



AVANÇOS RECENTES EM CIÊNCIAS DA ENGENHARIA

Editores

Edson Denner Leonel
Marcelo Aparecido Chinelatto

Vol.
1

SÉRIE MONOGRÁFICA

Edson Denner Leonel
Marcelo Aparecido Chinelatto (Eds.)

Avanços recentes em Ciências da Engenharia: volume 1

São Carlos
2025

DOI: 10.11606/9786586954524

Universidade de São Paulo

Reitor: Prof. Dr. Carlos Gilberto Carlotti Junior

Vice-Reitor: Prof. Dr. Maria Arminda do Nascimento Arruda

Escola de Engenharia de São Carlos

Diretor: Prof. Dr. Fernando Martini Catalano

Vice-diretor: Prof. Dr. Antônio Néelson Rodrigues da Silva

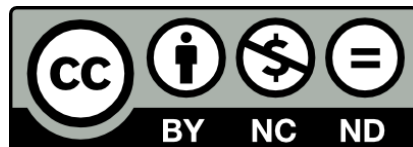
Ficha catalográfica elaborada pela Seção de Atendimento ao Usuário do Serviço de Biblioteca "Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes"

L583a Leonel, Edson Denner
v.1 Avanços recentes em Ciências da Engenharia :
volume 1 / Edson Denner Leonel; Marcelo Aparecido
Chinelatto (Eds.). -- São Carlos: EESC-USP, 2025.
255 p. : il. (Série monográfica; vol.1)
ISBN 978-65-86954-52-4
DOI 10.11606/9786586954524

1. Inovação em Engenharia. 2. Ciência aberta.
3. Pesquisa. I. Chinelatto, Marcelo Aparecido.
II. Título.

Elaborado por Eduardo Graziosi Silva - CRB-8/8907

Esta obra é de acesso aberto. É permitida a reprodução parcial ou total desta obra, desde que citada a fonte e autoria e respeitando a Licença Creative Commons indicada.



PREFÁCIO

O amplo domínio do conhecimento que abrange as Ciências da Engenharia está em constante evolução e seus avanços recentes têm redefinido e transformado a maneira como projetamos, construímos e interagimos com o mundo ao nosso redor. Nesta obra, *“Avanços Recentes em Ciências da Engenharia Vol. I”*, reunimos uma coleção de pesquisas inovadoras e descobertas científicas na fronteira do conhecimento desenvolvidas na Escola de Engenharia de São Carlos (EESC) da Universidade de São Paulo (USP) que não só refletem os desafios do presente, mas também sinalizam as possibilidades e soluções para o futuro.

Destacam-se as contribuições nas áreas de: Mecânica dos Sólidos, Estruturas, Geotécnica, Engenharia Médica, Planejamento de Transportes, Saneamento Ambiental e Tratamento de Águas de Abastecimento e Residuárias. Cada seção busca não apenas relatar inovações e avanços científicos, mas também estimular a reflexão sobre como tais descobertas podem ser aplicadas no enfrentamento dos diversos desafios globais.

Esta obra resulta dos esforços envidados pela EESC no sentido de tornar a ciência aberta à sociedade. Com sua distribuição gratuita em canais digitais, os textos desta obra poderão ser utilizados como referência em diversas atividades de ensino, pesquisa e extensão. Portanto, esta obra atende aos pilares de atuação da universidade e aproxima suas atividades da sociedade.

Agradecemos a todos os pesquisadores e leitores que se dedicam às Ciências da Engenharia e desenvolvem pesquisas inovadoras, criativas e disruptivas na busca por soluções científicas e tecnológicas eficientes, sustentáveis e socialmente responsáveis para os desafios da engenharia contemporânea.

Boa leitura!

Edson Denner Leonel e Marcelo Aparecido Chinelatto

Presidente e Vice-Presidente da Comissão de Pesquisa e Inovação da EESC

SUMÁRIO

Seção 1: Engenharia médica

Capítulo 1 - Influência das armações de óculos de sol na proteção contra radiações nocivas.....8

Artur Duarte Loureiro, Pedro Miguel Lira Guedes e Liliane Ventura

Seção 2: Estruturas

Capítulo 2 - Análise da interação entre blocos rígidos de estacas e o solo submetido a forças horizontais e verticais.....23

Ana Paula Ferreira Ramos, Ray Calazans dos Santos Silva e João Batista de Paiva

Capítulo 3 - Modelagem 3D da difusão transiente para análises relacionadas à durabilidade das estruturas de concreto.....37

Wagner Queiroz Silva, Edson Denner Leonel

Seção 3: Geotécnica

Capítulo 4 - Geossintéticos em obras de engenharia: benefícios, aplicações e desafios....66

Ana Carolina Gonzaga Pires e Jefferson Lins da Silva

Capítulo 5 - Estudo da durabilidade de geossintéticos.....80

José Luiz Ernandes Dias Filho e Jefferson Lins da Silva

Seção 4: Mecânica dos sólidos

Capítulo 6 - Análise de geometrias aparadas pelo método dos elementos de contorno isogeométrico.....104

Matheus Rocha e Edson Denner Leonel

Capítulo 7 - Digital twins in robotic applications.....123

Renan Sanches Geronel e Maíra Martins da Silva

Seção 5: Planejamento de transportes

Capítulo 8 - Uso de krigagem para estimação espacial de dados sobre qualidade do transporte público urbano.....144

Samille Santos Rocha, Ana Júlia de Oliveira Tertuliano, Samuel de França Marques e Cira Souza Pitombo

Capítulo 9 - Simulação geoestatística para geração de cenários de ocupação de linhas de transporte público urbano.....163

Anabele Lindner, Ana Júlia de Oliveira Tertuliano, Samuel de França Marques e Cira Souza Pitombo

Seção 6: Saneamento ambiental

Capítulo 10 - Monitoramento ambiental por meio do sensoriamento da temperatura distribuída por fibra óptica.....191
Elias de Lima. Neto e Edson Cezar Wendland

Seção 7: Tratamento de águas de abastecimento e residuárias

Capítulo 11 - Tendências, inovações e desafios no desenvolvimento e aplicação de filtros lentos domiciliares para o tratamento de águas de abastecimento.....203
Bárbara Luiza Souza Freitas e Lyda P. Sabogal-Paz

Capítulo 12 - Peróxido de hidrogênio no tratamento de água e desinfecção em nível domiciliar: um panorama.....220
Kamila Jessie Sammarro Silva1 e Lyda Patricia Sabogal-Paz

Capítulo 13 - Fármacos betabloqueadores atenolol e propranolol em águas residuárias: detecção, tratamento e ecotoxicidade.....233
Allan Pretti Ogura, Vinicius Silveira Leite, Matheus Neves de Araujo e Elis Watanabe Nogueira

Seção 1
Engenharia Médica



CAPÍTULO 1

INFLUÊNCIA DAS ARMAÇÕES DE ÓCULOS DE SOL NA PROTEÇÃO CONTRA RADIAÇÕES NOCIVAS

Artur Duarte Loureiro, Pedro Miguel Lira Guedes e Liliane Ventura*

Departamento de Engenharia Elétrica e de Computação (SEL), Escola de Engenharia de São Carlos (EESC), Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, SP, Brasil

**lilianeventura@usp.br*

Resumo - Ao avaliar a proteção oferecida por óculos de sol contra radiações nocivas, as normas atuais consideram fundamentalmente a transmitância direta de radiação através das lentes. Além disso, elas apresentam outros dois requisitos mais fracos: as lentes devem possuir um tamanho mínimo e deve haver uma proteção lateral mínima para óculos de sol com lentes muito escuras. No entanto, a proteção oferecida pelos óculos de sol é influenciada por sua armação. Armações mais abertas, que possuem mais espaço entre o rosto e a armação, permitem que mais radiação atinja os olhos, seja diretamente seja refletida no interior das lentes. Este trabalho visa contribuir para a elaboração de requisitos adicionais para normas atuais, levando em consideração a contribuição das armações dos óculos de sol na proteção contra radiações nocivas ao olho. Foi construído um protótipo consistindo em um ambiente iluminado por fonte de luz azul com uma cabeça de manequim e um sensor posicionado no olho do manequim. O protótipo permite medir a influência das armações na proteção contra radiações. Os resultados indicaram que a proteção das armações varia significativamente, com armações mais abertas permitindo que até 20 % da radiação incidente alcance o olho, independentemente da transmitância das lentes.

Palavras-chave: *Dispositivos de proteção dos olhos. Óculos. Luz azul. Raios ultravioleta. Espectrofotometria.*

Financiamentos: FAPESP (Processo: 2021/12240-2) e CNPq (Processo: 131056/2022-0).

Introdução

A proteção contra radiação solar é importante para a saúde ocular, especialmente para pessoas que passam longos períodos ao ar livre. A literatura mostra a associação entre a exposição à luz azul e danos induzidos aos tecidos da retina, com atenção especial aos efeitos crônicos [1-7]. E, ainda, mostra que o uso de filtros com proteção azul pode prevenir a frequência de danos aos olhos [3]. Embora haja uma crescente preocupação com lentes dos óculos de sol que bloqueiem radiações danosas, como a luz azul e a radiação ultravioleta (UV), a eficácia das armações em proteger os olhos é um aspecto menos explorado.

As normas internacionais e nacionais, como a ABNT NBR ISO 12312-1:2023 [8-11], definem critérios fracos para as armações: devem possuir uma área mínima ao redor dos olhos e, para óculos com lentes muito escuras, deve haver proteção lateral. Estas normas abordam de forma limitada a influência das armações na proteção contra a radiação solar.

Algumas armações, aprovadas nos requisitos das normas atuais, podem permitir que quantidades significativas de radiação alcancem os olhos.

Este trabalho busca preencher essa lacuna, investigando como diferentes armações influenciam a quantidade de radiação incidente nos olhos, além de propor um método alternativo para prever a proteção proporcionada pelas armações sem a necessidade de bloqueio físico das lentes. Espera-se que os resultados desta pesquisa possam contribuir para futuras atualizações das normas de óculos de sol, garantindo que óculos de sol certificados ofereçam uma proteção eficaz, neste quesito, para os consumidores.

Conceito de Radiação

A radiação é o processo de transferência de energia que não requer um meio material para se propagar. Podendo, desta forma, se propagar pelo vácuo, como ocorre com a radiação solar que incide sobre a Terra [12].

Além de ser o nome do processo de transferência de energia, radiação também é o nome da própria energia que é transferida [12]. Os termos radiação e radiação eletromagnética são intercambiáveis.

Dualidade Onda-Partícula

A radiação apresenta propriedades de onda eletromagnética ou de partícula (fóton), dependendo do fenômeno que está sendo estudado. Por exemplo, processos como difração, espalhamento e interferência são descritos em termos de propriedades ondulatórias [13], enquanto que a interação entre radiação e tecidos biológicos, geralmente, é estudada tratando a radiação como partícula [14].

Como onda eletromagnética, a radiação possui propriedades como comprimento de onda (λ), frequência (f) e a capacidade de interferir e difratar. A radiação se caracteriza pela relação:

$$c = \lambda \times f \quad (1)$$

onde c é velocidade de propagação da luz no vácuo ($2,99793 \times 10^8$ m/s), λ é o comprimento de onda (em metros) e f é a frequência (em hertz).

Esta relação indica que quanto maior for o comprimento de onda, menor será a frequência. A radiação se propaga como uma onda eletromagnética, com campos elétrico e magnético oscilantes perpendiculares entre si e à direção de propagação.

Uma ilustração do comportamento ondulatório da radiação é o espectro de cores que se observa quando a luz branca atravessa um prisma e seus diferentes comprimentos de onda são separados.

Como partícula, a radiação é composta por pacotes discretos de energia chamados fótons. Os fótons não possuem massa, mas cada um carrega uma quantidade específica de energia determinada pela frequência da onda. Segundo a Lei de Planck:

$$E = h \times f \quad (2)$$

onde, E é a energia de um fóton de radiação (em joules), h é a constante de Planck ($6,6262 \times 10^{-34}$ J.s) e f é a frequência da radiação (em hertz).

Enquanto a frequência da radiação determina a energia de cada fóton, o número de fótons em um feixe de radiação determina sua intensidade.

Uma ilustração do comportamento particular da radiação é o efeito fotoelétrico, em que a luz é capaz de ejetar elétrons de certos metais.

Quando a energia de radiações incide em e é absorvida por matéria, incluindo tecidos biológicos, ocorrem mudanças no nível molecular ou atômico [15]. Pela teoria quântica, cada substância é capaz de absorver e de emitir radiação em apenas determinados comprimentos de onda, dependendo do estado de agregação molecular em que se encontre [12].

Espectro Eletromagnético

O espectro eletromagnético é a faixa completa de comprimentos de onda de todas as radiações. Ele é organizado em ordem crescente ou decrescente dos comprimentos de onda.

As diferentes regiões do espectro eletromagnético são utilizadas em uma variedade de aplicações, desde comunicações até diagnósticos médicos. Elas apresentam efeitos específicos no corpo humano e no ambiente. Por exemplo, a radiação UV pode causar queimaduras na pele e aumentar o risco de câncer de pele, enquanto a radiação ionizante, como os raios X e os raios gama, podem danificar o DNA das células e causar mutações genéticas. Já a radiação infravermelha pode aquecer os tecidos corporais e causar queimaduras, enquanto a radiação de micro-ondas pode ser absorvida pelos tecidos e causar danos térmicos.

Radiação Óptica

O termo radiação óptica se refere a qualquer radiação eletromagnética com comprimento de onda entre a região espectral de transição para raios X ($\lambda \approx 1$ nm) e a região espectral de transição para ondas de rádio ($\lambda \approx 1$ mm) [16-17].

A radiação visível (luz) é definida como qualquer radiação óptica capaz de causar diretamente uma sensação visual [16]. Como esta sensação visual depende da potência radiante que atinge a retina e da responsividade do observador, no contexto prático, a região espectral da radiação visível não possui limites precisos, assumindo, geralmente, limite inferior entre 360 nm e 400 nm e, superior, entre 760 nm e 830 nm [16]. Para os efeitos de normas sobre óculos, os limites da radiação visível são 380 nm e 780 nm [8,16-18].

A radiação ultravioleta (UV) é definida como qualquer radiação óptica com comprimentos de onda mais curtos do que os da radiação visível [16].

Em razão dos efeitos bioactínicos da radiação, isto é, a capacidade da radiação causar danos, o limite superior da radiação UV é normalmente adotado como 400 nm [16-17,19-21]. No entanto, para os efeitos de normas sobre óculos, este limite é 380 nm [8,16-18]. As justificativas dadas para excluir a banda espectral de 380 nm a 400 nm da região espectral da radiação UV são: (1) dificuldades técnicas na produção de lentes corretivas não-coloridas com alta transmitância luminosa que absorvam o intervalo de 380 nm a 400 nm, e (2) o efeito bioactínico das radiações neste intervalo espectral ser consideravelmente inferior ao das demais radiações UV [17]. Além de haver evidências suficientes na literatura de que o limiar para lesões cutâneas e oculares agudas é, de fato, 400 nm [19], desconsiderar o intervalo espectral de 380 nm a 400 nm é particularmente

problemático para localidades com intensa irradiância solar, como o Brasil. Ao considerar este intervalo espectral, a exposição radiante UV no Brasil aumenta, em média, 49 % [22]. Em última análise, uma limitação técnica na confecção de lentes corretivas causou um impacto negativo na proteção de óculos de sol.

Baseando-se na ação fotobiológica da radiação UV [15], ela normalmente é subdividida em [17]:

- UVA: de 315 nm a 400 nm (ou de 315 nm a 380 nm)
- UVB: de 280 nm a 315 nm
- UVC: de 100 nm a 280 nm
- UVE: de 1 nm a 100 nm

As radiações UV com comprimentos de onda abaixo de 190 nm não são encontradas naturalmente na Terra, são altamente absorvidas pelo oxigênio, e, por isso, chamadas de ultravioleta de vácuo (UVV). A atmosfera terrestre absorve todo UVC solar e aproximadamente 90 % do UVB solar [21]. A radiação UVA, por sua vez, é menos afetada pela atmosfera [21]. Desta forma, para os efeitos de normas sobre óculos, o limite inferior da radiação UV é definido como 280 nm [8,16-18].

A radiação infravermelha (IR) é definida como qualquer radiação óptica com comprimentos de onda mais longos do que os da radiação visível [16]. A literatura sugere que proteção contra radiação IR solar não é necessária, já que a exposição crônica à radiação IR solar não oferece riscos [18,23-24]. As normas de óculos de sol não impõem requisitos para proteção IR [8,18].

Há duas formas usuais de subdividir a radiação IR [17]:

- IR próximo: de 780 nm a 3 000 nm
- IR médio: de 3 000 nm a 50 000 nm
- IR distante: de 50 000 nm a 10^6 nm

- IRA: de 780 nm a 1 400 nm
- IRB: de 1 400 nm a 3 000 nm
- IRC: de 3 000 nm a 10^6 nm

Como o espectro da radiação IR no nível do mar se estende até 2 000 nm [16], para os efeitos de normas sobre óculos, os limites da radiação IR são 780 nm e 2 000 nm [8].

Efeitos Bioactínicos

A radiação solar que atinge a Terra com comprimento de onda mais curto (UV e luz azul) gera efeitos biológicos significativos pelo fato da energia individual de seus fótons ser a maior dentro do espectro óptico [19]. Estes fótons possuem energia suficiente para causar alterações químicas em tecidos biológicos que podem iniciar processos potencialmente nocivos [19]. Efetivamente, a exposição crônica à luz visível também é capaz de causar estas alterações químicas potencialmente nocivas [19]. Estas ações bioquímicas são chamadas de efeitos bioactínicos [16]. A dimensão do dano depende de fatores como intensidade, comprimento de onda e duração da exposição. Como os olhos e a pele ficam expostos, eles são os órgãos mais vulneráveis à radiação óptica [19].

Distribuição da Radiação

Quando uma radiação eletromagnética atravessa um meio, acontecem os seguintes fenômenos com essa radiação [25]:

1. parte dela passa diretamente através do meio (transmissão direta);
2. parte dela é refletida pelo meio (reflexão);
3. parte dela é espalhada pelo meio, ou seja, esta parte da radiação que entra no meio também emerge, mas em direções aleatórias (espalhamento);
4. parte dela é absorvida pelo meio, e a energia é utilizada para ionizar átomos, aquecer os átomos, fazê-los fluorescer, etc (absorção).

Efeito Coroneo

O efeito Coroneo é um fenômeno óptico em que a parte frontal do olho, ao receber luz lateralmente, atua como uma lente que focaliza a luz em regiões específicas, como o limbo nasal (a junção entre a córnea e a esclera), intensificando sua intensidade em até 20 vezes. Esse mecanismo de focalização periférica da luz tem sido associado ao desenvolvimento de condições oculares causadas pela exposição solar, como o pterígio e a catarata cortical [26-27]. Estudos utilizando modelos de olhos bovinos e técnicas de rastreamento de raios assistidas por computador confirmaram que as áreas de concentração de luz coincidem com as regiões mais afetadas por essas condições [26-27]. A focalização da luz em ângulos laterais contribui para danos celulares no limbo e no cristalino, ressaltando a importância de uma proteção ocular adequada que minimize a incidência de luz lateral [26-27]. O uso de armações com proteção lateral eficaz e lentes que bloqueiam a radiação UV é fundamental para prevenir os efeitos prejudiciais associados a esse fenômeno [26-27].

O efeito Coroneo é a justificativa para a adoção nas normas atuais do requisito de proteção lateral para óculos de sol com lentes muito escuras.

Desenvolvimento

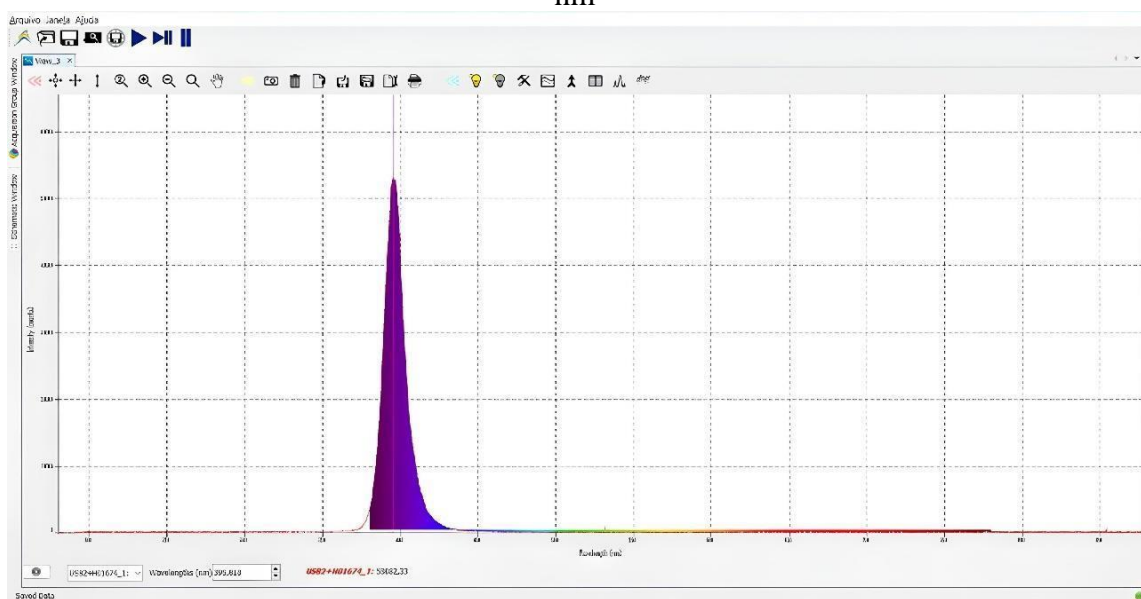
O protótipo desenvolvido para os testes da influência das armações na proteção contra radiações solares é mostrado na Fig. 1. Ele consiste em um ambiente esférico com uma cabeça de manequim em seu interior. O ambiente é iluminado por fitas de LED SMD 5050, com pico em 395,818 nm. O espectro de emissão do LED é mostrado na Fig. 2. A cabeça do manequim conta com dois sensores GVBL-S12SD da Roithner LaserTechnik, com pico de sensibilidade em aproximadamente 400 nm, cujo espectro de sensibilidade é mostrado na Fig. 3. Um sensor está posicionado no olho do manequim para medir a radiação incidente, enquanto o outro está na testa, funcionando como um sensor de referência para corrigir flutuações na emissão da fonte luminosa, ainda que não tenha o mesmo caminho óptico do outro sensor.

Figura 1 – Protótipo desenvolvido para os testes



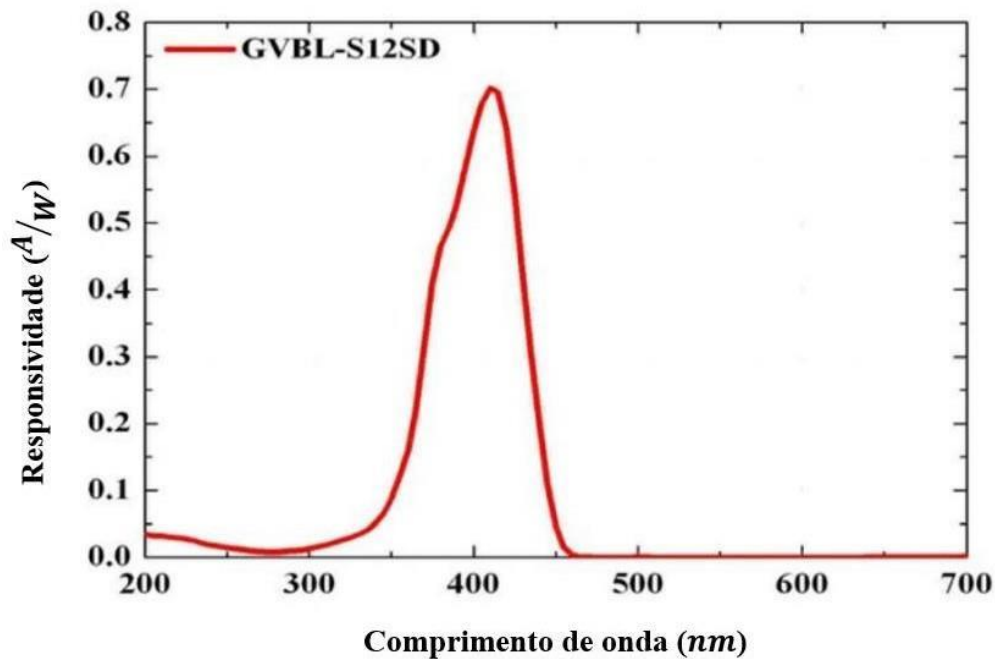
Fonte: Autores (2024).

Figura 2 – Emissão espectral de um LED da fita de LEDs usada no protótipo, medida usando espectrofotômetro OCEAN OPTICS USB 2000, pico de emissão em 395,818 nm



Fonte: Autores (2024).

Figura 3 – Sensibilidade espectral do sensor GVBL-S12SD usado no protótipo, curva fornecida pelo fabricante [28]



Fonte: [28].

O ambiente esférico de isopor reflete e dispersa a luz emitida pelas fitas de LED, contribuindo para a uniformidade da iluminação interna. O comprimento de onda de 395 nm foi escolhido por estar tanto na região da luz azul quanto na região da radiação UV, o que proporciona uma avaliação abrangente da proteção fornecida pelas armações e lentes, quanto a radiações solares danosas. O sensor posicionado no olho mede a radiação incidente diretamente, enquanto o sensor na testa é utilizado para detectar possíveis variações na emissão da fonte luminosa, possibilitando a correção dessas flutuações.

Antes de iniciar as medições, é realizada a calibração do sistema. São registradas medidas sem óculos no manequim, tanto com os LEDs apagados quanto acesos, para verificar a existência de algum offset e calcular o fator de proporção entre as leituras do sensor que funciona como de referência (testa) e do sensor de medição (olho). Se houver variações no sensor da testa durante o teste, significa que houve flutuações na emissão da fonte luminosa, e, com estas flutuações quantificadas, é possível corrigi-las. Para cada medição, foram feitas 500 leituras, cujas médias foram utilizadas para reduzir o ruído e aumentar a precisão. Foram testadas 32 amostras de óculos de sol. Destas, 16 foram medidas em duas condições: (1) com a região externa das lentes cobertas por papel cartão preto, e (2) com as lentes descobertas. As demais 16 amostras foram medidas apenas com as lentes descobertas.

A razão de se cobrir a região externa das lentes é bloquear toda luz que incidiria no olho através das lentes. Desta forma, é medida apenas a radiação incidente que reflete na superfície interna da lente ou que incide diretamente no olho.

Para verificar a repetibilidade das medições, cada teste com lentes cobertas foi repetido cinco vezes para cada uma das 16 amostras mencionadas. Foram também medidas com o espectrofotômetro OCEAN OPTICS USB 2000 a transmitância das lentes em 395 nm. Além disso, 10 amostras foram utilizadas para treinar um modelo de regressão linear,

com o objetivo de prever os valores de radiação incidente com lentes cobertas nas amostras restantes. A regressão linear foi escolhida por ser um método adequado para modelar relações potencialmente lineares entre variáveis, permitindo obter uma relação entre a medição com lentes descobertas, a transmitância das lentes para 395 nm e a quantidade de luz que incide no sensor com as lentes cobertas. As 6 amostras restantes foram utilizadas para testar a precisão do modelo e avaliar sua eficácia na previsão dos valores faltantes.

Resultados e Discussões

A análise de repetibilidade das medições com as lentes cobertas indicou uma alta consistência nos resultados. Para as 16 amostras medidas em cinco repetições, a média dos desvios-padrões foi de 0,23 %. O baixo desvio-padrão garante que as variações observadas entre diferentes medições são, de fato, atribuídas às características dos óculos de sol, e não a flutuações no processo de medição.

Em seguida, foram realizadas medições com as lentes cobertas, descobertas e também foi determinada a transmitância das lentes em 395 nm para cada amostra. A Tabela 1 apresenta os valores de radiação incidente com lentes cobertas, descobertas e a transmitância medida para cada uma das 32 amostras de óculos de sol.

Tabela 1 – Medições de radiação incidente com lentes cobertas e descobertas, e transmitância das lentes em 395 nm

amostra	coberta (%)	descoberta (%)	transmitância 395nm (%)
1	4,72	6,87	0,13
2	3,91	4,35	0,12
3	17,18	24,07	1,92
4	3,31	39,53	45,86
5	9,37	10,14	0,09
6	3,65	4,21	0,00
7	7,52	31,30	32,88
8	2,16	4,38	4,37
9	6,39	7,56	0,12
10	3,26	4,15	0,26
11	11,50	13,62	0,01
12	20,01	22,87	0,11
13	6,02	7,88	0,14

14	19,29	20,95	1,41
15	8,93	25,99	24,14
16	10,78	11,96	0,01
17	--	2,82	0,17
18	--	2,43	0,08
19	--	6,74	0,11
20	--	5,39	0,03
21	--	27,17	31,95
22	--	20,45	0,18
23	--	10,83	0,06
24	--	24,05	32,70
25	--	7,15	0,15
26	--	15,35	32,37
27	--	5,95	0,10
28	--	31,09	0,01
29	--	29,00	33,87
30	--	9,93	0,17
31	--	2,81	0,10
32	--	4,62	0,19

Fonte: Autores (2024).

Após a coleta dos dados, foi aplicada a regressão linear para prever os valores de radiação incidente com lentes cobertas nas amostras para as quais esses valores não foram diretamente medidos. A Equação (3) foi obtida.

$$coberta_calculada = 0,82 + 0,74 \cdot descoberta - 0,55 \cdot transmitância \quad (3)$$

onde *coberta_calculada* representa a radiação incidente com lentes cobertas. A Tabela 2 mostra os valores previstos pelo modelo de regressão para as 16 amostras que não tiveram medições diretas de lentes cobertas.

Tabela 2 – Valores calculados de radiação incidente com lentes cobertas para as 16 amostras as quais esta medida não foi feita

amostra	coberta_calculada	descoberta	transmitância 395nm
	(%)	(%)	(%)
17	2,81	2,82	0,17
18	2,57	2,43	0,08
19	5,72	6,74	0,11
20	4,77	5,39	0,03
21	3,20	27,17	31,95
22	15,78	20,45	0,18
23	8,76	10,83	0,06
24	0,49	24,05	32,70
25	6,00	7,15	0,15
26	-5,74	15,35	32,37
27	5,15	5,95	0,10
28	23,71	31,09	0,01
29	3,49	29,00	33,87
30	8,04	9,93	0,17
31	2,84	2,81	0,10
32	4,12	4,62	0,19

Fonte: Autores (2024).

Para avaliar a precisão do modelo de regressão, as 6 amostras restantes, não utilizadas no treinamento, foram comparadas com os valores previstos pelo modelo. Os resultados são mostrados na Tabela 3. O erro médio absoluto foi de aproximadamente 1,81 %, indicando que o modelo forneceu previsões razoavelmente precisas para essas amostras de teste. Para avaliar melhor a adequação do uso de regressão linear para este caso, são necessárias mais amostras de teste.

Tabela 3 – Valores calculados de radiação incidente com lentes cobertas para as 6 amostras de teste para avaliar a precisão do modelo de regressão linear

amostra	coberta_calculada	coberta	descoberta	transmitância 395nm
	(%)	(%)	(%)	(%)
11	10,85	11,50	13,62	0,01
12	17,60	20,01	22,87	0,11
13	6,55	6,02	7,88	0,14
14	15,47	19,29	20,95	1,41
15	6,64	8,93	25,99	24,14
16	9,62	10,78	11,96	0,01

Fonte: Autores (2024).

Os resultados das medições com as lentes cobertas apresentaram uma variação significativa, com valores que variaram de 2,16 % a 20,01 %. Essa grande variação indica que os desenhos das armações influenciam de formas muito diferentes na proteção contra a radiação incidente. Já para as medições com as lentes descobertas, os valores variaram de 2,43 % a 39,53 %, destacando a influência predominante da transmitância das lentes. Por exemplo, a amostra 4, que apresentou um valor elevado de radiação incidente com lentes descobertas, possui uma transmitância de quase 46 % em 395 nm.

Por fim, vale mencionar a complexidade envolvida na preparação das amostras para as medições com lentes cobertas. O processo de cobrir as lentes com papel cartão preto mostrou-se trabalhoso e requer precisão para garantir que toda a lente seja bloqueada, sem cobrir espaços fora da lente. Essa etapa não pode ser realizada rapidamente, o que inviabiliza a aplicação desse método para testes em larga escala, como em óculos de clientes em um ponto de venda. Dessa forma, a possibilidade de calcular os valores de radiação incidente com lentes cobertas a partir de medições mais simples, como aquelas feitas com lentes descobertas e a transmitância, se mostra uma solução eficaz e prática, aumentando a viabilidade de análises em ambientes de teste e em aplicações comerciais.

Conclusões

Este estudo tem como objetivo contribuir com a norma ABNT NBR ISO 12312-1:2023, com a esperança de influenciar mudanças nas normas atuais para óculos de sol, incluindo maior consideração da influência das armações na proteção contra radiações nocivas ao olho. Os resultados mostraram que, embora a norma estabeleça requisitos para que as armações cubram áreas ao redor dos olhos, estes requisitos são insuficientes. Este trabalho mostrou que algumas armações, dentro dos limites da norma, permitem a passagem de pelo menos 20 % da radiação solar ao olho, independentemente da transmitância das lentes, destacando uma fragilidade potencial que merece maior atenção nas normas atuais. Conforme esperado, os testes demonstraram que armações mais fechadas, com proteção lateral, proporcionam uma redução significativa da radiação incidente nos ensaios com

lentes cobertas, enquanto armações mais abertas apresentam uma proteção menor. Além disso, óculos com lentes de alta transmitância para 395 nm exibiram maior variação na radiação incidente no sensor entre os ensaios com lentes cobertas e descobertas.

Uma das contribuições importantes deste estudo é o método proposto, que permite avaliar a proteção das armações sem a necessidade de cobrir as lentes com papel opaco. Esse procedimento simplificado é relevante, pois a cobertura das lentes requer tempo e precisão, dificultando sua aplicação em testes em grande escala. A repetibilidade das medições, com um desvio-padrão médio de 0,23 %, confirma a confiabilidade do método para aplicações experimentais.

Por fim, embora os resultados tenham mostrado que a regressão linear é uma ferramenta útil para prever a radiação incidente no olho com base em medições mais simples, mais dados são necessários para garantir que a regressão linear seja adequada para esse tipo de cálculo. Se não for, métodos mais avançados, que considerem possíveis não linearidades, devem ser explorados. A inclusão de novos critérios nas normas pode resultar em óculos de sol mais seguros, beneficiando especialmente aqueles que passam longos períodos ao ar livre ou em ambientes com alta exposição à radiação nociva.

Referências

1. Narimatsu *et al.* Blue light-induced inflammatory marker expression in the retinal pigment epithelium-choroid of mice and the protective effect of a yellow intraocular lens material in vivo. *Experimental Eye Research* 2015, 132, 48. <https://doi.org/10.1016/j.exer.2015.01.003>.
2. M. Nakamura *et al.* Exposure to excessive blue led light damages retinal pigment epithelium and photoreceptors of pigmented mice. *Experimental Eye Research* 2018, 177, 1. <https://doi.org/10.1016/j.exer.2018.07.022>.
3. T. Ueda *et al.* Eye damage control by reduced blue illumination. *Experimental Eye Research* 2009, 89, 863. <https://doi.org/10.1016/j.exer.2009.07.018>.
4. S. C. Tomany *et al.* Sunlight and the 10-year incidence of age-related maculopathy: the beaver dam eye study. *Archives of Ophthalmology* 2004, 122, 750. <http://doi.org/10.1001/archophth.122.5.750>.
5. Y.-M. Shang *et al.* White light-emitting diodes (leds) at domestic lighting levels and retinal injury in a rat. *Environ Health Perspectives* 2014, 122, 269. <http://doi.org/10.1289/ehp.1307294>.
6. X. Liu *et al.* The protective effects of blue light-blocking films with different shielding rates: a rat model study. *Translational Vision Science & Technology* 2019, 8, 2019. <http://doi.org/10.1167/tvst.8.3.19>.
7. J. Vicente-Tejedor *et al.* Removal of the blue component of light significantly decreases retinal damage after high intensity exposure. *PLoS One* 2018, 13, 1. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0194218>.
8. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 12312-1:2023: proteção dos olhos e do rosto: óculos para proteção solar e óculos relacionados: parte 1: óculos para proteção solar para uso geral*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2023.
9. International Organization for Standardization, *ISO 12312-1:2022: eye and face protection: sunglasses and related eyewear: part 1: sunglasses for general use*, Geneva, International Organization for Standardization, 2022. <https://www.iso.org/standard/77321.html>.

10. American National Standards Institute, *Z80.3-2018 (R2023): ophthalmics: nonprescription sunglass and fashion eyewear requirements*, Alexandria, American National Standards Institute, 2023. [https://webstore.ansi.org/standards/vc%20\(asc%20z80\)/ansiz802018r2023](https://webstore.ansi.org/standards/vc%20(asc%20z80)/ansiz802018r2023).
11. New Zealand Standards, *AS/NZS 1067.1:2016: eye and face protection: sunglasses and fashion spectacles: part 1: requirements*, Standards Australia, 2016.
12. G. B. Lyra; E. O. dos Santos, Radiação solar e terrestre in *Meteorologia básica: IF/111*, Seropédica, DCA/IF/UFRRJ, 2013. https://arquivos.ufrrj.br/arquivos/20191141578b6a2119581a3d15f59fe4b/Apostila_Capitulo_5_Radiacao_Solar.pdf.
13. K. K. Likharev, Radiation, scattering, interference, and diffraction in Classical electrodynamics: lecture notes, K. K. Likharev; Bristol, IOP Publishing, 2018; 8-1. <https://dx.doi.org/10.1088/978-0-7503-1404-6ch8>.
14. A. Cougnard-Gregoire *et al.* Blue light exposure: ocular hazards and prevention: a narrative review. *Ophthalmology and Therapy* 2023, 12, 755. <https://doi.org/10.1007/s40123-023-00675-3>.
15. D. G. Pitts; R. N. Kleinstein, *Environmental vision: interactions of the eye, vision, and the environment*, Boston, Butterworth-Heinemann, 1993.
16. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 13666:2019: óptica oftálmica: lentes para óculos: vocabulário*, Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Normas Técnicas, 2019.
17. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 20473:2014: óptica e fotônica: bandas espectrais*, Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Normas Técnicas, 2014.
18. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 8980-3:2024: óptica oftálmica: lentes para óculos acabadas e não cortadas: parte 3: especificações de transmitância e métodos de ensaio*, 3. ed., Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Normas Técnicas, 2024.
19. International Commission on Non-Ionizing Radiation Protection. Guidelines on limits of exposure to ultraviolet radiation of wavelengths between 180 nm and 400 nm (incoherent optical radiation). *Health Physics* 2004, 87, 171.
20. International Agency for Research on Cancer, *A review of human carcinogens*, Lyon, International Agency for Research on Cancer, 2012; <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK304366/>. IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans, No. 100D.
21. World Health Organization, Ultraviolet radiation, 2024. <https://www.who.int/health-topics/ultraviolet-radiation>.
22. M. Masili; H. Schiabel; L. Ventura. Contribution to the radiation protection for sunglasses standards. *Radiation Protection Dosimetry* 2015, 164, 435. <https://doi.org/10.1093/rpd/ncu274>.
23. International Commission on Non-Ionizing Radiation Protection. ICNIRP guidelines on limits of exposure to incoherent visible and infrared radiation. *Health Physics* 2013, 105, 74. <http://dx.doi.org/10.1097/HP.0b013e318289a611>.
24. S. J. Dain. Sunglasses and sunglass standards. *Clinical and Experimental Optometry* 2003, 86, 77. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1444-0938.2003.tb03066.x>.
25. E. A. Boettner; J. R. Wolter. Transmission of the ocular media. *Investigative Ophthalmology & Visual Science* 1962, 1, 776.
26. M. T. Coroneo; N. W. Müller-Stolzenburg; A. Ho. Peripheral light focusing by the anterior eye and the ophthalmohelioses. *Ophthalmic Surgery* 1991, 22, 705.

27. M. Coroneo. Ultraviolet radiation and the anterior eye. *Eye & Contact Lens* 2011, 37, 214. <https://doi.org/10.1097/ICL.0b013e318223394e>.
28. ROITHNER LASERTECHNIK GMBH, GVBL-S12SD, Vienna, 2020. <https://www.roithner-laser.com/datasheets/pd/uv/gvbl-s12sd.pdf>.

Seção 2

Estruturas



CAPÍTULO 2

ANÁLISE DA INTERAÇÃO ENTRE BLOCOS RÍGIDOS DE ESTACAS E O SOLO SUBMETIDO A FORÇAS HORIZONTAIS E VERTICAIS

Ana Paula Ferreira Ramos¹, Ray Calazans dos Santos Silva² e João Batista de Paiva^{3*}

1 – Departamento de Engenharias, Universidade Federal Rural do Semi-Árido (UFERSA), Caraubas, RN, Brasil

2 – Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Federal do Recôncavo da Bahia (UFRB), Cruz das Almas, BA, Brasil

*3 – Departamento de Engenharia de Estruturas, Universidade de São Paulo (USP), São Carlos, SP, Brasil *paiva@sc.usp.br*

Resumo - Neste trabalho é apresentada uma formulação para a análise da interação entre blocos rígidos de estacas e o solo, submetidos a (às) forças horizontais e verticais. A estaca é analisada pelo Método dos Elementos Finitos e o solo pelo Método dos Elementos de Contorno, como um meio contínuo, elástico-linear, semi-infinito, isótropo e homogêneo. Combinando-se estes métodos de análise, obtém-se um sistema de equações lineares representando o problema de interação estaca-solo. Nesta formulação o bloco não precisa ser representado pois como se trata de bloco rígido todos seus deslocamentos serão iguais portanto não surgirão tensões ou deformações no mesmo. Após a resolução deste sistema, são obtidos os deslocamentos e rotações nos nós do elemento e as tensões de contato estaca-solo correspondentes aos deslocamentos unitários. Por proporcionalidade com o carregamento real aplicado obtém-se então os valores finais de deslocamentos e tensões nos nós das estacas. O método é fácil de ser implementado e as incógnitas são somente deslocamentos e rotações em nós da estaca. Exemplos envolvendo a formulação proposta são analisados e os resultados obtidos são concordantes com os de outros autores.

Palavras-chave: *Método dos Elementos de Contorno. Método dos Elementos Finitos. Interação estaca-solo. Estacas flexíveis. Grupos de estacas.*

Introdução

A interação solo-estrutura é atualmente um dos problemas que tem recebido especial atenção de pesquisadores nos mais diversos centros de pesquisa, principalmente por suas aplicações de caráter prático.

Blocos de estacas são muito utilizadas como fundação de estruturas como edifícios altos, muros de arrimo, torres de transmissão, etc.. Pelas suas dimensões o bloco pode ser considerado rígido, consideração esta que minimiza muito os dados de entrada do problema, pois somente as estacas devem ser representadas na análise. Dentre os trabalhos apresentados para a análise de grupos de estacas ligadas por uma placa considerada rígida, podem ser citados os desenvolvidos por [1-12].

A análise da interação entre o bloco de estacas e o solo pode ser feita de duas diferentes abordagens: a primeira considera que o bloco está em contato com o solo e a segunda considera que o bloco está acima do solo.

Para a análise de blocos de estacas com cargas horizontais, as duas formulações fornecem o mesmo resultado, porém para o caso de cargas verticais os resultados são diferentes pois aparecem tensões de contato entre o bloco e o solo. Mesmo assim a análise considerando que este contato não existe ainda fornece resultados interessantes, pois devido às dimensões do bloco apenas uma parcela da carga vertical é compensada pela resistência do solo e assim a análise pode muito bem ser usada em um pré-dimensionamento.

Neste trabalho é apresentada uma formulação para a análise da interação entre um bloco rígido com estacas e o solo. Inicialmente é imposto um deslocamento unitário no topo de todas as estacas e, uma vez resolvido o sistema de equações, obtém-se as forças atuantes no topo de cada estaca. Por proporcionalidade obtém-se então a força real no topo das estacas e todos deslocamentos e rotações ao longo do fuste da estaca. Como o bloco é considerado rígido, ele não precisa fazer parte da formulação, bastando impor as condições de topo das estacas engastadas para representar a ligação das estacas com o bloco.

Muitos trabalhos foram feitos considerando solos estratificados porém o grande diferencial destes problemas é a solução fundamental que é obtida a partir da solução analítica do solo estratificado. Entretanto, todo o resto das formulações apresentadas utilizam o método dos elementos de contorno para obter o sistema final de equações do problema. Assim, a formulação apresentada aqui pode facilmente ser adaptada para as formulações de solo estratificado mudando somente a solução fundamental de [8] pela obtida analiticamente.

Vários exemplos de blocos com estacas foram analisados e os resultados estão em perfeita concordância com os obtidos por outros autores.

Desenvolvimento

Sistema de equações para o solo

A equação integral que relaciona os deslocamentos em um ponto genérico do solo enrijecido por estacas, foi obtida da equação Somigliana para solução fundamental de Mindlin considerando-a livre de forças de massa, e é dada por:

$$u_i = \int_{\Gamma} u_{ij}^*(p, s) p_j(s) d\Gamma(s), \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (1)$$

onde $u_{ij}^*(p, s)$ é a solução fundamental de Mindlin para o deslocamento de um ponto s na direção j devido a uma carga unitária aplicada no ponto p na direção i ; p_j é a tensão de contato entre a estaca e o solo na direção j sendo considerada como uma carga linear no domínio do solo. No apêndice, a solução fundamental de Mindlin é apresentada.

A equação 1 pode ser escrita na seguinte forma:

$$u_i = \sum_1^{Ne} \int_{\Gamma_e} u_{ij}^*(p, s) p_j(s) d\Gamma(s), \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (2)$$

Onde Ne é o número de linhas de carga (estacas) no domínio do solo.

Neste estudo as estacas são consideradas elementos tridimensionais e divididos em elementos finitos de viga. As tensões na interface estaca-solo em cada elemento finito são aproximadas por funções lineares dadas por:

$$\{P_s\} = \begin{Bmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-\xi & \xi & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-\xi & \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1-\xi & 1-\xi \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{xi} \\ p_{xj} \\ p_{yi} \\ p_{yj} \\ p_{zi} \\ p_{zj} \end{Bmatrix} \quad (3)$$

onde p_{xi} , p_{xj} , p_{yi} , p_{yj} , p_{zi} e p_{zj} são os valores das tensões nos nós do elemento Fig.1.

Escrevendo a Eq. 1 para os deslocamentos u , v , e w de todos os nós da estaca o seguinte sistema de equações é obtido:

$$\{u_s\} = [H]\{P_s\} \quad (4)$$

Onde $\{u_s\}$ é o vetor com os deslocamentos nodais para o solo e $\{P_s\}$ é o vetor com os valores nodais das tensões de contato, onde $\{u_s\}$ e $\{P_s\}$ são:

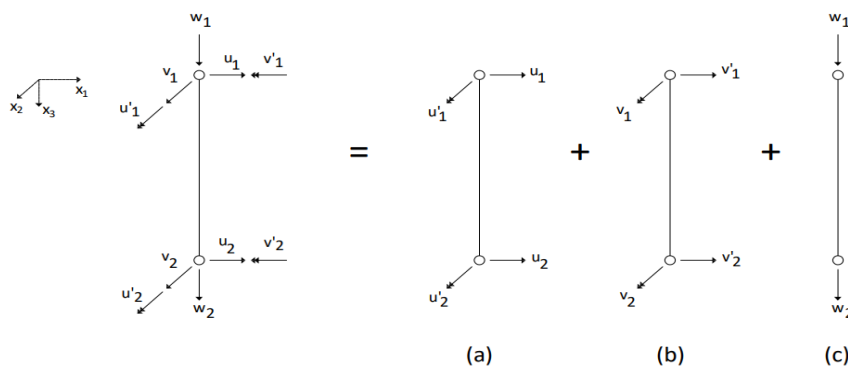
$$\begin{aligned} \{u_s\}^T &= \{u_1 \ v_1 \ w_1 \ u_2 \ v_2 \ w_2 \dots \ u_i \ v_i \ w_i\} \\ \{P_s\}^T &= \{p_{x1} \ p_{y1} \ p_{z1} \ p_{x2} \ p_{y2} \ p_{z2} \dots \ p_{xi} \ p_{yi} \ p_{zi}\} \end{aligned} \quad (5)$$

Sistema de equações para a estaca

A estaca deste trabalho é modelada como um elemento finito de pórtico tridimensional, (Fig. 1). O elemento é formado por dois nós, tendo cinco graus de liberdade por nó (três translações e dois giros), totalizando dez graus de liberdade.

Figura 1 - Elemento finito para a estaca

(a) Elemento de viga plano x_1x_3 (b) Elemento de viga plano x_2x_3 (c) Elemento de treliça

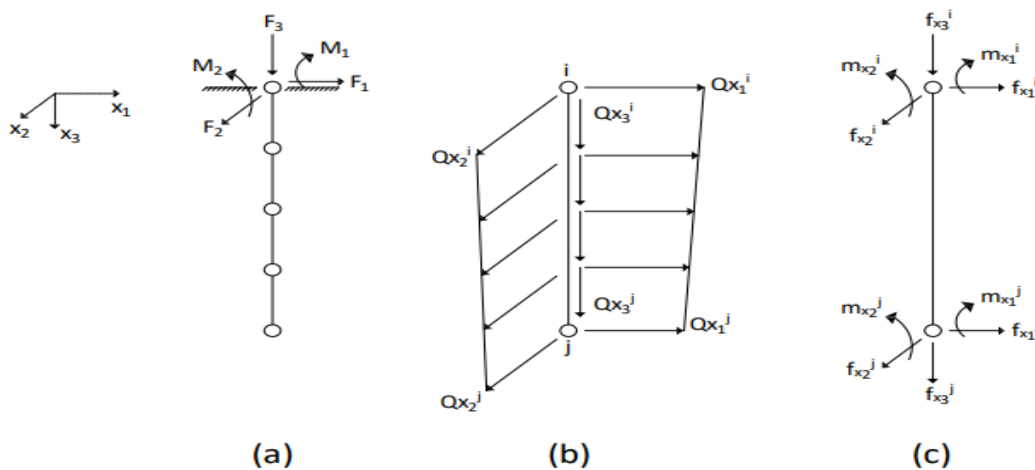


Fonte: Autores (2025)

Vale destacar que a rigidez à torção foi desprezada e, portanto, o grau de liberdade referente ao giro no eixo longitudinal foi desconsiderado. Como resultado, têm-se o seguinte elemento finito e parâmetros nodais (Fig. 2).

Figura 2 - Interação estaca-solo

(a) Forças no topo da estaca (b) Forças distribuídas (c) Forças nodais equivalentes



Fonte: Autores (2025)

Onde:

$[K_p]$ é a matriz de rigidez das estacas. A matriz de rigidez de um único elemento finito é dada por:

$$[k^e] = \begin{bmatrix} \frac{12EI_{x_2}}{l^3} & 0 & 0 & \frac{6EI_{x_2}}{l^2} & 0 & -\frac{12EI_{x_2}}{l^3} & 0 & 0 & \frac{6EI_{x_2}}{l^2} & 0 \\ 0 & \frac{12EI_{x_1}}{l^3} & 0 & 0 & \frac{6EI_{x_1}}{l^2} & 0 & -\frac{12EI_{x_1}}{l^3} & 0 & 0 & \frac{6EI_{x_1}}{l^2} \\ 0 & 0 & \frac{EA}{l} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{EA}{l} & 0 & 0 \\ \frac{6EI_{x_2}}{l^2} & 0 & 0 & \frac{4EI_{x_2}}{l} & 0 & -\frac{6EI_{x_2}}{l^2} & 0 & 0 & \frac{2EI_{x_2}}{l} & 0 \\ 0 & \frac{6EI_{x_1}}{l^2} & 0 & 0 & \frac{4EI_{x_1}}{l} & 0 & -\frac{6EI_{x_1}}{l^2} & 0 & 0 & \frac{2EI_{x_1}}{l} \\ -\frac{12EI_{x_2}}{l^3} & 0 & 0 & -\frac{6EI_{x_2}}{l^2} & 0 & \frac{12EI_{x_2}}{l^3} & 0 & 0 & -\frac{6EI_{x_2}}{l^2} & 0 \\ 0 & -\frac{12EI_{x_1}}{l^3} & 0 & 0 & -\frac{6EI_{x_1}}{l^2} & 0 & \frac{12EI_{x_1}}{l^3} & 0 & 0 & -\frac{6EI_{x_1}}{l^2} \\ 0 & 0 & -\frac{EA}{l} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{EA}{l} & 0 & 0 \\ \frac{6EI_{x_2}}{l^2} & 0 & 0 & \frac{2EI_{x_2}}{l} & 0 & -\frac{6EI_{x_2}}{l^2} & 0 & 0 & \frac{4EI_{x_2}}{l} & 0 \\ 0 & \frac{6EI_{x_1}}{l^2} & 0 & 0 & \frac{2EI_{x_1}}{l} & 0 & -\frac{6EI_{x_1}}{l^2} & 0 & 0 & \frac{4EI_{x_1}}{l} \end{bmatrix} \quad (7)$$

e $[Q]$ é a matriz que transforma as tensões aplicadas no fuste das estacas em cargas concentradas nos nós do elemento finito e $\{F\}$ é o vetor formado pelas cargas concentradas aplicadas no topo das estacas (Fig. 2).

A matriz $[Q]$ para um único elemento finito é dada por:

$$[Q^e] = \begin{bmatrix} \frac{7}{20}l & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3}{20}l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{7}{20}l & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3}{20}l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{l}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{l}{6} & 0 & 0 \\ \frac{1}{20}l^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{30}l^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{20}l^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{30}l^2 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{20}l & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7}{20}l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{20}l & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7}{20}l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{l}{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{l}{3} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{30}l^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{20}l^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{30}l^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{20}l^2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (8)$$

Acoplamento MEC/MEF

A Eq. 4 pode ser reescrita na seguinte forma:

$$\{P_s\} = [H]^{-1} \{u_s\} \quad (9)$$

Considerando equações de interação entre a estaca e o solo, ou seja:

$$\{P_s\} + \{P_p\} = 0 \quad (10)$$

As Eq. 6 e a Eq. 9 podem ser combinadas resultando em:

$$[K_p] \{u_p\} = \{F\} - [M] \{u_s\} \quad (11)$$

onde:

$$[Q][H]^{-1} = [M] \quad (12)$$

Na Eq. 11 os vetores $\{u_s\}$ e $\{u_p\}$ são de ordens diferentes. Assim, para efetuar o acoplamento dos dois sistemas de equações $\{u_s\}$ deve ser reescrito agora incorporando as derivadas dos deslocamentos nodais do vetor $\{u_p\}$. Então a matriz $[M]$ deve ser aumentada para ser da mesma ordem que a matriz $[K_p]$. Portanto, colunas e linhas de zeros são adicionadas a $[M]$, que representam as rotações negligenciadas em torno dos eixos X_1 e X_2 no solo. A ampliação da matriz $[M]$ é denotada pela adição de uma barra. Como consequência, o vetor deslocamento na equação do solo também deve ser aumentado.

$$\{u_s\}^T = \{u_{s1} \ v_{s1} \ w_{s1} \ \frac{\partial w_{s1}}{\partial x_1} \ \frac{\partial w_{s1}}{\partial x_2} \dots \ u_{sj} \ v_{sj} \ w_{sj} \ \frac{\partial w_{sj}}{\partial x_1} \ \frac{\partial w_{sj}}{\partial x_2}\} \quad (13)$$

Da compatibilidade de deslocamentos, obtém-se:

$$\{u_s\} = \{u_p\} = \{\bar{U}\} \quad (14)$$

ou seja:

$$[[K_p] + [\bar{M}]]\{\bar{U}\} = \{F\} \quad (15)$$

Resultando em:

$$[\bar{K}]\{\bar{U}\} = \{F\} \quad (16)$$

onde:

$[\bar{K}]$ é a matriz final do sistema de interação (MEC/MEF);

$\{\bar{U}\}$ é o vetor que engloba todos os deslocamentos considerados no sistema, inclusive as rotações;

$\{F\}$ é o vetor de cargas externas aplicadas no topo da estaca.

Acoplamento bloco rígido e estacas

O sistema de equações Eq. 16 pode ser escrito na seguinte forma:

$$[\bar{K}]\{\bar{U}\} = [I]\{F\} \quad (17)$$

I é a matriz identidade.

Impõe-se um deslocamento unitário nos nós dos topos das estacas na direção e sentido carga externa aplicada no bloco. Na sequência o sistema de equações é reorganizado para

separar os deslocamentos assumidos conhecidos das respectivas incógnitas que no caso são as forças no topo das estacas. Isso se faz trocando colunas da matriz identidade pelas colunas correspondentes aos deslocamentos unitários. Após esta transformação o sistema de equações fica:

$$[\overline{K}_G]\{X\} = [\overline{I}]\{F\} \quad (18)$$

onde $[\overline{K}_G]$ é a matriz de rigidez após a troca de colunas, $\{X\}$ é o novo vetor de incógnitas que agora se compõe de deslocamentos ao longo do fuste da estaca e de cargas aplicadas nos nós do topo das estacas, $[\overline{I}]$ é a matriz identidade que agora incorpora as colunas que vieram da matriz de rigidez e $\{F\}$ é o vetor que contém os deslocamentos unitários prescritos nos nós do topo das estacas.

O Sistema de equações agora pode ser resolvido obtendo como resposta das forças no topo das estacas, os deslocamentos dos demais nós das estacas. Na sequência os resultados precisam ser transformados para o problema real. Chamando de F_R a força real aplicada na direção do deslocamento unitário aplicado, este valor deve ser proporcional ao carregamento que produziu os deslocamentos unitários no topo das estacas. Chamando F_i a força aplicada na estaca i , pode-se obter o carregamento virtual total aplicado no grupo de estacas:

$$R_B = F_1 + F_2 + F_3 + \dots + F_n \quad (19)$$

onde n é o número de estacas do grupo. Assim, o fator de correção para a carga real aplicada no bloco é dada por:

$$\alpha = \frac{F_R}{R_B} \quad (20)$$

Multiplicando-se por α todos os resultados obtidos na análise para os deslocamentos unitários obtém-se os resultados correspondentes ao carregamento real.

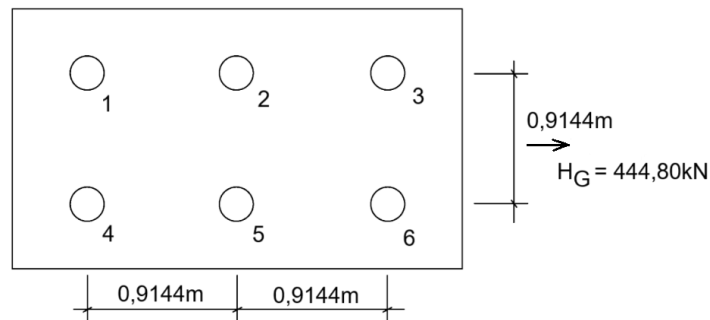
Resultados e Discussões

Avaliação numérica

Exemplo 1

A formulação foi inicialmente testada para o grupo de seis estacas com bloco rígido indicado nas Fig.(s) 3 e 4.

Figura 3 – Grupo de 6 estacas com bloco rígido



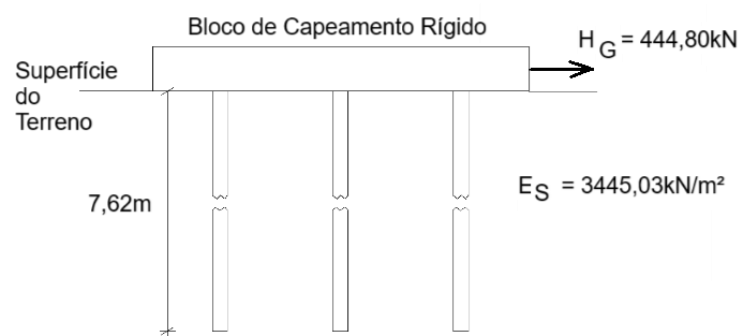
Fonte: Autores (2025)

As estacas têm o mesmo diâmetro, $D=0,3048\text{m}$ e o mesmo comprimento, $L=7,62\text{m}$. O conjunto está submetido a uma força horizontal ao longo de sua maior dimensão no valor de $P_x=444,8\text{kN}$. O módulo de elasticidade do solo foi adotado $E_s=3445,0332\text{kN/m}^2$, já o coeficiente de Poisson é igual a 0,5. E K_R é coeficiente de flexibilidade do sistema:

$$K_R = \frac{E_p I_p}{E_s L^4} = 10^{-3} \quad (21)$$

Com a formulação apresentada neste trabalho foram obtidos os valores apresentados na Tabela 1, para o deslocamento lateral (u) no topo das estacas e forças horizontais (H_1 e H_2).

Figura 4 - Grupo de 6 estacas com bloco rígido



Fonte: Autores (2025)

Tabela 1 - Resultados para o deslocamento lateral no topo das estacas e forças horizontais

Autor	Presente trabalho	Ref. [7]	Razão relativa (%)
u (cm) (no topo das estacas, $P_x=444,80\text{kN}$)	2,9666	3,0591	3,12
H1 (kN) (nas estacas 2 e 5)	80,78198	83,4739	3,33
H2 (kN) (nas estacas 1, 3, 4 e 6)	60,83605	55,4522	8,85

Fonte: Autores (2025)

Na sequência o grupo foi analisado submetido à mesma carga porém agora aplicada na direção da menor dimensão do bloco. Finalmente o bloco foi analisado com a carga aplicada verticalmente sobre o bloco e neste caso está se admitindo que não existe contato entre a placa e o solo. Os resultados obtidos encontram-se na Tabela 2.

Tabela 2 - Resultados para o deslocamento no topo das estacas e forças horizontais

Resultados no topo das estacas	menor dimensão do bloco $P_y=444,80\text{kN}$	sobre o bloco $P_z=444,80\text{kN}$
deslocamentos (cm) (no topo das estacas)	2,806044	1,755644
H1 (kN) (nas estacas 2 e 5)	81,05623	85,46298
H2 (kN) (nas estacas 1, 3, 4 e 6)	60,28754	51,47405

Fonte: Autores (2025)

Para estes dois últimos exemplos não têm-se resultados de outros autores com os dados indicados. Assim para se fazer uma confirmação destes resultados o grupo de estacas, com as mesmas condições de contorno e com as cargas H_1 e H_2 aplicadas no topo das estacas foi analisada e os deslocamentos do topo das estacas coincidiram com os obtidos

com a formulação apresentada. Foram introduzidas condições de contorno no sistema final de equações para representar a ligação rígida entre a estaca e o bloco sendo somente liberado o deslocamento na direção da força aplicada. Os resultados obtidos com esta análise coincidem com os obtidos pela formulação apresentada.

Conclusões

Neste trabalho é apresentada uma formulação para a análise da interação entre um bloco rígido com estacas e o solo utilizando o acoplamento MEC-MEF. Inicialmente impõe-se deslocamento unitário no topo das estacas na direção da força aplicada no bloco e o sistema de equações é então resolvido. A partir do fator de conversão do carregamento total nas estacas com deslocamento unitário imposto e o carregamento real aplicado obtém-se as forças no topo das estacas e deslocamentos e tensões de interação ao longo do fuste da estaca.

Dos resultados apresentados, um está de acordo com o obtido por outra formulação e os outros dois foram confirmados a partir da solução do mesmo problema porém com estacas submetidas às cargas obtidas com a formulação proposta.

Agradecimentos

À Universidade Federal Rural do Semi-Árido (UFERSA), Campus Caraúbas pelo afastamento docente para pós-doutorado no Departamento de Engenharia de Estruturas da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo (SET-EESC-USP).

Referências

1. Z. Y. Ai; D. L. Feng; Y. C. Cheng. BEM analysis of laterally loaded piles in multi-layered transversely isotropic soils. *Engineering Analysis with Boundary Elements* 2013, 37, 04.009. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2013.04.009>.
2. R. Butterfield; P. K. Banerjee. The problem of pile group–pile cap interaction. *Geotechnique* 1971, 21, 2. <https://doi.org/10.1680/geot.1971.21.2.135>.
3. R. Butterfield; P. K. Banerjee. The elastic analysis of compressible piles and pile groups. *Geotechnique* 1971, 21, 1. <https://doi.org/10.1680/geot.1971.21.1.43>.
4. E. H. Davis; H. G. Poulos. The analysis of piled raft systems. *Australian Geomechanics Society* 1972, G2,21. <https://www.australiangeomechanics.org/journals/volume-g2-no-1-1972/>.
5. H. G. Poulos; E. H. Davis, *Pile foundation analysis and design*, John Wiley & Sons, New York, 1980.
6. S. J. Hain; I. K. Lee. The analysis of flexible raft-pile systems, *Geotechnique*, 1978, 28, 65. <https://www.icevirtuallibrary.com/doi/abs/10.1680/geot.1978.28.1.65>.
7. R. Matos Filho; A. V. Mendonça; J. B. Paiva. Static boundary element analysis of piles submitted to horizontal and vertical loads. *Engineering analysis with boundary elements* 2005, 29, 10.003. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2004.10.003>.
8. R. D. Mindlin. Force at a Point in the Interior of a Semi-Infinite Solid. *Journal of Applied Physics* 1936, 7, 1745385. <https://doi.org/10.1063/1.1745385>.
9. J. B. Paiva; R. R. Tronci in *Proceedings of 3rd International Conference on Computational Structures Technology - Advances in boundary element methods*, Budapest, 1996, Vol. 1, 135.

10. J. B. Paiva; R. Butterfield, Computers & Structures. Boundary element analysis of plate-soil interaction 1997, 64, 1-4. [https://doi.org/10.1016/S0045-7949\(96\)00135-6](https://doi.org/10.1016/S0045-7949(96)00135-6).
11. H. G. Poulos; N. S. Mates. Settlement and load distribution analysis of pile groups. Australian Geomechanics Society, 1971, 55, 4. <https://australiangeomechanics.org/journals/volume-55-number-4/>.
12. H. H. Zhang; J. C. Small. Analysis of capped pile groups subjected to horizontal and vertical loads. Computers and Geotechnics, 2000, 26, 1. [https://doi.org/10.1016/S0266-352X\(99\)00029-4](https://doi.org/10.1016/S0266-352X(99)00029-4).

APÊNDICE

Soluções fundamentais de Mindlin (1936) referentes aos deslocamentos x_1 , x_2 e x_3 :

$$u_{11}^* = K_d \left\{ \frac{3-4\nu_s}{r_{SP}} + \frac{1}{R_{SS'}} + \frac{r_{SP1}^2}{r_{SP}^3} + \frac{(3-4\nu_s)r_{SP1}^2}{R_{SS'}^3} + \frac{2CZ}{R_{SS'}^3} \left(1 - \frac{3r_{SP1}^2}{R_{SS'}^2} \right) + \frac{4(1-\nu_s)(1-2\nu_s)}{R_{SS'} + R_{SS'3}} \left[1 - \frac{r_{SP1}^2}{R_{SS'}(R_{SS'} + R_{SS'3})} \right] \right\}$$

$$u_{12}^* = K_d r_{SP1} r_{SP2} \left[\frac{1}{r_{SP}^3} + \frac{3-4\nu_s}{R_{SS'}^3} - \frac{6CZ}{R_{SS'}^5} - \frac{4(1-\nu_s)(1-2\nu_s)}{R_{SS'}(R_{SS'} + R_{SS'3})^2} \right]$$

$$u_{13}^* = K_d r_{SP1} \left[\frac{r_{SP3}}{r_{SP}^3} + \frac{(3-4\nu_s)r_{SP3}}{R_{SS'}^3} - \frac{6CZ R_{SS'3}}{R_{SS'}^5} + \frac{4(1-\nu_s)(1-2\nu_s)}{R_{SS'}(R_{SS'} + R_{SS'3})} \right]$$

$$u_{21}^* = u_{12}^*$$

$$u_{22}^* = K_d \left\{ \frac{3-4\nu_s}{r_{SP}} + \frac{1}{R_{SS'}} + \frac{r_{SP2}^2}{r_{SP}^3} + \frac{(3-4\nu_s)r_{SP2}^2}{R_{SS'}^3} + \frac{2CZ}{R_{SS'}^3} \left(1 - \frac{3r_{SP2}^2}{R_{SS'}^2} \right) + \frac{4(1-\nu_s)(1-2\nu_s)}{R_{SS'} + R_{SS'3}} \left[1 - \frac{r_{SP2}^2}{R_{SS'}(R_{SS'} + R_{SS'3})} \right] \right\}$$

$$u_{23}^* = \frac{r_{SP2}}{r_{SP1}} u_{13}^*$$

$$u_{31}^* = K_d r_{SP1} \left[\frac{r_{SP3}}{r_{SP}^3} + \frac{(3-4\nu_s)r_{SP3}}{R_{SS'}^3} + \frac{6CZ R_{SS'3}}{R_{SS'}^5} - \frac{4(1-\nu_s)(1-2\nu_s)}{R_{SS'}(R_{SS'} + R_{SS'3})} \right]$$

$$u_{32}^* = \frac{r_{SP2}}{r_{SP1}} u_{31}^*$$

$$u_{33}^* = K_d \left[\frac{R_{SP3}^2}{R_{SP}^3} + \frac{3 - 4\nu_s}{R_{SP}} + \frac{6CZR_{SS'3}^2}{R_{SS'}^5} + \frac{8(1 - \nu_s)^2 - (3 - 4\nu_s)}{R_{SS'}} + \frac{(3 - 4\nu_s)R_{SS'3}^2 - 2CZ}{R_{SS'}^3} \right]$$

onde:

$$K_d = \frac{1 + \nu_s}{8\Pi E_s (1 - \nu_s)}$$

$$\Pi = 3,1415926536$$

$$C = x_{3P}$$

$$Z = x_{3\xi}$$

$$R_{SP} = \sqrt{(x_{1\xi} - x_{1P})^2 + (x_{2\xi} - x_{2P})^2 + (x_{3\xi} - x_{3P})^2}$$

$$R_{SP1} = x_{1\xi} - x_{1P}$$

$$R_{SS'} = \sqrt{(x_{1\xi} - x_{1S'})^2 + (x_{2\xi} - x_{2S'})^2 + (x_{3\xi} - x_{3S'})^2}$$

$$R_{SS'3} = x_{3\xi} - x_{3S'}$$

$$K_S = \frac{1}{8\Pi(1 - \nu_s)}$$

onde u_{ij}^* é a solução fundamental, i é a direção da força, j é a direção do deslocamento, ν_s é o coeficiente de Poisson do solo, E_s é o módulo de elasticidade longitudinal do solo, L é o comprimento da estaca, R_0 é raio, (x_{1P}, x_{2P}, x_{3P}) são coordenadas do ponto fonte P , $(x_{1\xi}, x_{2\xi}, x_{3\xi})$ são coordenadas do ponto campo S , S' é um ponto definido tal que $(x_{1S'}, x_{2S'}, x_{3S'}) = (x_{1P}, x_{2P}, -x_{3P})$, R_{SP} é a distância do ponto de integração S ao ponto fonte P e $R_{SS'}$ é a distância do ponto de integração S ao ponto S' .



CAPÍTULO 3

MODELAGEM 3D DA DIFUSÃO TRANSIENTE PARA ANÁLISES RELACIONADAS À DURABILIDADE DAS ESTRUTURAS DE CONCRETO

Wagner Queiroz Silva^{1*}, Edson Denner Leonel²

1 – Departamento de Engenharia Civil, Universidade Federal do Amazonas (UFAM), Manaus, AM, Brasil

*wqs@ufam.edu.br

2 – Departamento de Engenharia de Estruturas, Universidade de São Paulo (USP), São Carlos, SP, Brasil

Resumo - O desenvolvimento de modelos capazes de prever quantitativamente a vida útil de materiais e estruturas é um dos grandes desafios da engenharia contemporânea. O concreto, por ser o material estrutural mais amplamente utilizado no mundo, requer uma atenção especial em relação à durabilidade, tanto em construções existentes quanto em novas edificações. Devido à sua natureza como material compósito poroso, o concreto apresenta um comportamento intrinsecamente complexo. A deterioração de estruturas de concreto é influenciada por fenômenos físicos e químicos, muitos dos quais estão diretamente associados a processos de transferência de massa, especialmente por difusão. Embora os modelos analíticos sejam amplamente consolidados, sua aplicação é limitada para casos de fluxos unidimensionais. Para fluxos multidimensionais, como aqueles envolvendo cloretos ou a condutividade térmica das estruturas tridimensionais, os modelos numéricos, como os baseados no método dos elementos finitos (MEF), oferecem maior precisão e flexibilidade. Este trabalho apresenta um modelo de difusão transiente tridimensional utilizando o MEF para a análise de fenômenos como a difusão iônica de cloretos, difusão térmica e difusão de umidade no concreto. O modelo proposto pode contribuir para uma melhor compreensão desses fenômenos, promovendo avanços das metodologias para avaliações de durabilidade e de vida útil de estruturas de concreto armado.

Palavras-chave: *Difusão transiente. MEF 3D. Transferência de massa. Durabilidade do concreto.*

Financiamentos: Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Amazonas - FAPEAM

Introdução

Temáticas relacionadas à durabilidade das construções vêm ganhando destaque na engenharia civil nos últimos anos. É notável, nas últimas décadas, um impulsionamento de pesquisas voltadas para o desenvolvimento de metodologias robustas capazes de prever e quantificar a vida útil das construções, tanto existentes quanto futuras. Há especial interesse nas estruturas de concreto, por ser este o material estrutural mais utilizado mundialmente. Afinal, o concreto oferece inúmeras vantagens, como a flexibilidade de formas, ampla disponibilidade de matéria-prima e menor custo em relação aos demais materiais estruturais, tanto de execução quanto para a sua manutenção [1]. Além disso, é um material com comportamento mecânico intrinsecamente complexo, por ser um compósito poroso e altamente heterogêneo, cuja durabilidade pode ser significativamente afetada pela interação com agentes agressivos presentes no ambiente.

A avaliação da durabilidade das estruturas de concreto armado requer uma compreensão de diversos fenômenos, dentre estes a difusão de substâncias agressivas, a variação térmica e a interação com o meio ambiente, o que tem motivado o desenvolvimento de modelos computacionais, para que se possa prever tais comportamentos de maneira adequada e eficaz.

Sabe-se que as estruturas de concreto armado estão sujeitas à degradação ao longo do tempo, devido principalmente à exposição a agentes externos e a ações físicas e químicas, que podem comprometer sua funcionalidade e segurança. Edificações, pontes e outras infraestruturas são continuamente expostas a condições ambientais que, progressivamente, deterioram a qualidade dos materiais. Em resposta a esses desafios, é importante que os engenheiros busquem aprimorar métodos e técnicas para garantir que as estruturas mantenham condições de uso adequadas, mesmo diante dos inevitáveis processos de deterioração.

Um dos principais problemas que afetam a durabilidade das construções de concreto armado é a corrosão das armaduras. A corrosão não só compromete a integridade estrutural, como também impõe grandes custos à sociedade. De acordo com estudos realizados pela organização *National Association of Corrosion Engineers (NACE International)*, os custos associados à corrosão, no mundo, podem atingir valores comparáveis ao Produto Interno Bruto (PIB) global, e a principal causa de falhas ou problemas operacionais que resultam em manutenções não programadas, têm origens relacionadas a problemas de corrosão [2]. No Brasil, estudos recentes confirmam que a corrosão das armaduras constitui o principal fator de degradação das estruturas de pontes de concreto [3]. Embora ainda faltem dados mais atualizados e específicos sobre esses custos, é evidente que a corrosão em estruturas de concreto é uma preocupação significativa para o setor da construção civil.

Um dos principais fatores que desencadeiam o processo de corrosão em estruturas de concreto armado é o ataque de cloretos, comumente proveniente de ambientes marinhos, da maresia, do contato direto com a água do mar, pela ação de nuvens salinas, ou mesmo pela simples ação de produtos à base de cloro. Os íons de cloreto, ao se depositarem na superfície das peças de concreto, são progressivamente transportados para o interior do material por mecanismos como a difusão iônica e a permeabilidade da água. Esses processos, ao longo do tempo, geram mudanças eletroquímicas em torno das armaduras, o que pode iniciar ou acelerar o processo corrosivo. Na literatura, encontram-se inúmeros estudos que abordam esse fenômeno de forma mais ampla, reforçando a importância da compreensão destes mecanismos para a preservação e durabilidade das estruturas de concreto armado [4-8].

Diversos fatores podem influenciar a difusão de íons de cloreto e alterar os mecanismos de transporte inerentes a esse processo. A complexidade do problema aumenta quando se consideram as características de materiais cimentícios, como o concreto. Além dos parâmetros materiais, a difusão de cloretos é impactada por condições externas, como temperatura e umidade, que afetam o comportamento difusivo. Por isso, o estudo da difusão de íons de cloreto no concreto está também intrinsecamente relacionado à compreensão das variações internas de temperatura e de umidade.

Em relação ao comportamento dos materiais diante de variações térmicas, sabe-se que essas mudanças também são descritas por mecanismo difusivo. A equação diferencial que

governa o problema da condutividade térmica é equivalente à equação que descreve a difusão iônica. Em ambos os casos, trata-se do transporte de uma quantidade conservada, seja calor ou massa, através de um meio, e impulsionado por gradientes, sejam de temperatura ou de concentração, respectivamente. Essa equivalência permite que métodos de modelagem aplicados a um desses fenômenos sejam adaptados ao outro, o que se mostra particularmente útil em simulações numéricas, como no método dos elementos finitos (MEF). Além disso, o entendimento dessa correspondência facilita o desenvolvimento de análises integradas que considerem múltiplos mecanismos de transporte, fator crucial no estudo de materiais complexos, como o concreto, no qual o aumento de temperatura normalmente acelera os processos físico-químicos e pode intensificar a deterioração estrutural.

Outro fenômeno de interesse diz respeito a umidade do concreto endurecido e suas mudanças com o tempo. A variação de umidade interna no concreto é um fenômeno altamente complexo, envolvendo múltiplos mecanismos de transporte, mas a mecânica difusiva é um dos processos principais. A alta complexidade decorre do fato de que o concreto é um material higroscópico, ou seja, capaz de absorver e liberar água em diferentes estados físicos. Assim, há uma interação dinâmica entre o transporte de água em seu estado líquido, regido principalmente pela capilaridade, e a difusão do vapor de água pelo volume e através dos poros do concreto [9]. A presença de umidade elevada intensifica os processos internos, facilitando a mobilidade de íons de cloreto e de outros agentes agressivos, o que acelera a difusão e contribui para a deterioração do concreto.

Embora uma análise completa da umidade exija a consideração de diversos mecanismos de transporte para fornecer uma avaliação mais precisa, o presente trabalho foca exclusivamente no processo de difusão, que é dominante no volume do concreto [10].

A importância do estudo do fenômeno difusivo torna-se clara para a análise da durabilidade das estruturas de concreto e para a modelagem dos fenômenos associados. Por mais que existam soluções analíticas para a equação diferencial da difusão, tais soluções são limitadas por considerarem fluxos apenas em uma direção. Além disso, consideram o material de forma inerte, o que não corresponde à realidade. Em estruturas sujeitas a fluxos provenientes de múltiplas direções, a aplicação de modelos numéricos é mais adequada. O MEF surge, nesse sentido, como uma alternativa eficiente, permitindo maior generalização e um tratamento mais adequado para estes casos.

A formulação do MEF para elementos sólidos foi então utilizada para o desenvolvimento de uma ferramenta computacional capaz de resolver numericamente a equação diferencial da difusão transiente em três dimensões. O modelo é versátil e adaptável tanto para simulações de transporte de massa quanto de calor. Tal flexibilidade faz desta uma ferramenta de grande interesse para estudos de mecanismos que influenciam diretamente na durabilidade de estruturas de concreto armado. Afinal, esse tipo de metodologia pode ser incorporado a outros modelos para ampliação do universo de análises. É possível, por exemplo, avaliar a difusão de cloretos em estruturas de concreto combinando modelos numéricos à modelos de confiabilidade e otimização [11], ou considerando a incorporação de modelos não lineares de dano para a realização de análise multifísica [12].

Independentemente do modelo utilizado para avaliação da durabilidade das construções, percebe-se que os processos difusivos desempenham um papel essencial. O presente trabalho busca contribuir para a compreensão dos fenômenos que afetam a durabilidade

de estruturas de concreto, especialmente daqueles relacionados ao ataque de cloretos. Espera-se contribuir com o aprimoramento dos modelos para análises estruturais, promovendo soluções práticas e eficientes para a melhoria no desenvolvimento dos projetos de estruturas.

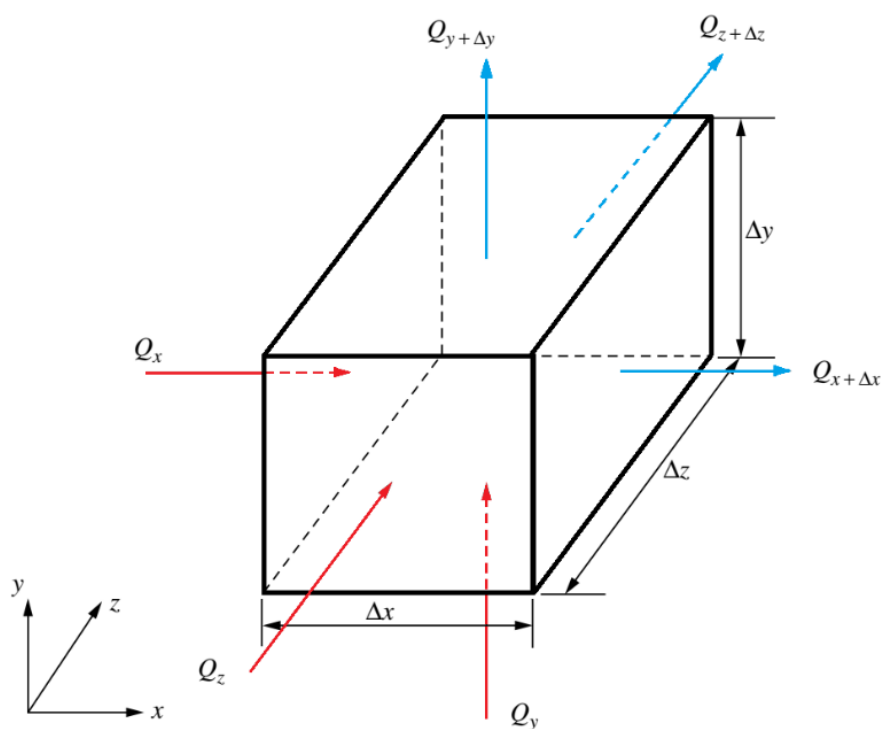
Desenvolvimento do modelo numérico

Equação diferencial da difusão

Difusão, por definição, é o fenômeno de transporte de matéria por movimento de partículas de uma região de maior concentração para uma região de menor concentração. Este fenômeno é governado por um conjunto de princípios físicos que pode ser expresso matematicamente por uma equação diferencial.

Para obter a equação geral da difusão (ou da condução de matéria), pode-se aplicar o conceito de conservação de massa dentro de um volume de controle específico do material. Considera-se um volume infinitesimal pertencente a um sólido, onde as quantidades de partículas de entrada, de saída, gerada e consumida devem estar equilibradas pelo princípio da conservação. Definem-se as direções do fluxo difusivo no espaço tridimensional, que descreve a quantidade de partículas que se movem através de uma unidade de área por unidade de tempo. A figura 1 mostra o volume de controle e os fluxos de partículas entrando e saindo em faces opostas.

Figura 1 – Elemento infinitesimal para o problema da difusão 3D



Fonte: Adaptado de [13].

Admite-se que, para cada direção, o fluxo é diretamente proporcional a uma grandeza denominada gradiente de concentração, a qual é descrita por Fick [14]. Denomina-se a concentração por potencial, dando assim maior generalidade ao equacionamento.

O balanço energético deve garantir o princípio da conservação. Assim, pode-se escrever a seguinte igualdade:

$$Q_x + Q_y + Q_z + G\Delta x\Delta y\Delta z = Q_{x+dx} + Q_{y+dy} + Q_{z+dz} + \rho\Delta x\Delta y\Delta z \frac{\partial u}{\partial t} \quad (1)$$

Na Eq. 1 tem-se Q_x , Q_y e Q_z representando as quantidades de energia de entrada em cada direção x , y e z ; G é um termo de domínio no volume infinitesimal ($\Delta x\Delta y\Delta z$) relacionado à geração interna de energia (quando houver); Q_{x+dx} , Q_{y+dy} e Q_{z+dz} são as parcelas de energia de saída; ρ é a constante que está relacionada à capacidade do material de armazenar a quantidade que está sendo difundida; u é o potencial que varia no tempo t . O último termo define a taxa de variação de u no tempo.

As parcelas de energia de saída podem ser obtidas realizando-se expansões em séries de Taylor para cada uma, desprezando-se os termos de ordem superior, conforme descreve a Eq. 2 a seguir.

$$\begin{aligned} Q_{x+dx} &= Q_x + \frac{\partial Q_x}{\partial x} \Delta x \\ Q_{y+dy} &= Q_y + \frac{\partial Q_y}{\partial y} \Delta y \\ Q_{z+dz} &= Q_z + \frac{\partial Q_z}{\partial z} \Delta z \end{aligned} \quad (2)$$

Substituindo-se a Eq. 2 na Eq. 1, obtém-se a seguinte expressão:

$$-\frac{\partial Q_x}{\partial x} \Delta x - \frac{\partial Q_y}{\partial y} \Delta y - \frac{\partial Q_z}{\partial z} \Delta z + G\Delta x\Delta y\Delta z = \rho\Delta x\Delta y\Delta z \frac{\partial u}{\partial t} \quad (3)$$

As energias de entrada Q_x , Q_y e Q_z podem ser calculadas a partir do produto entre o fluxo em cada direção pela respectiva área da face de atuação. Os fluxos q_x , q_y e q_z são definidos por uma lei constitutiva, que, no caso do problema de difusão transiente será a 2ª lei de Fick, que relaciona o fluxo com a variação do potencial [14]. Para cada direção, têm-se então as relações dadas nas Eq. 4.

$$\begin{aligned} Q_x &= q_x\Delta y\Delta z = \left(-D_x \frac{\partial u}{\partial x}\right) \Delta y\Delta z \\ Q_y &= q_y\Delta x\Delta z = \left(-D_y \frac{\partial u}{\partial y}\right) \Delta x\Delta z \\ Q_z &= q_z\Delta x\Delta y = \left(-D_z \frac{\partial u}{\partial z}\right) \Delta x\Delta y \end{aligned} \quad (4)$$

Nestas expressões os coeficientes D_x , D_y e D_z representam constantes de difusão do material em cada direção do espaço. O sinal negativo está relacionado à direção do fluxo, que se dá sempre no sentido do ponto de maior potencial para o ponto de menor potencial.

No modelo aqui proposto, considera-se a formulação para materiais isotrópicos, isto é:

$$D_x = D_y = D_z = D \quad (5)$$

Também se admite que o termo de domínio G é nulo, ou seja, não há fonte de geração de energia interna. Substitui-se então a Eq. 4 na Eq. 3, divide-se pelo volume e aplica-se às duas últimas considerações mencionadas, obtendo-se assim uma equação diferencial para o problema de difusão transiente em materiais com isotropia, que tem a seguinte forma:

$$D \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = \frac{\partial u}{\partial t} \quad (6)$$

Aplicação do MEF

Para solucionar a equação diferencial dada na Eq. 6, aplica-se o método dos resíduos ponderados, de modo a se escrever o potencial u como uma aproximação em função de valores nodais em uma malha de pontos discreta formada por elementos finitos. O potencial então fica definido pela Eq. 7.

$$\sum_{j=1}^m N_j u_j \quad (7)$$

Nesta abordagem, N_j são as funções ponderadoras, que coincidem com as funções de forma interpoladoras de um elemento finito; u_j são os valores potenciais nos nós j do elemento, e m é o número de nós do elemento. Para o presente trabalho utilizam-se elementos sólidos hexaédricos com aproximação linear, isto é, contendo um nó em cada vértice do cubo, totalizando 8 nós por elemento. Para uma determinada região do problema os valores potenciais devem ser conhecidos, o que corresponde às condições de contorno essenciais para encaminhar a solução numérica.

Aplicando-se então o método dos resíduos ponderados na equação diferencial e considerando a aproximação por elementos finitos dada pela Eq.7, obtém-se a seguinte expressão para o domínio Ω de um elemento finito:

$$\int_{\Omega} N_j D \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{1}{D} \frac{\partial u}{\partial t} \right) d\Omega = 0 \quad (8)$$

Aplica-se o teorema de Green aos termos diferenciais da Eq. 8, obtendo-se assim:

$$\begin{aligned}
 & - \int_{\Omega} D \left[\frac{\partial N_j}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial N_j}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial N_j}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial z} + N_j \frac{1}{D} \frac{\partial u}{\partial t} \right] d\Omega + \\
 & + \int_{\Gamma_q} N_j D \left[\frac{\partial u}{\partial x} \hat{n}_x + \frac{\partial u}{\partial y} \hat{n}_y + \frac{\partial u}{\partial z} \hat{n}_z \right] d\Gamma_q = 0
 \end{aligned} \tag{9}$$

Na Eq. 9 a integral de domínio se dividiu em duas integrais, uma ainda sobre o domínio Ω , e outra sobre o contorno Γ_q , para o qual se conhece o valor dos fluxos (condição de contorno natural). Nesta última integral, aparecem as componentes \hat{n}_x , \hat{n}_y e \hat{n}_z do vetor unitário normal à superfície Γ_q . Define-se então um vetor fluxo \underline{q} em função das normais unitárias em cada direção da seguinte maneira:

$$\underline{q} = -q_x \hat{n}_x - q_y \hat{n}_y - q_z \hat{n}_z \tag{10}$$

Considerando a Eq. 4 em conjunto com as Eq. 7, 9 e 10, chega-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} D \left[\frac{\partial N_j}{\partial x} \frac{\partial N_k}{\partial x} u_k + \frac{\partial N_j}{\partial y} \frac{\partial N_k}{\partial y} u_k + \frac{\partial N_j}{\partial z} \frac{\partial N_k}{\partial z} u_k + \frac{1}{D} N_j \frac{\partial N_k}{\partial t} u_k \right] d\Omega + \\
 & + \int_{\Gamma_q} N_j \underline{q} d\Gamma_q = 0
 \end{aligned} \tag{11}$$

que pode ser reescrita em formato matricial da seguinte maneira:

$$[V] \left\{ \frac{\partial u}{\partial t} \right\} + [D] \{u\} = \{f\} \tag{12}$$

onde têm-se:

$$[V] = \int_{\Omega} [N]^T [N] d\Omega \tag{13}$$

$$[D] = \int_{\Omega} D [B]^T [B] d\Omega \tag{14}$$

$$\{f\} = \int_{\Gamma_q} \underline{q} [N]^T d\Gamma_q \tag{15}$$

com

$$[B] = \left[\frac{\partial N_1}{\partial x} \frac{\partial N_2}{\partial x} \dots \frac{\partial N_n}{\partial x} ; \frac{\partial N_1}{\partial y} \frac{\partial N_2}{\partial y} \dots \frac{\partial N_n}{\partial y} ; \frac{\partial N_1}{\partial z} \frac{\partial N_2}{\partial z} \dots \frac{\partial N_n}{\partial z} \right] \tag{16}$$

Para facilitar a compreensão destas expressões, a matriz $[V]$ pode ser compreendida como uma matriz de capacitância, análoga à matriz de massa em problemas dinâmicos elásticos de estruturas, pois representa o acúmulo do potencial ao longo do tempo. Já a matriz $[D]$ corresponde à matriz de difusividade, equivalente à matriz de rigidez do problema

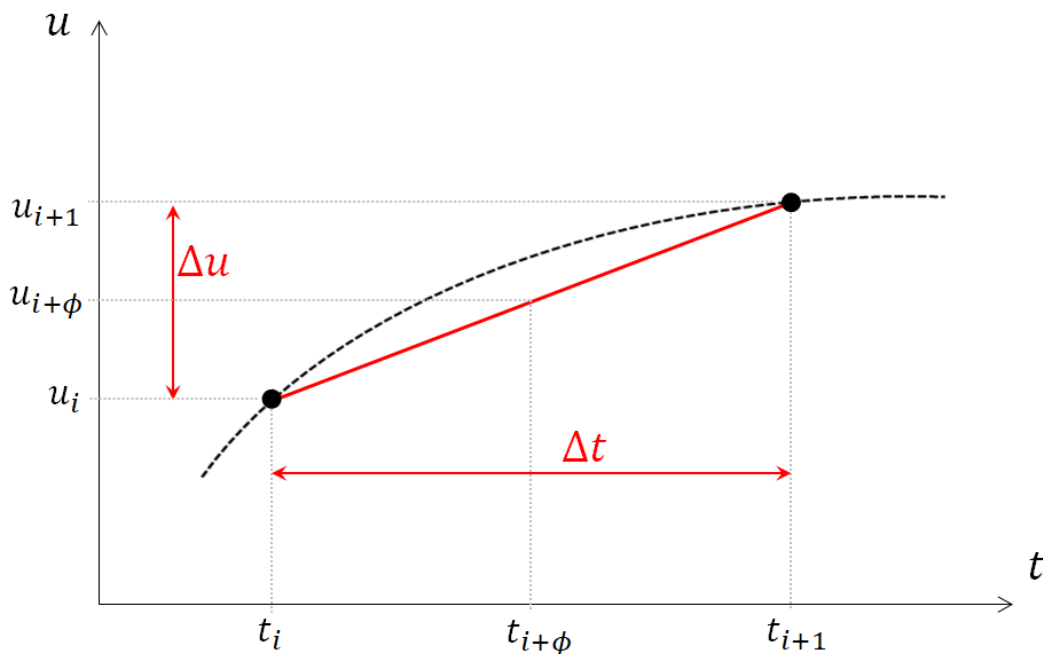
elástico, representando aqui uma restrição de difusão no volume. O vetor $\{f\}$ constitui o fluxo, sendo equivalente a um vetor de forças do problema elástico.

Caso se pretenda analisar um problema em regime estacionário, basta que se despreze o primeiro termo na Eq. 12, que é dependente do tempo.

Integração temporal para regime transiente

A resolução da Eq. 12 para o regime transiente envolve discretizar a parcela diferencial $\left\{\frac{\partial u}{\partial t}\right\}$, o que pode ser realizado por uma técnica de diferenças finitas. Para isso, considera-se a variação do potencial u no tempo t entre dois intervalos consecutivos t_i e t_{i+1} , conforme ilustra a figura 2.

Figura 2 – Variação do potencial u em um intervalo de tempo Δt



Fonte: Autores (2024).

Um valor potencial intermediário para um instante $(i + \phi)$ pode ser estimado aplicando-se séries de Taylor, conforme mostra a Eq. 17.

$$u_{i+\phi} = u_i + \phi \Delta t \frac{\partial u_{i+\phi}}{\partial t} + \phi \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 u_{i+\phi}}{\partial t^2} + \dots \quad (17)$$

Escreve-se então uma aproximação para o operador diferencial temporal da seguinte forma (desconsiderando-se os termos de ordem superior):

$$\frac{\partial u_{i+\phi}}{\partial t} \cong \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta t} \quad (18)$$

Substituindo a aproximação da Eq. 18 na Eq. 17 obtém-se uma expressão que fornece o potencial para o instante $(i + \phi)$:

$$u_{i+\phi} = \phi u_{i+1} + (1 - \phi)u_i \quad (19)$$

o que permite reescrever a Eq. 12 da seguinte maneira:

$$[V] \left\{ \frac{\partial u}{\partial t} \right\}_{i+\phi} + [D] \{u\}_{i+\phi} = \{f\}_{i+\phi} \quad (20)$$

Rearranjando os termos com auxílio das Eq. 18 e 19, obtém-se finalmente o sistema de equações para o problema de difusão transiente em sua forma matricial, que tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \left(\frac{[V]}{\Delta t} + \phi[D] \right) \{u\}_{i+1} &= \left(\frac{[V]}{\Delta t} - (1 - \phi)[D] \right) \{u\}_i + \\ &+ \phi\{f\}_{i+1} + (1 - \phi)\{f\}_i \end{aligned} \quad (21)$$

Uma outra maneira de expressar esse mesmo sistema é apresentada a seguir:

$$[D] \{u\}_{i+1} = \{F\} \quad (22)$$

onde tem-se:

$$[D] = \frac{[V]}{\Delta t} + \phi[D] \quad (23)$$

$$\{F\} = \left(\frac{[V]}{\Delta t} - (1 - \phi)[D] \right) \{u\}_i + \phi\{f\}_{i+1} + (1 - \phi)\{f\}_i \quad (24)$$

A Eq. 22 permite calcular os valores potenciais nodais em um instante $(i + 1)$ a partir dos valores conhecidos no instante i . Realiza-se então um processo iterativo, admitindo-se um potencial inicial conhecido (u_0) que é a primeira aproximação para o início o processo, isto é, para o tempo t igual a 0. Assim, sequencialmente os potenciais u_{i+1} podem ser calculados a partir de u_i .

O integrador temporal ϕ influencia a convergência para o processo iterativo, e seu valor é normalmente definido conforme o tipo de problema específico. É possível demonstrar as condições de estabilidade numérica avaliando-se este parâmetro, sendo em geral recomendado para problemas lineares ou não lineares valores de $\phi > 0,5$. Neste trabalho adota-se para ϕ o valor de $2/3$ [12, 13].

Considera-se que o regime de difusão linear é suficientemente preciso para os objetivos propostos. Para as análises de durabilidade pretendidas, o uso de formulações não lineares tornaria o modelo numérico significativamente mais complexo, porém sem expectativa de ganho expressivo em precisão. Esse impacto seria especialmente limitado ao considerar que o modelo será calibrado com parâmetros do concreto que apresentam grande variabilidade em seus valores e que, muitas vezes, são obtidos de maneira empírica, como será discutido adiante.

Aplicações do modelo numérico

Durabilidade do concreto armado ao ataque de cloretos

O modelo numérico descrito pode ser aplicado na solução de diferentes problemas de engenharia que tenham sua descrição dada pela equação de transporte difusivo, apresentada na Eq. 6. Um caso de particular interesse refere-se ao fenômeno de difusão iônica de cloretos em peças de concreto armado, que ocasiona a corrosão das armaduras em seu interior. Mas o processo de corrosão do aço no concreto armado não é imediato, passando por diferentes etapas sucessivas e havendo diferentes definições para relacionar estes processos a vida útil de uma estrutura.

Um modelo amplamente aceito considera que as armaduras inseridas no concreto estão inicialmente imersas em um ambiente alcalino, com pH em torno de 12,5. Isso cria uma película protetora ao redor das barras de aço, conhecida como filme passivo, formada por reações de oxidação do ferro e redução do oxigênio. A presença excessiva de íons de cloreto pode comprometer essa proteção, causando o que se denomina despassivação da armadura e iniciando o processo de corrosão [15]. Logo, a modelagem da difusão de íons de cloreto pode ser utilizada para quantificar o tempo de ocorrência da despassivação das armaduras, e tal critério define o que alguns pesquisadores denominam como vida útil de projeto [16, 17].

É necessário, para tanto, estabelecer os valores de concentração a partir dos quais os processos eletroquímicos iniciam (ou intensificam) a despassivação das barras de aço. Sabe-se que a probabilidade de corrosão pode aumentar em 50% quando a quantidade de íons Cl^- na interface concreto/aço atinge 0,4% em peso do teor de cimento, e este aumento pode chegar a 90% quando os teores de Cl^- sobem para além de 1,0% em peso [18]. É possível encontrar na literatura diferentes recomendações, mas concentrações da ordem de 0,6 a 0,9 kg/m^3 já são consideradas excessivamente agressivas [1].

A despassivação pela ação de cloretos é prevista pela norma brasileira de projetos de estruturas de concreto [19]. Valores limites máximos para o teor de íons de cloreto são estabelecidos com o objetivo de garantir proteção das armaduras. Estes limites são dados em porcentagens sobre a massa de cimento, e dependem do tipo de estrutura, se concreto protendido ou armado, além da situação em relação à exposição na condição de serviço. A limitação mais rigorosa da norma brasileira é para peças de concreto protendido, cujo teor limite é de 0,05% sobre a massa de cimento, independente da forma de exposição. Para peças de concreto armado expostas à ação de cloretos nas condições de serviço, o limite aumenta para 0,15%. No caso de peças de concreto armado não expostas à cloretos nas condições de serviço, o teor limite é de 0,30% da massa de cimento, caso que corresponde a 0,9 kg/m^3 para um concreto com consumo de cimento de 300 kg/m^3 , por

exemplo. O caso menos rigoroso se aplica a peças de concreto armado em condições mais brandas, como ambientes secos e protegido da umidade nas condições de serviço da estrutura, onde a limitação é de 0,40% sobre a massa de cimento [20].

O teor de concentração interno aumenta conforme se dá o gradiente de concentração em relação ao ambiente externo, onde os íons de cloreto depositados sobre a superfície iniciam o processo difusivo. É preciso definir, portanto, valores para as concentrações superficiais nas faces expostas ao ataque de cloretos, sendo essa a condição de contorno essencial do modelo numérico.

Encontra-se na literatura várias recomendações para a obtenção da concentração superficial de cloretos. Cita-se, apenas como exemplo, a correlação indicada na Eq. 25 em função da distância da estrutura analisada em relação ao mar. Esse modelo é baseado em um estudo realizado com diversas pontes localizadas na Austrália [21]. Nesta expressão, a distância d é dada em km, e resulta em valores aproximados de concentração superficial C_s em kg/m^3 .

$$\begin{aligned} C_s &= 2,95 \text{ kg/m}^3 && \text{para } d < 0,1 \text{ km} \\ C_s &= 1,15 - 1,81 \cdot \log(d) && \text{para } 0,1 \text{ km} \leq d < 2,84 \text{ km} \\ C_s &= 0,35 \text{ kg/m}^3 && \text{para } d > 2,84 \text{ km} \end{aligned} \quad (25)$$

Não há atualmente diretriz normativa brasileira em relação a este parâmetro específico. Outros modelos propostos por diferentes autores, inclusive com variações da concentração superficial ao longo do tempo, poderiam ser também considerados. Para o presente trabalho, admite-se que os efeitos médios de valores obtidos a partir da aproximação dada na Eq. 25 são suficientes para as discussões aqui propostas.

Além do teor limite e da concentração superficial, se faz necessário estabelecer o valor do coeficiente de difusão de íons de cloreto do concreto. Este parâmetro, na verdade, depende de diversos fatores dentre a composição do material, sua microestrutura, inclusive a porosidade, além da temperatura e da umidade interna. O mais recomendado é que a determinação de seu valor seja por ensaios experimentais, mas muitos trabalhos buscam estabelecer correlações empíricas com outros parâmetros do concreto, com o intuito de dar maior praticidade às análises. Cita-se, apenas como exemplo, a função dada na Eq. 26, onde se estabelece uma correlação aproximada entre o coeficiente de difusão e o fator água/cimento (a/c) [22].

$$D_{cl} \cong 10^{-10+4,66(a/c)} \text{ em } \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \quad (26)$$

Existem na literatura outras relações empíricas que também podem ser aplicadas, não havendo a intenção de se realizar neste momento uma análise crítica em relação a estas. O intuito é apenas exemplificar ao leitor os fatores envolvidos na definição dos parâmetros necessários para a calibração do modelo numérico de difusão de íons de cloreto no concreto. Relações diversas, tanto para o coeficiente de difusão, quanto para a

concentração superficial, podem ser encontradas em revisões da literatura sobre o tema [23-25].

Variação de temperatura interna do concreto

O modelo numérico de difusão transiente pode ser aplicado a problemas que envolvam variação de um potencial no tempo, inclusive a transferência de calor por condução. Em diversas aplicações que tratam de avaliar a durabilidade das estruturas, há interesse em empregar o modelo de difusão transiente para o estudo do comportamento térmico no interior do concreto em relação às variações do ambiente. Isso se deve ao fato, já mencionado, de que os processos de degradação do concreto armado podem sofrer influência da temperatura, como é o caso da difusão de íons de cloreto, que tende a aumentar em temperaturas maiores. Outros mecanismos de deterioração e algumas propriedades do concreto também sofrem essa influência, o que justifica tal interesse.

Mensurar as temperaturas internas em estruturas de concreto é possível com uso de sensores. Porém, esse tipo de ensaio requer uma grande quantidade de equipamentos, o que geralmente limita a sua aplicação. Além disso, os próprios sensores podem sofrer interferências térmicas, dificultando algumas das medições. Apesar de haver atualmente desenvolvimentos para futuras técnicas de medição sem contatos, esse tipo de tecnologia irá demandar validação de seus resultados, seja experimentalmente, seja com modelos numéricos [26].

De todo modo, o acompanhamento de temperaturas internas do concreto endurecido através de ensaios ou em campo envolve processos de difícil realização, especialmente quando há interesse em acompanhar as variações por longos períodos, como no caso das análises de durabilidade. É neste sentido que o modelo computacional pode auxiliar, ao prover recursos que permitem estimar as variações térmicas do material com uso de métodos numéricos.

Assim, de maneira análoga ao que foi descrito para a análise da difusão de íons de cloreto, a condução térmica também pode ser estudada com a mesma formulação, sendo necessário definir o coeficiente da difusão térmica do material e os gradientes térmicos nas superfícies.

Em relação ao coeficiente de difusividade térmica do concreto, este é um parâmetro que também depende de outros fatores. Mas a variabilidade deste é menor, quando comparado ao coeficiente de difusão de íons de cloreto. O coeficiente da difusão térmica é dado pela relação apresentada na Eq. 27.

$$D_T = \frac{\kappa}{\rho c} \quad (27)$$

Nesta expressão, κ é a condutividade, ρ é a densidade e c o calor específico do material. Para concretos normais, o calor específico está na faixa entre 900 e 1000 J/kg·°C e a densidade é admitida no valor de 2400 kg/m³. A condutividade térmica é influenciada principalmente pelas características mineralógicas dos agregados, e encontra-se na literatura recomendações de valores que vão de 1,3 a 3,5 W/m·K [1, 27, 28].

É preciso também definir as temperaturas nas superfícies expostas às fontes de calor atuantes. Sabe-se que a transferência de calor pode se dar, além da condução, por mecanismos de convecção e de radiação, com diferentes origens [27]. Para as construções usuais de concreto armado, como pontes e edificações, os fluxos devido a radiação solar e convecção do ar e/ou da água preponderam no comportamento térmico destas estruturas, quando comparadas a outras fontes, como a radiação emitida pela terra, por exemplo [29].

Dentro dessa temática, cita-se um interessante estudo, voltado ao desenvolvimento de métodos práticos para a determinação de temperaturas de pavimentos em rodovias na América do Norte, por meio de um modelo de transferência de calor com consideração dos fenômenos de radiação solar e da convecção de ventos [30]. O estudo concluiu que a relação entre a temperatura máxima do pavimento e a temperatura máxima do ar é essencialmente linear. Observou-se também que, para camadas mais superficiais (até 20 cm) as diferenças entre as temperaturas máximas do pavimento e do ar alcançaram valores da ordem de 7°F (aproximadamente 3,8°C), dependendo da absorvidade do material. Nota-se que essa diferença de temperatura equivale, aproximadamente, a um percentual da ordem de 10% a 15% das temperaturas máximas típicas observadas no Brasil, especialmente nas regiões mais quentes do país [31]. É interessante observar também que, alguns dos valores de propriedades considerados naquela pesquisa para o material asfáltico são próximos às faixas de valores do concreto. É o caso da emissividade e da condutividade térmica, para as quais foram adotados, respectivamente, os valores de 0,9 e 1,38 W/m²·K.

Modelos presentes na literatura frequentemente consideram a hipótese de uma relação linear entre a temperatura do ar e a temperatura no interior das estruturas. Em seções transversais de pontes do tipo caixão, por exemplo, alguns estudos indicam que a temperatura máxima na seção transversal pode exceder as temperaturas máximas do ar em até 10% [32]. Dessa maneira, as temperaturas na superfície do concreto ficam definidas a partir dos dados meteorológicos da região do projeto.

Definições de limites (superior ou inferior) para as temperaturas se aplicam a problemas específicos, como estruturas em situação de incêndio, ou sujeitas a congelamentos, onde sabe-se que propriedades, como as resistências mecânicas, sofrem significativa influência. Porém, estas situações não serão aqui tratadas, havendo maior interesse no presente trabalho em se discutir o comportamento do concreto diante dos gradientes de temperatura ambiente, para análise da durabilidade das estruturas. Adiante, será apresentada uma simulação de variação térmica diária utilizando o modelo proposto, retomando essa discussão no contexto da durabilidade.

Variação de umidade interna do concreto

A variação de umidade interna em materiais também pode ser analisada por meio de modelos que consideram o transporte de água via difusão, tanto em sua fase líquida quanto gasosa. No entanto, a difusão representa apenas um dos mecanismos de transferência de umidade nos materiais. Esse processo é particularmente complexo em materiais porosos e higroscópicos, como os materiais cimentícios, nos quais a interação entre fases e condições ambientais resulta em variações de umidade que exigem abordagens avançadas para uma descrição mais precisa.

O transporte de umidade interna no concreto é um processo não linear, e sofre forte influência de uma série de parâmetros, dentre a composição do concreto, a idade, o grau de hidratação, dimensões dos poros, condições de temperatura, além da própria umidade. A umidade presente em seu estado líquido e em forma de vapor de água se influenciam mutuamente, afetando a taxa de transporte e os gradientes de umidade interna [9]. Experimentos em laboratório demonstram que até mesmo o valor do coeficiente de difusão da umidade varia com a mudança da umidade relativa [33, 34].

São todos estes fatores que causam a complexidade do processo, tornando a modelagem numérica do fenômeno de transporte de umidade um desafio. No entanto, avaliações precisas do teor de umidade interna costumam ser cruciais em análises específicas nas idades iniciais do concreto, como na secagem, durante o processo de cura, por exemplo. Vale lembrar também que, tanto a difusão de cloretos quanto a condutividade térmica, sofrem influências da umidade, estando todos estes fenômenos (dentre outros), relacionados entre si.

Estudos para o cálculo de umidade interna de materiais cimentícios são realizados desde o final da década de 1950 [35]. Ainda hoje discutem-se quais metodologias são mais eficientes para se modelar a movimentação de água no interior dos materiais. Percebe-se a distinção entre métodos considerados mais adequados para concretos em diferentes situações de umidade ambiente, dentre concretos em meios saturados, concretos sujeitos a ciclos de molhagem-secagem e concretos em ambientes mais secos.

Nos materiais cimentícios, o fenômeno da difusão está mais relacionado a movimentação da água em seu estado gasoso, enquanto para o estado líquido prepondera o movimento por outros processos, ocorridos nos vazios da estrutura porosa deste tipo de material. Embora a difusão de moléculas de água ocorra em líquidos (como em soluções aquosas), o transporte de água líquida no concreto é comumente governado por outros fenômenos como a sucção capilar e a permeabilidade (fluxo de água sob gradiente de pressão). A difusão de água líquida pura não é tão significativa em comparação a esses outros mecanismos, especialmente em meios porosos [10].

Pretende-se neste trabalho limitar a discussão em relação ao transporte de umidade por difusão, no qual as moléculas de vapor de água movem-se de acordo com o gradiente de umidade relativa. Para realizar esse tipo de análise, é preciso definir o valor do coeficiente de difusão e os gradientes de umidade externos.

O coeficiente de difusão da umidade no concreto é bastante variável, sendo possível encontrar na literatura técnica algumas formulações empíricas. Cita-se, apenas como exemplo, a relação dada conforme a Eq. 28 [36]:

$$D_h = D_{va} \tau \theta_g \quad (28)$$

Nesta expressão, a difusão equivalente de umidade D_h é dada em função do coeficiente de difusão do vapor de água no ar D_{va} , que também é estimado por outras correlações, além do coeficiente de tortuosidade dos poros τ e da quantidade de vapor θ_g em %. Percebe-se, então, a dificuldade na determinação deste parâmetro, mesmo com uso de correlações empíricas, sendo mais usual que o coeficiente de difusão da umidade seja obtido por meio de ensaios laboratoriais.

Valores para o coeficiente de difusão de umidade da ordem de 10^{-11} a 10^{-9} m²/s são comumente indicados para concretos de densidades normais com fator água cimento entre 0,40 e 0,60 [4, 21, 37]. Porém, é possível encontrar na literatura uma variedade grande de valores para este parâmetro, a depender de como é feito o ensaio para a sua determinação. Alguns trabalhos, por exemplo, observaram valores maiores, da ordem de 10^{-8} a 10^{-7} m²/s [33, 35, 38]. Isso se deve ao fato de que a difusividade é fortemente dependente da própria umidade interna do concreto, do tempo e procedimentos de cura, dentre outros fatores já mencionados.

Em relação ao gradiente de umidade na superfície, o usual é a consideração da relação direta entre a umidade relativa do ar e a umidade superficial, de maneira similar ao que foi comentado no caso térmico. Excetuam-se casos específicos, como estruturas mergulhadas, para as quais interessa a condição saturada, porém estas não serão aqui discutidas.

A intenção do presente trabalho é avaliar o comportamento difusivo da umidade relativa no interior do concreto para fins de avaliação da durabilidade das construções convencionais no longo prazo. Discussões mais amplas sobre este tema e sobre os outros fenômenos relacionados podem ser encontradas em revisões da bibliografia [10, 39, 40].

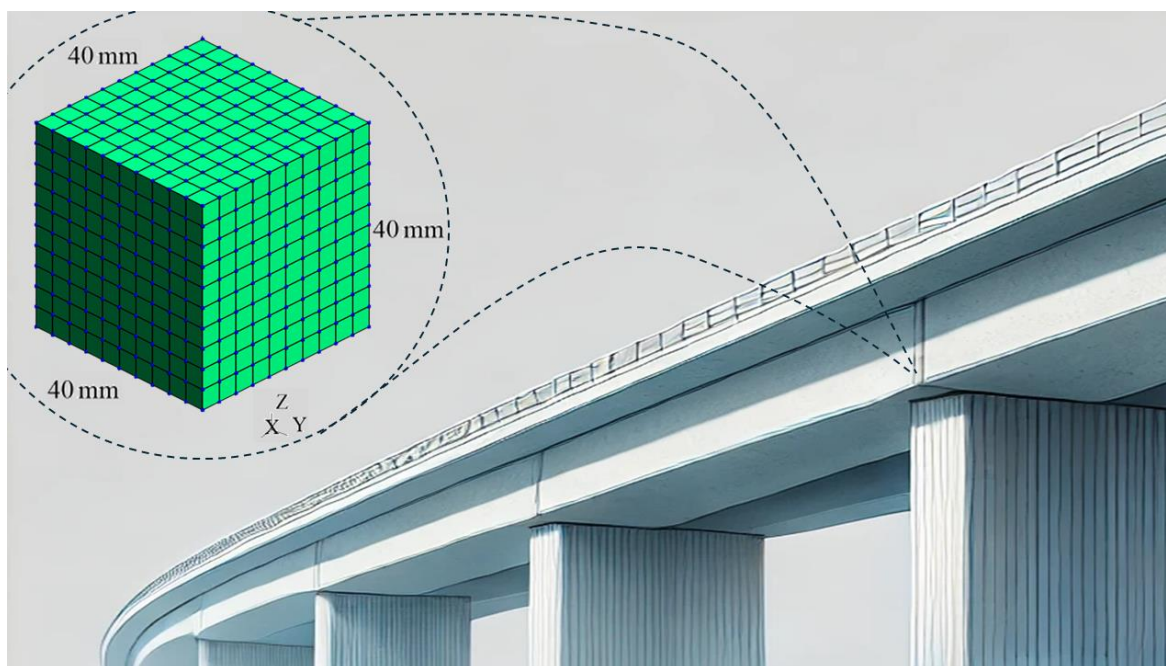
Resultados e Discussões

Nas seções a seguir, serão apresentados e discutidos exemplos de aplicação do modelo de difusão transiente. As simulações realizadas abordam problemas diretamente relacionados à durabilidade de estruturas de concreto. O objetivo é demonstrar como este modelo pode contribuir para o desenvolvimento de metodologias práticas voltadas para análises de durabilidade estrutural das construções.

Simulação da difusão de íons de cloreto no concreto

Aplica-se nesta simulação o modelo numérico descrito para a análise da difusão transiente tridimensional de íons de cloreto em um volume de concreto, visando mensurar a durabilidade de uma estrutura de concreto armado. A simulação é realizada em um cubo de material isotrópico com lados iguais de dimensões de 40 mm. Aplica-se uma concentração superficial constante de cloretos em 3 faces que possuem um vértice em comum. Este modelo pode ser entendido como a quina (ou canto) de uma peça estrutural de concreto armado qualquer, sendo a posição da armadura correspondente ao vértice diagonalmente oposto àquele comum às faces atacadas. Assim, essa simulação equivale a análise de fluxo tridimensional em uma peça de concreto armado com cobrimento de 40 mm, conforme ilustra a figura 3. Após uma análise de convergência, a malha discreta foi elaborada utilizando-se 1000 elementos finitos hexaédricos lineares, totalizando 1331 nós.

Figura 3 – Exemplo de aplicação para análise 3D da difusão no concreto



Fonte: Autores (2024).

A magnitude de cobertura considerada corresponde ao valor mínimo exigido pela norma brasileira de projetos de estruturas de concreto para vigas e pilares em ambiente de classe de agressividade classificado como forte [19].

Para a simulação, adotou-se o coeficiente de difusão de íons de cloreto no concreto com valor de $67,4 \text{ mm}^2/\text{ano}$ (aproximadamente $2 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$), valor este calculado para um fator água/cimento de 0,50 [22].

Para a concentração superficial adotou-se $1,15 \text{ kg/m}^3$, que correspondente a um valor aproximado para obras localizadas a 100 metros do mar [21]. Assume-se que esta concentração seja constante ao longo do tempo, admitindo-a como um valor médio para o período considerado. A concentração inicial interna é zero, e a análise foi feita para um intervalo de 40 anos dividido em 100 passos de tempo iguais.

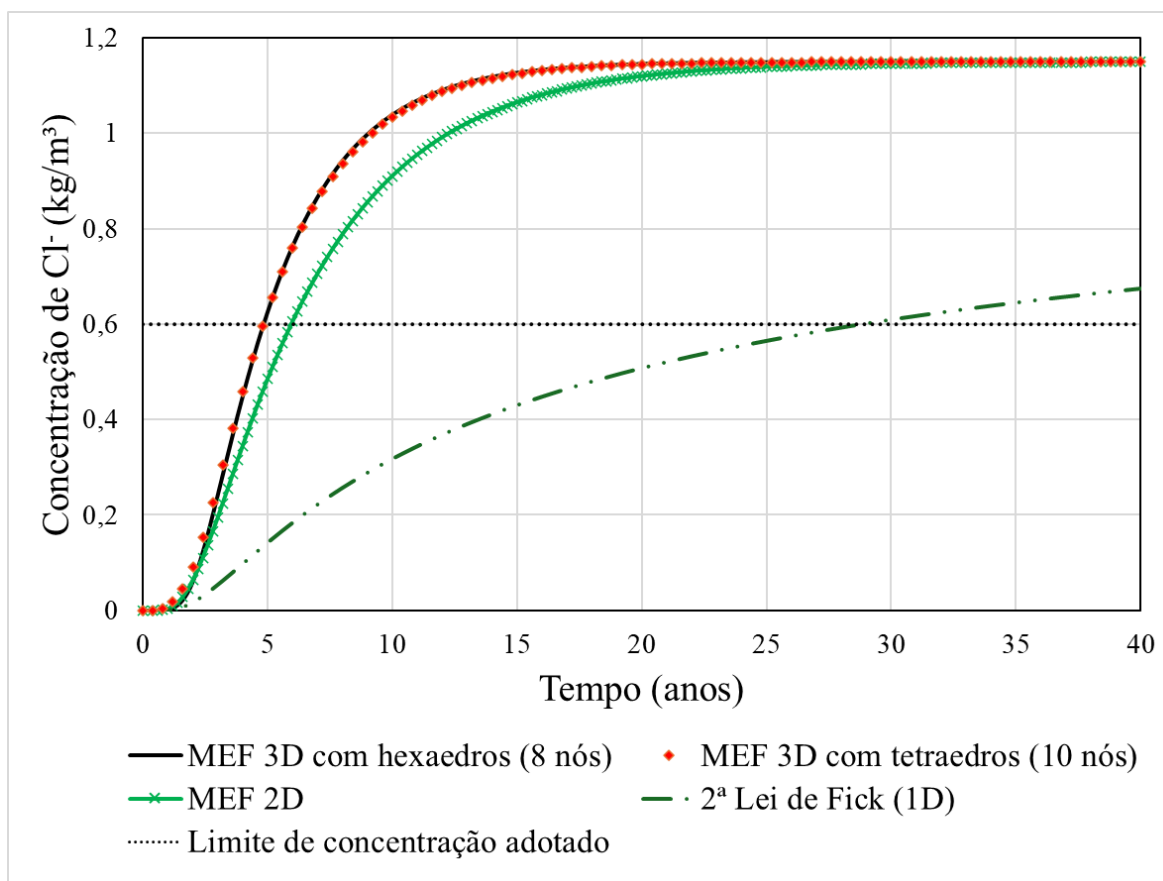
Para a mensuração da vida útil de projeto, conforme o critério de durabilidade adotado, considerou-se o valor de concentração limite de $0,60 \text{ kg/m}^3$. Este valor equivale a limitação da norma brasileira de 0,15% sobre a massa de cimento, para uma estrutura de concreto armado exposta em situação de serviço e com consumo de cimento de 400 kg/m^3 [20].

Os resultados foram comparados com outra simulação utilizando o próprio modelo proposto, com a seguinte alteração: foi analisado o caso com aplicação da concentração superficial somente em duas das faces originalmente carregadas, simulando assim um fluxo bidimensional (MEF 2D). Avalia-se também os resultados com outros dois modelos de referência: o primeiro consiste em outro modelo tridimensional, aplicado à análise multifísica da difusão transiente com dano, porém com utilização de elementos finitos

tetraédricos [12]; o segundo é um modelo analítico baseado na 2ª lei de Fick, ou seja, considerando o fluxo unidirecional [41].

A figura 4 a seguir exibe os resultados da variação da concentração de íons de cloreto ao longo do tempo na extremidade da linha diagonal do cubo. O ponto de interseção entre cada curva com a linha horizontal pontilhada define o valor da vida útil de projeto para cada caso.

Figura 4 – Resultados da concentração de íons cloreto ao longo do tempo



Fonte: Autores (2024).

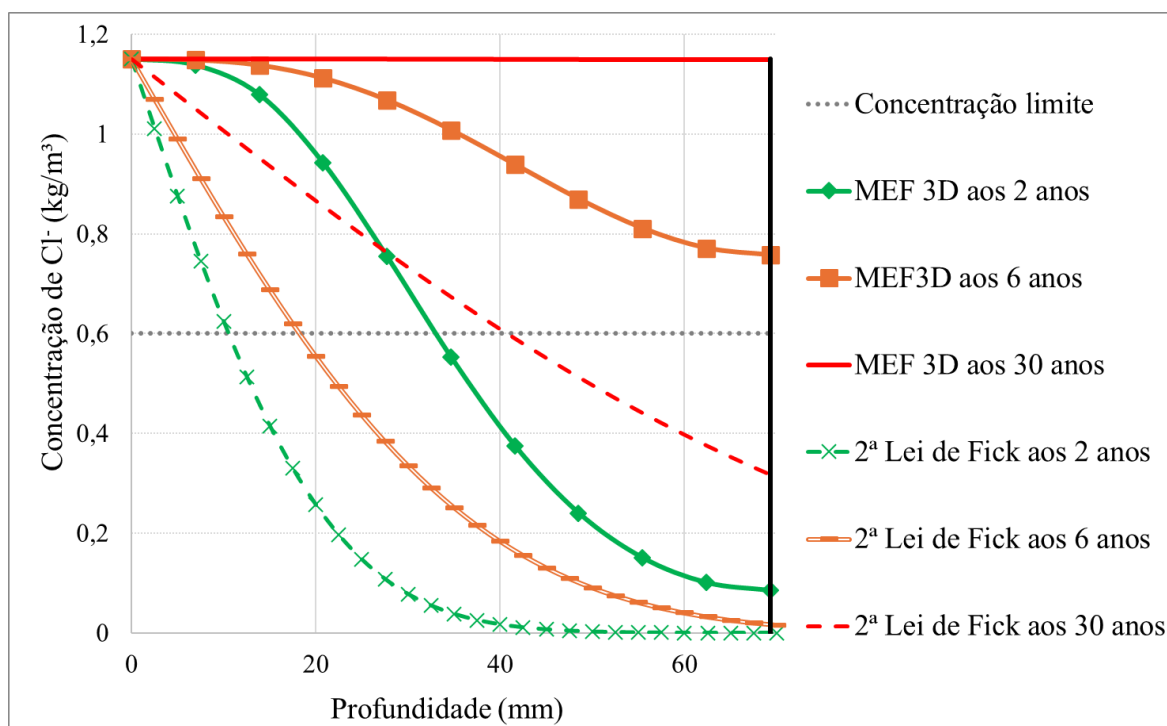
Os modelos 3D resultaram em uma vida útil de aproximadamente 5 anos, enquanto o modelo 2D resultou em uma vida útil de aproximadamente 6 anos. O modelo analítico (unidirecional) resultou em uma vida útil muito mais conservadora (o que era esperado), chegando a quase 30 anos.

Os resultados do presente trabalho tiveram diferenças insignificantes quando comparados ao modelo 3D de referência, que utilizou 45619 nós em uma malha de elementos finitos tetraédricos com aproximação quadrática. Isso corresponde a um sistema de equações com mais de 44 mil graus de liberdade a mais do que o modelo aqui proposto, o que tem impacto no custo computacional. Porém, a malha quadrática mencionada foi aplicada para a consideração de um modelo multifísico, com a inclusão de análise mecânica não linear, o que justifica o uso de uma malha muito superior [12]. A comparação visa demonstrar

que, especificamente para a análise da difusão transiente e para a quantificação da vida útil, o uso de uma malha menor com aproximação linear se mostrou suficiente e eficiente.

Analisou-se também a variação da concentração ao longo da linha diagonal interna para os intervalos de 2, 6 e 30 anos. Os resultados do modelo 3D foram comparados com a aplicação da solução analítica, e estão apresentados na figura 5 a seguir.

Figura 5 – Resultados da concentração de íons cloreto ao longo da profundidade



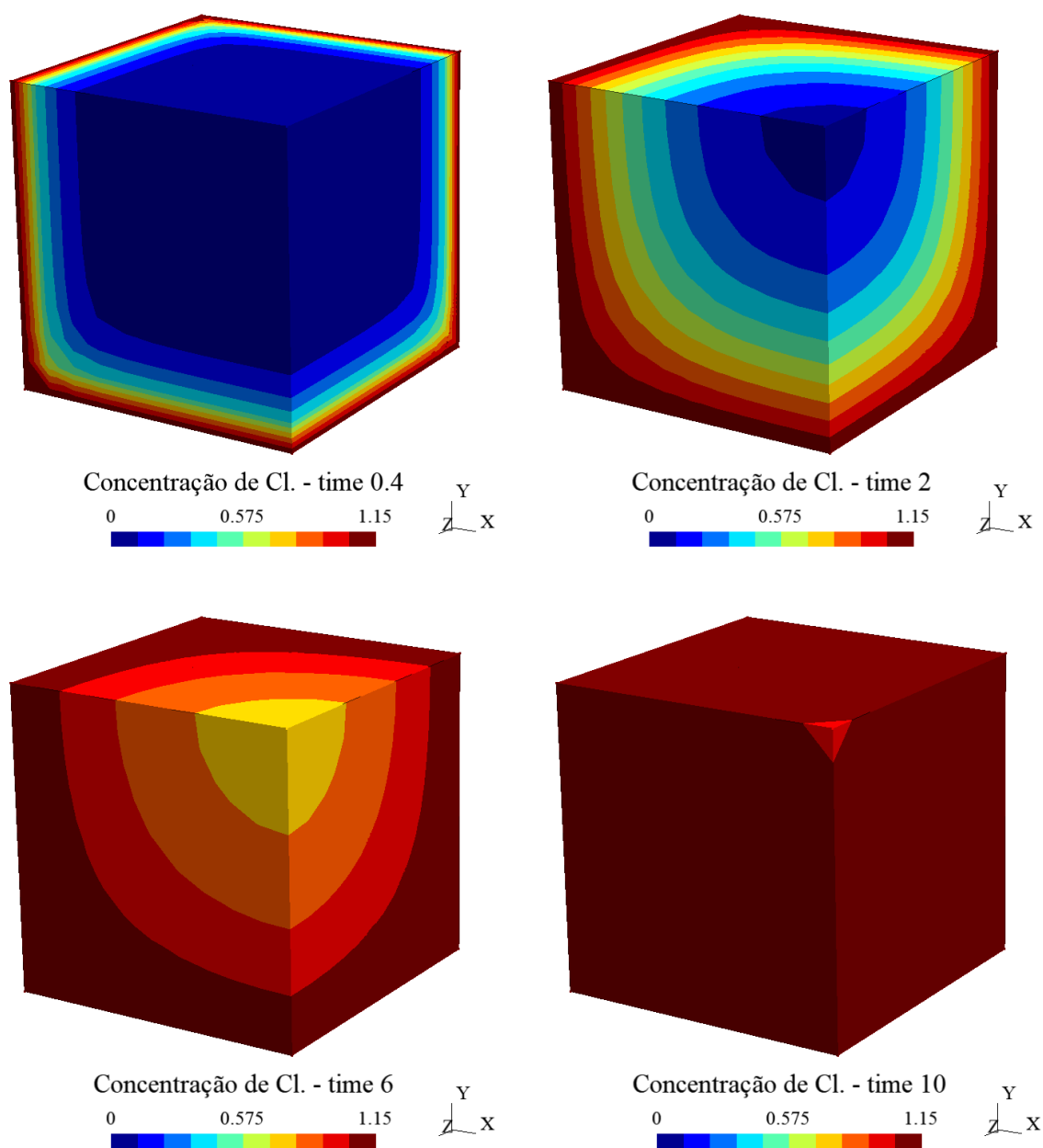
Fonte: Autores (2024).

Avaliando-se as concentrações ao longo da profundidade, é possível notar o quão conservador é o modelo analítico. É possível perceber também a importância do valor do cobrimento das armaduras para a quantificação da vida útil estrutural.

A figura 6 a seguir ilustra resultados de concentração para quatro instantes ao longo do processo iterativo, incluindo o primeiro passo de tempo (0,4 anos), 2, 6 e 10 anos, sendo o vértice frontal das imagens correspondente a posição da armadura. Nota-se um comportamento, conforme esperado, com a concentração crescente, à medida que a difusão se dá com o fluxo na direção do ponto mais interno. Após 10 anos, praticamente todo o volume já se encontra em equilíbrio (saturação) com o meio externo.

A simulação apresentada reforça a relevância do modelo numérico na análise da durabilidade estrutural de estruturas de concreto. Aqui, procurou-se evidenciar as limitações do modelo analítico tradicional, que, apesar de consolidado, é adequado apenas para fluxos unidimensionais, sendo menos representativo em situações de múltiplas direções de transporte. O exemplo demonstra como fluxos multidirecionais podem afetar as previsões de vida útil. Ainda que se considere outros critérios, como a fase posterior, de propagação da corrosão, essa conclusão não seria alterada.

Figura 6 – Resultados visuais da variação de concentração de íons cloreto no cubo de concreto



Fonte: Autores (2024).

Neste exemplo não foram considerados diversos aspectos que podem influenciar a mecânica difusiva, como a temperatura e a umidade. Entender essas interações é crucial para um estudo mais detalhado da durabilidade do concreto. Por esse motivo, nos próximos itens, serão abordadas outras simulações, para o estudo de fenômenos também relacionados à durabilidade estrutural.

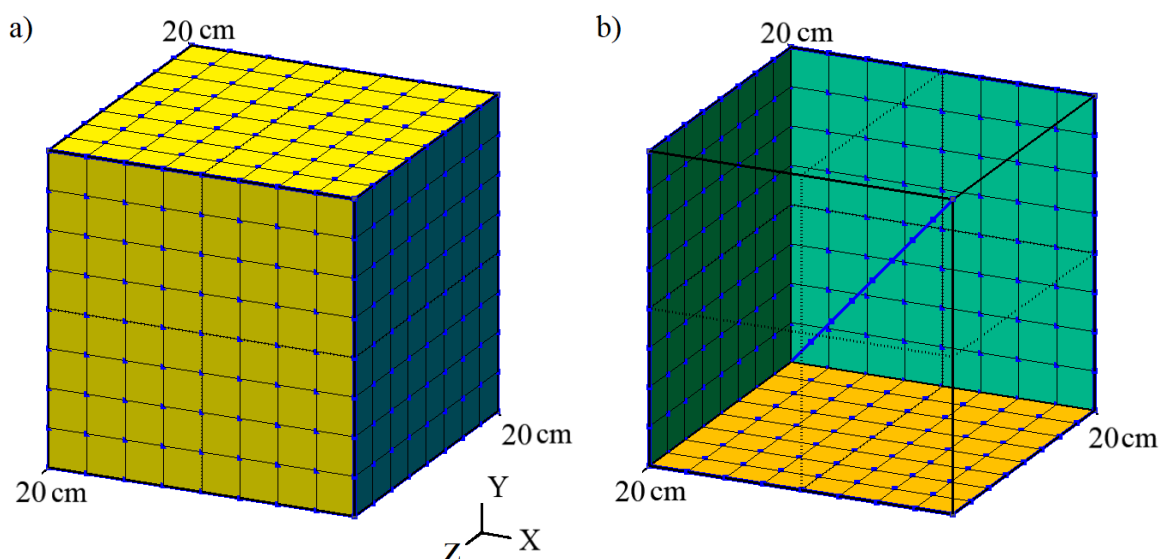
Simulação da variação da temperatura interna no concreto

Para avaliar os efeitos da variação da temperatura ambiente no equilíbrio térmico interno de estruturas de concreto, foi realizada uma simulação utilizando o modelo numérico de difusão aqui descrito. Para este estudo, considera-se um cubo com arestas de 20 cm, representando a extremidade de uma seção transversal de um elemento de concreto armado, similar ao canto de uma peça estrutural, como uma viga, ou uma laje qualquer. A simulação tem como objetivo observar a propagação térmica até 20 cm de profundidade, avaliando-se camadas muito além daquelas onde normalmente se encontram as armaduras principais em estruturas convencionais.

Foi imposta uma condição de temperatura superficial variável ao longo do tempo em três faces adjacentes do cubo que compartilham um vértice. A variação da temperatura interna do material foi monitorada ao longo de uma linha diagonal inclinada no interior do modelo.

A figura 7(a) ilustra o modelo considerado nesta simulação, e a figura 7(b) mostra as faces carregadas, bem como a linha diagonal mencionada. Após uma análise de convergência e, considerando os pontos de interesse, adotou-se para o modelo numérico uma malha com 512 elementos finitos hexaédricos com aproximação linear, totalizando 729 graus de liberdade.

Figura 7 – Modelo utilizado na simulação de variação de temperatura



Fonte: Autores (2024).

É necessário definir uma lei de variação para a temperatura ambiente ao longo do tempo. Nesta simulação, optou-se por utilizar uma função periódica cosseno, que descreve adequadamente o comportamento térmico diário típico de regiões de clima quente e tropical. Foi adotada uma variação em torno de uma temperatura média de 28°C , com amplitude de $\pm 8^{\circ}\text{C}$ e com período de 24 horas, sendo a máxima temperatura atingida às 13 horas. Essa situação é similar ao clima encontrado em regiões costeiras do Brasil, como por exemplo no litoral das regiões nordeste e sudeste do país [31]. A simulação considerou um intervalo total de 48 horas dividido em 96 passos de tempo, para melhor observação.

Admite-se uma relação linear entre a temperatura do ar e a temperatura da superfície do concreto. Considerando-se algumas das recomendações práticas encontradas na bibliografia [32, 42], admitiu-se que a superfície do concreto exposta ao ambiente pode sofrer acréscimos durante a fase de aumento da temperatura do ar, sendo este acréscimo proporcional ao intervalo de aquecimento (trecho crescente da função), até o limite máximo de 10%. Considera-se, assim, os efeitos da radiação solar durante o período diurno de maneira simplificada. Para os intervalos em que a temperatura do ar é menor, a temperatura da superfície se iguala à primeira, assumindo-se assim que, em condições normais, as magnitudes das temperaturas mínimas no Brasil não são suficientes para que se considere resfriamentos maiores do que aqueles do próprio ambiente. Dessa forma, a variação de temperatura de superfície $T_{sup.}$ fica definida pela Eq. 29, em °C, com o tempo t sendo dado em horas.

$$T_{sup.}(t) = \left\{ 28 + 8 \cdot \cos \left[\frac{\pi}{12} (t - 13) \right] \right\} \cdot A(t) \quad (29)$$

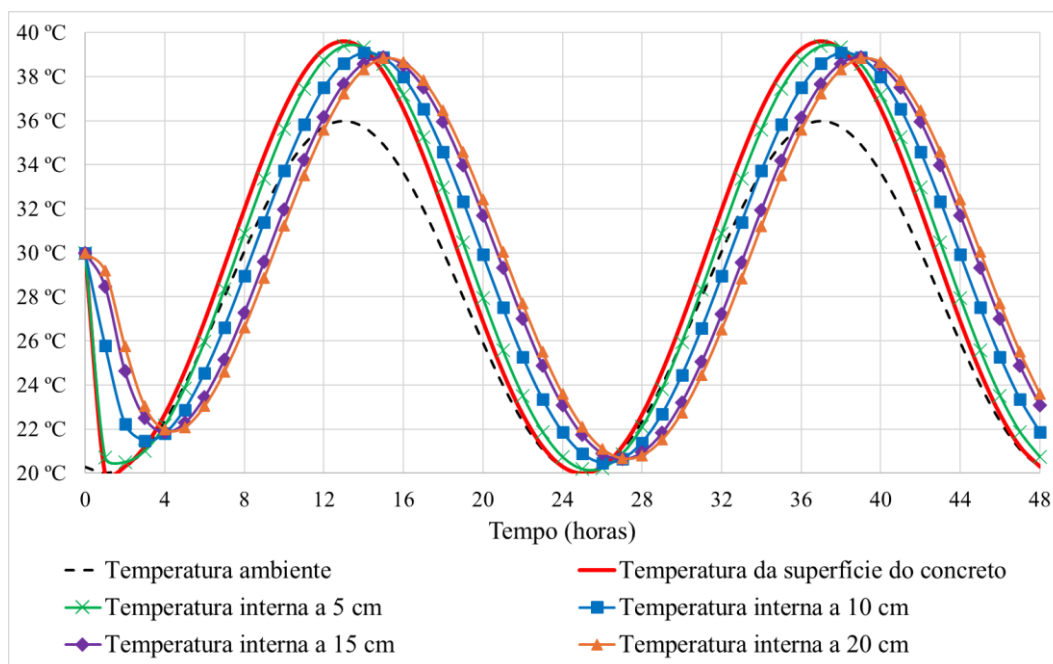
Nesta expressão, o trecho entre chaves $\{ \}$ corresponde à função da variação da temperatura ambiente, e a variável $A(t)$ representa o fator de amplificação, da metodologia simplificada para a consideração da radiação solar, sendo esta última dada conforme a Eq. 30.

$$A(t) = 1 + 0,10 \cdot \frac{\left\{ \cos \left[\frac{\pi}{12} (t-13) \right] + 1 \right\}}{2} \quad (30)$$

Adota-se intencionalmente para o início do processo (em que t é igual a 0) uma temperatura inicial interna diferente da temperatura do ar naquele instante, com valor de 30°C. O coeficiente da difusão térmica utilizado foi de 40 cm²/h, que é um valor típico para concretos estruturais com agregados de granito [1].

O resultado da simulação é apresentado na figura 8, onde foram comparadas as variações de temperaturas internas para diferentes profundidades e da temperatura ambiente.

Figura 8 – Resultado para a simulação de variação da temperatura



Fonte: Autores (2024).

Nota-se que, dentro da faixa analisada, mesmo as camadas mais profundas do concreto entram em equilíbrio com a temperatura de superfície rapidamente. Observa-se para as camadas até 20 cm uma defasagem máxima de aproximadamente 2 horas em relação a temperatura da superfície. Para as camadas menos profundas essa defasagem é menor, o que fica claro ao se analisar o início da simulação.

Considerando estes resultados, é possível afirmar que, para as camadas de cobertura das armaduras, a hipótese de que a temperatura interna varia linearmente conforme a temperatura ambiente é realista. Essa conclusão está alinhada às observações feitas por outros pesquisadores com simulações semelhantes, mas que consideraram modelos térmicos mais elaborados, com fluxos convectivos e de radiação [29, 43].

O modelo utilizado nesta simulação considerou de forma simplificada a transferência de calor por radiação solar, tratada como uma amplificação da temperatura do ar. Essa abordagem pode ser vista como a aplicação de um valor médio, desconsiderando-se eventuais temperaturas extremas, que têm baixa frequência de ocorrência para as escalas de tempo da ordem de anos ou décadas — escalas essas de interesse nas avaliações da vida útil das construções.

Simulação da variação da umidade interna no concreto

Com o objetivo de estudar também os efeitos da variação da umidade ambiente no concreto, foi realizada uma simulação, análoga a anterior, desta vez considerando gradientes de umidade relativa do ar. Admite-se, como principal hipótese, que o fluxo de umidade está relacionado à difusão do vapor de água, sendo desconsiderados nesta simulação outros processos, como as movimentações de água líquida por capilaridade.

Esta análise foi realizada utilizando-se o modelo numérico anteriormente apresentado, com o cubo de 20 cm de aresta, sendo aplicado um teor de umidade relativa (em %) variando com o tempo em 3 faces que possuem um vértice em comum. O acompanhamento das variações da umidade do material será feito ao longo da linha diagonal interna do cubo. A geometria e a malha do modelo são, portanto, as mesmas que foram ilustradas na figura 7.

Para a variação do teor de umidade relativo do ar no tempo aplicou-se uma função periódica cosseno, considerando-se dados obtidos para um clima típico de cidades da região sudeste do país [31]. Assim, foi adotada uma variação de $\pm 18\%$ em torno de uma umidade média de 67% para ciclos com período diário, e com o teor de umidade máximo às 2 horas da manhã. A umidade na superfície do concreto $U_{sup.}$ é admitida igual a umidade do ar, sendo, portanto, dada conforme a Eq. 31, com o tempo t em horas.

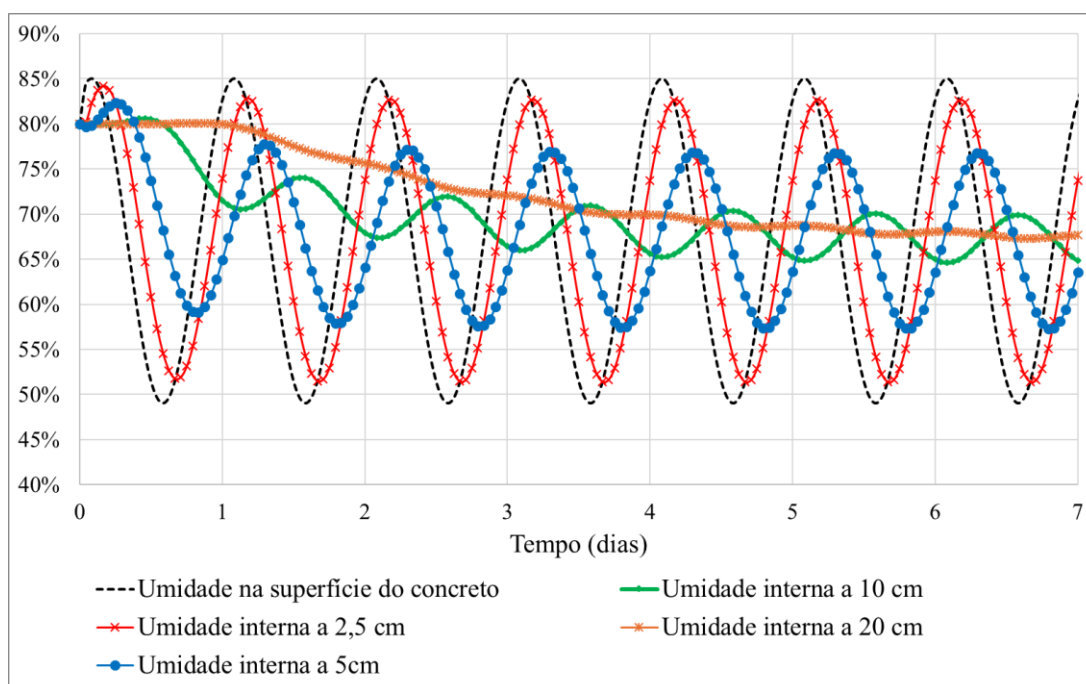
$$U_{sup.}(t) = 0,67 + 0,18 \times \cos\left[\frac{\pi}{12}(t - 2)\right] \quad (31)$$

O concreto foi admitido inicialmente (em t igual a 0) com umidade relativa interna de 80%. Para o coeficiente de difusão da umidade foram considerados resultados de ensaios laboratoriais conduzidos por um trabalho de referência, no qual foram examinados corpos de prova de concretos com diferentes misturas, mensurando a difusividade para fatores água/cimento variando de 0,43 a 0,50 [38]. Com base nesses dados, optou-se realizar duas simulações, utilizando-se coeficientes de difusão de $3,7 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ e $8,3 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$.

A figura 9 a seguir apresenta os resultados da simulação para o maior valor de coeficiente de difusão, comparando-se as diferentes profundidades. Observa-se que as camadas superficiais, até 2,5 cm de profundidade, atingem o equilíbrio com a superfície externa de forma mais rápida, devido à sua proximidade com o ambiente externo. Já as camadas intermediárias, próximas aos 5 cm de profundidade, exibem um comportamento de transição. Embora não alcancem o equilíbrio tão rapidamente quanto as camadas superficiais, também não demoram tanto quanto as camadas mais profundas. Estas apresentam uma taxa de difusão moderada, indicando uma resposta progressiva ao ambiente externo, levando algumas horas adicionais para se estabilizarem, no cenário considerado.

As camadas mais internas demoram significativamente mais tempo para atingir o equilíbrio. A profundidade de 10 cm, por exemplo, levou cerca de 2 dias para alcançar a estabilidade. Já a camada a 20 cm de profundidade só alcançou o equilíbrio com o meio externo após 7 dias, confirmando que a difusão de umidade ocorre mais lentamente nas regiões mais profundas do concreto, mas ainda em uma escala de tempo da ordem de dias.

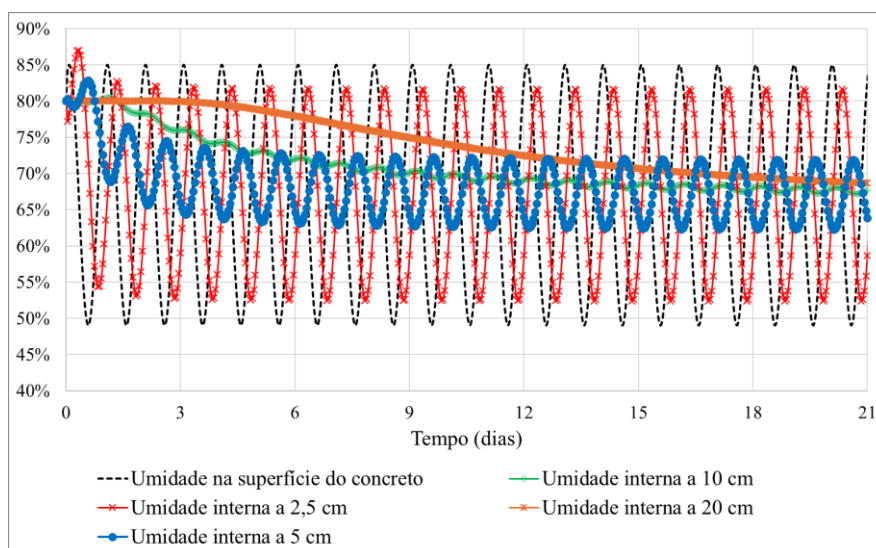
Figura 9 – Resultado da simulação de variação da umidade para $D_h = 3,7 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$



Fonte: Autores (2024).

A Figura 10 apresenta os resultados da segunda simulação, realizada para o menor valor de coeficiente de difusão considerado. Neste caso, foi necessário prolongar o tempo de análise, sendo apresentados valores observados em um intervalo de 21 dias.

Figura 10 – Resultado da simulação de variação da umidade para $D_h = 8,3 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$



Fonte: Autores (2024).

Com a redução da difusividade, o tempo necessário para que o interior do concreto atinja o equilíbrio por difusão aumenta significativamente. Essa menor capacidade de transporte

de umidade retarda a uniformização das condições internas com as externas, especialmente em camadas mais profundas.

No caso da camada situada a 20 cm de profundidade, o tempo necessário para alcançar o equilíbrio aumentou para aproximadamente 21 dias, representando um aumento de 200% em relação à simulação com o maior coeficiente de difusão. Esse aumento expressivo ilustra como uma variação na difusividade pode impactar drasticamente a velocidade de transporte de umidade no concreto, especialmente na parte mais interior das peças estruturais.

Camadas mais próximas à superfície, como as de 5 cm e 10 cm de profundidade, também mostraram um atraso no processo de equilíbrio, embora em menor magnitude, refletindo o mesmo comportamento de transição observado anteriormente, conforme a profundidade aumenta. As camadas até 2,5 cm, embora tenham também levado mais tempo para o equilíbrio, mantiveram padrão semelhante ao observado na primeira simulação, confirmando assim a maior suscetibilidade destas às variações externas.

Os comportamentos observados evidenciam a dificuldade de troca de umidade entre as regiões mais internas do concreto e o ambiente externo, destacando-se as variações que ocorrem em cada nível de profundidade nas estruturas. Porém, no contexto da avaliação de durabilidade, especialmente com base no critério de despassivação das armaduras, o foco recai sobre as camadas referentes ao cobrimento, que geralmente estão situadas até o máximo de 5 cm de profundidade, considerando estruturas convencionais no Brasil. Nessa faixa, o comportamento de difusão da umidade se deu de maneira mais rápida. Essa sensibilidade maior é crucial, pois afeta diretamente a proteção das armaduras contra a corrosão.

Conclusões e considerações finais

O modelo proposto para a análise da difusão transiente em sólidos isotrópicos mostrou-se eficiente e aplicável a diferentes problemas de engenharia. Entre esses problemas, avaliou-se a difusão de íons de cloreto, a condutividade térmica e a difusão de umidade, particularmente para o caso do material concreto. Diferente da solução analítica, o modelo numérico fundamentado no MEF permite a consideração de fluxos multidirecionais, tornando-se mais representativo para problemas difusivos em estruturas com múltiplas superfícies submetidas aos gradientes potenciais.

A utilização de elementos finitos hexaédricos com aproximação linear provou ser eficaz. A hipótese de comportamento em regime linear é considerada adequada para análises de longo prazo, nas quais efeitos médios oferecem precisão suficiente para uma quantificação da durabilidade estrutural. Essa abordagem é particularmente importante devido ao custo computacional para o uso de modelos numéricos mais refinados nesse tipo de análise, e considerando ainda as dificuldades em obter dados experimentais no longo prazo, dada a natureza dos fenômenos envolvidos na deterioração do concreto.

No que diz respeito ao modelo de vida útil, que se baseia na fase de iniciação da corrosão das armaduras, entende-se que esse período é mais adequado para o projeto estrutural do que a fase de propagação da corrosão. Isso se deve ao fato de que os dimensionamentos em projetos estruturais não consideram a corrosão das armaduras.

Quanto a consideração apenas do mecanismo de transporte por difusão, tanto na simulação de ataque de cloretos quanto na simulação da umidade interna, assume-se que a estrutura permanece em condições adequadas de serviço, sem a ocorrência de danos ou fissuras, concentrando assim as análises na resposta do concreto íntegro em termos da sua durabilidade. Admite-se que, nestas condições, a difusão torna-se o fenômeno predominante, sendo praticamente exclusiva, conforme apontam alguns estudos.

De maneira similar, a análise da variação de temperatura interna do concreto com a aplicação de um modelo simplificado, mostra-se apropriada para estudos de durabilidade. A simplificação adotada é adequada para análises de longo prazo, onde se busca capturar tendências médias de comportamento térmico, considerando-se também a facilidade de integração deste modelo às simulações de previsão climatológicas futuras mais usuais.

As simulações demonstram que assumir temperaturas e umidades do ambiente como valores atuantes nas camadas mais superficiais do concreto ao longo de sua vida útil não conduz a perdas relevantes de representatividade para estes fenômenos.

Por fim, espera-se que esses resultados contribuam para o desenvolvimento de outros estudos que ampliem a compreensão sobre os fenômenos que impactam a durabilidade das estruturas de concreto. Espera-se também que os resultados possam auxiliar no desenvolvimento de metodologias práticas, porém eficientes, para que futuramente os códigos normativos consigam incorporar especificações mais objetivas, visando a melhoria no desenvolvimento de projetos estruturais, especialmente em termos de durabilidade.

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Amazonas (FAPEAM) pelo apoio financeiro, por meio do Edital N° 016/2023 PRODOC/FAPEAM.

Referências

1. P. K. Mehta; P. J. M. Monteiro, *Concrete: microstructure, properties, and materials*, 4th ed., McGraw-Hill Education, New York, 2014.
2. G. H. Koch *et al.*, *International measures of prevention, application, and economics of corrosion technologies study*, E. Bowman Ed., NACE International, Houston, 2016. <http://impact.nace.org/executive-summary.aspx>.
3. C. B. L. Oliveira; M. Greco; T. N. Bittencourt. Análise do inventário das pontes federais do Brasil. *Revista IBRACON de Estruturas e Materiais* 2019, 12, 1. <https://doi.org/10.1590/s1983-41952019000100002>.
4. A. V. Saetta; R. V. Scotta; R. V. Vitaliani. Analysis of chloride diffusion into partially saturated concrete. *ACI Materials Journal* 1993, 90, 441. <https://doi.org/10.14359/3874>.
5. R. A. de Medeiros-Junior; M. G. de Lima; M. H. F. de Medeiros. Service life of concrete structures considering the effects of temperature and relative humidity on chloride transport. *Environ. Dev. Sustain.* 2015, 17, 1103. <https://doi.org/10.1007/s10668-014-9592-z>.
6. G. P. Pellizzer; E. D. Leonel; C. G. Nogueira. Numerical approach about the effect of the corrosion on the mechanical capacity of the reinforced concrete beams considering

material nonlinear models. *Revista IBRACON de Estruturas e Materiais* 2018, 11, 26. <https://doi.org/10.1590/s1983-41952018000100003>.

7. G. B. Wally; F. C. Magalhães; L. C. P. Silva Filho. From prescriptive to performance-based: An overview of international trends in specifying durable concretes. *Journal of Building Engineering* 2022, 52, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2022.104359>

8. J. Sun; Z. Jin; H. Chang, W. Zhang. A review of chloride transport in concrete exposed to the marine atmosphere zone environment: experiments and numerical models. *Journal of Building Engineering* 2024, 84, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2024.108591>

9. V. Baroghel-Bouny. Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials: part I: essential tool for analysis of hygral behaviour and its relation to pore structure. *Cement and Concrete Research* 2007, 37, 414. . <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2006.11.019>.

10. P. Moonen; M. Griffa. Modelling the response of concrete to moisture in *Understanding the tensile properties of concrete*, Woodhead Publishing, Cambridge, 2024; 89. <https://doi.org/10.1016/B978-0-443-15593-2.00012-9>.

11. G. P. Pellizzer, E. D. Leonel. Determinação da espessura do cobrimento de estruturas em concreto sujeitas ao ingresso de cloretos pela técnica RBDO. *Revista IBRACON de Estruturas e Materiais*, 2020, 13, 1. <https://doi.org/10.1590/S1983-41952020000500002>.

12. R. C. S. Silva, Tese de doutorado, Universidade de São Paulo, 2023.

13. R. W. Lewis; P. Nithiarasu; K. N. Seetharamu, *Fundamentals of the finite element method for heat and fluid flow*, 1st ed., John Wiley & Sons, Chichester, 2004.

14. A. Fick. Ueber diffusion. *Annalen der Physik* 1855, 170, 59. <https://doi.org/10.1002/andp.18551700105>.

15. A. M. Neville, *Propriedades do Concreto*, 5 ed., Bookman, Porto Alegre, 2015.

16. K. Tuutti, Ph.D. Thesis, Swedish Cement and Concrete Research Institute, Stockholm, 1982.

17. M. H. F. Medeiros; J. J. O. Andrade; P. Helene; Durabilidade e vida útil das estruturas de concreto in *Concreto: ciência e tecnologia*, Geraldo Isaia, Org; Ibracon, São Paulo, 2011; v. 1, 773, 1 ed.

18. J. P. Broomfield, *Corrosion of steel in concrete: understanding, investigation and repair*, 3rd ed., CRC Press, Abingdon, 2023.

19. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR 6118: projeto de estruturas de concreto-procedimento - Versão corrigida 2*, Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Normas Técnicas, 2024.

20. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR 12655: Concreto de cimento Portland. Preparo, controle e recebimento-procedimento*, Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Normas Técnicas, 2022.

21. E. Bastidas-Arteaga *et al.* Influence of weather and global warming in chloride ingress into concrete: a stochastic approach. *Structural Safety* 2010, 32, 238. <https://doi.org/10.1016/j.strusafe.2010.03.002>.

22. M. G. Stewart, D. V. Rosowsky. Structural safety and serviceability of concrete bridges subject to corrosion. *ASCE Journal of Infrastructure Systems* 1998, 4, 146. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)1076-0342\(1998\)4:4\(146\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)1076-0342(1998)4:4(146)).

23. M. Shafikhani, S. E. Chidiac. Quantification of concrete chloride diffusion coefficient: a critical review. *Cement and Concrete Composites* 2019, 99, 225. <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2019.03.011>.

24. V. de B. Souza, Tese de doutorado, Universidade de São Paulo, 2021.

25. P. R. R. Ferreira, Tese de doutorado, Universidade Federal da Paraíba, 2022.

26. S. Borah; A. Al-Habaibeh; R. Kromanis. The effect of temperature variation on bridges: a literature review in *Energy and Sustainable Futures*, I. Mporas, Ed.; Springer, Cham, 2021; 207. https://doi.org/10.1007/978-3-030-63916-7_26.
27. T. L. Bergman; A. S. Lavine, *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, 8th ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2017.
28. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR 15200: projeto de estruturas de concreto em situação de incêndio-procedimento*, Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Normas Técnicas, 2024.
29. A. Saetta; R. Scotta; R. Vitaliani. *Journal of Structural Engineering*, vol. 121, no. 3, pp. 446–457, March 1995. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9445\(1995\)121:3\(446\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9445(1995)121:3(446)).
30. M. Solaimanian; T. W. Kennedy. Predicting maximum pavement surface temperature using maximum air temperature and hourly solar radiation. *Transportation Research Record* 1993, 1417, 1.
31. Instituto Nacional de Meteorologia. 2024. <https://portal.inmet.gov.br/>.
32. S. R. Abid *et al.* Temperatures and gradients in concrete bridges: experimental, finite element analysis and design. *Structures* 2022, 37, 960. <https://doi.org/10.1016/j.istruc.2022.01.070>.
33. Z. Zhang; M. Thiery; V. Baroghel-Bouny. Investigation of moisture transport properties of cementitious materials. *Cement and Concrete Research* 2016, 89, 257. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cemconres.2016.08.013>.
34. F. Zhou *et al.* Moisture diffusion coefficient of concrete under different conditions. *Buildings* 2023, 13, 2421. <https://doi.org/10.3390/buildings13102421>.
35. J. Arfvidsson; G. Hedenblad. A new model to calculate the drying of concrete in *Proceedings of 10th Conference of the International Building Performance Simulation Association, Beijing, 2007, 1792, Vol. 1-3*.
36. H. Jin *et al.* An experimental study on the influence of continuous ambient humidity conditions on relative humidity changes, chloride diffusion and microstructure in concrete. *Journal of Building Engineering* 2022, 59, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2022.105112>.
37. W. Ali; G. Urgessa. Computational model for internal relative humidity distributions in concrete. *Journal of Computational Engineering* 2014, 2014, 1. <http://dx.doi.org/10.1155/2014/539850>.
38. M. N. Balakrishna *et al.* Evaluation of chloride absorption in preconditioned concrete cubes. *Journal of Civil Engineering* 2018, 46, 1.
39. G. H. Galbraith, Ph.D. Thesis, University of Strathclyde, Glasgow, 1992.
40. M. G. Luiz, Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2005.
41. J. Crank, *The Mathematics of Diffusion*, Oxford University Press, Bristol, 1979.
42. A. R. Moreira; R. E. Catai; W. Mazer. Monitoramento de temperatura em pontes usando termografia: estudo de caso. *Revista Espacios* 2023, 44, 4. <https://doi.org/10.48082/espacios-a23v44n04>.
43. S. J. H. da Silva, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2003.

Seção 3

Geotécnica



CAPÍTULO 4

GEOSSINTÉTICOS EM OBRAS DE ENGENHARIA: BENEFÍCIOS, APLICAÇÕES E DESAFIOS

Ana Carolina Gonzaga Pires^{1*}, Jefferson Lins da Silva²

1 – Departamento de Geotecnia (SGS), Escola de Engenharia de São Carlos (EESC), Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, SP, Brasil

*carolina.gonzaga20@gmail.com

2 – Departamento de Geotecnia (SGS), Escola de Engenharia de São Carlos (EESC), Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, SP, Brasil

Resumo – A incorporação de geossintéticos em obras de engenharia oferece diversos benefícios, como elementos de reforço, proteção, filtração, drenagem, separação e barreira. Na geotecnia, esses materiais reforçam taludes e aterros, prevenindo deslizamentos e aumentando a estabilidade dos solos. Em obras civis, sua aplicação em estradas e ferrovias assegura a distribuição uniforme das tensões, prolongando a vida útil das infraestruturas. Na mineração, são essenciais para estabilizar pilhas de rejeitos e conter resíduos. Além de serem economicamente vantajosos, os geossintéticos reduzem a necessidade de materiais convencionais e os custos de manutenção. Ambientalmente, promovem a sustentabilidade ao minimizar impactos das obras. Entre os geossintéticos, destacam-se geotêxteis e geogrelhas cada um com propriedades específicas para diferentes necessidades de engenharia. Este capítulo revisa as pesquisas sobre as vantagens, desafios e soluções encontradas na literatura. Estudos recentes mostram que o uso de geossintéticos pode reduzir significativamente os custos de construção e manutenção, além de melhorar o desempenho das estruturas. Além disso, também são discutidos desafios, como a durabilidade dos materiais em diferentes condições ambientais e a necessidade de recomendações normativas específicas para garantir a eficácia das aplicações. A análise das pesquisas atuais oferece uma visão atualizada sobre como esses materiais contribuem para soluções mais seguras e sustentáveis.

Palavras-chave: *Geossintéticos. Engenharia. Reforço. Sustentabilidade. Durabilidade.*

Introdução

Os geossintéticos são materiais poliméricos amplamente utilizados na construção civil, com destaque para projetos de engenharia geotécnica, hidráulica, de pavimentação e ambientais. Esses materiais, que incluem geotêxteis, geomembranas, geogrelhas, entre outros, têm a função de reforçar, separar, drenar, proteger e impermeabilizar o solo, proporcionando soluções técnicas eficientes e econômicas para diversas situações de projeto. A utilização de geossintéticos tem crescido nas últimas décadas devido à sua versatilidade e desempenho, contribuindo para a durabilidade e segurança das obras de engenharia [1].

Dentre os geossintéticos, os geotêxteis e geogrelhas são os materiais mais empregados na engenharia em virtude de suas amplas aplicações. Por outro lado, as geomembranas e os geocompostos estão presentes em obras hidráulicas e ambientais.

Os geotêxteis são materiais permeáveis feitos de fibras sintéticas que podem ser tecidos ou não-tecidos. Eles são usados principalmente para separação, filtração e drenagem em obras como estradas, ferrovias e sistemas de drenagem. Os geotêxteis têm a função de separar diferentes camadas de solo, evitando que elas se misturem, além de permitir a passagem de água enquanto retêm partículas de solo [1].

As geogrelhas consistem em estruturas abertas e reticuladas que são usadas principalmente para reforço do solo. Elas são eficientes em aumentar a resistência do solo em obras de contenção e estabilização de taludes. O uso de geogrelhas permite a construção de estruturas de solo reforçado mais econômicas e com menor impacto ambiental em comparação aos métodos tradicionais [2].

As geomembranas, por sua vez, são mantas impermeáveis usadas para evitar a passagem de líquidos e gases. Elas são aplicadas em barragens, aterros sanitários e reservatórios de água. As geomembranas são essenciais para evitar contaminação ambiental, principalmente em aterros, onde é necessário prevenir a infiltração de resíduos no solo e nos lençóis freáticos [1].

Por fim, os geocompostos são combinações de diferentes tipos de geossintéticos, como geotêxteis e geomembranas, que unem as propriedades de ambos para oferecer funcionalidades múltiplas em projetos complexos. Por exemplo, um geocomposto de drenagem pode incorporar funções de filtração, drenagem e proteção [1].

Aplicações em obras de engenharia

Aplicações em rodovias e ferrovias

O uso de geossintéticos em rodovias e ferrovias é uma prática bastante difundida, especialmente para melhorar a capacidade de suporte do solo e aumentar a durabilidade das vias. Geogrelhas são frequentemente utilizados em obras de pavimentação para criar uma camada de reforço que distribui as cargas uniformemente, evitando a formação de sulcos e deformações na superfície.

Em solos moles ou de baixa capacidade de suporte, os geotêxteis e as geogrelhas são utilizados para estabilizar a fundação. Eles funcionam como uma estrutura de reforço, aumentando a resistência ao cisalhamento do solo e melhorando a distribuição das cargas. Isso possibilita a construção de estradas mais estáveis em áreas onde, de outra forma, seria necessário remover e substituir grandes volumes de solo.

Em estradas pavimentadas, os geotêxteis são colocados entre as camadas de base e subleito, evitando que o material granular (brita) se misture com o solo mais fino e menos estável abaixo. Isso é particularmente útil em solos de baixa capacidade de suporte, onde o tráfego pode causar a migração de partículas finas para a camada da base, resultando em recalques e deformações.

Os geossintéticos oferecem alternativas sustentáveis que melhoram o desempenho, a durabilidade e a relação custo-benefício de pavimentos rodoviários, ferrovias e aeródromos. Embora os mesmos tipos de geossintéticos possam ser utilizados na construção dessas diferentes infraestruturas de transporte, é essencial adotar uma

abordagem adequada para combinar as propriedades dos solos ou materiais agregados não ligados com as características dos geossintéticos, a fim de garantir uma estabilização mecânica eficaz [6].

Aplicações em aterros sanitários

As geomembranas são, talvez, o tipo mais conhecido de geossintético quando se trata de proteção ambiental. A principal função desse geossintético é criar uma barreira impermeável que impede a passagem de líquidos e gases, sendo amplamente utilizadas em aterros sanitários, onde evitam a contaminação do solo e da água subterrânea por resíduos perigosos.

Um aterro sanitário típico é projetado com uma camada de geomembrana na base, acompanhada por sistemas de drenagem que coletam o chorume (líquido gerado pela decomposição dos resíduos). Em muitos projetos, essa camada de geomembrana é reforçada com geocompostos que combinam uma camada impermeável e uma camada drenante. Isso permite que o chorume seja captado e tratado adequadamente, reduzindo os riscos ambientais.

Além disso, após o encerramento de um aterro, os geossintéticos também são utilizados para cobrir o local e evitar a infiltração de água da chuva, que poderia aumentar a produção de chorume e causar instabilidade na estrutura. Esses sistemas de cobertura final incluem geotêxteis para drenagem e geomembranas para impermeabilização, além de camadas de solo vegetado para controle de erosão.

Aplicações para controle de erosões

A erosão é um problema sério em áreas com taludes íngremes, especialmente em regiões sujeitas a chuvas intensas. Nessas áreas, geossintéticos são utilizados para proteger a superfície do solo e estabilizar encostas, evitando o desprendimento e deslocamento de partículas de solo pela ação da água e do vento.

Esses materiais são aplicados sobre encostas íngremes para manter o solo em posição, permitindo, ao mesmo tempo, a infiltração de água e o crescimento de vegetação. A vegetação, por sua vez, ajuda a estabilizar a estrutura do solo a longo prazo. Em projetos de infraestrutura, como ferrovias e rodovias que atravessam áreas montanhosas, o uso de geotêxteis ajuda a prevenir deslizamentos e escorregamentos de terra, que poderiam danificar as vias ou interromper o tráfego.

Aplicações em barragens, diques e reservatórios de água

Na construção de barragens e diques, os geossintéticos desempenham um papel fundamental na impermeabilização, drenagem e reforço estrutural. Barragens destinadas à retenção de água ou rejeitos precisam de sistemas que garantam segurança e evitem vazamentos, e os geossintéticos oferecem soluções eficazes para atender a esses requisitos.

Uma das aplicações mais críticas é a impermeabilização, especialmente em barragens de rejeitos e reservatórios de água. As geomembranas criam uma barreira que impede a passagem de água e rejeitos líquidos, evitando vazamentos. Em muitos projetos, as

geomembranas são combinadas com outras técnicas, como cortinas de injeção, para garantir um nível elevado de estanqueidade. Além disso, geomembranas têm sido utilizadas para revestir o talude de montante de barragens, prevenindo infiltrações indesejadas e reduzindo a necessidade de manutenção constante [1].

O controle da drenagem também é essencial para a segurança das barragens, pois ajuda a aliviar pressões internas e a manter a estabilidade da estrutura. Geodrenos, instalados tanto de forma vertical quanto horizontal, auxiliam na dispersão e no direcionamento do fluxo de água, enquanto geotêxteis protegem as camadas de drenagem contra a contaminação por partículas finas. Em barragens de terra, esses sistemas de drenagem são particularmente importantes para evitar a saturação excessiva do maciço da barragem, que poderia levar a problemas como o *piping*.

Aplicações em reforço de solos moles

Os solos moles apresentam desafios significativos na construção civil, especialmente em fundações de edificações. Nesse contexto, os geossintéticos têm se mostrado eficazes na melhoria dessas condições, especialmente através do uso de geogrelhas e geotêxteis. Esses materiais são utilizados para aumentar a capacidade de carga do solo, minimizando deformações e elevando a resistência ao cisalhamento.

Além de reforçar o solo, os geossintéticos também desempenham um papel crucial na redistribuição de tensões. Ao serem instaladas nas camadas de solo, as geogrelhas distribuem as cargas aplicadas sobre uma área maior, reduzindo o potencial de recalque diferencial.

Por fim, o uso de geossintéticos não apenas melhora a capacidade de suporte do solo, mas também oferece uma alternativa mais sustentável em comparação com métodos tradicionais, que muitas vezes envolvem a remoção e substituição de grandes volumes de solo.

Aplicações em estabilização de taludes

A estabilização de taludes é um desafio constante em projetos de infraestrutura, especialmente em áreas montanhosas ou com solos susceptíveis a deslizamentos. Nesses cenários, os geossintéticos oferecem soluções inovadoras, oferecendo segurança e durabilidade para as estruturas.

As geocélulas, por exemplo, são estruturas tridimensionais que confinam o solo, aumentando sua resistência ao cisalhamento e reduzindo o risco de erosão. Elas são empregadas na estabilização de encostas em aterros e em barragens de pequeno porte, permitindo a construção de taludes mais íngremes e estáveis e reduzindo a área necessária para a obra [2].

Além das geocélulas, o reforço de taludes com geotêxteis tem se mostrado uma solução eficaz. Esses materiais são aplicados na superfície exposta do solo, protegendo-o contra a erosão hídrica e promovendo o crescimento de vegetação, o que contribui para a estabilização a longo prazo.

Outra aplicação importante é o uso de geogrelhas para reforço em taludes. Essas estruturas são inseridas nas camadas de solo para aumentar a resistência ao cisalhamento e controlar deformações. Um exemplo é o projeto de estabilização de um talude em uma mina a céu aberto, onde as geogrelhas ajudaram a suportar as pressões exercidas pelo solo e pelas operações de mineração, evitando o colapso da encosta e garantindo a segurança dos trabalhadores e das operações.

Benefícios do uso dos geossintéticos em obras de engenharia

Os geossintéticos são materiais versáteis amplamente utilizados em obras de engenharia, destacando-se por seus múltiplos benefícios técnicos, econômicos e ambientais. Esses materiais incluem uma variedade de produtos, como geomembranas, geotêxteis, geogrelhas e geocélulas, que desempenham funções essenciais em projetos de infraestrutura, controle de erosão, drenagem, impermeabilização e reforço de solos.

Ao longo dos anos, os geossintéticos têm sido fundamentais na evolução da engenharia geotécnica e civil, oferecendo soluções inovadoras e sustentáveis para uma ampla gama de aplicações. Seus principais benefícios incluem a redução de custos, o aumento da durabilidade das obras e uma contribuição significativa para a sustentabilidade ambiental, alinhando-se a muitos dos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) das Nações Unidas, a qual estabelece 17 objetivos para orientar decisões tomadas por nações e organizações nos próximos anos.

No âmbito da engenharia, os geossintéticos podem desempenhar papel importante na obtenção do ODS 6, água limpa e saneamento; ODS 9, indústria, inovação e infraestrutura; ODS 12, consumo e produção responsáveis; ODS 13, ação climática; e ODS 17, parcerias para as metas [3]. A atuação da International Geosynthetic Society (IGS) nesse aspecto também tem uma contribuição significativa no que diz respeito a discussão e disseminação desses valores, não sendo apenas uma associação composta por seres humanos, é fundada não apenas em suas robustas capacidades técnicas [4].

Um dos aspectos mais notáveis do uso de geossintéticos é a eliminação da necessidade de grandes escavações e transporte de materiais, o que reduz o impacto ambiental. Além disso, esses materiais possuem longa vida útil e podem ser instalados de forma rápida, favorecendo projetos com cronogramas apertados [1].

A economia de custos é outro benefício significativo. Comparados aos métodos tradicionais de engenharia, como a remoção e substituição de grandes volumes de solo, os geossintéticos oferecem uma solução mais econômica. De acordo com a International Geosynthetic Society (IGS), eles reduzem a necessidade de grandes escavações, minimizam o uso de materiais pesados de construção e simplificam a logística das obras. Outro ponto importante é a durabilidade dos geossintéticos, que reduz a necessidade de manutenções frequentes, evitando o uso excessivo de recursos e a geração de resíduos. Esses materiais são projetados para durar décadas, aumentando a vida útil das infraestruturas. Em aterros sanitários, reservatórios e obras hidráulicas, por exemplo, os geossintéticos funcionam como barreiras eficazes contra a infiltração de líquidos, protegendo o solo e as águas subterrâneas de contaminação. Essa durabilidade também reduz intervenções e custos ao longo do ciclo de vida da infraestrutura [7,9].

Em termos econômicos, soluções que utilizam geossintéticos geralmente apresentam menores custos iniciais e operacionais em comparação com métodos tradicionais. Isso é

evidente, por exemplo, em obras de estabilização de encostas e reforço de solos, onde os geossintéticos eliminam a necessidade de escavações profundas e caras [8,9].

Do ponto de vista ambiental, os benefícios dos geossintéticos são evidentes pela sua capacidade de reduzir o impacto ecológico dos projetos de engenharia. Eles promovem a sustentabilidade por meio da conservação de recursos naturais, redução de emissões de carbono e minimização de resíduos de construção. De acordo com a International Geosynthetic Society (IGS), destaca que esses materiais ajudam a otimizar a eficiência dos projetos, reduzindo o uso de recursos naturais, como areia, cascalho e cimento, cuja extração e processamento consomem grandes quantidades de energia.

A redução no uso de materiais naturais, como solo, areia e agregados, é um dos maiores benefícios dos geossintéticos, diminuindo a demanda por recursos naturais e economizando energia e emissões de gases de efeito estufa associadas ao transporte de materiais pesados [7,9].

Em aplicações como estabilização de solos e construção de rodovias, o uso de geossintéticos permite substituir agregados por materiais sintéticos de alta resistência, reduzindo a necessidade de camadas espessas de solo e minimizando a extração de recursos naturais. Além disso, a menor utilização de materiais como cimento e concreto contribui para a sustentabilidade, reduzindo as emissões de CO₂ associadas à sua produção [9].

Os geossintéticos também proporcionam soluções de longo prazo para problemas de erosão e instabilidade do solo, contribuindo para a preservação ambiental. Em obras de controle de erosão, ajudam a proteger ecossistemas e preservar recursos hídricos, evitando a contaminação de corpos d'água e minimizando a degradação do terreno [10].

A utilização de resíduos e materiais reciclados na fabricação de alguns tipos de geossintéticos tem se tornado uma prática comum, promovendo a economia circular. Por exemplo, o uso de fibras recicladas de polipropileno em geotêxteis reduz a necessidade de matérias-primas virgens e diminui os resíduos enviados para aterros [7,9].

Embora o desempenho dos geossintéticos fabricados com materiais reciclados possa ser inferior em alguns casos comparado aos feitos com polímeros virgens, eles ainda apresentam vantagens significativas em termos de sustentabilidade. Quando bem utilizados, esses produtos podem cumprir suas funções por longos períodos, contribuindo para a redução do impacto ambiental total das obras [7].

Estudos indicam que o uso de geossintéticos pode reduzir drasticamente as emissões de carbono em projetos de construção. Um levantamento em 25 aplicações mostrou que esses materiais podem diminuir a pegada de carbono em média 65%, principalmente devido à redução no transporte de materiais e à menor movimentação de terra [8].

Em obras rodoviárias, por exemplo, o uso de geossintéticos reduz a quantidade de materiais de enchimento necessários, resultando em economia de energia e diminuição das emissões de gases de efeito estufa. Sua durabilidade também contribui para uma maior resiliência das estruturas frente às mudanças climáticas, como inundações e eventos extremos [9].

Os geossintéticos são essenciais na proteção ambiental, especialmente em aplicações de contenção de resíduos perigosos e controle de erosão. Em aterros sanitários, geomembranas e barreiras geossintéticas evitam a contaminação do solo e das águas subterrâneas. Em áreas suscetíveis à erosão, ajudam na estabilização do solo, prevenindo deslizamentos e a perda de vegetação [9].

Ao promover o controle da erosão e estabilização de solos, os geossintéticos também auxiliam na preservação da biodiversidade e recuperação de áreas degradadas. Em barragens, canais e taludes, permitem o desenvolvimento de vegetação local, contribuindo para a restauração ambiental [7,9].

Portanto, o uso de geossintéticos em obras de engenharia proporciona benefícios econômicos e ambientais. Além de aumentar a eficiência das construções e reduzir custos, contribuem para a sustentabilidade, minimizando o uso de recursos naturais, reduzindo emissões de CO₂ e promovendo a economia circular. Sua aplicação melhora o desempenho das obras e ajuda a mitigar impactos ambientais, alinhando-se aos objetivos globais de desenvolvimento sustentável. De acordo com a International Geosynthetic Society (IGS), destaca que o uso de geossintéticos apoia diretamente os ODS das Nações Unidas, melhorando a eficiência da infraestrutura e promovendo práticas ecologicamente corretas e economicamente viáveis.

Desafios enfrentados

A constante elaboração de normas padronizadas e regulamentos específicos para a aplicação de geossintéticos em diversos contextos geotécnicos é um desafio para a escolha adequada dos materiais e métodos de instalação e para a qualidade do processo de fabricação. A produção de geossintéticos é caracterizada por uma variabilidade inerente nas propriedades dos produtos fabricados, o que torna indispensável a realização de medições frequentes e ensaios específicos para o monitoramento das características relevantes. No Brasil, já existem normas técnicas para definir a frequência e os tipos de ensaios necessários para o controle de qualidade resulta na padronização desses procedimentos. Na prática, os ensaios são tipicamente focados na determinação das características físicas, químicas, hidráulicas e mecânicas dos geossintéticos [24]. Os parâmetros de qualidade podem variar dependendo do tipo de geossintético e das características do solo, o que demanda ensaios rigorosos para garantir a conformidade com os requisitos de cada obra [1].

As normas técnicas brasileiras disponíveis para consultas foram elaboradas pela Comissão de Estudo Especial de Geossintéticos (CEE-175) da Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT) com o apoio e participação de profissionais experientes e empresas da área. Atualmente, são disponibilizadas cerca de 26 normas técnicas brasileiras em vigor no catálogo da ABNT, sendo elas:

- **ABNT NBR ISO 9862:** Geossintéticos - Amostragem e preparação de corpos de prova para ensaios.
- **ABNT NBR ISO 9863:** Geossintéticos - Determinação da espessura a pressões especificadas - Parte 1: Camada única.
- **ABNT NBR ISO 9864:** Geossintéticos — Método de ensaio para determinação da massa por unidade de área de geotêxteis e produtos correlatos.
- **ABNT NBR ISO 10318-1:** Geossintéticos - Parte 1: Termos e definições.

- **ABNT NBR ISO 10318-2:** Geossintéticos - Parte 2: Símbolos e pictogramas.
- **ABNT NBR ISO 10319:** Geossintéticos — Ensaio de tração faixa larga.
- **ABNT NBR ISO 10320:** Geossintéticos - Identificação na obra.
- **ABNT NBR ISO 10321:** Geossintéticos — Ensaio de tração de emendas pelo método da faixa larga.
- **ABNT NBR ISO 10722:** Geossintéticos — Procedimento de ensaio índice para avaliação do dano mecânico sob carga repetida — Dano causado por material granular (método de ensaio de laboratório).
- **ABNT NBR 11058:** Geotêxteis e produtos correlatos - Determinação das características de permeabilidade hidráulica normal ao plano e sem confinamento.
- **ABNT NBR ISO 12236:** Geossintéticos — Ensaio de punçionamento estático (punção CBR).
- **ABNT NBR ISO 12956:** Geotêxteis e produtos correlatos — Determinação da abertura de filtração característica.
- **ABNT NBR ISO 12957-1:** Geossintéticos — Determinação das características de atrito - Parte 1: Ensaio de cisalhamento direto.
- **ABNT NBR ISO 12957-2:** Geossintéticos — Determinação das características de atrito - Parte 2: Ensaio de plano inclinado.
- **ABNT NBR ISO 12958-1:** Geotêxteis e produtos correlatos - Determinação da capacidade de fluxo de água no plano - Parte 1: Ensaio índice.
- **ABNT NBR ISO 12958-2:** Geotêxteis e produtos correlatos - Determinação da capacidade de fluxo de água no plano - Parte 2: Ensaio de desempenho.
- **ABNT NBR ISO 13427:** Geossintéticos - Simulação do dano por abrasão (ensaio de bloco deslizante).
- **ABNT NBR ISO 13431:** Geotêxteis e produtos correlatos - Determinação do comportamento em deformação e na ruptura por fluência sob tração.
- **ABNT NBR ISO 13433:** Geossintéticos — Ensaio de perfuração dinâmica (ensaio de queda de cone).
- **ABNT NBR ISO 13437:** Geossintéticos — Instalação e extração de amostras na obra para avaliação de durabilidade.
- **ABNT NBR 15856:** Geomembranas e produtos correlatos — Determinação das propriedades de tração.
- **ABNT NBR 16199:** Barreiras geossintéticas — Instalação de geomembranas poliméricas.
- **ABNT NBR 16757-1:** Geossintéticos – Requisito para aplicação – Parte 1: Geotêxteis e produtos correlatos.
- **ABNT NBR 16757-2:** Geossintéticos – Requisito para aplicação – Parte 2: Barreiras geossintéticas.
- **ABNT NBR ISO 18325:** Geossintéticos — Método de ensaio para a determinação da capacidade de descarga de água para drenos verticais pré-fabricados.
- **ABNT NBR ISO 25619-1:** Geossintéticos — Determinação do comportamento em compressão - Parte 1: Propriedades na fluência à compressão.

Além dessas, foram elaboradas normas técnicas com diretrizes para determinação das propriedades físicas (gramatura e espessura), mecânicas (ensaios de tração, punçionamento, dano por abrasão, fluência a compressão, etc) e hidráulicas (capacidade de fluxo no plano e permeabilidade), entre outras. Na ausência de normalização brasileira para subsidiar o direcionamento na avaliação do material, são utilizadas as normas técnicas internacionais americanas e europeias, guias de boas práticas de institutos consolidados na comunidade de geossintéticos (como por exemplo, o Geosynthetic

Institute - GSI). No cenário internacional, as normas mais importantes sobre geossintéticos são desenvolvidas por organizações como a International Organization for Standardization (ISO), a American Society for Testing and Materials (ASTM), e outras entidades regionais de normalização. Essas normas abrangem métodos de ensaio, especificações e diretrizes para a aplicação de geossintéticos em diferentes contextos.

Além disso, é relevante mencionar a importância das conferências nacionais e internacionais para o avanço e a troca de experiências na área de geossintéticos, desempenhando um papel vital no desenvolvimento da engenharia geotécnica e ambiental. Essas conferências reúnem profissionais, acadêmicos, pesquisadores e representantes da indústria de todo o mundo para compartilhar conhecimentos, apresentar novas tecnologias, discutir desafios e explorar soluções inovadoras. Não obstante, em alguns casos, durante esses eventos, comitês especializados discutem a atualização de normas internacionais, como as da ISO e ASTM, com base nas necessidades atuais do mercado e nos avanços tecnológicos.

Outro desafio enfrentado no cenário de obra com aplicação de geossintético é a correta instalação dos geossintéticos para que o material desempenhe com eficiência sua função ao longo do tempo adequado. A maioria das obras que utilizam geossintéticos são de grande escala, envolvendo atividades como escavação, preparação de superfície, instalação do geossintético, distribuição e compactação de materiais, realizadas por trabalhadores que frequentemente não estão cientes da sensibilidade desse tipo de material [17].

Problemas como danos durante a instalação, dobras inadequadas ou tensões excessivas podem comprometer a integridade do material. O tráfego de veículos e pessoas sobre os materiais, se não devidamente protegidos, também podem provocar o aparecimento de fendas, rasgamento, corte das fibras, ruptura por tração e outros tipos de patologias que devem ser evitados ou corrigidas antes de finalizar a obra, de modo que não propicie a redução das suas propriedades.

Portanto, os danos durante a instalação são dependentes de vários fatores, tais como ao tipo de geossintético, ao material em contato com o geossintético e as condições de instalação na construção [20]. Assim, é necessário que para minimizar tais danos sejam empregados equipamentos específicos, a preparação adequada do terreno com a remoção de materiais granulares pontiagudos, proteção dos geossintéticos e o treinamento adequado dos profissionais envolvidos na instalação.

Ensaio de laboratório permitem simular a influência no desempenho geossintético devido à presença de danos mecânicos, a degradação química e térmica dos materiais para determinados períodos de exposição, entre outros. [11]. Por exemplo, para aplicação em pavimentação, o efeito da degradação térmica e mecânica dos geossintéticos são avaliados por meio de ensaios exposição térmica, análise da interação reforço-mistura asfáltica, ensaios mecânicos e etc. [19, 22; 23].

Em geomembranas, estudos de variação das propriedades devido a danos mecânicos também são realizados em escala real ou reduzida [18, 21, 15, 13].

Além disso, a durabilidade é um fator crítico que pode ser comprometido por exposição a raios ultravioleta, mudanças de umidade e temperatura e interações químicas. A exposição prolongada à radiação UV pode causar a degradação dos polímeros usados nos

geossintéticos, afetando sua durabilidade e diminuindo o seu tempo de vida útil [1]. Esse problema pode ser minimizado pelo uso de aditivos estabilizadores, mas a durabilidade varia conforme as condições do local. Com o tempo, sua vida útil pode ser afetada e mudanças nas propriedades podem ser observadas, o que afeta o desempenho desses materiais [30].

Geotêxteis são geralmente projetados para aplicações subterrâneas, onde não ficam expostos à luz solar. Entretanto, é possível que ocorra uma breve exposição ao sol antes da instalação. Devido ao risco de atrasos na instalação e no enterramento, o material precisa possuir resistência aos raios UV. Para avaliar o risco de danos por exposição acidental à luz solar, realiza-se o intemperismo UV artificial, que simula os efeitos dos raios ultravioleta no material [12, 16, 26, 27, 29, 30, 32]. A Fig 1 mostra a coleta de amostras de geotêxteis para avaliação de desempenho.

Figura 1 – Exumação de amostras geotêxteis expostas a radiação solar.



Fonte: [29]

A quantidade de radiação UV que atinge a superfície terrestre varia conforme a localização geográfica, a estação do ano e as condições climáticas. Por exemplo, o espectro solar no verão é diferente do espectro no inverno. Durante o inverno, a degradação solar tende a ser menor, já que a radiação UV, que é altamente energética e a mais prejudicial, não chega à superfície, além da irradiância solar ser reduzida nesse período.

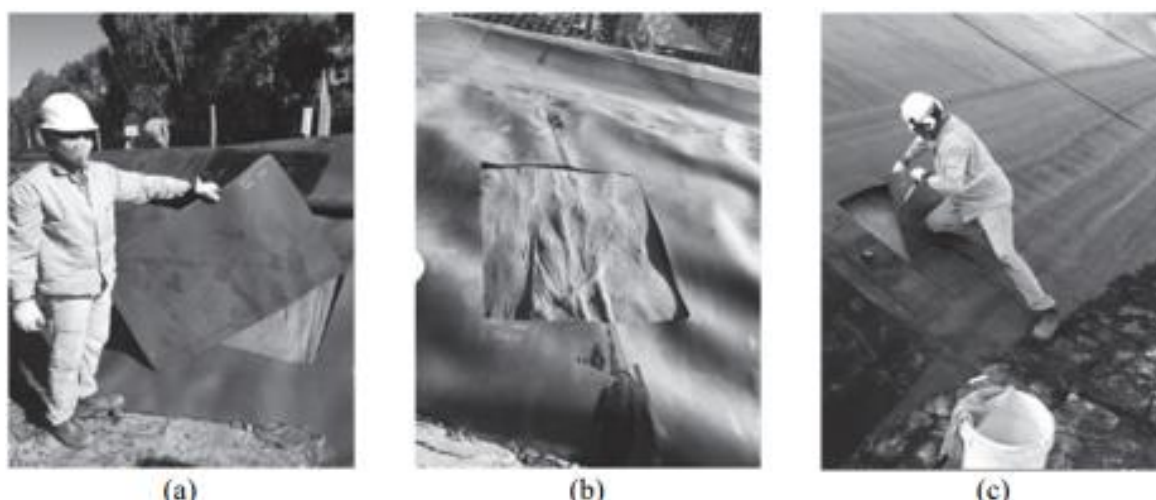
A resistência dos geossintéticos a substâncias químicas agressivas, como hidrocarbonetos e solventes, é outro desafio relevante, especialmente em aplicações de contenção de resíduos industriais, de mineração ou em aterros sanitários. A escolha do tipo de polímero adequado, como polietileno de alta densidade (PEAD), pode aumentar a resistência a substâncias químicas, mas testes específicos são necessários para cada aplicação [5].

No setor de mineração, as características dos projetos e suas localizações geralmente fazem com que os materiais geossintéticos sejam submetidos a condições que vão além dos limites dos procedimentos convencionais de projeto, testes e métodos de construção. Com os avanços nas técnicas e nos equipamentos de processamento de minério, os grandes projetos de mineração atualmente incluem o desenvolvimento de extensas

plataformas de lixiviação em pilha, depósitos de rejeitos, instalações para disposição de estéril e lagoas de processamento [25].

Analogamente, ao que foi pontuado para a exposição UV, para avaliação da influência da exposição dos geossintéticos com fluidos agressivos é necessária uma avaliação da degradação a curto e longo prazo por meio de amostras de geossintéticos expostas em campo ou em laboratório. O material exposto em campo é exumado periodicamente para realização de ensaios para determinação das suas propriedades físicas, mecânicas e hidráulicas [14, 28]. No estudo de durabilidade de uma geomembrana de polietileno de alta densidade (PEAD) que atua como barreira de fluidos há 10 anos em uma barragem/reservatório de mineração de ouro no Brasil, foi realizada a exumação de amostras de geomembranas em campo para avaliação em laboratório de suas propriedades, conforme mostrado na Fig. 2. Os resultados não apontaram para perdas significativas nas resistências da geomembranas ou aumento significativo em sua deformação à tração, podendo, neste caso, continuar a desempenhar a função para a qual foi projetada. [31].

Figura 2 – Exumação de amostras geomembranas.



Fonte: [31].

Dado o exposto, pode-se notar que os avanços tecnológicos e a crescente capacitação dos profissionais envolvidos na instalação de geossintéticos representam importantes passos para reduzir os problemas enfrentados em campo. Esses progressos têm permitido maior precisão e eficácia nas técnicas de instalação, contribuindo para melhorar a durabilidade e o desempenho das obras.

Conclusões

Os geossintéticos se destacam como uma tecnologia essencial em obras de engenharia, oferecendo soluções eficientes, econômicas e sustentáveis. Seus benefícios técnicos e econômicos, aliados a uma forte contribuição para a sustentabilidade ambiental, tornam esses materiais uma escolha preferencial para projetos complexos que exigem alta performance e compromisso com a preservação do meio ambiente. A implementação de práticas sustentáveis, como a integração de geossintéticos em obras de infraestrutura,

demonstra o potencial de inovação no setor da construção civil para enfrentar desafios ambientais e econômicos do século XXI.

Embora os geossintéticos ofereçam soluções inovadoras para muitos problemas de engenharia, é essencial abordar os desafios associados à sua aplicação. A pesquisa e o desenvolvimento contínuos de novas formulações, a adaptação de normas técnicas e o treinamento especializado são fundamentais para garantir que os geossintéticos possam ser utilizados de maneira eficaz e sustentável em diversas obras.

O uso de geossintéticos em obras de engenharia representa um avanço significativo na forma como projetamos e construímos infraestruturas. A versatilidade e a eficiência desses materiais permitem soluções que são, ao mesmo tempo, técnicas e economicamente viáveis, além de mais sustentáveis. À medida que as demandas por soluções de engenharia mais rápidas e econômicas aumentam, é provável que o uso de geossintéticos continue a crescer, trazendo benefícios para diversos setores da engenharia civil.

O desenvolvimento tecnológico e a contínua qualificação dos profissionais que trabalham com a instalação de geossintéticos são passos fundamentais para minimizar os problemas encontrados em campo. Esses avanços têm possibilitado maior precisão e eficiência nas técnicas de instalação, o que, por sua vez, contribui para aumentar a durabilidade e melhorar o desempenho das estruturas onde esses materiais são aplicados. Além disso, a realização contínua de estudos sobre o comportamento dos materiais em diferentes condições ambientais e aplicações específicas tem sido fundamental para o desenvolvimento de geossintéticos cada vez mais eficientes. Esses estudos possibilitam a identificação de novas soluções e o aprimoramento das propriedades dos materiais, promovendo maior segurança, sustentabilidade e custo-benefício nas diversas áreas de aplicação, como mineração, construção civil e projetos ambientais. Assim, a combinação de tecnologia, capacitação e pesquisa contínua impulsiona a evolução da utilização dos geossintéticos, tornando-os cada vez mais essenciais nas soluções de engenharia.

Agradecimentos

Este estudo foi financiado em parte pelo Projeto CNPq/FNDCT/MCTI 15/2022 - Processo 405594/2022-4: Desempenho de pavimentos estabilizados com geossintéticos: uma abordagem experimental e numérica.

Referências

1. R. M. Koerner, *Designing with geosynthetics*, Pearson Education, New Jersey, 2005.
2. E. M. Palmeira, *Geossintéticos em geotecnia e meio ambiente*, Oficina de Textos, São Paulo, 2018.
3. N. Dixon, G. Fowmes, M. Frost. Global challenges, geosynthetic solutions and counting carbon. *Geosynthetics International*, 2017, 24, 5, <https://doi.org/10.1680/jgein.17.00014>.
4. N. Touze. Healing the world: a geosynthetics solution. *Geosynthetics International*, 2021, 28, 1. <https://doi.org/10.1680/jgein.20.00023>.
5. S. K. Shukla. *Geosynthetics and Their Applications*. Thomas Telford, London, 2002.

6. E. Tutumluer, M. Kang. I. I. Qamhia. Geosynthetic stabilization of road pavements, railroads, and airfields. *Transportation Geotechnics* 2024, 23, 1. <https://doi.org/10.1016/j.trgeo.2024.101321>
7. F. Fontana. Opportunities and limits of recycling in the production of geosynthetics in a circular economy perspective in *Proceedings of XXXII Convegno Nazionale Geosintetici*, Bologna, 2022, 23.
8. J. Kraus. Geosynthetics, sustainability and planetary boundaries: real global benefits and potential policy risks in Europe in *Proceedings of XXXII Convegno Nazionale Geosintetici*, Bologna, 2022, 29.
9. N. Touze. The role of geosynthetics in sustainable development and the circular economy in *Proceedings of XXXII Convegno Nazionale Geosintetici*, Bologna, 2022, 7.
10. D. Wall; R. K. Rowe. Root cause failure assessment of a water retention reservoir at a mining industry site. *GeoAmericas* 2024, 569, 1. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202456919002>
11. A. M. V. Paula, Master Degree Thesis, University of Porto, 2003.
12. J. R. C. Carneiro, PhD. Thesis, University of Porto, 2009.
13. S. P. C. N. M. Moreira, Master Degree Thesis, University of Porto, 2009.
14. M. T. N. S. Bueno, PhD. Thesis, University of Brasilia, 2009.
15. L. I. D. Cardona, Master Degree, University of Brasilia, 2014
16. .B. V. Milagres, Master Degree, Federal University of Ouro Preto, 2014
17. F. D. F. Carvalho, Master Degree Thesis, University of Porto, 2014.
18. J. R. A. Soto, Master Degree, University of Brasilia, 2015.
19. J. R. A. Obando, PhD. Thesis, University of Brasilia, 2016.
20. A. C. M. Brás, Master Degree Thesis, University of Porto, 2017.
21. G. O. M Pedroso, Master Degree, University of São Paulo, 2017
22. L. M. M. Azevedo, Master Degree Thesis, University of Rio Grande do Norte, 2019.
23. M. A. Mello, Master Degree Thesis, University of Rio Grande do Norte, 2022.
24. C. M. L. Costa et al. *Polímeros* 2008, 18, 158. <https://doi.org/10.1590/S0104-14282008000200014>
25. J. F. Lupo; K. F. Morrison. Geosynthetic design and construction approaches in the mining industry. *Geotextiles and Geomembranes* 2007, 25, <https://doi.org/10.1016/j.geotextmem.2006.07.003>
26. B. Urashima et al. Degradação de geotêxteis expostos às intempéries. *Brazilian Journal of Development* 2020, 6, 25208. <https://doi.org/10.34117/bjdv6n5-103>
27. M. A. Aparicio-Ardila et al. Evaluating the degradation of a nonwoven polypropylene geotextile exposed to natural weathering for 3 years. *International Journal of Geosynthetics and Ground Engineering* 2021, 7, 1. <https://doi.org/10.1007/s40891-021-00314-6>
28. F. B. Abdelaal et al. Degradation of HDPE, LLDPE, and blended polyethylene geomembranes in extremely low and high pH mining solutions at 85°C. *Geotextile and Geomembrane* 2023, 51, 27. <https://doi.org/10.1016/j.geotextmem.2023.04.011>.
29. D. Beaumier, S. Fourmont, G. Koerner. *GeoAmericas* 2024, 569, 1. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202456926003>
30. J. L. E. Dias Filho et al. No access natural weathering effects of nonwoven geotextile exposed to different climate conditions. *Geosynthetic International* 2024. <https://doi.org/10.1680/jgein.23.00156>
31. B. Urashima et al. *GeoAmericas* 2024, 569, 1. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202456916002>.

- 32.** F. L. Lavoie; M. Kobelnik; M. L. Lopes. Study of heat and UV radiation exposures on HDPE geomembranes. *Results in Materials* 2024, 22, 2. <https://doi.org/10.1016/j.rinma.2024.100552>



CAPÍTULO 5

ESTUDO DA DURABILIDADE DE GEOSSINTÉTICOS

José Luiz Ernandes Dias Filho^{1*} e Jefferson Lins da Silva²

1 – Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias (CCET), Universidade Federal do Oeste da Bahia (UFOP), Barreiras, BA, Brasil *jledfilho@ufob.edu.br

2 – Departamento de Geotecnia (SGS), Escola de Engenharia de São Carlos (EESC), Universidade de São Paulo (USP), São Carlos, SP, Brasil

Resumo – Os geossintéticos tiveram suas primeiras aplicações em projetos de engenharia no final de 1950. Desde então, a popularidade destes materiais aumentou, repercutindo em números, diversidades de aplicação e sua importância a desempenhar nas obras de engenharia. Nesse sentido, destaca-se a necessidade de conhecer melhor os materiais utilizados, a fim de avaliar o seu comportamento quanto a durabilidade perante os diversos ambientes exógenos a que estão submetidos. Dessa forma, neste capítulo de livro, são apresentados metodologias e trabalhos que caracterizam principalmente a durabilidade dos geotêxteis. Em aplicações em que esses materiais estão cobertos por solo, por exemplo, pouco se alteram, mas quando estão submetidos à exposição aos raios do sol, variações ou extremos de temperatura, e contato com líquidos ácidos e básicos, podem estar sujeitos à rápida alteração e, conseqüentemente, comprometimento da obra. Sendo assim, a escolha dos materiais deve estar condicionada a sua função e vida útil da obra ao qual será dimensionado. Entre os principais mecanismos de avaliação da durabilidade estão às exposições às intempéries ou procedimentos de degradação acelerada em laboratório. E, como principal contribuição, são apresentados resumos dos principais mecanismos associado à durabilidade dos geossintéticos, indicando a forma como a durabilidade dos materiais podem ser avaliadas.

Palavras-chave: Geossintéticos. Geotêxteis. Durabilidade. Degradação natural. Degradação acelerada.

Introdução

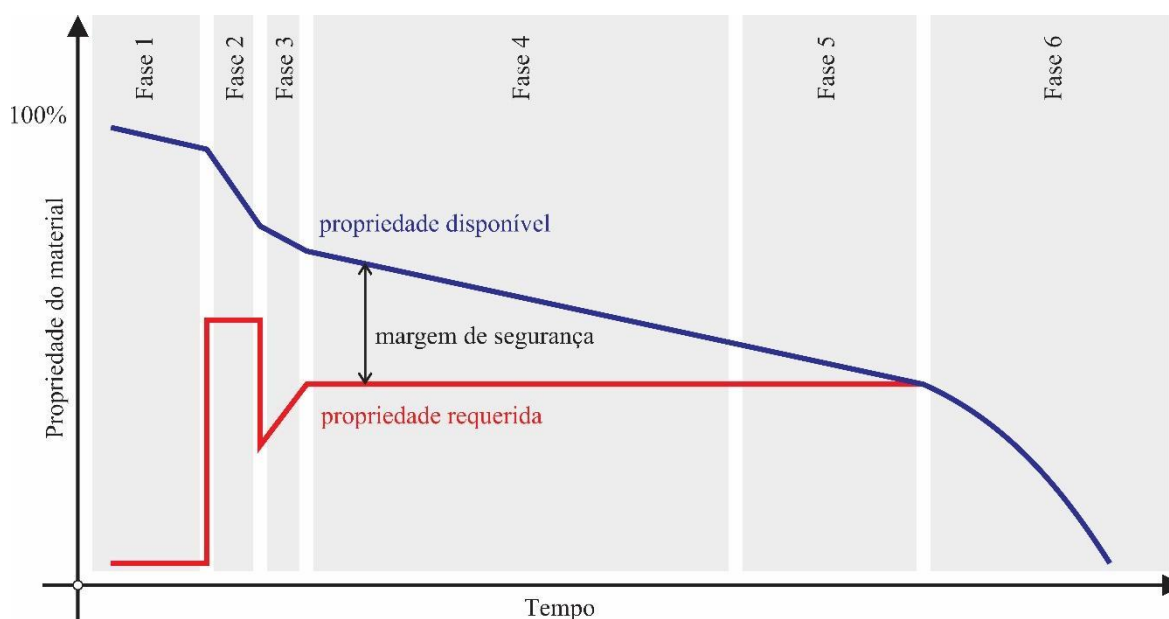
O estudo da durabilidade dos geossintéticos surge da necessidade de avaliar o desempenho das obras que utilizam desse material, o qual tem seus primeiros projetos executados na década de 1950. Resumidamente, há um grupo de aplicações em que os geossintéticos estão expostos na superfície, como por exemplo, em reservatórios de água ou proteção de taludes, enquanto outra parte está enterrado, como são os casos de aterros sanitários. Nessas condições severas os materiais estão sujeitos à exposição a raios ultravioleta (aplicações superficiais), e ataque químico e/ou biológico (aplicações subterrâneas), com o decorrer do tempo e sob ações mecânicas de fadiga ou fluência, as propriedades do geossintéticos podem alterar-se desfavoravelmente. Existe ainda uma preocupação real, que se vincula a fragilidade perante o impacto mecânico e o vandalismo, os quais afetam negativamente na durabilidade dos geossintéticos [1-11].

A redução da resistência causada por danos mecânicos, condições climáticas, deterioração química e biológica pode levar a um desempenho inferior, devido à perda de resistência e funcionalidade. As variações provenientes da fabricação dos materiais geossintéticos estão frequentemente ligadas às características de durabilidade desses

materiais. Contudo, dado que certos resultados dos ensaios não podem ser interpretados como garantia em condições normais de operação, mas como um recurso para escolher um produto apropriado para uma vida útil prevista, é crucial avaliar os produtos com base no seu desempenho in situ.

Tendo em vista que os materiais perdem o desempenho conforme a cronologia do projeto, é sabido que sua durabilidade é afetada por processos de degradação seja durante a instalação e manuseio no início da obra, até seu possível colapso (Figura 1). O termo durabilidade também é aplicado para se referir à capacidade da obra poder continuar em funcionamento a um nível aceitável mesmo após algum dos materiais utilizados na sua construção ter começado a degradar após a finalização do projeto.

Figura 1 – Variação da propriedade disponível dos geossintéticos durante as fases da obra



Fonte: Adaptado de [12].

Durante a instalação (Fase 1) existe grande probabilidade dos geossintéticos sofrerem danos mecânicos e, conseqüentemente, reduzir sua propriedade disponível. Depois tem-se o desenvolvimento do projeto com as construções adicionais (Fase 2), as quais exigem da propriedade requerida, uma vez que há contato com equipamentos pesados, por exemplo. Posteriormente, solicitando menos de sua propriedade, é chegada a finalização (Fase 3) do projeto e, a partir desse momento sua utilização (Fase 4). Até esse ponto da cronologia a propriedade disponível é controlada pelo engenheiro na obra. Após esse controle, dependendo da localização e da acessibilidade aos geossintéticos, além das ações sujeitas devido ao meio ambiente exógeno, existe risco de vandalismo e outras atividades antrópicas no projeto, os quais afetam sua vida útil (Fase 5). Todos esses fatores podem levar a uma redução na resistência à tração, à perfuração, ao rasgamento e à fissuração. Esses fatores são relevantes devido às tensões adicionais ou falhas de componentes que podem induzir na perda de funcionalidade e eventual colapso (Fase 6).

As principais características intrínsecas que interferem na durabilidade de geossintéticos são a sua formulação, os possíveis aditivos, a geometria das fibras e a qualidade das

ligações químicas. Já as características extrínsecas, são relativas ao meio ambiente a que este material ficará exposta sujeito às intempéries locais e a outras possíveis ações antrópicas. Estes fatores interferem diretamente na capacidade dos geossintéticos em manter suas propriedades em projeto durante o tempo desejado. Entretanto, as análises de durabilidade dos geossintéticos é um aspecto importante a ser considerado de acordo com cada projeto, tendo em vista o prolongado contato com agentes de alteração, que podem causar seu envelhecimento prematuro.

Dessa forma, a origem das ações que afetam a durabilidade dos geossintéticos pode ser classificada como antrópica ou natural. Enquanto as ações humanas podem ser minimizadas por um maior controle e gerenciamento dos materiais, as ações naturais exigem maior cuidado quanto à escolha dos mesmos e conexão com o tipo do projeto. Portanto, este capítulo de livro revisa métodos de caracterização e envelhecimento acelerado para fornecer um guia de metodologias que podem auxiliar análises de durabilidade dos geossintéticos, com foco nos geotêxteis e produtos correlatos.

Desenvolvimento

Materiais

Os geossintéticos são produzidos a partir de polímeros termoplásticos, os quais incluem as poliefinas, os vinis, os poliésteres e as poliamidas. Segundo [9-10], 95% dos geossintéticos são produzidos por polipropileno (PP) e Poliéster (PET), sendo o PP o polímero mais utilizado, que varia entre 65% [9] à 85% [10], já o PET é o segundo polímero mais utilizado alcançando a marca de 12% [9] à 30% [10]. O polietileno (PE) vem em seguida com aproximadamente 2% [9], o que pode aumentar no futuro com a crescente utilização desses materiais em projetos de aterros sanitários e reservatórios. Baseado nisso, a Tabela 1 apresenta as principais características dos polímeros descritos conforme algumas de suas propriedades requeridas em projeto.

Tabela 1 – Propriedades requeridas conforme mesma gramatura

Propriedade	Polímeros		
	PP	PET	PE
Resistência à tração	***	*	*
Deformação na ruptura	**	***	***
Fluência	*	***	***
Resistência ao ultravioleta (não estabilizado)	***	**	*
Resistência ao ultravioleta (estabilizado)	***	***	***
Resistência à base	*	***	***
Resistência à microrganismos	**	**	***

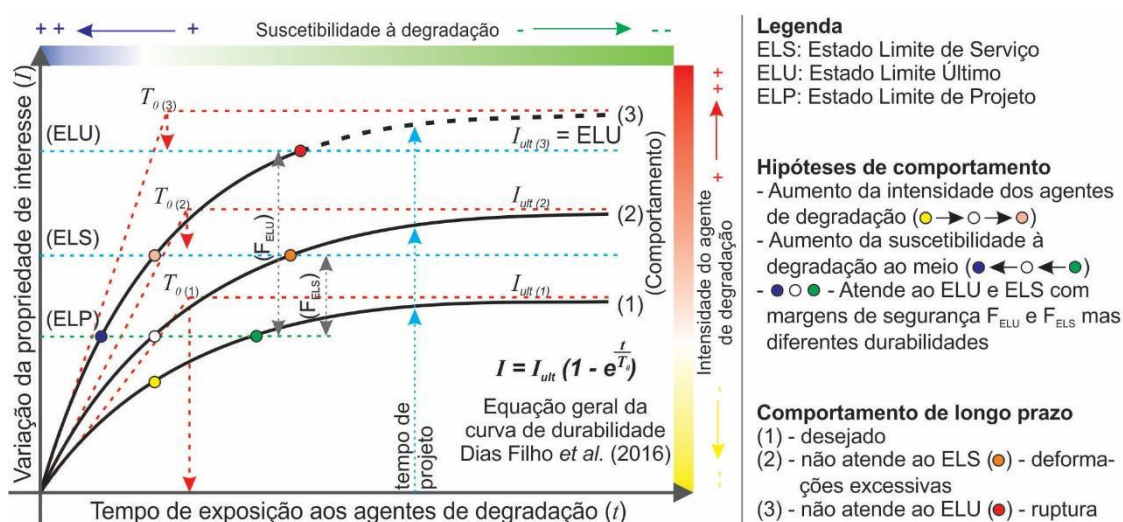
***elevada, **média, *baixa

Fonte: Adaptado de [11].

Conceitos fundamentais

A durabilidade do geossintético é a sua capacidade de manter suas propriedades ao longo da sua vida útil. Em outras palavras, é quando desempenha satisfatoriamente as suas propriedades requeridas ou de interesse mesmo em contato com agentes alteração [12]. Os agentes alteração, por sua vez, promovem a degradação dos materiais, conforme sua intensidade no meio ambiente exógeno de exposição, e sua resposta aos mecanismos de degradação caracteriza sua susceptibilidade à degradação. A Figura 2 ilustra este conceito apresentando a definições de Estado Limite de Serviço (ELS), onde o desempenho da estrutura é insatisfatório e sem risco de colapso, Estado Limite Último (ELU), em que há colapso da estrutura, e Estado Limite de Projeto (ELP), que garante um projeto satisfatório e margem de segurança para desenvolvimento de patologias na obra.

Figura 2 – Caracterização da variação das propriedades de interesse do geossintético com o tempo de exposição considerando a influência da alterabilidade na durabilidade dos materiais



Fonte: [13].

A durabilidade, então, está relacionada ao tempo de uso do material (t), onde se atinge o valor a propriedade de interesse (I), que define uma condição aceitável de obra: ELP. Conforme o tempo passa ou aumenta-se a intensidade de degradação o ELS é alcançado e o desempenho dos materiais torna-se insatisfatório até chegar à condição em que existe o colapso do material: ELU. A degradação representa a situação pela qual os geossintéticos sofrem alteração ao longo do tempo: variação das propriedades de interesse. E a alterabilidade está relacionada à facilidade com que ocorre a degradação do material: susceptibilidade de degradação.

A Figura 2 ilustra ainda as hipóteses de comportamento do material considerando o aumento na intensidade dos agentes de degradação e também da susceptibilidade à degradação ao meio ambiente exógeno. No primeiro exemplo, considerando o mesmo tempo t de degradação, o material e sua condição representados pelo ponto amarelo e branco satisfazem o ELP, já o ponto rosa tem-se o limite para o ELS. As três condições podem estar representando, por exemplo, diferentes intensidades da radiação solar ou uma variação mais acentuada do pH do meio em que se encontra o geossintético. No segundo exemplo são caracterizados a susceptibilidade. As três cores, azul, branco e

verde, representam, respectivamente, o aumento da durabilidade do material, o qual caracteriza condições de degradação diferentes, onde o ponto azul tem-se maior ação dos agentes de degradação e no ponto verde menor.

Degradação

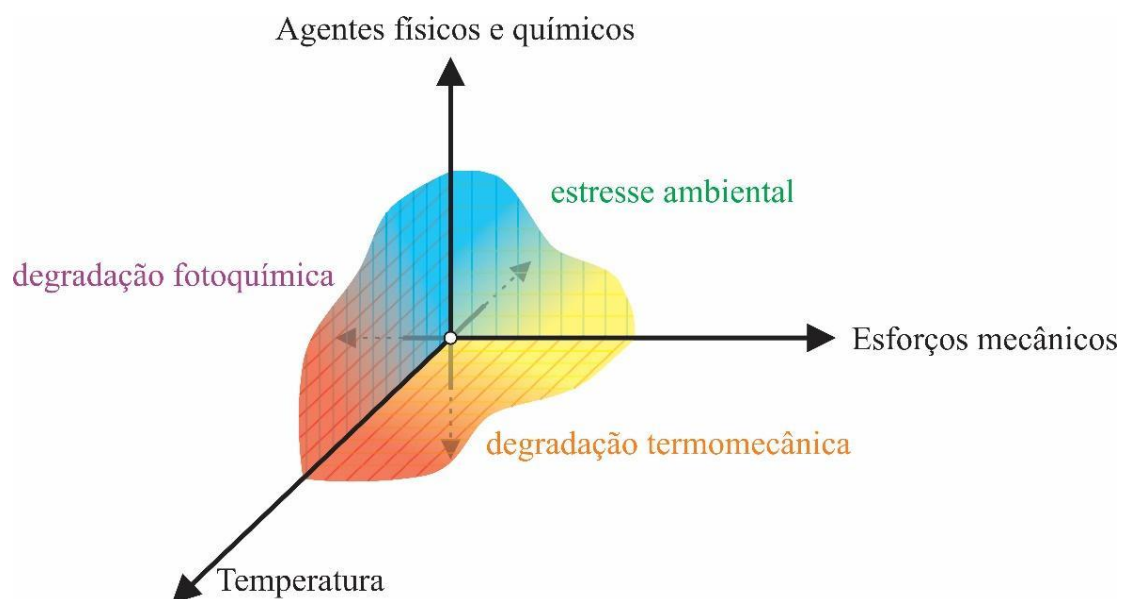
Mesmo com as propriedades da matéria-prima, geralmente não degradáveis a curto período de tempo, os geossintéticos podem sofrer mudanças rápidas, especialmente em projetos que enfrentam condições ambientais adversas, como aterros sanitários, barragens de resíduos industriais, reservatórios e canais, por exemplo. De acordo com [12], a degradação dos geossintéticos pode ser definida como qualquer processo de destruição dos polímeros provocado por fatores físicos, químicos e biológicos. Ressalta-se que a degradação causa uma alteração permanente nas características dos materiais poliméricos, demonstrada pela deterioração gradual, refletindo em mudança em suas propriedades e aspecto visual [6,14].

Na literatura [15] é demonstrado as mudanças no comportamento dos geossintéticos ao longo do tempo devido aos agentes de alteração. Este autor analisa as características de amostras exumadas em variados intervalos de tempo, sugerindo que a degradação pode levar até mesmo à ruptura dos geossintéticos em uma aplicação. [6, 16-17] também apresenta a exumação para a realização de análise do desempenho dos geossintéticos após a utilização, além disso há as simulações em laboratório e técnicas de avaliação da resistência conforme os agentes de alteração.

Na prática, a deterioração de um geossintético pode ser provocada por mais agentes de alteração, que podem ser categorizados em físico, químico e biológico. Os agentes físicos podem ser a radiação solar ou radiações α , β e γ , temperatura, abrasão e danos mecânicos. Agentes químicos são a água, ácidos, bases, solventes e outros agentes químicos, oxigênio, ozônio e poluentes atmosféricos. Já como agentes biológicos, têm-se as ações de microrganismos, tais como fungos e bactérias, os quais na prática promovem a degradação descritas pelos agentes físicos e químicos.

Os agentes de alteração podem mobilizar diversos mecanismos de degradação e, conforme os autores [13, 16-18], os principais mecanismos de degradação dos geossintéticos são provocados pelo efeito da temperatura, por esforços mecânicos e ações dos agentes físicos e químicos, entre eles, pela incidência solar, por expansão devido à absorção de líquidos, por reações químicas, pela extração de um ou mais componentes do material polimérico e pela ação de microrganismos. A Figura 3 exibe um gráfico, apresentando estes mecanismos de degradação e a forma com que ocorrem sob efeito isolado ou em conjunto.

Figura 3 – Efeitos dos mecanismos de degradação nos geossintéticos



Fonte: Autores (2024).

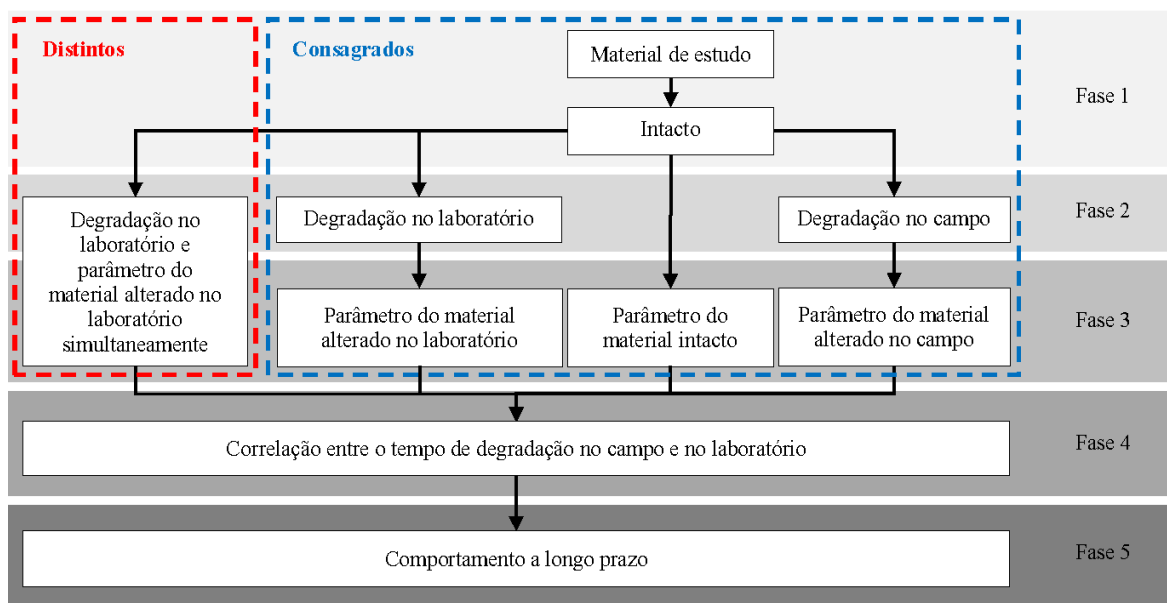
A ideia central da Figura 3 é mostrar que a degradação dos geossintéticos ocorre da combinação ou não entre diferentes mecanismos de degradação. O geossintético, enterrado em solo com função de reforço e aplicado em região com pouca pluviosidade, pode estar sujeito apenas a esforços mecânicos. Já com elevada umidade e chuva, os mecanismos oriundos de agentes físicos e químicos somatizam os efeitos da degradação promovendo o estresse ambiental. Considerando, então, o geossintético exposto na face do talude tem-se todos os mecanismos em ação, ou seja, inclui-se ações fotoquímica e termomecânica. Dessa forma, cada aplicação terá uma combinação diferente.

Portanto, é essencial analisar as alterações nos geossintéticos causadas pela degradação. Essas mudanças podem causar a inviabilização das construções e até eventual colapso. Ademais, a análise da alterabilidade pode determinar a forma mais eficaz de usar geossintéticos conforme sua propensão a degradações conforme o meio ambiente exógeno.

Resultados e Discussões

Com base nos diferentes livros, artigos e normas citados ao longo do capítulo, para apresentar os métodos de envelhecimento acelerado, com destaque para os geotêxteis, foram subdivididas as metodologias entre procedimentos consagrados ou convencionais e distintos ou não convencionais. Além disso, é importante destacar os ensaios de caracterização, os quais são essenciais para analisar as propriedades dos geossintéticos. A Figura 4 mostra as cinco fases envolvidas na previsão do comportamento de longo prazo.

Figura 4 – Metodologia para prever o comportamento a longo prazo dos geossintéticos



Fonte: Adaptado de [19].

Nesta metodologia, a fase 1 é a obtenção do material de estudo. Em seguida, na fase 2, tem-se a produção de amostras com alteração induzida de forma acelerada no laboratório ou com alteração natural no campo. A fase 3 acontece depois da degradação das amostras, em que se faz necessário determinar as propriedades físicas, mecânicas, hidráulicas ou de desempenho, a fim de se obter parâmetros dos geossintéticos alterados. Em paralelo a isso, há métodos que permitem a obtenção de parâmetros que caracterizam o comportamento destes materiais durante o processo de degradação, o qual contempla as fases dois e três simultaneamente. A fase 4 apresenta a variável do tempo correlacionada a uma propriedade do geossintético conforme procedimento de degradação. E por último, a fase 5, finaliza-se a análise dos resultados com a previsão do comportamento do geossintético estudado a longo prazo.

Resumidamente, são estudados os geossintéticos nas condições intactas e degradada. Com a caracterização do material intacto por fluência, por exemplo, é possível obter o comportamento a longo prazo. Se o objetivo for analisar a durabilidade após processo de degradação, com ou sem correlação e orientado pelo ambiente exógeno em que o material será aplicado, faz-se a definição do procedimento adequado para caracterização.

Métodos consagrados ou convencionais

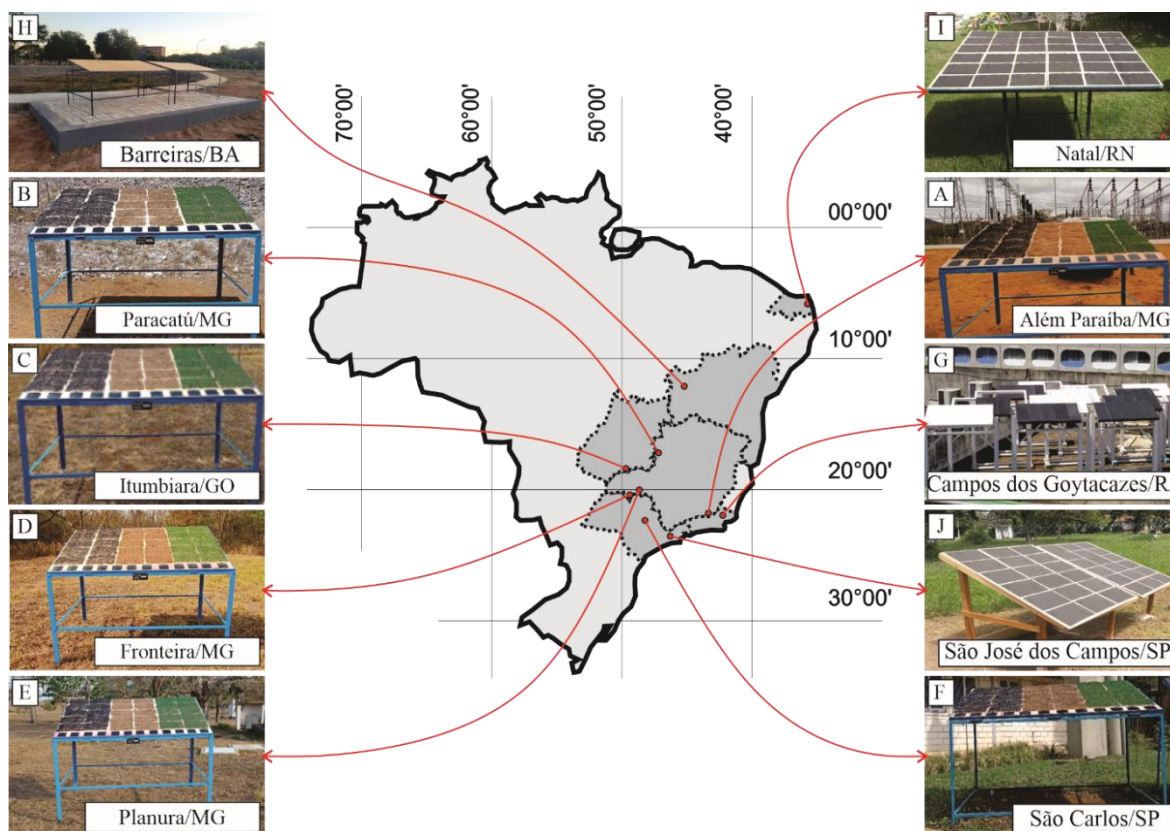
Os métodos consagrados ou convencionais basicamente se dividem em degradação no campo e degradação no laboratório conforme apresentado na Figura 4.

Degradação no campo

Em se tratando de degradação no campo tem-se as referências internacionais [12, 20]. Elas abordam o assunto apresentando os procedimentos necessários para exposição dos geossintéticos em condições naturais. A intenção é fornecer ao usuário, um padrão, pelo

qual avaliar a degradação às intempéries com ênfase na radiação solar de um local em termos de expectativa de vida útil. Assim, devido à variabilidade do clima no mundo, a comparação direta entre dados de teste obtidos a partir de diferentes locais de exposição é difícil. A fim de realizar qualquer tipo de comparação, a radiação solar ultravioleta diária total e acumulada, durante o tempo de exposição natural no campo, deve ser medida durante o período de exposição. As normas sugerem criação de suportes para exposição dos geossintéticos em um ângulo conforme a latitude local (Figura 5), com face voltada para a Linha do Equador. O comportamento do material será definido em função da variação dos parâmetros dos geossintéticos alterados, principalmente quanto a radiação ultravioleta (UV), durante o tempo de exposição.

Figura 5 – Variação da inclinação dos pódicos com a latitude local



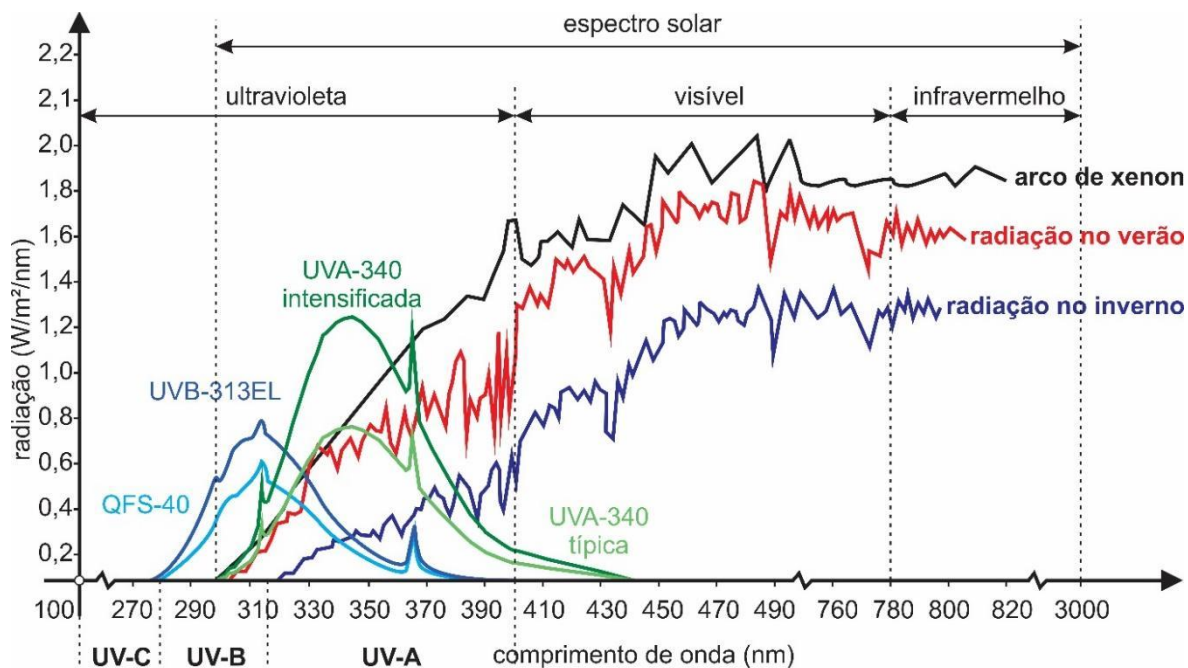
Fonte: Autores (2024).

Conforme pode-se observar na Figura 5, a inclinação dos painéis é menor em Natal/RN e maior em São José dos Campos/SP. Seguindo as letras de A até J, resumidamente tem-se a inclinação de $I < H < B < C < E < D < A < G < F < J$.

[21] analisa os métodos normatizados comparando mudanças em variáveis a exposição em regiões diferenciadas, umidade e ângulo de exposição. A umidade e a inclinação foram trabalhadas em conjunto. Os autores concluíram que há mudança nas características dos materiais provocadas pela exposição conforme as regiões de climas distintos e sair dos limites prescritos em norma pode gerar diferentes resultados em exposições na mesma região. Inclinações maiores facilitam o escoamento da água e quanto mais próximo ela for da latitude, maior será a absorção por radiação.

Para as análises da degradação nestas condições é necessário conhecer a radiação e seu espectro. O espectro solar que atinge a superfície da Terra possui comprimentos de onda compreendidos entre os 295 e os 3000 nm. Ele pode ser dividido em três regiões: radiação UV entre 295 e 400 nm, radiação visível entre 400 e 780 nm e radiação infravermelha entre 780 e 3000 nm, os quais são ilustrados pela Figura 6.

Figura 6 – Espectros de luz natural do sol e artificial de lâmpadas



Fonte: [22].

[12] estabelece que a radiação ultravioleta corresponde a 7,5% da radiação solar global incidente sobre a superfície terrestre. Com base nessa proporção, nos ensaios de exposição à radiação ultravioleta realizados em laboratório, é possível estimar o tempo de ensaio com o valor da radiação global correspondente desejada.

De acordo com [2], a degradação no campo ainda pode ser acelerada com procedimentos especiais conforme a [23]. O método utiliza o equipamento de Fresnel para concentrar a luz solar natural utilizando espelhos altamente reflexivos e ciclos de molhagem e secagem em tempos pré-determinados.

Degradação no laboratório

Em se tratando de degradação no laboratório, por sua vez, possui o método especificado em [12, 24]. O processo é rápido, onde aumenta-se a intensidade dos mecanismos de degradação, e proporciona uma resposta em um curto período de tempo quando comparado aos procedimentos de degradação no campo. Entre os ensaios tem-se a fotodegradação [6], degradação biológica [25], degradação química [5, 26], degradação térmica [19], fluência convencional e acelerada [19, 27-29] e danos mecânicos [30]. É importante destacar que, cada procedimento possui norma para produção e análise dos

resultados, que é baseado nos comportamentos de propriedades do geossintéticos após determinado período de exposição ao mecanismo de degradação acelerado.

Especificamente sobre a fotodegradação tem-se a norma [31] e a Figura 7 destaca lâmpadas comumente utilizadas nesse procedimento de degradação. As lâmpadas UVA 340 nm e UVB 313 nm, por exemplo, apresentam uma irradiância típica de 0,89 e 0,71 W/m².nm, respectivamente. Então, conforme os ciclos dos ensaios, os geossintéticos estarão submetidos a determinada quantidade de horas de radiação UV, e por fim, faz-se necessário o produto da irradiância, comprimento de onda da lâmpada e seu total de horas de utilização, conforme as especificações do ensaio, para cálculo do valor total de radiação UV. Esse valor pode ser comparado diretamente, por um dado período de tempo, a 7,5% da radiação solar global incidente sobre a superfície terrestre.

Os outros procedimentos de degradação fazem parte dos ensaios de caracterização dos geossintéticos, os quais serão apresentados posteriormente em outro tópico.

Métodos distintos ou não convencionais

A partir dos métodos consagrados, alguns autores analisam a interação de mais de um procedimento normatizado para avaliação da durabilidade. Estes métodos fazem análise da sinergia de exposição dos geossintéticos em mais de um mecanismo de degradação. Entre as inúmeras combinações possíveis, destaque para a utilização de termo oxidação e ultravioleta [6, 19, 32-33], exposição natural e imersão em ácidos com temperaturas diferentes [34-36], danos de instalação e exposição natural [30, 37], fluência e exposição natural [27] e ultravioleta e imersão em solução ácida e básica [38].

A escolha dos métodos varia de acordo com a aplicação do geossintético em projeto, que está relacionado a mais de um mecanismo de degradação. Situações específicas, conforme apresentada pelos autores citados no parágrafo anterior, geram esta demanda de ensaios e possibilitaram entender melhor o quanto a sinergia pode contribuir com os estudos de durabilidade dos materiais.

Deve-se destacar que o material no campo está sujeito a solicitações mecânicas e aos efeitos da degradação natural de forma simultânea. Assim, a metodologia proposta pela bibliografia necessita de uma adaptação incluindo os procedimentos de laboratório com solicitações mecânicas e de durabilidade de forma simultânea. Particularmente, a sobreposição de efeitos influencia fundamentalmente o comportamento de fluência, à tração ou punção, associado ao efeito da degradação.

Caracterização dos geossintéticos

Os ensaios de caracterização são fundamentais para análise da durabilidade e podem ser divididos em grupos que analisam propriedades físicas, mecânicas, hidráulicas e desempenho. Eles estão expostos na Tabela 2, acompanhados das normas nacionais e internacionais. É importante destacar que há muito mais normas que o identificado na Tabela 2, uma vez que há especificidades para cada tipo de geossintéticos e com uma busca rápida pelos sites das normas ABNT, ISO e ASTM é possível encontrar todas informações. As normas relacionadas são em sua maior parte para a caracterização realizada nos geotêxteis e produtos correlatos, podendo contemplar as geomembranas. Além destas, há outras variações de procedimento de acordo com o tipo de geossintético

e suas aplicações. [39-40] destacam a importância dos ensaios e, principalmente, da criação de especificações bem definidas em projeto, que permitam a caracterização adequada dos materiais vendidos, ao mesmo tempo em que garantem a qualidade da obra.

Tabela 2 – Caracterização das propriedades do geossintético com ensaios, normas e referências

	Propriedades	Norma	Referências
F í s i c a s	Gramatura	[41-43]	A literatura técnica utiliza as propriedades físicas como informações apenas do material intacto, porém é crescente a utilização desses ensaios para utilização em análises a longo prazo para observação da variação da alteração dos geossintéticos antes e após determinado procedimento de degradação. Entre os principais destaques nessa área tem-se alguns trabalhos com utilização da gramatura [93-97], espessura [5, 93-95], microscopia [6, 14, 34, 93, 98-100] e espectrofotometria ultravioleta e infravermelho [6, 93, 101].
	Espessura nominal	[44-46]	
	Porosidade	-	
	Porcentagem de área aberta	-	
	Microscopia	-	
	Espectrofotometria	[47-49]	
M e c â n i c a s	Compressibilidade	[50-52]	Os ensaios de caracterização das propriedades mecânicas estão entre os métodos mais comuns para utilizar em geossintético, seja em material intacto, seja em material após procedimento de degradação. É sempre importante destacar que os ensaios são realizados em função das solicitações que as aplicações estarão sujeitas nas obras de engenharia. Sendo assim, é fácil encontrar na literatura conteúdo diversificado sobre o assunto e cabe ao pesquisador filtrar o que mais interessa. Entre os diversos trabalhos sobre a durabilidade dos geossintéticos e utilização de propriedades mecânicas, como principal fonte de informação, tem-se os autores [6, 93-97, 98, 100, 102]. Já sobre os assuntos mais abordados de forma específica estão os trabalhos com ensaios de fluência e suas variações [19, 103-106], além dos ensaios de tração e puncionamento [34, 107-112].
	T Convencional	[53-55]	
	r Faixa estreita	[56]	
	ç Multidirecional	[57]	
	ã Estática	[58-60]	
	o Dinâmica	[61-62]	
	P Propagação de rasgo	[63]	
	ç Estouro	[64]	
	ã Tração	[65-67]	
	o Compressão	[50-52, 68]	
H i d r á u l i c a	Permissividade	[69-71]	Os ensaios relacionados as propriedades hidráulicas não estão entre os mais utilizados, uma vez que as aplicações são restritas a projetos com fluxo de fluido, ainda assim a literatura apresenta trabalhos na área que caracterizam em condição intacta e alterada [94, 100, 113-115].
	Transmissividade	[72-74]	
	Abertura de Filtração	[75-77]	
D e s	Tração confinada	-	A propriedade de desempenho possui os ensaios relativamente mais complexos, pois tentam reproduzir melhor as condições da aplicação na qual o geossintético
	Punção confinada	-	

e	Fluência confinada	-	está exposto na obra [116]. Entre a grande diversidade de ensaios tem-se os confinados, os quais são semelhantes aos testes das propriedades mecânicas, porém o material está em contato com o solo, condição na qual é recorrente em obras geotécnicas [108, 117].
m	R	Radiação ultravioleta	[31, 78-80]
p	e	Química	[81-82]
e	s	Biológica	[83]
n	i	Térmica	-
h	s	Arrancamento	-
o	t	Cisalhamento direto	[84-86]
	ê	Plano inclinado	[87-88]
	n	Abrasão	[89-90]
	c	Filtração de longa duração	[91]
	i	Danos de instalação	[92]
	a		Filtração de longa duração está presente em um trabalho de durabilidade focado em colmatção [100]. Já a abrasão e danos mecânicos é o destaque em [125].

Fonte: Autores (2024).

A Tabela 2 não é completa com relação as normas e ensaios que são possíveis realizar para caracterização dos geossintéticos intacto e degradado, porém contempla os procedimentos utilizados mais importantes, os quais são destacados pelas referências. A seguir um pouco mais das propriedades dos geossintéticos:

Propriedades físicas

As propriedades físicas dos geossintéticos de maior interesse são massa por unidade de área, comumente conhecida como gramatura, espessura nominal, porosidade e porcentagem de área aberta. São consideradas propriedades-índices, que servem para identificar os produtos. Já a microscopia e espectrofotometria surgem como formas de caracterização complementar, além de ser uma forma importante de entender e explicar alterações nas propriedades do geotêxteis após procedimento de degradação.

Em se tratando de estudos sobre análise das propriedades físicas durante o período de degradação, destaque para [95], em que foi estudado geotêxteis não tecidos em polipropileno e observou-se redução de gramatura e espessura das amostras na ordem de 30%, por outro lado em [26, 126], os artigos sobre geomembranas em polietileno de alta densidade, não foi observado variação significativa. Basicamente a grande diferença entre os resultados dá-se, além das características distintas de tipo de geossintético e polímero base, pelo uso de aditivo estabilizante utilizado no material do segundo trabalho.

O trabalho de revisão [101] e aplicação [6, 93] das técnicas de espectrofotometria e microscopia, por sua vez, são promissores para análises qualitativas e quantitativas dos geotêxteis intactos e após procedimento de degradação. Eles permitem avaliar o quanto foi absorvido de radiação e a quebra de ligações químicas, o que torna possível estimar a resistência do material.

Propriedades mecânicas

As técnicas e resultados obtidos dos ensaios citados já são difundidas no meio profissional e acadêmico. Dessa forma o grande destaque é o trabalho [107]. No artigo foi utilizado ensaio de puncionamento para análise das tensões e deformações dos geotêxteis durante o teste. O artigo apresenta equações matemáticas que apresentaram uma boa correlação dos resultados obtidos entre ensaios de puncionamento CBR, mini CBR, o qual apresenta um pistão 3 vezes menor que o tradicional de 50 mm, e tração. Além disso foi obtido o coeficiente de Poisson para as condições apresentadas e, conseqüentemente, expandir o conhecimento para aplicações práticas na engenharia.

Propriedades hidráulicas

A metodologia dos ensaios e sua caracterização já são conhecidas e em [114-115] os autores apresentam procedimentos não normatizado, mas que conseguiram excelente representação do procedimento e resultados para a caracterização, principalmente com o ensaio de transmissividade adaptado de equipamento triaxial, o qual permite compressão dos corpos de prova de geotêxteis bem maiores que as usuais.

Propriedades desempenho

Em relação ao comportamento do geossintético frente às aplicações mais condizentes com a realidade, os autores buscam em seus trabalhos a representatividade da aplicação em função do meio exógeno. O trabalho [108], por exemplo, apresenta o ensaio de puncionamento considerando o contato com o solo. Foi observado o incremento da resistência do conjunto e diminuição das deformações. O parâmetro avaliado foi a densidade do solo, o qual contribui proporcionalmente a resposta dos testes. De forma similar [117] apresenta a fluência em confinamento em diferentes condições dos solos utilizados, uma geogrelha e dois tipos de geotêxteis e procedimento acelerado. O trabalho foi pioneiro no assunto e permitiu, com o equipamento construído, evidenciar um comportamento diferente do ensaio tradicional em laboratório.

Outras contribuições específicas estão relacionadas a degradação por agentes químicos, muito utilizados nos trabalhos dos autores [5, 26], os quais são grandes referências técnicas que trabalham com geotêxteis e geomembranas, respectivamente. Esses procedimentos de ensaios são bem representativos das condições exógenas em que há variações do pH nos locais da aplicação dos geotêxteis e também muito utilizado em geomembranas.

Os autores em [121] apresentaram um contexto mais amplo e que representa grande parte das últimas contribuições referentes a procedimento de degradação acelerada. No trabalho foi apresentado fluência sob condições aceleradas em ciclos de umedecimento e secagem, a fim de promover uma caracterização mais fiel às aplicações costeiras e ribeirinhas de geotêxteis aplicados como formas têxteis tubulares.

Em projetos envolvendo reforço de taludes e aterros é muito importante também a interação solo-geossintético. No artigo [122], por exemplo, nos ensaios de tração confinados em geogrelhas observou-se menor rigidez de tração secante quando embutida em solo compactado úmido no ponto ótimo, porém o comportamento tensão-deformação foi melhorado como um todo. Já em [123] abordou-se aterros sobre colunas encamisadas

em análises numéricas, onde estudou-se o comportamento da consolidação dos recalques e as tensões do reforço. E finalmente, a influência da rigidez geotêxteis e geogrelha em soluções analíticas para aterro reforçado sobre vazio foi o tema do artigo [124]. Os autores estudaram o limite de rigidez do reforço em projetos com essa peculiaridade. Em comum, os trabalhos apresentados contemplam pesquisas de grupos que desenvolvem bons projetos na área e são referências em análises que envolvem estabilidade dessas estruturas.

Por fim, outros pesquisadores que se destacam em suas respectivas áreas, encerram a análises das propriedades de desempenho com ensaios em filtros colmatados [3, 100], já em [30, 37, 125] são apresentadas experiências com processos abrasivos e avarias em procedimentos de instalação.

Conclusões

Este capítulo de livro apresentou uma revisão ampla sobre estudos de durabilidade de geossintéticos com destaque para os geotêxteis e produtos correlatos, apresentando desde técnicas simples de ensaios até o envelhecimento acelerado, ambos casos contemplando referências e normas especializadas.

Considerando as principais matérias-primas utilizadas na fabricação dos geossintéticos, os polipropilenos e poliésteres são os mais utilizados. Independentemente do polímero base, é importante conhecer suas características para melhor direcionar sua aplicação. E com os aditivos estabilizantes, por sua vez, torna-se ainda mais importante avaliar a durabilidade do material conforme os parâmetros de interesse.

As metodologias para prever o comportamento de longo prazo dos geossintéticos apresentaram as formas de estimar a durabilidade de forma convencional e não convencional. As normas técnicas e principais artigos científicos mostram que os ensaios consagrados continuam sendo amplamente utilizados. No entanto, vale destacar que os estudos atuais, que adaptam a metodologia de acordo com a aplicação dos materiais em projetos, são uma forma mais adequada para avaliar a durabilidade.

Em relação à caracterização dos geossintéticos, a escolha dos métodos de ensaio depende da sua aplicação. São apresentadas normas referentes às propriedades físicas, mecânicas, hidráulicas e de desempenho. Por fim, fica claro que sempre haverá a necessidade de caracterizar os materiais, principalmente em estudos de durabilidades, de forma garantir a aplicação ao longo dos anos.

Agradecimentos

Este estudo foi financiado em parte pelo Projeto Universal CNPq - Processo: 422116/2023-8: Durabilidade de geossintéticos sob diferentes condições de envelhecimentos naturais e acelerados.

Referências

1. J. L. E. Dias Filho *et al.* Natural weathering effects of nonwoven geotextile exposed to different climate conditions. *Geosynthetics International* 2024, 1. <https://doi.org/10.1680/jgein.23.00156>.
2. L. D. Suits; Y. G. Hsuan. Assessing the photo-degradation of geosynthetics by outdoor exposure and laboratory weatherometer. *Geotextile and Geomembranes* 2003, 21, 111. [https://doi.org/10.1016/S0266-1144\(02\)00068-7](https://doi.org/10.1016/S0266-1144(02)00068-7).
3. M. G. A. Guimarães; D. C. Urashima; D. M. Vidal. Dewatering of sludge from a water treatment plant in geotextile closed systems. *Geosynthetics International* 2014, 21, 310. <https://doi.org/10.1680/gein.14.00018>.
4. R. M. Koerner; Y. G. Hsuan; G. R. Koerner. *Geosynthetics International* 2017, 24, 198. <https://doi.org/10.1680/jgein.16.00026>.
5. J. R. Carneiro; M. Morais; M. L. Lopes. Degradation of polypropylene geotextiles with different chemical stabilisations in marine environments. *Construction and Building Materials* 2018, 165, 877. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.01.067>.
6. J. L. E. Dias Filho; P. C. A. Maia; G. C. Xavier. Spectrophotometry as a tool for characterizing durability of woven geotextiles. *Geotextile and Geomembranes* 2019, 47, 577. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2019.02.002>.
7. F. B. Abdelaal; R. K. Rowe; M. Z. Islam. Effect of leachate composition on the long-term performance of a HDPE geomembrane. *Geotextile and Geomembranes* 2014, 42, 348. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2014.06.001>.
8. F. L. Lavoie *et al.* Evaluation of exhumed HDPE geomembranes used as a liner in Brazilian shrimp farming ponds. *Case Studies in Construction Materials* 2022, 16, 1. <https://doi.org/10.1016/j.cscm.2021.e00809>.
9. R. M. Koerner, *Designing with geosynthetics*, 5th. ed., Prentice-Hall, Upper Saddle River, 2012.
10. T. S. Ingold, *The geotextiles and geomembranes manual*, Elsevier, Oxford, 1994.
11. N. W. M. John, *Geotextiles*, Chapman and Hall. New York, 1987.
12. International Organization for Standardization. *ISO/TS 13434: geosynthetics: guidelines for the assessment of durability*. International Organization for Standardization, Geneve. 2016.
13. J. L. E. Dias Filho; P. C. A. Maia. Análise crítica de procedimentos de ensaios de durabilidade em geossintéticos. *Revista Fundações & Obras Geotécnicas* 2017, 84, 29. https://issuu.com/editorarudder/docs/revista_fundac__o_es_84_issuu.
14. C. A. Valentin *et al.* Study of the ultraviolet effect and thermal analysis on polypropylene nonwoven geotextile. *Materials* 2021, 14, 1. <https://doi.org/10.3390/ma14051080>.
15. G. P. Raymond. Railway rehabilitation geotextiles. *Geotextiles and Geomembranes* 1999, 17, 213. [https://doi.org/10.1016/S0266-1144\(99\)00002-3](https://doi.org/10.1016/S0266-1144(99)00002-3).
16. M. Abramento. Durabilidade e comportamento de longo prazo de geossintéticos: parte 1: propriedades mecânicas e hidráulicas. *Geossintéticos* 1995, 95, 216.
17. M. Abramento. Durabilidade e comportamento de longo prazo de geossintéticos: parte 2: durabilidade dos materiais. *Geossintéticos* 1995, 95, 226.
18. J. Budiman in 5th International Conference on Geotextiles, Geomembranes and Related Products. Effects of temperature on physical behavior of geomembrane. Singapore, 1994, Vol. 1, 1093.
19. J. L. E. Dias Filho; P. C. A. Maia. A non-conventional durability test for simulating creep of geosynthetics under accelerated degradation. *International Journal of*

- Geosynthetics and Ground Engineering 2021, 7, 1. <https://doi.org/10.1007/s40891-021-00310-w>.
20. American Society of Testing Materials, *D5970: standard test method for deterioration of geotextiles from outdoor exposure*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2021.
 21. H. K. Hardcastle; W. L. Meeks. Considerations for characterizing moisture effects in coatings weathering studies. *Journal of Coatings Technology and Research* 2008, 5, 181. <https://doi.org/10.1007/s11998-007-9078-0>.
 22. J. L. E. Dias Filho *et al.* Degradação de geotêxteis tecidos por radiação ultravioleta in XVIII Congresso Brasileiro de Mecânica dos Solos e Engenharia Geotécnica, Belo Horizonte, 2016, Vol. 1, 1.
 23. American Society of Testing Materials, *G90: standard practice for performing accelerated outdoor weathering of nonmetallic materials using concentrated natural sunlight*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2010.
 24. American Society of Testing Materials, *D5819: standard guide for selecting test methods for experimental evaluation of geosynthetic durability*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2005.
 25. S. Sumi; N. Unnikrishnan; L. Mathew. Durability studies of surface-modified coir geotextiles. *Geotextiles and Geomembranes* 2018, 46, 699. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2018.07.007>.
 26. R. A. Silva; F. B. Abdelaal; R. K. Rowe. A 9-year study of the degradation of a HDPE geomembrane liner used in different high pH mining applications. *Geotextiles and Geomembranes* 2025, 53, 230. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2024.09.012>.
 27. M. G. A. Guimarães; D. M. Vidal; D. C. Urashima; C. A. C. Castro. Degradation of polypropylene woven geotextile: tensile creep and weathering. *Geosynthetics International* 2017, 24, 213. <https://doi.org/10.1680/jgein.16.00029>.
 28. J. L. E. Dias Filho; P. C. A. Maia; G. C. Xavier. A short-term model for extrapolating unconfined creep deformation data for woven geotextiles. *Geotextiles and Geomembranes* 2019, 47, 792. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2019.103492>.
 29. Y. Zhao *et al.* A fast and precise methodology of creep master curve construction for geosynthetics based on stepped isothermal method (SIM). *Geotextile and Geomembranes* 2021, 49, 952. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2021.01.005>.
 30. M. Pinho-Lopes; A. M. Paula; M. L. Lopes. Long-term response and design of two geosynthetics: effect of field installation damage. *Geosynthetic International* 2018, 25, 98. <https://doi.org/10.1680/jgein.17.00036>.
 31. American Society of Testing Materials, *G154: standard practice for operating fluorescent ultraviolet (UV) lamp apparatus for exposure of nonmetallic materials*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2016.
 32. J. R. Carneiro; P. J. Almeida; M. L. Lopes. Some synergisms in the laboratory degradation of a polypropylene geotextile. *Construction and Building Materials* 2014, 73, 586. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2014.10.001>.
 33. P. Gijssman; J. Sampers. The influence of oxygen pressure and temperature on the UV-degradation chemistry of polyethylene. *Polymer Degradation and Stability* 1997, 58, 55. [https://doi.org/10.1016/S0141-3910\(97\)00012-8](https://doi.org/10.1016/S0141-3910(97)00012-8).
 34. R. Carneiro; M. L. Lopes. Natural weathering of polypropylene geotextiles treated with different chemical stabilisers. *Geosynthetics International* 2017, 24, 544. <https://doi.org/10.1680/jgein.17.00020>.
 35. J. R. Carneiro; P. J. Almeida; M. L. Lopes. Laboratory Evaluation of Interactions in the Degradation of a Polypropylene Geotextile in Marine Environments. *Advances in Materials Science and Engineering* 2018, 1. <https://doi.org/10.1155/2018/9182658>.

36. D. G. Grubb; W. E. Dising III; S. C. J. Cheng. High Altitude Exposure Testing of Geotextiles in the Peruvian Andes. *Geosynthetics International* 1999, 6, 119. <https://doi.org/10.1680/gein.6.0146>.
37. F. Almeida *et al.* Resistance of geosynthetics against the isolated and combined effect of mechanical damage under repeated loading and abrasion. *Materials* 2019, 12, 1. <https://doi.org/10.3390/ma12213558>.
38. M. G. A. Guimarães *et al.* Durability of a polypropylene woven geotextile under climatic and chemical agents. *Modern Environmental Science and Engineering* 2015, 1, 172. [https://doi.org/10.15341/mese\(23332581\)/04.01.2015/002](https://doi.org/10.15341/mese(23332581)/04.01.2015/002).
39. F. T. Montez. Especificação de geotêxteis em projetos: situação brasileira e internacional in *Anais do II Simpósio Brasileiro sobre Aplicações de Geossintéticos*, São Paulo, 1995, Vol. 1, 237.
40. R. O. Gomes; D. M. Vidal. Importância da Garantia de Qualidade dos Resultados de Ensaio em Laboratórios Certificados in *XII Congresso Brasileiro de Mecânica dos Solos e Engenharia Geotécnica*, São Paulo, 2002. Vol. 1, p. 6.
41. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 9864: geossintéticos: método de ensaio para determinação da massa por unidade de área de geotêxteis e produtos correlatos*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro. 2013.
42. International Organization for Standardization, *ISO 9864: geosynthetics; test method for the determination of mass per unit area of geotextiles and geotextile-related products*, International Organization for Standardization, Geneve. 2005.
43. American Society for Testing and Materials, *D5261: standard test method for measuring mass per unit area of geotextiles*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2010.
44. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 9863-1: geossintéticos: determinação da espessura a pressões especificadas*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
45. International Organization for Standardization, *ISO 9863-1: geosynthetics: determination of thickness at specified pressures: part 1: single layers*, International Organization for Standardization, Geneve, 2016.
46. American Society for Testing and Materials, *D5199: standard test method for measuring the nominal thickness of geosynthetics*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2012.
47. International Organization for Standardization, *ISO 10640: plastics: methodology for assessing polymer photoageing by FTIR and UV/visible spectroscopy*, International Organization for Standardization, Geneve, 2016.
48. American Society for Testing and Materials, *D2702: standard practice for rubber chemicals: determination of infrared absorption characteristics*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2005.
49. American Society for Testing and Materials, *E169-16: standard practices for general techniques of ultraviolet-visible quantitative analysis*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2022.
50. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 25619-1: geossintéticos: determinação do comportamento em compressão*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
51. International Organization for Standardization, *ISO 25619-1: geosynthetics: determination of compression behavior: part 1: compressive creep properties*, International Organization for Standardization, Geneve, 2012.

52. American Society for Testing and Materials, *D6364-06: standard test method for determining short-term compression behavior of geosynthetics*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2011.
53. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 10319: geossintéticos: ensaio de tração faixa larga*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
54. International Organization for Standardization, *ISO 10319: geosynthetics: wide-width tensile test*, International Organization for Standardization, Geneve, 2015.
55. American Society for Testing and Materials, *D4595-11: standard test method for tensile properties of geotextiles by the wide-width strip method*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2017.
56. American Society for Testing and Materials, *D5035-11: standard test method for breaking force and elongation of textile fabrics (strip method)*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2015.
57. American Society for Testing and Materials, *D5716/D5716M: standard test method for bursting strength of textile fabrics—diaphragm bursting strength tester method*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2018.
58. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 12236: geossintéticos: ensaio de punçionamento estático (punção CBR)*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
59. International Organization for Standardization, *ISO 12236: geosynthetics: static puncture test (CBR test)*, International Organization for Standardization, Geneve, 2016.
60. American Society for Testing and Materials, *D6241: standard test method for static puncture strength of geotextiles and geotextile-related products using a 50-mm probe*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2014.
61. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 13433: geossintéticos: ensaio de perfuração dinâmica (ensaio de queda de cone)*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
62. International Organization for Standardization, *ISO 13433: geosynthetics: dynamic perforation test (cone drop test)*, International Organization for Standardization, Geneve, 2016.
63. American Society for Testing and Materials, *D4533/D4533M: standard test method for trapezoid tearing strength of geotextiles*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2015.
64. American Society for Testing and Materials, *D3786/D3786M: standard test method for bursting strength of textile fabrics: diaphragm bursting strength tester method*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2013.
65. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR 15226: geossintéticos: determinação do comportamento em deformação e na ruptura*, por fluência sob tração não confinada, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2005.
66. International Organization for Standardization, *ISO 13431: geotextiles and geotextile-related products: determination of tensile creep and creep rupture behaviour*, International Organization for Standardization, Geneve, 2016.
67. American Society for Testing and Materials, *D5262: standard test method for evaluating the unconfined tension creep and creep rupture behavior of geosynthetics*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 1997.
68. American Society for Testing and Materials, *D7361-07: standard test method for accelerated compressive creep of geosynthetic materials based on time-temperature*

- superposition using the stepped isothermal method*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2018.
69. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 11058: geotêxteis e produtos correlatos: determinação das características de permeabilidade hidráulica normal ao plano e sem confinamento*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
 70. International Organization for Standardization, *ISO 11058: geotextiles and geotextile-related products: determination of water permeability characteristics normal to the plane, without load*, International Organization for Standardization, Geneve, 2016.
 71. American Society for Testing and Materials, *D5493-06: standard test method for permissivity of geotextiles under load*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2016.
 72. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 12958: geotêxteis e produtos correlatos: determinação da capacidade de fluxo no plano*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
 73. International Organization for Standardization, *ISO 12958: geotextiles and geotextile-related products: determination of water flow capacity in their plane*, International Organization for Standardization, Geneve, 2016.
 74. American Society for Testing and Materials, *D4716/D4716M: standard test method for determining the (in-plane) flow rate per unit width and hydraulic transmissivity of a geosynthetic using a constant head*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2014.
 75. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 12956: geotêxteis e produtos correlatos: determinação da abertura de filtração característica*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
 76. International Organization for Standardization, *ISO 12956: geotextiles and geotextile-related products: determination of the characteristic opening size*, International Organization for Standardization, Geneve, 2014.
 77. American Society for Testing and Materials, *D4751: standard test methods for determining apparent opening size of a geotextile*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2016.
 78. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR 15380: tintas para construção civil: método para avaliação de desempenho de tintas para edificações não industriais: resistência à radiação UV e à condensação de água pelo ensaio acelerado*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2016.
 79. International Organization for Standardization, *ISO 16474-1: paints and varnishes: methods of exposure to laboratory light sources: part 1: general guidance*, International Organization for Standardization, Geneve, 2013.
 80. American Society for Testing and Materials, *D4355: standard test method for deterioration of geotextiles by exposure to light, moisture and heat in a xenon arc type apparatus*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2002.
 81. International Organization for Standardization, *ISO/TR 12960: geotextiles and geotextile-related products: screening test method for determining the resistance to liquids*, International Organization for Standardization, Geneve, 2016.
 82. American Society for Testing and Materials, *D6389: standard practice for tests to evaluate the chemical resistance of geotextiles to liquids*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 1999.

83. American Society for Testing and Materials, *D1987: standard test method for biological clogging of geotextile or soil/geotextile filters*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2007.
84. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 12957-1: geossintéticos: determinação das características de atrito*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
85. International Organization for Standardization, *ISO 12957-1: geosynthetics: determination of friction characteristics: part 1: direct shear test*, International Organization for Standardization, Geneve, 2015.
86. American Society for Testing and Materials, *D5321/D5321M: standard test method for determining the shear strength of soil-geosynthetic and geosynthetic-geosynthetic interfaces by direct shear*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2014.
87. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR ISO 12957-2: geossintéticos: determinação das características de atrito*, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, 2013.
88. International Organization for Standardization, *ISO 12957-2: geosynthetics: determination of friction characteristics: part 2: inclined plane test*, International Organization for Standardization, Geneve, 2015.
89. International Organization for Standardization, *ISO 13427: geosynthetics: abrasion damage simulation (sliding block test)*, International Organization for Standardization, Geneve, 2014.
90. American Society for Testing and Materials, *D4886: standard test method for abrasion resistance of geotextiles (sand paper/sliding block method)*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2010.
91. American Society for Testing and Materials, *D5101: standard test method for measuring the filtration compatibility of soil-geotextile systems*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2012.
92. American Society for Testing and Materials, *D5818: standard practice for exposure and retrieval of samples to evaluate installation damage of geosynthetics*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, 2011.
93. J. R. Carneiro; P. J. Almeida; M. L. Lopes. Evaluation of the resistance of a polypropylene geotextile against ultraviolet radiation. *Microscopy and Microanalysis* 2019, 25, 196. <https://doi.org/10.1017/S1431927618000430>.
94. J. R. Carneiro; M. Morais; M. L. Lopes. Weathering of a nonwoven polypropylene geotextile: field vs. laboratory exposure. *Materials* 2022, 15, 1. <https://doi.org/10.3390/ma15228216>.
95. M. A. Aparicio-Ardila *et al.* Evaluating the degradation of a nonwoven polypropylene geotextile exposed to natural weathering for 3 years. *International Journal of Geosynthetics and Ground Engineering* 2021, 7, 1. <https://doi.org/10.1007/s40891-021-00314-6>.
96. D. G. Grubb *et al.* Comparison of geotextile durability to outdoor exposure conditions in the Peruvian Andes and the southeastern USA *Geosynthetics International* 2000, 1, 23. <https://doi.org/10.1680/gein.7.0164>.
97. D. G. Grubb *et al.* Comparison of the durability of geotextiles in an alkaline mine tailings environment. *Geosynthetics International* 2001, 8, 49. <https://doi.org/10.1680/gein.8.0186>.
98. M. A. Aparicio-Ardila *et al.* Semi-rigid erosion control techniques with geotextiles applied to reservoir margins in hydroelectric power plants, Brazil. *Water* 2021, 13, 1. <https://doi.org/10.3390/w13040500>.

99. Y. B. Franco *et al.* Accelerated aging ultraviolet of a PET nonwoven geotextile and thermoanalytical evaluation. *Materials* 2022, 15, 1. <https://doi.org/10.3390/ma15124157>.
100. C. Xu *et al.* Long-term permeability tests on clogging and permeability of nonwoven geotextile filtering silty clay. *The Journal of the Textile Institute* 2022, 114, 1704. <https://doi.org/10.1080/00405000.2022.2145443>.
101. J. L. E. Dias Filho; E. S. N. Cruz Junior; P. C. A. Maia. Revisão crítica da utilização da espectrofotometria para a caracterização de geossintéticos in *Anais do IX Congresso Brasileiro de Geossintéticos*, Salvador, 2023, Vol. 1.
102. J. L. E. Dias Filho *et al.* Evaluation of tensile properties in geotextile fabrics by varying the width of the sample in *Proceedings of 10th International Conference on Geosynthetics*, Berlin, 2014, Vol. 1.
103. M. P. Fleury *et al.* Creep behaviour of recycled poly(ethylene) terephthalate non-woven geotextiles. *Polymers* 2021, 13, 1. <https://doi.org/10.3390/polym13050752>.
104. R. J. Bathurst; B. Huang; T. M. Allen. Interpretation of laboratory creep testing for reliability-based analysis and load and resistance factor design (LRFD) calibration. *Geosynthetics International* 2012, 19, 39. <https://doi.org/10.1680/gein.2012.19.1.39>.
105. J. L. E. Dias Filho. Assessment of creep behavior in aged geotextiles in *Proceedings of 12th International Conference on Geosynthetics*, Roma, 2023, Vol. 1.
106. J. L. E. Dias Filho *et al.* Woven geotextile nonconventional creep test performed with static puncture test in *Proceedings of 3rd Pan-American Regional Conference on Geosynthetics*, Buenos Miami, 2016, Vol. 1.
107. J. L. E. Dias Filho, B. R. F. Corrêa; P. C. A. Maia. Stress-strain behavior of geotextile: A proposed new indirect calculation using the static puncture test (CBR test). *Geotextiles and Geomembranes* 2022, 50, 163. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2021.10.001>.
108. J. L. E. Dias Filho *et al.* CBR Test in geosynthetics with confined support using sands. *The Electronic Journal of Geotechnical Engineering* 2016, 21, 1681.
109. J. L. E. Dias Filho *et al.* Estudo do puncionamento confinado em areias para análise do comportamento tensão deformação em geotubos in *Anais do in VII Congresso Brasileiro de Geossintéticos*, Brasília, 2015, Vol. 1.
110. J. L. E. Dias Filho *et al.* Determinação indireta da tração de geotêxteis tecidos através de ensaios de puncionamento in *Anais do XVII Congresso Brasileiro de Mecânica dos Solos e Engenharia Geotécnica*, Goiânia, 2014, Vol. 1.
111. J. L. E. Dias Filho *et al.* Analysis of indirect tension in woven geotextile through non-standardized test in *Proceedings of XV Pan-American Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering*, Buenos Aires, 2015, Vol. 1.
112. B. R. F. Correa *et al.* Análise do comportamento tensão vs. deformação de geotêxteis tecidos submetidos a ensaios de tração não confinada em diferentes tipos de garra in *Anais do VII Congresso Brasileiro de Geossintéticos*, Brasília, 2015, Vol. 1.
113. C. Guo *et al.* Permeability prediction in geotextile envelope after chemical clogging: a coupled model. *Geotextiles and Geomembranes* 2022, 50, 1172. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2022.08.002>.
114. L. K. Nascimento; J. L. E. Dias Filho; P. C. A. Maia. Ensaios de permeabilidade em fluxo no plano em geotêxteis tecidos com procedimento não normatizado *Anais do in Congresso Brasileiro de Geossintéticos*, São Carlos, 2019, Vol. 1, 43.

115. L. K. Nascimento; J. L. E. Dias Filho; P. C. A. Maia. Geosynthetic's non-standardized hydraulic tests in Proceedings of 4th Pan American Conference on Geosynthetics, Rio de Janeiro, 2020, Vol. 1.
116. Prellwitz, M. F.; P. C. A. Maia; J. L. E. Dias Filho. Influence of drying temperature on punching resistance in geotextile fabrics through wet and dry degradation test in Proceedings of 10th International Conference on Geosynthetics, Berlim, 2014, Vol. 1.
117. F. A. N. França; B. S. Bueno. Creep behavior of geosynthetics using confined-accelerated tests. *Geosynthetics International* 2011, 18, 242. <https://doi.org/10.1680/gein.2011.18.5.242>.
118. P. C. A. Maia; J. L. E. Dias Filho; G. C. Xavier. Procedure to determination of durability parameter in geosynthetics in Proceedings of 19th International Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering, Seoul, 2017, Vol. 1, 2007.
119. J. L. E. Dias Filho; P. C. A. Maia; G. C. Xavier. Durability Characterizing of Woven Geotextiles Container System in 4th Pan American Conference on Geosynthetics, Rio de Janeiro, 2020, Vol. 1.
120. J. L. E. Dias Filho; J. L. Silva. Review of accelerated aging methods for geotextiles in Proceedings of 5th Pan-American Conference on Geosynthetics, Toronto, 2024, Vol. 1.
121. J. L. E. Dias Filho; G. D. Venancio; P. C. A. Maia. Avaliação de procedimento de degradação de geossintéticos por ciclos de umedecimento e secagem in Anais do XX Congresso Brasileiro de Mecânica dos Solos e Engenharia Geotécnica, Campinas, 2022, Vol. 1, 4765.
122. S. Balakrishnan; B. V. S. Viswanadham. Evaluation of tensile load-strain characteristics of geogrids through in-soil tensile tests. *Geotextile and Geomembranes* 2017, 45, 35. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2016.07.002>.
123. K. W. Liu *et al.* Long-term reinforcement strains for column supported embankments with viscous reinforcement by FEM. *Geotextile and Geomembranes* 2017, 45, 307. <https://doi.org/10.1016/j.geotexmem.2017.04.003>.
124. F. M. Naftchali; R. J. Bathurst. Influence of geosynthetic stiffness on analytical solutions for reinforced fill over void. *Geosynthetics International* 2021, 30, 95. <https://doi.org/10.1680/jgein.21.00015a>.
125. M. Pinho-Lopes; A. M. Paula; M. L. Lopes. Long-term response and design of two geosynthetics: effect of field installation damage. *Geosynthetics International* 2018, 25, 98. <https://doi.org/10.1680/jgein.17.00036>.
126. J. L. E. Dias Filho *et al.* Resistência e rigidez de geomembranas de PEAD expostas em painéis localizados em regiões brasileiras in Anais do XXI Congresso Brasileiro de Mecânica dos Solos e Engenharia Geotécnica, Balneário Camboriú, 2024, Vol. 1, 1.

Seção 4
Mecânica dos Sólidos



CAPÍTULO 6

ANÁLISE DE GEOMETRIAS APARADAS PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO ISOGEOMÉTRICO

Matheus Rocha^{1*}, Edson Denner Leonel¹

*1 – Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos (EESC),
Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, SP, Brasil*

**rocha.matheus@usp.br*

Resumo – O Método dos Elementos de Contorno Isogeométrico (MECIG) é uma técnica numérica para resolução de problemas de valor de contorno exclusivamente a partir das grandezas do problema descritas no contorno do sólido em estudo. Neste método, geometria e campos mecânicos utilizam curvas isogeométricas em sua descrição, reduzindo erros de discretização. Adicionalmente, o acoplamento entre o MECIG e modelos CAD (Computer Aided Design) torna-se natural, uma vez que tais modelos representam exclusivamente o contorno do componente, sendo diretamente a malha exigida pelo MECIG. Contudo, a representação de superfícies contendo detalhes ou furos exige a aparação da superfície no contexto da análise isogeométrica. Assim, incorporar a aparação no MECIG permite a aplicação do método em uma gama maior de geometrias. Nesse contexto, este estudo apresenta as alterações necessárias para a incorporação das superfícies aparadas no MECIG. Particularmente, três etapas merecem destaque: a identificação de regiões aparadas, a integração desse contorno, e a estratégia de colocação adaptada. Dessa forma, a validação da formulação ocorre para problemas da elasticidade tridimensional, em que a análise do erro em comparação com modelos analíticos ou de referência são adotadas. Assim, mostram-se os avanços obtidos e as limitações existentes da utilização de geometrias aparadas no MECIG.

Palavras-chave: *Método dos Elementos de Contorno. Análise isogeométrica. Superfícies aparadas. Análise tridimensional. Métodos numéricos.*

Introdução

A correta previsão do comportamento mecânico de estruturas e componentes industriais é um aspecto crucial em projetos de engenharia. Essa tarefa permite a busca por um dimensionamento ótimo, em que a minimização do uso de materiais garantindo a segurança estrutural é desejada. No entanto, abordagens analíticas para esta etapa são impraticáveis para a realidade industrial, em que as peças possuem detalhes geométricos complexos, e também condições de contorno e resposta material. Neste cenário, os métodos numéricos surgem como uma alternativa eficaz para determinar os campos mecânicos de tais sólidos. Dentre os métodos existentes, o Método dos Elementos Finitos (MEF) se destaca, em que uma malha de domínio é necessária para análise numérica.

Alternativamente ao MEF, o Método dos Elementos de Contorno (MEC) requer apenas uma parametrização sobre o contorno do sólido para a resolução do problema mecânico. Esta característica promove duas vantagens: a dispensa de uma malha de domínio e a exata determinação de deslocamentos e tensões internas. Na versão convencional do MEC, polinômios de Lagrange aproximam geometria e campos mecânicos ao longo do

contorno. De modo a promover uma aproximação mais precisa, [1] propuseram a Análise Isogeométrica acoplada ao MEF. Nesta abordagem, as funções de forma isogeométricas (tais como *Non-Uniform B-Splines*, NURBS) são responsáveis por descrever a geometria e campos físicos do problema. Como tais curvas são capazes de representar geometrias complexas de forma exata e com poucos parâmetros, o acoplamento entre a IGA e os métodos numéricos leva a respostas mais precisas que as obtidas por aproximações tradicionais e com menor custo computacional. Adicionalmente, o uso direto de modelos CAD (*Computer Aided Design*) reduz significativamente o tempo exigido para a análise, dado que a geração da malha é eficientemente efetuada. Alguns aprimoramentos da IGA com o MEF está presente em diversos trabalhos [2-4], e sua aplicação exitosa em problemas de interação fluido-estrutura [5], biomecânica [6], e otimização topológica [7], demonstram a capilaridade do método.

O acoplamento entre o MEC e a análise isogeométrica se inicia com o trabalho [8], em que as curvas NURBS foram utilizadas para aproximação de geometria e campos de solução de problemas de potencial bidimensionais. Dado que modelos CAD representam as geometrias a partir de curvas e superfícies NURBS apenas no contorno do sólido, o acoplamento entre o MEC e o IGA se torna natural. Desse modo, diversos autores aplicaram o MEC Isogeométrico (MECIG) em áreas distintas da mecânica computacional, como otimização topológica [9-11], mecânica dos fluidos [12], acústica [13], e elasticidade bidimensional [14]. Diversos trabalhos [15-18] aplicaram o MECIG para elasticidade tridimensional, em que a superfície NURBS é gerada a partir do produto tensorial entre duas curvas NURBS uni-variadas. Adicionalmente, [19-21] fizeram uso do MECIG para problemas da mecânica da fratura tridimensional. No entanto, nenhum destes trabalhos considera modelos geométricos com superfícies aparadas.

A geração tradicional de superfícies NURBS dificulta a representação de furos e detalhes específicos no contorno externo. Para superar tal limitação, a operação de aparação propõe um conjunto fechado de curvas NURBS para definir a região removida e a região remanescente da superfície a partir de uma subtração Booleana no espaço paramétrico. Dessa forma, a utilização de superfícies aparadas permite expandir significativamente o escopo de representações geométricas de modelos CAD. Nesse cenário, a incorporação de superfícies aparadas nos métodos numéricos torna-se crucial para expandir seu escopo de aplicações. O estudo pioneiro de [22] propôs a incorporação de superfícies aparadas no contexto da análise isogeométrica a partir do MEF bidimensional. Os aspectos de inovação focaram na identificação da influência da aparação e na integração numérica dos elementos. No contexto do MECIG, poucos estudos consideraram a presença das superfícies aparadas [23,24].

Neste contexto, o presente trabalho apresenta uma formulação do Método dos Elementos de Contorno Isogeométrico tridimensional para problemas da elasticidade considerando a utilização de superfícies aparadas. Para este acoplamento, três aspectos alteram o MECIG convencional e são discutidos: a identificação das regiões aparadas e das funções de forma correspondentes, a integração numérica, e a estratégia de colocação. A validação numérica das técnicas propostas ocorre por meio de uma aplicação numérica com duas faces aparadas, que é comparada com um modelo equivalente obtido em MEF. Assim, demonstra-se a robustez e a capacidade da formulação apresentada em descrever problemas complexos de engenharia estrutural.

Método dos Elementos de Contorno Tridimensional Isogeométrico

Esta seção apresenta os conceitos associados ao Método dos Elementos de Contorno Isogeométrico para a elastoestática tridimensional. Primeiramente, as equações integrais de contorno em deslocamentos (EIDs) determinam os deslocamentos do sólido em função dos campos mecânicos apenas do contorno. Em sequência, apresenta-se a parametrização de superfícies a partir das curvas e superfícies B-Splines e NURBS, que culmina na Análise Isogeométrica quando acoplada a um método numérico. Assim, o acoplamento entre a Abordagem Isogeométrica e o MEC ocorre por meio da aproximação de geometria e campos mecânicos com as funções isogeométricas, o que exige aspectos específicos para a integração numérica e para a estratégia de colocação. Com isso, a obtenção dos campos mecânicos incógnitos ocorre pela resolução de um sistema algébrico oriundo da aplicação das EIDs sobre o contorno.

O problema de valor de contorno da elasticidade linear consiste em um sólido de domínio Ω e contorno $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_p$ em que Γ_u e Γ_p possuem as condições de contorno prescritas em deslocamentos e em forças de superfície, respectivamente. Dessa forma, as incógnitas do problema são os deslocamentos em Γ_p e as forças de superfície em Γ_u . Para a obtenção destes campos, o MEC parte da equação integral em deslocamentos:

$$c_{lk}(\hat{x}) u_k(\hat{x}) + \int_{\Gamma} P_{lk}^*(x, \hat{x}) u_k d\Gamma = \int_{\Gamma} U_{lk}^*(x, \hat{x}) p_k d\Gamma \quad (1)$$

em que \hat{x} é o ponto de colocação, e c_{lk} é um termo livre dependente da posição do ponto de colocação, sendo δ_{lk} , o Delta de Kronecker, para \hat{x} interno ao domínio e $0,5\delta_{lk}$ para \hat{x} sobre um contorno suave. Adicionalmente, u_k e p_k são os deslocamentos e forças de superfície sobre o contorno, enquanto que P_{lk}^* e U_{lk}^* se referem às soluções fundamentais para o meio elástico isotrópico, como:

$$U_{lk}^* = \frac{1}{16 \pi \mu (1-\nu) r} [(3 - 4\nu) \delta_{lk} + r_{,l} r_{,k}] \quad (2)$$

$$P_{lk}^* = \frac{1}{8 \pi \mu (1-\nu) r^2} \left\{ \frac{\partial r}{\partial n} [(1 - 2\nu) \delta_{lk} + 3r_{,l} r_{,k}] - (1 - 2\nu) (r_{,l} n_k + r_{,k} n_l) \right\}$$

em que μ e ν são o Módulo de Cisalhamento e o coeficiente de Poisson, respectivamente, $r = |r|$ é a norma do vetor distância entre o ponto campo x sobre o contorno e o ponto de colocação \hat{x} e $r_{,l}$ indica a derivada do vetor distância em relação à direção l .

A técnica de discretização adotada no presente trabalho lança mão da abordagem isogeométrica para a geometria e campos mecânicos. Especificamente, funções do tipo NURBS são adotadas, e devido a serem uma extensão das B-Splines, a definição das funções base B-Splines é necessária. Diversas abordagens estão disponíveis na literatura, sendo a formulação recursiva de Cox-de-Boor [25-27] a mais comum para abordagens numéricas. Dessa forma, a função base B-spline $N_{i,p}$ de grau p associada ao ponto de controle i é:

$$N_{i,0}(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi_i \leq \xi < \xi_{i+1} \\ 0, & \text{c. c.} \end{cases}$$

$$N_{i,p}(\xi) = \frac{\xi - \xi_i}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}(\xi) + \frac{\xi_{i+p+1} - \xi}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}(\xi) \quad (3)$$

em que $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n+p+1}\}$ é o knot-vector e n é o número de pontos de controle. O suporte compacto que surge da definição da função de grau zero reduz o custo computacional, dado que apenas as funções $\{N_{j-p,p}, \dots, N_{j,p}\}$ são não-nulas num dado knot-span $\xi_j < \xi < \xi_{j+1}$. Outras propriedades das funções B-Splines são a Partição da Unidade, não-negatividade e possuem continuidade C^∞ dentro de seu suporte e C^{p-z} sobre o knot, sendo z a multiplicidade do knot. Tais propriedades também estão presentes nas curvas e superfícies NURBS. A função de forma NURBS consiste na inclusão de pesos w_i para cada um dos pontos de controle, tornando-a em uma função racional como:

$$\phi_i = \frac{N_i(\xi)w_i}{\sum_{k=1}^n N_k(\xi)w_k} \quad (4)$$

No MECIG tridimensional, a interpolação do contorno exige uma discretização bidimensional para tanto a geometria quanto para os campos mecânicos. Assim, o produto tensorial entre duas curvas NURBS uni-variadas, uma com knot-vector $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n+p+1}\}$, grau p e número de pontos de controle n e outra com knot-vector $H = \{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_{m+q+1}\}$, grau q e número de pontos de controle m gera tal superfície. Assim, a função de forma NURBS bi-variada é:

$$\phi_\alpha = \frac{N_i(\xi)M_j(\eta)w_\alpha}{\sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^m N_k(\xi)M_l(\eta)w_{\alpha(k,l)}} \quad (5)$$

em que N_i e M_j se associam às funções base de cada direção paramétrica, α é o índice de conectividade entre os índices i e j ou k e l de cada curva NURBS, enquanto w_α é o peso correspondente. Assim, a interpolação geométrica e de campos mecânicos para o MECIG é:

$$\begin{aligned} x_k^\gamma(\xi, \eta) &= \sum_{\alpha=1}^{n^\gamma} \phi_\alpha(\xi, \eta) P_k^\beta \\ u_k^\gamma(\xi, \eta) &= \sum_{\alpha=1}^{n^\gamma} \phi_\alpha(\xi, \eta) d_k^\beta \\ p_k^\gamma(\xi, \eta) &= \sum_{\alpha=1}^{n^\gamma} \phi_\alpha(\xi, \eta) t_k^\beta \end{aligned} \quad (6)$$

em que β é um índice de conectividade global associado a α e a superfície γ , P_k^β é a coordenada do ponto de controle da superfície NURBS, enquanto d_k^β e t_k^β são coeficientes

sem significado físico responsáveis pela interpolação de deslocamentos e forças de superfície, respectivamente.

A integração numérica no MECIG ocorre sobre as células definidas no intervalo de cada knot-vector $[\xi_i, \xi_{i+1}] \times [\eta_j, \eta_{j+1}]$. Dado que o espaço de integração da quadratura de Gauss-Legendre é definido como $\{\hat{\xi}, \hat{\eta}\} \in \Lambda \mid \Lambda = [-1, 1] \times [-1, 1]$, uma transformação adicional entre o espaço paramétrico da superfície NURBS e o espaço de integração é necessária, como:

$$\begin{aligned}\xi &= \frac{(\xi_{i+1} - \xi_i) \hat{\xi} + (\xi_{i+1} + \xi_i)}{2} \\ \eta &= \frac{(\eta_{j+1} - \eta_j) \hat{\eta} + (\eta_{j+1} + \eta_j)}{2}\end{aligned}\quad (7)$$

Para a integração, a existência de duas transformações de variáveis inclui dois Jacobianos, um para a transformação entre o espaço físico e o espaço paramétrico NURBS (J_1^Y) e outro entre o espaço paramétrico NURBS e o espaço de integração (J_2^Y). Tal relação, para uma superfície NURBS γ , é:

$$d\Gamma_\gamma = \left\| \frac{\partial r}{\partial \hat{\xi}} \times \frac{\partial r}{\partial \hat{\eta}} \right\| d\Lambda = \left\| \frac{\partial r}{\partial \xi} \times \frac{\partial r}{\partial \eta} \right\| \frac{1}{4} (\xi_{i+1} - \xi_i) (\eta_{j+1} - \eta_j) d\Gamma = J_1^Y J_2^Y d\Lambda \quad (8)$$

A substituição das equações (6) e (8) na eq. (1) resulta na EID escrita de forma discreta, em que os campos mecânicos são interpolados pelas entidades associadas. Dessa forma, a equação discretizada se torna:

$$0.5 \delta_{lk} \sum_{\alpha=1}^{n_\gamma^Y} \phi_\alpha^{\hat{\gamma}}(\hat{x}) d_k^\beta + \sum_{\gamma=1}^{NS} \underline{P}_{lk}^{*\alpha\gamma} d_k^\beta = \sum_{\gamma=1}^{NS} \underline{U}_{lk}^{*\alpha\gamma} t_k^\beta \quad (9)$$

em que NS é o número de superfícies NURBS, e $\hat{\gamma}$ é a superfície que contém o ponto de colocação \hat{x} . Os termos $\underline{P}_{lk}^{*\alpha\gamma}$ e $\underline{U}_{lk}^{*\alpha\gamma}$ são:

$$\begin{aligned}\underline{P}_{lk}^{*\alpha\gamma} &= \sum_{ks=1}^{n_{ks}^Y} \int_{\Lambda} P_{lk}^* \phi_\alpha^Y J_\gamma^{ks} d\Lambda \\ \underline{U}_{lk}^{*\alpha\gamma} &= \sum_{ks=1}^{n_{ks}^Y} \int_{\Lambda} U_{lk}^* \phi_\alpha^Y J_\gamma^{ks} d\Lambda\end{aligned}\quad (10)$$

em que n_{ks}^Y denota o número de knot-spans da superfície integrada.

A eq. (10) representa um conjunto de três equações, uma para cada direção, que relaciona as entidades mecânicas de um ponto de colocação com os coeficientes associados a todos os pontos de controle. Desse modo, existem como incógnitas $3.NPC$, sendo NPC o número de pontos de controle. Para obter um sistema algébrico quadrado, uma estratégia de colocação é exigida, e o MECIG adota as Abscissas de Greville [28] para determinar a posição dos pontos de controle. Dessa forma, a coordenada paramétrica (ξ_i, η_j) é definida como:

$$\xi_{-i} = \frac{\sum_{s=i+1}^{i+p} \xi_s}{p}$$

$$\eta_{-j} = \frac{\sum_{s=j+1}^{j+p} \eta_s}{q}$$
(10)

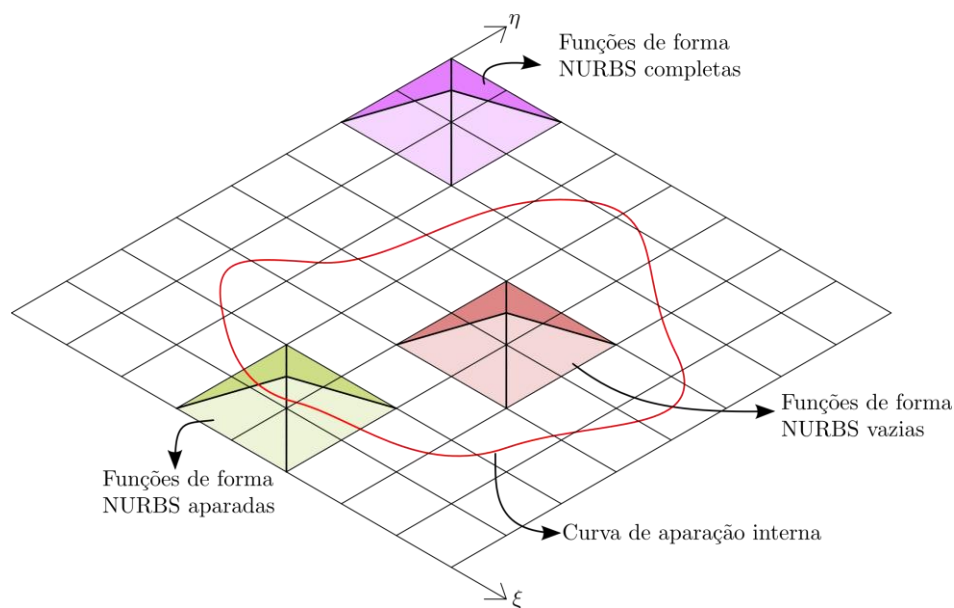
em que i e j são os índices das curvas NURBS uni-variadas geradoras das superfícies NURBS e ξ_s e η_s são valores do knot-vector. Quando o ponto de colocação cai numa posição em que não é garantida continuidade C^0 (contorno suave), este ponto é movido, conforme apontado por [29]. Adicionalmente, a integração numérica exige a Técnica de Subtração de Singularidade quando o knot-span integrado contém o ponto de colocação, devido à natureza singular do núcleo fundamental. Detalhes dessa técnica também são discutidos em [29] para o MECIG tridimensional.

A aplicação da eq. (9) para todos os pontos de colocação resulta num sistema algébrico do tipo $Hd = Gp$, em que as matrizes H e G armazenam os coeficientes de influência associados aos parâmetros interpolantes d e p . A aplicação de condições de contorno é um desafio para a abordagem geométrica devido aos parâmetros mecânicos não possuírem necessariamente significado físico. Neste estudo, a utilização exclusiva de condições de contorno uniformes permite a simplificação deste problema, uma vez que neste caso todos os parâmetros de interpolação da referida condição serão constantes. Assim, a imposição das condições de contorno ocorre pela operação de troca de colunas do sistema. Isso resulta num sistema de formato $Ax = b$, em que x armazena os parâmetros dos deslocamentos e forças de superfície desconhecidos.

Superfícies Aparadas no MECIG

A construção de superfícies NURBS consiste no produto tensorial entre duas curvas NURBS uni-variadas, o que dificulta a representação de furos e detalhes complexos a partir dessa parametrização. Assim, uma solução para este problema é a operação de aparação, em que uma subtração Booleana remove as regiões que não compõem a superfície representada. Tal corte é indicado pelas curvas de aparação, que indicam as regiões a serem mantidas ou removidas no espaço paramétrico da superfície NURBS. Como consequência, as funções de forma NURBS e os knot-spans são classificadas em completos, aparados ou removidos, dependendo da influência da aparação. Os knot-spans cruzados pelas curvas de aparação são os intersectados pelas curvas de aparação, enquanto que os completos são inalterados pela operação e os removidos são aqueles que não são cortados, mas também não fazem parte da representação final. A análise do tipo de knot-span permite a classificação de cada função de forma NURBS, e consequentemente do ponto de controle associado. Quando todos os knot-spans de suporte associados à função de forma são completos, a função de forma também é completa. Caso exista ao menos um knot-span aparado no suporte, a função de forma é aparada. Por fim, se todo o suporte é composto por knot-spans removidos, a função de forma é do tipo removida. A definição de cada tipo de função de forma está presente na Fig. 1.

Figura 1 – Tipos de função de forma considerando a aproximação



Fonte: Autores (2024).

A incorporação de superfícies aparadas no MECIG altera a integração de regiões afetadas pela aproximação. Dessa forma, torna-se necessária a prévia identificação dos knot-spans aparados, assim como a classificação dos vértices como mantidos ou removidos. Adicionalmente, a coordenada paramétrica associada à intersecção entre os limites de cada knot-span e a curva de aproximação é útil para definir a região a ser integrada, e deve ser determinada.

Inicialmente, a determinação do cruzamento entre a coordenada paramétrica e um limite de knot-span utiliza um procedimento iterativo de Newton-Raphson. Nesta abordagem, a função resíduo $R(t)$ define o cruzamento entre a curva de aproximação e o limite do knot-span, como:

$$R(t) = \lambda_S - \lambda(t) \quad (13)$$

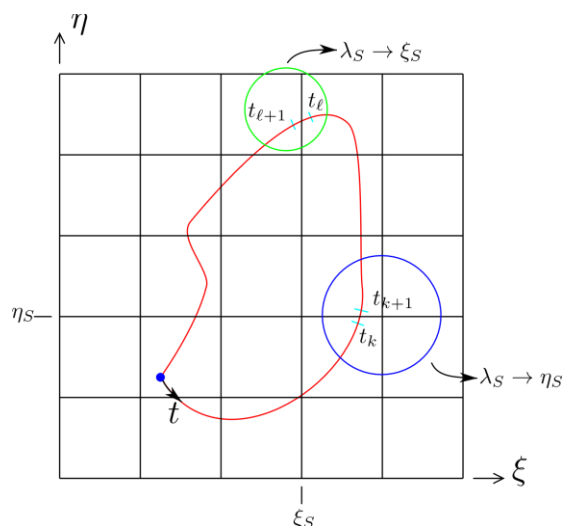
em que λ representa a coordenada paramétrica ξ para cruzamento com o knot-span E e η para cruzamento com o knot-span H , conforme Fig. 2. Assim, λ_S refere-se à coordenada paramétrica conhecida associada ao cruzamento e $\lambda(t)$ advém da interpolação da curva de aproximação. Desse modo, a expansão da eq. (13) em série de Taylor ao redor de t e truncada no primeiro termo resulta num procedimento não-linear como:

$$\Delta t_k = \frac{R(t_k)}{\frac{\partial R}{\partial t}|_k} \quad (14)$$

em que Δt_k é o passo na coordenada paramétrica univariada da curva de aproximação que se soma a t_k de modo a encontrar o valor tal que $R(t_k) < tol$, sendo tol uma tolerância para

o processo iterativo. Adicionalmente, $\partial R / \partial t$ é o componente do vetor tangente na direção associada à busca. O procedimento iterativo ocorre após uma avaliação prévia de $R(t_k)$ para cada $t_j = t_b + j(t_e - t_b) / \Delta_j$, em que t_b e t_e se referem às coordenadas paramétricas iniciais e finais da curva de aproximação, e Δ_j indica o número de subdivisões sobre esta curva. Com isso, a cada vez que $R(t_j) \cdot R(t_{j+1}) < 0$, a busca local ocorre a partir da eq. 14 para encontrar $t_j < t_k < t_{j+1}$. Adicionalmente, o knot-span em que a busca é efetuada é classificado diretamente como aparado.

Figura 2 – Identificação de λ no procedimento iterativo Newton-Raphson local



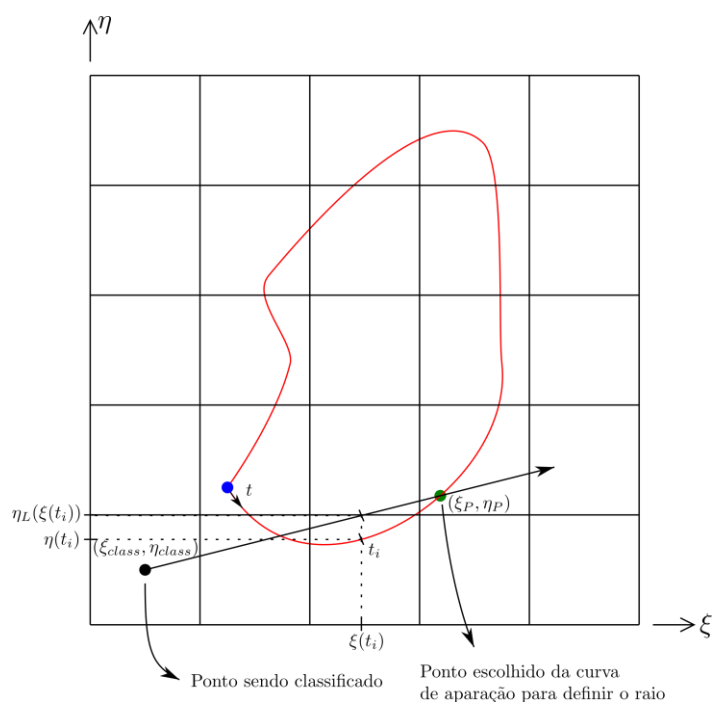
Fonte: Autores (2024).

Em seguida, o algoritmo ray-casting possibilita a classificação dos knot-span não aparados como internos ou externos à curva de aproximação. Este método permite determinar a posição relativa de um ponto em relação a uma curva fechada, em que o ponto pode estar interno ou externo à curva. Para isso, o número de cruzamentos entre a curva de aproximação e um segmento de reta partindo do ponto (ξ_0, η_0) sob classificação e que intercepta a curva em ao menos um ponto. Quando há um número par de cruzamentos, o ponto é externo à curva, e interno caso contrário. Assim, a função de cruzamento f relaciona a coordenada paramétrica interpolada pela curva de aproximação $\eta(t)$ com a coordenada $\eta_L(\xi(t))$, em que η_L expressa a equação do segmento de reta e $\xi(t)$ é obtido a partir da expressão da curva de aproximação. A expressão para f é:

$$f = \eta(t) - \eta_L(\xi(t)) \Rightarrow f = \eta(t) - [m_L(\xi(t) - \xi_0) + \eta_0] \quad (15)$$

em que $m_L = (\eta_P - \eta_0) / (\xi_P - \xi_0)$ é o coeficiente angular do segmento de reta, dado o ponto (ξ_P, η_P) da curva de aproximação para definir o segmento de reta. A Fig. 3 indica o significado geométrico de tais variáveis. O cruzamento ocorre para $f = 0$, e dessa forma, o número de cruzamentos é detectado a partir do número de trocas de sinal de f . Assim, o algoritmo de ray-casting calcula o número de trocas de sinal para cada $t_j = t_b + j(t_e - t_b) / \Delta_j$, em que a troca é detectada quando $f(t_j)f(t_{j+1}) < 0$.

Figura 3 – Algoritmo ray-casting

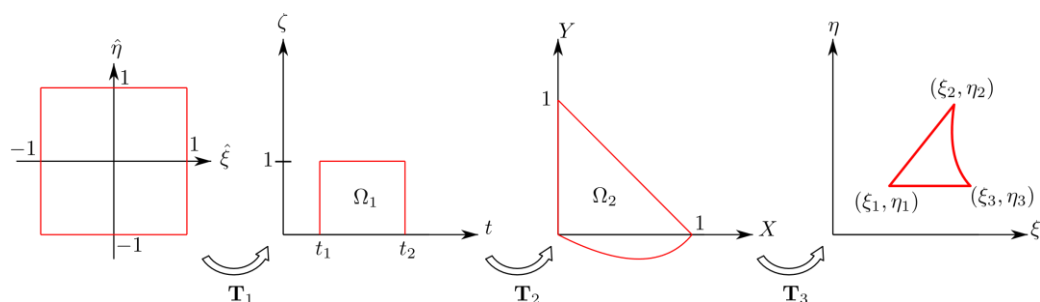


Fonte: Autores (2024).

O ponto médio dos knot-spans não aparados e os vértices dos knot-span aparados utilizam o algoritmo de ray-casting para determinar se tais pontos são internos ou externos. A classificação dos pontos médios é seguida pelos knot-spans não aparados, ou seja, se o ponto médio é interno, o knot-span também é. Adicionalmente, os vértices dos knot-spans aparados são classificados de modo a permitir a correta subdivisão para a integração numérica.

A integração numérica de knot-spans aparados utiliza o procedimento proposto por [22], em que dois mapeamentos são responsáveis por mapear o ponto do espaço de integração até o espaço paramétrico, conforme Fig. 4. Nesta estratégia, ocorre a subdivisão do knot-span aparado em dois tipos de células, em que o tipo A possui uma das arestas sendo um trecho da curva de aparição e o tipo B é um triângulo regular.

Figura 4 – Mapeamento das células de tipo A



Fonte: Autores (2024).

O primeiro mapeamento T_1 relaciona o ponto $(\hat{\xi}, \hat{\eta})$ do espaço de integração para o primeiro espaço auxiliar retangular Ω_1 tal que $\{t, \zeta\} \in \Omega_1 | \Omega_1 = [t_1, t_2] \times [0, 1]$, em que t é a variável paramétrica da curva de aproximação dentro dos limites t_1 e t_2 dentro do knot-span. A expressão dessa transformação é:

$$\begin{aligned} T_1: (\hat{\xi}, \hat{\eta}) &\rightarrow (t, \zeta) \\ t &= \frac{\hat{\xi}}{2}(t_2 - t_1) + \frac{1}{2}(t_2 + t_1) \\ \zeta &= \frac{\hat{\eta}}{2} + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (16)$$

A segunda transformação T_2 promove o mapeamento entre Ω_1 e Ω_2 , em que os dois pontos superiores de Ω_1 colapsam em um único ponto, de modo que Ω_2 se torne um espaço triangular. Além disso, este mapeamento é responsável por considerar a curva de aproximação $\psi = T_3^{-1}C(t)$, em que T_3 é o terceiro mapeamento, que será apresentado em seguida, e $C(t)$ é a curva de aproximação no espaço paramétrico da NURBS. Assim, o mapeamento T_2 é:

$$\begin{aligned} T_2: (t, \zeta) &\rightarrow (X, Y) \\ X &= \psi_X(t)(1 - \zeta) \\ Y &= \psi_Y(t)(1 - \zeta) + \zeta \end{aligned} \quad (17)$$

em que ψ_X e ψ_Y são componentes de ψ .

Por fim, o mapeamento T_3 relaciona o espaço Ω_2 e o espaço paramétrico da NURBS. Esta transformação considera o mapeamento tradicional de elementos triangulares do Método dos Elementos Finitos. Para tanto, as coordenadas dos vértices do triângulo no espaço paramétrico são (ξ_1, η_1) , (ξ_2, η_2) e (ξ_3, η_3) . Assim, T_3 promove este mapeamento como:

$$\begin{aligned} T_3: (X, Y) &\rightarrow (\xi, \eta) \\ \xi &= Y\xi_1 + (1 - X - Y)\xi_2 + X\xi_3 \\ \eta &= Y\eta_1 + (1 - X - Y)\eta_2 + X\eta_3 \end{aligned} \quad (18)$$

O mapeamento para células do tipo B é possível a partir dos mapeamentos indicados ao utilizar $t_1 = 0$ e $t_2 = 1$ na eq. (16), e $\psi_X(t) = t$ e $\psi_Y(t) = 0$ na eq. (17).

Com a inserção de novos mapeamentos, jacobianos adicionais são necessários para a integração numérica. Assim, o jacobiano indicado na eq. (8) se transforma em:

$$d\Gamma_\gamma = \left\| \frac{\partial r}{\partial \xi} \times \frac{\partial r}{\partial \eta} \right\| d\Lambda = \underline{J}_1^Y \underline{J}_2^Y \underline{J}_3^Y \underline{J}_2^Y d\Lambda \quad (19)$$

em que \underline{J}_1^Y , \underline{J}_2^Y e \underline{J}_3^Y são, respectivamente, os jacobianos associados aos mapeamentos T_1 , T_2 e T_3 , sendo:

$$\begin{aligned} \underline{J}_1^Y &= \left| \frac{\partial t}{\partial \xi} \frac{\partial \zeta}{\partial \xi} \frac{\partial t}{\partial \eta} \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \right| = \left| \frac{t_2 - t_1}{2} \ 0 \ 0 \ \frac{1}{2} \right| \\ \underline{J}_2^Y &= \left| \frac{\partial X}{\partial t} \frac{\partial Y}{\partial t} \frac{\partial X}{\partial \zeta} \frac{\partial Y}{\partial \zeta} \right| = \left| \frac{d\psi_X(t)}{dt} (1 - \zeta) \frac{d\psi_Y(t)}{dt} (1 - \zeta) - \psi_X(t) - \psi_Y(t) + \right. \\ &\quad \left. 1 \right| \\ \underline{J}_3^Y &= \left| \frac{\partial \xi}{\partial X} \frac{\partial \eta}{\partial X} \frac{\partial \xi}{\partial Y} \frac{\partial \eta}{\partial Y} \right| = \left| -\xi_2 + \xi_3 \quad -\eta_2 + \eta_3 \quad \xi_1 - \xi_2 \quad \eta_1 - \eta_2 \right| \end{aligned} \quad (19)$$

A terceira alteração significativa para incorporação de superfícies aparadas ao MECIG envolve a estratégia de colocação. Uma vez que porções da superfície são removidas, a estratégia clássica das Abscissas de Greville pode gerar pontos de colocação em regiões que não fazem mais parte do contorno do sólido. Assim, após a disposição dos pontos de colocação de forma tradicional, os pontos de colocação associados às funções base e aos pontos de controle removidos também são retirados na análise. Em seguida, pontos de colocação em knot-spans aparados são detectados e removidos, e a contribuição nas matrizes que seria ocupada por eles passa a se associar com um conjunto de $(p + 1)(q + 1)$ pontos de colocação adicionados a cada knot-span. Para knot-spans que, após o corte, apresentam apenas uma sub-célula triangular, a distribuição de pontos ocorre seguindo as coordenadas dos pontos de Gauss no espaço $[-1,1] \times [-1,1]$. Em seguida, tais pontos são mapeados conforme o mapeamento indicado para as integrações numéricas. Para células com quatro arestas, inicialmente é efetuada uma divisão uniforme ao longo do lado oposto à curva de aparação. Na sequência, calcula-se a distância perpendicular entre esse lado oposto até a curva de aparação, e tal reta é dividida uniformemente para definir a posição dos pontos, conforme Fig. 5. Células com 3 sub-triângulos e 5 arestas recebem a subdivisão ao longo da curva de aparação, em que em seguida uma reta perpendicular à curva de aparação é traçada até interceptar o limite do knot-span. Sob esta reta, ocorre novamente uma divisão uniforme, descrita na Fig. 6.

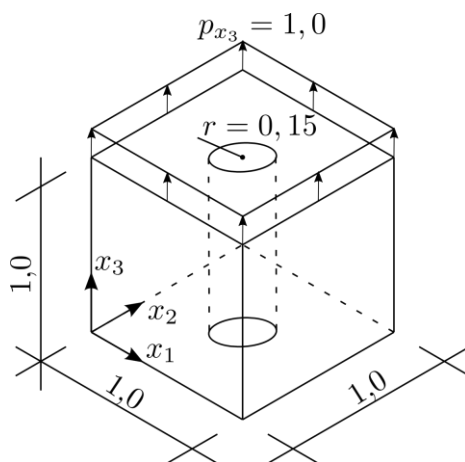
$$\begin{aligned} u_1(x_1, x_2, x_3) &= -\frac{\nu x_1}{E} \\ u_2(x_1, x_2, x_3) &= -\frac{\nu x_2}{E} \\ u_3(x_1, x_2, x_3) &= \frac{x_3}{E} \end{aligned} \quad (20)$$

e a avaliação do erro em norma L2 utiliza a diferença entre a resposta analítica e a resposta numérica como:

$$\|e\|_{L_2} = \frac{\int_{\Gamma} (u_{ap}-u_{ex})(u_{ap}-u_{ex})^T d\Gamma}{\int_{\Gamma} (u_{ex})(u_{ex})^T d\Gamma} \quad (21)$$

em que u_{ap} e u_{ex} representam o vetor da solução aproximada e da solução exata, respectivamente. A integração numérica para avaliação de $\|e\|_{L_2}$ utiliza a posição dos mesmos pontos de integração que a análise numérica.

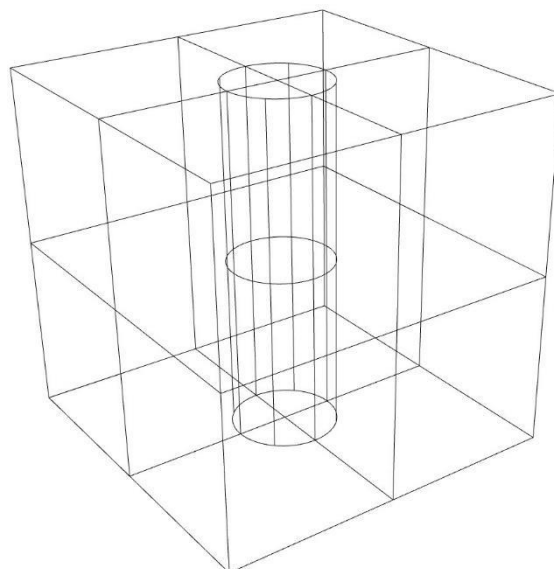
Figura 7 – Geometria e condições de contorno do cubo com furo cilíndrico



Fonte: Autores (2024).

A malha isogeométrica desta aplicação possui 10 superfícies NURBS, conforme Fig. 8. Seis faces definem o cubo, enquanto 4 faces são responsáveis pela representação das paredes laterais do furo. Nas faces superior e inferior ($x_3 = 0,0$ e $x_3 = 1,0$) há uma curva de aproximação de grau 2 para remover a porção interior referente ao furo. Tais curvas possuem knot vector $\tau = \{0; 0; 0; 1/4; 1/2; 3/4; 1; 1; 1\}$ e a Tab. 1 apresenta os pontos de controle sobre o espaço paramétrico da superfície NURBS. Assim, tais faces necessitam de apenas uma superfície NURBS aparada em sua representação, enquanto que a formulação não-aparada do MECIG exigiria ao menos 4 superfícies. Todas as superfícies NURBS das faces planas do cubo possuem grau 1 em ambas as direções paramétricas, e os correspondentes knot-vectors são $E = H = \{0; 0; 0,5; 1; 1\}$. Já as faces do furo cilíndrico possuem grau 2 na direção circunferencial e grau 1 na direção oposta, com knot-vectors sendo $E = \{0; 0; 0; 0,5; 1; 1; 1\}$ e $H = \{0; 0; 0,5; 1; 1\}$. São utilizados 116 pontos de colocação, em que a disposição deles para as faces aparadas exige o reposicionamento discutido neste trabalho, e é apresentada na Fig. 9.

Figura 8 – Malha isogeométrica do cubo com furo cilíndrico



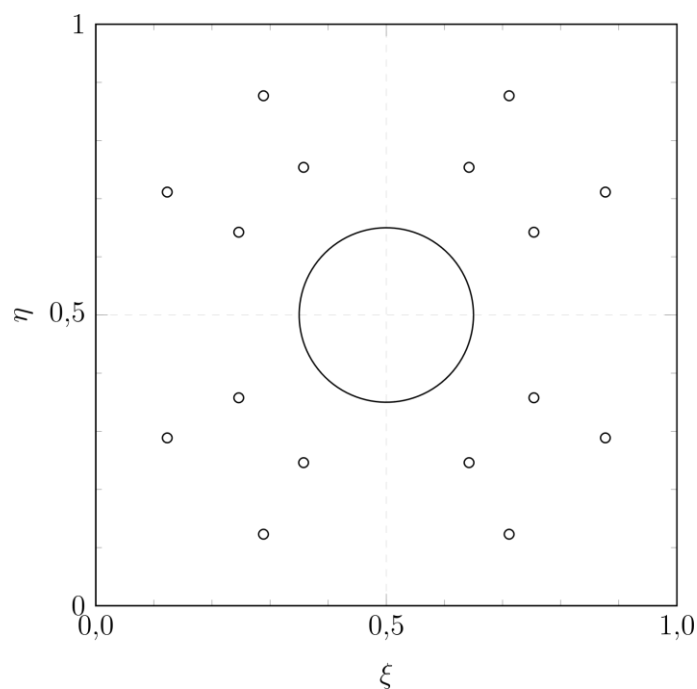
Fonte: Autores (2024).

Tabela 1 – Posição dos pontos de controle da curva de aproximação nas superfícies aparadas

Número	ξ	η	w
1	0,65	0,50	1,0
2	0,65	0,35	$\sqrt{2}/2$
3	0,50	0,35	1,0
4	0,35	0,35	$\sqrt{2}/2$
5	0,35	0,50	1,0
6	0,35	0,65	$\sqrt{2}/2$
7	0,50	0,65	1,0
8	0,65	0,65	$\sqrt{2}/2$
9	0,65	0,50	1,0

Fonte: Autores (2024).

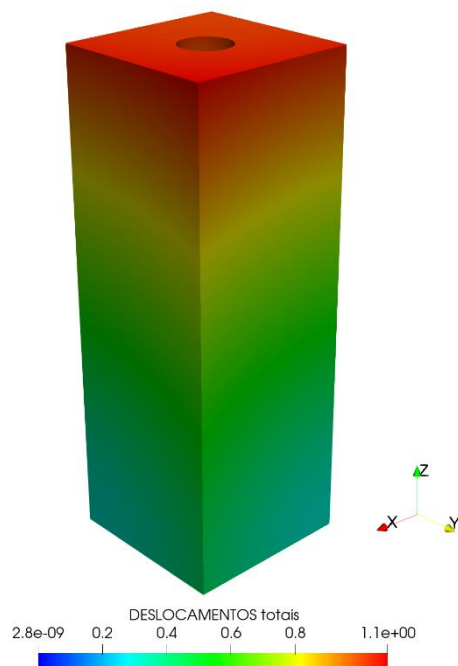
Figura 9 – Posição dos pontos de colocação para faces aparadas



Fonte: Autores (2024).

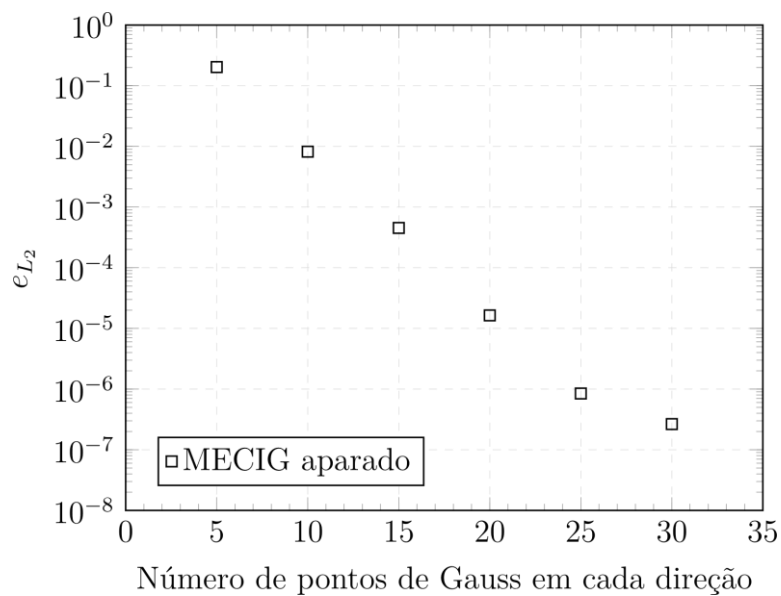
O campo de deslocamentos totais para a aplicação numérica é apresentado na Fig. 10. É possível constatar a capacidade da formulação em representar o deslocamento uniforme esperado, assim como o efeito de Poisson nas outras direções. Já a avaliação do erro em norma L2 considera a variação do número de pontos de integração aplicado a cada direção paramétrica, a partir de 5 até 30, variando de 5 em 5. Assim, a Fig. 11 apresenta a convergência da resposta com o aumento do número de pontos de integração. Ao mesmo tempo, ocorre a estabilização do erro na ordem de 10^{-6} partir de 25 pontos de integração, o que demonstra que a inserção de mais pontos de integração a partir deste ponto não afeta a precisão da resposta final. Além disso, tal erro comprova a capacidade da formulação aparada do MECIG em representar problemas mecânicos com furos, com uso de menos superfícies NURBS e menos parâmetros na representação geométrica do problema.

Figura 10 – Deslocamentos totais para cubo com furo cilíndrico tracionado.



Fonte: Autores (2024).

Figura 11 – Erro em norma L2 para deslocamentos totais do cubo com furo cilíndrico tracionado



Fonte: Autores (2024).

Conclusões

Este trabalho apresentou o acoplamento entre o MECIG com a representação de superfícies a partir da técnica de aproximação. Uma vez que o MEC exige apenas a malha de contorno para a análise do problema mecânico, seu uso com a descrição isogeométrica de sólidos torna-se adequada e compatível. Com isso, modelos CAD são diretamente a malha do MECIG, o que dispensa etapas de geração de malha. No entanto, a representação de uma maior quantidade de geometrias exige a técnica de aproximação das superfícies NURBS. Assim, a absorção de tais superfícies para o MECIG constituiu um avanço significativo para a representação mecânica de componentes mecânicos de engenharia.

Assim, uma aplicação numérica demonstra o êxito da formulação apresentada. Dessa forma, há a extensão dos conceitos associados ao MECIG com superfícies aproximadas. A partir das formulações apresentadas neste trabalho, torna-se possível promover avanços associados à análise de componentes complexos de engenharia. Adicionalmente, tais formulações podem ser acopladas à análise de fratura de sólidos, haja vista que o MEC possui excelente desempenho neste campo de estudo.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Brasil. Processo nº 2019/18795-6.

Referências

1. T. J. Hughes; J. A. Cottrell; Y. Bazilevs. Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2005, 194, 4135. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.10.008>.
2. Y. Bazilevs; L. Beirão da Veiga; J. A. Cottrell; T. J. Hughes; G. Sangalli. Isogeometric analysis: approximation, stability and error estimates for h-refined meshes. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 2006, 16, 1031. <https://doi.org/10.1142/s0218202506001455>.
3. J. A. Cottrell; T. J. R. Hughes; A. Reali. Studies of refinement and continuity in isogeometric structural analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2007, 196, 4160. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.04.007>.
4. Y. Bazilevs et al. Extended isogeometric analysis using analysis-suitable T-splines for plane crack problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2010, 199, 229. <https://doi.org/10.5755/j01.mech.23.1.13475>.
5. Y. Bazilevs et al. Isogeometric fluid-structure interaction: theory, algorithms, and computations. *Computational Mechanics* 2008, 43, 3. <https://doi.org/10.1007/s00466-008-0315-x>.
6. Y. Bazilevs et al. Isogeometric fluid-structure interaction analysis with applications to arterial blood flow. *Computational Mechanics* 2006, 38, 310. <https://doi.org/10.1007/s00466-006-0084-3>.
7. W. A. Wall; M. A. Frenzel; C. Cyron. Isogeometric structural shape optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2008, 197, 2976. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.01.025>.

8. C. Politis et al. An isogeometric BEM for exterior potential-flow problems in the plane in Proceedings of 2009 SIAM/ACM Joint Conference on Geometric and Physical Modeling, San Francisco, 2009, 349.
9. K. Li; X. Qian. Isogeometric analysis and shape optimization via boundary integral. Computer-Aided Design 2011, 43, 1427. <https://doi.org/10.1016/j.cad.2011.08.031>.
10. S. H. Sun; T. T. Yu; T. T. Nguyen; E. Atroshchenko; T. Q. Bui. Engineering Analysis with Boundary Elements 2018, 88, 26-40. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2017.12.007>.
11. H. L. Oliveira; H. D. C. Andrade; E. D. Leonel. An isogeometric boundary element approach for topology optimization using the level set method. Applied Mathematical Modelling 2020, 84, 536. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2020.03.047>.
12. L. Heltai; M. Arroyo; A. DeSimone. Nonsingular isogeometric boundary element method for Stokes flows in 3D. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 2014, 268, 514. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.09.017>.
13. L. Coox et al. An isogeometric indirect boundary element method for solving acoustic problems in open-boundary domains. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 2017, 316, 186. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.05.039>.
14. R. N. Simpson et al. A two-dimensional isogeometric boundary element method for elastostatic analysis. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 2012, 209, 87. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.08.008>.
15. H. Lian; R. N. Simpson; S. P. Bordas. Stress analysis without meshing: isogeometric boundary-element method. Proceedings of the Institution of Civil Engineers: Engineering and Computational Mechanics 2013, 166, 88. <https://doi.org/10.1680/eacm.11.00024>.
16. J. Gu et al. An isogeometric BEM using PB-spline for 3-D linear elasticity problem. Engineering Analysis with Boundary Elements 2015, 56, 154. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2015.02.013>.
17. G. Beer et al. Isogeometric boundary element analysis with elasto-plastic inclusions. Part 2: 3-D problems. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 2017, 315, 418. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.11.007>.
18. S. Li et al. Accelerating isogeometric boundary element analysis for 3-dimensional elastostatics problems through black-box fast multipole method with proper generalized decomposition. International Journal for Numerical Methods in Engineering 2018, 114, 975. <https://doi.org/10.1002/nme.5773>.
19. X. Peng et al. Isogeometric boundary element methods for three dimensional static fracture and fatigue crack growth. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 2017, 316, 151-185. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.05.038>.
20. S. G. F. Cordeiro; E. D. Leonel. Mechanical modelling of three-dimensional cracked structural components using the isogeometric dual boundary element method. Applied Mathematical Modelling 2018, 63, 415. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2018.06.042>.
21. M. Rocha; J. Trevelyan; E. D. Leonel. An extended isogeometric boundary element formulation for three-dimensional linear elastic fracture mechanics. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 2024, 423, 116872. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2024.116872>.
22. H. J. Kim; Y. D. Seo; S. K. Youn. Isogeometric analysis for trimmed CAD surfaces. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 2009, 198, 2982. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2009.05.004>

23. Y. Wang; D. J. Benson; A. P. Nagy. A multi-patch nonsingular isogeometric boundary element method using trimmed elements. *Computational Mechanics* 2015, 56, 173. <https://doi.org/10.1007/s00466-015-1165-y>.
24. B. Marussig; R. Hiemstra; T. J. Hughes. Improved conditioning of isogeometric analysis matrices for trimmed geometries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2018, 334, 79. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.01.052>.
25. M. G. Cox. The numerical evaluation of B-splines. *IMA Journal of Applied Mathematics* 1972, 10, 134. <https://doi.org/10.1093/imamat/10.2.134>.
26. C. De Boor. On calculating with B-splines. *Journal of Approximation Theory* 1972, 6, 50. [https://doi.org/10.1016/0021-9045\(72\)90080-9](https://doi.org/10.1016/0021-9045(72)90080-9).
27. C. De Boor. *A Practical guide to splines*, Springer-Verlag, New York, 1978.
28. T. N. E. Greville. Numerical procedures for interpolation by spline functions. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics, Series B: Numerical Analysis* 1964, 1, 53. <https://doi.org/10.1137/0701005>.
29. S. G. F. Cordeiro. Contribuições às análises de fratura e fadiga de componentes tridimensionais pelo método dos elementos de contorno dual. Ph.D. Thesis, Universidade de São Paulo, 2018.



CAPÍTULO 7

DIGITAL TWINS IN ROBOTIC APPLICATIONS

Renan Sanches Geronel^{1*} and Máira Martins da Silva¹

¹University of Sao Paulo (USP), Department of Mechanical Engineering, São Carlos School of Engineering. Av. Trab. São Carlense, 400 - Parque Arnold Schmidt, 13566-590, São Carlos, 13565-090, São Paulo, Brazil *renansanches@usp.br

Abstract – Digital Twin is the cutting-edge technology that has revolutionized the industry by mirroring any necessary product, process, or service element. Reducing costs and risks, improving efficiency, reliability and resilience, and supporting decisions are some of the main characteristics that can be achieved using DT. The employment of DT allows replicating any element from real world to digital space to provide predictive feedback to engineers. It enables them to combine the model and data approaches to create a virtual prediction tool that can change over time. The digital replica is linked with the actual product to update, and change based on the inputs received from the prototype. As a result, the DT technology enables engineers and experts to improve overall business performance by quickly detecting and solving physical problems and providing initial information for product design. The robotic domain is gaining rapid importance with digital twins, including space, medical and rehabilitation, soft robotics, human-robot interaction, and industrial robots. Then, this chapter aims to i) provide the state-of-art of DT in robotic applications, ii) assess the advances of DT with artificial intelligence, and iii) identify further possibilities and challenges to expand their applications in the near future.

Keywords: *Digital Twins. Robotic Applications. Artificial Intelligence. Challenges*

Funding: São Paulo Research Foundation - FAPESP [grant numbers 18/21336-0 and 23/07834-6] and the National Council for Scientific and Technological Development - CNPq [grant number 303884/2021-5]

1. Introduction

Since the early 2000s, society has been experiencing some significant advances in digital technology. Concepts such as Industry 4.0, the Internet-of-Things, and Big Data are some of current most used terms in engineering applications [1,2]. An open and smart platform are some of the characteristics of Industry 4.0, which enables the transformation of machines into self-learning systems. In smart systems, each machine is able to interact with several sensors and other machines, as well as use the data collected by these sensors to aid production and decision-making. The application in cyber-physical systems, along with smart machines and digital technologies, received growing attention due to computer technologies, including computer-aided design (CAD), computer-aided manufacturing (CAM), computer-aided engineering (CAE) and many others. The integration of these technologies comprises the foundational architecture of Industry 4.0, which enables the industries to adapt to the market needs and equip them to face global challenges [3,4]. Despite all the advantages achieved, there are still a large number of engineering problems and uncertainties that require an additional strategy [5,6].

For instance, modeling mechanical joints represents a challenging task, since they are subjected to epistemic uncertainty and small disturbances. Besides the difficulty of representing some common phenomena, like friction and hysteresis, most of the physical process happens on a micro scale, whereas the modeling and structural behavior of the joints are often defined on a macro scale [7]. Tolerance differences, friction, and sensitivity to temperature variation also lead to large deviations in the dynamic behavior of joint structures. Therefore, the inclusion of different parameters and phenomena, that occur at different scales, and their corresponding uncertainties into an accurate model of a complete mechanical structure is an interesting alternative since it requires a high computational cost, human demand and operation time.

Besides the presence of several uncertainties of the dynamic model, these mechanic systems have become much more complex in recent years leading the development of collaborative design environment, which is formed by customers, manufactures, engineers and designers. This worldwide collaboration provides an interesting alternative to sharing ideas and knowledge in different phases of product design. However, it is noted that digital models are commonly used for the static parts of the design, allowing us to examine the manufacturing process and investigate some of the most feasible design characteristics. On the other hand, those models' monitoring and optimization are still in an elementary phase, even in the presence of experts [8]. In this sense, Digital Twin (DT) emerges as a promising alternative to provide an accurate virtual representation of objects and simulation of the operation process.

Digital Twin is the cutting-edge technology that has revolutionized the industry field by mirroring any necessary element of a product, process or service. The work [9] estimates that by 2027, nearly 40% of executives from large companies will incorporate DT in their projects and operations to increase revenue. Reducing costs and risks, improving efficiency, reliability and resilience, and supporting decisions are some of the main characteristics that can be achieved by using DT. The employment of DT allows the replication of any element from the real world to the digital space, with the aim of providing predictive feedback to engineers. It allows then to combine the model and data approaches to create a virtual prediction tool that can change over time. The digital replica is linked with a real product to update, and change based on the inputs received from the prototype. Different types of sensors are deployed for real-time data transmission between them. As a result, the DT technology enables the engineers and experts to improve the overall business performance, by allowing them to quickly detect and solve physical problems and provide some initial information for the product design [10]. The main achievement attributed to DT relies on the possibility of evaluating different characteristics of the whole product, or even some entities from the prototype to a software domain.

Overall, three parts are required to design a Digital Twin. The first one includes the physical prototype in real space, whereas the digital copy, in virtual space, represents the second part. The third part comprises the use of links to exchange information and data, which ties real and virtual worlds together. The data flows from real to virtual space, and the information takes place in virtual to real spaces. To understand the generic working principle, a digital copy of an existing prototype needs to be created. The digital model receives input from the data acquired by sensors on the prototype. Then, the digital twin model is able to replicate the changes in the prototype, since the prototype can send real-time data to the digital copy [11]. According to [12], the advancement of Digital Twins

has changed the initial concept of autonomous systems, which were originally designed to operate independently of human intervention. These emerging applications demand autonomous systems that seamlessly interact with and respond to user input. However, distinct levels of interaction can be observed, from occasional automated assistance to user oversight for critical decision-making. Users can provide feedback, correct the system's behavior, and help it learn from new situations and challenges.

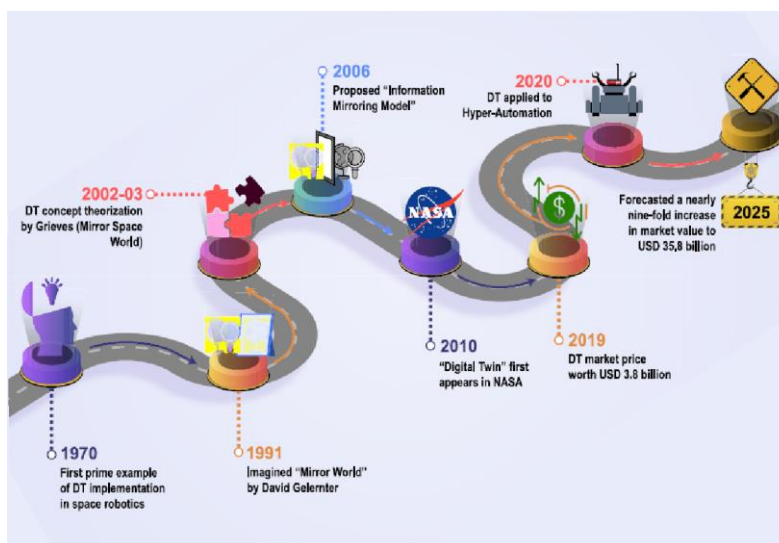
1.1 Brief History of Digital Twin

The origin of the twin concept has been attributed to NASA during the Apollo program, which was related to product life cycle management [13]. In 1970, NASA engineers used several tools to save the Apollo 13 mission, including a simulator, a twin of the command module, and an additional subsystem for the module's electrical. Two hours were necessary to complete the process and save the lives of three astronauts on board. A digital mirror of the space vehicle was built on Earth to replicate the equipment condition over the mission. NASA initially described this approach as "an integrated multi-physics, multi-scale, probabilistic simulation of a vehicle or system that uses the best available physical models, sensor updates, and fleet history to mirror the life of its flying twin".

In 1991, David Gelernter used a similar concept for software models that mimic the reality of information from the real world, named "Mirror Worlds." Although the approach has been investigated for many years (from an informal perspective), especially in the aerospace sector, the concept of Digital Twin did not receive much attention until 2002, when it was first introduced by Professor Grieves of the University of Michigan in a course called "virtual digital representation equivalent to physical products." Initially, Grieves referred to as the "Conceptual Ideal for PLM", discussing some properties of the digital twins. These dimensions were used to define the DTs, including a physical entity, a digital counterpart, and a connection that connects the two parts together. It also highlighted the importance of data and information exchange between real and virtual systems [14]. In 2005, Grieves mentioned that the DT could be divided into three sub-groups, such as DT prototype, DT instance, and DT aggregate [15].

In 2006, the concept, used for Grieves, has been renamed from the "Mirrored Spaces Model" to the "Information Mirroring Model". In 2010, NASA used the term "Digital Twin" in the Technology Area 12 report, to represent the technology duplicating and linking digital and physical models [16]. The first paper regarding DT was published in 2011, leading to rapid growth in different areas, such as aerospace, automotive, building and construction, energy, education, medical, and health care, among others [8,17]. In 2012, NASA employed the concept of DT to integrate ultra-high-fidelity simulation for collecting data from a digital model of an aerial vehicle to improve the levels of safety and reliability of a correlated physical vehicle. Since then, other universities, organizations, and companies have expanded its definition. Large corporations, such as Siemens and GE, combine the Internet of Things to enhance the DT technology in the manufacturing industry. The proposed strategy aims to improve the real-time monitoring, inspection, and maintenance [18]. According to Markets and Markets, the DTs market would be worth USD 3.8 billion in 2019, and it is predicted a value of USD 35.8 billion by 2025. Figure 1 illustrates the evolution of the Digital Twin in robotics.

Figure 1 – Evolution of the Digital Twins

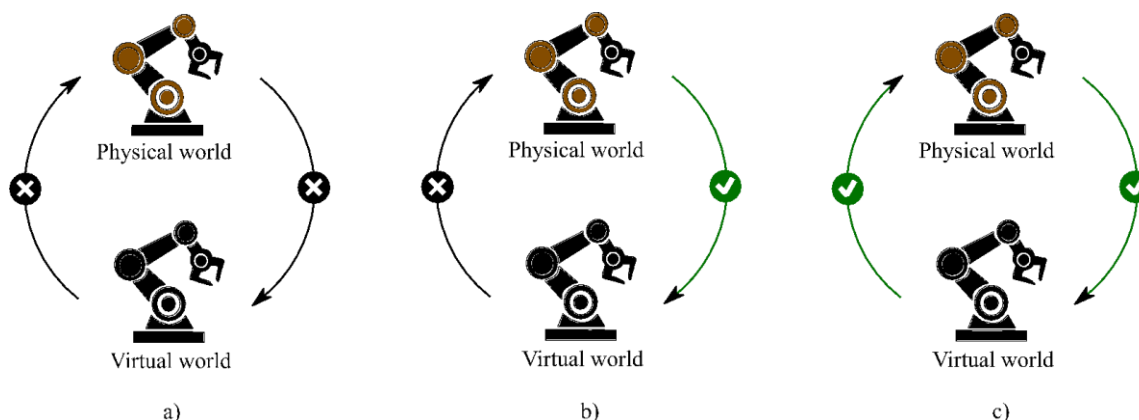


Source: Adapted from [19].

According to the Encyclopedia of Production Engineering, the concept of DT can be defined as "The Digital Twin is a representation of an active unique "product" which can be a real device, object, machine, service, intangible asset, or a system consisting of a product and its related services" [20]. The first stage of building a DT requires modeling the static properties, which aim to indicate the requirements and constraints. The next step is related to the communication between the physical and virtual models, including software and hardware equipment. The virtual object is commonly designed as a mirror of the physical system. The specific functions and functions must be included in the product design since the DT may address the phenomena of interest. Therefore, virtual replica of the real-world is obtained through constant data transmission to exist simultaneously with the physical prototype. This strategy allows the DT to be used not only for static product design but also for investigating dynamic behavior. Three main categories can be adopted to explore the integration between the physical and virtual systems, based on the data integration level.

Figure 2 illustrates the levels of integration among digital model, digital shadow, and digital twin. The digital model represents the digital representation of a prototype with no data exchange, *i.e.*, no impact is observed on the digital model even in the presence of a change on the physical object. Any change must be reflected through manual modification. On the other hand, a unidirectional exchange of data from the physical to the virtual model is observed on the digital shadow. Sensors are used to measure the data from the physical model and transfer it to the virtual model only. In the Digital Twin, the data transmission automatically synchronizes the digital object with the current status of the physical one (also sending control information to it). A bidirectional transmission is achieved, allowing the data to flow automatically to and from each system. Consequently, the data from the physical model automatically influences the virtual model in such a way that the virtual model is updated according to the evolution of its physical counterpart [21].

Figure 2 – Levels of integration of digital approach, where a) digital model, b) digital shadow, and c) digital twin



Source: Authors.

Before the consolidation of the term digital twin, some concepts were used worldwide, including digital counterparts, virtual engines, and intelligent prognostics tools, among others. The DT approach has gained significant attention since its employment in the product design area, with particular overlap with existing digital design tools, like big data, data-driven design, and related CAD software. Digital twins have also been considered for manufacturing processes, such as autonomous and real-time manufacturing, and other innovations (for instance, cyber-physical systems) [22,24]. The mentions of Digital Twins have then been growing exponentially, from just a few in 2015 to millions of mentions in 2019. In 2023, more than 9 million mentions were found on Google Scholar, reaching a higher number with images. According to Google Scholar, the number of academic papers has also increased from 1000 to 52000, highlighting its importance in the research field [25].

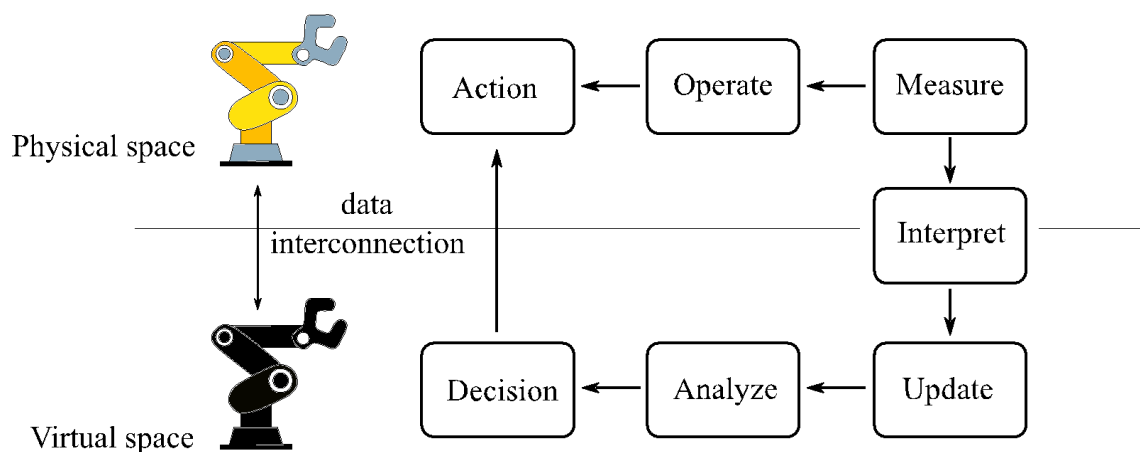
The scope of the Digital Twin has also increased significantly over the last few years. The DT approach was originally employed for aerospace and manufacturing. The rapid advance of the digital twin in the industrial environment leads to its expansion in different applications, including offshore drilling, space structure, robotics, nuclear fusion, and offshore wind turbines [26,27]. Currently, DTs are often used to manage system performance after its design. Still, it could provide a better experience if the DT were implemented from the beginning of its operational life through its entire operation. The constant data collection of the mechanical system can provide real-time analysis and be used for structural life prediction. The increasing attention paid to DTs by researchers and companies is due to the fact that they can contribute to monitoring, evaluation, optimization, simulation, prediction, control, and many other applications. Although Digital Twins are currently used in different fields, the robotic field is one of the most interesting and relevant applications.

1.2 Architecture of Digital Twins

The rapid advance of Industry 4.0 requires more innovative, optimized, and effective products and services. Digital transformation is seen as a promising alternative to handle most of these challenges. The use of Digital Twins aligns with the digital transformation

concept, which is related to the business model innovation to reflect the value that can be obtained by data [28]. The characteristics of Digital Twin are related to the physical and virtual systems and their interconnections. The physical system corresponds to the prototype to be investigated. On the other hand, physical reality is formed by three main elements: physical system, physical environment, and physical process. The physical system can range from a single machinery part to a complete and all-interconnected system in a single asset, while the physical environment is where the system resides. For instance, considering that the physical system is a single room in a large building, the physical environment may include additional parts of the building, such as ventilation systems, adjacent rooms, among others. The physical process defines its behavior in the physical environment. Therefore, these three combined elements can be represented in the virtual space to support simulations, optimization, and forecasting [29]. Figure 3 illustrates the integration of the digital twin concept.

Figure 3 – Schematic scheme of architecture design



Source: Authors.

The overall implementation of Digital Twins presents a variety of technical elements that can be generalized, including outcome identification, solution scope, the creation of the virtual copy, and data interconnections. According to [29], the vice president of Software Research at the GE Global Research Center, Colin Parris, defines the DT concept as "a living model that drives a business outcome." The outcome identification allows the concept of Digital Twins to be realistically bounded to achieve the project goal. This clear identification of the outcomes, *i.e.* its capacity to be measurable and quantifiable, improves the DT's capacity to produce a positive change towards the intended objectives. There is a large variety of outputs that are currently being sought, where some common outputs associated with the Digital Twins in robotics include cost and risk reduction, the improvement of efficiency, security, and reliability, as well as the intelligent decision-making [30,32].

The DT feasibility is achieved when the predetermined scope of the DT is strictly aligned with the intended output without including additional complexity or costs. For instance, it would be infeasible to model and control each component of a soft robotic system. The initial stage of setting the scope is identifying the required portion of the physical prototype that will be modeled establishing the boundaries and connections between the

real and virtual systems. Some boundaries are chosen to guarantee the positive achievement of target outputs, besides reducing the model complexity [33]. The level of abstraction determines computational fidelity, *i.e.*, which physical states can be modeled and maintained. Although it is commonly assumed that a high level of fidelity ensures a better representation between the virtual and real systems, this is not true if the collected data is not appropriate for the model fidelity. Besides the difficulty of collecting all required data, some challenges can be observed, such as storage management, data transfer limitations, and the high computational processing cost. Therefore, different abstraction models can be evaluated to assure the users to choose only the required ones to keep the scope consistent as well as to include or remove some of them when needed [14].

The data model, including remote and local management, represents one of the first elements of the virtual representation. While the local approach is mainly adopted for cases in which data security is required, remote management provides several advantages, such as accessibility and efficient transference of data in real time. Data visualization also provides initial information for the data organization, which some statistics methodology can portion. This visualization stage is used to represent the data in a format that supports more efficient decision-making. According to the available information collected by the prototype, some computational models can be used, such as physics-based and data-driven models. The objective of the computational model is to obtain the relationship between the inputs and outputs that change the system states [34].

The last component of the Digital Twin relies on the interconnection between the physical and virtual representation, in which the data can be exchanged in both directions: physical to virtual and virtual to physical. While the first case enables the update of the states from the physical to the virtual state, the virtual-to-physical approach guarantees updating the physical state. According to [35], three stages are required to establish the physical-to-virtual connection: collecting relevant information from the physical reality, interpreting acquired data, and updating the virtual representation states. Conversely, the virtual-to-physical connection ensures that the data collected from the physical systems are used to update the virtual representation. Similar to the first case, the action is created according to the change of the corresponding representation to achieve the target state.

2. Digital Twins applications

Currently, engineering and manufacturing are the two main fields that employ the concept of Digital Twins to provide accurate virtual representations of objects and simulations of operational processes. The automotive, aerospace, robotics, agriculture, utilities, healthcare, military, and public safety sectors are just a few examples of industries that have constantly integrated the concepts of DT into the industrial process. The applications are mainly related to traceability, transport maintenance, remote assistance, and design customization [9]. Especially in robotic applications, Digital Twins provides comprehensive improvements for better simulations, which is one of the most effective sources of information for preparing strategic plans, forecasts, scale, measurements, and the enhancement of overall performance in terms of costs and time.

2.1 Digital Twins in Robotics

Over the years, robotic technology has been repurposed from a defined and unchanged prototype to a sophisticated real-time cyber-physical approach. Different robotics domains are gaining rapid importance, including space, medical and rehabilitation, soft robotics, human-robot interaction, and industrial robots [36,37]. Smart machines enable real-time communication about machines, robots, and operations, which promotes the development of robots that can work alongside humans. In most cases, the simulation framework is one of the most important tools employed in a new robot strategy. Distinct types of analysis, including fault and anomaly detection, may be necessary before implementing a new robot. Data analysis frameworks are also commonly used to anticipate the future state according to historical data. Interactive user interfaces can also be combined to improve the robot's performance. Therefore, many distinct frameworks that may or may not collaborate are required to enhance industrial robotic manufacturing, making the whole process more expensive, labor-intensive, and time-consuming. However, the Digital Twins strategy can combine all of those functions in a single work cell to simulate the complete plant. Due to the bidirectional contact with the physical and virtual counterparts, the analytical data is more precise, making the process faster, easier, and with an enhanced predictive analysis [19].

The feedback of the robotic control strategy provides commands for the next loop of execution based on the exchange of information collected from physical sensors installed on robots and the external environment. The real-time transmission of information presents some advantages regarding adaptability in varying environments and dynamic changes, as well as accomplishing nontrivial manipulation tasks. Jin et al [38] combine the DT with a smart robotic gripper system for periodic motion and tactile information measurement. Sensors are employed to collect the data, which is then used to calculate a real-time prediction control. Other applications regarding Digital Twins can be related to robotic systems, especially maintenance, and system health monitoring, including detection of failure and robot anomaly, and predictive maintenance of industrial robots, among others. Different predictive maintenance methodologies can be combined, including statistic-based reliability, physical modern-driven, and data-driven, to reduce the chances of error in robotics maintenance and minimize production loss and breakdown time. Moreover, since the correct time for maintenance is still uncertain, gathering information from different sensors and combine with data algorithms designed based on DT may improve the system failure models and support human decision-making [37].

The Digital Twins has gained rapid importance in soft robotics development over the last years due to its ability to create virtual reality. In 2019, Malik *et al.* [39] perform an immersive human-robot simulation, based on Amazon Sumerian framework, to investigate the overall performance of soft robotics. The robots were replicated in a virtual reality to asses all the collected information. The robotics's movement was initially done using a depth camera, and the data was transferred to the digital twin. The study shows that using DT can enable better visualization of the robot workspace, creating strategies to improve safety and reducing the complexity and process steps. Moreover, Borges *et al.* [40] investigates the development of an open-source framework for real-time reconstruction of soft robots in Augmented and Virtual Reality. Proprioceptive sensors are used to collect the robot's signals and convert them to parameters of a virtual armature to control a mesh representation of an actuator through the Unity skeletal animation framework. Although soft robots present soft bodies that enable them to conform to their

environment, some specific tasks require an operator to supervise the interaction between the robot and its environment to adjust the actuation inputs. In this sense, the DT can be used to simulate different parameters and scenarios to achieve enhanced execution performance.

In aerospace, Digital Twins enables us to replicate the continuous time history of flight, producing a large amount of simulation data. The aim of making such a large amount of simulation data is to recognize what the aircraft has undergone and to design further maintenance requirements. DT is a precise, accurate, and practical tool that can be employed to monitor the aerospace vehicle airframe, life support, energy storage, and thermal protection, among others. Because of the constant need for the aviation industry to effectively adapt life cycle management tools, DT can provide an iterative closed-loop process that integrates the most important nodes of aerospace products from design, manufacturing, and testing [41]. The DT enables two-dimensional support for data flow, providing lifelong data support across every product node, including updates and iterations. Therefore, the constant transference of data allows product optimization and decision-making [42]. DTs can also allow conventional tests, including material tests, wind tunnel, and flight tests, to be moved to virtual spaces to reduce the time-consuming and overall costs significantly.

Bolcavage *et al.* [43] mention that the employment of DTs in aerospace applications has reduced the initial time spent on material testing and verification by 80% and 25%, respectively. Finally, DTs can assess aircraft health management and flight optimization by integrating dynamic information and aircraft status to improve decision-making related to fuel optimization, flight routes, prediction of remaining useful life of components, and others. DT has gained constant importance, particularly in the space environment, which is inaccessible or unsustainable for long-term human presence. The DT also plays an important role in astronaut education and training since the interaction with Digital Twins allows them to understand better the working and equipment status to improve the decision-making and emergence responses in extreme environments [44]. Therefore, the world-leading aerospace companies, such as NASA, EASA, US Air Force, and Royal Canadian Air Force, are some of the companies that are currently working on applying DTs to operation and maintenance [45]. The work [46] assess the use of DT to monitor the manufacturing anomalies for health management and maintenance history for aerospace applications. In contrast, the work [47] employ DT for predicting the micro-cracks at an early stage using integrated simulation and on-board system.

With technological advances in the automotive industry, automotive equipment and in-vehicle control software have become more complex and integrated. On the other hand, the exploitation time of automobiles is shorter due to the manufacturing requirements, environmental regulations, and accelerated technology development. In this sense, researchers and engineers have been working on strengthening system design capabilities and proposing solutions, because the more complex the vehicle structure, the greater the possibility of performance degradation or function failure. This significantly increased costs in design, development, testing, operation, and maintenance [48]. Digital Twins is an interesting solution that saves time and costs due to its ability to monitor and predict health conditions. For instance, Patrikeev *et al.* [49] assess the use of DT for noise, vibration, and harshness analysis to design a new body-on-frame SUV. The use of DT allows a positive reduction in the number of physical tests, which represents a significant saving in time and costs. Shikata *et al.* [50] have combined a virtual replica and the real

vehicle on a computer to assess some components of electric vehicles. Positioning electric control units (ECU), automatic parking, and charge control are some parameters tested under various conditions. Rajesh *et al.* [51] have exploited the use of DT for brake pad maintenance inspection. The DT is used to develop a monitoring activity, enabling prediction maintenance tools based on measured parameters, including brake pressure and wheel speed.

Digital Twins can also be employed in medical and rehabilitation robotics, including robots for surgeries, rehabilitation, assembly of medical equipment, and others. Pizzolato *et al.* [52] have investigated the use of DT in the development of aided prostheses, exoskeletons, and other robot-assisted measures. In this case, data measured in the real world by electroencephalograms (EEG) and electromyograms (EMG), as well as sensor data from assistive devices, are used to classify the motor intention. Then, the measured data and motor intention are used as input to the replica of the patient and assistive devices, based on Digital Twin concepts. The DT implements a personalized neuromusculoskeletal model that combines the input data to estimate optical muscle and the amount of mechanical support that needs to be provided via rehabilitation robotics. Therefore, the data simulated from DT are used to control assistive devices and calculate afferent feedback via visual or haptic monitors. Donati *et al.* [53] have investigated the use of motor-driven exoskeleton gait training and tactile feedback, based on simulated foot pressures), with advanced brain-computer interfaces and virtual reality to restore the brain-muscle loop. Likewise, Digital Twins can also be used to optimize human-robot cooperation to deal with the increased need for medical equipment during disasters and pandemics [54]. During the COVID-19 pandemic, manufacturing tests based on Digital Twins made it possible to increase overall efficiency by 25% and reduce operator workload by 20% to build alternators and medical ventilators. Digital Twins representation is employed not only for manufacturing some robots but also includes social robots and wearable robotics, which are able to collect data from users constantly and consequently enhance a person's motion and abilities.

3. Digital Twins with Artificial Intelligence

The most crucial approach for Digital Twins development is related to the feedback between the real physical systems and digital models. In that way, researchers have been developing techniques to recreate what occurs in the physical world in digital models. Machine Learning is a promising technology employed to analyze a large amount of data and assess feasible solutions for a desired problem. Nevertheless, the high efficiency of Machine Learning requires a vast number of training datasets, which demands high computational costs and can be time-consuming. The work [55] mention that the DTs can be employed to accelerate the training phase of Machine Learning by creating an appropriate training data set and automatically separating them through a simulation tool chain. Rasheed *et al.* [56] have mentioned that Digital Twins is an important tool that can be used as adaptive models for complex systems, such as robotic manipulators. As a result, Digital Twins are employed not only in building and managing intelligent systems but also in solving fundamental challenges.

The development of current controls requires physical sensors installed on robots and communication schemes to generate the corresponding control law. Researchers have been combining AI + DT to improve the accuracy and stability of the proposed control strategy. Compared to conventional DTs, the employment of AI ensures positive

advantages related to adaptability in a varying environment and accomplishing nontrivial sensing/manipulation tasks. Digital Twins are also combined with machine learning to enable robotic systems to lift unknown mass through trial-and-error search [57], while the work [58] investigate the use of DT to develop control algorithms for soft robots applied to industrial peg-in-hole insertion tasks. Similarly, the DT and AI can also be focused on finding a close-to-optimal solution among some feasible options under constraints. Compared with conventional methods, including search-based motion planning algorithms, reinforcement learning is seen as a promising alternative to complex system planning. Then, Digital Twins and Artificial Intelligence can be combined to collect a large amount of data and provide feasible solutions. Matulis [59] investigates the communication scheme of virtual and physical agents to train a 6DOF robot arm to complete a given task under environmental changes. The case study combines a virtual space, created by Unit Engine and a 3D-printed replica robot arm to represent the physical space. These linked spaces are used to solve a task and provide training data for the AI model. Reinforcement learning rewards determine the feasible control law for a specific state.

Similarly, Liu *et al.* [60] combine Deep Reinforcement Learning (DRL) and Digital Twin technology to control humanoid robot arms. A data acquisition system based on sensors, analog and digital electronics, mechanics, and mechanical components is designed to generate angle data of the robot arm automatically. This data is employed to enhance the reward function of the DRL and quickly train the robot for a task. Therefore, this combined strategy allows for the speeding up of the planning of manipulator movements under different conditions. In addition, the work [61] combine the DRL and AI to establish a continuous interface between a virtual environment and industrial robotic systems. The virtual approach is designed as one step to digital training to accelerate the training, testing, and validation of smart control systems. Then, some features from external sources can be envisioned to convey key information to optimize the process autonomously. As a result, integrating a smart agent into the industrial platforms allows the use of the system-level DT, where intelligent control methodologies are trained and verified upfront before being deployed to the industrial robots. Moreover, the proposed strategy allows us to easily replicate some strategies and different conditions to other manipulators.

Along with the constant advance of intelligent technology, the information level of the manufacturing industry is also gaining importance. The intelligent strategies enable the increase of production rates and the prompt handling of emergencies, improving the overall ability of the assembly lines to control all the production processes. Zhou *et al.* [62] have developed a knowledge-driven framework to transform conventional manufacturing units into intelligent manufacturing to sense, simulate, predict, optimize, and control automatically. Smart manufacturing is able to maximize product quality with low production costs. Xu *et al.* [63] assess a two-phase DTs-aided fault diagnosis methodology with Deep Transfer Learning. The purpose strategy allows for the identification of potential problems of robotic manipulators that were not previously designed by performing an ultra-high-fidelity model in virtual space. Deep Transfer Learning is used to migrate the trained diagnostic from virtual to physical models for real-time monitoring and predictive maintenance. Likewise, Ren *et al.* [64] combine embedded machine learning methodologies into Digital Twins in the full life cycle (FLC) management to make the process more responsive, predictable, and adaptable. The FLC

management of complex systems is fundamental to intelligent transformation and upgrading modern industries.

With the constant advance of technology, more robotic manipulators have been designed to perform industry tasks. However, the close collaboration between humans and robots may lead to serious risks, including pushing, rushing, and clamping over the operation. The work [65] investigates the combination of AI and DT to improve the safety of human-robot collaboration. Then, a local path planner is designed for industrial robots to keep a safe distance between robots and humans, and an algorithm is implemented to lead with obstacle detection and 3D location. Sensors are then used to capture and analyze the robot's movement in the virtual space. Then, a machine learning-enhanced robot control strategy is developed by combining a nearest-neighbor approach for path planning, clustering analysis, and artificial NN for obstacle detection. In addition, Kurrek et al, [66] investigate the use of DT and reinforcement learning for the life-cycle framework development of advanced robots. The virtual-based methods accelerate the learning process and improve the operation and development of complex robot systems under different environments. The methodology is used to investigate the complete life cycle of robot development, reducing cost and time. Similarly, Ahmad [67] combines Deep Learning technology and Digital Twins for the operational support of a human-robot assembly station. While the DT is used to design, simulate, and optimize complex systems, a CNN is employed to improve collaborative robot design (with more powerful decision-making for different tasks).

Similar to medical and rehabilitation robotics, Artificial Intelligence can also be combined with Digital Twins to learn normal behavior patterns and characteristics over time. Digital Twin is a virtual model fed by information on wearable devices. AI and robotics can be employed in DT to learn about disease progression and drug response or plan the best procedure before surgery. Robots are designed to improve users' physical and cognitive support by monitoring their progress. In addition, these designed robots can support patients in recovering motions or recovering loss function [68]. The combined methodologies enable patients to perform practice behaviors while interacting with a virtual reality that imitates a physical presence in real or imagined worlds. According to [69] this process enables the collection of a significant amount of data to develop their ability for some rehabilitation, such as motor control, balance, gait, and strength. In addition to providing a better understanding of injury recovery, the combination of DT and AI allows for more sophisticated design of future robot prototypes. Moreover, Corral *et al.* [70] assess the combination of a DT and AI to customize a virtual organ, for instance, a digital heart. According to static models and virtual representation, the robot prototypes can be designed after simulations, optimization, and validation. The intensive process enables a better clinical diagnosis as well as individualized robotic design based on patient records.

Regarding the aerospace field, the work [41] has addressed the advanced compositions and limitations of the future digital twins in this application. Interaction, standardization, and cognitive are the three current dimensions of the aero DTs that could help the aviation research and development community. Integrating both methodologies can significantly improve the overall efficiency in terms of fuel consumption, optimization of routes, and aerodynamics. Similarly, Becue *et al.* [71] investigate an innovative cognitive modeling and collaborative simulation to investigate the human behavior model and security testing capabilities in aerospace. Therefore, the constant exchange of information between real

and physical words enables the discovery of gaps and unexpected behavior in robots used in the aerospace field. The early discovery of malfunctions may help to direct the development of required robotic systems to ensure operation safety and lower the collaborative optimization goal and operating costs.

4. Current Challenges

Despite all the advantages listed for using Digital Twins for robotic applications, some challenges are currently related. The scale, complexity, scarcity of implementation tools, data management, and lack of protocols are some of the current challenges addressed for developing a full-scale digital twin technology [7]. In addition, the multibody simulation is challenging due to the complex interaction properties at the interfaces between human–robots. Moreover, since the robot movement is significantly fast, the real-time feedback design from sensors can suffer from a performance limitation to the DT's effectiveness in making short-term decisions. Inputs and disturbances from human users imply additional uncertainties and unpredictability in the collaborative workspace.

According to [72], developing a DT has five main challenges: high-fidelity modeling, data acquisition and processing, real-time connection, unified platform, and environmental coupling technologies. The digital twin model's accuracy and reliability are crucial for its technical applications' success. Currently, there are several difficulties in efficiently mirroring a physical entity, including variability, uncertainty, and fuzziness of physical space. In addition, the real-time exchange of information, data acquisition, and processing are some of the most challenging steps to design a DT. There must be an efficient methodology to integrate sensors, machine vision, internet, data fusion, machine learning, and other technologies to store and process a large amount of data collected from a machine during its movement. The external influence is another limitation to the design of a DT because the interaction of physical objects and environments has not been fully embodied in the virtual models. In addition, the organizational structure of companies can be another limitation for the DT development, since they are usually partitioned, making it difficult to access different sectors and departments [73].

The rapid advance of Industry 4.0 and IoT also accelerates the adoption of Digital Twin technology across robotic applications. However, DT's development faces challenges parallel to AI and IoT technologies, such as data management and standardization, data security, and barriers to its implementation and legacy system information. The DT can operate across multiple industrial partners and inventory sites, raising security concerns. This is not only related to industry security but also to the leak of real-time monitoring data. In this sense, Fuller *et al.* [74] have addressed current limitations of industrial infrastructure, including the need for updating old IT infrastructure, high cost of deployment, integration with existing software, increased demand for power and storage, and the lack of a modeling approach. Long-term use of Digital Twins also represents a very costly task, due to the need to be continuously updated based on recent developments in technologies on IoT, big data, and machine learning [75].

Regarding the design of robots for healthcare applications, Digital Twins also represents a challenging task. Developing a mathematical model of healthcare systems is not simple and requires a significant number of simplifications, which can lead to inaccurate results. Moreover, experimental modeling may suffer from experimental errors and equipment limitations, such as sensors or software. In this sense, machine learning has been

developing to tackle some limitations since it can be used as a fast methodology to train and transfer technology. However, as previously noted, Digital Twins are often used to train local model devices and transferred through edge/cloud aggregator to produce a global DT, which implies cyber security problems and large data [76]. The collection and sharing of sensing data enables a major challenge in developing a digital Twin in healthcare, and privacy and security, scalability, and ethical considerations. Then, the sensitive data must be properly addressed and governed to attenuate the inevitable concern that collected data may be used for purposes other than informing healthcare decisions and disease research [77].

In space applications, Digital Twins can efficiently be employed for improving the spacecraft design, maintenance process, and enhance the mission efficiency planning and execution. Moreover, this technology enables real-time monitoring and fault prediction, significantly improving mission safety and success rates. However, the implementation of Digital Twins faces different obstacles, including data transmission delays, model accuracy, and the design of user–system interactions [78]. Due to the divergences of models, constant improvement and investigation of model accuracy must be made, which still represents a significant cost part of the design. Despite a positive advance in combining the DT with Artificial Intelligence to optimize the construction and adjustment of the model process, the interpretability issue of deep learning can raise questions about their reliability. Then, it is essential to develop complex verification and test procedures, including not only under normal operation conditions but also under potential faults conditions, to ensure model reliability and robustness in predicting critical system failures and rapid making decisions [79]. Likewise, most existing Digital Twin models have been developed, including terrestrial characteristics. This leads to inaccuracies in simulating and predicting the robot equipment behavior in the space environment, failing to meet the high demands of reliability and safety required for space missions. Sensors may also suffer extreme temperature conditions, high radiation levels, and mechanical vibrations, which substantially increase the project costs due to the need for sensors with high reality and self-calibration capability to adapt to long-term changes in the space environment [80].

5. Final Remarks

Over the last few years, society has experienced important advances in digital technology. Due to the advancement of Industry 4.0, a smart machine can interact with several sensors and other machines, as well as improve efficiency and decision-making. In this sense, Digital Twins (DT) appears to be a promising technology that has revolutionized the industry by mirroring any necessary element of a product, process, or service. The development of DT allows the replication of any element from the real world to the digital world to provide predictive feedback to engineers. This enables to combine of the model and data approaches to create a virtual tool that can change over time. Reducing costs and risks, improving efficiency, reliability, and resilience, and supporting decisions are some of the main characteristics that can be achieved using DT.

The origin of Digital Twin has been attributed to NASA during the Apollo program, which was related to product life cycle management. In 1991, David Gelernter used a similar concept for software models that mimic the reality of information from the real world, named "Mirror worlds". However, only in 2002 did the concept of Digital Twins gain significant attention. Professor Grieves discusses some properties of the Digital

Twins. These dimensions were used to define the DTs, including a physical entity, a digital counterpart, and a connection that connects the two parts together. Since then, other universities, organizations, and companies have expanded its definition. As a result, the rapid advance of the digital twin appears not only in aerospace, as initially designed, but leads to its expansion in different industrial applications, such as offshore drilling, space structure, robotics, nuclear fusion, and offshore wind turbines. According to Markets and Markets, the DTs market is predicted to achieve a value of USD 35.8 billion in 2025, highlighting its significant advance and importance.

One of the most interesting applications of DT is related to robotics since it can be applied in several domains, including space, medical and rehabilitation, soft robotics, human robot interaction, and industrial robots. Smart machines enable real-time communication about machines, robots, and operations, which promotes the development of robots that can work alongside humans. Data analysis frameworks are also commonly used to anticipate the future state according to historical data. Therefore, Digital Twins strategy can combine all of those functions in a single work cell to simulate the complete plant. Due to the bidirectional contact with the physical and virtual counterparts, the analytical data is more precise, making the process faster and easier with an enhanced predictive analysis. In aerospace, DT enables to monitor of the vehicle airframe, life support, energy storage, thermal protection and can be used to improve the design properties and dynamics of a further vehicle. Related to the automotive industry, DTs are significantly employed to investigate noise, vibration, and harshness of a new product before its manufacturing, representing a significant saving in time and cost. In addition, medical and rehabilitation robotics can also be optimized by DTs. Measured data and motor intention are used as input to the replica of the patient and assistive devices, which allows the development of a personalized and optimized treatment for a patient.

However, since different sensors are employed to collect real-time data, a large amount of data is collected over time. Machine Learning is an interesting technology that can be used to analyze a large amount of data and assess feasible solutions for a desired problem. Nevertheless, the high efficiency of Machine Learning requires a vast number of training datasets, which demands high computational costs and can be time-consuming. The combination of DT and Machine Learning is employed to accelerate the training phase by creating an appropriate training data set and automatically separating them through a simulation tool chain. Researchers have been combining AI + DT to improve the accuracy and stability of the proposed control strategy. Compared to conventional DTs, the employment of AI ensures positive advantages related to adaptability in a varying environment and accomplishing nontrivial sensing/manipulation tasks. As a result, integrating a smart agent into the industrial platforms allows the use of the system-level DT, where intelligent control methodologies are trained and verified upfront before being deployed to the industrial robots.

On the other hand, along all the advantages for using Digital Twins in robotic applications, there are current challenges that need to be overcome for the full development of DT. The scale, complexity, scarcity of implementation tools, data management, security, and lack of protocols are some of the current challenges addressed for developing a full-scale digital twin technology. Since the DT can operate across multiple industrial partners and inventory sites, some security issues can be related. In addition, there is an important limitation of industrial infrastructure, such as the need to update old IT infrastructure, high cost of deployment, integration with existing software,

increased demand for power and storage, and the lack of a modeling approach. Therefore, the current use of DTs is an interesting and promising solution for many robotic applications even in the presence of current challenges. There is an important adoption by researchers and large organizations, which can significantly optimize the process, by reducing operational time and costs.

References

1. M. Chen; S. Maio; Y. Liu. Big data: a survey. *Mobile Networks and Applications* 2014, 19, 171.
2. A. Gilchrist. *Industry 4.0: the industrial internet of things*, Springer, New York, 2016.
3. E. Hozdić. Smart factory for industry 4.0: a review. *International Journal of Modern Manufacturing Technologies* 2015, 7, 28.
4. J. Lee; B. Bagheri; H.-A. A cyber-physical systems architecture for industry 4.0-based manufacturing systems. *Manufacturing Letters* 2015, 3, 18.
5. Y. Jiang et al. Industrial applications of digital twins. *Philosophical Transactions of The Royal Society A* 2021, 1, 379.
6. D. Wagg et al. Digital twins: state-of-the-art and future directions for modeling and simulation in engineering dynamics applications. *Asce-Asme Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems, Part B: Mechanical Engineering*, American Society of Mechanical Engineers 2020, 6, 030901.
7. M. Singh et al. Digital twin: origin to future. *Applied System Innovation* 2021, 1, 4.
8. C. Lo; C.-H. Chen; R. Y. Zhong. A review of digital twin in product design and development. *Advanced Engineering Informatics* 2021, 48, 101297.
9. M. Attaran; B. G. Celik. Digital twin: benefits, use cases, challenges, and opportunities. *Decision Analytics Journal* 2023, 6, 100165.
10. Y. Fu et al. Digital twin for integration of design-manufacturing-maintenance: an overview. *Chinese Journal of Mechanical Engineering* 2022, 35, 80.
11. Z. Wang. Digital twin technology in Industry 4.0 - impact on intelligent logistics and manufacturing, T. Bányai, Ed. A. Petrillo and Fabio de Felice, Ed.; Intechopen, 2020, 95.
12. P. Antsaklis. Autonomy and metrics of autonomy. *Annual Reviews in Control* 2020, 49, 15.
13. R. Rosen et al. About the importance of autonomy and digital twins for the future of manufacturing. *Ifac-Papersonline*, 2015, 48, 567.
14. M. Grieves; J. Vickers. Digital twin: mitigating unpredictable, undesirable emergent behavior in complex systems in *Transdisciplinary perspectives on complex systems: new findings and approaches*, F.-J. Kahlen; S. Flumerfelt; A. Alves; Springer, Cham, 2017; 85–113.
15. M. W. Grieves. Product lifecycle management: the new paradigm for enterprises. *International Journal of Product Development* 2005, 2, 71.
16. B. Piasek et al. Materials, structures, mechanical systems, and manufacturing roadmap. *Nasa Ta* 2012, 1.
17. E. J. Tuegel et al. Reengineering aircraft structural life prediction using a digital twin. *International Journal of Aerospace Engineering* 2011, 1, 154798.
18. E. Fourgeau et al. System engineering workbench for multi-views systems methodology with 3dexperience platform. The aircraft RADAR use case in *Proceedings of the Second Asia-Pacific Conference on Complex Systems Design & Management*, Singapore, 2016, 269.

- 19.A. Mazumder et al. Towards next generation digital twin in robotics: trends, scopes, challenges, and future. *Heliyon* 2023, 9, E13359.
- 20.S. Chatti, Ed. et al. *CIRP Encyclopedia of Production Engineering*. Springer, Berlin, 2019.
- 21.M. Segovia; J. Garcia-Alfaro. Design, modeling and implementation of digital twins. *Sensors*, 2022, 22, 5396.
22. E. Tuegel. The airframe digital twin: some challenges to realization in 53rd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Materials Conference; 20th AIAA/ASME/AHS Adaptive Structures Conference; 14th AIAA, Honolulu, 2012, 1.
23. S. Yun; J.-H. Park; W.-T. Kim. Data-centric middleware based digital twin platform for dependable cyber-physical systems in 2017 Ninth International Conference on Ubiquitous and Future Networks, Milan, 2017, 922.
- 24.S. Sierla et al. Automatic assembly planning based on digital product descriptions. *Computers In Industry* 2018, 97, 34.
- 25.N. Crespi; A. T. Drobot; R. Minerva, Eds. *The digital twin*. Springer, Cham, 2023.
26. D. Iglesias et al. Digital twin applications for the jet divertor. *Fusion Engineering and Design* 2017, 125, 71.
27. K. Sivalingam et al. A review and methodology development for remaining useful life prediction of offshore fixed and floating wind turbine power converter with digital twin technology perspective in 2018 2nd International Conference on Green Energy and Applications, Singapore, 2018, 197.
28. C.-A. Schumann et al. Digital transformation and industry 4.0 as a complex and eclectic change in 2017 Future Technologies Conference, Vancouver, 2017, 645.
- 29.E. Vanderhorn; S. Mahadevan. Digital twin: generalization, characterization and implementation in *Decision Support Systems* 2021, 145, 113524.
30. R. Bitton et al. Deriving a cost-effective digital twin of an ICS to facilitate security evaluation in 23rd European Symposium on Research in Computer Security, Barcelona, 2018, Part I 23, 533.
31. H. Millwater; J. Ocampo; N. Crosby. Probabilistic methods for risk assessment of airframe digital twin structures. *Engineering Fracture Mechanics* 2019, 221, 106674, 2019.
32. J. Meierhofer et al. The digital twin as a service enabler: from the service ecosystem to the simulation model in 10th International Conference, H. Nóvoa; M. Drăgoicea; N. Kühl, Eds.; Springer, 2020, 347–359.
33. B. A. Talkhestani et al. Consistency check to synchronize the digital twin of manufacturing automation based on anchor points. *Procedia CIRP* 2018, 72, 159.
34. F. Perabo et al. Digital twin modelling of ship power and propulsion systems: application of the open simulation platform (OSP) in 2020 IEEE 29th International Symposium on Industrial Electronics, Delft, 2020, 1265.
- 35.A. M. Madni; C. C. Madni; S. D. Lucero. Leveraging digital twin technology in model-based systems engineering. *Systems* 2019, 7, 1.
- 36.J. Fan; P. Zheng; S. Li. Vision-based holistic scene understanding towards proactive human–robot collaboration. *Robotics and Computer-Integrated Manufacturing* 2022, 75, 102304.
- 37.A. K. Ramasubramanian et al. Digital twin for human–robot collaboration in manufacturing: review and outlook. *Applied Sciences* 2022, 12, 4811.
- 38.T. Jin et al. Triboelectric nanogenerator sensors for soft robotics aiming at digital twin

- applications. *Nature Communications* 2020, 1, 5381.
39. A. A. Malik; T. Masood; A. Bilberg. Virtual reality in manufacturing: immersive and collaborative artificial-reality in design of human-robot workspace. *International Journal of Computer Integrated Manufacturing* 2020, 33, 22.
 40. E. I. Borges et al. Framework for armature-based 3D shape reconstruction of sensorized soft robots in extended reality. *Frontiers In Robotics and AI* 2022, 9, 810328.
 41. L. Li et al. Digital twin in aerospace industry: a gentle introduction. *IEEE Access* 2021, 10, 9543.
 42. E. M. Kraft. The air force digital thread/digital twin-life cycle integration and use of computational and experimental knowledge in 54th AIAA Aerospace Sciences Meeting, Reston, 2016, 0897.
 43. A. Bolcavage et al. Integrated computational materials engineering from a gas turbine engine perspective. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation* 2014, 3, 181.
 44. D. Shangguan; L. Chen; J. Ding. A digital twin-based approach for the fault diagnosis and health monitoring of a complex satellite system. *Symmetry* 2020, 12, 1307.
 45. M. Liao; G. Renaud; Y. Bombardier. Airframe digital twin technology adaptability assessment and technology demonstration. *Engineering Fracture Mechanics* 2020, 225, 106793.
 46. E. Glaessgen; D. Stargel. The digital twin paradigm for future nasa and us air force vehicles in 53rd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Materials Conference; 20th AIAA/ASME/AHS Adaptive Structures Conference; 14th AIAA, Honolulu, 2012, 1818.
 47. K. Reifsnider; P. Majumdar. Multiphysics stimulated simulation digital twin methods for fleet management in 54th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, And Materials Conference, Boston, 2013, 1578.
 48. F. Tao et al. Digital twin driven prognostics and health management for complex equipment. *CIRP Annals* 2018, 67, 169.
 49. A. Patrikeev et al. NVH analysis of offroad vehicle frame: evaluation of mutual influence of the body-frame system components in Proceedings of 17th International Workshop on New Approaches to High-Tech: Nano-Design, Technology, Computer Simulations, Minsk, 2017, 106.
 50. H. Shikata. et al. Digital twin environment to integrate vehicle simulation and physical verification. *Sei Technical Review* 2019, 88, 18.
 51. P. Rajesh et al. Digital twin of an automotive brake pad for predictive maintenance. *Procedia Computer Science* 2019, 165, 18.
 52. C. Pizzolato et al. Neuromusculoskeletal modeling-based prostheses for recovery after spinal cord injury. *Frontiers In Neurorobotics* 2019, 13, 97.
 53. A. R. Donati et al. Long-term training with a brain-machine interface-based gait protocol induces partial neurological recovery in paraplegic patients. *Scientific Reports* 2016, 6, 30383.
 54. Q. Lv et al. A digital twin-driven human-robot collaborative assembly approach in the wake of Covid-19. *Journal Of Manufacturing Systems* 2021, 60, 837.
 55. K. Alexopoulos; N. Nikolakis; G. Chryssolouris. Digital twin-driven supervised machine learning for the development of artificial intelligence applications in manufacturing. *International Journal of Computer Integrated Manufacturing*, 2020, 33, 429.
 56. A. Rasheed; O. San; T. Kvamsdal. Digital twin: values, challenges and enablers. *Arxiv Preprint Arxiv:1910.01719*, 2019.

57. I. Verner et al. Robot online learning through digital twin experiments: a weightlifting project in Proceedings of the 14th International Conference on Remote Engineering and Virtual Instrumentation, New York, 2018, 307–314.
58. G. Grinshpun et al. From virtual testbeds to real lightweight robots: development and deployment of control algorithms for soft robots, with particular reference to in Proceedings of ISR 2016: 47st International Symposium On Robotics, Munich, 2016. 1–7.
59. M. Matulis; C. Harvey. A robot arm digital twin utilising reinforcement learning. Computers & Graphics 2021, 95, 106.
60. C. Liu et al. A multitasking-oriented robot arm motion planning scheme based on deep reinforcement learning and twin synchro-control. Sensors 2020, 20, 3515.
61. K. Xia et al. A digital twin to train deep reinforcement learning agent for smart manufacturing plants: environment, interfaces and intelligence. Journal Of Manufacturing Systems 2021, 58, 210.
62. G. Zhou et al. Knowledge-driven digital twin manufacturing cell towards intelligent manufacturing. International Journal of Production Research 2020, 58, 1034.
63. Y. Xu et al. A digital-twin-assisted fault diagnosis using deep transfer learning. IEEE Access 2019, 7, 19990.
64. Z. Ren; J. Wan; P. Deng. Machine-learning-driven digital twin for lifecycle management of complex equipment. IEEE Transactions on Emerging Topics in Computing 2022, 10, 9.
65. K. Dröder et al. A machine learning-enhanced digital twin approach for human-robot-collaboration. Procedia CIRP 2018, 76, 187.
66. P. Kurrek et al. Reinforcement learning lifecycle for the design of advanced robotic systems in 2020 IEEE Conference on Industrial Cyberphysical Systems, Tampere, 2020, 230.
67. B. Ahmad. Intelligent digital twin to make robot learn the assembly process through deep learning. Lahore Garrison University Research Journal of Computer Science and Information Technology 2021, 5, 65.
68. K. Denecke; C. R. Baudoin. A review of artificial intelligence and robotics in transformed health ecosystems. Frontiers In Medicine 2022, 9, 795957.
69. M. C. Howard. A meta-analysis and systematic literature review of virtual reality rehabilitation programs. Computers In Human Behavior 2017, 70, 317.
70. J. Corral-Acero et al. The ‘digital twin’ to enable the vision of precision cardiology. European Heart Journal 2020, 41, 4556.
71. A. Bécue et al. A new concept of digital twin supporting optimization and resilience of factories of the future. Applied Sciences 2020, 10, 4482.
72. W. Hu et al. Digital twin: a state-of-the-art review of its enabling technologies, applications and challenges. Journal Of Intelligent Manufacturing and Special Equipment 2021, 2, 1.
73. F. Pires et al. Digital twin in industry 4.0: technologies, applications and challenges in 2019 IEEE 17th International Conference on Industrial Informatics, Helsinki 2019, 1, 721.
74. A. Fuller et al. Digital twin: enabling technologies, challenges and open research. IEEE Access 2020, 8, 108952.
75. A. Sharma et al. Digital twins: state of the art theory and practice, challenges, and open research questions. Journal of Industrial Information Integration 2022, 30, 100383.

76. M. Alazab et al. Digital twins for healthcare 4.0: recent advances, architecture, and open challenges. *IEEE Consumer Electronics Magazine* 2022, 12, 29.
- 77.K. Zhang et al. Concepts and applications of digital twins in healthcare and medicine. *Patterns* 2024, 5, 1.
- 78.W. Liu et al. Digital twin of space environment: development, challenges, applications, and future outlook. *Remote Sensing* 2024, 16, 3023.
- 79.L. Zhang; L. Zhou; B. K. Horn. Building a right digital twin with model engineering. *Journal of Manufacturing Systems* 2021, 59, 151.
80. P. Legai. Optimizing collection, transmission, and transformation of space data to take up security challenges, toward improved crisis prevention and response in *Space Data Management*, A. Cortesi, Ed.; Springer, Singapore, 2024, 127-139.

Seção 5

Planejamento de Transportes



CAPÍTULO 8

USO DE KRIGAGEM PARA ESTIMAÇÃO ESPACIAL DE DADOS SOBRE QUALIDADE DO TRANSPORTE PÚBLICO URBANO

Samille Santos Rocha¹, Ana Júlia de Oliveira Tertuliano^{1*}, Samuel de França Marques¹ e Cira Souza Pitombo¹

1 – Departamento de Engenharia de Transportes (STT), Escola de Engenharia de São Carlos (EESC), Universidade de São Paulo (USP), São Carlos, SP, Brasil.

**ajtertuliano@usp.br*

Resumo - A demanda por transportes possui relação espacial, uma vez que as atividades urbanas e a ocupação do solo exercem influência nos deslocamentos cotidianos da população. Em grandes cidades, milhares desses deslocamentos são feitos utilizando o transporte público, especialmente o ônibus. A importância do transporte público (TP), dentre outras coisas, está na democratização do direito à cidade (acesso a bens e serviços), especialmente à população de baixa renda. Entretanto, problemas relacionados ao TP, como, por exemplo, a falta de qualidade do serviço, podem levar à escolha do transporte individual motorizado, ocasionando graves problemas na mobilidade urbana. Diante disso, a principal proposta dessa pesquisa é a obtenção de um método para analisar a qualidade do transporte público em uma linha da rede de TP da cidade de São Paulo. Um indicador foi elaborado a fim de avaliar a qualidade do TP relativa, sobretudo, ao conforto do passageiro. Para a realização deste estudo, foram utilizados dados sobre a demanda e oferta (considerando a quantidade de assentos disponíveis) nas paradas da linha 6913-1 na hora pico da manhã. Além da proposta de um indicador, a qualidade dos deslocamentos nessa linha de ônibus foi verificada utilizando ferramentas de análise espacial, como a krigagem.

Palavras-chave: *Transporte público. Conforto do usuário. Indicador. Krigagem.*

Financiamentos: O presente trabalho foi realizado com apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) - Processos: 152536/2018-3 e 305973/2023-1.

Introdução

A necessidade de locomover pessoas e mercadorias diariamente pelas cidades leva a vários problemas como congestionamentos, poluição, riscos de acidentes, dentre outros [1]. A mobilidade é atualmente uma das principais preocupações nas áreas urbanas e o uso dos modos de transporte coletivo e não motorizados são alternativas sustentáveis em detrimento do modo individual motorizado. Além disso, o transporte público promove acesso a bens e serviços oferecidos nas grandes cidades, promovendo o direito à cidade para a população de baixa renda. No entanto, muitas vezes, os serviços de transporte público não atendem adequadamente às necessidades de mobilidade da população, sendo não confiáveis, desconfortáveis ou inseguros [2]. Devido a sua importância, é necessário que um sistema de transporte público ajuste sua operação para que a oferta e a demanda estejam em constante equilíbrio, de forma a atenuar problemas relativos à mobilidade urbana.

O conceito de qualidade vem sendo aplicado ao transporte público, pois se relaciona a diversos fatores, como conforto, segurança, tempo de viagem, conveniência e acessibilidade. Alguns autores [3-5] determinaram, ao longo dos anos, as variáveis mais importantes para os usuários do transporte público ao avaliar a qualidade do serviço em diversas cidades do mundo, identificando fatores diversos tais como acessibilidade, conforto, tempo de espera e confiabilidade.

O planejamento de transportes realiza estudos relacionados à aplicação de técnicas que analisam a adequação da oferta à demanda por transportes, com a finalidade de minimizar problemas na mobilidade, principalmente nas grandes cidades. Modelos tradicionais de demanda por transportes, embora bastante utilizados, apresentam algumas restrições, especialmente relacionadas à natureza dos dados de viagens. Além disso, a relação existente entre a geração de viagens e variáveis explicativas, como população ou empregos, por exemplo, muitas vezes não é linear.

Outra questão a ser considerada é que a demanda por transportes surge a partir da necessidade de realização de atividades cotidianas como ir ao trabalho, à escola ou fazer compras. Portanto, é necessário entender como estas atividades estão distribuídas no espaço [6]. No entanto, a localização das atividades e uso do solo, que influenciam as decisões individuais relacionadas à demanda por transportes, não é considerada nos modelos tradicionais, ou seja, a componente espacial é desprezada.

Conforme a literatura apresenta [7], fenômenos no espaço geográfico são dependentes. Dessa forma, dados que estão espacialmente próximos tendem a ter valores mais parecidos que aqueles mais distantes. Por esta razão, a utilização de variáveis que incorporam a localização geográfica passa a ser uma importante ferramenta para o aprimoramento das estimativas de dados relacionados à demanda por transportes [8]. Ao longo dos últimos anos, análises urbanas de uso do solo e transportes vêm aplicando ferramentas que utilizam a localização geográfica para entender a dependência espacial entre as observações [9-11].

A geoestatística é uma técnica de análise espacial que considera que os valores das variáveis não são independentes no espaço. A sua aplicação na área de planejamento e demanda por transportes vem evoluindo ao longo dos anos [12]. Há autores na literatura [9] que utilizaram técnicas de análise de dependência espacial para prever o tráfego médio diário anual. Estes autores concluíram que o volume de tráfego em uma estação de monitoramento está correlacionado com os volumes nas estações vizinhas. Além disso, os modelos que levaram em conta a autocorrelação espacial apresentaram melhor capacidade preditiva em relação aos modelos tradicionais não espaciais. Alguns autores [13-17] utilizaram a geoestatística para prever tempo de viagem, carregamentos de passageiros, embarques e desembarques e a variação espacial na velocidade veicular. Outros autores [18] compararam os resultados de estimativas por krigagem para contagem de tráfego considerando a distância euclidiana e em rede. E ainda há autores [19] que utilizaram a geoestatística para estimar a probabilidade da ocorrência de roubos em transporte público por ônibus em Salvador, Bahia. Com o uso da krigagem indicativa, foi possível obter uma superfície espacial sobre a possível ocorrência de crimes no interior dos veículos. Os autores concluíram que a análise espacial pode ser uma ferramenta importante para políticas públicas voltadas à segurança no transporte público.

Especificamente na área de demanda por transportes, [20] há autores que estimaram o número de passageiros em uma linha de metrô de Nova York. As distâncias euclidianas foram substituídas pelas distâncias em rede, considerando que atividades de transporte geralmente ocorrem em uma rede viária estruturada. A krigagem em rede apresentou melhores ajustes em relação aos resultados da regressão linear e de krigagem realizada através da distância euclidiana convencional. Alguns autores [21] utilizaram um método sequencial empregando análise em componentes principais (ACP) e krigagem com deriva externa (KED). Nesse estudo, uma componente, relacionada a dados socioeconômicos da população, foi utilizada como variável secundária para auxiliar a previsão de dados agregados por zona de tráfego sobre viagens produzidas por transporte coletivo na cidade de São Paulo.

Especificamente, para avaliação da qualidade de sistemas de transportes, a geoestatística foi utilizada como interpolador espacial para obtenção do nível de serviço de ciclofaixas e ciclovias em João Pessoa (PB) [22]. Neste trabalho fica clara a abordagem da geoestatística no sentido de reduzir a avaliação de toda a rede cicloviária, uma vez que a técnica é capaz de estimar o nível de serviço em trechos viários não amostrados, reduzindo consideravelmente os custos com levantamento de dados associados à qualidade.

Diante disso, a presente pesquisa buscou analisar o conforto durante as viagens através da análise da demanda e da oferta (quantidade de assentos disponíveis) por ponto de parada durante o pico da manhã em uma linha de ônibus que conecta a Zona Sul ao centro da cidade de São Paulo (SP) com auxílio da geoestatística.

Considerando a relevância do transporte público no cotidiano da população e a importância do adequado planejamento do mesmo, o presente texto busca apresentar os principais resultados da pesquisa realizada, além de apontar os desafios encontrados ao longo da sua execução.

Fundamentação Teórica: a ferramenta

Análise Espacial

A aplicação de ferramentas e modelos que avaliam as relações dos valores de uma variável no espaço é conhecida como análise espacial de dados. Esse conjunto de técnicas procura relacionar e quantificar características de um fenômeno (que varia significativamente no espaço) a partir de sua localização geográfica [23-24].

Além das ciências ambientais, muitas áreas de estudo utilizam ferramentas de análise espacial, como a criminologia, epidemiologia e planejamento urbano [25-27]. Principalmente após os avanços dos Sistemas de Informações Geográficas (SIG) e com a difusão de dados espaciais digitais, técnicas que incorporam a dependência espacial aos estudos relativos a problemas de transportes passaram a ser amplamente utilizadas.

A análise espacial possui duas diferentes abordagens (exploratória e confirmatória), que compreendem desde uma simples descrição estatística até a inferência de dados através de modelos [28]. A análise exploratória é utilizada quando se quer conhecer as características e padrões espaciais de uma variável. O semivariograma, principal etapa da modelagem geoestatística, representa a dependência espacial entre pares de observações e corresponde a uma ferramenta de análise exploratória de dados espaciais [24]. Já a

análise confirmatória engloba um conjunto de ferramentas destinado para as etapas de modelagem, previsão e validação de dados relativos a fenômenos espaciais, como a krigagem.

A modelagem de fenômenos espaciais através da geoestatística surgiu a partir da associação de fenômenos naturais com embasamentos teóricos da estatística, principalmente da teoria das funções aleatórias [29]. A teoria geoestatística associa a aleatoriedade do fenômeno a um modelo estocástico no qual a variável regionalizada é considerada como sendo uma entre muitas realizações possíveis de uma função aleatória [30]. Esta subseção apresenta os principais conceitos e ferramentas da técnica.

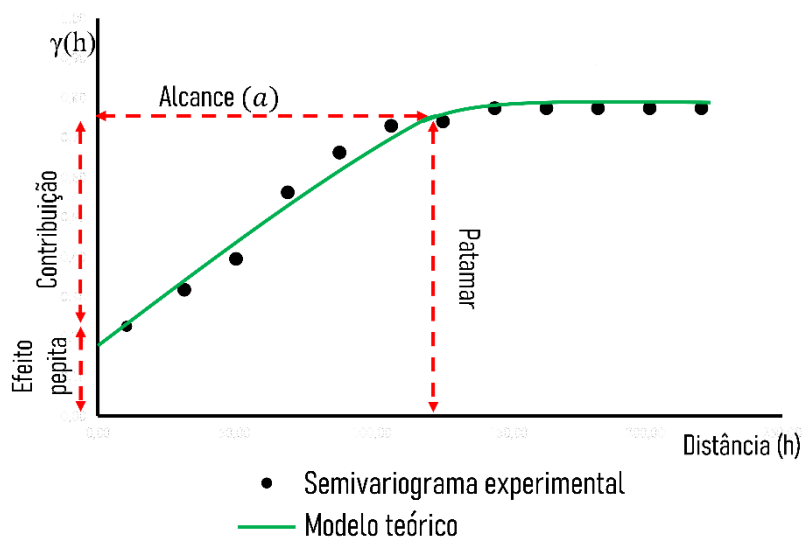
As Variáveis Regionalizadas (VR) representam um conjunto de dados distribuídos espacialmente ou associados a um par de coordenadas geográficas. De acordo com a teoria das VR, os valores de um atributo não se distribuem espacialmente de forma aleatória, mas de acordo com determinada distância e direção. Portanto, teoricamente, as VR representam características estruturais de uma forma matematicamente adequada para, na prática, estimar dados a partir de uma pequena amostra [31].

O estimador da função do semivariograma da variável regionalizada z entre dois pontos, x_i e x_j , separados por uma distância h é:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [Z(x_i) - Z(x_{i+h})]^2 \quad (1)$$

A semivariância de um conjunto de dados é calculada até uma distância máxima que separa os pares de pontos. Com isso, a variabilidade do fenômeno é representada graficamente pelo semivariograma experimental. A modelagem da variabilidade dos dados é feita através de uma curva de ajuste (semivariograma teórico). A Fig. 1 apresenta uma ilustração do semivariograma experimental e teórico [32].

Figura 1: Semivariograma



Fonte: Adaptado de [24].

A krigagem é um método geoestatístico de estimação espacial de superfícies. A krigagem ordinária (KO) é utilizada quando se admite que as médias dos atributos são constantes e desconhecidas. O valor desconhecido $Z_{x_0}^*$ pode ser estimado a partir de uma combinação linear dos pesos λ_i com n valores vizinhos $Z(x_i)$ do ponto a ser estimado [32]:

$$Z_{x_0}^* = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) \quad (2)$$

Os pesos i são calculados com o intuito de que a variância de estimação seja mínima. Por isso, o estimador KO é bastante utilizado. Os pesos ótimos e variância mínima são obtidos pelos parâmetros de Lagrange [33].

O sistema de equações da krigagem ordinária pode ser representado de forma matricial, conforme a Eq. 3.

$$[K] \cdot [\lambda] = [M] \quad (3)$$

onde,

K é a matriz da variância entre as amostras,

λ são os ponderadores da krigagem e

M é matriz da variância entre as amostras e o ponto a ser previsto.

Desenvolvendo os termos da Eq. 3, monta-se a matriz da krigagem ordinária:

$$\begin{bmatrix} \gamma(x_1 - x_1) & \gamma(x_1 - x_2) & \dots & \gamma(x_1 - x_n) & 1 \\ \gamma(x_2 - x_1) & \gamma(x_2 - x_2) & \dots & \gamma(x_2 - x_n) & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \gamma(x_n - x_1) & \gamma(x_n - x_2) & \dots & \gamma(x_n - x_n) & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(x_0 - x_1) \\ \gamma(x_0 - x_2) \\ \vdots \\ \gamma(x_0 - x_n) \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4)$$

Os valores dos ponderadores $[\lambda]$, são obtidos através do produto entre a matriz inversa de K e a matriz M [29].

$$[\lambda] = [K]^{-1} \cdot [M] \quad (5)$$

Se duas variáveis possuem alta correlação entre si, admite-se que uma variável supostamente conhecida (secundária) pode ser utilizada para estimar outra variável a ela correlacionada (primária).

A Krigagem com Deriva Externa (KED, do inglês *kriging with external drift*) é uma ferramenta da geoestatística multivariada que combina o uso de variáveis co-localizadas para estimar uma variável primária. Portanto, a KED possibilita que uma variável

primária seja conhecida em qualquer ponto através do valor da variável secundária [29]. A função $y(x)$ precisa ser conhecida em todos os pontos amostrais da variável primária ($Z(x)$), inclusive nos nós da grade de estimativa (interpolação espacial) [34]. Sendo $Z(x)$ a variável primária e $y(x)$ a variável secundária, ambas apresentam dependência linear, conforme escreve [30]:

$$E[Z(x)] = a_0 + b_1 y(x) \quad (6)$$

Assim, o estimador da krigagem com deriva externa pode ser escrito como:

$$Z_{KED}^*(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) \quad (7)$$

com a primeira condição de não enviesamento sendo:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \quad (8)$$

e a segunda condição de não enviesamento como:

$$y(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i y(x_i) \quad (9)$$

Onde x_i é o valor observado e λ_i é o ponderador de cada ponto x_i . A variância da estimação, juntamente com os respectivos ponderadores, é obtida através da matriz seguinte (Eq. 10):

$$\begin{bmatrix} C & 1 & Y \\ 1^T & 0 & 0 \\ Y^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ -\mu \\ -\mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_0 \\ 1 \\ Y_0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

Onde C representa a função de covariância entre a variável primária e a secundária e μ é o multiplicador de Lagrange [34].

A Validação Cruzada, ou teste do ponto fictício, é a técnica que obtém a estimativa dos pontos amostrados, desconsiderando o valor verdadeiro da observação. Para estimar o valor de um ponto são utilizados os valores de amostras vizinhas. Com isso, para cada ponto de valor conhecido, existirá o valor verdadeiro (valor observado) e o valor estimado por krigagem, podendo-se assim obter medidas de desempenho dos modelos [34]. A partir da validação cruzada, podem ser analisados erros, variância e desvio padrão da estimação, além da média de erros padronizados.

Obtenção de superfícies através da Krigagem

A geoestatística é um método de estimativa local e seu objetivo é a modelagem da distribuição e variabilidade de um fenômeno espacial [34]. A krigagem, procedimento de estimação da geoestatística, é um algoritmo que realiza a interpolação espacial de dados através dos pesos associados a cada amostra. Estes pesos são atribuídos a partir dos parâmetros do semivariograma teórico [34]. Quanto mais próximo uma amostra estiver de um ponto a ser estimado, maior será sua influência no valor deste ponto. Por outro lado, quanto mais agrupados estiverem os dados, menor será o peso individual de cada amostra no sistema de estimação de um ponto [29].

Na krigagem, a interpolação é realizada estabelecendo-se uma grade, regularmente espaçada, onde cada nó da grade é um ponto x_0 a ser estimado. Como resultado da interpolação, tem-se um mapa de superfície de valores estimados de $Z(x)$ [34].

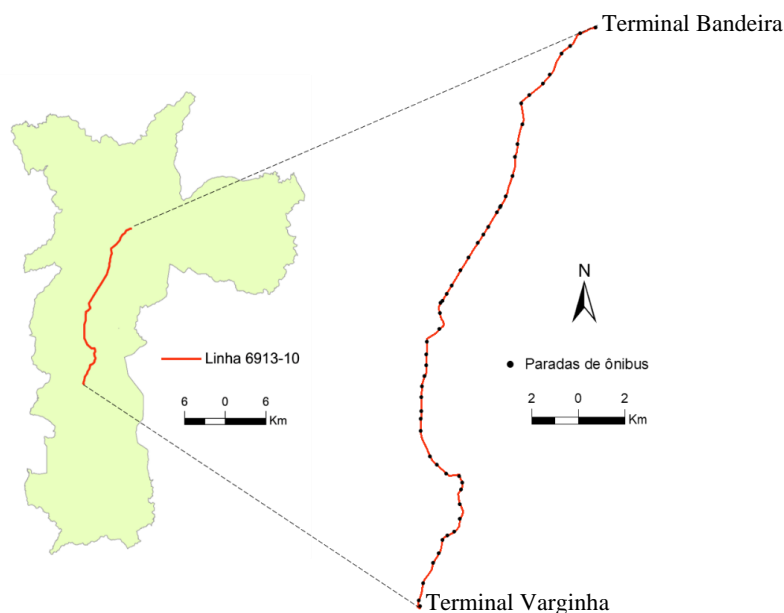
Desenvolvimento

Área de Estudo

O caso de estudo selecionado neste trabalho foi a linha 6913-10 (Fig. 2), sentido bairro-centro, que interliga o Terminal Varginha, na Zona Sul, ao Terminal Bandeira, no centro de São Paulo.

A linha 6913-10 foi selecionada considerando a extensão, aproximadamente 30 km, e seu potencial de conexão entre áreas densamente povoadas, parte do distrito de Grajaú (que pode ser visto na Fig. 2), ao centro de São Paulo, importante polo de atração de viagens. Além disso, essa linha apresenta uma razoável quantidade de pontos de parada, 51 no total, o que torna estatisticamente mais confiável as inferências obtidas através da geoestatística. A próxima subseção apresenta os dados relacionados à movimentação de passageiros nessa linha.

Figura 2: Localização da área de estudo



Fonte: Autores (2024)

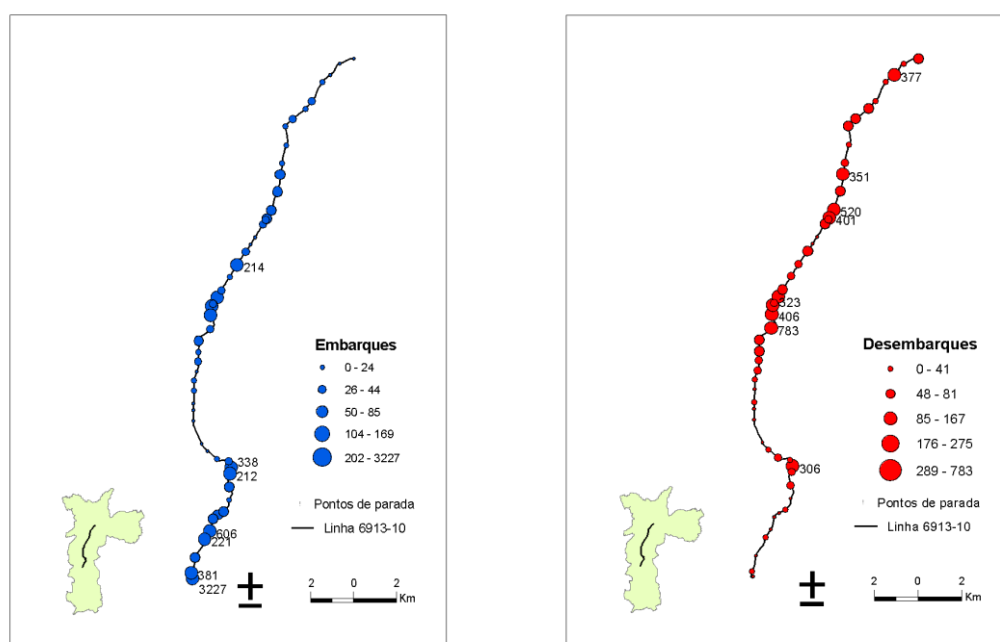
Dados

As bases de dados, como os pontos de parada e as linhas de ônibus, foram obtidas através do GEOSAMPA, um sítio eletrônico que disponibiliza diversas bases de dados georreferenciados do município de São Paulo. O geoprocessamento dos dados, análise e filtragem das informações sobre a área de estudo foram realizados em ambiente SIG, no *software* ArcGis 10.3.

Os dados de embarque, desembarque e carregamento foram coletados pela empresa São Paulo Transporte S/A (SPTrans) em 2012 e extrapolados para o ano de 2017. O conjunto de dados contém o código dos pontos de parada, o sentido da linha (1 – centro; 2 – bairro) e as faixas horárias em que as viagens foram realizadas. Neste estudo, foram consideradas, para análise, as viagens realizadas na hora pico da manhã, sentido centro.

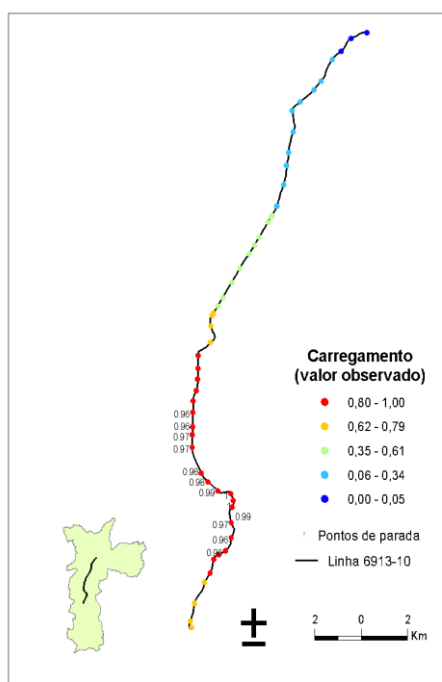
As informações disponibilizadas foram associadas às coordenadas geográficas das paradas de ônibus da linha 6913-10 (Fig. 2) e espacializadas para compreensão do fenômeno no espaço geográfico. As Figs. 3 e 4 apresentam os embarques, desembarques e o carregamento nas paradas de ônibus ao longo da linha. A variável carregamento foi normalizada, a fim de diminuir a ordem de grandeza dos dados.

Figura 3: Embarques, desembarques nos pontos de parada da linha 6913-10



Fonte: Autores (2024)

Figura 4: Carregamento nos pontos de parada da linha 6913-10



Fonte: Autores (2024)

Para mensurar a qualidade do serviço de transporte público na linha 6913-10 foram considerados dados sobre oferta na hora pico da manhã (entre as 5:00h e 8:59h), disponibilizadas no sítio eletrônico da SPTrans e pelo Centro de Estudos da Metrópole (CEM). O CEM disponibilizou dados georreferenciados sobre as linhas de ônibus do

município de São Paulo. Dentre as informações contidas nesse banco de dados foram selecionadas informações sobre a frota (tipo e quantidade) e extensão das linhas.

A linha 6913-10 se insere no subsistema estrutural, no qual opera linhas com veículos de médio e grande porte, como os articulados e biarticulados. Linhas com esse tipo de estrutura buscam atender demandas elevadas, com a finalidade de integrar diversas regiões às áreas centrais da cidade. Outra informação importante para chegar à capacidade dessa linha na hora pico foi o tipo da frota e a demanda. A Tabela 1 resume as principais características da linha 6913-10.

Tabela 1: Características operacionais da linha 6913-10

Subsistema	Tipo de ônibus	Frota máxima no pico da manhã	Volume de pass. na seção crítica	Tempo estimado de viagem (min)
Estrutural	Articulado (23 m)	15	4878	111

Fonte: Autores (2024)

A norma brasileira de especificações técnicas de fabricação de veículos para transporte coletivo de passageiros [35] foi utilizada para determinar, em média, a capacidade de oferta de lugares sentados na hora pico da manhã.

É importante mencionar, no entanto, que essa norma não compreende a capacidade para ônibus articulado de 23m, mas sim para veículo de 18m. O ônibus articulado de 18m possui 60 assentos, com capacidade mínima de transportar 100 passageiros sentados e em pé [31]. No entanto, para a análise do conforto, apenas a quantidade de assentos foi relacionada à capacidade neste estudo. Para o caso do ônibus articulado de 23m, foi considerada a quantidade de 80 assentos.

A partir das informações da Tabela 1 e as normas técnicas disponíveis no documento de normas técnicas, [35], a capacidade total (2320 lugares) na linha 6913-10 foi calculada, sem considerar, no entanto, a variação na oferta na hora pico da manhã.

Para dimensionar a oferta na hora pico da manhã, foi utilizado o volume na seção crítica (V_c) para determinar o fluxo e a frequência de viagens na linha estudada. Segundo alguns autores [36], o número de veículos da frota (F) para atender um fluxo Q é obtida da seguinte maneira:

$$Q = \frac{P}{C} \quad (11)$$

$$H = \frac{60}{Q} \quad (12)$$

$$F = \frac{T}{H} \quad (13)$$

sendo,

P a demanda ou fluxo de passageiros na seção crítica (pass/h);

C a capacidade do veículo de transporte (pass/veíc). Neste estudo foi considerado o número de assentos;

T o tempo de ciclo da linha (min) considerando o tempo de 60s em cada parada;

H *headway* entre os veículos (min/veíc).

A partir das informações obtidas com as Eqs. 11, 12 e 13, a frota foi dimensionada em 29 veículos para atender à demanda da hora pico da manhã. Por fim, considerando a quantidade de assentos para um ônibus articulado de 23m e o valor de F , a capacidade total na hora pico da manhã foi estabelecida como:

$$C_{total} = F * C \quad (14)$$

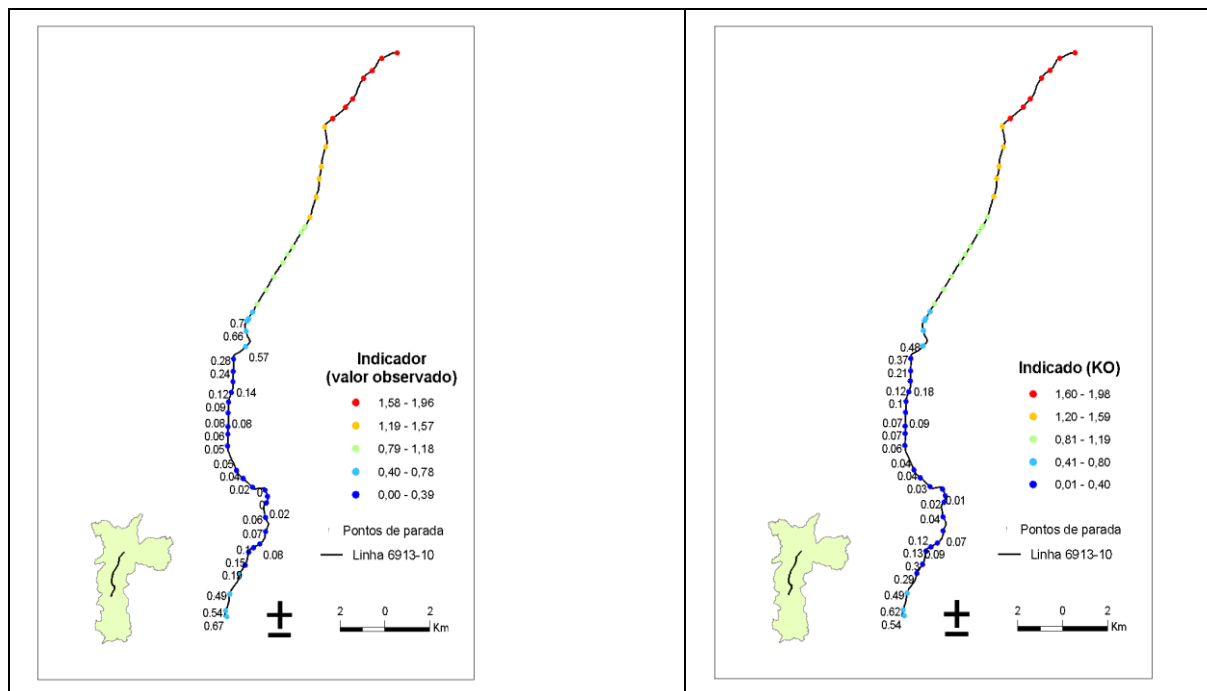
A partir das etapas descritas acima, um indicador para mensurar o conforto nas viagens foi calculado como:

$$IC = \frac{V_c - x}{C_{total}} \quad (15)$$

onde, IC é o indicador do conforto e x é o carregamento em cada parada de ônibus.

A Fig. 5 apresenta a distribuição espacial do indicador e os valores estimados nos pontos de parada através da krigagem ordinária. Essa etapa foi necessária para obter uma grade de pontos estimados a serem utilizados como dados secundários ou auxiliares na previsão de dados sobre carregamento através da KED.

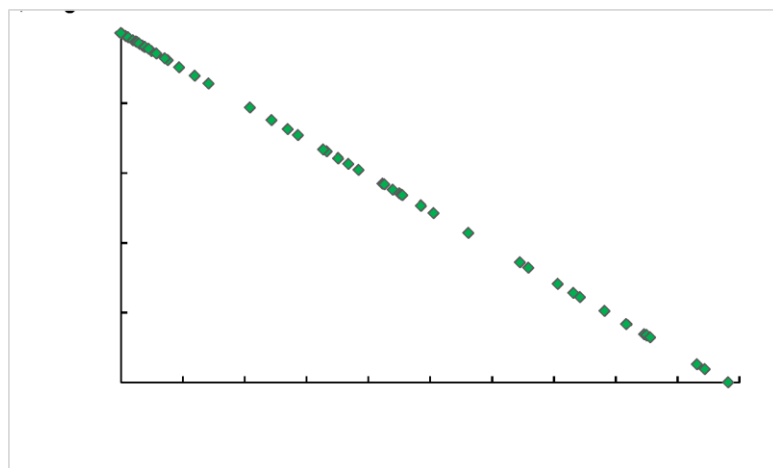
Figura 5: Pontos observados e estimados do indicador do conforto



Fonte: Autores (2024)

O coeficiente de correlação de *Pearson*® entre o carregamento e o indicador de qualidade é igual a -1. Comparando as Fig. 4 e 5, verifica-se que há uma forte associação negativa entre as duas variáveis. Em outras palavras, é possível afirmar que, à medida que o carregamento aumenta, o indicador de conforto diminui, como pode ser observado através do gráfico de dispersão entre as variáveis (Fig. 6).

Figura 6: Dispersão entre as variáveis estudadas



Fonte: Autores (2024)

Foi importante verificar a correlação entre o carregamento e o indicador, pois a etapa de estimação espacial através da krigagem com deriva externa exige que uma variável secundária seja altamente correlacionada com a variável a ser estimada.

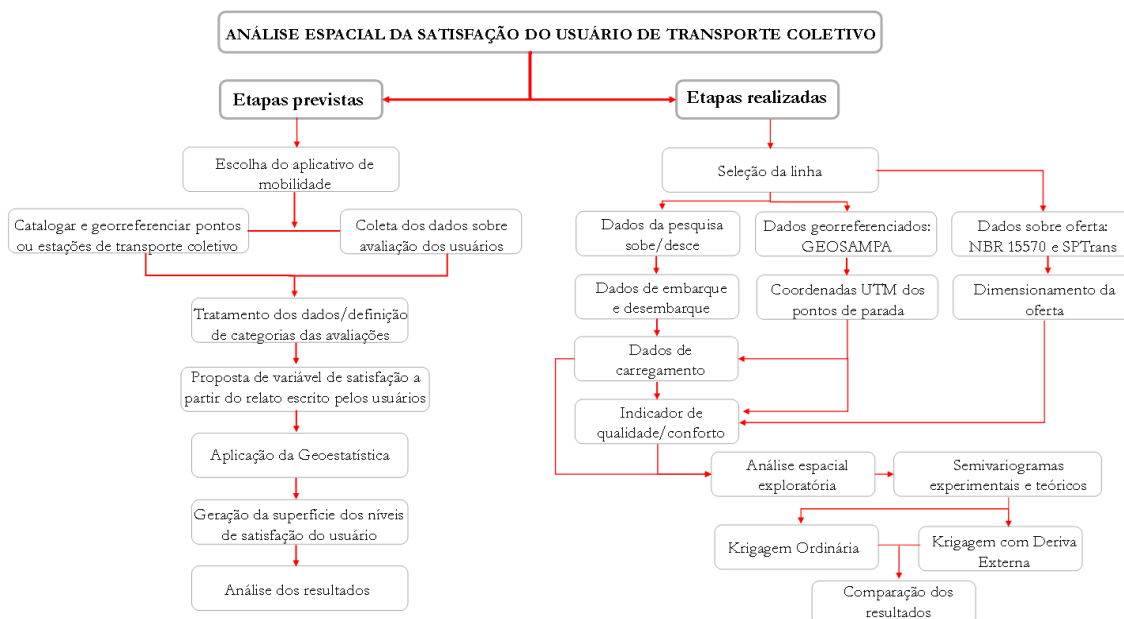
Desenvolvimento da Pesquisa

A proposta inicial desse estudo foi utilizar informações relacionadas à satisfação, fornecidas pelos próprios usuários de transporte público, através de aplicativos de mobilidade. Pretendia-se utilizar dados relacionados à frequência, conforto, segurança, lotação, limpeza, dentre outros. Através destas plataformas, seria possível desenvolver um método de mensuração da satisfação do usuário de um sistema de transporte através das técnicas de análise espacial já mencionadas. Vale a pena ressaltar que essas bases *web* fornecem também a localização geográfica dos dados, informação extremamente necessária em análise espacial.

Foi realizado contato por *e-mail* com a empresa *Moovit* solicitando os dados necessários para a realização do método proposto. No entanto, foi informado que essas informações não são disponibilizadas ao público. Como segunda alternativa, a coleta de dados poderia ser realizada através da participação de usuários voluntários que utilizariam plataformas abertas de mapeamento colaborativo, como o *Google Maps*. Entretanto, devido ao curto espaço de tempo para a preparação da base cartográfica e catalogação de pontos de parada, além da obtenção de voluntários para alimentar um banco de informações, uma terceira alternativa foi proposta, através de dados de demanda e oferta já disponibilizados. A Fig. 7 ilustra um esquema das etapas realizadas e não realizadas nesta pesquisa. A verificação da qualidade percebida pelo usuário do TP, apesar da mudança de método, foi parcialmente contemplada, especialmente considerando-se que o uso de técnicas de análise espacial, comprovadamente, pode auxiliar na previsão de dados que possuem dependência espacial.

Com o uso de dados já disponíveis, foi possível propor um indicador de qualidade relativo ao conforto nas viagens realizadas no pico da manhã, bem como avaliar sua relação de dependência espacial, inclusive com outros fenômenos espaciais, como a distribuição populacional e o uso do solo.

Figura 7: Etapas previstas e realizadas do método proposto



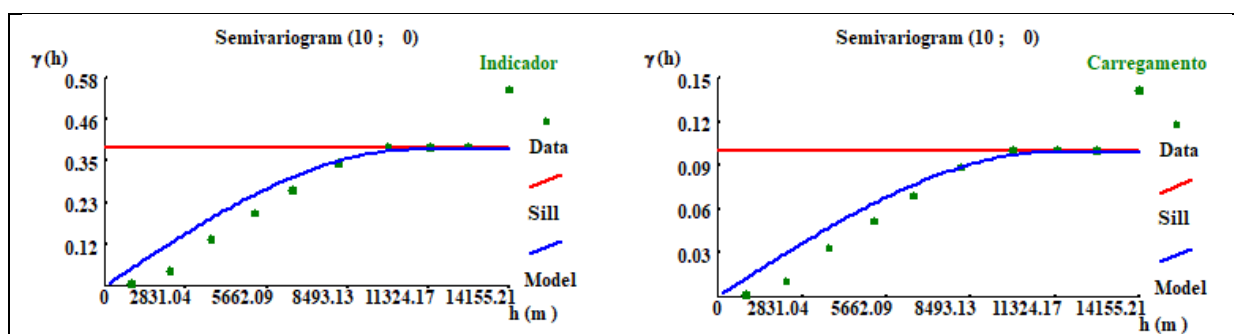
Fonte: Autores (2024)

Resultados e Discussões

Com a definição do indicador de qualidade, foram obtidos dados que permitiram associar o carregamento nos pontos de parada a um índice de conforto das viagens ao longo da linha 6013-10 no pico da manhã.

Com a análise exploratória das variáveis, foi constatado que ambas possuem o mesmo comportamento espacial (Fig. 8), entretanto, com relação inversa, como observado na Fig. 6.

Figura 8: Semivariogramas das variáveis estudadas



Fonte: Autores (2024)

Os parâmetros dos modelos teóricos dos semivariogramas, apresentados na Fig. 8, foram utilizados para estimar as variáveis através de métodos de krigagem. Tanto o carregamento, quanto o indicador, foram estimados utilizando a KO. Foi necessário estimar o indicador para que as informações resultantes servissem como dados secundários na estimativa da variável carregamento.

Após a modelagem dos semivariogramas, o desempenho de cada modelo foi verificado através dos resultados provenientes da validação cruzada. A Tabela 2 mostra algumas medidas de desempenho das duas técnicas de krigagem empregadas neste estudo.

Tabela 2: Medidas de desempenho da krigagem

Carregamento	Erro absoluto	EQM*	Variância média	Desvio padrão
KO	0,02	0,00	0,01	0,08
KED	0,00	0,00	0,07	0,27

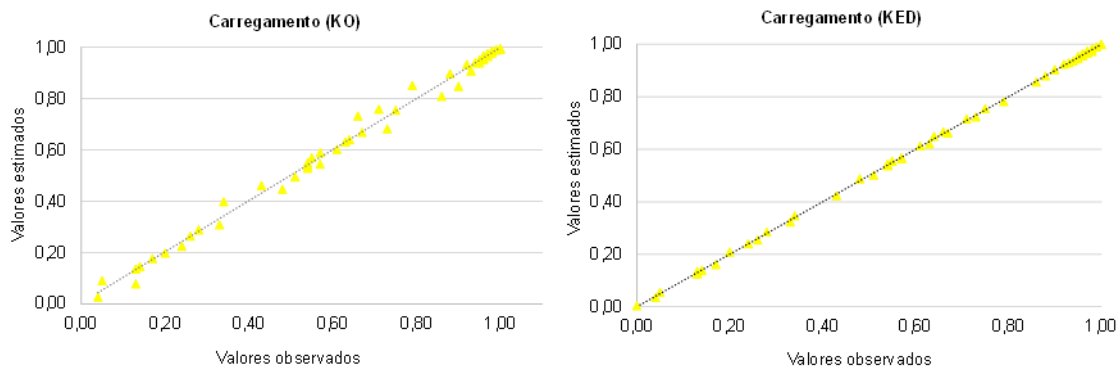
*EQM: Erro Quadrático Médio

Fonte: Autores (2024)

A variância média da estimação foi superior no método KED. Essa medida pode ser verificada para os pontos de parada (Apêndice). A Fig. 9 apresenta os gráficos de dispersão entre valores observados e estimados pela KO e KED. Os valores estimados

são muito semelhantes aos valores observados, no entanto, na estimativa por KED os resultados apresentam maior similaridade.

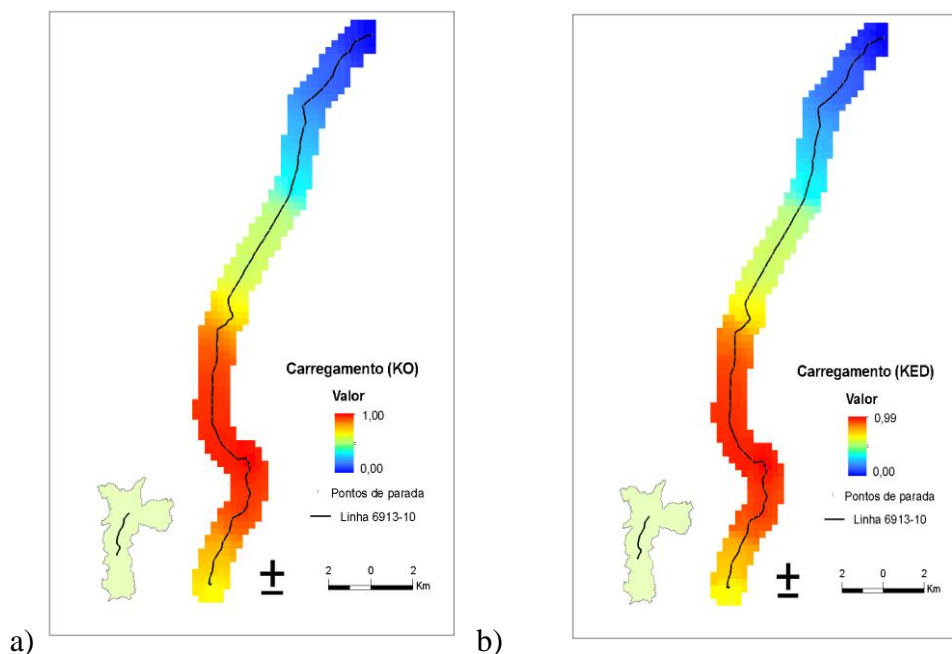
Figura 9 - Dispersão entre valores observados e estimados



Fonte: Autores (2024)

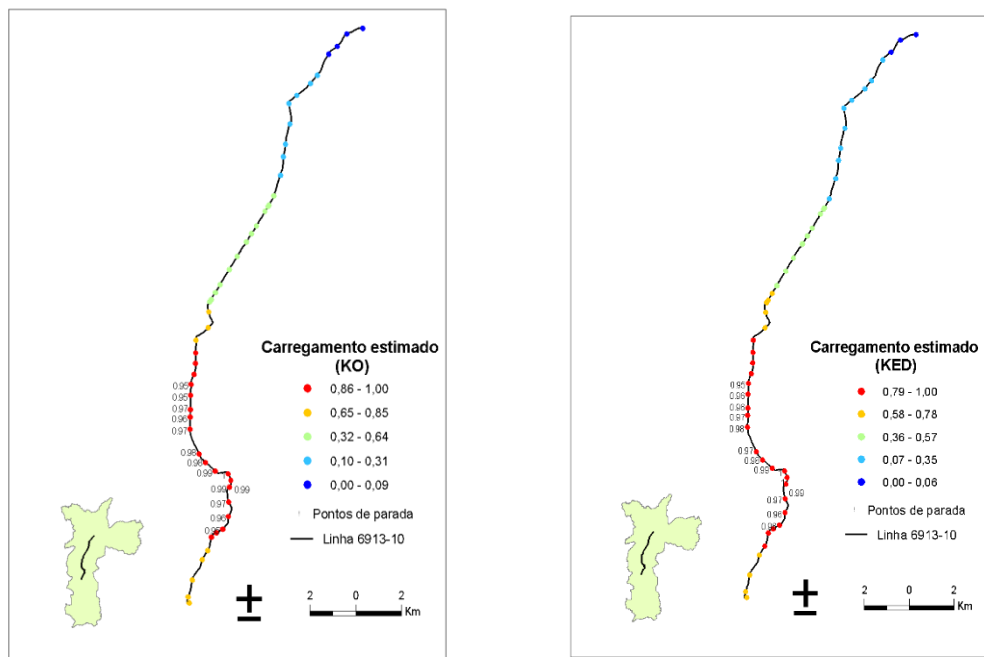
As Figs. 10 e 11 apresentam, respectivamente, os mapas de superfície e pontos estimados da variável “carregamento”, utilizando a KO e a KED. Assim como nos resultados verificados na etapa de validação, tanto os mapas de superfície quanto os de pontos estimados, apresentam valores altamente semelhantes, quando comparados os métodos de krigagem utilizados. As seções críticas concentram-se na mesma área, sendo que à medida que a linha se aproxima do centro, o carregamento diminui e, conseqüentemente, o índice de conforto aumenta, como pode ser verificado na Fig. 5.

Figura 10: Mapas de superfícies estimadas da variável “carregamento”. Em a) Carregamento KO e em b) Carregamento KED



Fonte: Autores (2024)

Figura 11: Mapas de pontos estimados da variável carregamento. Em a) Carregamento estimado KO e b) Carregamento estimado KED.



a)

b)

Fonte: Autores (2024)

Conclusões

Recentemente, as cidades passaram a priorizar um sistema de transporte que reduza parte dos problemas relacionados ao excesso do uso do transporte individual motorizado, tais como congestionamentos, poluição e falta de estacionamento. O transporte público é uma das alternativas para a mobilidade sustentável e deve ser pensado para que tenha a capacidade de atrair usuários do automóvel. Isso pode ser alcançado através de estudos sobre as variáveis que interferem no processo de tomada de decisão dos indivíduos. Um indicador de satisfação global, composto por diversas variáveis, poderia gerar um resultado mais abrangente e qualitativo que expressasse a satisfação, em relação a apenas avaliar o conforto percebido pelo usuário do TP. Por outro lado, a lotação é um atributo que, apesar de ser quantitativo, está diretamente relacionado ao conforto.

Apesar de dados precisos sobre oferta não estarem disponíveis, sendo necessário dimensionar uma oferta média, foi possível observar seções críticas e verificar as relações com áreas populosas. O indicador proposto reflete o grau de dependência espacial do conforto para quem utiliza o transporte público durante as viagens realizadas no pico da manhã. O uso da Krigagem Ordinária (KO) permitiu conhecer uma superfície de dados estimados do indicador de qualidade. A aplicação da Krigagem com Deriva Externa (KED) comprovou que o uso de uma variável auxiliar aprimora as estimativas. Para pesquisas futuras, sugere-se uma extrapolação da validação para linhas adjacentes, a fim de comparar os resultados da krigagem com dados observados. Essa extrapolação poderá corroborar o conceito de dependência espacial relativo à qualidade do transporte público.

Agradecimentos

À SPTrans por disponibilizar o banco de dados da pesquisa Sobe e Desce para a realização deste trabalho.

Referências

1. J. D. Ortúzar; L. G. Willumsen, *Modelling transport*. 4th. ed., Wiley, Oxford, 2011. <https://doi.org/10.1002/9781119993308>.
2. D. Pojani; D. Stead. Sustainable urban transport in the developing world: beyond megacities. *Sustainability* 2015, 7, 7784. <https://doi.org/10.3390/su7067784>.
3. L. Dell'olio; A. Ibeas; P. Cecín. Modelling user perception of bus transit quality. *Transport Policy* 2010, 17, 388. <https://doi.org/10.1016/j.tranpol.2010.04.006>.
4. R. F. Abenoza; O. Cats; Y. O. Susilo. Travel satisfaction with public transport: determinants, user classes, regional disparities and their evolution. *Transportation Research Part A: Policy and Practice* 2017, 95, 64. <https://doi.org/10.1016/j.tra.2016.11.011>.
5. Becker, J. U.; Albers, S. The limits of analyzing service quality data in public transport. *Transportation* 2016, 43, 823.
6. D. Mcfadden. The measurement of urban travel demand. *Journal of Public Economics* 1974, 3, 303. [https://doi.org/10.1016/0047-2727\(74\)90003-6](https://doi.org/10.1016/0047-2727(74)90003-6).
7. W. R. Tobler. A computer movie simulating urban growth in the Detroit region. *Economic Geography* 1970, 46, 234. <https://doi.org/10.2307/143141>.
8. C. S. Pitombo; A. Costa; A. R. Salgueiro. Proposal of a sequential method for spatial interpolation of mode choice. *Boletim de Ciências Geodésicas* 2015, 21, 274. <https://doi.org/10.1590/S1982-21702015000200016>.
9. A. Páez; D. M. Scott. Spatial statistics for urban analysis: a review of techniques with examples. *GeoJournal* 2005, 61, 53. <https://doi.org/10.1007/s10708-005-0877-5>.
10. S. S. Rocha *et al.* Applying optimization algorithms for spatial estimation of travel demand variables. *Transportation Research Interdisciplinary Perspectives* 2021, 10, 1. <https://doi.org/10.1016/j.trip.2021.100369>.
11. A. Lindner; C. S. Pitombo. Sequential gaussian simulation as a promising tool in travel demand modeling. *Journal of Geovisualization and Spatial Analysis* 2019, 3, 1. <https://doi.org/10.1007/s41651-019-0038-x>.
12. S. F. Marques; C. S. Pitombo. Intersecting geostatistics with transportation demand modeling: a bibliographical survey. *Revista Brasileira de Cartografia* 2020, 72, 1004. <https://doi.org/10.14393/rbcv72nespecial50anos-56467>.
13. S. F. Marques; C. S. Pitombo; J. J. Gómez-Hernández. Spatial modeling of travel demand accounting for multicollinearity and different sampling strategies: a stop-level case study. *Journal of Advanced Transportation* 2024, 2024, 1. <https://doi.org/10.1155/2024/7967141>.
14. S. F. Marques; C. S. Pitombo. Local modeling as a solution to the lack of stop-level ridership data. *Journal of Transport Geography* 2023, 112, 2. <https://doi.org/10.1016/j.jtrangeo.2023.103682>.
15. S. F. Marques; C. S. Pitombo. Transit ridership modeling at the bus stop level: comparison of approaches focusing on count and spatially dependent data. *Applied Spatial Analysis and Policy* 2022, 15, 277. <https://doi.org/10.1007/s12061-022-09482-y>.
16. S. F. Marques; C. S. Pitombo. Ridership estimation along bus transit lines based on kriging: comparative analysis between network and Euclidean distances. *Journal of*

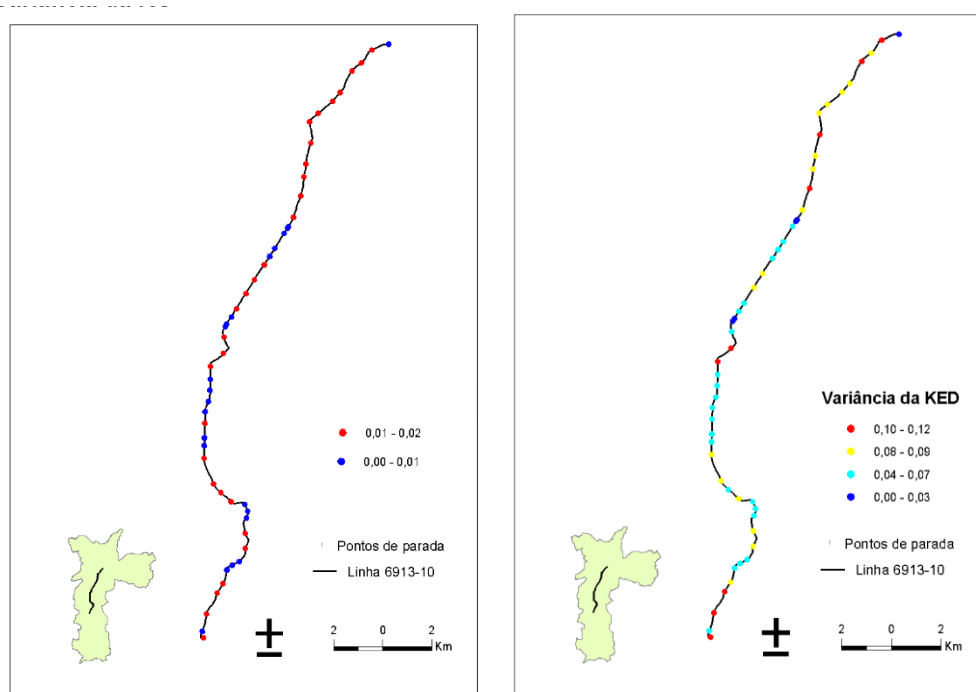
Geovisualization and Spatial Analysis 2021, 5, 1. <https://doi.org/10.1007/s41651-021-00075-w>.

17. S. F. Marques; C. S. Pitombo. Applying multivariate geostatistics for transit ridership modeling at the bus stop level. *Boletim de Ciências Geodésicas* 2021, 27, 1. <https://doi.org/10.1590/1982-2170-2020-0069>.
18. W. Yong; D. Zhuang; L.I.U. Haode. Spatial distribution of floating car speed. *Journal of Transportation Systems Engineering and Information Technology* 2012, 12, 36. [https://doi.org/10.1016/S1570-6672\(11\)60182-7](https://doi.org/10.1016/S1570-6672(11)60182-7).
19. B. Selby; K. M. Kockelman. Spatial prediction of traffic levels in unmeasured locations: applications of universal kriging and geographically weighted regression. *Journal of Transport Geography* 2013, 29, 24. <https://doi.org/10.1016/j.jtrangeo.2012.12.009>.
20. D. Zhang; C.X. Wang. Transit ridership estimation with network Kriging: a case study of Second Avenue Subway, NYC. *Journal of Transport Geography* 2014, 41, 107. <https://doi.org/10.1016/j.jtrangeo.2014.08.021>.
21. A. Lindner *et al.* Estimation of transit trip production using factorial kriging with external drift: an aggregated data case study. *Geo-Spatial Information Science* 2016, 19, 245. <https://doi.org/10.1080/10095020.2016.1260811>
22. W. A. Traldi *et al.* Avaliação da infraestrutura cicloviária e interpolação espacial de seus indicadores de qualidade: uma abordagem baseada em análise hierárquica e geoestatística. *Revista Brasileira de Cartografia* 2022, 74, 968. <https://doi.org/10.14393/revbrascartog>.
23. M. M. Fischer. Spatial analysis in Geography in *International Encyclopedia of the Social & Behavioral Sciences*, Neil J. Smelser, Ed.; Paul B. Baltes, Ed.; Elsevier, Amsterdam, 2001; 14752-14758. <https://doi.org/10.1016/B0-08-043076-7/02489-X>.
24. E. C. G. Camargo; S. D. Fucks; G. Câmara. Análise de superfícies por geoestatística linear in *Análise espacial de dados geográficos*, S. Druck *et al.* Eds.; EMBRAPA, Brasília, 2004; 79-122.
25. P. Goovaerts. Geostatistical analysis of disease data: estimation of cancer mortality risk from empirical frequencies using Poisson kriging. *International journal of health geographics* 2005, 4, 31. <https://doi.org/10.1186/1476-072X-4-31>.
26. P. Goovaerts. Merging areal and point data in medical geography and soil mapping in *Proceedings of the 11th International Conference on GeoComputation*, London, 2011; 59. https://www.academia.edu/12549429/Merging_Areal_and_Point_Data_in_Medical_Geography_and_Soil_Mapping.
27. M. Tsutsumi; H. Seya. Measuring the impact of large-scale transportation projects on land price using spatial statistical models. *Papers in Regional Science* 2008, 87, 385. <https://doi.org/10.1111/j.1435-5957.2008.00192.x>.
28. L. Anselin; A. Getis. Spatial statistical analysis and geographic information systems. *The Annals of Regional Science* 1992, 26, 19. <https://doi.org/10.1007/BF01581478>.
29. A. Soares, *Geoestatística para as ciências da terra e do ambiente*, 3. ed., IST Press; Lisboa, 2000.
30. J. P. Chiles; P. Delfiner, *Geostatistics: modeling spatial uncertainty*, 2nd. ed., John Wiley & Sons, New Jersey, 2012.
31. G. Matheron, *The theory of regionalized variables and its applications*, ENSMP, Paris, 1971.
32. A. Journel, *Fundamentals of geostatistics in five lessons*, American Geophysical Union, Washington, 1989; Vol. 8.

33. A. G. Journel; C. J. Huijbregts, *Mining geostatistics*, Academic Press London, London, 1978.
34. H. Wackernagel, *Multivariate geostatistics: an introduction with applications*, 3rd. ed., Springer, Fontainebleau, 2003. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-05294-5>.
35. Associação Brasileira de Normas Técnicas, *NBR 15570: fabricação de veículos acessíveis de categoria M3 com características urbanas para transporte coletivo de passageiros: especificações técnicas*, ABNT, Rio de Janeiro, 2009.
36. A. C. P. Ferraz; I. G. E. Torres, *Transporte público urbano*, Rima, São Carlos, 2023.

APÊNDICE

Figura 12: Variância das estimativas do carregamento



Fonte: Autores (2024)



CAPÍTULO 9

SIMULAÇÃO GEOESTATÍSTICA PARA GERAÇÃO DE CENÁRIOS DE OCUPAÇÃO DE LINHAS DE TRANSPORTE PÚBLICO URBANO

Anabele Lindner¹, Ana Júlia de Oliveira Tertuliano^{1*}, Samuel de França Marques¹ e Cira Souza Pitombo¹

1 – Departamento de Engenharia de Transportes (STT), Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo (USP), São Carlos, SP, Brasil.

**ajtertuliano@usp.br*

Resumo - A Pesquisa Sobe/Desce é um tipo de coleta de dados necessária para o planejamento, gerenciamento e avaliação do nível de serviço de um sistema de transporte público. O método tradicional de coleta destes dados demanda tempo, alto custo e intenso treinamento, além de também estar sujeito a erros devido a fatores humanos. Os obstáculos enfrentados, no cenário brasileiro, para a coleta de dados de comportamento de usuários de transporte coletivo apontam para uma lacuna a ser preenchida: a necessidade de alternativas para a obtenção de tais dados, visando melhor aproveitamento de recursos. Esta pesquisa teve por objetivo utilizar uma técnica de simulação espacial para gerar cenários associados a uma variável tradicionalmente obtida pela Pesquisa Sobe/Desce: o carregamento de linhas de transporte público. Considerou-se, como estudo de caso, o município de São Paulo, através de dados disponibilizados pela SPTrans (2018) para oito linhas de ônibus. O método utilizado permite representar a variável de estudo em pontos não amostrados da linha. Diversas simulações espaciais foram geradas, permitindo o cálculo de cenários críticos e considerando intervalos de confiança. Através dos resultados, foram fornecidos novos instrumentos para a tomada de decisão, principalmente ao levar em conta o dimensionamento de frota de transporte coletivo.

Palavras-chave: *Análise espacial. Geoestatística. Simulação sequencial gaussiana. Transporte público. Carregamento.*

Financiamentos: O presente trabalho foi realizado com apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, Processos 151115/2019-2 e 305973/2023-1.

Introdução

O conhecimento da demanda por viagens é indispensável para um adequado planejamento da oferta de transporte coletivo urbano. A obtenção de dados de demanda por transportes para o planejamento, gerenciamento e avaliação do nível de serviço de um sistema de transporte público requer pesquisas que compreendam contagens e entrevistas de passageiros.

A Pesquisa Sobe/Desce, também denominada Pesquisa Embarque/Desembarque, é um tipo de coleta de dados para planejamento de redes de transporte público. Esta pesquisa visa investigar a movimentação espacial de passageiros ao longo das linhas de transporte público. São levantadas informações acerca: dos pontos de parada e respectivos números de embarques e desembarques; ocupação de viagens ao longo da linha; carregamento e trechos críticos com lotação máxima [1].

Existem diversas abordagens para a coleta de dados de Pesquisa Sobe/Desce. As formas mais tradicionais, aplicadas no Brasil, são baseadas em contagens manuais (de embarques e desembarques para cada ponto de parada), distribuição de senhas, numeradas sequencialmente, e preenchimento de formulários, por pesquisadores devidamente treinados. Além desta abordagem, existem métodos automatizados para a contagem de passageiros (APC - *Automatic Passenger Counters*) que utilizam tecnologias de detectores e câmeras infravermelhas, câmeras estereoscópicas, scanners a laser, detectores ultrassônicos, radares de microondas, tapetes piezoelétricos e balanças eletrônicas. [2-5].

A aplicação destas novas tecnologias, no entanto, necessita de alto investimento financeiro para o desenvolvimento técnico-científico. Além do entrave financeiro, países em desenvolvimento, como o Brasil, encontram obstáculos no emprego de novas tecnologias, ao deparar com ocorrências frequentes de vandalismo e depredação de patrimônio público. Dessa forma, o uso de equipamentos de alto custo para contagem de usuários de transporte público sofre intensa suscetibilidade à depredação e pode ser dado como ineficaz para a contagem uniforme de toda a área abrangida na pesquisa. A coleta de dados através de bilhetagem eletrônica, apesar de ser bem aceita para obtenção de percepções acerca dos processos operacionais de embarques e desembarques de passageiros, possui algumas desvantagens no que se refere aos pressupostos assumidos. Além disso, a bilhetagem eletrônica não permite associar características socioeconômicas aos padrões de viagens. Por outro lado, o uso do método tradicional, por meio de entrevistadores, demanda tempo e envolve alto custo e intenso treinamento, além de também estar sujeito a erros devido a fatores humanos. Os obstáculos enfrentados, no cenário brasileiro, para a coleta de dados de comportamento de usuários de transporte coletivo apontam para uma lacuna a ser preenchida: a necessidade de alternativas para a obtenção de tais dados, visando melhor aproveitamento de recursos.

Tendo em vista que a Pesquisa Sobe/Desce apura informações sobre a movimentação espacial de passageiros e que existe autocorrelação espacial entre as variáveis levantadas em campo [6-8], esta pesquisa visa dar continuidade aos trabalhos realizados, ao longo dos últimos anos, no Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Transportes da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, através da temática “Geoestatística aplicada à demanda por Transportes”. A aplicação proposta, no presente trabalho, é para dados em rede de Transporte Público – variável “carregamento de linhas de transporte público” [8]. O uso da Geoestatística a tais dados permite que, a partir de informações coletadas em alguns pontos de paradas e alguns trechos de linhas de transporte coletivo, seja gerada uma superfície de estimativa para toda a rede de transporte público, sem a necessidade de amostrar a rede completa. Além disso, salienta-se que a aplicação da Geoestatística permite que a estimativa não sofra influência de evasões (embarques irregulares), que, no Brasil, provocam inconsistências nos dados coletados. A Geoestatística é uma ferramenta de estatística espacial já utilizada por alguns autores nos estudos de planejamento de transportes [6-23]. Esta técnica possibilita análises exploratórias e confirmatórias através da previsão do comportamento de uma variável espacialmente correlacionada. Além disso, o método permite que sejam modelados valores de uma variável em posições espaciais onde não há conhecimento prévio desta, ou seja, onde não houve amostragem.

A simulação geoestatística já foi utilizada para gerar cenários equiprováveis de uma variável de demanda por transportes associada à escolha modal, ao invés de uma simples estimativa por krigagem [20]. A autora verificou que a simulação geoestatística, além de

permitir gerar diversos cenários para a variável em estudo, permite a obtenção de intervalos de confiança e a verificação de áreas críticas de taxa de uso de transporte público nas áreas habitadas do município de São Paulo. Levando em conta o potencial apresentado pela aplicação de Simulação Sequencial Gaussiana em demanda por transportes e os resultados promissores da tese [20], a presente pesquisa objetivou aplicar a técnica a uma variável de carregamento de linhas de transporte público, através de um índice de ocupação de oito linhas de ônibus do município de São Paulo.

Fundamentação Teórica

A Geoestatística explora eventos em que os valores de uma determinada variável estão associados à sua respectiva localização espacial [24-26]. Essa abordagem utiliza conceitos da estatística espacial e gera uma superfície contínua de valores de variáveis através de um banco de dados que pode ser espacialmente distribuído de forma regular ou não.

A abordagem geoestatística permite caracterizar a dispersão espacial de um evento, analisando parâmetros de incerteza, determinando a variabilidade espacial e obtendo uma superfície contínua de estimação ou de simulações.

A geoestatística diferencia-se das demais técnicas de estatística espacial, pois utiliza o semivariograma (ou covariograma) como dado de entrada no método. Dessa forma, a estimativa/simulação não é realizada por uma simples interpolação espacial, mas sim, por um processo de krigagem. Além disso, os métodos geoestatísticos apresentam vantagens, pois permitem considerar os aspectos de direção de maior continuidade espacial da variável em estudo, através de uma análise de anisotropia espacial [24].

O presente trabalho introduz, nas seguintes seções, o desenvolvimento teórico dos conceitos geoestatísticos aqui utilizados: análise variográfica, krigagem, e Simulação Sequencial Gaussiana (SSG).

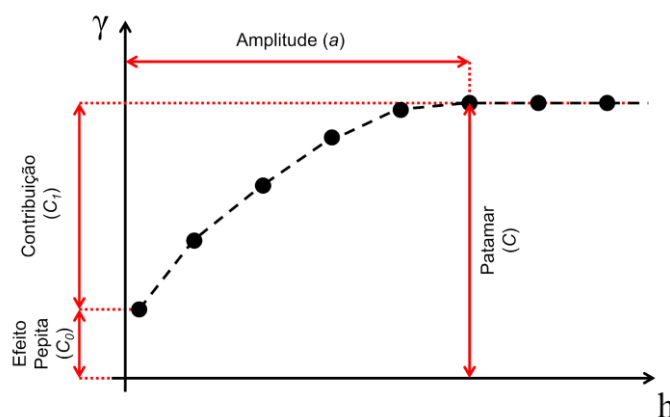
Análise Variográfica

A análise e modelagem da estrutura espacial de uma variável regionalizada tem como ferramenta primária o variograma experimental [27-28]. O variograma condensa as informações obtidas pelas variáveis regionalizadas por meio de uma representação gráfica em que a ordenada é a esperança da variância entre pares de observações (γ) e a abscissa é a distância entre estes pares (h), também denominada *lag*. A função do semivariograma é dada pela Eq. 1[24], onde $N(h)$ é o conjunto de pares de valores $z(x)$ e $z(x+h)$ em posições i e $i+h$, respectivamente.

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{n(h)} [z(x_i) - z(x_i + h)]^2 \quad (1)$$

Outra etapa da análise variográfica é a definição de um modelo teórico que se ajuste ao semivariograma experimental. A Fig. 1 apresenta os parâmetros gráficos obtidos a partir de um modelo teórico experimental.

Figura 1 - Parâmetros gráficos de um modelo teórico de semivariograma



Fonte: Adaptado de [29].

Os modelos teóricos de um semivariograma podem ser de natureza: cúbica, esférica, exponencial, gaussiana, pentaesférica, lei de potência e efeito senoidal. Embora as sete curvas sejam convenientes a modelos de ajuste, as três curvas mais utilizadas na literatura são: exponencial, esférica e gaussiana, cujas expressões estão representadas nas Eqs. 2, 3 e 4, respectivamente [30].

$$Ex(h) = C \left(1 - e^{-3h/a} \right) \quad (2)$$

$$Es(h) = \begin{cases} C \left(\frac{3h}{2a} - \frac{1}{2} \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right), & 0 \leq |h| < |a| \\ C, & |a| \leq |h| \end{cases} \quad (3)$$

$$G(h) = C \left(1 - e^{-3(h/a)^2} \right) \quad (4)$$

Onde, C é o patamar do semivariograma, a é o alcance e h é o lag.

Krigagem

A krigagem é um método de estimativa utilizado na Geoestatística. A técnica se trata de um processo de predição linear, pois suas estimativas são combinações lineares ponderadas por dados existentes (amostrados). A krigagem fornece, em geral, estimativas não tendenciosas e com variância mínima [31].

Os métodos de krigagem partem do pressuposto que pontos próximos no espaço tendem a ter valores mais parecidos do que pontos afastados e diferem-se dos demais interpoladores, pois são as únicas técnicas que reconhecem a anisotropia espacial. Esse pressuposto é garantido por uma ponderação intrínseca à abordagem. A partir dos parâmetros gráficos do semivariograma (efeito pepita (C_0), contribuição (C_1) e amplitude

(a)), é definido um modelo teórico que, em conjunto com os dados, é utilizado para a definição de pesos λ_i (ponderadores) do sistema de krigagem. A função dos ponderadores é a de ditar a influência dos dados amostrais na estimação de novos valores. O estimador de krigagem é dado pela Eq. 5.

$$z^*(x_0) - m(x_0) = \sum_{j=1}^n \lambda_j \times [z(x_j) - m(x_j)] \quad (5)$$

Onde $z^*(x_0)$ é o valor estimado em um local não amostrado x_0 ; $m(x_0)$ é um valor inicial de média populacional em x_0 ; $\lambda_j, j = 1, \dots, n$ são as ponderações aplicadas às n observações (pontos amostrais); $z(x_j)$ são os valores de n observações; $m(x_j), j = 1, \dots, n$ são os valores iniciais de média amostral nos locais com dados [32].

As formas mais usuais de krigagem são a Krigagem Simples (KS) e a Ordinária (KO). A KS é utilizada quando se tem conhecimento prévio da média populacional. Essa média é assumida como estatisticamente constante para toda área de abrangência das amostras. A KO, por sua vez, considera a média flutuante ou móvel por toda área. Dessa forma, para a KO, a formulação pode ser simplificada, conforme a Eq. 6.

$$z^*(x_0) = \sum_{j=1}^n \lambda_j \times z(x_j) \quad (6)$$

O sistema de krigagem é constituído por ponderadores com o objetivo de conduzir estimativas a erros nulos (não enviesamento universal) e à minimização da variância (otimização), conforme as restrições apresentadas na Eq. 7.

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n \lambda_j \gamma(x_i - x_j) + \mu = \gamma(x_0 - x_i) \\ \sum_{j=1}^n \lambda_j = 1 \end{cases} \quad (7)$$

Sendo μ um multiplicador de Lagrange e para $i=1, n$. A solução para os ponderadores da KO pode ser dada pelo sistema matricial representado na Eq.8.

$$\lambda_j = (G)^{-1} \times M \quad (8)$$

Sendo λ , G e M as seguintes matrizes:

$$\lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \dots \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} \gamma(x_1, x_1) & \gamma(x_1, x_2) & \dots & \gamma(x_1, x_n) & 1 \\ \gamma(x_2, x_1) & \gamma(x_2, x_2) & \dots & \gamma(x_2, x_n) & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ \gamma(x_n, x_1) & \gamma(x_n, x_2) & \dots & \gamma(x_n, x_n) & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad M = \begin{bmatrix} \gamma(x_1, x_0) \\ \gamma(x_2, x_0) \\ \dots \\ \dots \\ \gamma(x_n, x_0) \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Simulação Sequencial Gaussiana

A Simulação Sequencial Gaussiana (SSG) é um método de simulação estocástica, que corrige efeitos de suavização e permite explorar um campo de possibilidades de um fenômeno. Dessa forma, a simulação visa gerar um conjunto de resultados alternativos equiprováveis que reproduzam os padrões espaciais, não apenas por uma única estimativa, como é feito pela krigagem [33-34].

Outra diferença entre a krigagem e a SSG trata da precisão de estimação. A krigagem utiliza a precisão local, ou seja, reproduz as médias locais, enquanto a SSG reproduz a precisão global, histogramas e variogramas [34].

A SSG é um método sequencial. As simulações são realizadas através de um caminhamento aleatório de pontos, em que cada valor previamente simulado é utilizado como informação para simular novos pontos. Além de ter característica sequencial, a SSG pode ser condicional ou não. Uma simulação condicional constitui um método em que, ao final, manterá os valores amostrados nos resultados. Esses diferentes cenários gerados pela simulação são denominados realizações. Em resumo, o princípio da SSG propõe que sejam considerados: a) todos os dados disponíveis em uma determinada vizinhança, b) os dados originais e c) todos os valores simulados [35].

As realizações pela SSG são dadas em função das estimativas por krigagem simples somadas a um ruído, conforme Eq. 9 [32].

$$z^{(i)}(x_0) = z^*(x_0) + \sigma \times \varepsilon \quad (9)$$

Sendo ε um termo aleatório entre 0 e 1. Diante dos diversos tipos de krigagem, deve-se dar preferência ao algoritmo de Krigagem Simples [34], pois este garante a reprodução do semivariograma.

O resultado da média de diversas realizações por SSG (conhecida pelo termo *e-type*) se aproxima do valor estimado pela krigagem e o resultado da variância das realizações tende à variância de krigagem [32].

Em geral, as simulações têm como objetivo principal, além da geração de diversas realizações, o cálculo da incerteza associada. Este parâmetro é normalmente mensurado

através da variância condicional entre as realizações. Para este trabalho, foi acrescentado o intervalo de confiança como medida estatística a ser gerada pelo método de simulação, uma vez que é relevante para o planejamento urbano adequado ter posse de informações de áreas críticas.

O método de SSG envolve duas vertentes estocásticas: 1) a simulação do termo aleatório da Equação 9, e 2) o método de simulação para definir o caminho aleatório que visite cada ponto da malha apenas uma vez. Estas questões são solucionadas pelo método de Monte Carlo.

Neste trabalho, a SSG é precedida de procedimentos de mudança de escala, de modo que, ao final, sejam geradas diversas realizações para informações desagregadas.

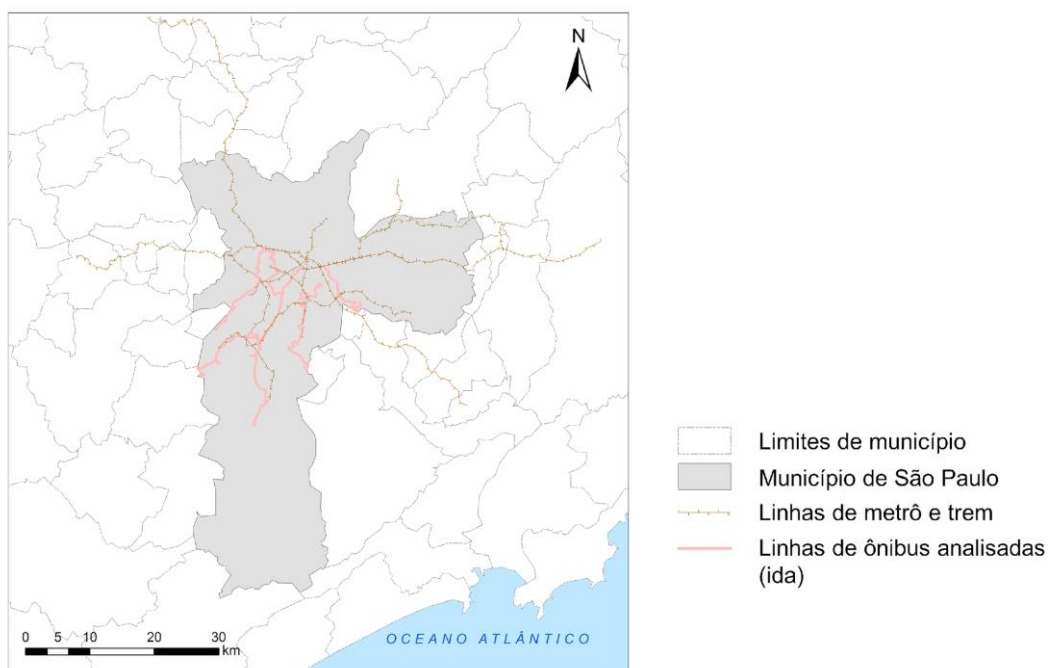
Desenvolvimento

Área de estudo e banco de dados

A área de estudo está locada no sudeste do Brasil. São Paulo é o município mais populoso do país, compreendendo uma área de 1.521 km² e aproximadamente 11,2 milhões de pessoas, de acordo com o último demográfico de 2010 [36]. O município possui o maior PIB brasileiro [36] e conta com o maior sistema de transporte público do Brasil, atualmente deslocando mais de nove milhões de passageiros por dia útil, conforme a empresa [37], que gerencia o sistema de transporte coletivo público do município. O sistema é composto por um total de 1.355 linhas de ônibus e 20.006 pontos de parada [37]. Contudo, foram disponibilizadas pela empresa, planilhas resultantes de uma Pesquisa Sobe/Desce de 2012 abrangendo apenas oito linhas de ônibus (contendo 631 pontos de parada) e uma extrapolação para o ano de 2017, a partir de dados de bilhetagem eletrônica.

A base de dados utilizada neste projeto trata dos resultados desta Pesquisa Sobe/Desce, realizada em oito linhas de ônibus do transporte público do município de São Paulo, em novembro de 2017. A base de dados foi disponibilizada pela SPTrans para as seguintes linhas: 407M-10; 573A-10; 577T-10; 809L-10; 856R-10; 6045-10; 6048-10; e 6913-10. A Fig. 2 e a Fig. 3 caracterizam a geolocalização das linhas utilizadas para as pesquisas, nos sentidos de ida e volta, respectivamente.

Figura 2 – Mapa representativo dos trechos de ida das linhas analisadas

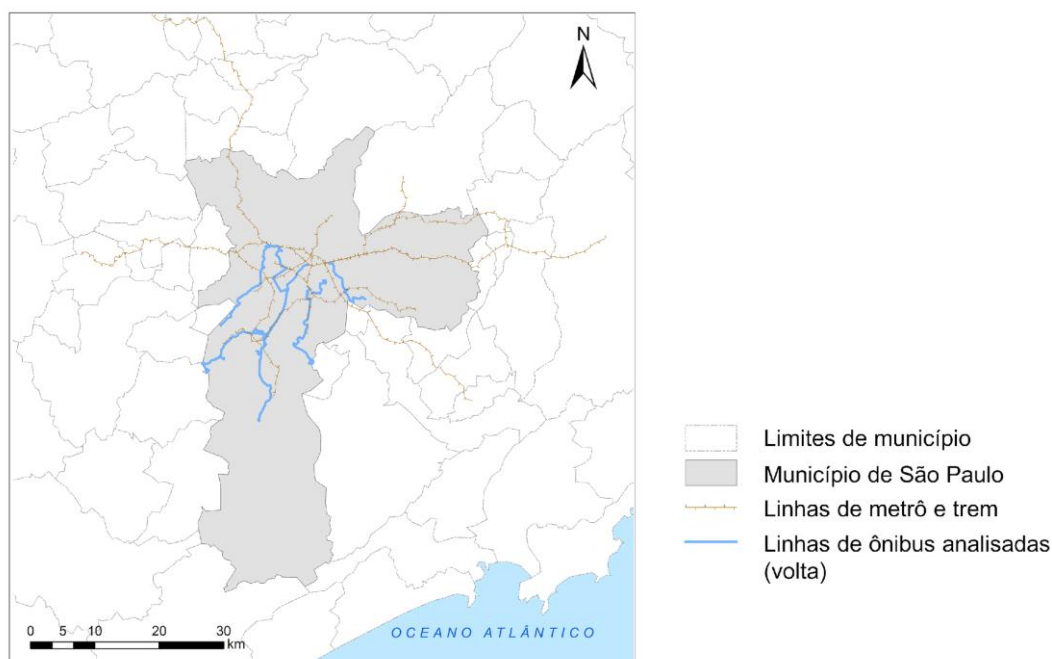


Fonte: Os autores (2024).

Foram fornecidos os resultados resumidos em seis períodos de um dia típico. Para este trabalho, foram utilizadas as informações referentes aos picos da manhã e tarde - horários das 5h às 8h59 e 16h às 19h59, respectivamente.

Por serem dados tratados, as informações foram apresentadas pela SPTrans através dos totais de contagens de passageiros que desceram e subiram em cada ponto de parada das linhas. Além disso, foram fornecidos os carregamentos referentes a cada trecho das linhas. Esta pesquisa utilizou as informações de carregamento e as respectivas localizações espaciais intermediárias dos pontos de parada das linhas, através das bases georreferenciadas fornecidas pela Prefeitura de São Paulo, disponíveis no sítio eletrônico GeoSampa (2010), e pela Secretaria de Transporte do Município de São Paulo (2015), por meio do Centro de Estudos da Metrópole. Estes dados deram origem a um índice padronizado de ocupação das linhas.

Figura 3 - Mapa representativo dos trechos de volta das linhas analisadas



Fonte: Os autores (2024)

Software

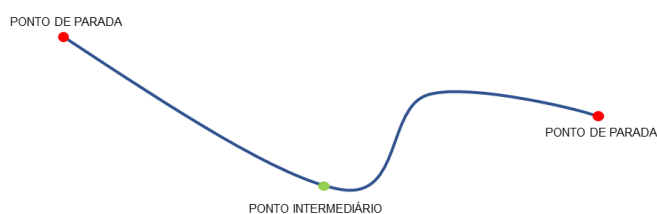
A Plataforma IBM SPSS 24 auxiliou no entendimento das estatísticas descritivas acerca das informações sobre o carregamento das oito linhas de ônibus analisadas. A preparação de dados espaciais e a reprodução de mapas foi realizada pela plataforma ESRI ArcGIS 10.1. Além disso, este software permitiu processar as estatísticas de índice Moran, a fim de compreender o comportamento espacial do carregamento. As técnicas geoestatísticas (cálculo e ajuste de semivariogramas, Simulação Sequencial Gaussiana, transformação gaussiana e back-transforming) foram processadas através do programa SGeMS 3.0. Pacotes geoestatísticos em R (maptools, geoR, gstat) auxiliaram na tomada de decisão de direções principais de continuidade [38-40].

Resultados e Discussões

Tendo em vista que este estudo buscou informações acerca do carregamento dos trechos de ida e volta de oito linhas de ônibus e que estudos espaciais necessitam de georreferenciamento das informações, propôs-se referenciar espacialmente as informações de carregamento aos trechos intermediários entre os pontos de paradas.

A Fig. 4 representa a definição de ponto intermediário, conforme aplicado neste estudo. A delimitação dos pontos intermediários seguiu a extensão do traçado linear dos trechos entre os pontos de parada.

Figura 4 – Mapa representativo da linha 6913-10 para os trechos de ida e volta.



Fonte: Os autores (2024)

A variável de interesse para este estudo é o carregamento por trecho. A Tabela 1 apresenta as estatísticas descritivas desta variável, obtida através da Pesquisa Sobe/Desce.

Tabela 1- Estatística descritiva dos pontos intermediários para os valores de carregamento

Linha	Sentido	Pico Manhã				Pico Tarde			
		Média	Desvio Padrão	Mínimo	Máximo	Média	Desvio Padrão	Mínimo	Máximo
407M-10	ida	182,53	79,24	41	279	186,71	106,79	24	327
	volta	157,89	87,87	21	279	191,50	69,56	43	267
573A-10	ida	463,37	534,76	58	1.670	771,24	325,58	206	1.225
	volta	697,17	199,39	306	959	600,57	406,37	123	1.464
577T-10	ida	462,03	254,32	37	933	179,39	83,04	12	310
	volta	96,37	52,22	5	190	374,08	177,39	16	608
6045-10	ida	520,37	330,21	49	1.062	235,67	138,60	26	474
	volta	122,85	47,04	15	198	571,29	175,88	173	839
6048-10	ida	1.543,57	603,95	496	2.158	337,57	119,24	105	495
	volta	184,42	66,82	66	290	1.588,35	415,15	667	2.085
6913-10	ida	3.180,63	1.506,52	190	4.878	771,08	290,11	92	1.426
	volta	916,25	486,25	111	2.034	2.968,43	849,49	906	3.776

809L-10	ida	1.157,25	176,40	677	1.374	419,33	198,03	91	672
	volta	379,47	177,84	88	641	844,42	114,67	541	1.011
856R-10	ida	620,36	330,83	38	1.117	597,21	240,88	88	904
	volta	883,35	336,15	159	1.267	438,60	193,86	83	871

Fonte: Os autores (2024).

Através da Tabela 1, nota-se que as linhas 6913-10, 6048-10 e 809L-10 são as linhas com maior solicitação no carregamento. Ao comparar os valores médios de carregamento de cada trecho entre pico manhã e pico tarde (fixando o trecho, variando o período), verifica-se que:

- Para a linha 407M-10, o carregamento médio é maior no pico da tarde, tanto para o trecho de ida, quanto para o trecho de volta;
- Para a linha 573A-10, o carregamento médio é significativamente maior no pico da tarde, tanto para o trecho de ida, quanto para o trecho de volta;
- Para as linhas 577T-10, 6045-10, 6048-10, 6913-10 e 809L-10, os carregamentos médios na ida são significativamente maiores no pico da manhã. Para estas linhas, os carregamentos médios na volta são maiores no pico da tarde;
- Para a linha 856R, os carregamentos médios na ida e na volta são significativamente maiores no pico da manhã.

Ao comparar os valores médios de carregamento de cada período entre os trechos de ida e volta (fixando o período, variando o trecho), verifica-se que:

- Para a linha 407M-10, a ida possui maior carregamento médio no pico da manhã e a volta possui maior carregamento no pico da tarde
- Para a linha 573A-10, a volta possui maior carregamento médio no pico da manhã e a ida possui maior carregamento médio no pico da tarde;
- Para as linhas 577T-10, 6045-10, 6048-10, 6913-10 e 809L-10, a ida possui maiores carregamentos médios no pico da manhã e a volta possui maiores carregamentos médios no pico da tarde;
- Para a linha 856R-10, a volta apresenta maior carregamento médio no pico da manhã e a ida apresenta maior carregamento médio no pico da tarde.

Com estas observações, nota-se que as linhas 577T-10, 6045-10, 6048-10, 6913-10 e 809L-10 possuem o mesmo padrão. Estas linhas foram identificadas, em geral, com trechos de ida que partem de regiões mais periféricas a regiões mais centrais. Os trechos de ida possuem maiores carregamentos médios no pico da manhã e os trechos de volta, possuem maiores carregamentos médios no pico da tarde. Esse comportamento infere um provável deslocamento pendular de passageiros, onde a região central concentra maiores

densidades de atividades comerciais e de serviço e as regiões periféricas concentram áreas residenciais. A linha 856R-10 apresentou o mesmo comportamento das linhas 577T-10, 6045-10, 6048-10, 6913-10 e 809L-10, ao considerar a inversão da nomenclatura de ida com a de volta.

Com relação às linhas 407M-10 e 573A-10, notou-se um comportamento diferente. Isto se deve ao fato de estas linhas deslocarem passageiros no sentido sudeste e sul. Diferentemente das demais seis linhas, estas apresentaram carregamentos na ida e na volta maiores no pico da tarde. Dessa forma, não houve inferência sobre comportamentos pendulares de viagem.

Tendo em vista as incompatibilidades espaciais e as discrepâncias entre os valores absolutos da variável de carregamento em seu formato original, ao utilizar as oito linhas de ônibus, este estudo utilizou uma variável padronizada que permite manter as informações de carregamento de maneira uniforme a todas as linhas. A variável se referiu a um índice de carregamento, onde realizou-se a relação entre o carregamento de cada ponto intermediário com o carregamento máximo observado por trecho. Este cálculo foi realizado para os pontos intermediários de cada trecho de cada linha. Posteriormente, os valores calculados em cada trecho das linhas foram consolidados para gerar uma nova base, que representasse um indicador de ocupação das linhas de ônibus do município de São Paulo. Desta forma, o índice de carregamento calculado permitiu inferir sobre a demanda em cada local amostrado do município. Essa abordagem foi pertinente ao estudo geostatístico, uma vez que possibilitou utilizar todas as informações de carregamento disponíveis, de forma a abranger maiores áreas do município de São Paulo. Além disso, esta variável calculada se mostra atrativa a estudos de planejamento de transportes, sobretudo ao considerar o acompanhamento espacial de uso do transporte público. Esta proposta permite trazer o foco a locais onde há concentração alta de carregamento, antecipando medidas de melhoria do serviço de transporte.

Ressalta-se aqui que o índice de ocupação utilizado não considerou a capacidade declarada das frotas devido à dificuldade de acesso a este dado, tendo em vista que se tratam de oito operadoras diferentes que não mantêm (ou não disponibilizam com facilidade) o histórico desta informação.

A Tabela 2 apresenta as estatísticas descritivas para os índices de carregamento calculados para os pontos intermediários do banco de dados.

Tabela 2 - Estatística descritiva dos pontos intermediários para o índice de carregamento

Linha	Sentido	Pico Manhã				Pico Tarde			
		Média	Desvio Padrão	Mínimo	Máximo	Média	Desvio Padrão	Mínimo	Máximo
407M-10	ida	0,65	0,28	0,15	1,00	0,57	0,33	0,07	1,00
	volta	0,57	0,31	0,08	1,00	0,72	0,26	0,16	1,00
573A-10	ida	0,28	0,32	0,03	1,00	0,63	0,27	0,17	1,00
	volta	0,73	0,21	0,32	1,00	0,41	0,28	0,08	1,00
577T-10	ida	0,50	0,27	0,04	1,00	0,58	0,27	0,04	1,00
	volta	0,51	0,27	0,03	1,00	0,62	0,29	0,03	1,00
6045-10	ida	0,49	0,31	0,05	1,00	0,50	0,29	0,05	1,00
	volta	0,62	0,24	0,08	1,00	0,68	0,21	0,21	1,00
6048-10	ida	0,72	0,28	0,23	1,00	0,68	0,24	0,21	1,00
	volta	0,64	0,23	0,23	1,00	0,76	0,20	0,32	1,00
6913-10	ida	0,65	0,31	0,04	1,00	0,54	0,20	0,06	1,00
	volta	0,45	0,24	0,05	1,00	0,79	0,22	0,24	1,00
809L-10	ida	0,84	0,13	0,49	1,00	0,62	0,29	0,14	1,00
	volta	0,59	0,28	0,14	1,00	0,84	0,11	0,54	1,00
856R-10	ida	0,56	0,30	0,03	1,00	0,66	0,27	0,10	1,00
	volta	0,70	0,27	0,13	1,00	0,50	0,22	0,10	1,00
	total	0,59	0,27	0,13	1,00	0,63	0,25	0,16	1,00
Média	sul-centro	0,61	0,26	0,13	1,00	0,65	0,23	0,17	1,00
	sul-sudeste	0,56	0,28	0,15	1,00	0,58	0,29	0,12	1,00
	total	0,60	0,27	0,15	1,00	0,58	0,26	0,11	1,00
Média na ida	sul-centro	0,65	0,26	0,13	1,00	0,65	0,23	0,17	1,00
	sul-sudeste	0,47	0,30	0,09	1,00	0,60	0,30	0,12	1,00
	total	0,58	0,26	0,12	1,00	0,69	0,23	0,21	1,00
Média na volta	sul-centro	0,56	0,26	0,09	1,00	0,73	0,22	0,24	1,00
	sul-sudeste	0,65	0,26	0,20	1,00	0,57	0,27	0,12	1,00

Fonte: Os autores (2024).

A Tabela 2 não permite concluir sobre maiores/menores índices em linhas específicas, uma vez que os valores médios são, em geral, muito similares.

A Tabela 3 apresenta uma análise do comportamento médio do índice de ocupação, considerando os padrões anteriormente mencionados (linhas sul/centro, linhas sul/sudeste) e os totais. Esta tabela permite a interpretação de que os trechos de deslocamento do sul ao centro, pelo pico da manhã, possuem, em média, maiores índices de ocupação (65%), em comparação ao sentido contrário. No pico da tarde, o sentido centro-sul possui ainda maior ocupação do que o índice visto no pico da manhã (73%).

Tabela 3 - Estatística descritiva dos pontos intermediários para o índice de carregamento

Linha	Sentido	Pico Manhã				Pico Tarde			
		Média	Desvio Padrão	Mínimo	Máximo	Média	Desvio Padrão	Mínimo	Máximo
Média	total	0,59	0,27	0,13	1,00	0,63	0,25	0,16	1,00
	sul-centro	0,61	0,26	0,13	1,00	0,65	0,23	0,17	1,00
	sul-sudeste	0,56	0,28	0,15	1,00	0,58	0,29	0,12	1,00
Média na ida	total	0,60	0,27	0,15	1,00	0,58	0,26	0,11	1,00
	sul-centro	0,65	0,26	0,13	1,00	0,65	0,23	0,17	1,00
	sul-sudeste	0,47	0,30	0,09	1,00	0,60	0,30	0,12	1,00
Média na volta	total	0,58	0,26	0,12	1,00	0,69	0,23	0,21	1,00
	centro-sul	0,56	0,26	0,09	1,00	0,73	0,22	0,24	1,00
	sul-sudeste	0,65	0,26	0,20	1,00	0,57	0,27	0,12	1,00

Fonte: Os autores (2024).

Com relação às duas linhas operantes no trecho sul-sudeste, não é possível realizar inferências, uma vez em que elas não operam em sentidos e regiões similares (não atendem a públicos similares).

Tendo em vista que o dimensionamento da frota de ônibus a ser disponibilizada deve considerar o atendimento da demanda com um adequado nível de serviço, este trabalho explorou o comportamento espacial do índice de carregamento médio no município de São Paulo, levando em consideração todas as informações disponibilizadas na Pesquisa Sobe/Desce. Não houve distinção entre linhas e/ou trechos. Apesar disso, foram feitas análises para o pico da manhã e para o pico da tarde, separadamente. É importante ressaltar que a variável, apesar de apresentar um bom indicador da solicitação das linhas, não representa a taxa de ocupação (que essencialmente compara o carregamento à capacidade declarada da frota utilizada). Isso faz com que os valores aqui indicados de índice de ocupação apresentem valores abaixo dos valores reais de taxas de ocupação, tendo em vista que as linhas de ônibus, historicamente, possuem carregamento máximo

muito superior à capacidade declarada, principalmente em horários de pico e ao considerar o nível de serviço normalmente ofertado.

Análise do Comportamento Espacial da Variável

A Tabela 4 apresenta os resultados da análise do comportamento espacial da variável de carregamento, através do índice de Moran, para cada linha de ônibus.

O índice de Moran é uma ferramenta de inferência estatística que permite avaliar a autocorrelação espacial, a partir do produto dos desvios, em relação à média do conjunto de dados [41]. Os resultados da Tabela 4 indicam que a hipótese nula pode ser rejeitada, isto é, a distribuição espacial dos valores do conjunto de dados está mais agrupada do que seria esperado em processos espaciais aleatórios. Com estas conclusões, justifica-se a continuidade da aplicação de métodos geoestatísticos para gerar cenários de carregamento, utilizando dados de pesquisa Sobe/Desce.

Tabela 4 – Análise de índice Moran (row standardized)

Linha	Sentido	Pico Manhã			Pico Tarde		
		Índice Moran	Z	Valor p	Índice Moran	Z	Valor p
407M-10	ida	0,862	3,612	0,000	0,937	3,863	0,000
	volta	0,912	4,019	0,000	0,810	3,663	0,000
573A-10	ida	1,006	12,048	0,000	0,903	10,539	0,000
	volta	0,897	7,366	0,000	0,993	8,234	0,000
577T-10	ida	0,975	8,842	0,000	0,951	8,628	0,000
	volta	0,980	7,968	0,000	0,997	8,114	0,000
6045-10	ida	0,915	8,988	0,000	0,921	9,027	0,000
	volta	0,892	7,979	0,000	0,925	8,256	0,000
6048-10	ida	0,974	5,166	0,000	0,881	4,774	0,000
	volta	0,894	5,696	0,000	0,826	5,352	0,000
6913-10	ida	1,000	7,001	0,000	0,734	5,280	0,000
	volta	0,078	7,236	0,000	0,911	6,734	0,000
809L-10	ida	0,900	7,079	0,000	0,985	7,548	0,000
	volta	0,964	7,462	0,000	0,983	7,774	0,000
	ida	0,971	8,712	0,000	0,914	8,263	0,000

856R- 10	volta	0,934	8,365	0,000	0,927	8,302	0,000
-------------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

Fonte: Os autores (2024).

Ao considerar o estudo da variável de índice de carregamento combinando as oito linhas de ônibus, foram calculadas as estatísticas descritivas conforme a Tabela 5.

Tabela 5 - Estatística descritiva média dos pontos intermediários

Medida Estatística	Carregamento		Índice de ocupação	
	Pico Manhã	Pico Tarde	Pico Manhã	Pico Tarde
Média	756,21	720,54	0,58	0,63
Desvio Padrão	923,49	783,65	0,29	0,27
Mínimo	41	24	0,15	0,07
Quartil 1	171	260	0,33	0,41
Mediana	480	507	0,61	0,66
Quartil 3	946	798	0,87	0,87
Máximo	4.878	3.776	1,00	1,00

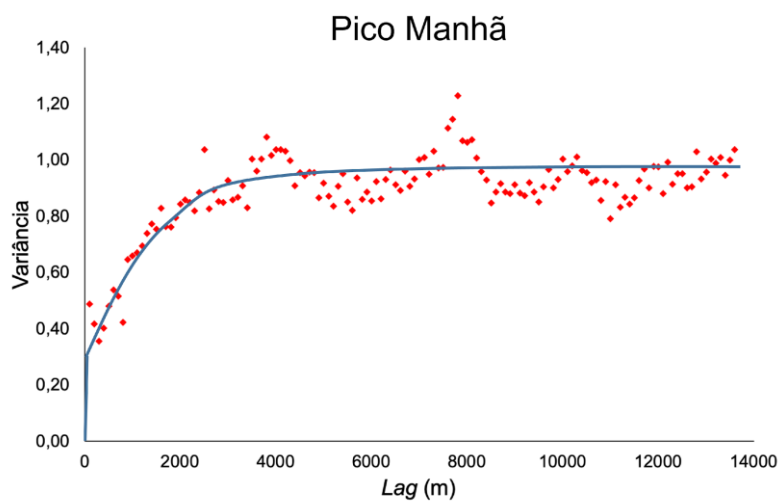
Fonte: Os autores (2024).

Salienta-se que os pontos espacialmente correspondentes foram tratados a partir da média dos valores. Ao total, foram verificados 42 pontos intermediários correspondentes, *i.e.*, pontos intermediários localizados em mesma posição geográfica.

Análise Variográfica

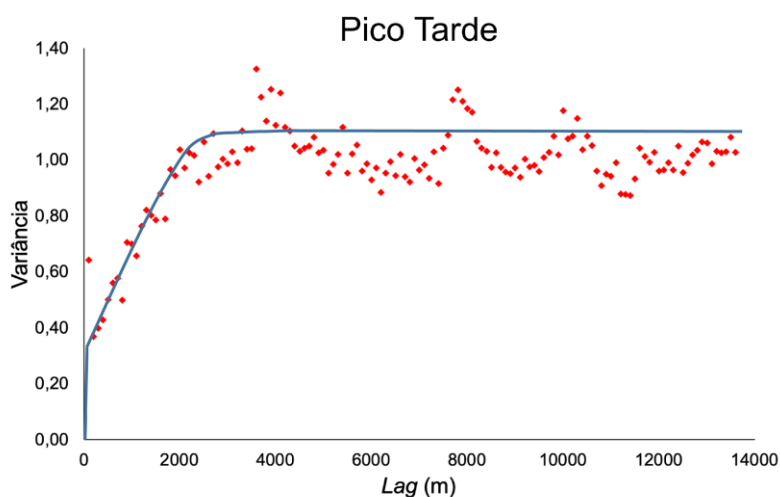
Os semivariogramas para as direções de 0°, 30°, 60°, 90°, 120° e 150°, bem como o semivariograma omnidirecional, dos picos da manhã e tarde foram plotados e analisados. Verificou-se que, para ambos os períodos de pico, o semivariograma omnidirecional indica potencial de melhor ajuste e maior amplitude de variância. Dessa forma, utilizou-se a direção principal de 0° e tolerância de 180° para os cálculos geoestatísticos de simulação, isto é, o semivariograma omnidirecional. Tendo em vista que as próximas etapas de simulação geoestatística demandam o uso da transformada gaussiana, a Fig. 5 e a Fig. 6 apresentam os semivariogramas ajustados das transformadas, considerando os picos da manhã e tarde, respectivamente. O semivariograma experimental do pico da manhã teve melhor ajuste com uma curva teórica exponencial, amplitude de 4.080 metros (a), efeito pepita (C_0) de 0,33 e contribuição (C_1) de 0,75. O semivariograma do pico da tarde, por sua vez, obteve melhor ajuste com um modelo esférico, amplitude (a) de 2.992 metros, efeito pepita (C_0) de 0,3 e contribuição (C_1) igual a 0,8.

Figura 5 - Semivariograma experimental e modelo teórico de ajuste para o Pico Manhã



Fonte: Os autores (2024).

Figura 6 - Semivariograma experimental e modelo teórico de ajuste para o Pico Tarde



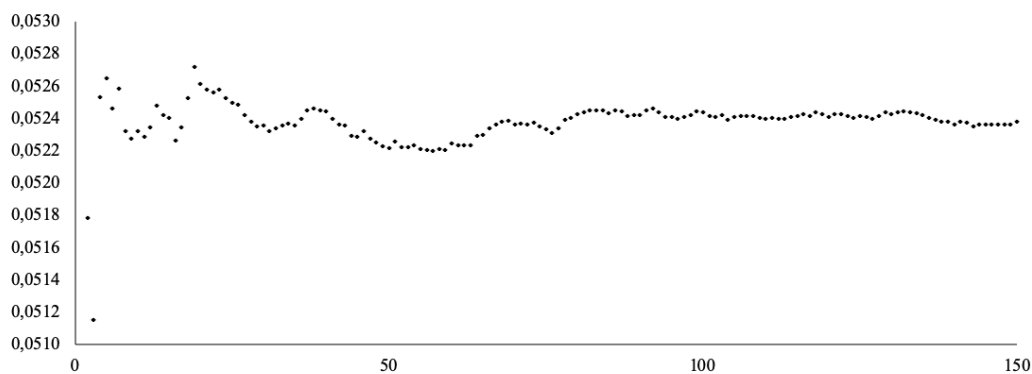
Fonte: Os autores (2024).

Com isso, observa-se que a estacionariedade é atingida com uma distância maior para o pico da manhã, em comparação ao pico da tarde. Por outro lado, a variância na estacionariedade é maior para o pico da tarde.

Simulação Sequencial Gaussiana

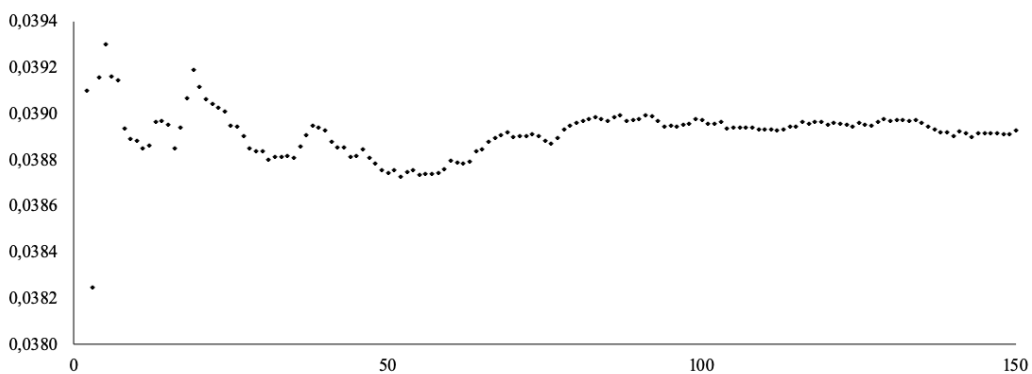
As simulações foram conduzidas, *a priori*, para 150 realizações. As Fig. 7 e a Fig. 8 mostram um comparativo das variâncias entre a combinação de 2 a 150 realizações nos pontos simulados.

Figura 7 - Variabilidade das realizações da SSG para o Pico Manhã



Fonte: Os autores (2024).

Figura 8 - Variabilidade das realizações da SSG para o Pico Tarde



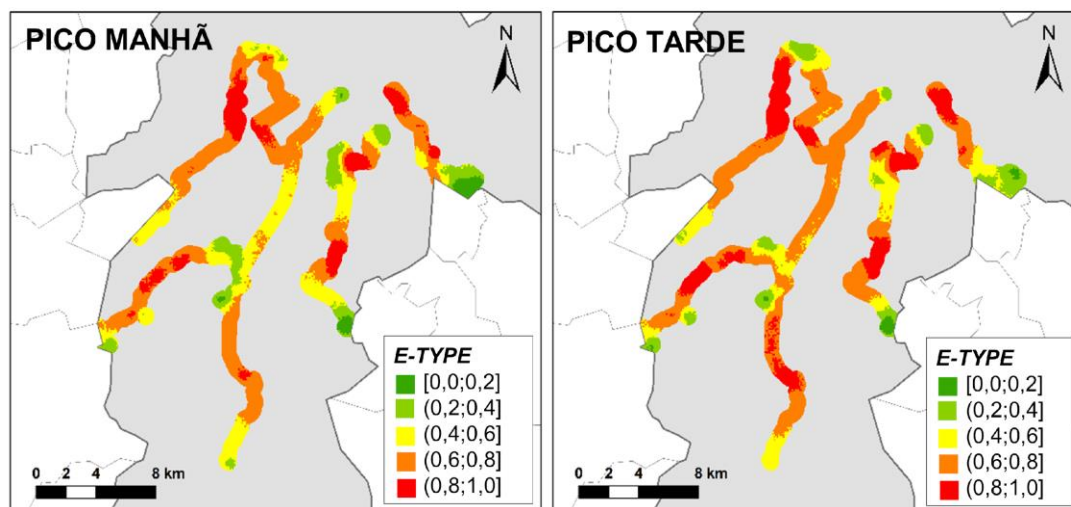
Fonte: Os autores (2024).

Verifica-se que a definição de 150 realizações, conforme utilizado neste estudo de caso, é suficiente, uma vez que houve estabilidade na variabilidade entre os valores observados.

Mapas e Estatísticas Univariadas

Esta subseção expõe os resultados da SSG, através de mapas e estatísticas Univariadas. As simulações foram conduzidas para um *buffer* de 500 metros dos vetores referentes às linhas de ônibus, de forma a representar o entorno das rotas. Da Fig. 9 à Fig. 18, são apresentados os resultados da SSG.

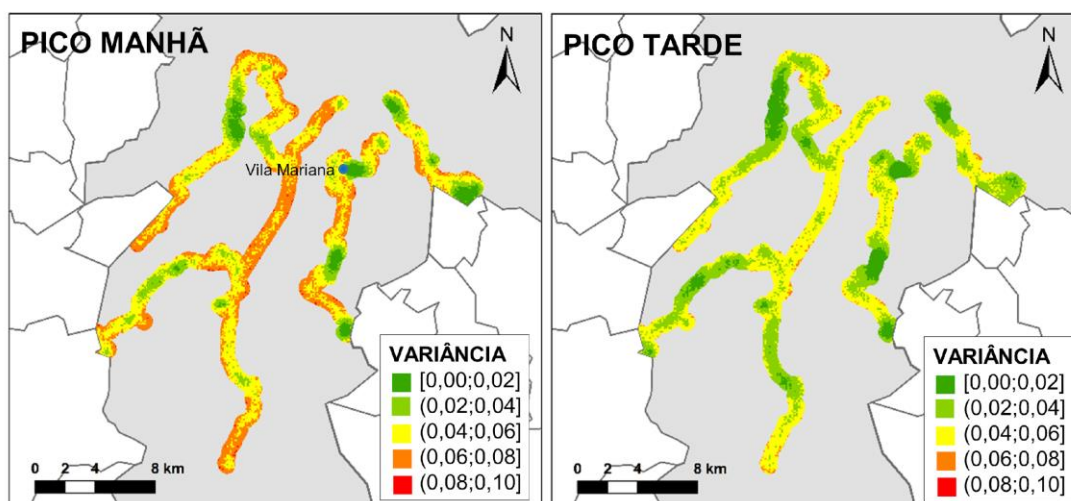
A Fig. 9 mostra os resultados da média (*e-type*) entre as 150 realizações, para as localidades de interesse (*buffer* de 500 metros das linhas analisadas). Ao comparar os dois períodos de pico, tem-se que alguns pontos que, pela manhã possuem maior solicitação, pelo período da tarde já possuem menores índices de ocupação das linhas e, vice-versa. O comportamento espacial contrastado às características de transporte público do município está apresentado na sequência desta subseção.

Figura 9 - Mapas de *e-type* da SSG para o índice de carregamento

Fonte: Os autores (2024).

A Fig.10 apresenta os resultados das variâncias entre as 150 realizações, em cada par de coordenadas. Nota-se, em geral, que as localidades com maiores valores de média possuem também menores variâncias. Apesar de o pico da tarde apresentar graficamente menores valores de variância, a média de variância para o pico da manhã é inferior à da tarde, considerando as exatas localidades amostradas.

Figura 10 – Mapas de variância da SSG para o índice de carregamento



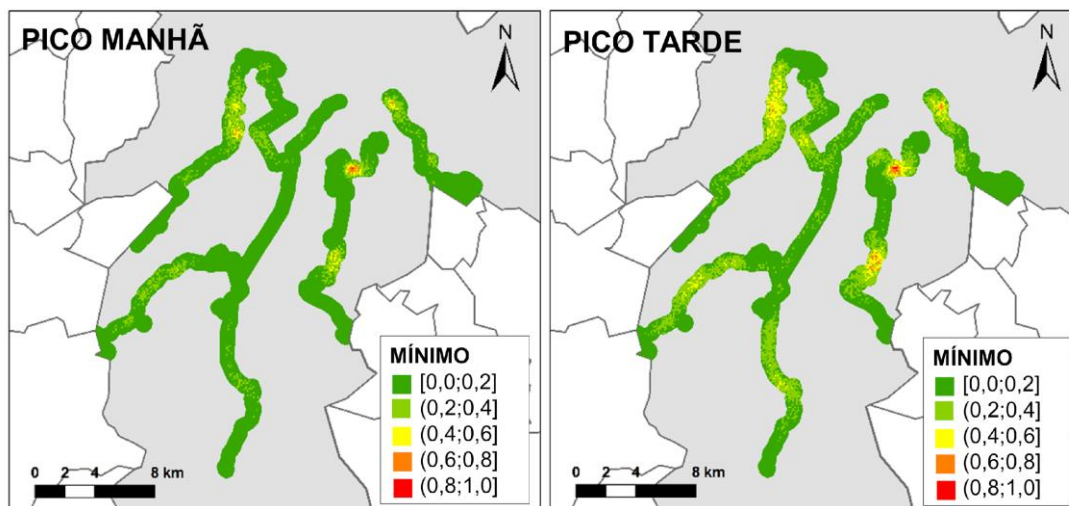
Fonte: Os autores (2024).

A Fig. 11 mostra os valores mínimos das 150 realizações, em cada par de coordenadas. Tem-se que os mínimos são, majoritariamente, representados por valores nulos, com

exceção à região da Vila Mariana (Centro-Sul do município de São Paulo), que apresenta os maiores valores mínimos resultantes das simulações.

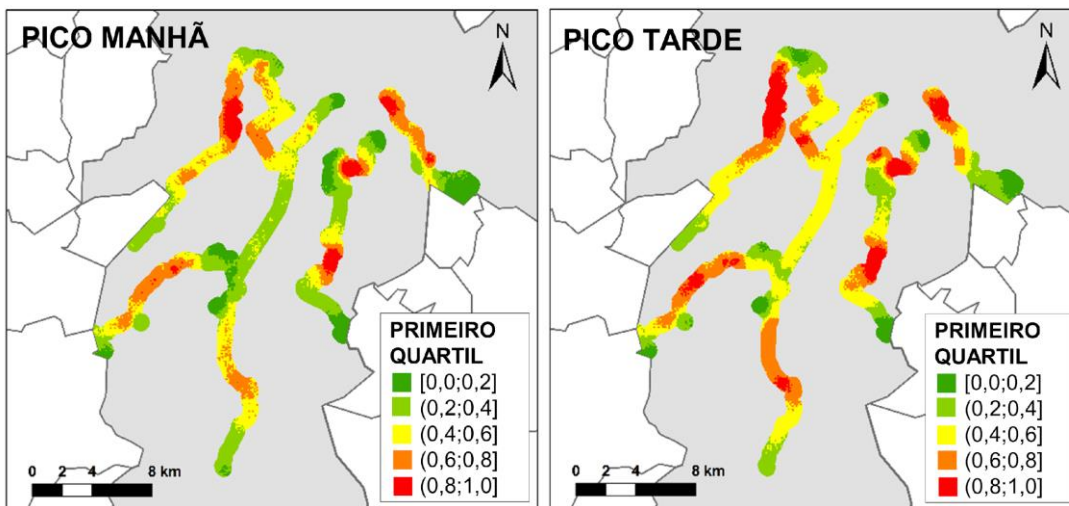
A Fig. 12 apresenta os mapas de primeiros quartis das 150 realizações, em cada par de coordenadas para os dois picos analisados. Destaca-se que, apesar de o pico da tarde possuir maiores áreas com quartis entre 0,8 e 1,0, os maiores valores de primeiros quartis são verificados no pico da manhã.

Figura 11 - Mapas de mínimo da SSG para o índice de carregamento



Fonte: Os autores (2024).

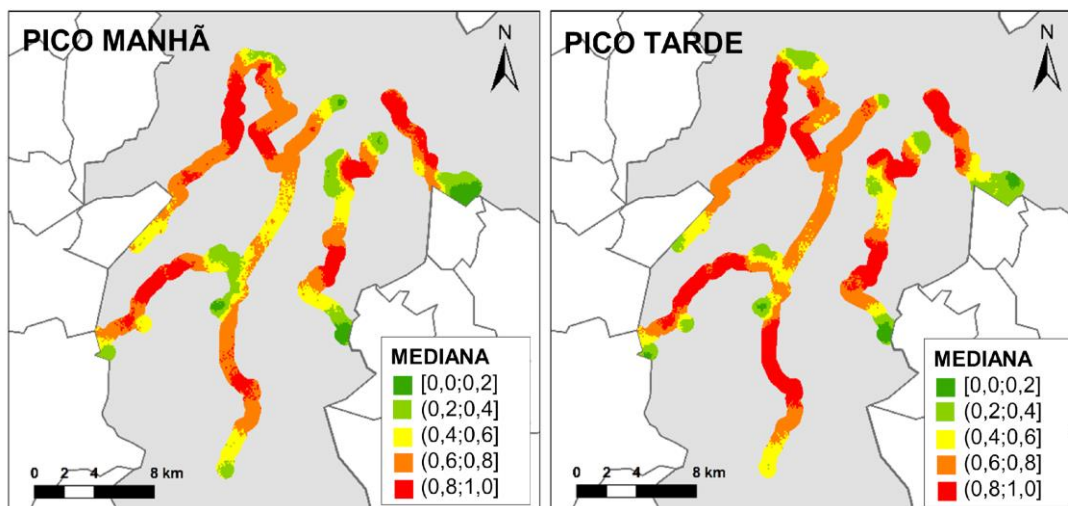
Figura 12 – Mapas de primeiro quartil da SSG para o índice de carregamento



Fonte: Os autores (2024).

A Fig. 13 mostra a mediana das 150 realizações para as localizações submetidas ao procedimento de simulação. Novamente, tem-se que, apesar de o pico da tarde possuir maiores áreas com medianas entre 0,8 e 1,0, os maiores valores de medianas são verificados no pico da manhã.

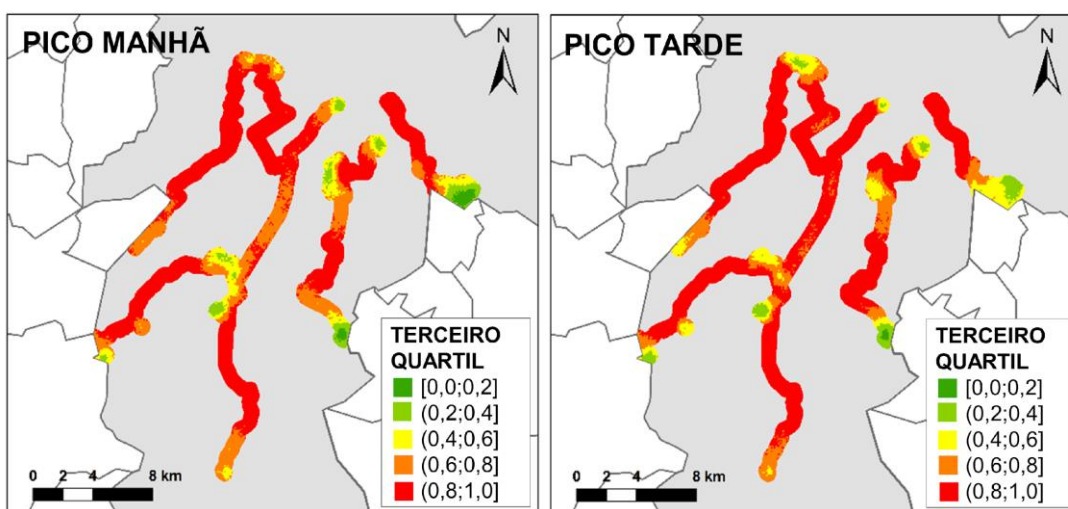
Figura 13 – Mapas de mediana da SSG para o índice de carregamento



Fonte: Os autores (2024).

A Fig. 14 mostra os mapas de terceiro quartil resultantes da simulação sequencial gaussiana. Para o terceiro quartil, tem-se maior cobertura de valores entre 0,8 e 1,0 e maior valor médio, ao considerar todas as posições espaciais simuladas.

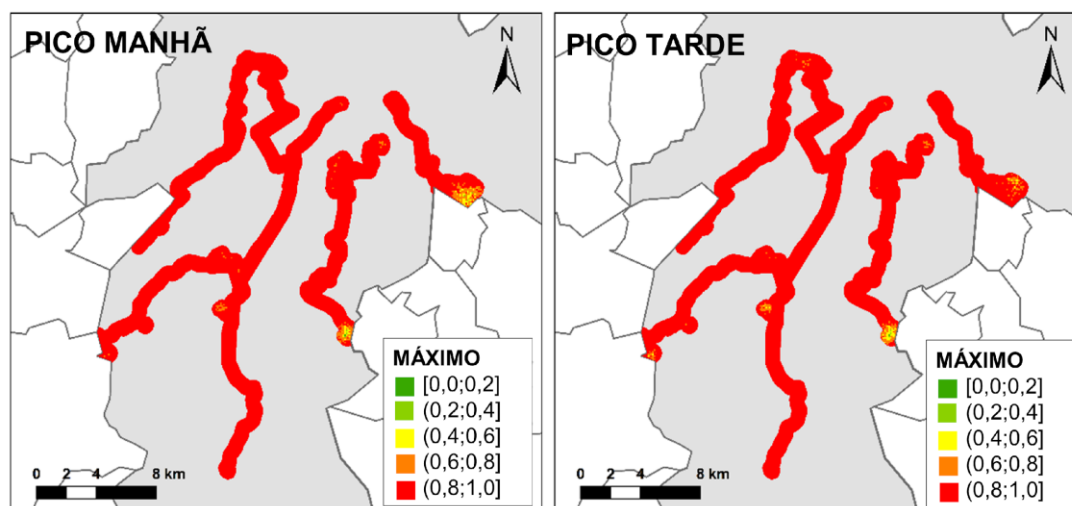
Figura 14 – Mapas de terceiro quartil da SSG para o índice de carregamento



Fonte: Os autores (2024).

A Fig. 15 representa os mapas de valores máximos resultantes da SSG para as 150 realizações. Ambos os períodos têm resultados similares, i.e., mostrando valores entre 0,8 e 1,0, como máximos.

Figura 15 - Mapas de máximo da SSG para o índice de carregamento



Fonte: Os autores (2024).

A Tabela 6 resume as estatísticas das simulações. Para o primeiro quartil e mediana, tem-se maiores valores para o período de pico da manhã. No entanto, ao considerar o terceiro quartil, os valores são maiores para o pico da tarde. Apesar disso, os resultados das estatísticas são similares para ambos os períodos de pico.

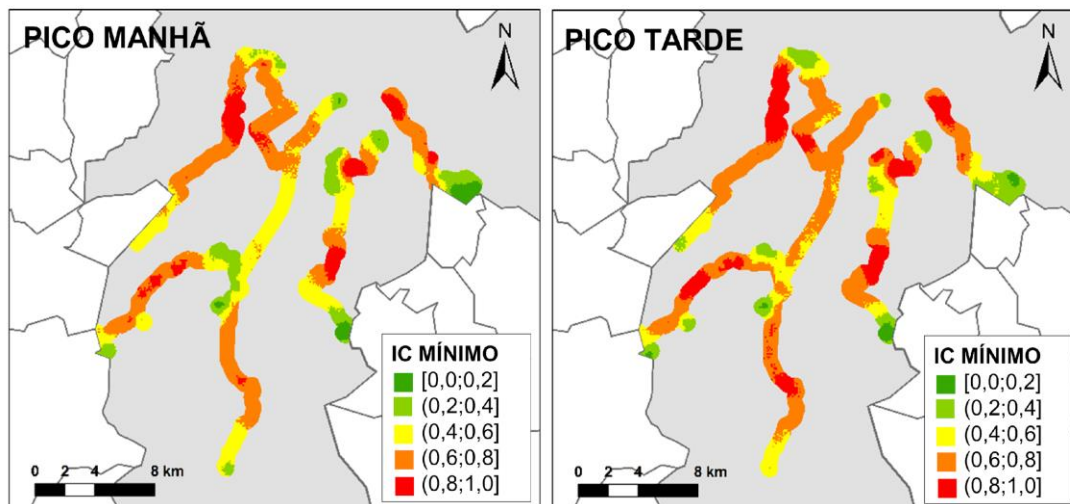
Tabela 6 – Medidas Estatísticas das 100 realizações em uma área no entorno das linhas

Medida Estatística	Índice de ocupação	
	Pico Manhã	Pico Tarde
Média	0.333	0.346
Desvio Padrão	0.348	0.359
Mínimo	0.000	0.000
Quartil 1	0.054	0.040
Mediana	0.081	0.073
Quartil 3	0.668	0.708
Máximo	1.000	1.000

Fonte: Os autores (2024).

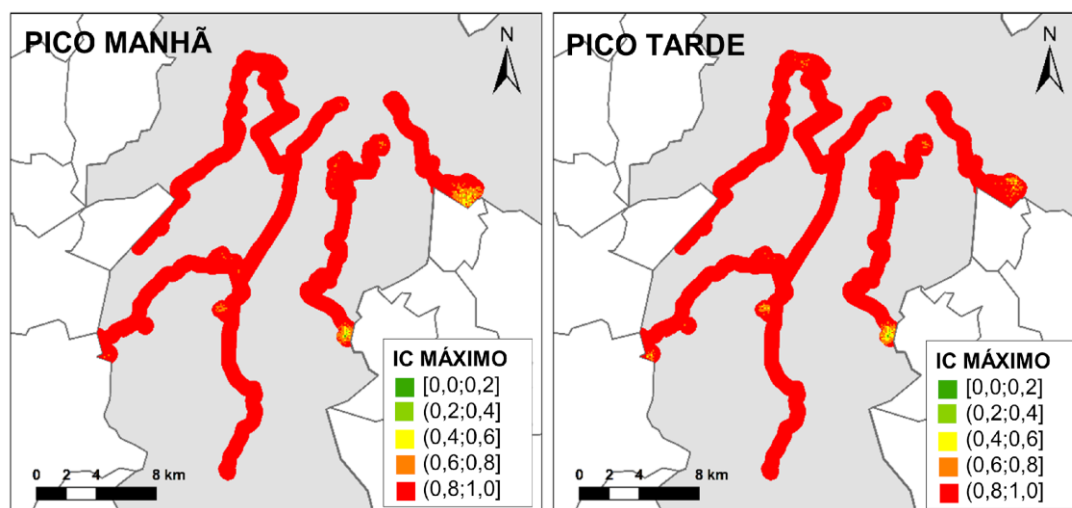
Na Fig. 16 e Fig. 17 estão representados os mapas de intervalo de confiança (valores mínimos e máximos) obtidos pelo procedimento de SSG.

Figura 16 – Valores mínimos do intervalo de confiança resultantes da SSG



Fonte: Os autores (2024).

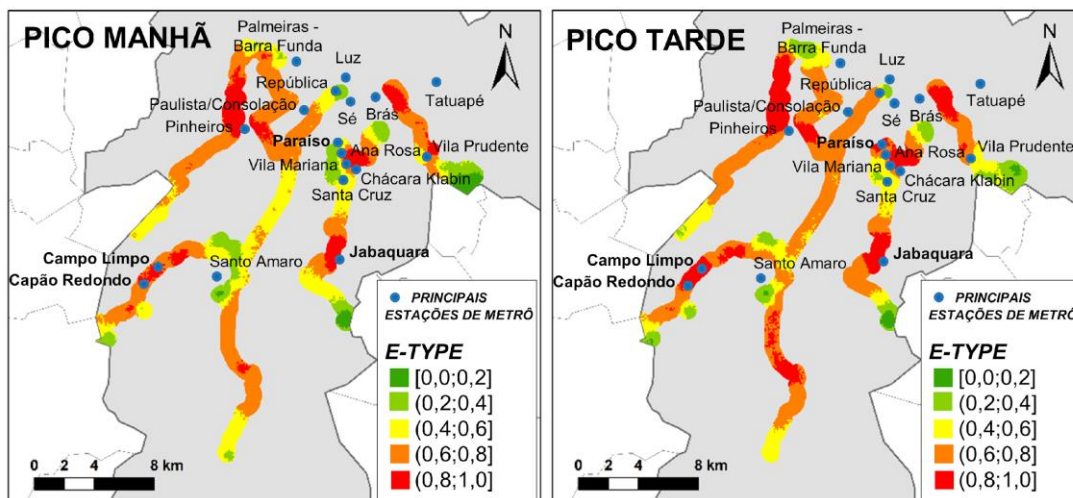
Figura 17 – Valores máximos do intervalo de confiança resultantes da SSG



Fonte: Os autores (2024).

Os valores médios das realizações estão apresentados, de forma contextualizada às principais estações de metrô, na Fig.18.

Figura 18 - Contextualização espacial dos resultados (*e-type*) com as principais estações de metrô



Fonte: Os autores (2024).

O comportamento dinâmico de movimentação e ocupação das oito linhas de ônibus para os dois picos é visível através dos mapas da Error: Reference source not found18. A região da estação do Paraíso se apresenta com maior solicitação no pico da tarde. De forma similar, as linhas nos arredores das estações do Campo Limpo, Capão Redondo e Jabaquara possuem maior influência de aumento de ocupação nas regiões dos arredores correspondentes.

Conclusões e Contribuições

A aplicação de simulação geoestatística a dados operacionais de transporte público, conforme proposta desta pesquisa, produziu resultados positivos, obtidos através de estimativa por krigagem e pela simulação geoestatística para obtenção de diversos cenários de variáveis de demanda por transportes. Estes resultados são promissores, podendo ser referência para estudos futuros associados à aplicação de análise espacial de demanda por transportes. Neste contexto, tem-se a possibilidade de obter estimativas e/ou simulações em localidades não necessariamente amostradas, utilizando exclusivamente a autocorrelação espacial da variável de estudo.

Na pesquisa aqui descrita, foram consideradas informações padronizadas de carregamento de oito linhas de ônibus, através de um índice calculado para mensurar a ocupação do sistema. Essa transformação foi necessária para que as linhas pudessem ser processadas em conjunto, gerando um índice que demonstrasse o comportamento do sistema, como um todo. O índice permitiu inferir sobre a solicitação do sistema de transporte público nas regiões simuladas, bem como gerar cenários e intervalos de confiança.

A variável de estudo apresentou estrutura espacial de forma que as observações mais próximas tiveram menor variância entre si. À medida em que os pontos amostrados foram se afastando entre si, a variância apresentou aumento gradual (com comportamento

similar às curvas esférica e exponencial), até atingir a estacionariedade, em uma amplitude de aproximadamente 4.000 e 3.000 metros, para o pico da manhã e o pico da tarde, respectivamente.

Levando em consideração o fato de que o índice calculado está sujeito à forte influência da variabilidade entre os diferentes períodos de picos, sobretudo ao verificar que, em geral, o pico da manhã apresenta maiores valores máximos de carregamento, não foi recomendada a comparação entre os resultados dos picos da manhã e da tarde. Apesar disso, verificou-se a forte concentração de áreas com sobrecarregamento das linhas de ônibus, especialmente em regiões próximas às principais estações de metrô do município de São Paulo.

O uso de SSG é conveniente a estudos de transportes que visam reproduzir diversas configurações espaciais (cenários). Desta forma, é possível detectar valores extremos da variável em estudo (valores máximos e mínimos), imprescindíveis para o adequado planejamento da oferta de transportes. Além disso, a utilização de SSG permite quantificar a incerteza associada do método.

Por fim, recomenda-se a continuidade do desenvolvimento desta linha de pesquisa, através das seguintes considerações:

- Cálculo de simulações de taxa de ocupação, utilizando a capacidade da frota;
- Cruzamento com dados operacionais do transporte metroviário;
- Análise estatística da relação entre os carregamentos das linhas e outros polos geradores de viagens por ônibus;
- Simulação geoestatística com Krigagem Simples e Monte-Carlo atrelados à rede, em vez do espaço bidimensional.

Agradecimentos

À SPTrans, pela disponibilização dos dados da Pesquisa Sobe/Desce usados neste estudo.

Referências

1. V. R. Vuchic, *Urban transit: operations, planning and economics*, John Wiley & Sons, Hoboken, 2005. ISBN: 978-0-471-63265-8, pp. 664.
2. R. F. Casey *et al.* *Advanced public transportation systems: the state of the art. update '96*. U.S. Department of Transportation, Washington, 1998. <https://rosap.ntl.bts.gov/view/dot/4317>.
3. J. Kuutti, Master's Dissertation, Aalto University, 2012.
4. A. J. Kotz; D. B. Kittelson; W. F. Northrop. Novel vehicle mass-based automated passenger counter for transit applications. *Transportation Research Record: Journal of the Transportation Research Board* 2019, 2563, 37. <https://doi.org/10.3141/2536-05>.
5. M. Siebert; D. Ellenberger. Automatic passenger counting: introducing the t-test induced equivalence test. 2018. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1802.03341>.
6. S. F. Marques; C. S. Pitombo. *Journal of Transport Geography* 2023, 112, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jtrangeo.2023.103682>.

7. S. F. Marques; C. S. Pitombo. Transit ridership modeling at the bus stop level: comparison of approaches focusing on count and spatially dependent data. *Applied Spatial Analysis and Policy* 2022, 15, 277. <https://doi.org/10.1007/s12061-022-09482-y>.
8. S. F. Marques, Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, 2019.
9. S.Y. Yoon; S. K. Ravulaparthi; K. G. Goulias. Dynamic diurnal social taxonomy of urban environments using data from a geocoded time use activity-travel diary and point-based business establishment inventory. *Transportation Research Part A: Policy and Practice* 2014, 3. <https://doi.org/10.1016/j.tra.2014.01.004>.
10. X. M. Chen; Z. Zhu; L. Zhang. Simulation-based optimization of mixed road pricing policies in a large real-world network. *Transportation Research Board* 2015, 8, 215. <https://doi.org/10.1016/j.trpro.2015.06.056>.
11. H. Miura. A study of travel time prediction using universal kriging. *Sociedad de Estadística e Investigación Operativa* 2010, 18, 257. <https://doi.org/10.1007/s11750-009-0103-6>.
12. S. S. Rocha, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal da Bahia, 2014.
13. A. Lindner, Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, 2015.
14. C. S. Pitombo *et al.* A two-step method for mode choice estimation with socioeconomic and spatial information. *Spatial Statistics* 2015, 11, 45. <https://doi.org/10.1016/j.spasta.2014.12.002>.
15. C. S. Pitombo; A. S. G. da Costa; A. R. Salgueiro. Proposal of a sequential method for spatial interpolation of mode choice. *Boletim de Ciências Geodésicas* 2015, 21, 274. <https://doi.org/10.1590/S1982-21702015000200016>.
16. A. Lindner *et al.* Estimation of transit trip production using factorial kriging with external drift: an aggregated data case study. *Geo-spatial Information Science* 2016, 19, 245. <https://doi.org/10.1080/10095020.2016.1260811>.
17. S. S. Rocha; A. Lindner; C. S. Pitombo. Proposal of a geostatistical procedure for transportation planning field. *Boletim de Ciências Geodésicas* 2017, 23, 636. <https://doi.org/10.1590/S1982-21702017000400042>.
18. A. Lindner; C. S. Pitombo. A conjoint approach of spatial statistics and a traditional method for travel mode choice issues. *Journal of Geovisualization and Spatial Analysis* 2018, 2, 1. <https://doi.org/10.1007/s41651-017-0008-0>.
19. S. S. Rocha, Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo, 2019.
20. A. Lindner, Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo, 2019.
21. A. Lindner *et al.* Estimativa da escolha do modo de viagem utilizando geoestatística: um estudo de caso brasileiro. *Revista Brasileira de Cartografia* 2021, 73, 182. <https://doi.org/10.14393/rbcv73n1-54210>.
22. S. F. Marques; C. S. Pitombo; J. Jaime Gómez-Hernández. Spatial modeling of travel demand accounting for multicollinearity and different sampling strategies: a stop-level case study. *Journal of Advanced Transportation* 2024, 2024, 1. <https://doi.org/10.1155/2024/7967141>.
23. S. S. Rocha *et al.* Applying optimization algorithms for spatial estimation of travel demand variables. *Transportation Research Interdisciplinary Perspectives* 2021, 10, 1. <https://doi.org/10.1016/j.trip.2021.100369>.
24. G. Matheron. Principles of geostatistics. *Economic Geology* 1963, 58, 1246. <https://doi.org/10.2113/gsecongeo.58.8.1246>.
25. G. Matheron, *Les variables régionalisées et leur estimation*, Masson et Cie, Paris, 1965.
26. G. Matheron, *The theory of regionalized variables and its applications*, ENSMP, Paris, 1971.

27. A. C. A. Gonçalves; M. V. Folegattin; J. D. V. Mata. Análise exploratória e geoestatística da variabilidade de propriedades físicas de um argissolo vermelho. *Acta Scientiarum* 2001, 23, 1149.
28. Z. M. Souza; J. Marques Jr; G. T. Pereira. Variabilidade espacial da estabilidade de agregados e matéria orgânica em solos de relevos diferentes. *Pesquisa Agropecuária Brasileira*. Brasília 2004, 39, 491.
29. H. Wackernagel, *Multivariate geostatistics*, 3rd ed., Springer, Berlin, 2003.
30. R. A. A six-step practical approach to semivariogram modeling. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment* 2006, 20, 307. <https://doi.org/10.1007/s00477-005-0026-1>.
31. P. M. B. Landim, *Análise estatística de dados geológicos*, 2. ed., Universidade Estadual Paulista, São Paulo, 2003.
32. J. P. Chilès; P. Delfiner, *Geoestatística modeling spatial uncertainty*, John Wiley & Sons, New York, 1999. <https://doi.org/10.1007/s11004-012-9429-y>.
33. G. Verly, Sequential gaussian simulation: a Monte Carlo method for generating models of porosity and permeability in Generation, accumulation and production of Europe's hydrocarbons III, A. M. Spencer, Ed.; Springer, Berlin, 1993, 345-356. https://doi.org/10.1007/978-3-642-77859-9_28.
34. C. V. Deutsch; A.G. Journel, *GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide*, Oxford University Press, New York, 1998.
35. E. H. Isaaks, Ph.D. Thesis, University Stanford, 1990.
36. Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. *Censo e microdados*. <https://www.ibge.gov.br>.
37. SPTRANS. *Dados SPTrans* 2017. <http://www.prefeitura.sp.gov.br/>.
38. R. Bivand; A. L. Et, *Maptools: tools for handling spatial objects*. 2020. <https://cran.r-project.org/web/packages/maptools/maptools.pdf>.
39. P. J. Ribeiro Jr.; P. J. Diggle. geoR: a package for geostatistical analysis. *R News* 2001, 1, 15. <http://cran.r-project.org/doc/Rnews>.
40. B. Graler; E. Pebesma; G. Heuvelink. Spatio-Temporal Interpolation using gstat. *The R Journal* 2016, 8, 204. <https://journal.r-project.org/archive/2016/RJ-2016-014/index.html>.
41. P. A. P. Moran. The Interpretation of Statistical Maps. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)* 1948, 10, 243. <https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1948.tb00012.x>.

Seção 6
Saneamento Ambiental



CAPÍTULO 10

MONITORAMENTO AMBIENTAL POR MEIO DO SENSORIAMENTO DA TEMPERATURA DISTRIBUÍDA POR FIBRA ÓPTICA

Elias de Lima Neto^{1*} Edson Cezar Wendland¹

*1 – Department of Hydraulic and Sanitation, University of São Paulo (USP), São Paulo, SP, Brasil
eliasshs@alumni.usp.br

Resumo – Os problemas ambientais vêm ganhando cada vez mais relevância global. Grande parte desses problemas estão relacionados à forma como interagimos com o ambiente, principalmente o natural. Para tentar minimizar ou mitigar os impactos antrópicos é fundamental estabelecer formas de medição dos parâmetros ambientais que possam nos revelar suas potenciais alterações. O lançamento irregular de esgoto doméstico em redes pluviais é um problema de poluição urbana que leva à subutilização do sistema de esgotamento, e principalmente à poluição dos recursos hídricos. A temperatura pode ser um importante parâmetro a ser monitorado para a identificação de contribuições irregulares de esgoto doméstico aos sistemas pluviais. O sensoriamento térmico distribuído por meio da fibra óptica tem potencial para ser aplicado nestas condições, tal que as variações de temperatura ao longo da rede pluvial podem ser determinadas com uma resolução espacial e temporal da ordem de centímetros e segundos, respectivamente. Com isso, este capítulo apresenta alguns trabalhos relevantes na área de sensoriamento térmico aplicado ao saneamento, além de estratégias de tratamento dos dados obtidos e potencial automatização para o escrutínio dos dados.

Palavras-chave: *DTS-FO. Monitoramento térmico. Escoamento superficial. Conexões de esgoto irregulares. Ligações pluviais irregulares.*

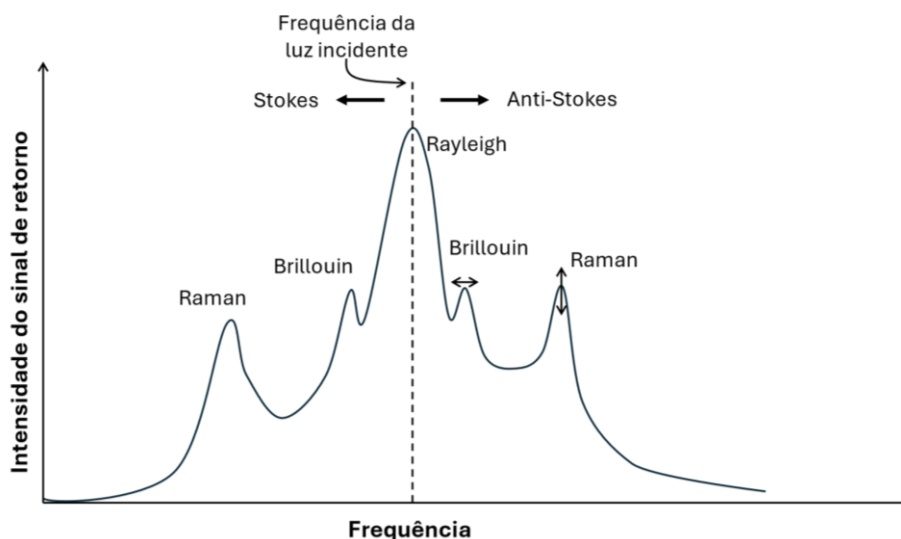
Financiamentos: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq. Processo: 151873/2024-0. Chamada CNPq N°32/2023 – Pós-Doutorado Júnior – PDJ 2023.

Introdução

O sensoriamento térmico distribuído por fibra óptica (acrônimo em inglês DTS-FO) é uma tecnologia com pouco mais de 30 anos aplicada em diversas áreas da engenharia, que contemplam a identificação de fraturas em rochas, erosão do solo, avaliação da integridade de barragens, monitoramento de tubulações de óleo e gás, monitoramento de linhas de transmissão de energia, etc [1], [2], [3], [3]. Em função de sua versatilidade, pode ser aplicada ao monitoramento da temperatura associada a vários fenômenos ou processos. Existem algumas configurações possíveis para a aplicação do sensoriamento térmico com fibra óptica. O sensoriamento pode ser distribuído ou pontual. Uma das principais vantagens do sensoriamento distribuído é a possibilidade de monitorar, quase em tempo real, grandes extensões com apenas um equipamento. Tal que - a depender da acurácia das medições - cada 0,25 m da fibra óptica comporta-se como um sensor de temperatura [4].

O sensoriamento térmico distribuído é realizado a partir da emissão de um pulso de luz pela fibra óptica. A luz emitida sofre espalhamento ao longo do seu percurso o que gera uma atenuação da amplitude do pulso de luz em função da distância percorrida e do retroespalhamento, que é utilizado para medir diferentes propriedades físicas ao longo da fibra óptica. A identificação da posição do sensoriamento se dá por meio do tempo que a luz leva entre a sua emissão e sua detecção, baseado no princípio fundamental da reflectometria óptica no domínio do tempo (Acrônimo em inglês OTDR). A luz ao atravessar a fibra óptica pode sofrer retroespalhamento em função da mudança do índice de refração. Existem três espalhamentos principais como ilustrado na Figura 1. O espalhamento Rayleigh é um espalhamento elástico, ao passo que os espalhamentos Brillouin e Raman são inelásticos. Tais propriedades implicam que não há alteração do comprimento de onda no espalhamento elástico, ao passo que os comprimentos inelásticos resultam em comprimentos de onda maiores (Stokes) e menores (Anti-Stokes) do que a frequência da luz incidente [5].

Figura 1 – Diagrama do espalhamento de um pulso de luz espalhado nos três componentes espectrais característicos Rayleigh, Raman e Brillouin ao longo de uma fibra óptica, e seus comportamentos em relação aos deslocamentos Stokes e Anti-Stokes



Fonte: Adaptado de [5].

Em termos de acurácia, o espalhamento Rayleigh é o melhor, porém seu alcance é limitado. Já os espalhamentos Brillouin e Raman permitem o monitoramento da temperatura por longos comprimentos, com a vantagem do espalhamento Brillouin também medir deformações distribuídas, porém não ao mesmo tempo que a temperatura. O resultado do estímulo térmico para o espalhamento Brillouin resulta em maiores variações de frequência do que de intensidade, o que ocorre de forma oposta para o espalhamento Raman [6], [7]. A quantificação da temperatura pelos métodos inelásticos se dá pela relação entre os deslocamentos Stokes, que é insensível à variação da temperatura, e Anti-Stokes, que é sensível à variação da temperatura [1].

O aparato de medição de forma geral é composto por duas partes, o sensor e o sistema de detecção, em que dependendo da acurácia desejada e equipamento utilizado, cada metro

ou fração métrica do comprimento são sensores unitários. O sistema de detecção envolve um sistema de pulsos de luz, sensores optoeletrônicos, processamento dos dados e sistema de armazenamento de dados. Algumas das marcas e modelos de fibra óptica reportados na literatura podem ser observados no Quadro 1.

A utilização de apenas um instrumento de medida com capacidade de monitorar longas distâncias é uma das principais características positivas da utilização do DTS para o monitoramento ambiental, além da baixa manutenção do equipamento. A sensibilidade das medidas do sistema DTS está condicionada a um equilíbrio entre a resolução temporal, resolução espacial, comprimento do cabo, precisão de temperatura e preço do equipamento [8]. Como as medições estão associadas ao tempo de deslocamento do laser dentro da fibra por uma certa distância de incidência e reflexão, em geral, nos cabos mais curtos a precisão das medidas é maior, e é possível fazer mais medições em um intervalo de tempo menor.

Quadro 1 – Equipamentos de sensoriamento térmico e modelos de fibra óptica utilizados em experimentos reportados na literatura

Marca do equipamento	Marca da fibra óptica	Autor
HALO DTS (Sensornet, London, England)	Fibra multimodo 50/125 μm (Kaiphone Technology, Taiwan)	[8]
HALO DTS (sensored, London, England)	Fibra multimodo 50/125 μm (Kaiphone technology Taiwan)	[9]
HALO SENTINEL	-	[10]
HALO	ORYX	[11]
Multi Sensor Board Linear Pro Series, (N4386B-052), AP-sensing	Armored FO PBT, OD 6.0 mm patch cord 50/125 (OM2), Kaiphone, China	[12]
DTS unit—XT-DTS (Silixa Ltd, London, UK)	Multimode 50/125 μm —OM2/OM3	[13]
Yokogawa DTSX3000	-	[14]
Silixa XT-DTS (Silixa Ltd., Hertfordshire, United Kingdom)	Multimode 50/125 μm , Fibre-Lan Indoor–Outdoor (Furukawa Electric Co. Ltd., Tokyo, Japan)	[4]
LIOS PRE. VENT DSM	(SMF-28-100) atenuação do comprimento de onda: 1260–1625 nm	[2]
Observação: as informações dos fabricantes foram apresentadas de acordo com o exposto no trabalho acadêmico consultado e citado.		

Fonte: Autores (2024).

Com isso, o sensoriamento térmico a partir da fibra óptica abriu uma nova janela para o monitoramento ambiental, principalmente quando o assunto é a análise da dinâmica dos

fluxos. A técnica de sensoriamento térmico da temperatura distribuída por fibra óptica, dependendo do arranjo de medições, permite o monitoramento de variações de temperatura da ordem de 0,01 °C, podendo apresentar uma resolução temporal de 5 s, e ao longo de distâncias superiores a 10 km.

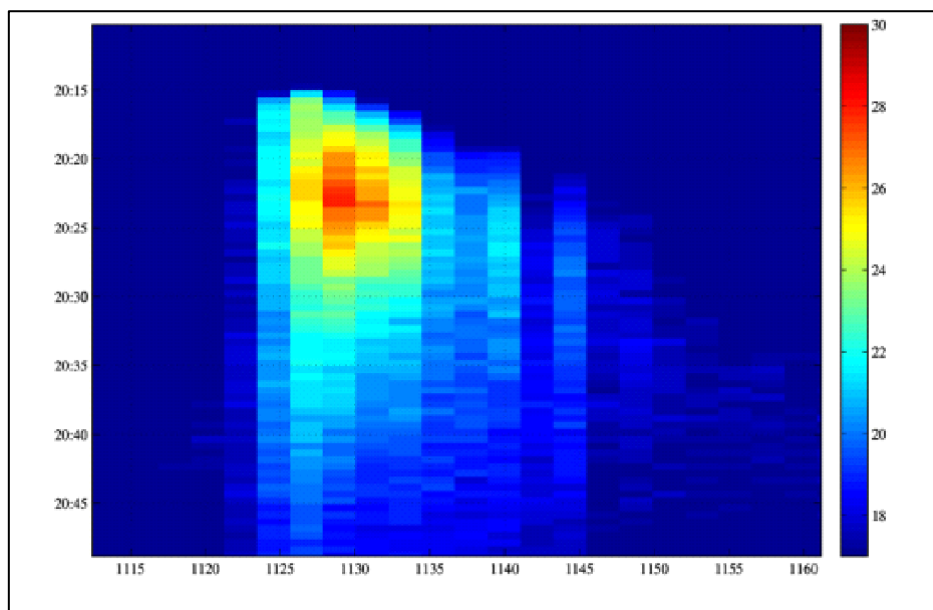
Na sequência será discutida e apresentada a aplicação do DTS para o monitoramento das ligações clandestinas de esgoto em redes pluviais, bem como as ligações pluviais em redes de esgoto, considerando a efetividade das medições e potencialidades relacionadas à automação da identificação de tais potenciais irregularidades.

Identificação de ligações de esgoto ilícitas

O monitoramento das contribuições ilícitas de esgoto aos sistemas pluviais é uma importante ferramenta para evitar a subutilização das redes coletoras e sistemas de tratamento de esgoto, bem como para garantir a qualidade das águas pluviais. Primeiramente, o lançamento de esgoto em sistemas pluviais leva à degradação da qualidade das águas superficiais, em última análise diminui a disponibilidade de mananciais para abastecimento humano, ou compromete sua utilização. Uma outra consequência deste processo é a subutilização dos coletores de esgoto e do próprio sistema de tratamento que são concebidos considerando a população local, o que gera desperdício de recursos financeiros, geralmente público no Brasil. Por último, é uma forma de sensoriamento e identificação de ligações ilícitas sem a necessidade de intervenções demasiadas, e que pode ser realizado em larga escala.

Neste contexto, a utilização do sensoriamento térmico distribuído (DTS) já foi analisada e comprovadamente apropriada. Os primeiros estudos, especificamente para esta finalidade foram conduzidos na Europa, cujo clima é temperado e os extremos térmicos tendem a ser bem definidos. A vantagem da utilização do DTS está associada à sua relativa simplicidade em termos de capacidade de monitoramento, tanto em termos de extensão como no tempo a partir de apenas um equipamento. No trabalho de Schilperoort e Clemens [9] foi monitorado aproximadamente 1,85 km de rede combinada (tubulação única para coletar esgoto e águas pluviais). Um dos desafios nessa operação é manter a fibra submersa, pois a exposição da fibra ao ar faz com que haja pequenas variações de temperatura que não representam as condições de variação térmica da massa líquida, que é o objeto de medição. Isso pode ser feito associando a fibra a uma corda ou cabo de maior densidade. Nas condições do experimento citado, a resolução das medições podem variar de 0,65m a 2 m em termos de espaço, e de 10 s a 60 s com relação ao intervalo de medições, considerando uma acurácia de 0,01 - 0,2 °C [4], [15]. A partir da Figura 2 é possível contextualizar uma das formas de representação dos dados monitorados por DTS, tal que a resolução espacial representada no gráfico de calor é de 2 m e a resolução temporal de 30 s.

Figura 2 – Apresentação do resultado do monitoramento com DTS de uma rede de águas pluviais recebendo contribuições irregulares de esgoto



Fonte: Adaptado de Hoes [8].

Para a finalidade de identificação de contribuições irregulares ou clandestinas aos sistemas pluviais, nem sempre a temperatura absoluta é o interesse do monitoramento, uma vez que as variações de temperatura já podem indicar inconsistências em termos de contribuições irregulares. Um despejo de esgoto doméstico na rede combinada pode gerar uma variação de até 10 °C (considerando estudos realizados nos Países Baixos entre junho e setembro) [10]. Essa variação está associada à temperatura do esgoto bruto, que pode variar de 35-40 °C considerando as águas de banho ou até mesmo de 30-90 °C dependendo do eletrodoméstico utilizado [8]. Evidentemente que há uma queda de temperatura em função das condições ambientais, no entanto, é uma expressiva diferença entre as águas pluviais ou fluviais e as águas servidas. No contexto tropical ainda há uma lacuna com relação às assinaturas térmicas do esgoto bruto a partir dos usos e hábitos da população.

Uma das lacunas para o monitoramento de ligações clandestinas seja de esgoto em redes pluviais ou águas pluviais em redes de esgoto, é a automatização da leitura das variações térmicas a partir dos dados do DTS. A maior parte dos trabalhos ao estudar tais eventos realizaram as inspeções manualmente [8], [9], [10], [11], [13], [15], [16]. Considerando que uma campanha de monitoramento pode gerar milhares de dados, a inspeção visual pode inviabilizar o processamento de informações extensas, bem como enviar as anomalias observadas por cada operador.

De forma complementar, tanto as ligações ilícitas de esgoto em redes pluviais podem ser determinadas, como também de ligações pluviais nas redes de esgoto. Evidentemente que estas perturbações tendem a revelar uma diminuição da temperatura do fluxo ao longo das conexões de esgoto. Neste caso, a determinação das ligações pluviais nos sistemas de esgoto são fundamentais, uma vez que as tubulações não são dimensionadas para receber tais contribuições, e as estações de esgoto normalmente não são dimensionadas para

receber esgotos com essas características. Em países tropicais, ou com elevada pluviosidade esse tipo de conexão pode levar a interrupção do fluxo de esgoto ou mesmo ruptura das tubulações pelo excesso do fluxo.

Identificação das conexões ilícitas e automatização para classificação das anomalias térmicas

Um dos pontos sensíveis da utilização do DTS para identificação de ligações irregulares está relacionado à interpretação dos dados. A maior parte dos trabalhos encontrados na literatura até o momento fizeram o escrutínio das informações manualmente, o que pode ser inviável para o monitoramento de longo período, que pode ultrapassar facilmente a marca de 360 milhões de dados [17]. Para aprimorar a utilização do DTS o primeiro estudo envolvendo um mecanismo de seleção e classificação das anomalias encontradas nos monitoramento foi proposto por Vosse e autores [17]. Essencialmente o processamento proposto pelos autores considerou seis etapas,

1. Processamento das medições;
2. Determinar os níveis de ruído;
3. Marcar todas as mudanças significativas de temperatura;
4. Combinar as mudanças de temperatura em locais adjacentes aos pulsos de fluxo no sistema medido;
5. Excluir fluxos associados aos eventos de tempestade.
6. Classificar cada fluxo.

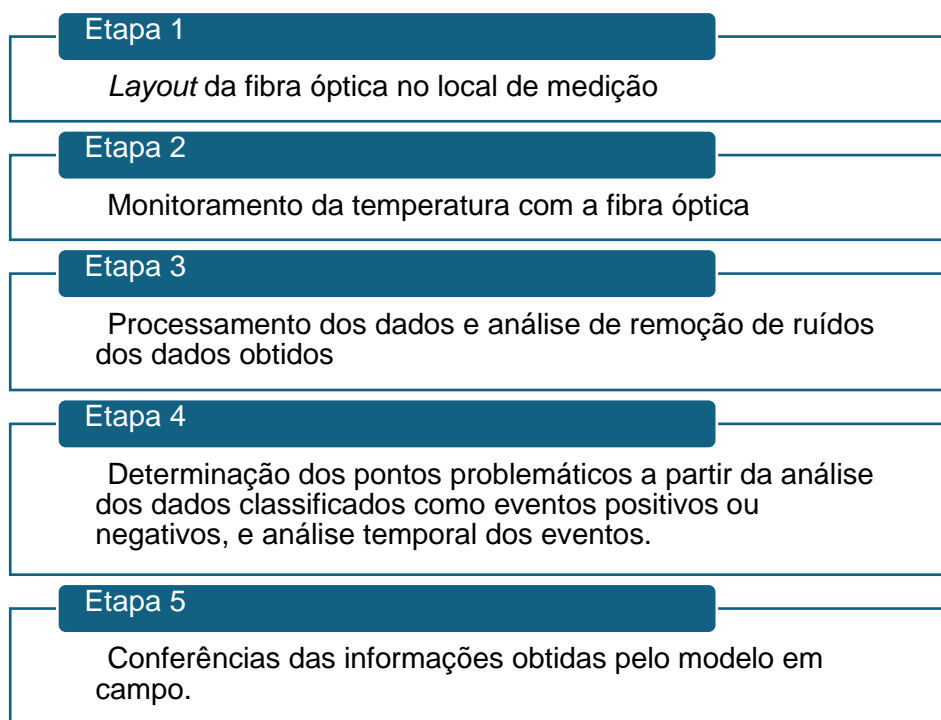
Pela metodologia proposta, a partir dos dados brutos os ruídos são definidos como o desvio padrão das anomalias monitoradas em uma condição padrão, que pode variar segundo o operador. Em sistemas de esgotamento sanitário o período noturno ou madrugada são os horários de mínimo ou ausência de uso das redes, sendo preferível como período padrão. Desta forma, Vosse e autores [17] definiram o ruído como um fator α , que representa o desvio padrão em um período de duas horas em condições de mínimo uso da rede, suficientes para estabelecer o ruído do sistema. Além das condições locais de monitoramento, os ruídos também estão associados ao equipamento utilizado, a distância que está sendo monitorada e a técnica utilizada para medição (*single end* ou *double end*).

Uma outra abordagem sobre a determinação do ruído foi apresentada por Kessili [12], em que a partir de uma matriz com a variação das temperaturas ao longo da fibra, foi obtida uma relação adimensional com a distribuição de frequência em intervalos de 0,1 °C, resultando em uma porcentagem de variação da temperatura em um dado tempo ao longo da fibra. O resultado desta avaliação demonstrou que 100 % da variação da temperatura em uma condição sem perturbações do meio, estavam dentro do limite de -0,2 °C a 0,1 °C. Com isso, é possível concluir que todas as mudanças de temperatura abaixo de -0,2 °C e acima de 0,1 °C são resultantes de algum evento. Neste caso, a abordagem permite a definição, tanto de um evento associado à contribuição de esgoto, como também de águas pluviais, e adicionalmente pode indicar posições em que a fibra óptica não está submersa (formando uma curva fora do líquido em função de uma possível movimentação

indesejável). Essa abordagem é uma evolução em relação a abordagem adotada por Vosse e autores [17], pois analisa o início e o final de um evento térmico, seja pela contribuição de esgoto ou de águas pluviais que estariam respectivamente associados a um evento positivo e um evento negativo em uma rede de esgoto. Entretanto, ainda é preciso avaliar como a variabilidade da temperatura das águas pluviais, a depender do período do ano e da superfície sobre a qual a precipitação escoou antes de adentrar à rede de esgotamento pode afetar a interpretação dos fenômenos estudados.

Ainda no contexto da automatização e identificação das contribuições ilícitas em sistemas pluviais ou de esgoto, o processamento dos dados medidos, independentemente do equipamento DTS utilizado, ainda parece ser o ponto chave para obter resultados consistentes. Uma das abordagens recentes acerca desta questão é apresentada por Zhou [18], e pode ser sumarizado a partir do seguinte fluxograma:

Figura 3 - Sequência de processamento sugerida para investigação de infiltração/lançamento de águas pluviais em galerias de esgoto



Fonte: Adaptado de [18].

A sequência das análises é semelhante entre os autores ao avaliar as contribuições aos sistemas de esgoto ou pluviais, no entanto, o que difere são as investigações aprimoradas dos dados obtidos, que inicialmente eram visuais, através de mapas de calor ou gráficos, por exemplo, e atualmente a interpretação é refinada a partir de diferentes técnicas de reprocessamento dos dados coletados. Uma das formas para sistematizar os dados monitorados é através de uma matriz de temperatura da água que é expressa de acordo com a Eq.1:

$$\mathbf{TA} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & \dots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \dots & T_{2n} \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ T_{m1} & T_{m2} & \dots & T_{mn} \end{bmatrix} \quad (1)$$

No estudo de Kessili e autores [12] a abordagem para refinamento dos dados foi a partir da análise da matriz de variância dos dados brutos, e desta análise foi estabelecido os limites para interpretação dos eventos positivos e negativos. Já no trabalho de Zhou e autores [18], foi utilizada a técnica de transformação wavelet para eliminação de ruídos. Não é objetivo deste trabalho se aprofundar na técnica wavelet, que já é um tema à parte. No entanto, de maneira genérica a transformada wavelet tem origem na transformada de Fourier, como uma adaptação para a análise de sinais não estacionários que contenham diferentes componentes de frequências em diferentes tempos.

Uma das respostas buscadas ao se utilizar o método de transformada wavelet é identificar a função analisadora, que são organizadas em famílias de equações mães wavelet, por exemplo: Haar, Daubechies (db2 e db4), Symlets (sym 4 e sym 6) e Coiflets (coif 1 e coif 4). Operacionalmente, os dados obtidos pelo processamento dos dados brutos, a partir de uma equação mãe wavelet, separam os dados em alta frequência e baixa frequência, dando origem a um vetor com os coeficientes de alta e baixa frequência. A partir destes dados são aplicadas técnicas para reduzir o nível dos ruídos com base na limiarização suave, na qual calcula-se o nível limiar, dentre os métodos disponíveis destacam-se: estimativa de risco imparcial de Stein, limiar fixo, limiar heurístico e mínima e máxima variância. O nível limiar calculado ainda pode ser ajustado considerando o próprio nível do ruído, tal que o limiar é ajustado com base em uma estimativa única do nível de ruído calculado a partir dos coeficientes do primeiro nível de decomposição; o limiar é ajustado de forma adaptativa para cada nível de decomposição, com base em uma estimativa dependente do nível de ruído; ou sem ajuste do limiar calculado. Para maiores detalhes sobre os métodos associados ao processo de remoção de ruídos recomenda-se o trabalho de Mallat [19].

Os passos descritos anteriormente permitem calcular a matriz de variação dos dados de temperatura corrigidos pela eliminação dos ruídos (Eq. 2), e com isso, avaliar os eventos positivos e negativos no intuito de automatizar a identificação dos pontos de anomalia da rede. Um avanço na metodologia proposta por Zhou [18], em relação às demais, é a utilização da classificação dos eventos a partir de uma matriz de três sinais, como apresentado na Eq. 3.

$$\Delta T = \begin{bmatrix} \Delta T_{11} & \Delta T_{12} & \dots & \Delta T_{1,n-1} \\ \Delta T_{21} & T_{22} & \dots & \Delta T_{2,n-1} \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ \Delta T_{m1} & \Delta T_{m2} & \dots & \Delta T_{m,n-1} \end{bmatrix} \quad (2)$$

Para cada uma das metodologias cotadas para eliminação dos ruídos a partir da função wavelet mãe, o nível limiar e correção dos coeficientes de limiarização dá origem a uma nova tabela ΔT . Para qual estão associados os coeficientes de limite de ruído de fundo **a** e **b**, respectivamente positivo e negativo, que compõem a Eq. 3.

$$K = \begin{bmatrix} \mathbf{1}, T_{ij} - T_{i,j-1} \geq \mathbf{a}, \textit{evento positivo}; \\ \mathbf{0}, \mathbf{b} < T_{ij} - T_{i,j-1}, \textit{nenhum evento}; \\ \mathbf{-1}, T_{ij} - T_{i,j-1} \leq \mathbf{b}, \textit{evento negativo}. \end{bmatrix} \quad (3)$$

A avaliação das melhores combinações de função wavelet mãe, limiar de ruído, e correção do limiar, podem ser medidas através da relação sinal ruído (acrônimo em inglês SNR) e erro quadrático médio (acrônimo em inglês RMSE). Considerando a aplicação da técnica para temperaturas variando de 27°C a 23 °C em redes de esgoto, a melhor definição do limiar de ruído é baseada na **regra mínima e máxima variância e limiar heurístico**, para a técnica de reamostragem o melhor método é da **estimativa dependente do nível de ruído para cada camada** [18]. De modo geral, quanto maior for a diferença de temperatura associada aos eventos sanitários, mais fácil é a identificação a partir do DTS, pois o contraste dos eventos tende a ser mais explícito, e menores serão os falsos positivos ou negativos.

Efeito do regime permanente e não permanente do escoamento e sua relação com as medições de temperatura nas tubulações sanitárias

Os sistemas de esgotamento e pluviais possuem algumas peculiaridades hidráulicas associadas ao seu regime de escoamento, que pode ser classificado como permanente ou não permanente. Nas condições em que o regime de escoamento pode ser considerado como permanente, a temperatura base para o sensoriamento térmico é a temperatura média do fluxo ao longo de duas seções consecutivas de controle. Esse é um dos cenários mais desafiadores no sensoriamento térmico, em que pequenas variações de temperatura ao longo do tempo e espaço podem indicar uma contribuição indesejada ao sistema de tubulação monitorado. Nestas condições, as técnicas discutidas anteriormente, relacionadas a eliminação de ruídos, são mais adequadas.

Já em condutos com fluxo não permanente, especialmente os intermitentes, a identificação da origem do fluxo é facilitada em função do contraste de temperatura, que pode chegar a 2°C de diferença entre um conduto com lâmina d'água persistente e um intermitente. Além da diferença mencionada, a temperatura do esgoto lançado em tubulações vazias tende a cair mais rapidamente quando comparada com tubulações que possuem lâmina líquida [8].

A magnitude do fluxo é outro fator importante para o sensoriamento térmico por fibra óptica, porém nesse caso, altos despejos podem mascarar os pontos de montante a ele, razão pela qual uma campanha de monitoramento de longa duração pode ser mais assertiva [17]. Neste contexto, a estimativa da quantidade de despejo à tubulação monitorada pode ser desejável, o que pode ser feito a partir do equacionamento das

contribuições medidas e suas temperaturas por meio da equação da energia. Com isso, é possível estabelecer relações entre o fluxo lançado em um dado trecho de uma rede em relação a uma vazão permanente [18], [20].

Considerações finais

- A investigação em tubulações de águas pluviais urbanas ou combinadas com águas fluviais, permite avaliar a presença de contribuições clandestinas de esgoto;
- A análise de redes de esgoto permite avaliar a contribuição irregular de águas pluviais dos sistemas prediais;
- A investigação de redes de esgoto permite avaliar a infiltração de águas do solo saturado, indicando demandas por reparo;
- Para melhor a interpretação dos dados de sensoriamento térmico por meio de fibra óptica é preciso utilizar informações complementares, como de eventos de chuva, ou outras disponíveis e de interesse;
- A identificação das ligações irregulares de esgoto ou de águas pluviais, precisa ser acompanhada do estudo temporal, como número de pulsos por dia ou semana, e o período do dia de ocorrência.

Referências

1. A. Ukil, H. Braendle; P. Krippner. Distributed temperature sensing: Review of technology and applications. *IEE Sensors Journal* 2012, 12, 885. <https://doi.org/10.1109/JSEN.2011.2162060>.
2. B. Bekele *et al.* Exploratory seepage detection in a laboratory-scale earthen dam based on distributed temperature sensing method. *Geotechnical and Geological Engineering* 2023, 41, 927. <https://doi.org/10.1007/s10706-022-02315-2>.
3. H. Li *et al.* Test and analysis on extended temperature rise of 110 kv transformer based on distributed temperature sensing. *IEEE Transactions on Power Delivery* 2023, 38 <https://doi.org/10.1109/TPWRD.2022.3204333>.
4. L. E. Bertotto, *et al.* Heated fibre optics to monitor soil moisture under successive saturation–drying cycles: An experimental approach. *European Journal of Soil Science* 2024, 75, 1. <http://dx.doi.org/10.1111/ejss.13535>.
5. J. S. Selker *et al.* Distributed fiber-optic temperature sensing for hydrologic systems. *Water Resources Research* 2006, 42, 1. <https://doi.org/10.1029/2006WR005326>.
6. H. J. Li *et al.* Detecting pipeline leakage using active distributed temperature sensing: theoretical modeling and experimental verification. *Tunnelling and Underground Space Technology* 2023, 135, 1. <https://doi.org/10.1016/j.tust.2023.105065>.
7. H.-E. Joe *et al.* A review on optical fiber sensors for environmental monitoring. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing-Green Technology* 2018, 5, 173. <https://doi.org/10.1007/s40684-018-0017-6>.
8. O. A. C. Hoes *et al.* Locating illicit connections in storm water sewers using fiber-optic distributed temperature sensing. *Water Research* 2009, 43, 5187. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2009.08.020>.
9. R. P. S. Schilperoot; F. H. L. R. Clemens. Fibre-optic distributed temperature sensing in combined sewer systems. *Water Science and Technology* 2009, 60, 1127. <https://doi.org/10.2166/wst.2009.467>.

10. J. G. Langeveld *et al.* Monitoring the performance of a storm water separating manifold with distributed temperature sensing. *Water Science and Technology* 2012, 66, 145. <https://doi.org/10.2166/wst.2012.152>.
11. J. Nienhuis *et al.* Assessment of detection limits of fiber-optic distributed temperature sensing for detection of illicit connections. *Water Science and Technology* 2013, 67, <https://doi.org/10.2166/wst.2013.176>.
12. A. Kessili; J. Vollertsen; A. H. Nielsen. Automated monitoring system for events detection in sewer network by distribution temperature sensing data measurement. *Water Science and Technology* 2018, 78, 1499. <https://doi.org/10.2166/wst.2018.425>.
13. O. Panasiuk *et al.* Using distributed temperature sensing (DTS) for locating and characterising infiltration and inflow into foul sewers before, during and after snowmelt period. *Water* 2019, 11, 1. <https://doi.org/10.3390/w11081529>.
14. M. Beheshti; S. Sægrov. Detection of extraneous water ingress into the sewer system using tandem methods-a case study in Trondheim city. *Water Science and Technology* 2019, 79, 231. <https://doi.org/10.2166/wst.2019.057>.
15. J. Selker *et al.* Fiber optics opens window on stream dynamics. *Geophysical Research Letter* 2006, 33, 1. <https://doi.org/10.1029/2006GL027979>.
16. R. Schilperoort *et al.* Searching for storm water inflows in foul sewers using fibre-optic distributed temperature sensing. *Water Science and Technology* 2013, 68. <https://doi.org/10.2166/wst.2013.419>.
17. M. Vosse *et al.* Processing of DTS monitoring results: automated detection of illicit connections. *Water Practice & Technology* 2013, 8, 375. <https://doi.org/10.2166/wpt.2013.037>.
18. Y. Zhou *et al.* A smart sewer detection approach based on wavelet denoising of in-sewer temperature sensing measurement. *Water Research X* 2023, 21, 1. <https://doi.org/10.1016/j.wroa.2023.100205>.
19. S. Mallat, *A wavelet tour of signal processing: the sparse way*, Elsevier, Amsterdam, 2008.
20. M. Beheshti; S. Sægrov. Quantification assessment of extraneous water infiltration and inflow by analysis of the thermal behavior of the sewer network. *Water* 2018, 10, 1. <https://doi.org/10.3390/w10081070>.

Seção 7
Tratamento de Águas de
Abastecimento e Residuárias



CAPÍTULO 11

TENDÊNCIAS, INOVAÇÕES E DESAFIOS NO DESENVOLVIMENTO E APLICAÇÃO DE FILTROS LENTOS DOMICILIARES PARA O TRATAMENTO DE ÁGUAS DE ABASTECIMENTO

Bárbara Luiza Souza Freitas¹ e Lyda Patrícia Sabogal-Paz^{1*}

1 – Departamento de Hidráulica e Saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brasil

** lysaboga@sc.usp.br*

Resumo – Tecnologias de tratamento de água descentralizadas ou de uso no local (*Point-of-Use* – POU) são recursos aplicados para melhorar a qualidade da água consumida por populações vulneráveis. O Filtro Lento Domiciliar (FLD) é uma dessas tecnologias que vem se destacando por suas diversas vantagens técnicas, construtivas e operacionais. Diferente dos filtros lentos convencionais, o FLD foi desenvolvido no início dos anos 90 para ser operado de forma simplificada e sob demanda pelo próprio usuário. Após 30 anos de experiências, o FLD se consolidou globalmente, tendo milhares de unidades implementadas em diversos países, impactando positivamente a saúde de populações atendidas. Apesar do sucesso, ainda há espaço para melhorias em sua eficiência, o que vêm motivando estudos de investigação sobre diferentes condições experimentais, regimes de operação e tamanho. Em especial, pesquisadores da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo (USP-EESC) têm se dedicado a aprimorar o FLD desde 2012, sendo atualmente considerado o principal centro de pesquisa desta tecnologia no mundo. Diante disso, este capítulo de livro descreverá diversos modelos de FLDs, visando não apenas disseminar o conhecimento científico, mas também identificar tendências, inovações e lacunas ainda presentes neste campo de pesquisa.

Palavras-chave: *Tratamento de água. Tecnologias sociais. Biofiltro de areia. Filtração lenta domiciliar. Segurança da água de consumo.*

Financiamentos: The Royal Society (ICA\R1\201373 - *International Collaboration Awards* 2020) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (números de concessão: 308070/2021-6 e 442074/2023-9).

Introdução

Atualmente, mais de 700 milhões de pessoas no mundo carecem de acesso à água potável [1], o que resulta na morte anual de mais de 443 mil crianças menores de cinco anos devido às doenças de veiculação hídrica. [2] Essas questões de saúde pública, além de evidenciarem as desigualdades sociais e econômicas enfrentadas pela população, destaca problemas que poderiam ser evitáveis com a universalização de serviços de saneamento adequados. Diante disto, a Agenda 2030 da Organização Mundial da Saúde incluiu entre os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) a meta ODS6, que visa universalizar o acesso aos serviços de saneamento. Essa meta vem intensificando as ações públicas e privadas, promovendo avanços significativos nos últimos anos no âmbito de saneamento de forma geral. No entanto, a falta de acesso permanece sendo um desafio,

especialmente em comunidades vulneráveis e isoladas, seja por razões geográficas ou por marginalização, sobretudo em países subdesenvolvidos e em desenvolvimento.

Nessas comunidades vulneráveis e isoladas, a implementação de redes de distribuição de água é financeiramente inviável e alternativas como carros-pipa ou cisternas são muitas vezes impróprias ao consumo. As formas mais seguras de abastecimento nestas regiões devem ser precedidas de um tratamento, o qual deve ser feito por tecnologias adaptadas às condições socioculturais e econômicas das pequenas comunidades e residências. Estas tecnologias descentralizadas variam desde métodos únicos, como filtração por cerâmica, areia e membrana e desinfecção por cloro, UV e solar, até soluções com múltiplas barreiras, envolvendo pré-tratamento, filtração e pós-tratamento. A escolha da tecnologia mais adequada depende de diversos fatores, como a qualidade da água bruta, a disponibilidade de materiais, os contextos socioculturais e econômicos e a capacidade de operação e manutenção da comunidade. [3] O ideal é que as comunidades consigam, de maneira simples, segura e de baixo custo, tratar sua própria água, reduzindo ou eliminando os riscos de doenças de veiculação hídrica.

Uma tecnologia descentralizada promissora é o Filtro Lento Domiciliar (FLD), uma adaptação dos filtros lentos convencionais, que oferece vantagens operacionais e construtivas, além de ser uma solução de excelente custo-benefício. Assim como os filtros convencionais, os FLDs utilizam mecanismos físico-químicos e biológicos para remover impurezas e patógenos, sendo especialmente eficazes na redução de doenças diarreicas. Criado no início da década de 90 por um grupo de pesquisa canadense liderado por Dr. David Manz, o primeiro modelo de FLD teve como objetivo propor uma solução viável e simples para atender às necessidades de tratamento conforme a demanda da comunidade. Esse modelo, patenteado como *Biosand Filter* (BSF), foi amplamente testado e validado em diversas implementações ao redor do mundo. [4] Apesar do seu sucesso, o modelo ainda apresenta limitações no tratamento de determinadas condições e não pode ser considerado adequado para todos os cenários descentralizados. Por isso, novos modelos de FLD, com melhorias construtivas e operacionais, estão sendo desenvolvidos e testados globalmente.

No Brasil, desde 2012, o grupo de pesquisa coordenado pela Prof. Tit. Lyda Patricia Sabogal Paz, da Escola de Engenharia de São Carlos (EESC), tem se dedicado ao desenvolvimento e aperfeiçoamento do FLD. Após testar diferentes designs para o tratamento de águas de diversas qualidades, o modelo otimizado da EESC já está em sua versão mais recente e está sendo avaliado sob condições específicas, visando a remoção de contaminantes presentes em matrizes naturais, cuja remoção ainda é complexa em tecnologias descentralizadas. Com doze anos de pesquisas e diversas publicações, atualmente o grupo da EESC é considerado o maior centro de estudos sobre FLDs no mundo.

Diante disso, este capítulo tem como objetivo disseminar o conhecimento científico sobre os filtros lentos domiciliares (FLD), abordando aspectos fundamentais do seu design patenteado e suas características operacionais. Além disso, serão apresentados outros modelos construtivos e operacionais descritos na literatura, bem como a qualidade e segurança da água produzida por essas diferentes variações. Por fim, o capítulo destacará os principais avanços e contribuições da EESC no desenvolvimento dessa tecnologia, além de discutir as principais tendências, inovações e lacunas de pesquisa ainda presentes neste campo.

Desenvolvimento

Breve histórico do Filtro Lento Domiciliar

No início da década de 90, um grupo de pesquisa da Universidade de Calgary liderado pelo Prof. Dr. David Manz foi pioneiro ao investigar e adaptar a tecnologia de tratamento de filtração lenta convencional no contexto domiciliar. Além da diferente escala, o Filtro Lento Domiciliar (FLD) foi idealizado para facilitar a construção e o transporte das unidades para comunidades vulneráveis, além de possibilitar a instalação e operação do sistema dentro das residências, aumentando a aceitação da tecnologia.

Seguindo essa premissa, o primeiro protótipo de FLD foi desenvolvido e implementado em uma comunidade rural de Mindanao nas Filipinas. [5] Os pesquisadores utilizaram materiais disponíveis localmente, como pedregulhos e areias de construção civil com características semelhantes às da filtração lenta convencional, além de um balde comum para o corpo do filtro e canos de PVC para a tubulação de saída. A simplicidade da construção, que podia ser realizada pelo próprio usuário, foi um fator crucial para o início do desenvolvimento dessa tecnologia. Outro aspecto relevante foi a capacidade do FLD de tratar a água sob demanda, permitindo que o usuário alimentasse o sistema em bateladas para obter água de qualidade segura conforme sua necessidade.

A partir deste primeiro protótipo, a tecnologia de filtração lenta domiciliar passou a ser amplamente estudada, permitindo uma compreensão mais profunda de aspectos cruciais do filtro, como o posicionamento da tubulação de saída, a composição e espessura do leito filtrante, a taxa de filtração, o período de pausa e as formas de manutenção. [6-8]

Dez anos após a concepção inicial em 2001, Dr. David Manz e Camilla Baker fundaram a organização comunitária CAWST (*Centre for Affordable Water and Sanitation Technology*). O objetivo da organização era promover e expandir a transferência de tecnologias descentralizadas em comunidades isoladas, com foco especial no Biofiltro de Areia (BSF – *Biosand Filter*), modelo patenteado por Manz.

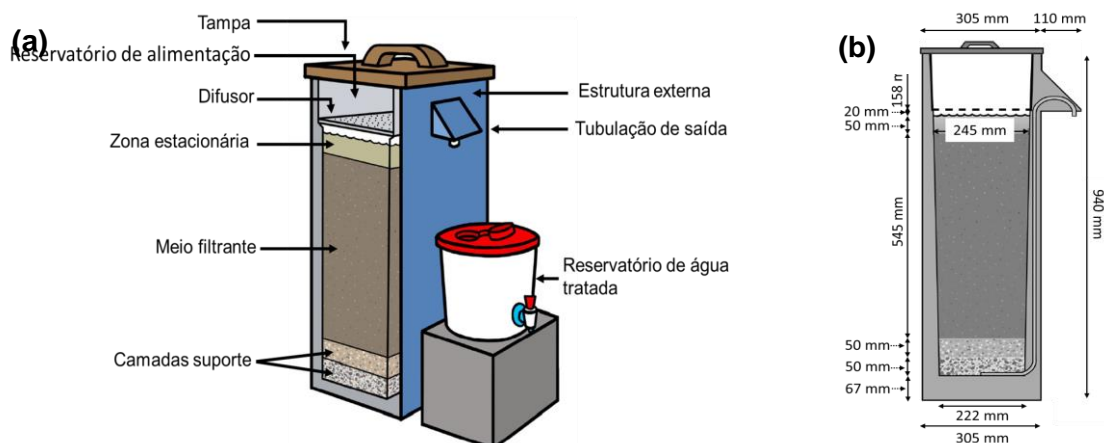
Naquela época, o BSF foi implementado em diversas comunidades, incluindo a República Dominicana [9,10], Camboja [11,12], Etiópia [13], Haiti [14], Quênia [15], Nepal [16,17] e Nicarágua [6]. Apesar da aceitação positiva por parte dos usuários, foram observados desafios construtivos e, principalmente, operacionais. As experiências em campo destacaram importância de práticas educacionais para auxiliar os usuários em relação à construção, operação e manutenção dos filtros domiciliares.

Em resposta a essas necessidades, a CAWST publicou, em 2009 e posteriormente em 2012, as versões 9.0 e 10.0 do manual "*Biosand Filter Manual: Design, Construction, Installation, Operation and Maintenance*". [4,18] Esses manuais incluíram práticas educacionais e novas recomendações para aprimorar a eficiência dos filtros, abordando desde o processo de construção até a operação e manutenção dos sistemas. Além disso, a versão 10.0 do manual apresentou o modelo de FLD consolidado que foi amplamente implementado em campo.

Conforme ilustrado na Fig. 1, o *Biosand Filter* possui uma estrutura externa retangular de concreto feita utilizando formas pré-moldadas, uma tampa e uma tubulação de saída. O

filtro é preenchido com materiais filtrantes, que incluem um leito com granulometria fina e camadas suporte com granulometrias mais grossas. Além disso, o modelo BSF é equipado com uma placa difusora que ajuda a dissipar a energia, evitando a perturbação do leito filtrante durante a alimentação e garantindo a eficiência do processo de filtração.

Figura 1 – Modelo de filtro lento domiciliar patenteado chamado de *Biosand Filter*, sendo (a) os seus componentes básicos e (b) as suas dimensões em milímetros



Fonte: Adaptado de [4].

Para facilitar a construção em locais remotos, o BSF utiliza materiais filtrantes locais, como areia e pedregulhos provenientes de solos, vales e taludes, em vez de opções comerciais com características granulométricas específicas. Como não é esperado que estes materiais estejam limpos e com tamanho dos grãos dentro do recomendado para a tecnologia, os usuários devem ser instruídos a lavar, secar e peneirar os materiais antes de usá-los nos filtros. Para etapa de peneiramento, utilizam-se aquelas de fácil acesso às comunidades, tais como as peneiras de fubá, arroz e café. Por fim, espera-se que a areia para o leito filtrante tenha tamanho efetivo (D_{10}) entre 0,15 e 0,20 mm e coeficiente de uniformidade (D_{10}/D_{60}) entre 1,5 e 2,5 mm, enquanto os pedregulhos devem ter dimensões entre 6 e 12 mm para a primeira camada e maiores que 12 mm para a segunda camada (Fig. 2). Por fim, a espessura recomendada para a camada filtrante de areia fina é de 54,5 cm e para as camadas suporte é de 10 cm. [4]

Figura 2 – Materiais filtrantes e seus respectivos tamanhos de grãos após o peneiramento



Fonte: Adaptado de [4].

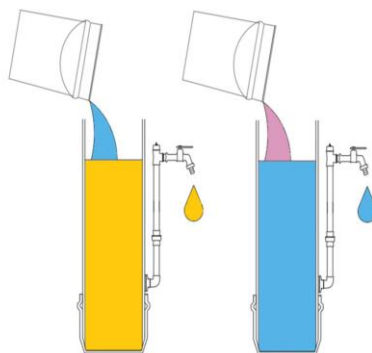
Outro ponto importante é o posicionamento da tubulação de saída do BSF, que deve ser mantida a 5 cm acima do leito filtrante para viabilizar a operação sob demanda. Essa configuração mantém um nível constante de água na zona estacionária, permitindo que o FLD permaneça sempre preenchido, mesmo nos intervalos entre as alimentações. Isso evita a formação de bolsões de ar, garantindo o funcionamento contínuo e eficiente do leito filtrante. Além disso, essa disposição favorece a formação de uma camada biológica aeróbica ativa na superfície do leito, fundamental para o bom desempenho do sistema.

Operação por demanda

A operação por demanda é um dos principais benefícios da filtração lenta domiciliar. Sua operação simples proporciona autonomia ao usuário, permitindo que ele utilize o filtro conforme sua necessidade dentro de sua própria residência, de maneira semelhante ao uso de filtros de cerâmica. A Fig. 3 ilustra essa dinâmica de operação intermitente.

É importante notar que quando o filtro recebe uma nova alimentação, a água adicionada desloca para a saída exatamente o mesmo volume que estava em repouso dentro do filtro desde a alimentação anterior. Esse volume de água deslocado é equivalente ao volume de vazios do filtro, que é o somatório dos volumes de água presentes nos materiais granulares e nas unidades livres. A determinação dos volumes nos materiais granulares é feita pela relação entre o volume ocupado por cada material e sua porosidade, enquanto as das unidades livres (*i.e.*, zona estacionária e tubulação de saída) são simplesmente equivalentes à geometria de cada um dos componentes.

Figura 3 – Dinâmica de operação intermitente de um Filtro Lento Domiciliar



Fonte: [19].

O modelo BSF foi projetado com um reservatório de alimentação que comporta até 12 litros de água por batelada, que é o volume de vazios exato da unidade. [4] Mesmo com essa capacidade definida, o usuário pode cometer erros na alimentação. Por exemplo, se volume de água inserido for menor do que a capacidade total do filtro, a água permanecerá no FLD por um período mais longo, o que pode melhorar a eficiência do tratamento, mas reduzir a produção diária de água filtrada. Por outro lado, ao adicionar 12 litros de água e, em seguida, um pouco mais para completar, o excesso pode passar diretamente pelo filtro, resultando em um tratamento limitado apenas ao mecanismo físico de filtração.

Nos primeiros dias de operação do design BSF, é esperado que o volume de alimentação de 12 L proporcione uma vazão máxima de filtração de 400 mL por minuto e uma taxa máxima de filtração de 9,6 m³/m².dia. [4] Contudo, é importante ressaltar que essa taxa de filtração não se mantém constante ao longo da alimentação, pois a estratégia de alimentação em batelada submete o filtro a variações temporais de carga hidráulica, resultando assim em uma taxa de filtração declinante. Isto é, inicialmente, ocorre uma vazão máxima após alimentação, seguido por declínio gradual até atingir zero, quando o nível de água estiver na mesma altura da tubulação de saída.

De forma geral, esta tecnologia pode produzir até 80 litros de água por dia, dependendo da demanda da residência. [4] Para atingir essa produção, o filtro deve ser alimentado diversas vezes respeitando o volume igual ou inferior ao volume de vazios. No entanto, ele não pode ser alimentado seguidamente, é preciso esperar o período de pausa da unidade. Esse período de pausa, dado pelo período entre o momento que a água para de escoar e a nova alimentação, proporciona mais contato da água com os poros da areia, potencializando as ações físico-químicas e biológicas de purificação. Por isso, é recomendado que este período de pausa seja de pelo menos 1 hora, porém sem ultrapassar 48 horas para que não ocorra falta de nutrientes e oxigenação à camada biológica. [4]

Além disso, ao longo dos dias de operação, é esperado que o leito filtrante retenha partículas e patógenos. Essa retenção diminui os vazios intergranulares, aumentando a perda de carga, diminuindo o período de pausa e a vazão de saída do filtro. Quando esta redução de vazão estiver afetando a rotina da residência, ou seja, quando os usuários passam a esperar muito tempo para coletar a água filtrada, é preciso executar algumas atividades de manutenção da unidade. Além de limpezas superficiais com um pano, o usuário precisa descompactar e revolver os primeiros centímetros do leito filtrante. Esse material revolvido, que contém uma alta carga microbiológica, é coletado para adição de uma parcela limpa de areia. Devido ao risco microbiológico, essa atividade deve ser feita com extremo cuidado, usando luvas de proteção, e o material deve ser descontaminado antes do descarte.

Mecanismos de tratamento

Assim como os filtros lentos convencionais, a tecnologia de filtros lentos domiciliares também utiliza mecanismos físico-químicos e biológicos para tratar águas. As ações físico-químicas ocorrem ao longo de todo o leito filtrante, enquanto as ações biológicas concentram-se predominantemente na camada superior. Isso se deve à granulometria fina das areias usadas no leito dos filtros lentos e seus diâmetros não tão uniformes quanto os das areias utilizadas em filtros rápidos. Essa característica promove uma estratificação do leito, favorecendo a filtração com uma ação superfície em vez de uma ação de profundidade em filtros lentos.

Nos primeiros dias de operação dos FLDs, predominam-se apenas os mecanismos físico-químicos de purificação, que incluem tensão superficial, sedimentação, forças inerciais e centrífugas, difusão e atração eletrostática. [20] Com o tempo, partículas, nutrientes e microrganismos são aderidos e depositados nos primeiros centímetros do leito, promovendo o desenvolvimento de uma camada biológica conhecida como *Schmutzdecke* (do alemão, "cobertura suja").

Schmutzdecke é uma camada gelatinosa, predominantemente aeróbica, localizada nos primeiros 5 cm do leito filtrante, composta por uma diversidade de microrganismos, tais como bactérias, algas, protozoários, rotíferos, nematódeos, fungos, entre outros. [21,22] Evidentemente, quanto maior a diversidade microbiana, mais intensas são as atividades metabólicas de oxidação e absorção de matéria orgânica e inorgânica, além da maior degradação de patógenos por predação, competição e morte natural. Por isso, o amadurecimento da camada biológica é uma medida crucial para avaliar a eficiência do FLD.

Em média, essa camada atinge o amadurecimento pleno após 30 dias de operação [4], embora esse período possa se estender, dependendo de fatores como a qualidade da água de entrada, frequência de alimentação, taxa de filtração, temperatura, entre outros. No tratamento de águas superficiais, que geralmente apresentam maior contaminação orgânica, a camada biológica tende a ser mais densa e diversa, amadurecendo mais rapidamente. Já no tratamento de águas subterrâneas, devido à menor contaminação, a camada formada é geralmente menos diversa e seu amadurecimento mais lento. Nesse estágio de maturação, o filtro atinge sua máxima eficiência ao combinar os processos físico-químicos e biológicos na purificação da água.

Resultados e Discussões

Desde o desenvolvimento do modelo patenteado BSF no início dos anos 90, o filtro lento domiciliar tem sido continuamente modificado e adaptado para aprimorar seu desempenho, facilitar sua operação e aumentar a aceitação entre os usuários. Como resultado, diversos modelos de filtros estão disponíveis atualmente. Nesta seção, serão abordadas estas outras experiências construtivas e operacionais de filtros lentos domiciliares com o objetivo de destacar diferentes tendências de aplicação dessa tecnologia. Além disso, serão descritas as principais eficiências alcançadas e a qualidade da água produzida por esses filtros, bem como estratégias para potencializar seus resultados. No âmbito da Escola de Engenharia de São Carlos, serão apresentados os principais avanços e contribuições científicas desde 2012. Por fim, serão discutidas as principais lacunas e tendências futuras de aplicação dessa solução.

Outras experiências construtivas e operacionais

A Fig. 4 apresenta diferentes exemplos de filtros lentos domiciliares disponíveis, para além do BSF, evidenciando a ampla gama de possibilidades para estudo e implementação desta tecnologia. Essas variações incluem diferenças (a) nos materiais de construção, (b) nos tamanhos das unidades, (c) nas profundidades e composições dos meios filtrantes, bem como (d) nos regimes de operação.

Os filtros lentos domiciliares são em sua maioria construídos em estruturas de concreto ou plástico. No entanto, em escala laboratorial, podem ser fabricados em acrílico, o que facilita a visualização de fenômenos investigativos [24,31] e, apesar de ser uma opção menos prática e com desvantagens térmicas, também existem registros de construção em ferro galvanizado. [23] Os filtros de concreto são os mais amplamente utilizados devido à sua facilidade de construção em larga escala. No entanto, o concreto, além de limitar a portabilidade, é suscetível a rachaduras e vazamentos quando exposto a distúrbios comuns em ambientes residenciais. Por outro lado, os filtros de plástico, que incluem sistemas como o pré-moldado Hydraid® e filtros feitos de materiais como PVC, PVC-

Defopo ou baldes comuns, são mais leves, portáteis e fáceis de manusear. Porém, podem exigir componentes de difícil acesso em comunidades vulneráveis e isoladas. Assim, a escolha do material para a construção de FLDs deve considerar fatores socioculturais e econômicos da comunidade beneficiária, garantindo que a solução seja adequada às suas necessidades e realidades.

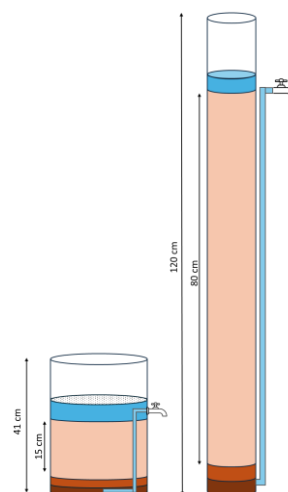
Os FLDs costumam ter alturas em torno de 1 metro, embora estudos relatem variações de 40 cm a 1,20 m [26,27], dependendo principalmente da espessura do leito filtrante e das dimensões da estrutura adotada. Evidentemente, filtros com dimensões menores são mais portáteis, enquanto os maiores tendem a ser mais eficientes. Isso acontece porque, embora a ação predominante do filtro lento ocorra na superfície, também há influência de efeitos em profundidade. [32] Assim, a espessura do leito filtrante tem uma importância para a garantia da segurança da água produzida e o recomendado é que seja superior a 40 cm.

Figura 4 – Exemplos de Filtros Lentos Domiciliares com diferentes designs

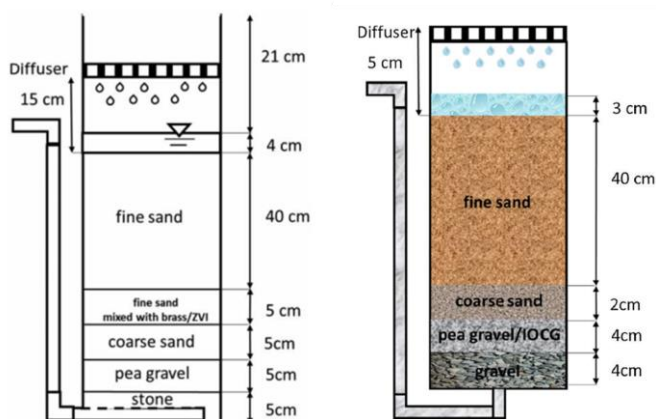
a) Materiais [4,23-26]



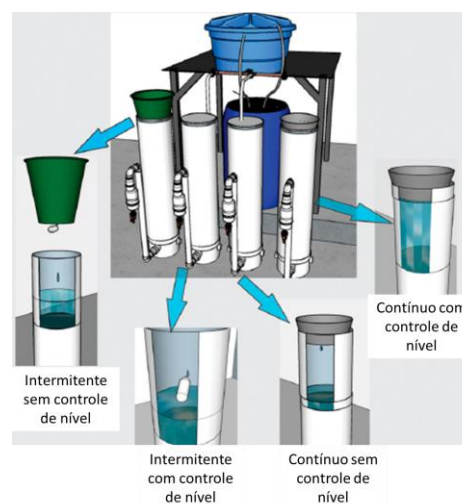
b) Tamanhos [26,27]



c) Profundidade e composição dos meios filtrantes [28,29]



d) Regimes de operação [30]



Fonte: Adaptado de [4,23-30].

A composição dos leitos filtrantes também pode variar para além da tradicional areia fina recomendada. Estudos vêm investigando a possibilidade de incremento desse leito com materiais adsorventes, como carvão ativado [33] e pedra-pomes [27], e materiais metálicos e nanoparticulados com propriedades antimicrobianas para potencializar a inativação de microrganismos [28,29]. No entanto, esses componentes adicionais são geralmente posicionados nas camadas inferiores do leito filtrante para evitar interferências no desenvolvimento da camada biológica na parte superior.

Além do regime intermitente, caracterizado pela operação sob demanda, o FLD também pode funcionar de forma contínua, seja por bombeamento [32] ou por gravidade [30], como em sistemas com reservatórios elevados. A principal diferença entre os regimes de operação está nas taxas de filtração: filtros intermitentes operam com taxas iniciais mais altas, que declinam com o tempo, enquanto filtros contínuos mantêm taxas de filtração mais baixas e constantes. Como princípio básico da filtração, taxas menores geralmente resultam em maior eficiência de remoção por mecanismos físico-químicos e microbiológicos. Dessa forma, filtros operados continuamente tendem a ser mais eficientes, embora possam exigir energia elétrica ou mais espaço, além de serem operacionalmente mais complexos. [31] Para mitigar as desvantagens dos filtros intermitentes, é possível utilizar dispositivos de controle de nível que reduzam a taxa máxima de filtração. [30] No caso dos filtros contínuos, o foco é desenvolver soluções que dispensem ajustes frequentes, permitindo a manutenção automática da taxa de filtração constante, enquanto a água passa continuamente pelo sistema. [34]

Segurança da água produzida pelos Filtros Lentos Domiciliares

Como mencionado, as características construtivas e operacionais são fatores que afetam o funcionamento e o desempenho dos filtros lentos domiciliares e, como há relatos de investigações com diferentes condições, os valores de remoção na literatura também são variados. Para facilitar a compreensão, em um estudo de revisão, Freitas e colaboradores [35] reuniram as principais eficiências dos filtros lentos domiciliares para o tratamento de água (Tabela 1).

Tabela 1 – Eficiência de remoção em filtros lentos domiciliares para o tratamento de água

Parâmetros		Eficiência de tratamento		
	Turbidez	75% – >90%		
	Matéria orgânica	<10% – 30%		
Físico-químicos	Metais	Mercúrio	>90%	
		Arsênio	<75%	
		Ferro	<50% – 90%	
		Fosfato	<50% – 90%	
		Fluoreto	<50% – 99%	
		Cálcio	<50% – 90%	
		Magnésio	<55%	
		Compostos nitrogenados	Nitrato	<53%
			Herbicida/pesticida	<50%

	Poluentes emergentes	Fármacos	70% – 99%
		Disruptores endócrinos	<20%
Microbiológicos	Bactéria	<i>Escherichia coli</i>	0.26log – >5log
		Coliformes totais	0.33log – 5.50log
	Vírus	MS2	0.38log – >4log
	Protozoários	Oocistos de <i>Cryptosporidium</i>	1.20log – 4.80log
		Cistos de <i>Giardia</i>	1.15log – >5log
	Cianobactérias	<i>Microcystis aeruginosa</i>	1.99log – 2.40log

Fonte: Adaptado de [35].

De forma geral, filtros lentos domiciliares são soluções eficientes para a redução de turbidez devido à composição de seu leito filtrante e mecanismos de tratamento atuantes. [35] Formas de potencialização da eficiência na remoção de turbidez incluem a aplicação de menores taxas de filtração, volumes de tratamento reduzidos, maiores períodos de pausa e tempos de operação mais longos. Esse último fator é especialmente relevante, pois o amadurecimento da camada biológica diminui os vazios intergranulares, potencializando ainda mais a retenção de partículas e a redução de turbidez.

Por outro lado, os FLDs apresentam limitações na remoção de partículas dissolvidas, incluindo as relacionadas à matéria orgânica medidas pelo carbono orgânico, cor verdadeira e absorvância a 254 nm. [35] Isso ocorre, em grande parte, porque não há adição de compostos químicos no filtro ou em etapas anteriores, o que impede a modificação das cargas eletrostáticas que poderiam aumentar a eficiência de remoção dessas substâncias. Diante disto, as opções para aumentar a remoção de matéria orgânica em FLDs, apesar de limitadas, focam principalmente em modificações nas camadas do leito filtrante, como, por exemplo, a adição de compostos químicos de ação coagulante como o óxido de ferro. [36]

Apesar das faixas relatadas na Tabela 1, ainda há poucos estudos e um falta de consenso quanto à capacidade dos filtros lentos domiciliares em remover metais, compostos nitrogenados e poluentes emergentes. [35] O que a literatura vem demonstrando é uma eficiência limitada para remoção de metais, compostos nitrogenados, pesticidas/herbicidas e disruptores endócrinos, especialmente nos modelos convencionais sem alterações no leito filtrante de areia. A inclusão de novos componentes no leito filtrante, como camadas de tijolos triturados, óxido de ferro e pregos na areia ou no difusor, além do uso de fibras comerciais oxidadas, são algumas das modificações propostas no design dos FLDs para melhorar essas eficiências. [35] Curiosamente, mesmo no modelo convencional, os FLDs apresentaram um potencial em remover produtos farmacêuticos e de cuidados pessoais, como paracetamol, diclofenaco, naproxeno, ibuprofeno, metilparabeno e benzofenona-3. [37]

A faixa de redução microbiológica também varia consideravelmente dadas as condições multivariadas de construção e operação dos FLDs. No entanto, na maioria dos casos, a remoção de bactérias situa-se entre 1 e 2 logs. [35] Em resumo, a eficiência de remoção de bactérias é maximizada em FLDs com leitos filtrantes de granulometria fina, acoplados com uma manta no topo para suporte ao biofilme, aplicadas a taxa de filtração

baixa, volumes de tratamento reduzidos, maiores períodos de pausa, tempos prolongados de operação, e com controle adequado da temperatura. Por outro lado, longos períodos sem alimentação, como quando a família viaja e deixa de usar o filtro, ou após a manutenção, quando ocorre a remoção ou distúrbio da camada biológica, tendem a reduzir a capacidade de tratamento microbiológico. Portanto, os parâmetros mais relevantes para otimizar a remoção de bactérias estão diretamente relacionados ao desenvolvimento e manutenção da camada biológica.

A remoção de vírus segue a mesma lógica das bactérias, mas, por serem organismos menores, tendem a transpassar o leito filtrante com maior facilidade. Assim, as condições que favorecem sua remoção estão ligadas ao tratamento de águas com alta concentração de cátions, como Ca^{2+} e Mg^{2+} [38], além de FLDs com leitos mais espessos e com a adição de materiais que alteram sua capacidade eletrostática, como camadas de ferro ou zeólita. [26,39] Por fim, embora haja menos informações sobre a retenção de protozoários e cianobactérias, estudos indicam que os cistos de *Giardia* são mais facilmente retidos do que os oocistos de *Cryptosporidium*, devido ao seu maior tamanho. [35] Além disso, há indícios de que os FLDs têm o potencial de reter cianobactérias e reduzir a presença de cianotoxinas no leito filtrante. [40]

Avanços e Contribuições da Escola de Engenharia de São Carlos

A pesquisa sobre o filtro lento domiciliar na EESC teve início pelo grupo da Prof. Tit. Lyda Patricia Sabogal Paz logo após a publicação do manual do CAWST em 2012. Os primeiros estudos, desenvolvidos em iniciações científicas, investigaram (i) o potencial do uso de FLD em países em desenvolvimento [41], (ii) os desafios operacionais e construtivos de um FLD baseado no modelo do CAWST utilizando estrutura de PVC [42] e (iii) a seleção da areia fina de construção civil como material mais adequado para o leito filtrante do FLD [43].

Diante dos resultados promissores, as pesquisas com FLDs se intensificaram, abrangendo estudos de pós-graduação. Nesses trabalhos, os filtros foram construídos em PVC com areia fina como meio filtrante, acoplados ou não com dispositivos para controle de nível e, além disso, introduziu-se o uso de mantas não tecidas para servir como suporte ao biofilme e facilitar o processo de manutenção. Os FLDs foram operados tanto em regime intermitente, conforme o modelo BSF, quanto em regime contínuo, com alimentação constante por reservatório elevado. Comparações desses modelos foram realizadas para tratamento de águas simuladas, tais como (i) água com baixa turbidez [30], (ii) água com alta turbidez e risco microbiológico [44] e (iii) água contaminada por cianobactérias [40]. Esses estudos demonstraram o potencial da tecnologia e destacaram a eficiência em taxas reduzidas, seja pela operação contínua ou pelo uso de dispositivos de controle de nível. Com base nesses testes com águas simuladas, o design dos FLDs foi otimizado, substituindo-se a estrutura externa por PVC-Defofo, um material atóxico usado no abastecimento de água. Os FLDs foram então avaliados em operação intermitente e contínua para tratamento de matrizes naturais, como águas subterrâneas [45] e águas superficiais [46-51]. Esses estudos aprofundaram a compreensão das eficiências na remoção de partículas e microrganismos (bactérias e protozoários). Também se investigou a facilidade de construção e operação dos sistemas, as durações das carreiras de filtração, as frequências de manutenção e os fatores que afetam e prejudicam as eficiências.

Pesquisas pontuais avaliaram aspectos específicos do FLD, como: (i) análise da camada biológica ao longo do leito filtrante por microssores [49], (ii) características e composições das camadas biológicas [52], (iii) técnicas para o amadurecimento da camada biológica [53], (iv) impacto da espessura do leito no FLD contínuo [46, 54], (v) efeito do dispositivo de controle de nível no FLD intermitente [50], (vi) eficiência na redução de bacteriófagos indicadores de vírus [55], (vii) remoção do poluente emergente Bisfenol-A [31], (viii) fluidodinâmica computacional para estudar o escoamento no filtro [48] e (ix) formas de otimização do FLD contínuo para facilitar sua operação [34]. O FLD também foi investigado como uma etapa intermediária em sistemas de múltiplas barreiras, visando reduzir sobrecargas na entrada e minimizar riscos microbiológicos na saída. Foram testados pré-tratamentos com filtração dinâmica [54] e coagulação com produtos naturais extraídos de cactos [44], além de pós-tratamentos com cloração [45,50] e radiação ultravioleta [56,57].

Até o momento, o grupo de pesquisa desenvolveu dez iniciações científicas, dois trabalhos de conclusão de curso, cinco dissertações de mestrado, seis teses de doutorado e sete projetos de pós-doutorado. Entre 2018 e 2024, foram publicados 17 artigos em periódicos de alto impacto, incluindo um artigo de revisão [35], totalizando mais de 410 citações até outubro de 2024. Após doze anos de pesquisas em FLD, o grupo da EESC é considerado o maior centro de estudos sobre essa tecnologia no mundo, com base no número e impacto das publicações.

Tendências futuras

Apesar dos mais de trinta anos de pesquisa e várias experiências bem-sucedidas de implementação, os filtros lentos de areia domésticos (FLD) ainda apresentam oportunidades para aprimoramento e aumento de eficiência e produção diária. Aspectos como a otimização da composição do leito filtrante para tratamento de poluentes específicos, o desenvolvimento de métodos eficazes para acelerar a maturação da camada biológica, além de melhorias na aceitação e usabilidade dos filtros — especialmente nos modelos de fluxo contínuo — permanecem como desafios que exigem mais investigação. Ao explorar melhor as potencialidades e mitigar as limitações desses filtros, será possível identificar os contextos em que eles representam uma solução viável para comunidades vulneráveis.

Conclusões

O filtro lento domiciliar se destaca como uma tecnologia descentralizada eficaz, com diversas experiências bem-sucedidas de implementação em populações isoladas e vulneráveis ao redor do mundo. No entanto, devido à diversidade de contextos socioculturais das comunidades e às variáveis em seus critérios de aceitação de tecnologias, cada implementação exige adaptações específicas, não havendo um modelo único que seja eficiente e aplicável a todos os cenários. Diante disto, este capítulo de livro buscou apresentar um panorama geral dos FLDs, abordando os aspectos fundamentais de sua construção e funcionamento, além de discutir adaptações no modelo patenteado, voltadas para aumentar a usabilidade e a eficiência no tratamento de contaminantes específicos. Embora os progressos sejam significativos, ainda existem desafios relacionados à tecnologia que justificam a continuidade das pesquisas nesse campo, as quais vem sendo, desde 2012, continuamente estudadas pelo grupo de pesquisa liderado

pela Prof. Tit. Lyda Patricia Sabogal Paz, da EESC, atualmente reconhecido como o principal centro de pesquisa mundial sobre essa tecnologia.

Agradecimentos

As autoras agradecem à The Royal Society (ICA\R1\201373 - International Collaboration Awards 2020) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (números de concessão: 308070/2021-6 e 442074/2023-9).

Referências

1. United Nations. *Summary Progress Update 2021: SDG 6 – water and sanitation for all: July 2021*, UN-Water, Geneva, 2021.
2. World Health Organization. *Diarrhoeal disease*, 2024. <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/diarrhoeal-disease>.
3. J. K. Mwabi *et al.* Household water treatment systems: a solution to the production of safe drinking water by the low-income communities of Southern Africa. *Physics and Chemistry of the Earth* 2011, 36, 1120. <https://doi.org/10.1016/j.pce.2011.07.078>.
4. Centre for Affordable Water and Sanitation Technology, *Biosand filter construction manual*, CAWST, Calgary, 2012.
5. D. Lee, *Report completed for an undergraduate course*, University of Calgary, 1991.
6. D. H. Manz; B. Buzunis; C. Morales, *Final Report*, University of Calgary, 1993
7. B. J. Buzunis, Ph.D. Thesis, The University of Calgary, 1995.
8. G. Palmateer *et al.* Toxicant and parasite challenge of Manz intermittent slow sand filter. *Environmental Toxicology*, 1999, 14, 217. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1522-7278\(199905\)14:2<217::AID-TOX2>3.0.CO;2-L](https://doi.org/10.1002/(SICI)1522-7278(199905)14:2<217::AID-TOX2>3.0.CO;2-L).
9. C. E. Stauber *et al.* Characterisation of the biosand filter for *E. coli* reductions from household drinking water under controlled laboratory and field use conditions. *Water Science & Technology*, 2006, 54, 1. <https://doi.org/10.2166/wst.2006.440>.
10. C. E. Stauber *et al.* A randomized controlled trial of the concrete biosand filter and its impact on diarrheal disease in Bonao, Dominican Republic. *The American Journal of Tropical Medicine and Hygiene*, 2009, 80, 286. <https://doi.org/10.4269/ajtmh.2009.80.286>.
11. K. Liang; M. Sobsey; C. E. Stauber, *Water and Sanitation Program Field Note*, 2010
12. H. M. Murphy; E. A. McBean; K. Farahbakhsh. Nitrification, denitrification and ammonification in point-of-use biosand filters in rural Cambodia. *Journal of Water and Health*, 2010, 8, 803. <https://doi.org/10.2166/wh.2010.163>.
13. P. Earwaker; J. Webster. Evaluation of the longterm sustainability of biosand filters in rural Ethiopia in Proceedings of 34th WEDC International Conference, Addis Ababa, 2009, 1.
14. W. F. Duke *et al.* Rural and remote health 2006, 6, 570. <https://doi/10.3316/informit.543225662688015>.
15. A. Mol. The success of household sand filtration. *Waterlines* 2001, 20, 1.
16. J. Hurd *et al.*, Master Thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2001.
17. T. L. Lee, Master Thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2001.
18. Centre for Affordable Water and Sanitation Technology, *Biosand filter manual: design, construction, installation, operation and maintenance*, CAWST, Calgary, 2009.
19. U. C. Terin, Tese de doutorado, Universidade de São Paulo, 2021.

20. L. Huisman; W. E. Wood, *Slow Sand Filtration*, World Health Organization, Geneva, 1974.
21. P. Ranjan; M. Prem. Schmutzdecke - A Filtration Layer of Slow Sand Filter. *International Journal of Current Microbiology and Applied Sciences* 2018, 7, 637 <https://doi.org/10.20546/ijcmas.2018.707.077>.
22. B. L. S. Freitas, Tese de doutorado, Universidade de São Paulo, 2021.
23. A. W. Smith. Sandstorm: a biosand filter designed for small-scale enterprises in *Proceedings of the WEDC International Conference*, Nakuru, 2013, 1.
24. M. Elliott *et al.* Investigation of *E. coli* and virus reductions using replicate, bench-scale biosand filter columns and two filter media. *International Journal of Environmental Research and Public Health* 2015, 12, 10276. <https://doi.org/10.3390/ijerph120910276>.
25. C. E. Stauber *et al.* Evaluation of the Impact of the Plastic BioSand Filter on Health and Drinking Water Quality in Rural Tamale, Ghana. *International Journal of Environmental Research and Public Health* 2012, 9, 3806 <https://doi.org/10.3390/ijerph9113806>.
26. F. E. Adeyemo; I. Kamika; M. N. B. Momba. Comparing the effectiveness of five low-cost home water treatment devices for Cryptosporidium, Giardia and somatic coliphages removal from water sources. *Desalination and Water Treatment* 2015, 56, 2351. <https://doi.org/10.1080/19443994.2014.960457>.
27. K. Ghebremichael *et al.* Comparative treatment performance and hydraulic characteristics of pumice and sand biofilters for point-of-use water treatment. *Journal of Water Supply: Research and Technology – Aqua* 2012, 61, 201. <https://doi.org/10.2166/aqua.2012.100>.
28. B. S. Yildiz. Performance assessment of modified biosand filter with an extra disinfection layer. *Journal of Water Supply: Research and Technology – Aqua*, 2016, 65, 266. <https://doi.org/10.2166/aqua.2016.103>.
29. B. Sizerici *et al.* Modified biosand filters enriched with iron oxide coated gravel to remove chemical, organic and bacteriological contaminants. *Journal of Water Process Engineering*, 2019, 27, 110. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2018.11.015>.
30. P. M. F. Maciel; L. P. Sabogal-Paz. Household slow sand filters with and without water level control: continuous and intermittent flow efficiencies. *Environmental Technology*, 2020, 41, 944. <https://doi.org/10.1080/09593330.2018.1515988>.
31. L.P. Sabogal-Paz *et al.* Household slow sand filters in intermittent and continuous flows to treat water containing low mineral ion concentrations and Bisphenol A. *Science of the Total Environment* 2020, 702, 135078. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.135078>.
32. C. Young-Rojanschi, C. Madramootoo. Intermittent versus continuous operation of biosand filters. *Water Research* 2014, 49, 1. <http://dx.doi.org/10.1016/j.watres.2013.11.011>.
33. S. A. Mirbagheri; S. Malekmohamadi; M. Ehteshami. Designing activated carbon and zeolite amended biosand filters: optimization using response surface methodology. *Desalination and Water Treatment* 2017, 93, 48. <https://doi.org/10.5004/dwt.2017.21458>.
34. E. J. S. Soares, Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, 2024. <https://doi.org/10.11606/D.18.2024.tde-05062024-115123>
35. B. L. S. Freitas *et al.* A critical overview of household slow sand filters for water treatment. *Water Research* 2022, 208, 117870 <https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117870>.
36. M. Maeng; E. Choi; S. Dockko. Reduction of organic matter in drinking water using a hybrid system combined with a rock biofilter and membrane in developing

countries. *International Biodeterioration & Biodegradation* 2015, 102, 223 <https://doi.org/10.1016/j.ibiod.2015.02.005>.

37. C. M. E. Pompei *et al.* Influence of PPCPs on the performance of intermittently operated slow sand filters for household water purification. *Science of The Total Environment* 2017, 581-582, 174. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.12.091>.

38. H. Wang; M. Li; K. Brockman; T.H. Nguyen *Environmental Science: Water Research & Technology*, 2016, 2, 483-491 <https://doi.org/10.1039/C5EW00297D>.

39. I. Bradley *et al.* Iron oxide amended biosand filters for virus removal. *Water Research* 2011, 45, 4501. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2011.05.045>.

40. U. C. Terin; L. P. Sabogal-Paz. *Microcystis aeruginosa* and microcystin-LR removal by household slow sand filters operating in continuous and intermittent flows. *Water Research* 2019, 150, 29. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2018.11.055>.

41. T. K. Carvalho; L.P. Sabogal-Paz. Experiências do uso de filtração lenta domiciliar em países em desenvolvimento in *Proceedings of 21° Simpósio Internacional de Iniciação Científica da USP, São Carlos*, 2013, n. 534.

42. E. V. Magalhães; L.P. Sabogal-Paz. Filtração lenta domiciliar como alternativa de tratamento de água para comunidades isoladas do Brasil: desafios na construção in *Proceedings of 21° Simpósio Internacional de Iniciação Científica da USP, São Carlos*, 2013, n. 724.

43. K. G. Calixto; A. Bogni; L. P. Saboga-Paz. Seleção do meio filtrante de biofiltros em areia e avaliação do modo de operação in *Proceedings of 22° Simpósio Internacional de Iniciação Científica da USP, São Carlos*, 2014, n. 2608.

44. B. L. Souza Freitas; L. P. Sabogal-Paz. Pretreatment using *Opuntia cochenillifera* followed by household slow sand filters: technological alternatives for supplying isolated communities. *Environmental Technology* 2020, 41, 2783 <https://doi.org/10.1080/09593330.2019.1582700>.

45. F. C. Andreoli; L. P. Sabogal-Paz. Household slow sand filter to treat groundwater with microbiological risks in rural communities. *Water Research* 2020, 186, 116352. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116352>.

46. B. L. S. Freitas *et al.* Filter media depth and its effect on the efficiency of Household Slow Sand Filter in continuous flow. *Journal of Environmental Management* 2021, 288, 112412. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2021.112412>.

47. N. M. N. Fava *et al.* Household slow sand filters in continuous and intermittent flows and their efficiency in microorganism's removal from river water. *Environmental Technology* 2022, 44, 1583. <https://doi.org/10.1080/09593330.2020.1841834>.

48. L. Y. C. P. Hojo *et al.* Household slow sand filters operating in continuous and intermittent flows: Computational fluid dynamics simulation and validation by tracer experiments. *Chemical Engineering Science* 2022, 247, 117058 <https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.117058>.

49. A. W. Lamon *et al.* Household slow sand filter efficiency with schmutzdecke evaluation by microsensors. *Environmental Technology* 2022, 43, 4042. <https://doi.org/10.1080/09593330.2021.1939795>.

50. U. C. Terin *et al.* Evaluation of a multi-barrier household system as an alternative to surface water treatment with microbiological risks. *Environmental Technology* 2022, 43, 3401. <https://doi.org/10.1080/09593330.2021.1921856>.

51. B. L. S. Freitas; U. C. Terin; L. P. Sabogal-Paz. Household slow sand filters in intermittent and continuous flow for a long-term surface water treatment: Efficiencies assessment and operational challenges. *Journal of Environmental Chemical Engineering* 2023, 11, 110090. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2023.110090>.

52. H. Lubarsky *et al.* Biological layer in household slow sand filters: characterization and evaluation of the impact on systems efficiency. *Water* 2022, 14, 1078. <https://doi.org/10.3390/w14071078>.
53. K. G. Calixto *et al.* Ripening of household slow sand filter by adding fish food. *Journal of Water, Sanitation and Hygiene for Development* 2020, 10, 76. <https://doi.org/10.2166/washdev.2020.143>.
54. R. C. Medeiros *et al.* Drinking water treatment by multistage filtration on a household scale: Efficiency and challenges. *Water Research* 2020, 178, 115816 <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.115816>.
55. M. Oliveira, Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, 2021. <https://doi.org/10.11606/D.18.2021.tde-06082021-184244>.
56. L. A. T. Garcia *et al.* Efficiency of a multi-barrier household system for surface water treatment combining a household slow sand filter to a Mesita Azul® ultraviolet disinfection device. *Journal of Environmental Management* 2022, 321, 115948 <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2022.115948>.
57. M. G. Melo Neto *et al.* Rainwater treatment system efficiency: Household slow sand filter combined with UVC lamp disinfection. *Journal of Water Process Engineering* 2024, 58, 104785. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.104785>.



CAPÍTULO 12

PERÓXIDO DE HIDROGÊNIO NO TRATAMENTO DE ÁGUA E DESINFECÇÃO EM NÍVEL DOMICILIAR: UM PANORAMA

Kamila Jessie Sammarro Silva^{1*}, Lyda Patricia Sabogal-Paz¹

1 – Departamento de Engenharia Hidráulica e Saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, SP, Brasil

**kamilajessie@gmail.com*

Resumo – Deficiências de infraestrutura de abastecimento e tratamento de água e instalações sanitárias precárias ampliam a transmissão de doenças de veiculação hídrica. Apesar dos avanços, ainda há uma parcela considerável da população mundial que não possui abastecimento público de água potável, realizando coleta e tratamento por conta própria e muitas vezes dependendo de mananciais contaminados. Tecnologias em nível domiciliar podem reduzir desigualdades nesse âmbito, atuando diretamente para o alcance do Objetivo de Desenvolvimento Sustentável 6 das Nações Unidas (ODS 6), que busca água potável para todos até 2030. Dentre essas técnicas, soluções simplificadas como fervura e cloração têm destaque. Entretanto, apresentam limitações relacionadas à capacidade de produção, e, no caso da cloração, riscos associados à formação de subprodutos. Nessa linha, buscam-se tratamentos alternativos, especialmente considerando desinfetantes que atuem contra diferentes grupos de patógenos, amigáveis ambientalmente e amplamente disponíveis. A desinfecção por peróxido de hidrogênio (H_2O_2) tem sido aplicada como uma abordagem eficaz para a inativação de microrganismos, com certa predominância para uso em superfícies e ambientes clínicos. No entanto, soluções de tratamento de água centradas em H_2O_2 têm sido pouco exploradas. Este capítulo aborda o uso de H_2O_2 no tratamento de água e potenciais e desafios no ponto de uso.

Palavras-chave: *Ponto-de-uso. Peroxidação. Desinfecção. Tratamento descentralizado*

Financiamentos: The Royal Society (ICA\R1\201373 - International Collaboration Awards 2020) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq (processos n° 308070/2021-6 e 442074/2023-9).

Introdução e contexto

Acesso à água potável é uma questão crítica para a saúde pública e bem-estar humano [1]. Entretanto, crises hídricas e dificuldades de acesso à água de qualidade constituem desafios em muitas partes do mundo, especialmente em locais remotos e para populações vulneráveis [2]. Instalações sanitárias precárias e deficiências na infraestrutura de abastecimento e tratamento de água ampliam o cenário de transmissão de doenças veiculadas pela água, como a cólera, a hepatite A, disenteria, giardíase, dentre outras [3], o que torna imperativo medidas para a garantia de fornecimento de água segura para todos. É com esse intuito que o Objetivo do Desenvolvimento Sustentável 6 (ODS 6) das Nações Unidas propõe uma série de indicadores e metas para o alcance de água potável para todos até 2030. Entretanto, apesar dos progressos nessa direção, a desigualdade no acesso ainda existe em várias partes do mundo [4], principalmente em conjunturas em que a infraestrutura de abastecimento centralizada é dificultada. Nessas situações, em

especial, sistemas descentralizados (no ponto de entrada e/ou no ponto de uso) podem desempenhar um papel importante no fornecimento de água para consumo e redução de contaminações [5].

Dentre as etapas que podem constituir um sistema de tratamento de água, a desinfecção é particularmente importante, quer o sistema seja em larga ou pequena escala. Essa etapa consiste em remover e inativar patógenos, evitando a propagação de doenças transmitidas pela água, constituindo-se, portanto, de uma medida direta de saúde pública [6]. Os tratamentos centralizados e mais convencionais em geral utilizam oxidantes como cloro livre, dióxido de cloro, cloraminas e ozônio [7,8]. Soluções descentralizadas de tratamento como um todo, por sua vez, são aquelas realizadas no local de consumo, visando redução da quantidade de patógenos presentes na água e podem se basear em tecnologias como coagulação, floculação, filtração (lenta, em membrana etc.), ou desinfecção *per se* [9].

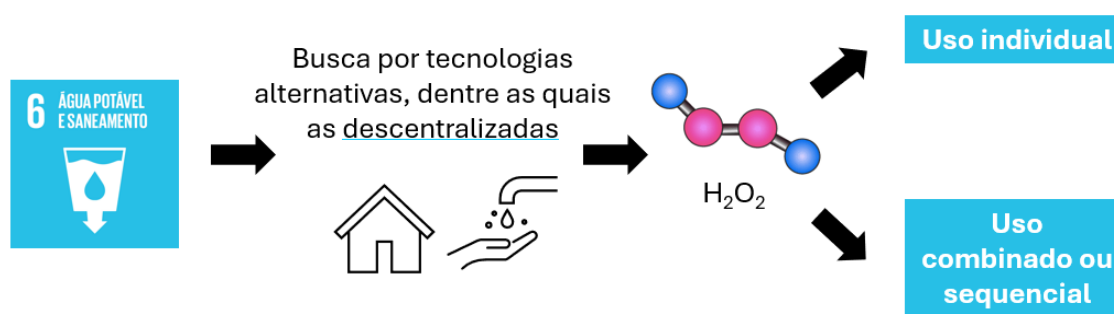
No ponto de uso, as principais técnicas usadas para a desinfecção de água são a fervura e a cloração. Embora sejam eficientes contra muitos microrganismos, esses métodos apresentam desvantagens relacionadas à limitada capacidade de produção de água e efeitos sobre fatores organolépticos, como o gosto [10,11]. No caso do uso do cloro em nível domiciliar, apesar de ser uma das técnicas mais acessíveis e de bom desempenho, está associado a possível formação de subprodutos tóxicos em águas contendo precursores [12–14]. Além disso, uma revisão recente indicou que há pouca adesão de comunidades à cloração domiciliar, especialmente no Sul Global [15]. Por esses motivos, tem crescido o número de estudos abordando diferentes métodos para intervenção no ponto de uso, visando a desinfecção de água e maior segurança de consumo. Esses estudos variam desde a forma de entrega e dissolução de cloro [16], por exemplo, até mesmo técnicas baseadas em luz na faixa do ultravioleta (UV) [17,18] e técnicas baseadas na luz solar em geral [19], como a desinfecção solar (SODIS) [20].

O cloro pode ser administrado por meio de uma certa dosagem de água sanitária ou soluções de hipoclorito de sódio (NaOCl) próprias para desinfecção de águas para consumo humano ou, mesmo, pastilhas de hipoclorito de cálcio ($\text{Ca}(\text{ClO})_2$). Sendo oxidantes, os compostos com cloro ativo desnaturam proteínas celulares com pH ácido e interagem com o DNA bacteriano, formando derivados clorados de bases de nucleotídeos. Além disso, o ácido hipocloroso (HClO) interrompe a fosforilação oxidativa e outras atividades enzimáticas associadas à membrana [21,22]. Seu mecanismo de ação é, portanto, o mesmo de outros desinfetantes como o peróxido de hidrogênio (H_2O_2). Os mecanismos biocidas envolvem ataque a biomoléculas, como ácidos nucleicos, causando a inibição da síntese de DNA e a quebra de suas ligações, e também proteínas, que podem ser oxidadas. No caso do H_2O_2 e, dependendo da ocorrência de processos combinados, é possível que haja atividade potencializada pela formação de radicais hidroxila ($\bullet\text{OH}$), o que pode configurar uma vantagem adicional, devido ao seu alto poder oxidativo [23]. Em comparação ao cloro, o H_2O_2 é considerado uma substância que pode ser considerada mais limpa ambientalmente, dado que usualmente se decompõe em moléculas de oxigênio e água, evitando a formação de subprodutos de desinfecção diante de uma ação efetiva [24,25]. Inclusive, o H_2O_2 é um oxidante alternativo que tem sido usado para controlar essa formação de subprodutos que trazem riscos à cloração enquanto tecnologia [26], o que evita preocupações com relação a produtos intermediários do tratamento. Outras questões que têm trazido destaque para o H_2O_2 enquanto desinfetante é que ele tem sido empregado no confronto a desafios atuais do setor de água, como o combate à

resistência antimicrobiana [27,28] e a inativação de microrganismos resistentes à desinfecção convencional, como é o caso dos protozoários patogênicos [29,30], que constituem um problema de saúde pública principalmente em locais mais vulneráveis, com infraestrutura deficitária.

Todos esses fatores trazem atenção para o H_2O_2 enquanto agente desinfetante e potencial para o tratamento descentralizado de água, podendo se apresentar como mais uma alternativa em direção ao alcance do ODS 6. Sendo assim, neste capítulo, apresentamos uma visão geral do uso de H_2O_2 na desinfecção de água, tanto de forma isolada quanto junto a outras tecnologias que podem ser utilizadas no ponto de uso, seja de forma combinada ou sequencial, conforme ilustrado no diagrama da Figura 1. Este capítulo também dá destaque para nossas contribuições em pesquisa bibliográfica e experimental realizadas na Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo (EESC/USP).

Figura 1 – Diagrama ilustrativo dos objetivos deste capítulo.



Fonte: Elaborado pelas autoras.

H_2O_2 como solução individual

No ano de 2022, publicamos uma revisão de literatura que abarcou 10 anos do uso de H_2O_2 como desinfetante, trazendo como pergunta de pesquisa se seu uso individual, na forma líquida, seria factível a nível domiciliar [31]. A pesquisa indicou que, entre 2011 e 2021, a ação do H_2O_2 foi estudada e relatada na forma de líquido, vapor (névoa), spray e aerossol (*dry mist*). Os sistemas de H_2O_2 via vapor são chamados de VHP e se referem à adição de concentrações acima de 30% a sistemas geradores de vapor, que deve condensar sobre superfícies [32]. No caso dos sistemas de geração de aerossol (AHP), emprega-se uma pressão que permite a produção de aerossóis e por vezes são utilizadas combinações de H_2O_2 e íons de prata [33], ou de amônio quaternário (QAC), que também possuem ação desinfetante e podem potencializar efeitos. Muitas dessas formulações estão disponíveis comercialmente. Sistemas de spray, VHP e AHP estiveram dominantes na nossa revisão, que indicou a predominância no emprego de H_2O_2 na desinfecção de superfícies em detrimento de matrizes líquidas, como a água. A revisão de literatura apresentou apenas dezesseis documentos voltados para o contexto do tratamento de água e efluentes, sendo que, dentre eles, onze se referiam a inativação de microrganismos, cujos resultados, portanto, poderiam dar base à pesquisa para desinfecção em contextos descentralizados. O número inicial de arquivos recuperados na busca havia sido 142 no total. Apesar dos documentos recuperados para saneamento, houve grande inconsistência

nos parâmetros operacionais identificados em cada estudo, cujos objetivos também diferiam. Isso ilustrou a necessidade de realização de pesquisas exploratórias de desempenho, visando elucidar dados básicos de inativação de microrganismos de interesse no tratamento de água, o que iniciamos na EESC.

Em um estudo que nós publicamos em 2021 visando começar a preencher essa lacuna [34], nós comparamos o desempenho de H₂O₂ aplicado na forma líquida ao cloro, que, conforme citado, é o agente desinfetante mais comum em aplicações em larga escala e intervenções descentralizadas. As doses de cloro testadas se basearam em estudos bem consolidados, simulando um cenário ideal e uma sub-dose. Em virtude das poucas referências que guiassem as concentrações de H₂O₂ a serem aplicadas para esse intuito, varremos diversas possibilidades, começando de um patamar de 3% H₂O₂ (v/v) [35], reduzindo gradualmente em função dos resultados obtidos, até a dose de 0,01%. Os tempos de exposição testados, por sua vez, foram de 60 min e 30 min, avaliando o desempenho do desinfetante na inativação do bacteriófago PhiX-174 (um modelo de contaminação por vírus entérico) e de *Escherichia coli* (uma bactéria indicadora de contaminação fecal).

Os resultados do estudo [35] reforçaram uma discussão que ocorre na literatura, a qual debate que se basear exclusivamente em bactérias indicadoras pode ser subestimar o risco microbiológico [36]. Isso foi evidenciado ao comparar a eficácia dos desinfetantes contra o *E. coli* e o bacteriófago Phi X174. Embora ambos os desinfetantes tenham sido semelhantes contra o *E. coli*, o H₂O₂ foi muito mais eficaz contra o Phi X174, o que é promissor para contextos de tratamento descentralizado [35], principalmente por abarcar eficiência alta na inativação de fagos semelhantes a vírus entéricos, os quais apresentam prevalência e risco em muitas localidades [37,38]. Nesse trabalho [35], nós recomendamos uma avaliação mais ampla da eficácia do H₂O₂ contra diferentes patógenos e suas cepas de maior interesse antes de implementá-lo como desinfetante de uso doméstico. O estudo [35] sugeriu que o H₂O₂ usado na forma líquida como desinfetante individual pode ser promissor para alcançar o ODS 6 (água potável e saneamento), mas são necessárias mais avaliações, especialmente em contextos específicos, onde a qualidade da água pode ser determinante. Este trabalho, realizado de forma exploratória em termos de desempenho do H₂O₂ na inativação de microrganismos de relevância no setor de água e saneamento tem servido como guia para demais investigações sobre esse desinfetante, além dos testes de bancada em batelada e não apenas no uso individual, mas também combinado com outras técnicas para aplicações descentralizadas.

Neutralização de residual

Um desafio relacionado ao uso de H₂O₂ isoladamente é a determinação da necessidade de neutralização de residual, ainda que ele se decomponha em água e oxigênio [21,39]. Para fins de água potável, os regulatórios não incluem padrões para concentração residual, supostamente porque o H₂O₂ não é um desinfetante convencional em sistemas de tratamento convencionais. Além disso, esses documentos fornecem dados técnicos e informações de engenharia voltadas para plantas de tratamento de água potável em larga escala, não se aplicando, portanto, à concepção de sistemas descentralizados, para os quais a neutralização ainda pode ser uma preocupação. Entretanto, para a descontaminação de alimentos, o H₂O₂ está isento na lista da Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (USEPA) para aplicações de concentração ≤1% em

culturas em crescimento e pós-colheita [40], o que pode nortear a pesquisa em sistemas de tratamento que utilizam o H_2O_2 na água e reduzir preocupações.

Entre trabalhos envolvendo o uso de H_2O_2 no contexto da desinfecção de água, os agentes neutralizadores de residual mais presentes foram o tiosulfato de sódio [41–43], e o metabissulfito de sódio [34,44], tendo sido exclusivamente empregados em estudos realizados em escala de bancada. Cabe ressaltar que a não utilização de um agente sequestrador de H_2O_2 não configura uma deficiência de um determinado sistema, mas é fundamental conhecer a cinética de degradação dos residuais presentes na água tratada, visando determinar não apenas se a sua neutralização é necessária, mas também determinar a segurança em termos de estocagem, por exemplo. Em sistemas centralizados de abastecimento, mantém-se um residual de cloro na água para o caso de contaminações na rede. Em contextos de coleta individualizada de água de manancial e sistemas de tratamento no ponto de uso, esta situação difere consideravelmente, dado que a preocupação maior é com a segurança da água produzida e armazenada.

Tratamentos sequenciais e combinados

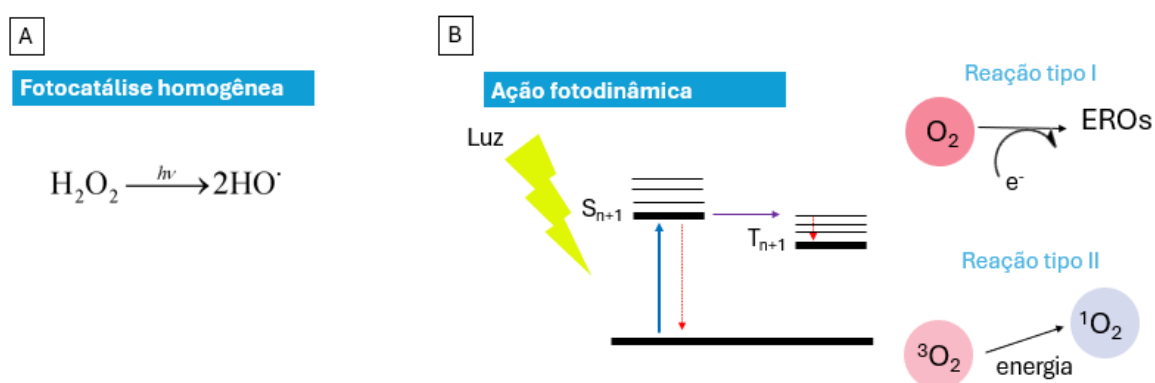
A potencial eficiência por efeito aditivo ou sinérgico da peroxidação em tratamentos sequenciais ou combinados tem sido discutida em função principalmente da qualidade da água e da tecnologia principal aplicada [45]. Neste capítulo, consideramos os tratamentos sequenciais como aqueles em que o H_2O_2 é aplicado antes de um determinado processo e sua ação é interrompida pelo uso de algum sequestrador, ou pelo tempo de ação antes de outra etapa. Os tratamentos combinados, por sua vez, são aqueles em que o H_2O_2 é usado em conjunto com outra tecnologia, por exemplo, um tratamento térmico, ou uso de radiação eletromagnética. Uma vantagem da perspectiva desses tratamentos combinados é a redução drástica na concentração de H_2O_2 requerida e na resiliência de sistemas testados, pois os mecanismos de ação podem ser aditivos ou sinérgicos na eficiência de inativação dos patógenos. Em cenários onde há limitação de recursos ou pouco controle sobre a qualidade da água bruta usada para consumo, esse atributo é particularmente positivo.

Já a pasteurização é um tratamento térmico muito comum em contextos descentralizados para tratar água e alimentos e envolve a elevação da temperatura da matriz até abaixo do ponto de fervura [46]. Dentre os avanços na pasteurização enquanto tratamento descentralizado, há ênfase no design de reatores, principalmente no caso da pasteurização solar (SOPAS), utilizando concentradores com diferentes configurações [47–49]. Além disso, há a possibilidade de inserção de aditivos químicos, dentre os quais o H_2O_2 pode ser um potencial. De fato, efeitos positivos foram verificados em um estudo de pasteurização assistida que realizamos na EESC, em que o H_2O_2 foi dosado antes da pasteurização, agindo durante a rampa de aumento de temperatura e mantido sem neutralização durante a pasteurização em si [50], o que configura, portanto, mais um exemplo de tratamento combinado, nesse caso, estudado com o intuito de aplicação, de fato, no ponto de uso, ainda que tenha sido realizado em nível laboratorial. O uso de H_2O_2 em conjunto com a pasteurização pode, portanto, reduzir os tempos de exposição à alta temperatura, diminuindo, também, a dependência de fontes externas de energia (e.g. lenha, luz solar etc.) e possivelmente ampliando o escopo de patógenos a serem inativados, devido ao poder oxidante da peroxidação por si só e dos efeitos complementares e sinérgicos da sua ação junto à temperaturas entre 30 e 70 °C [50].

Outra possível vertente são os tratamentos que envolvem luz (Figura 2). Processos de fotocatalise homogênea (Figura 2A), tais como aqueles que utilizam radiação ultravioleta ($\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV}$), por exemplo, configuram processos oxidativos avançados (POA), caracterizados pela geração de espécies reativas de oxigênio (EROs) [51], as quais apresentam alto poder oxidativo, capazes de atacar macromoléculas orgânicas e consequentemente inativar microrganismos [52]. Estes tratamentos de $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV}$ consistem, portanto, de um processo combinado e são amplamente conhecidos no âmbito do tratamento de água e efluentes, incluindo aplicações voltadas para reuso direto e indireto [53]. No contexto de desinfecção domiciliar, sistemas $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV}$ ainda não tem sido muito utilizados, principalmente devido ao custo de lâmpadas germicidas de mercúrio e demanda por eletricidade, tornando atraentes as pesquisas por alternativas mais simples [53], dentre as quais podem crescer as que empregam LEDs (*light emitting diodes*) como fontes de luz.

Uma outra alternativa é a integração desse tratamento fotocatalítico à SODIS [54]. O uso de SODIS remonta há mais de 40 anos e consiste na desinfecção da água que é colocada em frascos de plástico (em geral garrafas PET) expostas à luz solar em períodos que podem variar de 6 a 48 h, a depender da intensidade da radiação e resistência dos patógenos presentes na água a ser descontaminada [20]. As principais limitações dessa tecnologia se referem à baixa capacidade de produção, dependência de frascos PET limpos e de boa qualidade, a rotina diária de enchimento de garrafas que pode ser maçante, bem como o fato de que o armazenamento da água tratada não é recomendado por longos períodos [1]. Nesse sentido, o emprego de $\text{H}_2\text{O}_2/\text{SODIS}$, isto é, a adição de oxidante ao sistema, com possibilidades de geração de radicais e ação da individual do H_2O_2 , é uma possibilidade interessante para tratamentos combinados no ponto de uso. A integração do conceito de POA com SODIS reduz significativamente o tempo para a desinfecção completa de contaminantes em relação ao SODIS sozinho, evita a recuperação de microrganismos inativados, e melhora a inativação de organismos resistentes ao SODIS [2].

Figura 2 – Processos envolvendo luz no qual o H_2O_2 tem sido incorporado, sendo: (A) a fotocatalise homogênea e (B) a ação fotodinâmica representada pelo diagrama de Jablonski simplificado



Fonte: Elaborado pelas autoras.

Outro eixo de pesquisa em que a integração do H_2O_2 tem se destacado para o tratamento de água é no processo fotodinâmico. A exposição de moléculas fotossensibilizadoras (FS) à luz em comprimentos de onda específicos e em presença de oxigênio molecular, pode gerar a formação de EROs e oxigênio singleto, configurando um POA, ilustrado pelo diagrama de Jablonski apresentado Figura 2B. Há diversas classes de FS, que são constituídos de moléculas orgânicas como porfirinas e seus derivados [55], ftalocianinas [56], curcumina e curcuminoides [57], dentre outros. Essas moléculas são excitadas em geral na faixa do visível, o que é interessante da perspectiva do tratamento de água e tem motivado o seu emprego como aditivo em SODIS, por exemplo, principalmente usando corantes alimentícios como FS [58].

O tratamento fotodinâmico (PDT, *photodynamic treatment* ou *therapy*) é muito comum em usos clínicos para controle de infecções e tratamento de câncer, mas tem sido explorada em água e efluentes, abarcando pesquisas em inativação de microrganismos e eliminação de contaminantes químicos diversos [59]. Há, dentro da pesquisa em PDT, uma temática que explora os efeitos do input de espécies oxidantes adicionais no processo, incluindo o H_2O_2 . Dando continuidade à pesquisa do uso combinado de H_2O_2 , foi realizado, no Instituto de Física de São Carlos (IFSC/USP), um estudo de PDT *in-vitro* combinada com H_2O_2 utilizando curcumina como FS iluminada a 450 nm, verificou-se ação antagônica sobre inativação da bactéria *Staphylococcus aureus* [60]. Entretanto, esse próprio estudo discute trabalhos similares, em que outras abordagens de tratamento combinado são exploradas, tais como a diluição do FS em solução de H_2O_2 ou a suspensão da bactéria no agente oxidante [61]. Considerando os tempos de incubação e iluminação, entende-se que há uma exposição ao H_2O_2 passível de ser chamada de peroxidação, o que pode configurar um tratamento sequencial. Nessa linha, outro trabalho feito no IFSC também aplicando curcumina indicou, então, resultados promissores na ação antimicrobiana do tratamento sequencial H_2O_2 /PDT, tendo como alvo a bactéria *S. aureus*, nesse caso, resistente ao antibiótico metilicina [62], cepa que contribui para a carga de doença no mundo inteiro [63,64]. Os efeitos sinérgicos verificados nesse tipo de tratamento sequencial são atrativos para aplicações em tratamento de água, especialmente considerando cenários de poluição por bactérias resistentes, que constituem uma ameaça global [65,66], o que também se aplica a sistemas descentralizados.

Considerações finais

O H_2O_2 se apresenta como uma alternativa promissora para a desinfecção de água, especialmente em contextos descentralizados, devido à sua alta capacidade oxidativa, baixo impacto ambiental e eficácia contra microrganismos resistentes, mesmo quando comparado a outros métodos convencionais, como o cloro. Apesar de suas vantagens, mais estudos são necessários para determinar as concentrações ideais para o uso domiciliar e para garantir a neutralização de residual quando necessário, o que vai variar em função de diferentes contextos de aplicação. Nossa pesquisa na EESC, junto ao que temos acompanhado na literatura científica em geral, indica que, além das questões operacionais mais básicas, como tempo de contato e concentração, ainda há pouca informação sobre a infraestrutura necessária para o design de sistemas no ponto de uso, o que é fundamental para o bom desempenho da desinfecção e segurança do usuário.

O desenvolvimento de técnicas combinadas e sequenciais, como H_2O_2 em conjunto com pasteurização (estudada na EESC) ou radiação UV, oferece soluções inovadoras que podem aumentar a eficiência e reduzir os custos, tornando o processo mais acessível para

populações vulneráveis e áreas com infraestrutura deficitária. As pesquisas até agora sugerem que o H₂O₂ pode contribuir significativamente para alcançar o ODS 6, especialmente em regiões onde o acesso a soluções centralizadas de tratamento de água é limitado. Em conclusão, o H₂O₂ apresenta potencial não só como desinfetante isolado, mas também como parte de sistemas integrados que podem ampliar a segurança e o acesso à água potável em escala global (ao somarmos pequenas intervenções em contextos descentralizados). A continuação dos estudos experimentais e a implementação de soluções adaptadas ao contexto local são fundamentais para maximizar os benefícios dessa tecnologia, que, apesar de simples, pode trazer impactos muito favoráveis.

Referências

1. B. J. M. Chaúque; M. B. Rott. Solar disinfection (SODIS) technologies as alternative for large-scale public drinking water supply: advances and challenges. *Chemosphere* 2021, 281, 130754. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130754>.
2. A.-R. Afitiri; S. Appah Aram; M. Martienssen. Systematic review of the effects of advanced oxidation processes integration with solar water disinfection for improved drinking water production. *Waste Management Bulletin* 2024, 1, 52. <https://doi.org/10.1016/j.wmb.2023.08.005>.
3. A. R. Lima; K. J. S. Silva. Public health applications of photodynamic inactivation: an overview of vector control and water treatment in Light-dependent reactions: fundamentals and their catalytic and medical applications, L. D. Dias (Org.), Nova Science Publishers, New York, 2024: 13–32. <https://doi.org/10.4135/9781452229669.n742>.
4. United Nations Children’s Fund; World Health Organization, Progress on household drinking water, sanitation and hygiene I 2000-2017: special focus on inequalities, United Nations Children’s Fund, New York, 2019. <https://washdata.org/sites/default/files/documents/reports/2019-07/jmp-2019-wash-households.pdf>.
5. S. Doocy; G. Burnham, Point-of-use water treatment and diarrhoea reduction in the emergency context: an effectiveness trial in Liberia, *Tropical Medicine & International Health* 2006, 11 1542. <https://doi.org/10.1111/j.1365-3156.2006.01704.x>.
6. D. N. V. V. Konda Lutukurthi; S. Dutta. Recent advances on the technologies for the disinfection of drinking water in *Advances in Drinking Water Purification*, Sibdas Bandyopadhyay, Ed.; Elsevier, Amsterdam, 2024; 271. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-91733-9.00012-X>.
7. Black & Veatch Corporation, White’s handbook of chlorination and alternative disinfectants, John Wiley & Sons, Hoboken, 2009. <https://doi.org/10.1002/9780470561331>.
8. United States Environment Protection Agency, Alternative disinfectants and oxidants guidance manual, Office of Water, New York, 1999.
9. C.K. Pooi; H.Y. Ng. Review of low-cost point-of-use water treatment systems for developing communities, *npj Clean Water*. 1 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41545-018-0011-0>.
10. J. Zhao *et al.* Revisiting the effect of boiling on halogenated disinfection byproducts, total organic halogen, and cytotoxicity in simulated tap water. *Chemosphere* 2022, 309, 136577. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.136577>.
11. A. L. Osler; K. A. Alfredo; J. R. Mihelcic. Chlorine water taste threshold and acceptability among indigenous and non-indigenous populations in rural Panama.

Environmental Science & Technology 2023, 58, 5548. <https://doi.org/10.1021/acs.est.3c05630>.

12. S.S.I. Ali *et al.* Chlorine taste can increase simulated exposure to both fecal contamination and disinfection byproducts in water supplies. *Water Research* 2021, 44, 117806. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117806>.

13. Y. Qian *et al.* Evaluation of approaches for consumers to eliminate chlorine off-flavors from drinking water at point-of-use, *Water Science and Technology: Water Supply* 2015, 15, 84. <https://doi.org/10.2166/ws.2014.088>.

14. Y. Du *et al.* Formation and control of disinfection byproducts and toxicity during reclaimed water chlorination: a review. *Journal of Environmental Sciences* 2017, 58, 51. <https://doi.org/10.1016/j.jes.2017.01.013>.

15. A. M. Nielsen *et al.* Chlorination for low-cost household water disinfection – a critical review and status in three Latin American countries. *International Journal of Hygiene and Environmental Health* 2022, 244, 114004. <https://doi.org/10.1016/j.ijheh.2022.114004>.

16. R. Patil *et al.* Development of low cost point-of-use (POU) interventions for instant decontamination of drinking water in developing countries. *Journal of Water Process Engineering* 2020, 37, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2020.101435>.

17. G. Y. Lui *et al.* Point-of-use water disinfection using ultraviolet and visible light-emitting diodes. *Science of The Total Environment* 2016, 553, 626. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.02.039>.

18. S. A. Brownell *et al.* Assessment of a low-cost, point-of-use, ultraviolet water disinfection technology, *Journal of Water & Health* 2008, 6, 53. <https://doi.org/10.2166/wh.2007.015>.

19. N. Pichel; M. Vivar; M. Fuentes. The problem of drinking water access: a review of disinfection technologies with an emphasis on solar treatment methods, *Chemosphere* 2019, 218, 1014. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2018.11.205>.

20. K. G. McGuigan *et al.* Solar water disinfection (SODIS): a review from bench-top to roof-top. *Journal of Hazardous Materials* 2012, 235, 29. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2012.07.053>.

21. G. McDonnell; A. D. Russell. Antiseptics and disinfectants: activity, action, and resistance. *Clinical Microbiology Reviews* 1999, 12, 147. <https://doi.org/10.1128/CMR.12.1.147>.

22. P. Maris. Modes of action of disinfectants. *Revue Scientifique et Technique* 1995, 14, 47. <https://doi.org/10.20506/rst.14.1.829>.

23. C. P. Gerba, *et al.* Mechanisms of action of microbicides commonly used in infection prevention and control. *Microbiology and Molecular Biology Reviews* 2024, 88. <https://doi.org/10.1128/membr.00205-22>.

24. G. Farinelli *et al.* Evaluation of the effectiveness, safety, and feasibility of 9 potential biocides to disinfect acidic landfill leachate from algae and bacteria. *Water Research* 2021, 191, 1. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116801>.

25. M. Herraiz-Carboné *et al.* A review on disinfection technologies for controlling the antibiotic resistance spread. *Science of The Total Environment* 2021, 797, 1. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.149150>.

26. S. R. Poleneni. Recent research trends in controlling various types of disinfection by-products in drinking water: detection and treatment in Disinfection by-products in drinking water detection and treatment, M. N. V. Prasad; Elsevier, Butterworth-Heinemann, 2020. <https://doi.org/10.1016/b978-0-08-102977-0.00015-9>.

27. J. L. Cadnum *et al.* Effectiveness and real-world materials compatibility of a novel hydrogen peroxide disinfectant cleaner. *American Journal of Infection Control* 2021, 49, 1572. <https://doi.org/10.1016/j.ajic.2021.08.008>.
28. G. McKew *et al.* Efficacy of aerosolized hydrogen peroxide (Deprox) cleaning compared to physical cleaning in a Burns Unit. *Infection, Disease & Health* 2021, 26, 161. <https://doi.org/10.1016/j.idh.2021.01.003>.
29. Z. Liang; A. Keeley. Comparison of propidium monoazide-quantitative PCR and reverse transcription quantitative PCR for viability detection of fresh *Cryptosporidium* oocysts following disinfection and after long-term storage in water samples. *Water Research* 2012, 46, 5941. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2012.08.014>.
30. J. Quilez *et al.* Efficacy of two peroxygen-based disinfectants for inactivation of *Cryptosporidium parvum* oocysts. *Applied and Environmental Microbiology* 2005, 71, 2479. <https://doi.org/10.1128/AEM.71.5.2479-2483.2005>.
31. K. J. S. Silva; L. P. Sabogal-Paz. A 10-year critical review on hydrogen peroxide as a disinfectant: could it be an alternative for household water treatment? *Water Supply* 2022, 22 8527. <https://doi.org/10.2166/ws.2022.384>.
32. J. A. Otter; N. L. Havill; J. M. Boyce. Hydrogen peroxide vapor is not the same as aerosolized hydrogen peroxide. *Infection Control & Hospital Epidemiology* 2010, 31, 1201. <https://doi.org/10.1086/657076>.
33. T. Holmdahl *et al.* A head-to-head comparison of hydrogen peroxide vapor and aerosol room decontamination systems. *Infection Control & Hospital Epidemiology* 2011, 32, 831. <https://doi.org/10.1086/661104>.
34. K. J. S. Silva; L. P. Sabogal-Paz. Exploring potentials and constraints of H₂O₂ water disinfection for household settings. *Water, Air, & Soil Pollution* 2021, 232, 483. <https://doi.org/10.1007/s11270-021-05434-3>.
35. J. O. Choi; Y.H. Lee. Effect of sanitizers and disinfectants in *Staphylococcus saprophyticus*, *Medico-Legal Update* 2020, 20, 2064. <https://doi.org/10.37506/v20/i1/2020/mlu/194610>.
36. A. L. Mraz *et al.* Why pathogens matter for meeting the united nations' sustainable development goal 6 on safely managed water and sanitation. *Water Research* 2021, 189, 1. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116591>.
37. M. Rafieepoor *et al.* Detection of human enteric viruses in fresh produce of markets, farms and surface water used for irrigation in the Tehran, Iran. *Science of The Total Environment* 2024, 912, 1. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.169575>.
38. G. W. Fehrenbach *et al.* Comprehensive analysis and assessment of exposure to enteric viruses and bacteria in shellfish. *Marine Environmental Research* 2024, 196, 1. <https://doi.org/10.1016/j.marenvres.2024.106404>
39. E. Linley *et al.* Use of hydrogen peroxide as a biocide: new consideration of its mechanisms of biocidal action. *Journal of Antimicrobial Chemotherapy* 2012, 67, 1589. <https://doi.org/10.1093/jac/dks129>.
40. United States Environment Protection Agency, *Hydrogen peroxide; exemption from the requirement of a tolerance*, 2002. 67 FR 41844 June 20, 2002.
41. A. Santos-Rufo; D. Rodríguez-Jurado. Evaluation of chemical disinfectants in reducing *Verticillium dahliae* conidia in irrigation water. *Crop Protection* 2016, 79, 105. <https://doi.org/10.1016/j.cropro.2015.10.016>.
42. J. Fan *et al.* Application of various oxidants for cyanobacteria control and cyanotoxin removal in wastewater treatment. *Journal of Environmental Engineering* 2014, 140. [https://doi.org/10.1061/\(asce\)ee.1943-7870.0000852](https://doi.org/10.1061/(asce)ee.1943-7870.0000852).

43. A. A. Morales *et al.* Inactivation of *Ascaris* eggs in water using hydrogen peroxide and a Fenton type nanocatalyst (FeOx/C) synthesized by a novel hybrid production process. *Journal of Water & Health* 2013, 11, 419. <https://doi.org/10.2166/wh.2013.203>.
44. K. J. S. Silva *et al.* Effects of hydrogen peroxide preoxidation on clarification and reduction of the microbial load of groundwater and surface water sources for household treatment. *Water Supply* 2021, 22, 1. <https://doi.org/10.2166/ws.2021.421>.
45. K. J. S. Silva *et al.* Effects of hydrogen peroxide preoxidation on clarification and reduction of the microbial load of groundwater and surface water sources for household treatment. *Water Supply* 2022, 22, 2977. <https://doi.org/10.2166/ws.2021.421>
46. T. Deak. *Thermal treatment in Food safety management: a practical guide for the food industry*, Y. Motarjemi, Ed.; H. Lelieveld, Ed.; Elsevier, Amsterdam, 2014; p. 423–442. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-381504-0.00017-2>.
47. A. Martínez-García *et al.* Assessment of a pilot solar V-trough reactor for solar water disinfection. *Chemical Engineering Journal*, 2020, 399, 1. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.125719>.
48. B. Reyneke, M.Sc. Thesis, Stellenbosch University, 2017.
49. G. Carielo da Silva; C. Tiba; G. M. T. Calazans. Solar pasteurizer for the microbiological decontamination of water. *Solar pasteurizer for the microbiological decontamination of water* 2016, 87, 711. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2015.11.012>.
50. K. J. Sammarro Silva *et al.* Hydrogen peroxide-assisted pasteurization: an alternative for household water disinfection. *Journal of Cleaner Production* 2022, 357, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.131958>.
51. R. Su *et al.* Progress on mechanism and efficacy of heterogeneous photocatalysis coupled oxidant activation as an advanced oxidation process for water decontamination. *Water Research* 2024, 251, 1. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.121119>.
52. Y. Chen *et al.* Advanced oxidation processes for water disinfection: features, mechanisms and prospects. *Chemical Engineering Journal* 2021, 409, 1. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.128207>.
53. M. Farzanehsa *et al.* Comparison of UV-Cl and UV-H₂O₂ advanced oxidation processes in the degradation of contaminants from water and wastewater: a review. *Water and Environment Journal* 2023, 37, 633. <https://doi.org/10.1111/wej.12868>
54. J. A. Byrne *et al.* Photocatalytic enhancement for solar disinfection of water: a review. *International Journal of Photoenergy* 2011, 2011. <https://doi.org/10.1155/2011/798051>.
55. K. S. Ndlovu *et al.* Porphyrins developed for photoinactivation of microbes in wastewater. *Environmental Science and Pollution Research* 2023, 30, 11210. <https://doi.org/10.1007/s11356-022-24644-8>.
56. X. Li *et al.* Phthalocyanines as medicinal photosensitizers: developments in the last five years. *Coordination Chemistry Reviews* 2019, 379, 147. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2017.08.003>.
57. L. D. Dias *et al.* Curcumin as a photosensitizer: from molecular structure to recent advances in antimicrobial photodynamic therapy. *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews* 2020, 45, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochemrev.2020.100384>.
58. E. C. Ryberg; C. Chu; J.-H. Kim. Edible dye-enhanced solar disinfection with safety indication. *Environmental Science & Technology* 2018, 52, 13361. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b03866>.
59. K. J. S. Silva *et al.* Photodynamic processes for water and wastewater treatment: a review. *Laser Physics Letters* 2024, 21, 1. <https://doi.org/10.1088/1612-202X/ad3438>.

60. K. J. Sammarro Silva *et al.* Hydrogen peroxide as an additive to curcumin on the photodynamic inactivation of bacteria: a preliminary study. *Laser Physics* 2023, 33, 1. <https://doi.org/10.1088/1555-6611/acde71>.
61. A. S. Garcez *et al.* Antimicrobial mechanisms behind photodynamic effect in the presence of hydrogen peroxide. *Photochemical & Photobiological Sciences* 2011, 10, 483. <https://doi.org/10.1039/c0pp00082e>.
62. K. J. Sammarro Silva *et al.* Hydrogen peroxide preoxidation as a strategy for enhanced antimicrobial photodynamic action against methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*. *Journal of Water & Health* 2023, 21, 1922. <https://doi.org/10.2166/wh.2023.245>.
63. J. Denissen *et al.* Prevalence of ESKAPE pathogens in the environment: antibiotic resistance status, community-acquired infection and risk to human health. *International Journal of Hygiene and Environmental Health* 2022, 244, 1. <https://doi.org/10.1016/j.ijheh.2022.114006>.
64. M. Navidinia *et al.* Molecular characterization of resistance genes in MDR-ESKAPE pathogens. *Journal of Pure Applied Microbiology* 2017, 11, 779. <https://doi.org/10.22207/JPAM.11.2.17>.
65. M. A. Salam *et al.* Antimicrobial resistance: a growing serious threat for global public health. *Healthcare* 2023, 11, 1. <https://doi.org/10.3390/healthcare11131946>.
66. F. C. T. Elder *et al.* A framework to assess the terrestrial risk of antibiotic resistance from antibiotics in slurry or manure amended soils. *Environmental Science: Advances* 2023, 5, 780. <https://doi.org/10.1039/d2va00306f>.



CAPÍTULO 13

FÁRMACOS BETABLOQUEADORES ATENOLOL E PROPRANOLOL EM ÁGUAS RESIDUÁRIAS: DETECÇÃO, TRATAMENTO E ECOTOXICIDADE

Allan Pretti Ogura^{1*}, Vinicius Silveira Leite¹, Matheus Neves de Araujo¹, Elis Watanabe Nogueira¹

*1 – Laboratório de Processos Biológicos (LPB), Escola de Engenharia de São Carlos (EESC),
Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, SP, Brasil*

**allan.ogura@usp.br*

Resumo – Os betabloqueadores, como atenolol e propranolol, são fármacos comumente prescritos e que já foram detectados em águas residuárias. No entanto, há preocupações sobre seu impacto ambiental e a eficácia dos métodos de tratamento. Este capítulo fornece uma visão geral das características e do monitoramento desses compostos, além de apresentar estratégias para remoção de águas residuárias e a ecotoxicidade associada. Várias tecnologias de tratamento já foram aplicadas, como métodos físicos (*e.g.*, adsorção e filtração por membrana), processos químicos (*e.g.*, processos avançados de oxidação e ozonização) e tratamentos biológicos (*e.g.*, biodegradação por microrganismos e fitorremediação). A atenuação das concentrações de atenolol e propranolol depende da metodologia, das suas limitações e da escalabilidade. Além disso, os impactos ecotoxicológicos de betabloqueadores residuais em ecossistemas aquáticos e terrestres destacam riscos potenciais para organismos não-alvo. Portanto, há uma necessidade de abordagens de tratamento integradas e avanços tecnológicos para direcionar os desafios persistentes de contaminantes farmacêuticos em águas residuárias. Pesquisas futuras devem se concentrar em melhorar a eficiência da remoção e minimizar os riscos ecológicos, o que pode contribuir para práticas mais eficazes de gerenciamento de águas residuárias.

Palavras-chave: *Contaminantes emergentes. Ecotoxicologia. Micropoluentes. Remoção de fármacos. Risco ecológico.*

Financiamentos: Bolsas da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo de pós-doutorado (Processos 2021/14789-1 e 2023/10489-9), doutorado (2022/01945-8) e iniciação científica (2023/02569-2). Apoio do Projeto SABESP-FAPESP ATIVA-ETE (2020/09912-6).

Introdução

Os contaminantes são substâncias ou compostos que possuem o potencial de afetar negativamente o ambiente e são definidos como poluentes quando atingem níveis que podem causar efeitos deletérios ou prejudiciais na saúde humana ou nos organismos vivos. Os contaminantes podem ser provenientes de fontes pontuais, como o lançamento de efluentes domésticos e industriais, ou difusas, como as diversas atividades antrópicas que alteram as formas de uso e ocupação do solo (*e.g.*, agricultura e pecuária). Para identificar se um composto é um contaminante, é preciso avaliar se:

- A substância ou composto normalmente ocorreria nesse ambiente?
- Quais são as concentrações de referência ou valores basais da área de estudo?
- Existe algum indício de contaminação ou algum impacto ambiental evidente?
- Existem receptores que estão potencialmente expostos aos contaminantes?

A presença de fármacos em matrizes aquáticas, como águas superficiais e efluentes, tem emergido como um dos principais desafios para a qualidade ambiental. Os avanços das pesquisas e do desenvolvimento no âmbito da saúde contribuem para o aumento da produção e do consumo de produtos farmacêuticos, o que pode influenciar na presença desses compostos em matrizes ambientais [1]. Os betabloqueadores, como o atenolol e o propranolol, se destacam dentre os diversos compostos detectados devido à sua ampla prescrição médica e persistência no ambiente. Eles são considerados uma das classes farmacêuticas mais prescritas, juntamente com antibióticos, antidepressivos e anti-inflamatórios não esteróides [2]. Esses compostos são utilizados na terapia de primeira linha da hipertensão e para outras doenças cardiovasculares, como hipertensão arterial e angina de peito [3]. Vale destacar que o consumo anual de betabloqueadores utilizados no tratamento de doenças cardiovasculares cresceu significativamente por conta do maior número de pacientes que utilizam esses medicamentos [1].

A contínua introdução de fármacos no ciclo da água é decorrente da excreção humana, descarte inadequado ou tratamento insuficiente em estações de tratamento de efluentes (ETEs) [4]. Um modelo conceitual simplificado das fontes dos betabloqueadores atenolol e propranolol e as principais rotas de transporte desses compostos no ambiente está apresentada na Figura 1. As fontes pontuais dos betabloqueadores atenolol e propranolol no ambiente envolvem a sua introdução por meio de efluentes domésticos e hospitalares, pois esses compostos são excretados após uso humano e direcionados para as ETEs. Como os métodos tradicionais de tratamento podem não remover completamente esses compostos, eles são liberados em corpos d'água, nos quais podem se acumular, sofrer processos de diluição, degradação parcial e bioacumulação, afetando organismos aquáticos e potencialmente entrando na cadeia alimentar. Além disso, o descarte inadequado de resíduos sólidos, como medicamentos vencidos ou de embalagens, pode levar à contaminação do solo e, conseqüentemente, contribuir com as fontes difusas desses compostos para ambientes aquáticos por meio do escoamento superficial e da lixiviação.

Figura 1 – Modelo conceitual simplificado das fontes e transporte dos betabloqueadores atenolol e propranolol no ambiente



Fonte: Elaboração própria (Plataforma Canva)

Os avanços das técnicas analíticas instrumentais permitiram a detecção de baixas concentrações de vários produtos farmacêuticos em águas residuárias, águas superficiais, águas subterrâneas, solo e organismos aquáticos [5]. Em um estudo anterior, Aus der Beek *et al.* [6] registraram que produtos farmacêuticos foram identificados no ambiente natural de mais de 70 países de todos os continentes. Em geral, essas concentrações são detectadas na faixa de ng L^{-1} a $\mu\text{g L}^{-1}$ em ambientes aquáticos, como águas superficiais [1]. Por exemplo, o atenolol não é completamente metabolizado pelo corpo humano e, portanto, é excretado e é encontrado regularmente em águas residuárias e superficiais [7-8]. Estudos anteriores indicaram a presença de cerca de 135 ng L^{-1} desse fármaco em rios italianos [9]. O propranolol, por sua vez, é um anti-hipertensivo e já foi determinado em concentrações de cerca de 62 ng L^{-1} em uma ETE na província de Ontário, no Canadá [10]. Houve detecção de $0,0152 \mu\text{g L}^{-1}$ de propranolol em águas no sudeste do Brasil [11].

Esses compostos podem chegar ao meio ambiente pela eliminação em fezes e urinas, uma vez que passam por processos de biotransformação no corpo humano e podem ser excretados em sua forma natural ou em forma de seus metabólitos [12]. Por exemplo, processos de oxidação avançados (POAs) podem degradar esses compostos. No entanto, a depender das condições de processo aplicadas e das características das águas residuárias, os POAs podem resultar na formação de subprodutos ainda mais tóxicos, mesmo que em concentrações-traço. Além disso, tratamentos físicos, como adsorção de carbono e filtração por membrana podem atuar como uma barreira para evitar a presença desses produtos em águas tratadas. Contudo, a água retida e o produto absorvido exigem mais etapas de tratamento e descarte adequado [13]. Por outro lado, apesar das baixas eficiência de remoção observadas nas ETE convencionais, os processos biológicos de tratamento podem ser capazes de alcançar eficiências consideráveis de remoção para diversos produtos farmacêuticos, principalmente quando diferentes tecnologias são acopladas. No geral, a remoção de poluentes orgânicos encontrados em baixas concentrações (ng L^{-1} a $\mu\text{g L}^{-1}$) em águas residuárias, comumente nomeados de micropoluentes orgânicos (MPOs), ocorre principalmente por meio da (i) volatilização, (ii) adsorção no lodo dos reatores e (iii) biotransformação [14]. Embora alguns compostos possam sofrer transformação abiótica [15], a biotransformação é considerada o principal mecanismo de remoção MPOs, especialmente para compostos com altos valores de coeficiente de partição sólido-líquido (em outras palavras, aqueles que apresentam altos valores para a constante da lei de Henry) [16-17].

A biotransformação pode ocorrer por vias metabólicas primárias ou por cometabolismo. No caso de biotransformação por metabolismo direto, os MPOs servem como substrato caso a energia gerada seja suficiente para garantir o crescimento e manutenção das comunidades microbianas, enquanto a via cometabólica está baseada na capacidade dos microrganismos de degradar determinados substratos (*e.g.*, compostos farmacêuticos e outros MPOs) que não são utilizados como fonte direta de nutrientes e energia a partir de reações enzimáticas que envolvem um substrato alvo primário [18-21]. Um exemplo da ocorrência de cometabolismo em sistemas biológicos de tratamento foi demonstrado por Macêdo *et al.* [22] e Carneiro *et al.* [23], nos quais a remoção de diversos MPOs foi correlacionado a etapa de acidogênese da digestão anaeróbia. O cometabolismo é amplamente considerado como o mecanismo de biotransformação dominante em ambientes reais, incluindo biorreatores em ETEs [21, 24-27], e comumente leva à biotransformação de compostos parentais em produtos de transformação (PTs) em vez de sua mineralização completa, muitas vezes apresentando maior toxicidade em comparação com seus respectivos precursores. No geral, diversos fatores como tempo de detenção

hidráulica [25, 28], carga orgânica aplicada [29], potencial redox [30-31], pH [32], coeficiente de partição sólido-líquido [33-34], comunidades microbianas envolvidas [35-37], configuração de biorreator [38] podem influenciar a eficiência de remoção de fármacos e outros MPOs em sistemas biológicos de tratamento de águas residuárias. Neste contexto, a combinação de diferentes processos pode ser um esquema de tratamento ideal para a retenção e degradação dos compostos originais e de transformação [13].

Os compostos farmacêuticos são produzidos para atingir vias metabólicas e moleculares específicas em humanos e animais. Porém, muitas vezes também têm efeitos colaterais importantes [12]. Apesar de serem registrados em baixas concentrações, a presença de produtos farmacêuticos em ambientes aquáticos pode refletir sérias ameaças ao ecossistema [39]. Isso porque, podem apresentar capacidade de bioacumular nos organismos, o que pode levar a distúrbios endócrinos, resistência a medicamentos e inibição da produtividade [40]. Em um estudo anterior, Godoy *et al.* [41] demonstraram que os betabloqueadores, principalmente o atenolol e o propranolol, podem induzir riscos moderados a elevados em ecossistemas aquáticos. Portanto, torna-se essencial não apenas detectar esses compostos em matrizes aquáticas, mas também compreender seus efeitos de longo prazo sobre os ecossistemas.

Diante disso, observa-se que esses compostos podem influenciar não somente as comunidades biológicas, mas também a população que possui contato com o ambiente contaminado. Além disso, o lançamento de esgoto sem tratamento ou tratado de maneira inadequada representa uma grande fonte de poluição no Brasil, podendo afetar o equilíbrio ambiental dos ambientes atingidos e oferecer riscos à saúde da população [28]. No entanto, as regulamentações vigentes sobre a análise desses compostos em estações de tratamento de água e esgoto ainda são limitadas. Nesse sentido, avaliações ecotoxicológicas podem ser aplicadas para identificar a eficiência de diferentes métodos de tratamento de efluentes na remoção de produtos farmacêuticos, incluindo o atenolol e o propranolol, com o intuito de analisar as possíveis consequências geradas pela disposição de efluentes em ambientes aquáticos. Entre 1998 e 2019, os estudos sobre ocorrência, transformação e ecotoxicidade de β -bloqueadores no ambiente aumentaram 40% a cada cinco anos, concentrando-se principalmente em sua distribuição, ecotoxicidade, transporte físico e transformação química/biológica em ecossistemas naturais e artificiais [4].

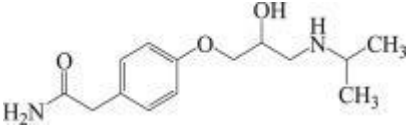
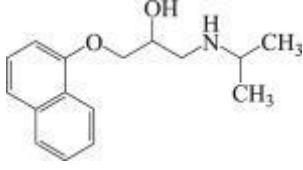
Neste capítulo, são exploradas as principais características do atenolol e propranolol em águas residuárias, incluindo as metodologias de detecção, as formas de tratamento e remoção e os impactos ecotoxicológicos. A discussão acerca dos desafios e limitações atuais, além das perspectivas futuras, pode contribuir para a mitigação dos riscos associados a esses fármacos no ambiente.

Características do atenolol e propranolol

As características físicas e químicas do atenolol e propranolol são fundamentais para prever o comportamento ambiental desses compostos químicos, pois afetam sua mobilidade, persistência, bioacumulação e toxicidade. Ademais, no tratamento de efluentes, as propriedades físico-químicas determinam as cinéticas de remoção e biotransformação dos micropoluentes. Dentre elas, destacam-se a solubilidade, o coeficiente de partição n-octanol-água [K_{ow}], o coeficiente de partição de carbono

orgânico [K_{oc}] e o coeficiente de dissociação ácida [pKa]. As principais características físicas e químicas do atenolol e propranolol estão apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 – Características do atenolol e propranolol

Característica	Atenolol	Propranolol
CAS	29122-68-7	525-66-6
Fórmula molecular	$C_{14}H_{22}N_2O_3$	$C_{16}H_{21}NO_2$
Estrutura molecular		
Peso molecular (g/mol)	266,34	259,34
Solubilidade em água a 25°C (mg L ⁻¹)	13.300	61,7
Coeficiente de dissociação ácida (pKa)	9,60	9,42
Coeficiente de partição n-octanol-água (log K _{ow})	0,16 – 0,50	3,12
Coeficiente de partição de carbono orgânico (K _{oc})	85 – 490	-
Coeficiente de sorção em lodo de esgoto (K _D)	44,1	-
Porcentagem excretada na urina	40% – 50%	1% – 4%

Fonte: Adaptado de [4, 42-44].

A solubilidade se refere à quantidade máxima de um composto (ou substância) que pode ser dissolvido em um solvente, geralmente água, formando uma solução homogênea, sob condições específicas de temperatura e pressão. O atenolol é uma molécula relativamente polar devido à presença de grupos funcionais hidrofílicos, o que confere a sua solubilidade muito alta (13.300 mg L⁻¹ a 25°C) e que favorece a sua presença em fase aquosa. Por outro lado, o propranolol é uma molécula mais lipofílica e a sua estrutura confere uma maior afinidade por fases orgânicas, o que influencia o seu comportamento ambiental. O propranolol é cerca de 200 vezes menos solúvel em água que o atenolol (61,7 mg L⁻¹ a 25°C), o que indica menor mobilidade em fase aquosa e que pode levar ao acúmulo nos sedimentos.

O K_{ow} é uma medida da tendência de uma substância se distribuir entre duas fases: uma fase orgânica (n-octanol, que simula lipídios) e uma fase aquosa (água). O atenolol tem

um K_{ow} muito baixo ($\log K_{ow} < 1$), indicando que ele é mais hidrofílico e tende a permanecer na água, enquanto o propranolol apresenta alto valor de K_{ow} ($\log K_{ow} > 3$), reforçando o seu caráter lipofílico e maior potencial de bioacumulação em organismos vivos. Uma vez absorvidos por organismos aquáticos, os contaminantes podem ser transferidos ao longo da cadeia alimentar (*i.e.*, biomagnificação), aumentando os riscos para predadores de níveis tróficos superiores, incluindo os seres humanos.

O K_{oc} descreve a afinidade de um composto orgânico para sorção em matéria orgânica do solo ou sedimento, ou seja, a relação entre a quantidade do composto aderida ao carbono orgânico do solo e sua concentração na fase aquosa. O K_{oc} contribui para prever o transporte e a mobilidade de poluentes no solo. O propranolol apresenta um K_{oc} muito mais alto do que o atenolol, o que significa que ele tem uma maior afinidade por se ligar à matéria orgânica do solo e sedimentos. Isso implica que o propranolol é mais propenso a se associar a partículas orgânicas e menos sujeito à lixiviação, enquanto o atenolol é mais móvel em ambientes terrestres, o que aumenta seu potencial de contaminação de águas subterrâneas. Os coeficientes de distribuição (K_d) para a adsorção de propranolol em oito tipos de sólidos variaram de 34 a 790 L kg⁻¹, sendo que os valores de K_d aumentaram conforme a maior capacidade de troca catiônica [45].

O pKa é uma medida da força de um ácido, indicando o pH no qual metade da substância está dissociada em suas formas ionizada e não ionizada. A forma neutra geralmente é mais lipofílica e tende a penetrar mais facilmente nas membranas celulares de organismos vivos, aumentando a toxicidade. Por outro lado, a forma ionizada tende a ser mais solúvel em água, aumentando sua mobilidade, mas reduzindo a bioacumulação. Ambos os compostos têm pKa muito próximos (em torno de 9,5–9,6), o que significa que, em ambientes aquáticos com pH neutro, eles estarão majoritariamente na forma ionizada. Em ambientes mais alcalinos, com pH acima de seus valores de pKa, eles começam a se encontrar predominantemente na forma neutra, o que pode aumentar sua lipofilicidade e, conseqüentemente, sua capacidade de atravessar membranas biológicas. A distribuição água-sólido também é influenciada pelos valores de pKa e o atenolol pode estar presente em maiores concentrações devido à elevada capacidade de adsorção do lodo de ETEs [4].

Deteção de atenolol e propranolol em matrizes aquáticas

A deteção dos betabloqueadores em matrizes aquáticas, como amostras de água superficial e efluentes depende de uma amostragem adequada, que possua boa precisão e reprodutibilidade na análise de micropoluentes. A amostragem composta proporcional é recomendada para analisar variações espaciais e temporais de β -bloqueadores, pois evita as limitações da amostragem discreta ou aleatória, que oferece apenas um retrato pontual das concentrações [4]. Em geral, os fármacos são encontrados na faixa de concentração de ng a $\mu\text{g L}^{-1}$ em efluentes de ETEs [46]. Dessa forma, as amostras precisam passar por uma etapa de concentração por meio de extração em fase sólida (SPE) *off-line* e/ou *on-line* antes da análise [4]. A SPE online apresenta algumas vantagens, como o menor tempo de preparação das amostras e o volume necessário, mantendo a sensibilidade e garantindo boa precisão e reprodutibilidade [4].

A técnica de cromatografia líquida de alta performance com espectrometria de massas em modo tandem (HPLC-MS/MS) se destaca por sua elevada sensibilidade na quantificação de estereoisômeros de β -bloqueadores, com limites de deteção tipicamente abaixo de 20 ng L⁻¹ [4]. Entretanto, algumas limitações dessas análises podem decorrer dos efeitos da

matriz, como efluentes e amostras biológicas (*e.g.*, biomassa de organismos e lodo de esgoto). A HPLC-MS/MS melhorou a eficiência de separação e a resolução de pico, mas os efeitos da matriz continuam sendo um problema, especialmente no modo de ionização por *eletrospray* [4]. Em amostras coletadas em ETEs, a recuperação de atenolol ($74\pm 16\%$ no afluente e $67\pm 29\%$ no efluente) foi menor que o valor obtido para propranolol ($106\pm 24\%$ no afluente e $87\pm 25\%$ no efluente) [47].

A revisão de Yi *et al.* [4] identificou que 12 β -bloqueadores foram detectados em águas residuárias domésticas em todo o mundo, e as concentrações de atenolol ($294,7 \pm 12,3 \mu\text{g L}^{-1}$ na Índia), metoprolol ($79,5 \pm 0,2 \mu\text{g L}^{-1}$ na Índia) e propranolol ($1,9 \mu\text{g L}^{-1}$ nos Estados Unidos) são normalmente uma ou duas ordens de magnitude maiores do que os outros compostos. Esse estudo também identificou que a concentração média de atenolol detectada no efluente de ETEs de Hong Kong foi cerca de $2,3\text{--}3,8 \mu\text{g L}^{-1}$, o que é 2–100 vezes maior do que na China ($0,0056\text{--}0,296 \mu\text{g L}^{-1}$), Suécia ($0,03 \mu\text{g L}^{-1}$), Alemanha (até $0,59 \mu\text{g L}^{-1}$), Austrália ($0,23\text{--}0,33 \mu\text{g L}^{-1}$) e México ($0,05\text{--}0,09 \mu\text{g L}^{-1}$) [4]. As concentrações de β -bloqueadores em águas residuárias podem ser influenciadas por fatores como temperatura e precipitação, com até $300 \mu\text{g L}^{-1}$ de atenolol detectados no verão em uma ETE na Índia, 10–20 vezes mais do que em outras estações [48]. O atenolol foi detectado em diferentes análises de efluentes hospitalares, como na Espanha ($0,1\text{--}122 \mu\text{g L}^{-1}$), na França ($1,6\text{--}6,5 \mu\text{g L}^{-1}$) e em Taiwan ($0,016\text{--}1,6 \mu\text{g L}^{-1}$) [49–51]. Por outro lado, o propranolol foi detectado em amostras de efluentes hospitalares na Espanha ($0,2\text{--}6,5 \mu\text{g L}^{-1}$) e em Taiwan ($0,042 \mu\text{g L}^{-1}$) e em efluentes domésticos nos Estados Unidos ($1,9 \mu\text{g L}^{-1}$) [49, 51–52].

Em águas superficiais, atenolol ($0,0047\text{--}11,02 \mu\text{g L}^{-1}$) e propranolol ($0,0001\text{--}0,59 \mu\text{g L}^{-1}$) foram detectados em concentrações muito menores do que aquelas detectadas em amostras de efluentes [4]. As variações espaciais e temporais dos β -bloqueadores em águas superficiais são influenciadas por fatores como descarga de águas residuárias, precipitação e temperatura, com menores concentrações em locais de maior temperatura e escoamento [4]. Em águas subterrâneas, as concentrações de atenolol ($0,0047\text{--}0,0062 \mu\text{g L}^{-1}$) e propranolol (até $0,0094 \mu\text{g L}^{-1}$) também são menores [4]. A ocorrência de β -bloqueadores em águas subterrâneas varia entre países, sendo a filtragem natural das margens dos rios a principal fonte de contaminação [4]. O atenolol foi detectado em amostras de sedimento ($3,78 \mu\text{g kg}^{-1}$), em sólidos suspensos ($3,06\text{--}34 \mu\text{g kg}^{-1}$) e em lodo de ETE ($1\text{--}186 \mu\text{g kg}^{-1}$) [4]. Por outro lado, o propranolol foi detectado apenas em sedimento ($29 \mu\text{g kg}^{-1}$) e em lodo de ETEs ($32,5 \mu\text{g kg}^{-1}$) [4].

Tratamento de efluentes visando à remoção de atenolol e propranolol

Os β -bloqueadores e seus metabólitos podem passar por processos físico-químicos e biológicos, incluindo adsorção e biodegradação em ETEs [4]. No entanto, a eficiência desses processos pode variar, e muitos β -bloqueadores e seus metabólitos persistem, escapando do tratamento convencional e entrando nos corpos hídricos.

Métodos físico-químicos

A sorção é o processo pelo qual substâncias, como solutos ou contaminantes, são retidas ou aderem a superfícies sólidas, podendo ocorrer por adsorção (superfície) ou absorção (interior do material). As características que definem o potencial de sorção de um

composto incluem sua hidrofobicidade, tamanho molecular, polaridade e coeficiente de partição (log K_{ow}). Por exemplo, as capacidades máximas de sorção do atenolol e propranolol em um polímero ligado por dissulfeto carregado negativamente, calculadas pelo modelo de Langmuir, foram próximas (28,57 e 20,75 mg g⁻¹, respectivamente) [1]. Portanto, compostos relativamente mais hidrofóbicos e com maior log K_{ow} , como o propranolol, tendem a apresentar maior sorção em superfícies orgânicas do que compostos mais hidrofílicos, como o atenolol.

Feng *et al.* [53] investigaram o comportamento de sorção de 24 micropoluentes emergentes em concentrações ambientalmente relevantes (1 µg L⁻¹) em seis frações de lodo de tamanhos variados (>4 mm, 2–4 mm, 1–2 mm, 0,6–1 mm, 0,2–0,6 mm e <0,2 mm) provenientes de um reator de lodo granular aeróbio (AGS) em escala real, por meio de experimentos em batelada. A sorção apresentou eficiência de remoção superior a 40% para 10 micropoluentes, incluindo atenolol e propranolol, que possuem carga positiva, o que ressalta a importância das interações eletrostáticas na sorção desses compostos em sistemas AGS. Os autores observaram que grânulos maiores apresentaram um coeficiente e uma capacidade de sorção superiores em comparação com frações menores de AGS, provavelmente devido ao maior teor de substâncias poliméricas extracelulares nesses grânulos [53].

A fotólise contribui para a degradação dos β-bloqueadores em ambientes naturais, com a eficiência de remoção variando conforme a radiação, rendimento quântico, espectros de absorção, composição da matriz da solução e parâmetros químicos da água, como o pH [4]. De acordo com a cinética de reação de pseudo primeira ordem, o propranolol (meia-vida de 16 h) apresentou maior fotodegradação com irradiação solar em comparação com o atenolol (meia-vida de 350 h) [54]. Outro estudo identificou que a concentração inicial dos compostos não alterou a cinética de reação; houve maior cinética de degradação em amostras de efluentes comparada com amostras de água pura, apesar desse processo não depender das concentrações de compostos nitrogenados nem da presença de matéria orgânica dissolvida [55].

POAs têm sido utilizados para a degradação de fármacos em amostras de água e de esgoto, como a fotocatalise heterogênea, a oxidação por peróxido de hidrogênio, processos Fenton e Foto-Fenton e a ozonização. Rosal *et al.* [56] investigaram o tratamento biológico seguido de ozonização para a remoção de poluentes em uma ETE e determinaram as concentrações de ozônio necessárias para a remoção dos β-bloqueadores, sendo <220 µM para atenolol e <50 µM para propranolol. No estudo, o tempo necessário para reduzir as concentrações desses compostos abaixo dos respectivos limites de quantificação (LQ) foi inferior a 10 minutos para o atenolol (LQ de 3 ng L⁻¹) e inferior a 4 minutos para o propranolol (LQ de 2 ng L⁻¹). As concentrações médias desses compostos no afluente da ETE eram de 1197 ng L⁻¹ e 36 ng L⁻¹ para o atenolol e o propranolol, respectivamente. Assim, a significativa diferença nos tempos e concentrações de aplicação de ozônio para esses β-bloqueadores pode estar relacionada não apenas às propriedades físico-químicas de cada substância, mas também às suas concentrações iniciais na ETE.

Outros exemplos de processos físico-químicos são os Fenton e Foto-Fenton, que consistem na reação entre íons ferrosos (Fe²⁺) e H₂O₂, gerando radicais hidroxila em um meio ácido. A versão foto-Fenton envolve a adição de luz UV para intensificar a geração de radicais. É usado para tratar fármacos como o diclofenaco e o ibuprofeno. De acordo

com Prieto-Rodríguez *et al.* [57], o processo foto-Fenton convencional (com ferro na faixa milimolar) em pH 2,8 [58] não é ideal para a remoção de micropoluentes em ETEs em concentrações muito baixas, pois deixaria uma quantidade excessiva de ferro no efluente, o que comprometeria sua reutilização segura. Para contornar esse problema, os autores utilizaram Fe^{2+} na concentração de 5 mg L^{-1} e obtiveram uma degradação de micropoluentes superior a 98% com consumo de H_2O_2 de 54 mg L^{-1} em poucos minutos de irradiação. Com apenas 15 mg L^{-1} de H_2O_2 e 5 mg L^{-1} de Fe^{2+} , o estudo registrou 84% de degradação em apenas 3 minutos de exposição à luz ($\text{QUV} = 0,56 \text{ kJ L}^{-1}$) [57].

A fotocatalise heterogênea utiliza a combinação de luz (UV ou solar) e um catalisador, como o dióxido de titânio (TiO_2), para gerar radicais que atacam os contaminantes. Prieto-Rodríguez *et al.* [57] investigaram a eliminação de 66 compostos, incluindo atenolol e propranolol, presentes no efluente do tratamento biológico secundário de uma ETE, utilizando fotocatalise heterogênea solar com TiO_2 . Os autores concluíram que a aplicação da fotocatalise com TiO_2 se mostrou menos eficiente em relação ao tempo de tratamento e ao consumo de energia acumulada quando comparada aos processos de foto-Fenton solar e ozonização [59].

Métodos biológicos

Bactérias, fungos e algas são os principais participantes da biotransformação de β -bloqueadores em águas superficiais e em ETEs [4]. Em comparação com a transformação físico-química, a biotransformação é mais lenta e pode gerar mais produtos de transformação, apesar dos menores custos e de seu caráter mais ecológico [4]. O tratamento de águas residuárias por lodos ativados, que contém microrganismos aeróbios e anaeróbios, pode eliminar de 48% a 100% dos β -bloqueadores [4].

- Tratamento anaeróbio: ocorre na ausência de oxigênio, em que microrganismos anaeróbios degradam a matéria orgânica, produzindo principalmente biogás (*e.g.*, metano e dióxido de carbono) como subproduto.
- Tratamento aeróbio: ocorre na presença de oxigênio, sendo realizado por microrganismos aeróbios que oxidam a matéria orgânica, resultando em dióxido de carbono, água e biomassa (*i.e.*, lodo).

A hidrólise bacteriana do atenolol resulta na formação do ácido atenolólico, mas sua biodegradabilidade é maior em lodo de biorreator de membrana, no qual tanto o composto parental quanto seu metabólito microbiano foram totalmente degradados em 2 e 20 dias, respectivamente [60]. Na Espanha, o atenolol foi detectado em amostras de efluentes primários ($3,1\text{--}2,2 \text{ } \mu\text{g L}^{-1}$) em concentrações superiores às medidas em efluentes secundários ($0,62\text{--}1,3 \text{ } \mu\text{g L}^{-1}$), indicando a sua remoção em ETEs [60]. No Canadá, as médias de remoção de atenolol e propranolol foram de 40% e 12%, respectivamente, em 14 ETEs [61]. O lodo ativado nitrificante apresenta maior eficiência na remoção de micropoluentes em comparação com o lodo ativado convencional, com cerca de 40% de remoção do atenolol a 15 mg L^{-1} em 10 dias na ausência de amônia, gerando ácido atenolólico. A biodegradação do atenolol está relacionada à taxa de oxidação da amônia e, na presença de amônia, houve 50% de remoção de atenolol e a formação de outros produtos de transformação, como o ácido atenolólico, 1-isopropilamino-2-propanol e o 1-amino-3-fenoxi-2-propanol [62].

Dolar *et al.* [63] avaliaram a eficiência de remoção de fármacos presentes nas águas residuárias municipais de uma ETE costeira (Castell-Platja d'Aro, Espanha) utilizando um sistema integrado em escala piloto com membranas e osmose reversa (MBR-OR). As taxas de remoção de β -bloqueadores pelo MBR foram de 87,10% para atenolol, 71,16% para metoprolol, 88,65% para nadolol, 67,01% para propranolol e 70,88% para sotalol. Maurer *et al.* [64] identificaram que o principal mecanismo de remoção de β -bloqueadores no lodo de MBR é a biodegradação, enquanto a adsorção foi uma via de remoção viável apenas para o propranolol. Além disso, Dolar *et al.* [63] constataram que a combinação dos tratamentos MBR e OR apresentou excelente remoção geral dos contaminantes emergentes-alvo, com taxas de remoção superiores a 99% para todos eles [63].

Choi *et al.* [65] investigaram a ocorrência, a taxa de remoção e os potenciais riscos de 43 micropoluentes orgânicos em quatro ETEs na Coreia que utilizam diferentes processos de tratamento biológico secundário, incluindo anaeróbio-anóxico-aeróbio (A2O), A2O em membrana (A2O-MBR), lodo ativado convencional (CAS) e processos modificados de Ludzack Ettinger (MLE). As concentrações de entrada medidas foram de 242,0 ng L⁻¹ para atenolol, 2,5 ng L⁻¹ para metoprolol e 51,4 ng L⁻¹ para propranolol. No efluente, as concentrações observadas foram de 105,5 ng L⁻¹ para atenolol, 2,2 ng L⁻¹ para metoprolol e 69,2 ng L⁻¹ para propranolol. Os β -bloqueadores, como atenolol e metoprolol, demonstraram eficiência de remoção moderada durante o tratamento biológico secundário, com taxas de remoção de 52% e 40%, respectivamente. No entanto, o propranolol apresentou uma taxa de remoção negativa de 15%, possivelmente devido à retrotransformação dos metabólitos hidrolisados de volta ao composto parental [66-67]. Além disso, entre os processos de tratamento biológico, o A2O-MBR obteve eficiências de remoção de micropoluentes orgânicos padronizadas (SRE) superiores às do MLE, CAS e A2O ($p < 0,05$), enquanto os últimos três mostraram diferenças estatisticamente não significativas nas SRE. O longo tempo de retenção de sólidos do A2O-MBR é conhecido por favorecer a degradação de micropoluentes orgânicos por meio de vias cometabólicas, promovendo o enriquecimento de bactérias de crescimento lento e a formação de comunidades microbianas diversas [68].

Liang *et al.* [69] avaliaram a biodegradação de fármacos em reatores de biofilme de leito móvel (MBBRs) sob diferentes ciclos de alimentação “feast-famine” (FF) ou “banquete-fome”. Os regimes de FF foram operados em cinco modos de ciclo com uma proporção fixa de 1:2: 6–12 h, 12–24 h, 24–48 h, 49–96 h e 96–192 h, resultando em tempos de ciclo FF de 18, 36, 72, 144 e 288 h. Os autores observaram que o tempo do ciclo FF influenciou a cinética de degradação de alguns fármacos: por exemplo, o atenolol foi degradado mais rapidamente com um ciclo curto de 18 h. No entanto, muitos fármacos apresentaram taxas de degradação semelhantes, mesmo em diferentes tempos de ciclo FF (como o propranolol), ou foram degradados a taxas mais baixas do que no reator não-FF (como o metoprolol). Os resultados mostraram que, para atenolol, metoprolol, propranolol e citalopram, os reatores com ciclos FF mais curtos (18 e 36 h) demonstraram maior remoção (~44% a ~89%) em comparação ao reator não-FF (~22% a ~52%).

Em uma ETE localizada na Espanha [70], houve remoção média similar de 30% de atenolol (mínimo de 1% e máximo de 55%) e 33% de propranolol (mínimo de 0% e máximo de 88%). Nesse estudo, as concentrações de atenolol na corrente afluyente apresentaram maior valores médios (1,62 $\mu\text{g L}^{-1}$, entre 0,275 e 3,03 $\mu\text{g L}^{-1}$) em comparação com a corrente efluente (média de 1,14 $\mu\text{g L}^{-1}$, entre 0,134 e 2,11 $\mu\text{g L}^{-1}$).

Para o propranolol, essa tendência também foi observada quando comparadas as concentrações na entrada (média de $0,123 \mu\text{g L}^{-1}$, entre $0,015$ e $0,511 \mu\text{g L}^{-1}$) e saída (média de $0,073 \mu\text{g L}^{-1}$, entre $0,009$ e $0,235 \mu\text{g L}^{-1}$) da ETE.

Portanto, a degradação de compostos farmacêuticos é possível por métodos como POAs: fotocatalise, Fenton, eletro-Fenton, ozonização, adsorção, filtração, cavitação, métodos ultrassônicos, mas também por meio do tratamento biológico [71]. Uma revisão dessas técnicas identificou que a fotocatalise, o eletro-Fenton e técnicas híbridas combinadas foram identificadas como as mais promissoras sob a perspectiva de futuro, consciência ambiental e eficácia de custo [71]. A combinação de mais de um processo pode contribuir para a remoção dos compostos em amostras de esgoto. Em um sistema híbrido visando à remoção de atenolol em esgoto sintético (10 mg L^{-1}), o processo fotocatalítico ($1,5 \text{ g L}^{-1}$ de TiO_2 sob luz solar) aumentou a biodegradabilidade (DBO/DQO) de 0,23 para 0,42 e resultou na remoção de 69,7% de DQO; em seguida, o tratamento biológico teve remoção final de DBO e DQO de 80,8% e 90,5%, respectivamente [72].

Tabela 2 – Vantagens e desvantagens das diferentes técnicas de remediação aplicadas na remoção de micropoluentes

Técnicas de remediação	Vantagens/Benefícios	Desvantagens/Limitações
Adsorção	Fácil operação; Alta eficiência.	Dificuldade de separação dos compostos sorvidos; Não há destruição/degradação do contaminante; Potencial dessorção dos contaminantes.
Filtração	Processo rápido; Eficiência média ou alta; Técnica suporte para outros métodos.	Entupimento das membranas ou filtros; Maior demanda de manutenção; Pouca pesquisa para remoção de fármacos.
Processos Oxidativos Avançados	Possibilidade de uso da radiação solar; Podem utilizar fontes renováveis, como energia eólica e geotérmica; Baixos custos operacionais e de manutenção.	Custo-benefício apenas com a aplicação de fontes renováveis; O custo inicial pode ser elevado.
Processos biológicos	Processo simplificado e prático; Alta eficiência de remoção; Baixo custo em comparação com as outras técnicas.	Não podem ser aplicados para todos os compostos, pois podem ser tóxicos aos microrganismos.

Fonte: Adaptado de [71].

Avaliação da ecotoxicidade de efluentes contendo atenolol e propranolol

Os bioensaios envolvem testes múltiplos com diferentes níveis tróficos e diferentes organismos-teste que podem ser utilizados para a avaliação da ecotoxicidade, como microalgas, invertebrados e peixes. Em geral, os testes devem ser padronizados, com critérios bem definidos (*e.g.*, validação) e representativos do ambiente estudado. Dessa forma, cada experimento deve levar em consideração quais os parâmetros (*endpoints*) que serão avaliados, quais são os diferentes modos de ação dos contaminantes e como os organismos-alvo podem estar potencialmente expostos ao composto estudado. O organismo-teste deve ser escolhido com base em sua relevância ecológica, representatividade do ambiente, fácil manipulação, cultivos geneticamente estáveis e sensibilidade consistente. Os ensaios ecotoxicológicos podem ser divididos em dois grupos principais:

- Ensaio de ecotoxicidade aguda: são de menor duração e envolvem a observação dos efeitos letais, como mortalidade e imobilidade dos organismos expostos ao contaminante ou à amostra ambiental (*e.g.*, água superficial ou efluente).
- Ensaio de ecotoxicidade crônica: em geral de maior duração, buscam avaliar efeitos subletais nos organismos expostos, como a reprodução, o crescimento, as taxas de alimentação e o comportamento.

Os dados de ecotoxicidade podem ser apresentados de forma qualitativa, classificando-os como tóxicos ou não tóxicos, ou de forma quantitativa, utilizando concentrações de efeito como CENO, CEO e CE₅₀:

- CENO (Concentração de Efeito Não Observado): é a concentração mais alta em que não são observados efeitos adversos nos organismos testados, ou seja, ela representa o limite acima do qual começam a surgir impactos.
- CEO (Concentração de Efeito Observado): é a menor concentração na qual efeitos adversos começam a ser observados em uma população testada.
- CE₅₀ (Concentração Efetiva 50%): é a concentração de uma substância ou composto que causa efeito adverso em 50% da população testada.

Os β -bloqueadores afetam os organismos aquáticos, provocando a alteração dos níveis de testosterona, a redução das taxas de fecundidade e reprodução, além de induzir comportamentos anômalos [4]. De acordo com Grzesiuk *et al.* [73], o propranolol pode afetar a fotossíntese e a taxa de crescimento de diferentes espécies de algas, como a *Chlamydomonas reinhardtii*. Além disso, o propranolol pode afetar o nível plasmático de esteroides da espécie de peixe *Oncorhynchus mykiss* em faixas de concentrações de $\mu\text{g L}^{-1}$ [74]. Os peixes da espécie *Pimephales promelas* foram capazes de tolerar concentrações maiores de atenolol (CEO = 10 mg L^{-1}) em comparação com o propranolol (CEO = $3,4 \text{ mg L}^{-1}$), considerando o *endpoint* de sobrevivência em 21 dias [75,76]. Em relação à reprodução, os valores de efeito para o atenolol (CENO de 10 mg L^{-1}) foram pelo menos 10 vezes maiores em comparação com o propranolol (CENO de $0,1 \text{ mg L}^{-1}$ e CEO de $1,0 \text{ mg L}^{-1}$). Esses autores identificaram que a menor lipofilicidade do atenolol (menor $\log K_{ow}$) resulta em menor bioconcentração desse composto, com concentrações plasmáticas de 1,8 a 12,2% daquelas na água, enquanto as de propranolol podem atingir até 1550%.

O atenolol apresentou valores de CENO e CEO para o crescimento da microalga *Raphidocelis subcapitata* de 128,8 e 257,5 mg L⁻¹, respectivamente [44]. Os autores também indicaram menor potencial de bioacumulação para esse fármaco, devido ao baixo valor de log K_{ow} (0,16). Por outro lado, a espécie de cladóceros *Daphnia magna* mostrou maior sensibilidade ao atenolol, com CENO de 8,9 mg L⁻¹, considerando a reprodução em ensaios crônicos de 21 dias. No entanto, em termos de CE₅₀ para atenolol, outros autores obtiveram valores de 143 a 190 mg L⁻¹ para reprodução de *R. subcapitata* e 755 e 1450 mg L⁻¹ para *D. magna* [77]. Conforme a Tabela 3, é possível indicar que o propranolol apresenta menores concentrações de efeito em comparação com o atenolol. Dessa forma, os riscos da presença de propranolol, uma vez que menores concentrações deste composto já são suficientes para a ocorrência de efeitos tóxicos aos organismos aquáticos expostos.

Tabela 3 – Concentrações de Efeito (CE₅₀) dos betabloqueadores atenolol e propranolol

Grupo	Espécie	Efeito	CE ₅₀ (mg L ⁻¹)		Referências
			Atenolol	Propranolol	
Microalgas	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Taxa de crescimento	1335	0,7	[78-79]
	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	Taxa de crescimento	143	1,86–4,74	[77, 80-81]
Crustáceos	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Mobilidade	33,4	1,54	[82]
	<i>Daphnia magna</i>	Mobilidade	313–755	5,53–9,06	[79, 81]
Bactérias	<i>Vibrio fisheri</i>	Luminescência	-	61–184,39	[80]
Protozoários	<i>Tetrahymena thermophila</i>	Taxa de crescimento	55,7	-	[77]

Fonte: Elaboração própria.

Em um estudo com fotoperoxidação e a radiação UV-C, houve remoção completa de atenolol e propranolol, mas não houve redução da toxicidade das amostras, identificada por meio de testes de germinação com diferentes espécies, incluindo agrião (*Nasturtium officinale*), rúcula (*Eruca vesicaria* ssp. *sativa*) e cenoura (*Daucus carota* subsp. *sativus*) [83]. Isso pode estar associado à formação de subprodutos de degradação, que podem conferir toxicidade às amostras mesmo após a remoção dos compostos parentais. Porém, poucos estudos conseguem identificar a toxicidade decorrente da presença dos fármacos em amostras de efluentes. Em geral, a complexidade das amostras faz com que as análises sejam mais subjetivas e dependentes de fatores como a elevada DBO e salinidade dessas amostras. Portanto, é fundamental que estudos sejam feitos para identificar os efeitos ecotoxicológicos decorrentes dos compostos-alvo e aqueles provenientes da matriz estudada (e.g., esgoto).

Desafios analíticos para a detecção de fármacos em amostras ambientais

Em geral, os métodos analíticos utilizam a abordagem denominada de análise-alvo (*target analyses*) para o monitoramento das correntes de entrada e saída das ETEs (águas residuárias, sólidos removidos e lodo residual) e para a determinação de fármacos e outros MPOs em diversos tipos de matrizes (*e.g.*, tecidos biológicos, lodos de reatores, solo, material vegetal) [84]. Em resumo, esse tipo de abordagem consiste no uso de padrões analíticos isotopicamente marcados e estáveis (*i.e.*, padrões internos), os quais podem conter nitrogênio 15 (^{15}N), carbono 13 (^{13}C), deutério (^2H) em sua composição molecular. Análises-alvo para amostras ambientais comumente envolvem o uso de técnicas cromatográficas acopladas à espectrometria de massas *in tandem* no espaço. Por exemplo, uma das técnicas mais utilizadas para investigações envolvendo matrizes ambientais consiste no acoplamento de cromatografia líquida (LC-do inglês *liquid chromatography*) com espectrômetros de massa (MS-do inglês *mass spectrometry*) do tipo quadrupolo, permitindo a separação cromatográfica dos analitos de interesse seguidos da ionização, seleção, fragmentação, separação e detecção dos íons produtos de interesse de acordo determinadas razões massa-carga [85].

No entanto, essa abordagem analítica permite a detecção e determinação confiável apenas de moléculas-alvo conhecidas e que possuam padrões internos comerciais, ou passíveis de serem sintetizados por empresas especializadas, ambos fatores que acabam encarecendo os fluxos de trabalho dessa natureza, principalmente quando envolvem a determinação de múltiplas moléculas [86]. Além disso, análises-alvo baseadas em LC-MS/MS exigem o desenvolvimento e refinamento dos métodos de separação para alcançar resoluções cromatográficas compatíveis com os padrões de qualidade, bem como o conhecimento prévio ou a realização de investigações adicionais ao desenvolvimento/uso do método para determinar as transições de massa de maior intensidade de cada composto-alvo [84-85]. Considerando que vários PTs podem ser formados em sistemas de tratamento biológico, bem como metabolizados por diferentes organismos, existe um conhecimento fragmentado sobre a ocorrência destas moléculas, principalmente devido à falta de padrões analíticos para um amplo espectro de potenciais PTs a partir de análises-alvo [87].

O recente desenvolvimento de métodos analíticos baseados na espectrometria de massa de alta resolução (HRMS-do inglês *high resolution mass spectrometry*) expandiu as fronteiras do conhecimento relacionadas à identificação de PTs em matrizes ambientais, principalmente devido ao desenvolvimento de tecnologias como os espectrômetros quadrupolares acoplados a analisadores de tempo de voo (Q-ToF) e aprisionadores de íon do tipo Orbitrap, os quais permitem a detecção e identificação rápida, sensível e confiável de moléculas de baixo peso molecular sem a necessidade do uso de padrões internos [87-89]. Nesse sentido, abordagens analíticas como a varredura (*screening*) e análises-não alvo (*non-target analyses*) passaram a ser amplamente utilizadas para identificação de pequenas moléculas em diversas aplicações, tais como a lipidômica [90], transcriptômica, proteômica [91], metabolômica [92] e identificação e elucidação de PTs em sistemas de tratamento biológico de águas residuárias [93-94]. No entanto, as abordagens baseadas em LC-HRMS para a análise exploratória de pequenas moléculas, seja no universo da metabolômica, lipidômica ou até mesmo na investigação de PTs, os quais os últimos nada mais são do que produtos do metabolismo de um dado organismo, foram transferidas sem críticas de fluxos de trabalho inicialmente concebidos para aplicações em proteômica [95].

Dado que a HRMS tem vantagens na discriminação de interferências relacionadas com compostos isobáricos, mas não é capaz de resolver questões relacionadas com isômeros, a necessidade de métodos de separação complexos torna-se imperativo e explica por que a maioria das técnicas ômicas começam com a cromatografia. Enquanto o universo da proteômica lida com moléculas de complexidade estrita e pressupõe a ocorrência de polaridade, os metabólitos e os lipídios envolvem diversas polaridades e propriedades químicas em resultado da ocorrência de múltiplos grupos funcionais e isômeros [95].

Outro problema com os fluxos de trabalho transferidos do campo da proteômica para a análise exploratória de pequenas moléculas, como os produtos do metabolismo de organismos, é a utilização de modos de varredura completa (*full scan*), favorecendo compostos altamente abundantes ou facilmente ionizáveis, bem como o requisito imperativo da identificação estrutural a nível de cada composto [95].

De acordo com Xie *et al.* [95], usuários de *softwares* de lipidômica e metabolômica geralmente experimentam uma elevada fração de íons/íons produtos não comparáveis (60-90%) quando conferidos os espectros obtidos a partir dos picos correspondentes detectados no espectrômetro de alta resolução com as bases de dados disponíveis. Neste contexto, os autores destacam procedimentos nos quais informações químicas podem ser perdidas ao utilizar fluxos de trabalho de análises exploratórias baseados em LC: (i) métodos de extração, os quais não são universais e, portanto, incapazes de selecionar uma miríade de moléculas possivelmente presentes em matrizes complexas; (ii) diluição, separação e filtração polar da amostra original durante a etapa cromatográfica, causando perda seletiva; (iii) depleção de informação química devida à baixa intensidade de determinados íons/íons produto durante o modo de aquisição de varredura total (*full scan*); e (iv) perda de informações devido ao uso exclusivo de espectros de íons/íons produto identificado para composição das bases de dados e posterior uso nas análises estatísticas.

Nesse sentido, alguns pesquisadores vêm desenvolvendo uma abordagem alternativa aos métodos baseados na LC-HRMS para análise exploratória de pequenas moléculas, a qual já foi descrita [96] e revisada [95] para múltiplas aplicações [97], incluindo a análise exploratória de PTs via metabolismo humano de compostos farmacêuticos em amostras de urina (*i.e.*, matriz complexa) [98]. Essa metodologia alternativa nomeada como *MRM proffiling* (em tradução livre: perfilagem do monitoramento de múltiplas reações) se baseia no uso de espectrômetros de massa de baixa resolução, mais especificamente os do tipo triplo quadrupolo, e no uso combinado dos diferentes modos de disponíveis para experimentos de MS/MS em espectrômetros quadrupolares para análise exploratória de pequenas moléculas em matrizes complexas.

De acordo com Edwards *et al.* [97], a varredura de íons produto (*product ion scan*) é o experimento de MS/MS mais comum realizado em triplos quadrupolo e permite obter informações estruturais sobre um íon precursor específico, enquanto as varreduras de íons precursores (*precursor ion scan*) e de perdas neutra (*neutral loss scan*) permitem a perfilagem de grupos funcionais, característica poderosa para análise exploratória de pequenas moléculas a nível de grupo funcional. Vale destacar que os modos de varredura MS/MS permitem a detecção de compostos que possivelmente não são detectados no modo de varredura completa de massa (*full mass scan*) devido ao ruído químico e diferentes eficiências de ionização entre os compostos presentes em uma matriz complexa [97-98]. Além disso, a técnica é baseada na exclusão de métodos de separação

cromatográfica pelo fato de operar com injeção direta das amostras. A justificativa para exclusão da etapa de cromatografia se refere à perda de informação química durante essa etapa e no preparo da amostra, que é imperativo para a otimização da separação dos analitos. Na contramão, o *MRM profiling* aposta na separação dos íons de interesse a partir da filtração nos analisadores de massa disponíveis nos espectrômetros quadrupolares a partir das razões massa-carga de interesse, permitindo uma maior garantia de obtenção de informações químicas presentes em uma amostra [95].

Vale destacar que o principal foco dessa técnica é a obtenção ampla de informações químicas que permitem a caracterização de diferentes amostras a nível de grupos funcionais e uso de ferramentas estatísticas massivas em conjunto com bases de dados para exploração de pequenas moléculas [95, 97-98]. Uma vez que a análise exploratória via *MRM profiling* permite o rastreamento amplo e rápido de informações poderosas relacionadas a funcionalidade das moléculas presente em uma amostra, o uso de técnicas complementares como cromatografia e HRMS associados ao uso de padrões internos e outras técnicas ômicas podem ser utilizados para confirmação estrutural, quantificação absoluta e anotação completa das moléculas sob análise [95, 97]. No entanto, o *MRM profiling* pode ser uma ferramenta poderosa para descoberta e varredura de amostras sem perdas de informações químicas de forma rápida e menos onerosa quando comparada a abordagens que se baseiam exclusivamente em métodos de LC-HRMS [99].

Considerando que muitos dos produtos do metabolismo dos organismos e os PTs relacionados aos sistemas de tratamento biológico de fármacos são resultado de ações enzimáticas que levam à alteração do metabólito primário (ou composto parental) a nível de grupamento funcional, o uso da *MRM profiling* demonstra ser uma potente ferramenta, conforme demonstrado em trabalhos recentes [96, 98-99]. Apesar de seu uso ainda não ter sido relatado para amostras ambientais complexas, como é o caso das águas residuárias, os achados relatados para amostras de PTs em amostras de urina [98] e diversas aplicações da técnica para análise exploratória de pequenas moléculas em tecidos complexos como fluido cérebro-espinhal [96], plasma humano [99-100] e tecidos de camundongos [101] indicam a potencialidade da técnica em ser utilizada para a identificação e monitoramento de PTs em sistemas de tratamento e organismos-teste em ensaios de ecotoxicidade. Por fim, vale destacar que espectrômetros de baixa resolução como os triplos quadrupolos são muito mais acessíveis para o cenário de pesquisa nacional quando comparados aos equipamentos de alta resolução, o que reforça as potencialidades da *MRM profiling* como uma técnica central para análise exploratória de fármacos e seus produtos de transformação em matrizes complexas no cenário científico brasileiro.

Considerações finais

Considerando a presença em diferentes matrizes ambientais dos fármacos betabloqueadores, em especial atenolol e propranolol, o tratamento de águas residuárias contaminadas com esses compostos é fundamental devido aos potenciais impactos ecológicos, incluindo a sua toxicidade e potencial de bioacumulação em organismos aquáticos. Diversos estudos apontam que atenolol e propranolol, mesmo em baixas concentrações, têm potencial para causar alterações fisiológicas em organismos, afetando, por exemplo, taxas de reprodução, crescimento e sobrevivência de espécies-chave em ecossistemas aquáticos. Esses efeitos já foram evidenciados em organismos-teste como microcrustáceos e microalgas, que são sensíveis a pequenas variações nas condições

ambientais e químicas. Dessa forma, estratégias de monitoramento mais frequentes e precisas são essenciais para a identificação e controle desses fármacos. A aplicação de métodos de quantificação, como a cromatografia líquida, oferece alta precisão, permitindo o desenvolvimento de políticas de monitoramento que possam servir de base para regulamentações futuras. Em relação aos processos de tratamento, tecnologias que demonstraram maior eficácia na degradação de atenolol e propranolol envolvem a fotocatalise, eletro-Fenton e técnicas híbridas, como a combinação da fotocatalise com POAs. Em geral, os estudos foram feitos em condições controladas de laboratório e existem limitações quanto à aplicação prática em larga escala e os altos custos operacionais para a implementação dessas tecnologias. Além disso, políticas públicas e parcerias com o setor industrial são indispensáveis para o desenvolvimento e aprimoramento de infraestruturas voltadas ao tratamento eficiente dessas águas residuárias. Por exemplo, o desenvolvimento de normativas que regulamentam os níveis máximos aceitáveis desses contaminantes em águas residuárias levando em consideração os riscos ambientais e à saúde humana.

Referências

1. S. Kim *et al.* Unveiling the adsorption mechanism of beta-blockers and sulfonamides in aqueous environment using disulfide-linked polymer. *Separation and Purification Technology* 2024, 333, 1. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2023.125897>.
2. M. Arenas *et al.* Environmental fate of chiral β -blockers in soils: effects of compost and digested sludge amendments and wastewater irrigation. *Comprehensive Analytical Chemistry* 2024, 1. <https://doi.org/10.1016/bs.coac.2024.08.011>.
3. M. Yi *et al.* Mechanism of β -blocker biodegradation by wastewater microorganisms. *Journal of Hazardous Materials* 2023, 444, 130338. <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2022.130338>.
4. M. Yi *et al.* β -blockers in the environment: distribution, transformation, and ecotoxicity. *Environmental Pollution* 2020, 266, 1. <https://doi.org/10.1016/J.ENVPOL.2020.115269>.
5. A. S. Adeleye *et al.* Abundance, fate, and effects of pharmaceuticals and personal care products in aquatic environments. *Journal of Hazardous Materials* 2022, vol. 424, p. 127284, <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2021.127284>.
6. T. aus der Beek *et al.* Pharmaceuticals in the environment: global occurrences and perspectives. *Environmental Toxicology and Chemistry* 2016, 35, 823. <https://doi.org/10.1002/ETC.3339>.
7. E. M. Beltrán *et al.* Uptake of atenolol, carbamazepine and triclosan by crops irrigated with reclaimed water in a Mediterranean scenario. *Ecotoxicology and Environmental Safety* 2020, 191, 110171, <https://doi.org/10.1016/J.ECOENV.2020.110171>.
8. A. Küster *et al.* Environmental risk assessment of human pharmaceuticals in the European Union: a case study with the β -blocker atenolol. *Integrated Environmental Assessment and Management* 2010, 6, 514. <https://doi.org/10.1897/IEAM2009-050.1>.
9. D. Calamari *et al.* Strategic survey of therapeutic drugs in the rivers Po and lambro in Northern Italy. *Environmental Science & Technology* 2003, 37, 1241. <https://doi.org/10.1021/ES020158E>.
10. M. R. Pino *et al.* Phytotoxicity of 15 common pharmaceuticals on the germination of *Lactuca sativa* and photosynthesis of *Chlamydomonas reinhardtii*. *Environmental Science and Pollution Research* 2016, 23, 22530. <https://doi.org/10.1007/S11356-016-7446-Y>.

11. M. B. Campanha *et al.* A 3-year study on occurrence of emerging contaminants in an urban stream of São Paulo State of Southeast Brazil. *Environmental Science and Pollution Research* 2015, 22, 7936. <https://doi.org/10.1007/S11356-014-3929-X>.
12. K. Fent; A. A. Weston; D. Caminada. *Ecotoxicology of human pharmaceuticals. Aquatic Toxicology* 2006, 76, 122. <https://doi.org/10.1016/J.AQUATOX.2005.09.009>.
13. H. Ghazal *et al.* Insights into current physical, chemical and hybrid technologies used for the treatment of wastewater contaminated with pharmaceuticals. *Journal of Cleaner Production* 2022, 361, 1. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2022.132079>.
14. B. Tiwari *et al.* Review on fate and mechanism of removal of pharmaceutical pollutants from wastewater using biological approach. *Bioresource Technology* 2017, 224, 1. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.11.042>.
15. Y. Yu *et al.* Ammonia monooxygenase-mediated cometabolic biotransformation and hydroxylamine-mediated abiotic transformation of micropollutants in an AOB/NOB coculture. *Environmental Science & Technology* 2018, 52, 9196. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b02801>.
16. Q. Su *et al.* Role of ammonia oxidation in organic micropollutant transformation during wastewater treatment: insights from molecular, cellular, and community level observations. *Environmental Science & Technology* 2021, 55, 2173. <https://doi.org/10.1021/acs.est.0c06466>.
17. P. Y. Nguyen *et al.* A review of the biotransformations of priority pharmaceuticals in biological wastewater treatment processes. *Water Research* 2021, 188, 1. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116446>.
18. D. M. Kennes-Veiga *et al.* Enzymatic cometabolic biotransformation of organic micropollutants in wastewater treatment plants: a review. *Bioresource Technology* 2022, 344, 1. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2021.126291>.
19. K. Fischer; M. Majewsky. Cometabolic degradation of organic wastewater micropollutants by activated sludge and sludge-inherent microorganisms. *Applied Microbiology and Biotechnology* 2014, 98, 6583. <https://doi.org/10.1007/s00253-014-5826-0>.
20. E. Fernandez-Fontaina *et al.* Modelling cometabolic biotransformation of organic micropollutants in nitrifying reactors. *Water Research* 2014, 65, 371. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2014.07.048>.
21. D. Krah *et al.* Micropollutant degradation via extracted native enzymes from activated sludge. *Water Research* 2016, 95, 348. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2016.03.037>.
22. W. V. Macêdo; G. H. D. Oliveira; M. Zaiat. Tetrabromobisphenol A (TBBPA) anaerobic biodegradation occurs during acidogenesis. *Chemosphere* 2021, 282, 1. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130995>.
23. R. B. Carneiro *et al.* Acidogenesis is a key step in the anaerobic biotransformation of organic micropollutants. *Journal of Hazardous Materials* 2019, 389, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.121888>.
24. C. F. Granatto *et al.* Influence of metabolic cosubstrates on methanogenic potential and degradation of triclosan and propranolol in sanitary sewage. *Environmental Research* 2021, 199, 1. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2021.111220>.
25. C. F. Granatto *et al.* Influence of cosubstrate and hydraulic retention time on the removal of drugs and hygiene products in sanitary sewage in an anaerobic Expanded Granular Sludge Bed reactor. *Journal of Environmental Management* 2021, 299, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2021.113532>.
26. L. de M. Pirete *et al.* Biodegradation of diclofenac and ibuprofen in fluidized bed reactor applied to sanitary sewage treatment in acidogenic and denitrifying conditions.

- Journal of Water Process Engineering 2022, 49, 2.
<https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2022.102964>.
27. J. M. Lema, Ed.; S. Suarez, Ed., Innovative wastewater treatment & resource recovery technologies: impacts on energy, economy and environment, London, IWA Publishing, 2017.
28. P. R. da Silva *et al.* Evaluation of toxicity and estrogenicity in UASB - treated municipal sewage. *Chemosphere* 2021, 268, 1.
<https://doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2020.128778>.
29. R. B. Carneiro *et al.* Influence of organic loading rate on ciprofloxacin and sulfamethoxazole biodegradation in anaerobic fixed bed biofilm reactors. *Journal of Environmental Management* 2020, 273, 1.
<https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2020.111170>.
30. L. B. Stadler *et al.* Effect of redox conditions on pharmaceutical loss during biological wastewater treatment using sequencing batch reactors. *Journal of Hazardous Materials* 2015, 282, 106. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2014.08.002>.
31. A. Arias *et al.* An innovative wastewater treatment technology based on UASB and IFAS for cost-efficient macro and micropollutant removal. *Journal of Hazardous Materials* 2018, 359, 113. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2018.07.042>.
32. R. Gulde *et al.* pH-Dependent biotransformation of ionizable organic micropollutants in activated sludge. *Environmental Science & Technology* 2014, 48, 13760. <https://doi.org/10.1021/es5037139>.
33. S. F. de Aquino; E. M. F. Brandt; C. A. de L. Chernicharo. Remoção de fármacos e desreguladores endócrinos em estações de tratamento de esgoto: revisão da literatura. *Engenharia Sanitária e Ambiental* 2013, 18, 187. <https://doi.org/10.1590/S1413-41522013000300002>.
34. M. Carballa *et al.* Determination of the solid-water distribution coefficient (K_d) for pharmaceuticals, estrogens and musk fragrances in digested sludge. *Water Research* 2008, 42, 287. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2007.07.012>.
35. A. B. Caracciolo; E. Topp; P. Grenni. Pharmaceuticals in the environment: biodegradation and effects on natural microbial communities: a review. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis* 2015, 106, 25.
<https://doi.org/10.1016/j.jpba.2014.11.040>.
36. P. R. Rout *et al.* Treatment technologies for emerging contaminants in wastewater treatment plants: a review. *Science of the Total Environment* 2021, 753.
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.141990>.
37. A. Ghattas *et al.* Anaerobic biodegradation of (emerging) organic contaminants in the aquatic environment. *Water Research* 2017, 116, 268.
<https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.02.001>.
38. M. Harb *et al.* Perspectives on the fate of micropollutants in mainstream anaerobic wastewater treatment. *Current Opinion in Biotechnology* 2019, 57, 94.
<https://doi.org/10.1016/j.copbio.2019.02.022>.
39. F. Desbiolles *et al.* Occurrence and ecotoxicological assessment of pharmaceuticals: Is there a risk for the Mediterranean aquatic environment? *Science of The Total Environment* 2018, 639, 1334.
<https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2018.04.351>.
40. H. Wang *et al.* Ecotoxicological effects, environmental fate and risks of pharmaceutical and personal care products in the water environment: a review. *Science of The Total Environment* 2021, 788, 2.
<https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2021.147819>.

41. A. A. Godoy; F. Kummrow; P. A. Z. Pamplin. Occurrence, ecotoxicological effects and risk assessment of antihypertensive pharmaceutical residues in the aquatic environment: a review. *Chemosphere* 2015, 138, 281. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2015.06.024>.
42. S. Kim *et al.* PubChem 2025 update. *Nucleic Acids Research* 2025, 53, 1516. <https://doi.org/10.1093/nar/gkae1059>.
43. M. D. Hernando; M. J. Gómez; A. Agüera; A. R. Fernández-Alba “LC-MS analysis of basic pharmaceuticals (beta-blockers and anti-ulcer agents) in wastewater and surface water,” *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 2007, 26, 6, 581, <https://doi.org/10.1016/J.TRAC.2007.03.005>.
44. A. Küster *et al.* Environmental risk assessment of human pharmaceuticals in the European Union: a case study with the β -blocker atenolol. *Integrated Environmental Assessment and Management* 2010, 6, 514. https://doi.org/10.1897/IEAM_2009-050.1.
45. R. M. Smith *et al.* Combining sorption experiments and time of flight secondary ion mass spectrometry (ToF-SIMS) to study the adsorption of propranolol onto environmental solid matrices: influence of copper(II). *Science of The Total Environment* 2018, 639, 841. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2018.05.118>.
46. M. K. Nguyen *et al.* Occurrence and fate of pharmaceutical pollutants in wastewater: insights on ecotoxicity, health risk, and state-of-the-art removal. *Chemosphere* 2024, 354, 2. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2024.141678>.
47. L. N. Nikolai *et al.* Stereoisomer quantification of the β -blocker drugs atenolol, metoprolol, and propranolol in wastewaters by chiral high-performance liquid chromatography–tandem mass spectrometry. *Journal of Chromatography A* 2006, 1131, 103. <https://doi.org/10.1016/J.CHROMA.2006.07.033>.
48. S. Mohapatra *et al.* Occurrence and fate of pharmaceuticals in WWTPs in India and comparison with a similar study in the United States. *Chemosphere* 2016, 159, 526. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2016.06.047>.
49. M. J. Gómez *et al.* Determination of pharmaceuticals of various therapeutic classes by solid-phase extraction and liquid chromatography–tandem mass spectrometry analysis in hospital effluent wastewaters. *Journal of Chromatography A* 2006, 1114, 224. <https://doi.org/10.1016/J.CHROMA.2006.02.038>.
50. J. U. Mullot *et al.* Modeling of hospital wastewater pollution by pharmaceuticals: first results of Mediflux study carried out in three French hospitals. *Water Science and Technology* 2010, 62, 2912. <https://doi.org/10.2166/WST.2010.986>.
51. A. Y. C. Lin; T. H. Yu; C. F. Lin. Pharmaceutical contamination in residential, industrial, and agricultural waste streams: Risk to aqueous environments in Taiwan. *Chemosphere* 2008, 74, 131. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2008.08.027>.
52. D. B. Huggett *et al.* Determination of beta-adrenergic receptor blocking pharmaceuticals in United States wastewater effluent. *Environmental Pollution* 2003, 121, 1995. [https://doi.org/10.1016/S0269-7491\(02\)00226-9](https://doi.org/10.1016/S0269-7491(02)00226-9).
53. Z. Feng *et al.* Sludge size affects sorption of organic micropollutants in full-scale aerobic granular sludge systems. *Water Research* 2024, 267, 1. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2024.122513>.
54. Q. T. Liu; H. E. Williams. Kinetics and degradation products for direct photolysis of β -blockers in water. *Environmental Science & Technology* 2007, 41, 803. <https://doi.org/10.1021/ES0616130>.
55. A. Piram *et al.* Photolysis of β -blockers in environmental waters. *Chemosphere* 2008, 73, 1265. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2008.07.018>.

56. R. Rosal *et al.* Occurrence of emerging pollutants in urban wastewater and their removal through biological treatment followed by ozonation. *Water Research* 2010, 44, 578. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2009.07.004>.
57. L. Prieto-Rodríguez *et al.* Application of solar AOPs and ozonation for elimination of micropollutants in municipal wastewater treatment plant effluents. *Water Research* 2013, 47, 1521. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2012.11.002>.
58. J. J. Pignatello; E. Oliveros; A. MacKay. Advanced oxidation processes for organic contaminant destruction based on the fenton reaction and related chemistry. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* 2006, 36, 1. <https://doi.org/10.1080/10643380500326564>.
59. M. Mofijur *et al.* Advances in identifying and managing emerging contaminants in aquatic ecosystems: analytical approaches, toxicity assessment, transformation pathways, environmental fate, and remediation strategies. *Environmental Pollution* 2024, 341, 122889, 1. <https://doi.org/10.1016/J.ENVPOL.2023.122889>.
60. J. Radjenović *et al.* Identification and structural characterization of biodegradation products of atenolol and glibenclamide by liquid chromatography coupled to hybrid quadrupole time-of-flight and quadrupole ion trap mass spectrometry. *Journal of Chromatography A* 2008, 1210, 142. <https://doi.org/10.1016/J.CHROMA.2008.09.060>.
61. H. B. Lee; K. Sarafin; T. E. Peart. Determination of β -blockers and β 2-agonists in sewage by solid-phase extraction and liquid chromatography–tandem mass spectrometry. *Journal of Chromatography A* 2007, 1148, 158. <https://doi.org/10.1016/J.CHROMA.2007.03.024>.
62. Y. Xu *et al.* Biodegradation of atenolol by an enriched nitrifying sludge: products and pathways. *Chemical Engineering Journal* 2017, 312, 351. <https://doi.org/10.1016/J.CEJ.2016.11.153>.
63. D. Dolar *et al.* Removal of emerging contaminants from municipal wastewater with an integrated membrane system, MBR–RO. *Journal of Hazardous Materials* 2012, 239–240, 64. <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2012.03.029>.
64. M. Maurer *et al.* Elimination of β -blockers in sewage treatment plants. *Water Research* 2007, 41, 1614. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2007.01.004>.
65. S. Choi *et al.* Occurrence, removal, and prioritization of organic micropollutants in four full-scale wastewater treatment plants in Korea *Chemosphere* 2024, 361, 2. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2024.142460>.
66. M. Kumar *et al.* Critical review on negative emerging contaminant removal efficiency of wastewater treatment systems: concept, consistency and consequences. *Bioresource Technology* 2022, 352, 2. <https://doi.org/10.1016/J.BIORTECH.2022.127054>.
67. Q. Sun *et al.* Seasonal and spatial variations of PPCP occurrence, removal and mass loading in three wastewater treatment plants located in different urbanization areas in Xiamen, China. *Environmental Pollution* 2016, 208, 371. <https://doi.org/10.1016/J.ENVPOL.2015.10.003>.
68. A. L. Batt; S. Kim; D. S. Aga Enhanced biodegradation of lopromide and trimethoprim in nitrifying activated sludge. *Environmental Science & Technology* 2006, 40, 7367. <https://doi.org/10.1021/ES060835V>.
69. C. Liang *et al.* Eat seldom is better than eat frequently: pharmaceuticals degradation kinetics, enantiomeric profiling and microorganisms in moving bed biofilm reactors are affected by feast famine cycle times. *Journal of Hazardous Materials* 2024, 468, 133739. <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2024.133739>.
70. M. Biel-Maeso C. Corada-Fernández; P. A. Lara-Martín. Monitoring the occurrence of pharmaceuticals in soils irrigated with reclaimed wastewater.

- Environmental Pollution 2018, 235, 312. <https://doi.org/10.1016/J.ENVPOL.2017.12.085>.
71. M. Date; D. Jaspal. Pharmaceutical wastewater remediation: a review of treatment techniques. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 2023, 62, 20492. <https://doi.org/10.1021/ACS.IECR.3C02451>.
72. V. Bhatia; A. Dhir; A. K. Ray. Integration of photocatalytic and biological processes for treatment of pharmaceutical effluent. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* 2018, 364, 322, <https://doi.org/10.1016/J.JPHOTOCHEM.2018.06.027>.
73. M. Grzesiuk; A. Wacker; E. Spijkerman. Photosynthetic sensitivity of phytoplankton to commonly used pharmaceuticals and its dependence on cellular phosphorus status. *Ecotoxicology* 2016, 25, 697. <https://doi.org/10.1007/S10646-016-1628-8>.
74. D. G. J. Larsson *et al.* Is heart rate in fish a sensitive indicator to evaluate acute effects of β -blockers in surface water? *Environmental Toxicology and Pharmacology* 2006, 22, 338. <https://doi.org/10.1016/J.ETAP.2006.05.002>.
75. M. J. Winter *et al.* Defining the chronic impacts of atenolol on embryo-larval development and reproduction in the fathead minnow (*Pimephales promelas*). *Aquatic Toxicology* 2008, 86, 361. <https://doi.org/10.1016/J.AQUATOX.2007.11.017>.
76. E. Giltrow *et al.* Chronic effects assessment and plasma concentrations of the β -blocker propranolol in fathead minnows (*Pimephales promelas*). *Aquatic Toxicology* 2009, 95, 195. <https://doi.org/10.1016/J.AQUATOX.2009.09.002>.
77. F. de Andrés; G. Castañeda; Á. Ríos. Use of toxicity assays for enantiomeric discrimination of pharmaceutical substances. *Chirality* 2009, 21, 751. <https://doi.org/10.1002/CHIR.20675>.
78. B. I. Escher *et al.* Comparative ecotoxicological hazard assessment of beta-blockers and their human metabolites using a mode-of-action-based test battery and a QSAR approach. *Environmental Science & Technology* 2006, 40, 7402. <https://doi.org/10.1021/ES052572V>.
79. M. Cleuvers. Initial risk assessment for three β -blockers found in the aquatic environment. *Chemosphere* 2005, 59, 199. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2004.11.090>.
80. B. Ferrari *et al.* Environmental risk assessment of six human pharmaceuticals: Are the current environmental risk assessment procedures sufficient for the protection of the aquatic environment? *Environmental Toxicology and Chemistry* 2004, 23, 1344. <https://doi.org/10.1897/03-246>.
81. L. Minguéz *et al.* Toxicities of 48 pharmaceuticals and their freshwater and marine environmental assessment in northwestern France. *Environmental Science and Pollution Research* 2016, 23, 4992. <https://doi.org/10.1007/S11356-014-3662-5>.
82. B. Fraysse; J. Garric. Prediction and experimental validation of acute toxicity of β -blockers in *Ceriodaphnia dubia*. *Environmental Toxicology and Chemistry* 2005, 24, 2470. <https://doi.org/10.1897/04-541R.1>.
83. V. de O. M. Cavalcanti *et al.* Treatment of the drugs atenolol and propranolol by advanced oxidation processes, a kinetic approach, toxicity effects on seeds, and chromatographic analysis. *Chemical Papers* 2021, 75, 4391. <https://doi.org/10.1007/S11696-021-01667-Y>.
84. M. Khalikova *et al.* What is the role of current mass spectrometry in pharmaceutical analysis? *Mass Spectrometry Reviews* 2024, 43, 560. <https://doi.org/10.1002/mas.21858>.

85. G. Loos; A. Van Schepdael; D. Cabooter. Quantitative mass spectrometry methods for pharmaceutical analysis. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 2016, 374, 1. <https://doi.org/10.1098/rsta.2015.0366>.
86. A. Ulvik *et al.* Quantifying precision loss in targeted metabolomics based on mass spectrometry and nonmatching internal standards. *Analytical Chemistry* 2021, 93, 7616. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c00119>.
87. S. Kern *et al.* Identification of transformation products of organic contaminants in natural waters by computer-aided prediction and high-resolution mass spectrometry. *Environmental Science & Technology* 2009, 43, 7039. <https://doi.org/10.1021/es901979h>.
88. D. Li *et al.* Recent advances in data-mining techniques for measuring transformation products by high-resolution mass spectrometry. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 2021, 143, 116409. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2021.116409>.
89. Y. Picó; D. Barceló. Transformation products of emerging contaminants in the environment and high-resolution mass spectrometry: a new horizon. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 2015, 407, 6257. <https://doi.org/10.1007/s00216-015-8739-6>.
90. K. Tarasov *et al.* High-content screening of yeast mutant libraries by shotgun lipidomics. *Molecular BioSystems* 2014, 10, 1364. <https://doi.org/10.1039/C3MB70599D>.
91. W. V. Macêdo *et al.* Proteogenomics identification of TBBPA degraders in anaerobic bioreactor. *Environmental Pollution* 2022, 310, 1. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2022.119786>.
92. H. Mizuno *et al.* The great importance of normalization of LC–MS data for highly-accurate non-targeted metabolomics. *Biomedical Chromatography* 2017, 31, 1. <https://doi.org/10.1002/bmc.3864>.
93. R. B. Carneiro *et al.* A critical review of wastewater-based epidemiology as a tool to evaluate the unintentional human exposure to potentially harmful chemicals. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 2024, 1. <https://doi.org/10.1007/s00216-024-05596-z>.
94. R. B. Carneiro *et al.* Biotransformation pathways of pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) during acidogenesis and methanogenesis of anaerobic digestion. *Journal of Hazardous Materials* 2024, 478, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.135444>.
95. Z. Xie *et al.* Multiple reaction monitoring profiling (MRM profiling): small molecule exploratory analysis guided by chemical functionality. *Chemistry and Physics of Lipids* 2021, 235, 1. <https://doi.org/10.1016/j.chemphyslip.2021.105048>.
96. C. R. Ferreira *et al.* Chemical profiling of cerebrospinal fluid by multiple reaction monitoring mass spectrometry. *Analyst* 2016, 141, 5252. <https://doi.org/10.1039/C6AN01618A>.
97. M. E. Edwards *et al.* Exploratory analysis using MRM profiling mass spectrometry of a candidate metabolomics sample for testing system suitability. *International Journal of Mass Spectrometry* 2021, 468, 1. <https://doi.org/10.1016/j.ijms.2021.116663>.
98. C. A. Marasco Júnior *et al.* Suspect screening of exogenous compounds using multiple reaction screening (MRM) profiling in human urine samples. *Journal of Chromatography B* 2022, 1201–1202, 1. <https://doi.org/10.1016/j.jchromb.2022.123290>.
99. K. E. Yannell *et al.* Multiple reaction monitoring (MRM)-profiling with biomarker identification by LC-QTOF to characterize coronary artery disease. *Analyst* 2018, 143, 5014. <https://doi.org/10.1039/C8AN01017J>.

- 100.** L. M. Kobos *et al.* An integrative proteomic/lipidomic analysis of the gold nanoparticle biocorona in healthy and obese conditions. *Applied In Vitro Toxicology* 2019, 5, 150. <https://doi.org/10.1089/aivt.2019.0005>.
- 101.** L. Kobos *et al.* A novel experimental workflow to determine the impact of storage parameters on the mass spectrometric profiling and assessment of representative phosphatidylethanolamine lipids in mouse tissues. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 2021, 413, 1837. <https://doi.org/10.1007/s00216-020-03151-0>.