

Expansão de Caos Polinomial

Neste capítulo, apresentaremos a teoria fundamental da Expansão por Caos Polinomial (ECP) que utilizaremos para representar a resposta de um modelo aleatório. Começamos com uma representação de quantidades aleatórias desconhecidas (como por exemplo, a representação de variáveis aleatórias) por meio de uma base de polinômios de Hermite de dimensão finita

$$\{\Phi_i(X)\}_{0 \leq i \leq N} \in \mathbb{P}_N,$$

conhecida como Caos Polinomial Homogêneo. Isto quer dizer, que se Y representa nossa resposta aleatória do sistema físico, então, Y pode ser aproximado como:

$$Y \approx \sum_{i=0}^N a_i \Phi_i. \quad (4-1)$$

Em seguida, vamos estudar o caso de Caos Polinomial Generalizado. Esta técnica tem como objetivo representar o sistema de resposta aleatória por meio de qualquer base de polinômios, além dos polinômios de Hermite; como por exemplo funcionais polinomiais de Laguerre ou Legendre.

Expansões por bases polinomiais são uma técnica de Análise Numérica bastante utilizada (Stoer et al., 2002). Como por exemplo, para resolução de problemas envolvendo equações integrais e diferenciais (Boyd, 2000). Uma das razões para escolher uma ECP é que esta técnica representa uma das mais frequentes aproximações não amostrais encontradas na literatura.

Dentre das ECP mais conhecidas está o Caos Polinomial Homogêneo; também conhecido como Expansão Wiener-Hermite (ou Expansão Hermite). Este conceito foi originalmente introduzido por Wiener (1938), que segundo Ghanem & Spanos (1991) representa uma extensão do trabalho de Volterra em uma generalização de séries de Taylor para funcionais. E inicialmente buscava representar uma variável aleatória por uma série de polinômios de Hermite em uma sequência de variáveis aleatórias Gaussianas independentes (i.e., variáveis aleatórias $N(0, 1)$). Logo, baseados nas ideias de Wiener, Cameron & Martin (1947) provaram que os polinômios de uma sequência de variáveis aleatórias

Gaussianas padrão e independentes estão em um conjunto denso de variáveis aleatórias com variância finita, as quais são mesuráveis com respeito a essas variáveis aleatórias Gaussianas.¹ E foi até 1991 que Ghanem & Spanos foram os pioneiros em aplicar esta expansão em problemas que apareciam no campo de mecânica sólida usando uma discretização de Elementos Finitos no espaço de variáveis.

Por sua vez, Karniadakis & Xiu (2002) descobriram que melhores aproximações de variáveis aleatórias podem ser conseguidas usando expansões polinomiais em variáveis aleatórias não Gaussianas. Esta generalização foi feita usando os polinômios ortogonais do esquema Askey. Segundo eles, se a ECP de Wiener-Askey é escolhida com respeito à distribuição de probabilidade de uma entrada aleatória, então a ECP pode alcançar a taxa ideal de convergência. Particularmente, sugeriram que a convergência de processos estocásticos de segunda ordem poderiam ser obtidos a partir da generalização do Teorema de Cameron-Martin.² Todo isto foi aplicado nas pesquisas de Xiu & Karniadakis (2002, 2003), conseguindo bons resultados para expandir equações diferenciais estocásticas.

4.1

Caos Polinomial Homogêneo

Antes de definir formalmente a noção de Caos Polinomial Homogêneo precisamos estabelecer algumas notações e conceitos introdutórios à teoria.

Definição 4.1 (Espaço Linear Gaussiano) *Um espaço linear Gaussiano \mathbb{G} é um espaço linear real de variáveis aleatórias, definidas em algum espaço de probabilidade (Θ, \mathcal{F}, P) tal que cada variável aleatória no espaço é Gaussiana centrada.*

Pode-se mostrar que um espaço linear Gaussiano é também subespaço linear de $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ (ver, e.g., Janson (1997)). Além disso, podemos verificar que o produto interno em \mathbb{G} é o produto interno induzido por L^2 , isto é,

$$\langle u; v \rangle = \int_I u(x)v(x)w(x)dx, \quad \forall u, v \in L^2. \quad (4-2)$$

Além disso, a norma em (Θ, \mathcal{F}, P) é dada por:

$$\|u\| = \left(\int_I u^2(x)w(x)dx \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4-3)$$

¹Note que a maioria dos problemas físicos satisfazem a hipótese de que o segundo momento da distribuição de probabilidade é finito.

²Xiu & Karniadakis (2002)

Como um espaço de Hilbert Gaussiano é um espaço linear com produto interno completo (i.e. um subespaço fechado de $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ que consiste das variáveis aleatórias centradas gaussianas), o resultado a seguir mostra que todo espaço linear Gaussiano pode ser completado, ou seja, podemos “transformar” \mathbb{G} em um espaço de Hilbert.

Teorema 4.1 *Se $\mathbb{G} \subset L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ é um espaço linear Gaussiano, então seu fecho $\overline{\mathbb{G}} \in L^2$ é um espaço Gaussiano de Hilbert.*

Demonstração: Ver, e.g., Janson, 1997, p. 4. □

Portanto, podemos considerar sem perda de generalidade só espaços de Hilbert Gaussianos. Agora, seja \mathcal{H} um espaço de Hilbert Gaussiano. Considere $\{X_i\}_{i=1}^{\infty}$ uma sequência de variáveis aleatórias Gaussianas centradas, normalizadas e mutuamente ortogonais. Para $n \in \mathbb{Z}^{+3}$ defina

$$\mathbb{P}_n(\mathcal{H}) := \{p(X_1, \dots, X_M) : p \text{ é um polinômio de grau } \leq n\},$$

onde $X_j \in \mathcal{H}$; $j = 1, \dots, M$ e $M \in \mathbb{N}$.

Como as variáveis aleatórias são independentes e têm distribuição gaussiana, então os momentos de variáveis aleatórias diferentes são os produtos dos momentos individuais. Por exemplo, se X e Y são variáveis aleatórias Gaussianas independentes, segue que $E[XY] = E[X]E[Y]$. Daí, pode-se verificar que $\mathbb{P}_n(\mathcal{H})$ é um subespaço linear de $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ para cada $n \geq 0$. Logo, $\overline{\mathbb{P}}_n(\mathcal{H})$ (i.e. o fecho de $\mathbb{P}_n(\mathcal{H})$) é um espaço de Hilbert.

Logo, pode-se verificar que os espaços $\mathbb{P}_n(\mathcal{H})$ e $\overline{\mathbb{P}}_n(\mathcal{H})$ são distintos para qualquer valor de n . Em particular, por definição, $\{\overline{\mathbb{P}}_n(\mathcal{H})\}_{n=0}^{\infty}$ forma uma sequência estritamente crescente de subespaços fechados de $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$. Agora, definamos os espaços \mathcal{H}_n como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_n &= \overline{\mathbb{P}}_n(\mathcal{H}) \ominus \overline{\mathbb{P}}_{n-1}(\mathcal{H}) \\ &= \overline{\mathbb{P}}_n(\mathcal{H}) \cap \overline{\mathbb{P}}_{n-1}(\mathcal{H})^{\perp}; \quad n \in \mathbb{N}, \end{aligned} \tag{4-4}$$

com $\mathcal{H}_0 := \overline{\mathbb{P}}_0(\mathcal{H}) = \mathbb{P}_0(\mathcal{H})$. Nesta equação $\overline{\mathbb{P}}_{n-1}(\mathcal{H})^{\perp}$ denota o complemento ortogonal de $\overline{\mathbb{P}}_{n-1}(\mathcal{H})$ em $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$, ou seja, consiste de todos os elementos em $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ que são ortogonais a cada polinômio em $\overline{\mathbb{P}}_{n-1}(\mathcal{H})$. Note que $\overline{\mathbb{P}}_{n-1}(\mathcal{H})^{\perp}$ é um subespaço linear de $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$.

³ \mathbb{Z}^+ o conjunto dos inteiros positivos.

Além disso, pela eq. (4-4) podemos afirmar que $\{\mathcal{H}_n\}$ é uma coleção de espaços de Hilbert ortogonais entre si ($\forall i$ e $j \in \mathbb{N} : \mathcal{H}_i \perp \mathcal{H}_j$). Daí, a soma direta destes subespaços é de novo um espaço linear de $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ (ver, e.g., Janson (1997)). Em outras palavras, esta decomposição ortogonal é dada como:

$$\overline{\mathbb{P}}_n = \bigoplus_{k=0}^n \mathcal{H}_k,$$

onde \bigoplus denota a soma direta (ortogonal) de espaços lineares. Além disso, podemos considerar todo o espaço como

$$\bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n = \overline{\bigcup_{n=0}^{\infty} \overline{\mathbb{P}}_n(\mathcal{H})}.$$

Finalmente, note que para um espaço linear Gaussiano \mathcal{H} definido em (Θ, \mathcal{F}, P) sempre temos $\sigma(\mathcal{H}) \subset \mathcal{F}$.

A seguir, vamos estabelecer o Teorema de Cameron-Martin para polinômios de variáveis aleatórias Gaussianas. Este teorema, afirma que os polinômios de uma sequência de variáveis aleatórias estão num conjunto denso de variáveis aleatórias com variância finita.

Teorema 4.2 (Teorema de Cameron-Martin) *Considere a notação definida nos parágrafos anteriores. Os espaços $\{\mathcal{H}_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ formam uma sequência de subespaços fechados mutuamente ortogonais de $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ tal que*

$$\bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n = L^2(\Theta, \sigma(\mathcal{H}), P).$$

Em particular, se $\sigma(\mathcal{H}) = \mathcal{F}$, então $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ admite uma decomposição ortogonal

$$L^2(\Theta, \mathcal{F}, P) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n.$$

Demonstração: Ver, e.g., Janson, 1997, p. 18. □

Note que, os elementos dos espaços L^2 e \mathcal{H} são classes de equivalência de variáveis aleatórias. Portanto, a notação $\sigma(\mathcal{H})$ implica que todas essas funções de equivalência devem ser mensuráveis, isto quer dizer que esta σ -álgebra é gerada por um representante de cada classe de equivalência.

Por último, uma projeção ortogonal P é uma transformação linear idempotente (i.e., $P^2 = P$) de um espaço de Hilbert nele mesmo, tal que

$\mathcal{R}(P) \perp \mathcal{N}(P)$.⁴ Em nosso contexto, pela definição de \mathcal{H}_n , a única projeção ortogonal $P_n : L^2 \rightarrow L^2$ para o qual $\mathcal{R}(P) = \mathcal{H}_n$ é a projeção ortogonal em \mathcal{H}_n .

Agora vamos definir a noção de Expansão de Caos Polinomial Homogêneo para uma variável aleatória. Seja $Y \in L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ uma variável aleatória, segue que

$$Y = \sum_{k=0}^{\infty} P_k, \quad (4-5)$$

é o Caos Polinomial Homogêneo, onde P_k é uma projeção ortogonal. Logo, Y pode ser aproximada por somas parciais

$$Y \approx Y_n := \sum_{k=0}^n P_k.$$

Podemos interpretar a noção de Caos Polinomial Homogêneo como uma variação da expansão do Teorema da Série de Fourier. Seja N um número inteiro não negativo. Considere $\{\Phi_k(x)\}_{k=0}^N \subset \mathbb{P}_N$ uma sequência de polinômios ortogonais de grau no máximo N com respeito a função peso $w(x)$. O operador projeção $P_N : L^2 \rightarrow \mathbb{P}_N$ é definido $\forall f \in L^2$, como

$$P_N f = \sum_{k=0}^N \hat{f}_k \Phi_k, \quad (4-6)$$

onde \hat{f}_k são os chamados coeficientes de Fourier dados por

$$\hat{f}_k = \frac{1}{\|\Phi_k\|^2} \langle f; \Phi_k \rangle, \quad 0 \leq k \leq N. \quad (4-7)$$

Nos parágrafos anteriores, definimos o conceito mais abstrato de Caos Polinomial Homogêneo. A seguir, vamos estabelecer uma definição equivalente à nossa para Caos Polinomial Homogêneo. Consideremos a variável aleatória de valor real Y definida no espaço de probabilidade (Θ, \mathcal{F}, P) , tal que

$$Y : \Theta \rightarrow \mathbb{R}.$$

⁴Seja uma função com domínio X e contradomínio Y . O range de F é a imagem de X sob F isto quer dizer: $\mathcal{R}(F) = \{x \in Y : y = F(x) \text{ para algum } x \in X\}$. Por outro lado, $\mathcal{N}(F)$ representa o kernel de F , isto é, $\mathcal{N}(F) = \{x \in X : Fx = 0\} = F^{-1}(\{0\})$.

O caos polinomial fornece um meio para expandir cada variável de segundo ordem de $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ em termos de polinômios de Hermite

$$\begin{aligned}
Y(\theta) &= a_0 H_0 + \sum_{i=1}^{\infty} a_{i_1} H_1(X_{i_1}(\theta)) \\
&+ \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} a_{i_1 i_2} H_2(X_{i_1}(\theta), X_{i_2}(\theta)) \\
&+ \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} a_{i_1 i_2 i_3} H_3(X_{i_1}(\theta), X_{i_2}(\theta), X_{i_3}(\theta)) \\
&+ \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} \sum_{i_4=1}^{i_3} a_{i_1 i_2 i_3 i_4} H_4(X_{i_1}(\theta), X_{i_2}(\theta), X_{i_3}(\theta), X_{i_4}(\theta)) \\
&+ \dots, \tag{4-8}
\end{aligned}$$

onde $\theta \in \Theta$ é um evento aleatório, $H_p(X_{i_1}(\theta), \dots, X_{i_n}(\theta))$ denota os polinômios de Hermite multidimensionais de ordem p em termos de variáveis aleatórias Gaussianas independentes, e os limites superiores nas somatórias refletem a simetria dos polinômios com respeito aos seus argumentos. Note que, dado que as variáveis aleatórias são funções, e os polinômios são funções destas variáveis aleatórias, então os polinômios são considerados funcionais (ver, e.g., (Ghanem & Spanos)). Além disso, pelo Teorema de Cameron-Martin a representação da eq. (4-8) converge em média quadrática, isto quer dizer que

$$\lim_{p \rightarrow \infty} E \left[\left(a_0 H_0 + \dots + \sum_{i_1=1}^{\infty} \dots \sum_{i_p=1}^{i_{p-1}} a_{i_1 \dots i_p} H_p(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_p}) - Y \right) \right] = 0. \tag{4-9}$$

Para tornar o texto mais claro, podemos reescrever a eq. (4-8) como

$$Y(X) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{a}_k \Phi_k(X); \quad X = \{X_1, X_2, \dots\}, \tag{4-10}$$

onde por simplicidade não representamos explicitamente a dependência de θ em $\mathbf{X} = (X_{i_1}, \dots, X_{i_n})$. Além disso, pode-se mostrar que existe uma bijeção entre os termos $H(\cdot)$ e os novos funcionais $\Phi(\cdot)$, assim como entre os coeficientes das duas representações. Assim mesmo, na eq. (4-10) a família $\{\Phi_k\}$ é uma base ortogonal completa de $L^2(\Theta, \mathcal{F}, P)$ que satisfaz:

$$\langle \Phi_n; \Phi_m \rangle = \gamma_n \delta_{nm}; \quad n, m \in \mathbb{N}, \tag{4-11}$$

onde o produto interno no espaço de funcionais aleatórios é o valor esperado

definido por:

$$E[\Phi_n(X)\Phi_m(X)] = \int_{\Theta} \Phi_n(X)\Phi_m(X)w(X)dX,$$

com função peso dada por:

$$w(X) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \exp\left(\frac{-1}{2} X^t X\right),$$

que representa a função de densidade de probabilidade Gaussiana, e portanto, o termo γ_i na eq. (4-11) é igual a $E[\Phi_n^2(X)]$. Logo, os coeficientes \hat{a}_k na eq. (4-10) são dados por

$$\hat{a}_k = \frac{1}{\gamma_k} E[X\Phi_k(X)].$$

4.1.1

Base Polinomial do Caos Homogêneo

Como foi visto na seção anterior, na Expansão Polinomial do Caos Homogêneo, eq. (4-10), utilizamos os polinômios de Hermite multidimensionais para representar respostas aleatórias. Dado que até o momento só foram mencionados os polinômios de Hermite de uma variável, precisamos definir como são os polinômios multidimensionais.

Uma maneira simples de construir a base de dimensão N é fazer um produto tensorial a partir dos polinômios de uma dimensão. Inicialmente vamos voltar nossa atenção para os polinômios de uma única variável aleatória. Lembre que os polinômios de Hermite são ortogonais e que a função de densidade de probabilidade de uma variável aleatória X Normal é dada por:

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/2). \quad (4-12)$$

Seja $\phi_p(X)$ os polinômios de Hermite unidimensionais de ordem p , onde o polinômio de grau 0 é $\phi_0(X) = 1$. A condição de ortogonalidade pode ser expressa por:

$$\begin{aligned} E[\phi_i\phi_j] &= \int_{\Theta} \phi_i(X(\theta))\phi_j(X(\theta))dP(\theta) = \langle \phi_i, \phi_j \rangle \\ &= \int_{\Theta} \phi_i(y)\phi_j(y)f_{\xi}(y)dy = \delta_{ij} \langle \phi_i, \phi_i \rangle, \end{aligned} \quad (4-13)$$

onde os polinômios são normalizados de tal forma que $\langle \phi_k, \phi_k \rangle = \gamma_i$. Os

polinômios Hermite de uma dimensão são ortogonais com respeito à medida Gaussiana. Agora, a partir destes polinômios de Hermite unidimensionais será construído o caso de uma base multidimensional.

Para isso, considere $\mathbf{X} = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ um conjunto de variáveis aleatórias independentes, onde cada X_i têm distribuição Gaussiana para $i = 1, 2, \dots, n$. Daí, podemos definir a função de densidade de probabilidade de \mathbf{X} por:

$$f_{\mathbf{X}}(x) = \prod_{i=1}^n f_X(x_i).$$

Logo, considere $\mathbf{i} = (i_1, \dots, i_n) \in \mathbb{N}_0^n$ um multi-índice com $|\mathbf{i}| = i_1 + \dots + i_n$. Por exemplo na Tabela 4.1 aparecem os multi-índices para um vetor de dimensão 4.

\mathbf{i}	Multi-índice \mathbf{i}	Índice único \mathbf{k}
0	(0 0 0 0)	1
1	(1 0 0 0)	2
	(0 1 0 0)	3
	(0 0 1 0)	4
	(0 0 0 1)	5
2	(2 0 0 0)	6
	(1 1 0 0)	7
	(1 0 1 0)	8
	(1 0 0 1)	9
	(0 2 0 0)	10
	(0 1 1 0)	11
	(0 1 0 1)	12
	(0 0 2 0)	13
3	(0 0 1 1)	14
	(0 0 0 2)	15
	(3 0 0 0)	16
	(2 1 0 0)	17
	(2 0 1 0)	18

Tabela 4.1: Exemplo do multi-índice de dimensão 4

Daí, podemos construir a base dos polinômios multidimensionais de Hermite de dimensão n de ordem p , como o produto dos polinômios de Hermite unidimensionais de grau total menor ou igual a p , isto é:

$$\Phi_{\mathbf{i}}(\mathbf{X}) = \phi_{i_1}(X_1) \cdots \phi_{i_n}(X_n), \quad 0 \leq |\mathbf{i}| \leq p. \quad (4-14)$$

Logo, temos que:

$$E[\Phi_i \Phi_j] = \int_C \Phi_i(x) \Phi_j(x) f_{\mathbf{X}}(x) dx = \delta_{ij} \gamma_i, \quad (4-15)$$

onde $\delta_{ij} = \delta_{i_1 j_1} \cdots \delta_{i_n j_n}$ e $\gamma_i = E[\Phi_i \Phi_i] = \gamma_{i_1} \cdots \gamma_{i_n}$.

Como exemplo exibimos uma expansão do Caos Polinomial Homogêneo para um vetor aleatório de duas dimensões $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$:

$$\begin{aligned} X &= a_0 H_0 + a_1 H_1(X_1) + a_2 H_1(X_2) \\ &+ a_{11} H_2(X_1) + a_{21} H_1(X_2) H_1(X_1) + a_{22} H_2(X_2) + \cdots \\ &= \hat{a}_0 + \hat{a}_1 X_1 + \hat{a}_2 X_2 \\ &+ \hat{a}_3 (X_1^2 - 1) + \hat{a}_4 X_1 X_2 + \hat{a}_5 (X_2^2 - 1) + \cdots \end{aligned} \quad (4-16)$$

Logo, a Tabela 4.2 e a Tabela 4.3 exibem, respectivamente, as expressões para os polinômios de dimensão 2 e 3. E as figuras, figura 4.1 e figura 4.2, apresentam os polinômios de Hermite de ordem 0, 1 e 2 e os polinômios de Hermite de ordem 3, respectivamente.

j	Ordem p	j-ésimo Polinômio de Hermite
0	$p = 0$	1
1	$p = 1$	X_1
2		X_2
3	$p = 2$	$X_1^2 - 1$
4		$X_1 X_2$
5		$X_2^2 - 1$
6	$p = 3$	$X_1^3 - 3X_1$
7		$X_1^2 X_2 - X_2$
8		$X_2^2 X_1 - X_1$
9		$X_2^3 - 3X_2$
10	$p = 4$	$X_1^4 - 6X_1^2 + 3$
11		$X_1^3 X_2 - 3X_1 X_2$
12		$X_1^2 X_2^2 - X_1^2 - X_2^2 + 1$
13		$X_2^3 X_1 - 3X_2 X_1$
14		$X_2^4 - 6X_2^2 + 3$

Tabela 4.2: Polinômios de Hermite de Duas Dimensões

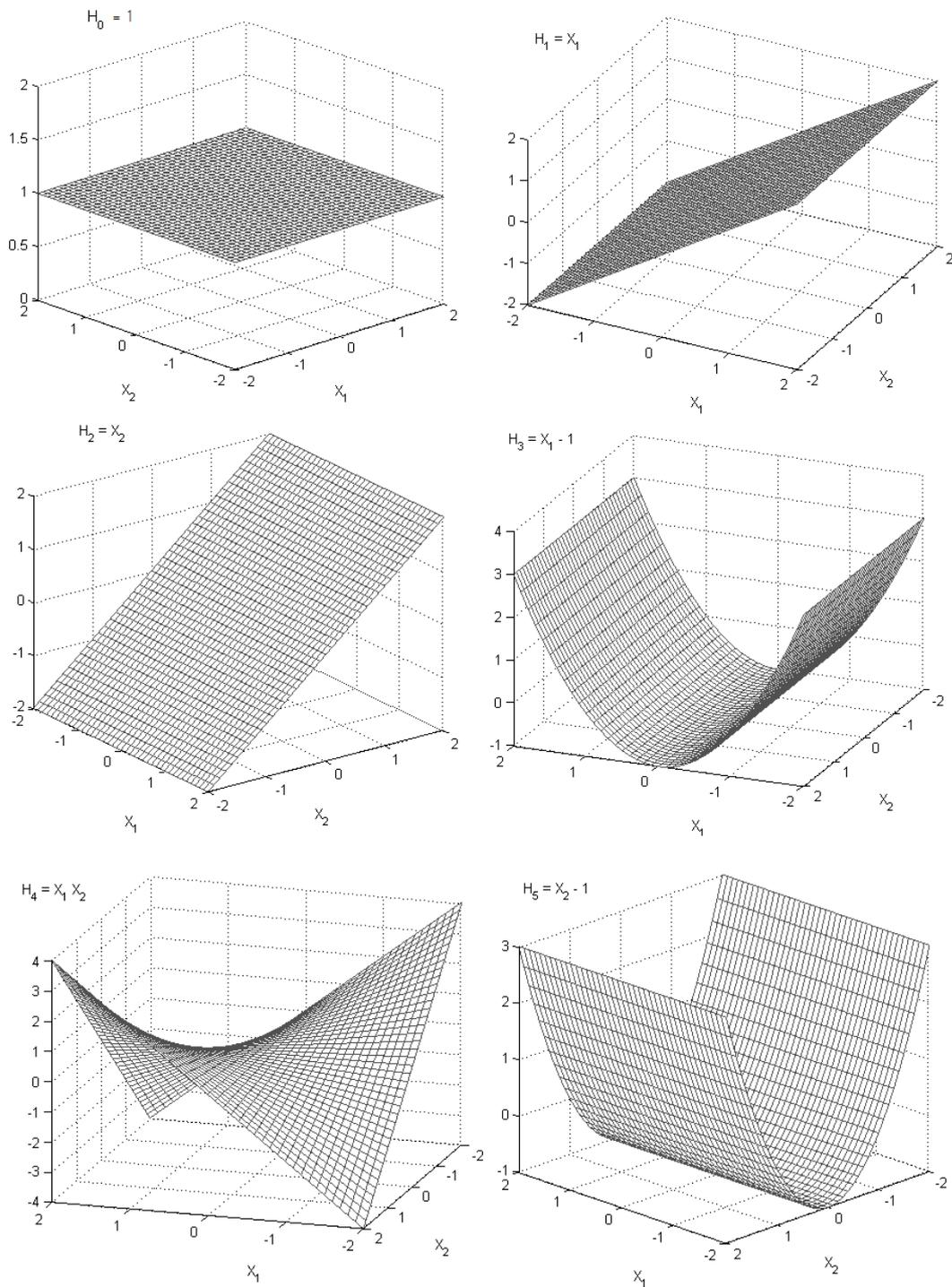


Figura 4.1: Polinômios de Hermite Ordem 0, 1, 2.

j	Ordem p	j-ésimo Polinômio de Hermite
0	$p = 0$	1
1	$p = 1$	X_1
2		X_2
3		X_3
4	$p = 2$	$X_1^2 - 1$
5		X_1X_2
6		X_1X_3
7		$X_2^2 - 1$
8		X_2X_3
9		$X_3^2 - 1$
10	$p = 3$	$X_1^3 - 3X_1$
11		$X_1^2X_2 - X_2$
12		$X_1^2X_3 - X_3$
13		$X_2^2X_1 - X_1$
14		$X_1X_2X_3$
15		$X_3^2X_1 - X_1$
16		$X_2^3 - 3X_2$
17		$X_2^2X_3 - X_3$
18		$X_3^2X_2 - X_2$
19	$p = 4$	$X_3^3 - 3X_3$
20		$X_1^4 - 6X_1^2 + 3$
21		$X_1^3X_2 - 3X_1X_2$
22		$X_1^3X_3 - 3X_1X_3$
23		$X_1^2X_2^2 - X_1^2 - X_2^2 + 1$
24		$X_1^2X_2X_3 - X_2X_3$
25		$X_1^2X_3^2 - X_1^2 - X_3^2 + 1$
26		$X_2^3X_1 - 3X_2X_1$
27		$X_2^2X_1X_3 - X_1X_3$
28		$X_3^2X_1X_2 - X_1X_2$
29		$X_3^3X_1 - 3X_1X_3$
30		$X_2^4 - 6X_2^2 + 3$
31	$X_2^3X_3 - 3X_2X_3$	
32	$X_2^2X_3^2 - X_2^2 - X_3^2 + 1$	
33	$X_3^3X_2 - 3X_2X_3$	
34	$X_3^4 - 6X_3^2 + 3$	

Tabela 4.3: Polinômios de Hermite de Três Dimensões

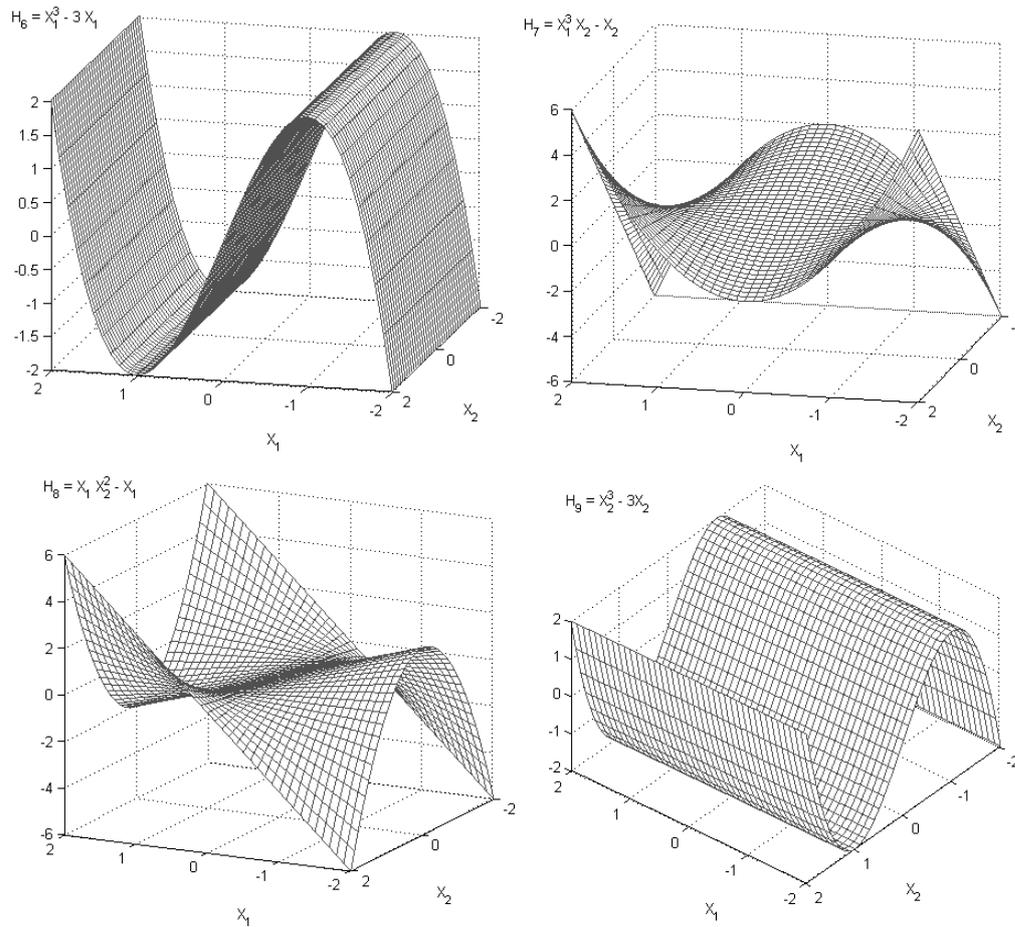


Figura 4.2: Polinômios de Hermite Ordem 3.

4.1.2

Expansão CP truncada

Por definição, o Caos Polinomial Homogêneo é uma função de um conjunto infinito de variáveis $\{X_i\}_{i=1}^{\infty}$, portanto um polinômio de dimensão infinita. No entanto, na prática, para propósitos computacionais temos que truncar a expansão até número finito N de termos. Daí, é preciso truncar a base polinomial que expande a função que desejamos investigar. Ou seja, considere o número de variáveis por $n \in \mathbb{N}$ e o grau máximo de polinômios por p . Segundo Ghanem & Spanos (1991) a variável N é dado por:

$$N = \frac{(n+p)!}{n!p!}. \quad (4-17)$$

Daí, a expansão truncada de uma variável aleatória Y pode ser expressada como:

$$Y = \sum_{k=0}^N \hat{a}_k \Phi_k(X) + \epsilon(n, p), \quad (4-18)$$

onde $\epsilon(n, p)$ representa o erro dependendo de n e p . Note que $\epsilon(n, p)$ é também uma variável aleatória, tal que Y converge no sentido média quadrática quando n e p vão para infinito. Isto quer dizer que:

$$\lim_{n, p \rightarrow \infty} \langle \epsilon(n, p); \epsilon(n, p) \rangle = 0.$$

Como o número de termos, N , depende da ordem do polinômio e do número de variáveis aleatórias, segue que para valores “pequenos” de p e n temos uma representação eficiente do ECP. Na Tabela 4.4 é representada essa dependência de N com n e p , onde o número de termos na expansão cresce rapidamente. O qual se apresenta como uma deficiência da técnica. Na prática, n depende do número das fontes de incerteza. E a ordem do polinômio p depende da variável aleatória Y que queremos representar (ver, e.g., Le Maitre & Knio, 2010).

p / n	1	2	3	4	5	6	7	8
1	2	3	4	5	6	7	8	9
2	3	6	10	15	21	28	36	45
3	4	10	20	35	56	84	120	165
4	5	15	35	70	126	210	330	495
5	6	21	56	126	252	462	792	1287
6	7	28	84	210	462	924	1716	3003
7	8	36	120	330	792	1716	3432	6435
8	9	45	165	495	1287	3003	6435	12870

Tabela 4.4: Dependência do número de termos com N e p .

4.2 Caos Polinomial Generalizado

O Caos Polinomial Homogêneo visto na seção anterior tem provado ser eficiente para entradas Gaussianas. No entanto, muitos problemas envolvem variáveis aleatórias não Gaussianas. Nestes casos, aproximações por ECP usando o Caos Polinomial Homogêneo pode provocar uma convergência de maneira bem mais lenta (Xiu & Karniadakis, 2002). Isto porque as aproximações obtidas utilizando variáveis aleatórias Gaussianas são muitas vezes não-lineares, pelo que obter uma boa aproximação precisa de uma truncção do Caos Polinomial Homogêneo de ordem muito alto (Ernst, 2012).

Uma estratégia para melhorar a taxa de convergência é o uso de uma Expansão de Caos Polinomial generalizada (generalização do Caos Polinomial Homogêneo). Esta aproximação está baseada em uma expansão de variáveis aleatórias não-Gaussianas cuja distribuição para cada termo seja mais próxima das variáveis aleatórias a serem expandidas. Permitindo assim boas aproximações com uma ordem mais baixa.

A ECP generalizada é uma ferramenta utilizada no tratamento de variáveis aleatórias cujas distribuições não são Gaussianas. E como no Capítulo 3 estabelecemos a existência de uma sequência de polinômios ortogonais do esquema Askey para qualquer função de distribuição de probabilidade (desde que todos seus momentos sejam finitos) vamos a considerar $\{X_i(\theta)\}$ um conjunto de variáveis aleatórias ortonormais com uma mesma distribuição (esta distribuição pode ser qualquer, mas trabalharemos só com distribuições contínuas), tal que X_i é independente de X_j , $\forall i \neq j$. Como na seção 4.1, iremos definir um processo de segunda ordem Y da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 Y(\theta) &= c_0 I_0 + \sum_{i=1}^{\infty} c_{i_1} I_1(X_{i_1}) \\
 &+ \sum_{i_1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} c_{i_1 i_2} I_2(X_{i_1}, X_{i_2}) \\
 &+ \sum_{i_1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} c_{i_1 i_2 i_3} I_3(X_{i_1}, X_{i_2}, X_{i_3}) \\
 &+ \dots, \tag{4-19}
 \end{aligned}$$

onde $I_n(X_{i_1}, \dots, X_{i_n})$ denota algum membro dos polinômios do esquema Askey de ordem n em termos do vetor aleatório $\mathbf{X} = (X_{i_1}, \dots, X_{i_n})$. Note que os polinômios devem corresponder as distribuições das variáveis X_{i_j} associadas como o respectivo suporte. Como pode ser visto na Tabela 4.5.

Além disso, podemos reescrever a eq. (4-19) com uma notação mais conveniente:

$$Y(\theta) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \Phi_k(X); \quad X = (X_1, X_2, \dots), \tag{4-20}$$

onde $\{\Phi_k\}$ uma família de polinômios no esquema de Askey. Como esta família forma uma base para o espaço de Hilbert que estamos investigando (i.e., o espaço de Hilbert determinado pelo correspondente vetor X), segue pelo Teorema de Cameron-Martin que Φ_k converge em L^2 para cada Φ_k em $\{\Phi_k\}$.

Distribuição de Probabilidade	Polinômios	Suporte	
Contínuas	Normal	Hermite	$(-\infty, \infty)$
	Exponencial	Laguerre	$[0, \infty)$
	Beta	Jacobi	$[a, b]$
	Uniforme	Legendre	$[a, b]$
Discretas	Poisson	Charlier	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Binomial	Krawtchouk	$\{0, 1, 2, \dots, N\}$
	Binomial Negativa	Meixner	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Hipergeométrica	Hahn	$\{0, 1, 2, \dots, N\}$

Tabela 4.5: Tabela Askey

Note que na eq. (4-20) a família $\{\Phi_k\}$ satisfaz:

$$\langle \Phi_n; \Phi_m \rangle = \gamma_n \delta_{nm}; \text{ onde } n, m \in \mathbb{N}. \quad (4-21)$$

Além disso, os coeficientes \hat{c}_k na eq. (4-20) são dados por

$$\hat{c}_k = \frac{1}{\gamma_k} E[X \Phi_k(X)].$$

Logo, o produto interno no espaço de funcionais aleatórios é o valor esperado definido por:

$$E[\Phi_n(X) \Phi_m(X)] = \int_{\mathcal{C}} \Phi_n(X) \Phi_m(X) w(X) dX,$$

onde a função peso $w(X)$ é representada pela distribuição de probabilidade associada ao respectivo polinômio do esquema Askey e \mathcal{C} é o respectivo suporte. Consequentemente, podemos estabelecer a igualdade abaixo:

$$\gamma_k = E[\Phi_n^2(X)].$$

Para finalizar, consideramos relevante reforçar o argumento estabelecido no início deste capítulo. Para problemas com modelos baseados em previsões, a distribuição de probabilidade da solução do modelo a ser determinado geralmente não é conhecida a priori. Portanto, não podemos saber qual seria a família de polinômios ortogonais ótima para realizar a expansão. No entanto, como conhecemos a distribuição de probabilidade das incertezas que desejamos propagar, podemos usar a medida associada a estas incertezas para gerar uma base para a ECP.

No decorrer deste capítulo mostramos como fazer isto. Vimos que se Y representa a resposta aleatória de um modelo então por meio da ECP podemos

aproximá-la a partir de uma base de polinômios ortogonais. Em particular, se esse modelo está em termos de variável ou vetor aleatório X do tipo Gaussiana, então usamos uma expansão de Caos Polinomial Homogêneo que tem uma base de polinômios ortogonais de Hermite. Caso contrário, podemos usar uma base polinomial do esquema Askey e fazer a expansão de Caos Polinomial generalizado.

No próximo capítulo vamos utilizar a teoria desenvolvida nos três primeiros capítulos (particularmente, a técnica do Caos Polinomial) para apresentar a teoria de propagação de incertezas que será aplicada na simulação em reservatórios de petróleo fictícios, que representa um modelo físico.