)=w]$, a entropia bivariada é dada por:

$$S_f(h) = - \int_{-\infty}^{\infty} \ln(f_h(v,w))f_h(v,w)dvdw \quad (C-2)$$

Uma forma normalizada da entropia S_f^N , variando entre 0 e 1 pode ser obtida para distâncias variando entre 0 e infinito como:

$$S_f^N(h) = \frac{S_f(h) - S_f(0)}{S_f(0)} \quad (C-3)$$

sendo $S_f(0)$ a entropia monovariada descrita em C-1.

Esta forma normalizada é apresentada na figura IV-6.

ANEXO D: DADOS ORIGINAIS DO TESTE SINTÉTICO

Todos os dados apresentados aqui exceto a figuras D-2 são uma compilação de Zimmerman et al. (1998).

Tabela D-1: Dados de construção e amostrados da realidade sintética.

TP	Recarga e Bombeamento ?	Alcance do campo 'real' (m)	Modelo de covariância	Dados exaustivos		Obtidos pela amostragem		Número de observações	
				média	var	média	var	Carga	Log ₁₀ T*
1	Não	2808	Exponencial	-5.84	1.56	-5.30	1.84	32	41
2	Não	2808	Exponencial	-1.26	2.14	-0.52	2.39	32	41
3	Sim	425	Telis	-5.64	1.38	-5.7	1.82	41	41
4	Sim	2063	Bessel	-5.32	1.93	-5.32	1.89	41	41

*expresso em [m²/s]

Tabela D-2: Dados fornecidos aos participantes

TP 1				TP 4			
X (m)	Y (m)	Log T (m ² /s)	Carga (m)	X (m)	Y (m)	Log T (m ² /s)	Carga (m)
11688	28631	-7.65		19201	29099	-5.47	1026.5
11891	17066	-6.485	917.15	19411	31085	-3.38	1028.44
13623	20846	-6.065	922.47	20254	27218	-4.67	1025.3
15581	14073	-5.331	919.26	15054	22165	-5.89	1031.2
16481	22758	-7.012	926.88	20930	27806	-4.41	1025.2
16706	11688	-8.359		19366	28487	-5.73	1025.5
17426	17831	-8.035	921.66	14053	26885	-3.62	1030.1
17426	29463	-1.347	932.77	4411	18255	-5.38	1029.9
17516	20058	-4.884	924.46	9523	14332	-4.22	1038.1
17898	22533	-5.093		19496	13733	-5.03	1029.5
19046	23433	-4.787		22531	25324	-5.56	1021.1
19203	20821	-4.091	925.41	29191	20507	-6.89	1016.24
19631	23703	-5.053	928.4	17735	26971	-8.06	1028.7
20328	21318	-5.211	925.72	25928	30083	-6.62	1016.8
20508	22061	-5.449	925.97	21259	30056	-3.2	1024.9
20711	19968	-5.585	925.1	17560	26245	-7.26	1029.8
20823	22286	-5.042	925.99	18132	28772	-7.15	1028.5
21048	22646	-6.236	926.87	18280	32133	-3.33	1028.8
21071	14298	-4.275	920.26	15843	27779	-3.19	1029.7
21138	23028	-4.3	927.4	16332	23977	-4.76	1030.8
21161	22286	-5.608		26659	25520	-3.13	1019.9
21206	20036	-4.53	925.64	18928	35975	-6.34	1017.1
21296	21633	-4.127	925.84	26004	32924	-6.95	999.79
21386	21813	-4.61	925.88	20499	33967	-6.23	1024.6
21588	22128	-4.673	926.11	18774	30255	-3	1028.4
21768	22016	-5.225	926.02	19360	26534	-6.91	1025.5
22016	23008	-3.842		20818	27419	-4.81	1025.2
22083	19811	-5.844	925.71	14539	32417	-5.58	1022.3
22083	23231	-4.752		15170	31732	-6.24	1028.1
22151	22713	-4.08		16122	36851	-6.2	1017.6
22488	19968	-4.433	925.75	16935	16966	-5.73	1029.7
22488	23748	-4.756	926.95	9484	33046	-6.07	1008.7
22938	21881	-3.418	925.83	11017	27219	-5.59	1028.06
23118	14726	-5.927	921.02	19414	27803	-5.91	1025.3
23681	27078	-7.793	930.8	20922	27002	-5.54	1025.2
24513	20981	-5.539	925.71	17402	26008	-6.92	1030.2
24738	22421	-4.655	925.84	12297	17923	-4.46	1034
24828	23096	-5.49	926.11	17129	26419	-7.19	1030.1
25616	26583	-5.921	928.5	20240	27000	-5.05	1025.3
25818	12903	-7.54		18174	31412	-3.02	1028.8
25976	18191	-4.183	924.67	15568	26403	-3.51	1030.2

TP 1

TP 2

TP 3

TP 4

Figura D-1: Campo de Log T sintético (representando a realidade), os quadrados são os pontos de amostragem passados aos participantes. Os valores de Log T representados vão de 10^{-7} a 10^{-6} para o escuro, 10^{-6} a 10^{-5} , 10^{-5} a 10^{-4} , 10^{-4} a 10^{-3} e menores que 10^{-3} para o mais claro. A linha saindo do quadrado ao centro da figura representa a trajetória de um partícula saindo dos limite do site de WIPP

a) Dados sobre TP 1

b) Dados sobre TP 4

Figura D-2: Mapas de Log Transmissividade e Carga hidráulica feitos com variograma linear a partir dos dados amostrados a) relativo a TP 1, b) relativo a TP4.

Figura D-3: Para TP 1 campo médio de Log T na parte superior, no centro uma realização qualquer com o percurso de uma partícula para aquela realização. Abaixo a cdf do tempo de trânsito com os envelopes de 95% dos casos, a linha grossa foi obtida do campo sintética e representa a 'realidade'.

Figura D-3: Para TP 1 campo médio de Log T na parte superior, no centro uma realização qualquer com o percurso de uma partícula para aquela realização. Abaixo a cdf do tempo de trânsito com os envelopes de 95% dos casos, a linha grossa foi obtida do campo sintética e representa a 'realidade'.

Figura D-3: Para TP 1 campo médio de Log T na parte superior, no centro uma realização qualquer com o percurso de uma partícula para aquela realização. Abaixo a cdf do tempo de trânsito com os envelopes de 95% dos casos, a linha grossa foi obtida do campo sintética e representa a 'realidade'.

Figura D-3: Para TP 4 campo médio de Log T na parte superior, no centro uma realização qualquer com o percurso de uma partícula para aquela realização. Abaixo a cdf do tempo de trânsito com os envelopes de 95% dos casos, a linha grossa foi obtida do campo sintética e representa a 'realidade'.

Figura D-3: Para TP 4 campo médio de Log T na parte superior, no centro uma realização qualquer com o percurso de uma partícula para aquela realização. Abaixo a cdf do tempo de trânsito com os envelopes de 95% dos casos, a linha grossa foi obtida do campo sintética e representa a 'realidade'.

Figura D-3: Para TP 4 campo médio de Log T na parte superior, no centro uma realização qualquer com o percurso de uma partícula para aquela realização. Abaixo a cdf do tempo de trânsito com os envelopes de 95% dos casos, a linha grossa foi obtida do campo sintética e representa a 'realidade'.

ANEXO E: CÁLCULO ROBUSTO DO HIPERELIPSÓIDE DE DISPERSÃO

Como já salientado no § IV.1.5, a exatidão da representação nas análises ACPP e Q-fatorial esta baseada na suposição de uma distribuição multinormal[†] das simulações utilizadas

É sabido que a detecção de observações anormais (outliers) em conjuntos multidimensionais não é simples (Rousseeuw & Leroy 1987). Para ilustrar a sensibilidade destes métodos as observações anormais e a dificuldade de detectá-los pelos métodos clássicos, é mais fácil considerar dados em duas dimensões, uma vez que neste caso o hiperelipsóide passa a ser visível como uma elipse.

Considere então a figura E-1, utilizando-se a distância de Mahalanobis dada por

$$Dm_i = \sqrt{(x_i - \text{Med}(\mathbf{X}))\mathbf{C}(\mathbf{X})^{-1}(x_i - \text{Med}(\mathbf{X}))^t} \quad (\text{E-1})$$

com $\text{Med}(\mathbf{X})$ representando a média da matriz $\mathbf{X}$ (dada pelo equação III-1), e $\mathbf{C}(\mathbf{X})$ a matriz de covariância de $\mathbf{X}$, o único ponto fora do elipsóide representado pela curva tracejada que define a elipse com 97.5% de tolerância ($\sqrt{\chi_{2,0.975}^2}$) é o ponto 25. Utilizando-se entretanto de estimadores de distância robustos para Med e $\mathbf{C}$, obtém-se o elipsóide em linha cheia indicando que todos os pontos (6,14,16,17,25) tem distância superior aos 97.5% da tolerância.

Com isso vê-se que a distância Dm não é satisfatória para dizer quão distante um ponto x_i é do centro da nuvem, considerando também a forma da nuvem. Para contornar este problema foram propostos outros estimadores mais robustos. Entre estes o que tem o maior ponto de quebra (breakdown point), quer dizer o que tolera a maior fração de outliers é o MVE (Mínimo Volume do Elipsóide), cujo ponto de quebra é a metade das observações mais uma.

O MVE procura o hiperelipsóide de menor volume que contenha o máximo das observações disponíveis. A partir do centro deste elipsóide e de sua matriz de covariância é possível se definir um estimador da distância robusto

O cálculo do MVE (Rousseeuw & Leroy 1987, Rousseeuw & Zomeren 1990) se faz procurando o par $(\text{Med}, \mathbf{C})$ que minimiza o determinante de $\mathbf{C}$ sujeito a :

$$\left\{ (x_i - \text{Med}(\mathbf{X}))\mathbf{C}(\mathbf{X})^{-1}(x_i - \text{Med}(\mathbf{X}))^t \leq \chi_{p,0.50}^2 \right\} \geq h$$

onde $h = ((n+p+1)/2)$, sendo $\mathbf{X}_{np}$ o conjunto de dados com n observações e p parâmetros,

[†] A multinormalidade implica que todas as combinações lineares de parâmetros são normais.

sendo:

$$\text{Med}(\mathbf{X}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (\text{E-2})$$

$$\mathbf{C}(\mathbf{X}) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \text{Med}(\mathbf{X}))^t (x_i - \text{Med}(\mathbf{X})) \quad (\text{E-3})$$

O cálculo é feito tomando-se subconjuntos de $p+1$ diferentes observações aos quais são adicionadas ou retiradas observações até que obtenha-se h pontos na nuvem de dispersão considerada. Toma-se então o subconjunto que resultou no menor valor do determinante de $\mathbf{C}$, isto é, onde cada um dos $p+1$ valores de $\mathbf{C}$ é calculado considerando somente os pontos selecionados naquele subconjunto.

O estimador da média é dado pela equação E-2, considerando somente o subconjunto escolhido e o estimador da covariância (E-3) é dado pelo elipsóide calculado corrigido por um fator para a obtenção de consistência.

Em muitas das aplicações não é possível calcular todos os subconjuntos possíveis para determinar o MVE devido ao tempo de cálculo proibitivo, por isso estuda-se a consistência dos resultados para uma amostragem dentro do número total de possibilidades. Por exemplo, se exaustivamente fosse necessário calcular-se um milhão de subconjuntos toma-se somente cem mil, e calcula-se então o MVE para diversos subgrupos de cem mil. Caso para todos os subgrupos os resultados mostrarem-se consistentes, considera-se que a amostragem foi suficientemente representativa, senão toma-se uma amostragem maior.

Na prática são necessários também, segundo regra empírica proposta por Rousseeuw & Zomeren (1990), pelo menos 5 observações por parâmetro para que não haja problemas numéricos com a colinearidade durante os cálculos.

Figura E-1: Gráfico do Log do peso do cérebro por Log peso do corpo com elipses de tolerância a 97.5% usando a média e a covariância clássicas (linha tracejada) e estas calculadas por estimador robusto (linha cheia). Pontos 6,16 e 25 são dinossauros, pontos 14 e 17 são respectivamente o homem e o macaco.

Errata da tese de doutorado de Alvaro Bueno Buoro
defendida em 21/6/99 no Instituto de Geociências – USP

Caro leitor,

Visando facilitar a leitura achei prudente refazer algumas das figuras em cores, elas não tiveram modificações na forma nem no conteúdo.

As modificações do texto seguem abaixo:

No terceiro parágrafo da página 12 substituir "(i.e. Log T negativo)" por "(i.e. T negativo)"

No ultimo parágrafo da página 12 substituir "... calagem..." por "... ajuste..."

No final primeiro parágrafo da página 21 substituir "...dos parâmetros de uma..." por "...dos parâmetros a uma..."

No primeiro parágrafo da página 56 incluir após "tipo WIPP" a referencia (vide III.3.2)

No final da página 71 trocar na tabela IV-2 na linha dos métodos SS por SF e SF por SS

No primeiro parágrafo da página 72 penultima linha "...como pode-se ver comparando-se ..." por "...vê-se comparando..."

No final da página 110 substituir o parágrafo inteiro.

" Com relação ao decaimento da função-objetivo tem-se na figura IV-38 a variação desta para diferentes tipos de campos de Log T em função do índice das iterações, representando cada uma um ponto piloto adicionado para a solução do problema inverso. Pode-se notar que a simulação - feita segundo a explicação do § III.3.2 - começa com o menor valor da função-objetivo, mas a resimulação tipo 2 após 3 iterações já esta mais próxima da convergência. Isto nos indica que a resimulação tipo 2 pode ser utilizados como campo inicial satisfatoriamente, já a resimulação tipo 1 não oferece nenhum interesse quanto a convergência da solução inversa."

A tabela a seguir relaciona o número das figuras as páginas onde elas aparecem.

Figura Número	Página	Figura Número	Página
III-2	35	IV-28	101
III-3	37	IV-30	103
IV-2	66	IV-31	104
IV-7	72		
IV-11	76		
IV-21	93		
IV-23	95

Figura III-2: Variograma para os 10 primeiros autovetores. “AV” indica autovetor

Figura III-3: Escolha do termo aleatório A da resimulação para cada um dos k autovetores indicados no eixo das abscissas para cada uma das escolhas aleatórias definidas por uma série.

Figura IV-2: Posicionamento da re-amostragem feita segundo características de cada método

Figura IV-7: Distribuição dos autovalores em termos absolutos, indicando sob a curva o volume do hiperelipsóide contendo todas as simulações.

Figura IV-11: Delimitação dos autovalores em termos absolutos, indicando sob a curva o volume do hiperelipsóide contendo todas as simulações.

Figura IV-21: Para o método SS no TP1: a) Campo médio sobre as 100 simulações na escala de cinza- e valor nos pontos de controle nos símbolos; todos os valores em Log T. b) Desvio padrão sobre as 100 simulações. c) Uma simulação original.

Figura IV-23: Diferença para o quartil 25% (dif25), a média (dif med) e o quartil 75% (dif75) calculadas entre 100 simulações e 100 resimulações, para os diferentes métodos.

Errata da tese de Alvaro Bueno Buoro

Figura IV-28: Amostragem realizada sobre TP4 para todos os métodos

Figura IV-30: Valor absoluto do autovalor em função do seu índice

Figura IV-31: Posicionamento da região de maior contribuição no primeiro valor para TP4. Só os 5% extremos da distribuição de cada método são mostrados.