



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA HIDRÁULICA E AMBIENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL
RECURSOS HÍDRICOS - DOUTORADO

GUILHERME COSTA RODRIGUES NETO

PROPOSTA DE METODOLOGIA PARA APLICAÇÃO
GENERALIZADA DO MÉTODO DAS
SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS

FORTALEZA

2026

GUILHERME COSTA RODRIGUES NETO

PROPOSTA DE METODOLOGIA PARA APLICAÇÃO
GENERALIZADA DO MÉTODO DAS
SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil (Recursos Hídricos), da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil. Área de concentração: Recursos Hídricos.

Orientador: Marco Aurélio Holanda de Castro, PhD.

FORTALEZA

2026

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

R613p Rodrigues Neto, Guilherme Costa.

Proposta de Metodologia para Aplicação Generalizada do Método das Soluções Fundamentais /
Guilherme Costa Rodrigues Neto. – 2026.
196 f. : il. color.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Civil: Recursos Hídricos, Fortaleza, 2026.
Orientação: Prof. Dr. Marco Aurélio Holanda de Castro.

1. Método das Soluções Fundamentais. 2. Método Livre de Malha. 3. Modelagem de Água Subterrânea. I.
Título.

CDD 627

GUILHERME COSTA RODRIGUES NETO

PROPOSTA DE METODOLOGIA PARA APLICAÇÃO
GENERALIZADA DO MÉTODO DAS
SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil (Recursos Hídricos), da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil. Área de concentração: Recursos Hídricos.

Aprovada em 14/01/2026.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Marco Aurélio Holanda de Castro (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Francisco de Assis de Sousa Filho
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Paulo Roberto Lacerda Tavares
Universidade Federal do Cariri (UFCA)

Prof. Dr. Lindemberg Lima Fernandes
Universidade Federal do Pará (UFPA)

Prof^ª. Dr^ª. Renata Shirley de Andrade Araújo
Universidade Federal do Piauí (UFPI)

Prof. Dr. Saulo de Tarso Marques Bezerra
Universidade Federal do Pernambuco (UFPE)

A Deus.

Aos meus pais.

À minha tia e madrinha.

Aos meus avós.

À minha irmã.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Universidade Federal do Ceará pela infraestrutura colocada à disposição. Agradeço ao Prof. Marco Aurélio Holanda de Castro, PhD., pela orientação ao longo deste trabalho, aos professores e demais participantes da banca examinadora pelo tempo dedicado e pelas contribuições oferecidas, aos colegas da turma de doutorado e de mestrado pelas discussões e sugestões que ajudaram a aprimorar esta pesquisa, e, por fim, à Fundação Cearense de Apoio à Pesquisa (FUNCAP) pelo apoio financeiro concedido na forma de bolsa de estudos (Edital N° 12/2024).

RESUMO

A modelagem numérica de fenômenos regidos pela equação de Laplace é relevante em diversas áreas da engenharia, inclusive na hidrogeologia, em que a limitação de dados e a complexidade geométrica dos domínios impõem dificuldades adicionais. Nesse contexto, esta tese propôs e avaliou uma metodologia generalizada para a aplicação do Método das Soluções Fundamentais (MSF) a problemas bidimensionais regidos pelo operador de Laplace, com posterior aplicação à simulação do fluxo de água subterrânea. A metodologia baseou-se na adoção de uma fronteira fictícia circular com pontos igualmente espaçados e na varredura sistemática de seu raio ($dvalue$), associada a critérios objetivos de estabilidade, convergência e acurácia. O desempenho numérico foi avaliado por meio do erro quadrático médio (RMSE), do inverso do número de condicionamento da matriz principal ($rcond$), de leituras pontuais no interior do domínio e de um teste de convergência por erros sucessivos. A metodologia foi validada em exemplos teóricos com solução analítica conhecida, em domínios retangulares e circulares. Os resultados evidenciaram faixas operacionais de $dvalue$ dependentes do número de pontos de contorno (N) e da geometria do domínio. Para o contorno circular unitário, identificaram-se limites práticos aproximados de $dvalue$ de 1211,5 para $N = 8$, 25,1 para $N = 16$ e 3,58 para $N = 32$, sendo a aplicação inviável para $N = 64$ sem tratamento numérico adicional. Observou-se que o aumento de N elevou a precisão das soluções, mas estreitou a janela operacional do método. Em estudo de caso de fluxo de água subterrânea com dados piezométricos, o procedimento permitiu diagnosticar limites operacionais do MSF e interpretar desvios entre valores calculados e observados. Concluiu-se que a metodologia ampliou a reprodutibilidade e a aplicabilidade do MSF, posicionando-o como ferramenta útil para triagem, diagnóstico e apoio à modelagem de problemas laplacianos e, em particular, do fluxo de água subterrânea com disponibilidade limitada de dados. Ao estabelecer faixas operacionais objetivas e quantificáveis para os parâmetros do método, esta tese contribuiu para o preenchimento de uma lacuna identificada na literatura e reforçou o potencial do MSF como alternativa ou complemento aos modelos tradicionais em contextos específicos.

Palavras-chave: método das soluções fundamentais; método livre de malha; fronteira fictícia; condicionamento numérico; água subterrânea.

ABSTRACT

Numerical modeling of phenomena governed by Laplace's equation is relevant to several fields of engineering, including hydrogeology, in which limited data availability and geometric complexity of the domain impose additional difficulties. In this context, this thesis proposed and evaluated a generalized methodology for applying the Method of Fundamental Solutions (MFS) to two-dimensional problems governed by the Laplace operator, with subsequent application to groundwater flow simulation. The methodology was based on the adoption of a circular fictitious boundary with equally spaced points and on the systematic variation of its radius (d value), associated with objective criteria of stability, convergence, and accuracy. Numerical performance was evaluated by means of the root mean square error (RMSE), the reciprocal condition number of the main matrix ($rcond$), pointwise interior-domain readings, and a convergence test based on successive errors. The methodology was validated using theoretical examples with known analytical solutions in rectangular and circular domains. The results revealed operational d value ranges dependent on the number of boundary points (N) and on domain geometry. For the unit circular boundary, approximate practical d value limits of 1211.5 for $N = 8$, 25.1 for $N = 16$, and 3.58 for $N = 32$ were identified, whereas application was not feasible for $N = 64$ without additional numerical treatment. It was observed that increasing N improved solution accuracy but significantly narrowed the method's operational range. In a groundwater flow case study using piezometric data, the procedure made it possible to diagnose MFS operational limits and to interpret deviations between computed and observed values. It was concluded that the proposed methodology expanded the reproducibility and applicability of the MFS, positioning it as a useful tool for screening, diagnosis, and modeling support in Laplacian problems and in groundwater flow simulations under limited data availability.

Keywords: method of fundamental solutions; fictitious boundary; numerical conditioning; groundwater; meshless modeling.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| | |
|---|-----|
| Figura 1 – Acesso ao Portal de Periódicos da CAPES através da plataforma CAFe | 30 |
| Figura 2 – Ilustração da interface de pesquisa avançada da base <i>Scopus (Elsevier)</i> | 30 |
| Figura 3 – Ilustração da interface de pesquisa avançada da base <i>Web of Science</i> | 31 |
| Figura 4 – Ilustração da interface de pesquisa avançada da base de dados <i>SciELO</i> | 31 |
| Figura 5 – Fluxograma PRISMA | 33 |
| Figura 6 – Mapas de associação entre Palavras-chave (A) e coautoria (B) | 36 |
| Figura 7 – Placa metálica discretizada em pontos internos segundo uma malha quadrangular e com condições de contorno de Dirichlet aplicadas as suas fronteiras..... | 60 |
| Figura 8 – Resultados obtidos com o MDF para o problema enunciado | 61 |
| Figura 9 – Exemplo de discretização e de um domínio de análise bidimensional segundo uma geometria triangular dos elementos | 62 |
| Figura 10 – Croqui de um mesmo domínio discretizado em elementos finitos (à esquerda) e pontos (à direita)..... | 65 |
| Figura 11 - (A) Domínio e contorno do problema (B) Modelagem aplicada ao MSF para o mesmo domínio e contorno A..... | 69 |
| Figura 12 – Resultados da comparação do MSF e MODFLOW para dois estudos de caso | 72 |
| Figura 13 – Croqui da interpretação da simplificação e Dupuit-Forchheimer | 77 |
| Figura 14 – Croqui exemplificativo de aquífero | 81 |
| Figura 15 – Convenções de simbologia de representação esquemática de algoritmo..... | 86 |
| Figura 16 – Fluxograma das etapas principais de processamento implementadas na metodologia proposta..... | 87 |
| Figura 17 – Exemplo de fronteira fictícia (asteriscos) distribuídos como uma circunferência em torno da fronteira real (pontos vazados) | 90 |
| Figura 18 – Exemplo de fronteira fictícia (pontos em vermelho) distribuídos como um <i>offset</i> da fronteira real (pontos de cor preto) | 91 |
| Figura 19 – Fluxograma da metodologia proposta..... | 98 |
| Figura 20 – Ilustração do efeito do passo do raio na resolução dos gráficos | 100 |
| Figura 21 – Ilustração da apresentação do primeiro bloco de resultados..... | 101 |
| Figura 22 – Ilustração da apresentação do resultado do teste de convergência | 102 |
| Figura 23 – Exemplo de modelagem dos problemas teóricos..... | 109 |

| | |
|---|-----|
| Figura 24 – Estrutura do <i>data.frame</i> retornado pelas | 110 |
| Figura 25 – Configuração geométrica do estudo de caso | 111 |
| Figura 26 – Geologia e geomorfologia da área de estudo | 113 |
| Figura 27 – Resultados do domínio quadrado com 8 pontos | 118 |
| Figura 28– Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 119 |
| Figura 29 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2) .. | 120 |
| Figura 30– Resultados do domínio quadrado com 16 pontos | 122 |
| Figura 31– Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 124 |
| Figura 32– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2) ... | 124 |
| Figura 33 – Resultados do domínio quadrado com 32 pontos | 127 |
| Figura 34 – Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 128 |
| Figura 35 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2) .. | 128 |
| Figura 36– Resultados do domínio circular com 8 pontos | 130 |
| Figura 37– Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 131 |
| Figura 38– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3) ... | 131 |
| Figura 39– Resultados do domínio circular com 16 pontos | 133 |
| Figura 40 – Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 134 |
| Figura 41 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3) .. | 135 |
| Figura 42– Resultados do domínio circular com 32 pontos | 137 |
| Figura 43– Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 138 |
| Figura 44– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3) ... | 138 |
| Figura 45– Resultados do domínio quadrado com 8 pontos | 140 |
| Figura 46– Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 141 |
| Figura 47 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2) .. | 142 |
| Figura 48– Resultados do domínio quadrado com 16 pontos | 144 |
| Figura 49– Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 145 |
| Figura 50– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2) ... | 146 |
| Figura 51– Resultados do domínio quadrado com 32 pontos | 148 |
| Figura 52– Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 149 |
| Figura 53 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2) .. | 149 |
| Figura 54 – Resultados do domínio circular com 8 pontos | 151 |
| Figura 55 – Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 152 |

| | |
|---|-----|
| Figura 56– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3) ... | 152 |
| Figura 57– Resultados do domínio circular com 16 pontos | 154 |
| Figura 58– Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 155 |
| Figura 59– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3) ... | 155 |
| Figura 60 – Resultados do domínio circular com 32 pontos | 157 |
| Figura 61– Resultado do teste de convergência para RMSE..... | 158 |
| Figura 62– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3) ... | 158 |
| Figura 63– Resultado do algoritmo de menor círculo centrado | 162 |
| Figura 64 – Resultados da simulação | 164 |
| Figura 65– Resultados da aproximação numérica para cada ponto do domínio | 165 |
| Figura 66 – Resultado do teste de convergência para a métrica RMSE..... | 166 |
| Figura 67 – Resultado dos testes de convergência para cada ponto do domínio | 166 |
| Figura 68 – Resultado dos testes de convergência para cada ponto do domínio | 167 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|-----|
| Tabela 1 – <i>Strings</i> de pesquisa avançada utilizadas em cada base | 26 |
| Tabela 2 – Síntese dos parâmetros da RSL | 29 |
| Tabela 3 – Rol de 30 artigos com maior quantidade de citações totais (TC) | 38 |
| Tabela 4 – Tipos de condições de contorno, onde ω corresponde à variável dependente, a constante, tal que $a \in R$, Γ é o contorno e n é o vetor normal em determinado ponto do contorno..... | 53 |
| Tabela 5 – Testes em modelos teóricos | 110 |
| Tabela 6 – Poços de observação aplicados na modelagem do estudo de caso | 112 |
| Tabela 7 – Condições de contorno do problema | 117 |
| Tabela 8 – Condições de contorno do problema | 121 |
| Tabela 9 – Valores máximos de <i>dvalue</i> para o domínio retangular | 123 |
| Tabela 10 – Condições de contorno do problema | 125 |
| Tabela 11 – Condições de contorno do problema | 128 |
| Tabela 12 – Valores máximos de <i>dvalue</i> para o domínio circular de raio unitário para os quais o limite de condicionamento 1,0E-15 é alcançado..... | 131 |
| Tabela 13 – Condições de contorno do problema | 132 |
| Tabela 14 – Decaimento de décadas do gráfico “rcond vs. dvalue” | 133 |
| Tabela 15 – Condições de contorno do problema | 135 |
| Tabela 16– Condições de contorno do problema | 139 |
| Tabela 17 – Decaimento de décadas do gráfico | 139 |
| Tabela 18 – Condições de contorno do problema | 142 |
| Tabela 19 – Decaimento de décadas do gráfico | 143 |
| Tabela 20– Condições de contorno do problema | 146 |
| Tabela 21 – Condições de contorno do problema | 150 |
| Tabela 22 – Condições de contorno do problema | 153 |
| Tabela 23 – Condições de contorno do problema | 156 |
| Tabela 24 – Síntese dos resultados dos testes em modelos teóricos | 159 |
| Tabela 25 – Decaimento de décadas do gráfico <i>rcond</i> vs. <i>dvalue</i> | 165 |
| Tabela 26 – Resultados numéricos obtidos através da metodologia proposta aplicada aos estudos de caso | 168 |

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

| | |
|----------|--|
| APA | Área de Proteção Ambiental |
| ArcGIS | <i>Arc Geographic Information System</i> (software de SIG) |
| BEM | <i>Boundary Element Method</i> (Método dos Elementos de Contorno) |
| DEM | <i>Discrete Element Method</i> (Método dos Elementos Discretos) |
| EDO | Equação Diferencial Ordinária |
| EDP | Equação Diferencial Parcial |
| MDF | Método das Diferenças Finitas |
| MEF | Método dos Elementos Finitos |
| MFS | <i>Method of Fundamental Solutions</i> (equivalente a MSF) |
| MODFLOW | <i>Modular Finite-Difference Flow Model</i> (modelo numérico de fluxo subterrâneo) |
| MSF | Método das Soluções Fundamentais |
| MVC | <i>Model–View–Controller</i> (padrão de arquitetura de software) |
| NMFS | <i>Non-Singular Method of Fundamental Solutions</i> |
| RBF | <i>Radial Basis Function</i> (Função de Base Radial) |
| RKPM | <i>Reproducing Kernel Particle Method</i> |
| SBM | <i>Singular Boundary Method</i> |
| SIG | Sistema de Informações Geográficas |
| SPH | <i>Smoothed Particle Hydrodynamics</i> (Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas) |
| TOPODATA | Base de dados TopoData (modelo digital de elevação) |
| UFC | Universidade Federal do Ceará |
| USGS | <i>United States Geological Survey</i> (referência associada ao MODFLOW) |

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|---|--|
| \mathcal{R} | Conjunto dos números reais (ad.) |
| \mathcal{R}^n | Espaço euclidiano n-dimensional (ad.) |
| x_i | Variável independente de uma função |
| $f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n)$ | Valor de uma função definida por n variáveis |
| A | Coefficiente dos termos de uma EDP |
| B | Coefficiente dos termos de uma EDP |
| C | Coefficiente dos termos de uma EDP |
| D | Coefficiente dos termos de uma EDP |
| E | Coefficiente dos termos de uma EDP |
| F | Coefficiente dos termos de uma EDP |
| G | Coefficiente dos termos de uma EDP |
| u | Solução analítica de uma Equação Diferencial |
| $y^{[i]}$, $\partial^{[i]}y/\partial x^{[i]}$ | Derivada de ordem i com relação à variável x |
| $\nabla^2 u$ | Operador Laplaciano aplicado à função u |
| t | Variável tempo (s) |
| φ | Carga hidráulica (m) |
| Γ | Fronteira de um domínio de análise |
| \tilde{u} | Solução aproximada/numérica |
| λ | Constantes do Método das Soluções Fundamentais |
| Ar | Área (m ²) |
| n | Porosidade |
| e | Índice de vazios |
| b | Espessura da camada (m) |
| S_γ | Produção específica |
| S_s | Armazenamento específico (m ⁻¹) |
| v | Vetor velocidade (m/s) |

SUMÁRIO

| | | |
|------------|---|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 17 |
| 1.1 | Contextualização..... | 17 |
| 1.2 | Problemática | 18 |
| 1.3 | Proposta e hipótese | 19 |
| 1.4 | Justificativa | 20 |
| 1.5 | Objetivos..... | 21 |
| 1.5.1 | Objetivo geral | 21 |
| 1.5.2 | Objetivos específicos | 21 |
| 2 | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA | 22 |
| 2.1 | Introdução | 22 |
| 2.2 | Metodologia | 22 |
| 2.2.1 | Definições e parâmetros adotados | 25 |
| 2.3 | Resultados e discussão..... | 32 |
| 2.3.1 | Fluxograma PRISMA | 32 |
| 2.3.2 | Bibliometria com o VOSviewer | 34 |
| 2.3.3 | Avaliação integrada do portfólio de artigos incluídos e análise bibliométrica.... | 37 |
| 2.4 | Conclusões | 41 |
| 3 | FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA..... | 45 |
| 3.1 | Equações diferenciais | 45 |
| 3.1.1 | Equações Diferenciais Parciais..... | 49 |
| 3.1.2 | Condições de contorno | 52 |
| 3.2 | Métodos numéricos..... | 54 |
| 3.2.1 | Métodos com malha..... | 58 |
| 3.2.2 | Métodos livres de malha | 64 |
| 3.3 | Método das Soluções Fundamentais | 67 |
| 3.3.1 | Solução Fundamental..... | 72 |
| 3.3.2 | Inomogeneidades e alternativas da literatura..... | 75 |
| 3.4 | Modelagem do fluxo de água subterrâneo..... | 75 |
| 3.4.1 | Lei de Darcy | 76 |
| 3.4.2 | Simplificação de Dupuit-Forchheimer | 77 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 3.4.3 | Equação da continuidade | 78 |
| 3.4.4 | Aquíferos sedimentares | 79 |
| 3.5 | Histórico de implementação computacional do método das Soluções Fundamentais..... | 82 |
| 4 | METODOLOGIA..... | 85 |
| 4.1 | Detalhamento da metodologia proposta | 85 |
| 4.1.1 | Fronteira fictícia em formato circular..... | 89 |
| 4.1.2 | Métrica RMSE..... | 94 |
| 4.1.3 | Inverso do número de condicionamento (<i>rcond</i>)..... | 95 |
| 4.1.4 | Critério de convergência..... | 96 |
| 4.1.5 | Fluxograma da metodologia proposta | 97 |
| 4.1.6 | Hipóteses adotadas..... | 102 |
| 4.1.7 | Comportamento esperado dos gráficos e interpretação das curvas | 104 |
| 4.2 | Definição dos problemas teóricos simulados..... | 108 |
| 4.3 | Delimitação do estudo de caso | 111 |
| 4.3.1 | Condições de contorno e hipóteses adotadas no estudo de caso | 113 |
| 5 | RESULTADOS E DISCUSSÃO..... | 116 |
| 5.1 | Resultados para os domínios unitários | 116 |
| 5.1.1 | Solução analítica polinomial $u(x,y) = x^2 - y^2$ | 117 |
| 5.1.2 | Solução analítica exponencial $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ | 138 |
| 5.1.3 | Síntese e discussão global dos resultados dos exemplos teóricos | 159 |
| 5.2 | Resultado para o estudo de caso..... | 162 |
| 5.2.1 | Síntese e discussão dos resultados..... | 167 |
| 5.3 | Discussão sobre aplicabilidade da metodologia proposta | 171 |
| 5.3.1 | Hipótese testada | 171 |
| 5.3.2 | Metodologia proposta | 171 |
| 5.3.3 | Resultados observados..... | 172 |
| 5.3.4 | Critérios de aplicabilidade | 173 |
| 5.3.5 | Pontos fortes, fracos e pontos de atenção | 174 |
| 5.3.6 | Critérios de avaliação dos gráficos | 174 |
| 5.3.7 | Síntese dos critérios e encaminhamento conclusivo..... | 175 |
| 6 | CONCLUSÕES..... | 177 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 6.1 | Recomendações para trabalhos futuros..... | 179 |
| | REFERÊNCIAS | 182 |

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização

O avanço da modelagem computacional em engenharia tem exigido estratégias numéricas capazes de lidar com domínios complexos e com forte heterogeneidade de propriedades, sem que o custo de pré-processamento (em especial, a geração de malhas) se torne um gargalo. Nesse contexto, métodos *meshless* (ou livres de malha) consolidaram-se como uma alternativa atrativa aos métodos clássicos baseados em discretizações estruturadas, sobretudo por reduzirem o esforço de geração de malhas ou elementos e por oferecerem flexibilidade geométrica em problemas governados por equações diferenciais parciais (Liu; Gu, 2005). Entre esses métodos, destaca-se o Método das Soluções Fundamentais (MSF), reconhecido como um método de contorno *meshless*, pois constrói aproximações numéricas diretamente a partir de soluções fundamentais do operador diferencial associado ao problema, evitando a discretização do domínio.

Historicamente, o MSF surgiu em contribuições pioneiras baseadas em equações funcionais e no uso de soluções fundamentais para a aproximação de problemas elípticos (Kupradze; Aleksidze, 1964), com consolidação posterior em formulações numéricas para problemas de contorno (Mathon; Johnston, 1977) e na formalização do método em problemas elípticos (Bogomolny, 1985). Trabalhos de síntese e referência contribuíram para disseminar o MSF como um procedimento prático de implementação, com bons níveis de acurácia e desempenho competitivo em problemas adequados ao seu arcabouço teórico, sobretudo em domínios analíticos e condições de contorno bem definidas (Fairweather; Karageorghis, 1998; Barnett; Betcke, 2008; Cheng; Hong, 2020). Do ponto de vista operacional, a atratividade do MSF decorre de (i) dispensar malhas internas, (ii) permitir discretizações por conjuntos de pontos, e (iii) viabilizar aproximações com boa convergência em configurações onde as hipóteses do operador e das condições de contorno se mantêm coerentes (Cheng; Hong, 2020).

Nas últimas duas décadas, o MSF recebeu contribuições que podem ser agrupadas em dois eixos complementares. No eixo teórico-metodológico, proliferaram estudos voltados à estabilidade numérica, ao mal-condicionamento e à escolha de pontos-fonte, com foco na robustez da matriz do sistema e na sensibilidade a parâmetros geométricos do método (Ramachandran, 2002; Chen; Cho; Golberg, 2006; Chen; Karageorghis; Li, 2016; Liu, 2012; Zhang *et al.*, 2022). Em paralelo, no eixo aplicado, o MSF foi explorado em diferentes classes de problemas físicos e de engenharia, incluindo transferência de calor, acústica e hidromecânica, frequentemente em configurações que permitem validação contra soluções de

referência ou medições em cenários controlados (Chantasiriwan, 2005; Fu; Chen; Gu, 2014; Wang; Zheng, 2015; Rodrigues Neto *et al.*, 2020). Essa dupla trajetória evidencia que o método evoluiu tanto na compreensão de suas propriedades numéricas quanto na ampliação de seu repertório de aplicações.

1.2 Problemática

A presente tese restringe a discussão do MSF a problemas governados pelo operador laplaciano, isto é, a problemas cuja variável de interesse é descrita por uma função harmônica. Esse recorte se justifica porque a Equação de Laplace surge como modelo canônico em sistemas naturais e físicos sob hipóteses de regime estacionário e ausência de fontes internas, incluindo (i) condução de calor em regime permanente, (ii) potenciais em escoamentos irrotacionais e incompressíveis, (iii) potenciais eletrostáticos e gravitacionais em regiões sem cargas/massas internas, e (iv) problemas hidrogeológicos em que a carga hidráulica pode ser aproximada por uma formulação harmônica em condições específicas (Carslaw; Jaeger, 1959; Evans, 2010; Bear, 1988; Freeze; Cherry, 1979; Fetter, 2018). Em particular, na hidrogeologia, modelos estacionários e simplificados, quando compatíveis com a escala e os dados disponíveis, tornam a Equação de Laplace um ponto de partida útil para diagnóstico preliminar e para testes de consistência entre condições de contorno e resposta do sistema (Bear, 1988; Freeze; Cherry, 1979).

Entretanto, ao aplicar o MSF a problemas governados pelo laplaciano, impõe-se uma condição estrutural do método, a necessidade de definir uma pseudo-fronteira (ou fronteira fictícia) para posicionar os pontos-fonte fora do domínio físico. Essa exigência decorre do caráter singular da solução fundamental do operador laplaciano, que se torna indefinida quando ponto de colocação e ponto-fonte coincidem, gerando degenerescências matemáticas e instabilidades numéricas. Assim, o MSF separa geometricamente o conjunto de pontos de colocação (no contorno físico) do conjunto de pontos-fonte (no exterior), de modo a preservar a consistência analítica da solução fundamental e permitir a montagem do sistema linear (Bogomolny, 1985; Fairweather; Karageorghis, 1998; Cheng; Hong, 2020).

A definição dessa pseudo-fronteira, contudo, não é neutra. Sua geometria e seu afastamento em relação ao contorno real influenciam simultaneamente a acurácia e o condicionamento do sistema. A literatura registra investigações sobre a escolha de localizações satisfatórias para os pontos-fonte e sobre critérios de estabilidade associados ao deslocamento/forma da fronteira fictícia, mostrando que configurações “próximas demais”

(entre a fronteira real e fictícia) podem amplificar o mal-condicionamento, enquanto configurações “distantes demais” podem degradar a qualidade da aproximação por perda de resolução efetiva (Liu, 2012; Chen; Karageorghis; Li, 2016; Zhang *et al.*, 2022). Também há propostas que buscam contornar a dependência explícita de uma fronteira fictícia, indicando que o tema permanece relevante e não totalmente estabilizado do ponto de vista metodológico (Chen; Wang, 2010).

Apesar desses avanços, a evidência reunida na revisão sistemática desta tese aponta que uma parcela expressiva dos estudos ainda se apoia em casos específicos e altamente estruturados, frequentemente calibrando a pseudo-fronteira e os parâmetros do método para geometrias controladas, dados de contorno prescritos e cenários de validação teórica. Esse padrão se reflete tanto em trabalhos centrados no diagnóstico de mal-condicionamento e na análise espectral do sistema (Ramachandran, 2002; Chen; Cho; Golberg, 2006) quanto em estudos que investigam condições de contorno especiais e estratégias numéricas localizadas para classes de problemas harmônicos e inversos (Young *et al.*, 2008; Li; Chen; Karageorghis, 2013; Wang *et al.*, 2020; Zhang *et al.*, 2022). Em consequência, embora o MSF seja reconhecido como promissor em problemas regidos pelo operador laplaciano, persiste uma lacuna na forma de protocolos generalizados e reprodutíveis para orientar sua aplicação, sobretudo quando o objetivo é transitar de testes teóricos para modelagem de sistemas naturais com dados reais e incertezas associadas.

1.3 Proposta e hipótese

Diante desse cenário, esta tese propôs uma metodologia generalizada para aplicação do MSF homogêneo em problemas bidimensionais governados pelo operador laplaciano, contemplando: (i) definição sistemática de pseudo-fronteira (geometria e afastamento) e (ii) avaliação conjunta de desempenho por medidas de acurácia e de estabilidade/condicionamento, de modo a orientar escolhas paramétricas com reprodutibilidade. A metodologia foi avaliada tanto em problemas estruturados com solução de referência quanto em um estudo de caso de aplicação hidrogeológica, buscando explicitar limites, potencialidades e condições de uso.

A hipótese testada foi a de que metodologia proposta permite aplicar o Método das Soluções Fundamentais (MSF) de forma reprodutível e generalizável a problemas bidimensionais regidos pela Equação de Laplace, incluindo casos teóricos com solução de referência e um estudo de caso com dados reais, identificando uma faixa operacional de afastamento de uma pseudo-fronteira circular na qual coexistem estabilidade numérica,

tendência de convergência sob refinamento e acurácia aceitável segundo métricas objetivas. Adicionalmente, quando a coexistência desses critérios não é observada mesmo sob configurações numericamente estáveis, a metodologia permite interpretar a discrepância como evidência de inadequação das hipóteses de modelagem adotadas, viabilizando um diagnóstico inicial sobre a representatividade do modelo físico frente ao sistema analisado.

1.4 Justificativa

A generalização de metodologias é frequentemente interpretada como um indicador de maturidade científica. Quando um método passa a dispor de regras operacionais claras (definições geométricas, critérios numéricos e medidas de desempenho), sua aplicação tende a tornar-se mais reprodutível, comparável e transferível entre contextos. No caso do MSF, revisões e estudos de aplicabilidade reconhecem tanto seu potencial quanto a importância de escolhas numéricas bem fundamentadas, especialmente no que se refere à robustez e à estabilidade do sistema linear resultante (Drombosky; Meyer; Ling, 2009; Cheng; Hong, 2020). Assim, uma metodologia de aplicação generalizada, mesmo que em uma primeira instância, pode contribuir para reduzir a dependência de ajustes ad hoc e para facilitar a adoção do método por pesquisadores e profissionais em diferentes problemas governados pelo operador laplaciano.

Essa necessidade é particularmente sensível na modelagem hidrogeológica, em que dados de contorno são frequentemente incompletos, a geometria do domínio pode ser irregular e o objetivo prático não se limita a reproduzir um cenário teórico, mas a produzir diagnósticos confiáveis e úteis à tomada de decisão. Como a hidrogeologia dispõe de modelos clássicos e consolidados para escoamento subterrâneo, uma metodologia generalizada do MSF aplicada ao laplaciano pode funcionar como ferramenta complementar. Quando bem-sucedida, oferece uma solução rápida e de implementação simples; quando falha sob dados verificados, pode sinalizar incompatibilidades entre hipóteses harmônicas e o comportamento do sistema, ajudando a justificar a adoção de modelos mais complexos (Bear, 1988; Freeze; Cherry, 1979; Wang; Zheng, 2015; Rodrigues Neto *et al.*, 2020).

1.5 Objetivos

1.5.1 Objetivo geral

Propor e testar a aplicação de uma metodologia padronizada para aplicar o MSF em problemas governados pelo operador de Laplace, conciliando acurácia, convergência e estabilidade numérica.

1.5.2 Objetivos específicos

- a. Definir um fluxo de aplicação do MSF baseado em métricas complementares (RMSE, $rcond$ e verificação pontual no domínio);
- b. Sistematizar a varredura do parâmetro que controla a distância das fontes (raio da fronteira fictícia) e mapear as faixas operacionais;
- c. Comparar desempenho entre geometrias (circular/retangular) e tamanhos de discretização de contorno;
- d. Discutir efeitos de condicionamento e estratégias de mitigação;
- e. Exemplificar a aplicabilidade em um estudo de caso de modelagem de fluxo de água subterrânea.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Introdução

A revisão bibliográfica ocupa papel central na pesquisa científica, por permitir identificar, organizar e avaliar criticamente o conhecimento já produzido sobre determinado tema, bem como localizar lacunas que justificam novos esforços de investigação. No caso específico das Revisões Sistemáticas da Literatura (RSL), não se trata apenas de uma etapa preliminar de um trabalho, mas de uma modalidade de pesquisa que segue protocolos específicos e busca conferir lógica e coerência a um grande corpus documental, desde a delimitação da questão de pesquisa até a sistematização e divulgação dos resultados (Galvão; Ricarte, 2019). Nesse sentido, dedicar um capítulo exclusivo à revisão sistemática de literatura nesta tese permitiu explicitar de forma estruturada o estado da arte em modelagem numérica associada ao Método das Soluções Fundamentais (MSF), situando claramente a contribuição do estudo desenvolvido.

A revisão conduzida neste capítulo teve caráter complementar em relação aos objetivos centrais da tese. Seu propósito principal foi mapear o estado da arte sobre o uso de métodos numéricos sem malha, em particular o Método das Soluções Fundamentais (MSF), na modelagem de problemas elípticos e de fluxo subterrâneo, de modo a evidenciar lacunas de pesquisa e enquadrar a relevância científica da investigação proposta. Do ponto de vista conceitual, esta revisão seguiu a perspectiva das RSL, a de que ela constitui um estudo em si, com problema, procedimentos e resultados claramente definidos (Galvão; Ricarte, 2019), mas, no contexto desta tese, foi utilizada como subsídio para situar as contribuições propostas e não como objetivo principal do trabalho. Nesse sentido, esta revisão foi apresentada com a estrutura de estudo científico completo, com introdução, metodologia, resultados e discussão e conclusão. Suficiente para expor o objetivo concebido inicialmente de situar a proposta da tese no âmbito do estado da arte dos tópicos centrais da investigação científica conduzida nos capítulos seguintes.

2.2 Metodologia

No delineamento metodológico adotado, combinaram-se três referências centrais: (i) o roteiro em passos para elaboração de revisões sistemáticas proposto por Galvão e Pereira (2014), que orienta a formulação da pergunta, a busca, a seleção, a extração e a síntese de dados; (ii) as recomendações do protocolo PRISMA (*Preferred Reporting Items for Systematic*

Reviews and Meta-Analyses) para organização e relato transparente do fluxo de seleção dos estudos (Moher *et al.*, 2010); e (iii) o processo ProKnow-C (*Knowledge Development Process – Constructivist*), desenvolvido por Ensslin e colaboradores, utilizado aqui como método estruturante para a seleção do portfólio bibliográfico e para a análise bibliométrica e sistêmica dos estudos (Ensslin *et al.*, 2015; Afonso *et al.*, 2011). Adicionalmente, empregou-se o software VOSviewer como ferramenta de apoio para a construção e visualização de mapas bibliométricos (Van Eck; Walt Man, 2010; Vosviewer, 2025).

A revisão foi planejada como uma revisão sistemática com análise bibliométrica, orientada por pergunta norteadora formulada a partir de descritores relacionados à modelagem de fluxo subterrâneo, métodos numéricos sem malha e Método das Soluções Fundamentais. Em linha com Galvão e Pereira (2014), definiram-se previamente: (i) pergunta norteadora, (ii) o escopo temático da revisão (inclusive as palavras-chave e demais descritores), (iii) o período de interesse, (iv) os tipos de documentos elegíveis (artigos em periódicos), e (v) os idiomas considerados. Em seguida, estruturaram-se as etapas de identificação, triagem, elegibilidade e inclusão conforme o fluxograma PRISMA (Moher *et al.*, 2010), as quais foram detalhadas nas subseções seguintes.

A seleção do portfólio bibliográfico seguiu as macroetapas do ProKnow-C (Ensslin *et al.*, 2015; Afonso *et al.*, 2011), adaptadas ao contexto da presente pesquisa. Inicialmente, realizaram-se buscas em bases de dados científicas selecionadas (por exemplo, Scopus, Web of Science e outras bases relevantes), por meio de combinações de palavras-chave e descritores em títulos, resumos e palavras-chave. O resultado desta etapa foi um banco bruto de publicações, composto por todos os registros recuperados nas buscas.

Na sequência, procedeu-se à remoção de duplicatas entre bases, originando um conjunto de publicações únicas. Essa remoção de duplicatas foi realizada com o auxílio de linguagem de programação R através da função “*mergeDbSources*” da biblioteca “*bibliometrix*” (Versão 5.2.1.). Sobre esse conjunto, aplicaram-se filtros sucessivos de alinhamento ao tema: (i) leitura dos títulos para exclusão de trabalhos claramente não relacionados e (ii) leitura dos resumos para verificar aderência ao escopo da revisão (modelagem de problemas elípticos, fluxo subterrâneo e/ou aplicação de métodos sem malha, com ênfase em MSF). Em consonância com o ProKnow-C, também foram considerados critérios de reconhecimento científico, tais como o tipo de periódico e o parâmetro TC (*Total Citations*), que representa o número total que determinado artigo foi citado por outros pesquisadores (Ensslin *et al.*, 2015).

Ao final desse processo iterativo, obteve-se o portfólio bibliográfico da revisão, composto pelos estudos que atenderam simultaneamente aos critérios temáticos, formais e

metodológicos definidos. O fluxo de identificação, exclusão e inclusão dos estudos é apresentado no capítulo por meio de um fluxograma no formato PRISMA, permitindo transparência na descrição do processo (Moher *et al.*, 2010).

Uma vez definido o portfólio bibliográfico, procedeu-se à extração padronizada de dados, em planilha eletrônica, contemplando, entre outros campos, ano de publicação, autores, afiliação institucional, país, periódico, tipo de problema modelado (por exemplo, equação de Laplace, problemas de Poisson, fluxo subterrâneo estacionário ou transiente), método numérico empregado (MSF, outros métodos sem malha, BEM, FEM) e principais características metodológicas. Com base nesses dados, realizou-se a análise bibliométrica utilizando o software VOSviewer (Van Eck; Waltman, 2010; Vosviewer, 2025). Os arquivos de saída das bases de dados foram importados para o VOSviewer, permitindo a construção de:

- a. mapas de coautoria (entre autores, instituições e países);
- b. mapas de coocorrência de termos e palavras-chave (títulos, resumos e *keywords* dos estudos selecionados).

Para cada tipo de análise, foram definidos parâmetros como unidade de análise (autor, periódico, palavra-chave), tipo de contagem (completa ou fracionária) e número mínimo de ocorrências ou citações, seguindo recomendações da literatura de mapeamento bibliométrico (Van Eck; Waltman, 2010). Os resultados desses mapas foram apresentados e discutidos em seção específica, contribuindo para a identificação de *clusters* temáticos, grupos de pesquisa e linhas dominantes na literatura sobre MSF e modelagem de fluxo subterrâneo.

No planejamento da revisão, foram consideradas metodologias alternativas de seleção e ranqueamento de publicações, em particular a *Methodi Ordinatio*, proposta por Pagani, Kovaleski e Resende (2015), que combina etapas inspiradas no ProKnow-C com um índice de ordenação (InOrdinatio) baseado em fator de impacto, número de citações e ano de publicação. Embora reconhecida como abordagem robusta para priorizar artigos em termos de relevância bibliométrica, optou-se por não adotar a *Methodi Ordinatio* como método central desta revisão, uma vez que o objetivo aqui não foi construir um *ranking* detalhado dos estudos, mas sim mapear o campo, identificar lacunas temáticas e contextualizar a pesquisa da tese no estado da arte. Assim, considerou-se mais adequado utilizar o ProKnow-C como estrutura principal de seleção e análise, associado à análise bibliométrica com VOSviewer, o que se mostrou suficiente para os propósitos deste capítulo.

2.2.1 Definições e parâmetros adotados

Para garantir a transparência e a reprodutibilidade da revisão sistemática com análise bibliométrica, foram explicitadas as decisões relativas à pergunta norteadora, ao escopo temático, período de interesse, tipos de documentos elegíveis, bases de dados consultadas e idiomas considerados, conforme recomendam Galvão e Pereira (2014) e demais guias metodológicos de RSL (Galvão; Pereira, 2014; Galvão; Ricarte, 2019).

A pergunta norteadora foi definida da seguinte forma: Como o Método das Soluções Fundamentais e métodos numéricos livres de malha relacionados vêm sendo formulados e aplicados na solução numérica de problemas de valor de contorno governados pelo operador de Laplace e outras equações elípticas em engenharia, com destaque para aplicações em fluxo subterrâneo e meios porosos, com ênfase em aspectos de acurácia, convergência e estabilidade numérica?

Essa pergunta explicita o fenômeno de interesse (problemas de valor de contorno elípticos), a intervenção/método (MSF e métodos *meshless* correlatos), o desfecho conceitual (acurácia, convergência e estabilidade numérica) e o tipo de estudo (aplicações e desenvolvimentos numéricos em engenharia). Ao mesmo tempo, ela é suficientemente ampla para abarcar não apenas estudos diretamente voltados à modelagem de aquíferos, mas também contribuições metodológicas mais gerais sobre o MSF e outros métodos sem malha aplicados a problemas governados pelo operador de Laplace ou por equações elípticas análogas, permitindo, portanto, o mapeamento do estado da arte de aplicação dessas técnicas numéricas. A pergunta mantém também coerência direta com o objetivo central da tese ao enfatizar as dimensões de formulação (como o MSF é construído nos estudos), de aplicação (quais tipos de problemas elípticos e cenários físicos são considerados) e de desempenho numérico (estratégias para lidar com acurácia, convergência e estabilidade).

No que se refere ao escopo temático, a revisão concentrou-se em estudos que tratam da modelagem numérica de problemas elípticos e típicos de escoamento subterrâneo e em meios porosos (como equações de Laplace e Poisson), com ênfase em métodos numéricos *meshless* e, em particular, no Método das Soluções Fundamentais (MSF), incluindo aplicações diretas em hidrogeologia e contribuições metodológicas de caráter mais geral, desde que explicitamente associadas a problemas de fronteira compatíveis com a modelagem de aquíferos. Assim, foram utilizadas combinações de descritores em português e inglês como “método das soluções fundamentais”, “*method of fundamental solutions*”, “*métodos meshless*”, “*meshfree methods*”, “fluxo subterrâneo”, “*groundwater flow*”, “*aquífer*” e “*elliptic boundary value*”

problems”, selecionados a partir de descritores recorrentes em revisões e estudos de modelagem por métodos *meshless* e em aplicações do MSF a problemas de fluxo em meios porosos (Sindhusuta *et al.*, 2021; Rodrigues Neto *et al.*, 2020). A Tabela 1 ilustrou o conjunto de *strings* de entrada para a pesquisa nos bancos de dados.

Tabela 1 – *Strings* de pesquisa avançada utilizadas em cada base

| Base | String (QUERY) |
|-----------------------------------|--|
| Scopus | TITLE-ABS-KEY(("method of fundamental solutions" OR "fundamental solution method*" OR "método das soluções fundamentais" OR "metodo das solucoes fundamentais") AND ("groundwater" OR "aquifer*" OR "aquifero*" OR "subsurface flow" OR "flow in porous media" OR "groundwater flow")) |
| | TITLE-ABS-KEY(("method of fundamental solutions" OR "fundamental solution method*" OR "método das soluções fundamentais" OR "metodo das solucoes fundamentais") AND ("Laplace equation" OR "Poisson equation" OR "elliptic boundary value problem*" OR "potential flow" OR "steady-state flow")) |
| | TITLE-ABS-KEY(("meshless" OR "meshfree" OR "mesh-free" OR "meshless method*" OR "meshfree method*") AND ("groundwater" OR "aquifer*" OR "aquifero*" OR "subsurface flow" OR "flow in porous media")) |
| Web of Science Core Collection | TS=("method of fundamental solutions" OR "fundamental solution method*" OR "método das soluções fundamentais" OR "metodo das solucoes fundamentais") AND ("groundwater" OR "aquifer*" OR "aquifero*" OR "subsurface flow" OR "flow in porous media" OR "groundwater flow")) |
| | TS=("method of fundamental solutions" OR "fundamental solution method*" OR "método das soluções fundamentais" OR "metodo das solucoes fundamentais") AND ("Laplace equation" OR "Poisson equation" OR "elliptic boundary value problem*" OR "potential flow" OR "steady-state flow")) |
| | TS=(("meshless" OR "meshfree" OR "mesh-free" OR "meshless method*" OR "meshfree method*") AND ("groundwater" OR "aquifer*" OR "aquifero*" OR "subsurface flow" OR "flow in porous media")) |
| SciELO | ("método das soluções fundamentais" OR "metodo das solucoes fundamentais") AND ("escoamento subterrâneo" OR "escoamento subterraneo" OR "fluxo subterrâneo" OR "fluxo subterraneo" OR "aquifero" OR "aquifero") ("método sem malha" OR "métodos sem malha" OR "método meshless" OR "método meshfree" OR "metodo sem malha" OR "metodos sem malha") AND ("escoamento subterrâneo" OR "escoamento subterraneo" OR "fluxo subterrâneo" OR "fluxo subterraneo" OR "aquifero" OR "aquifero") |

Fonte: O Autor

O período de interesse foi definido entre 2000 e 2024. Esse recorte temporal buscou, por um lado, incorporar a fase de consolidação e difusão dos métodos *meshless* em modelagem numérica, que ganhou proeminência na virada dos anos 2000, e, por outro, captar a produção recente associada à aplicação do MSF e de métodos sem malha à hidrogeologia e a problemas elípticos em geral. Estudos bibliométricos em recursos hídricos e em modelagem numérica de águas subterrâneas frequentemente adotam janelas temporais de 20 a 30 anos, com recortes como 1990–2020 ou 2000–2024, exatamente para permitir a identificação de tendências, consolidação de linhas de pesquisa e frentes de pesquisa emergentes (Sindhusuta *et al.*, 2021; De Souza, 2021; Xiang *et al.*, 2025; Muñoz-Alegría *et al.*, 2025). Nesse contexto, a escolha do intervalo 2000–2024 equilibra abrangência histórica e atualidade, sendo coerente com o horizonte temporal de desenvolvimento da tese e com a evolução recente dos métodos *meshless* aplicados a problemas práticos de engenharia.

Quanto aos tipos de documentos elegíveis, optou-se por incluir exclusivamente artigos científicos publicados em periódicos com revisão por pares, excluindo teses, dissertações e demais tipos de literatura cinzenta. Tal decisão buscou assegurar maior homogeneidade quanto ao processo de avaliação científica, uma vez que periódicos indexados em bases internacionais tendem a seguir rotinas editoriais padronizadas e critérios explícitos de qualidade metodológica. Além disso, parte significativa dos resultados de teses e dissertações tende a ser posteriormente condensada em artigos de periódicos, de modo que a inclusão simultânea de ambos pode gerar redundância na análise bibliométrica (Hartling *et al.*, 2017).

Diretrizes clássicas de revisões sistemáticas, como o Cochrane Handbook, reconhecem que a busca em literatura cinzenta (incluindo teses e dissertações) é desejável para reduzir viés de publicação, mas também destacam que tais buscas são mais custosas, nem sempre agregam um número significativo de estudos e podem ser restringidas quando o objetivo central é mapear a produção consolidada em periódicos e quando as limitações de tempo e escopo são explicitamente justificadas (Higgins; Green, 2008). Assim, a restrição a artigos de periódicos é coerente com a natureza bibliométrica do estudo, com a abordagem ProKnow-C de construção de um portfólio representativo de artigos e com os limites operacionais do presente capítulo.

Uma vez que a RSL foi modelada para permitir mapear o estado da arte da aplicação do MSF e correlatos em problemas de engenharia, não foram adotados critérios de elegibilidade que excluíssem trabalhos que explorassem aspectos puramente matemáticos ou de aplicação teórica. Nesse sentido, todos os artigos selecionados após a identificação e a triagem foram considerados elegíveis, pois trouxeram cada um alguma contribuição para responder à pergunta norteadora e contribuir com o estado da arte do escopo temático.

Para a identificação dos estudos, foram selecionadas como bases de dados principais a Scopus (Elsevier), a *Web of Science Core Collection (Clarivate Analytics)* e a SciELO, por combinarem ampla cobertura temática nas áreas de engenharia, recursos hídricos e ciências ambientais com funcionalidades avançadas de busca e exportação de referências compatíveis com ferramentas de análise bibliométrica e de mapeamento científico, como o VOSviewer. Comparações sistemáticas de sistemas de busca acadêmica indicam que Scopus e *Web of Science* estão entre as bases de maior cobertura e melhor desempenho para revisões sistemáticas e meta-análises, especialmente quando se considera a recuperação de registros em ciências naturais e de engenharia (Gusenbauer; Haddway, 2020; Gusenbauer, 2022). A inclusão da SciELO justifica-se pela relevância dessa base na indexação de periódicos ibero-americanos, em particular brasileiros, na área de recursos hídricos e meio ambiente, minimizando o risco de sub-representação da produção nacional não indexada em bases comerciais internacionais (Menghini; Packer, 2007). A busca em múltiplas bases reduz o viés de indexação e está alinhada com recomendações recentes para revisões sistemáticas e revisões bibliométricas.

Quanto aos idiomas considerados, foram incluídos estudos publicados em português e inglês. A inclusão do inglês é necessária, uma vez que a literatura indica que mais de 90% das publicações em ciências naturais são veiculadas nesse idioma, o que o consolida como língua franca da comunicação científica internacional (Gordin, 2015; Dobrescu *et al.*, 2021). A inclusão do português, por sua vez, busca captar a produção nacional sobre modelagem de escoamento subterrâneo e aplicação de métodos *meshless* em modelagem numérica, frequentemente voltada para problemas locais e publicada em periódicos brasileiros indexados em bases regionais e/ou na SciELO, cuja visibilidade internacional ainda é menor quando comparada aos grandes indexadores (Menghini; Packer, 2007). Ao mesmo tempo em que se reconhece o potencial viés de idioma quando se restringe a poucos idiomas, a combinação português–inglês proporciona, neste caso, um equilíbrio pragmático entre amplitude de cobertura (literatura internacional) e foco contextual (literatura brasileira relevante para recursos hídricos e modelagem numérica), em consonância com o objetivo desta tese de situar a pesquisa proposta simultaneamente no cenário global e no contexto nacional.

Para fins de síntese e transparência metodológica, a Tabela 2 apresentou de forma resumida os principais parâmetros adotados na revisão sistemática da literatura — escopo temático, pergunta norteadora, período de interesse, tipos de documentos, bases de dados e idiomas — tal como definidos e justificados anteriormente, em consonância com as recomendações de Galvão e Pereira (2014), Galvão e Ricarte (2019), do protocolo PRISMA e do processo ProKnow-C. As Figura 2, Figura 3 e Figura 4 ilustraram as interfaces de pesquisa

avançada de cada uma das bases selecionadas, cujo acesso só foi possível em virtude do cadastramento da instituição Universidade Federal do Ceará ao Portal de Periódicos da CAPES através da plataforma CAFe (Comunidade Acadêmica Federada) (Figura 1). O login foi realizado com as credenciais do autor desta tese.

Tabela 2 – Síntese dos parâmetros da RSL

| Parâmetro | Definição adotada | Justificativa |
|----------------------|---|--|
| Escopo temático | Modelagem numérica de problemas elípticos (Laplace/Poisson), com ênfase em métodos <i>meshless</i> e, em particular, no Método das Soluções Fundamentais (MSF), em aplicações de recursos hídricos e hidrogeologia. | Focaliza o recorte temático diretamente relacionado à tese, incluindo tanto aplicações em aquíferos quanto contribuições metodológicas gerais compatíveis com problemas de contorno típicos de modelagem numérica. |
| Pergunta norteadora | Como o Método das Soluções Fundamentais e métodos numéricos livres de malha relacionados vêm sendo formulados e aplicados na solução numérica de problemas de valor de contorno governados pelo operador de Laplace e outras equações elípticas em engenharia, com destaque para aplicações em fluxo subterrâneo e meios porosos, e quais estratégias têm sido adotadas para tratar aspectos de acurácia, convergência e estabilidade numérica? | Explicita o fenômeno de interesse (problemas de valor de contorno elípticos), a intervenção/método (MSF e métodos <i>meshless</i> correlatos), o desfecho conceitual (acurácia, convergência e estabilidade numérica) e o tipo de estudo (aplicações e desenvolvimentos numéricos em engenharia). Ao mesmo tempo, ela é suficientemente ampla para abarcar não apenas estudos diretamente voltados à modelagem de aquíferos, mas também contribuições metodológicas mais gerais sobre o MSF e outros métodos sem malha aplicados a problemas governados pelo operador de Laplace ou por equações elípticas análogas. |
| Período de interesse | 2000-2024 | Abrange a fase de consolidação e difusão dos métodos <i>meshless</i> em engenharia e captura a produção recente em MSF e modelagem de fluxo subterrâneo, em linha com janelas temporais de 20–30 anos adotadas em estudos bibliométricos similares. |
| Tipos de documentos | Artigos científicos publicados em periódicos com revisão por pares | Garante maior homogeneidade quanto ao crivo editorial e evita redundância com teses/dissertações, cujos principais resultados tendem a ser posteriormente condensados em artigos indexados. |
| Bases de dados | Scopus, Web of Science Core Collection e SciELO | <i>Scopus</i> e <i>Web of Science</i> oferecem ampla cobertura internacional em engenharia e ciências ambientais; SciELO complementa a visibilidade da produção ibero-americana, especialmente brasileira, reduzindo viés de indexação. |
| Idiomas considerados | Português e inglês | O inglês é a língua franca da literatura científica internacional, enquanto o português permite captar a produção nacional em recursos hídricos e hidrogeologia, proporcionando equilíbrio entre cobertura global e contexto brasileiro. |

Fonte: O Autor.

Figura 1 – Acesso ao Portal de Periódicos da CAPES através da plataforma CAFe

gov.br CAPES

Orgãos do Governo Acesso à Informação Legislação Acessibilidade Entrar

Portal de Periódicos da CAPES

Você está acessando esse portal por: UFC
Acesso CAFe

Acervo > Buscar assunto

Voltar

Compartilhe f X in

Ver no editor

Disponibilidade

BASE

Web of Science - Coleção Principal (Clarivate)

Clarivate Analytics; Linguagem: Não Identificado

Resumo

Base multidisciplinar que indexa somente os periódicos, conferências e livros mais citados em suas respectivas áreas. É também um índice de citações, informando, para cada trabalho, os documentos por ele citados e os documentos que o citaram. Possui hoje mais de 21.000 periódicos indexados. É composta por: ##Science Citation Index Expanded (SCI-EXPANDED): 1900 até o presente##Social Sciences Citation Index: 1900 até o presente##Arts and Humanities Citation Index: 1975 até o presente##Inclui também o Conference Proceedings Citation Index- Science (CPCI-S): Conference Proceedings Citation Index- Social Science & Humanities (CPCI-SSH) e o Book Citation Index, trazendo livros acadêmicos de todas as áreas desde 2005.

Fonte: O Autor

Figura 2 – Ilustração da interface de pesquisa avançada da base Scopus (Elsevier)

Search Sources Sc

Advanced query

```
TITLE-ABS-KEY (( "meshless" OR "meshfree" OR "mesh-free" OR "meshless method*" OR "meshfree method*" ) AND ( "groundwater" OR "aquifer*" OR "aquifero*" OR "subsurface flow" OR "flow in porous media" ) AND ( LIMIT-TO ( DOCTYPE, "ar" ) ) AND ( LIMIT-TO ( LANGUAGE, "English" ) )
```

Show less

Edit in advanced search

Documents Preprints Secondary documents

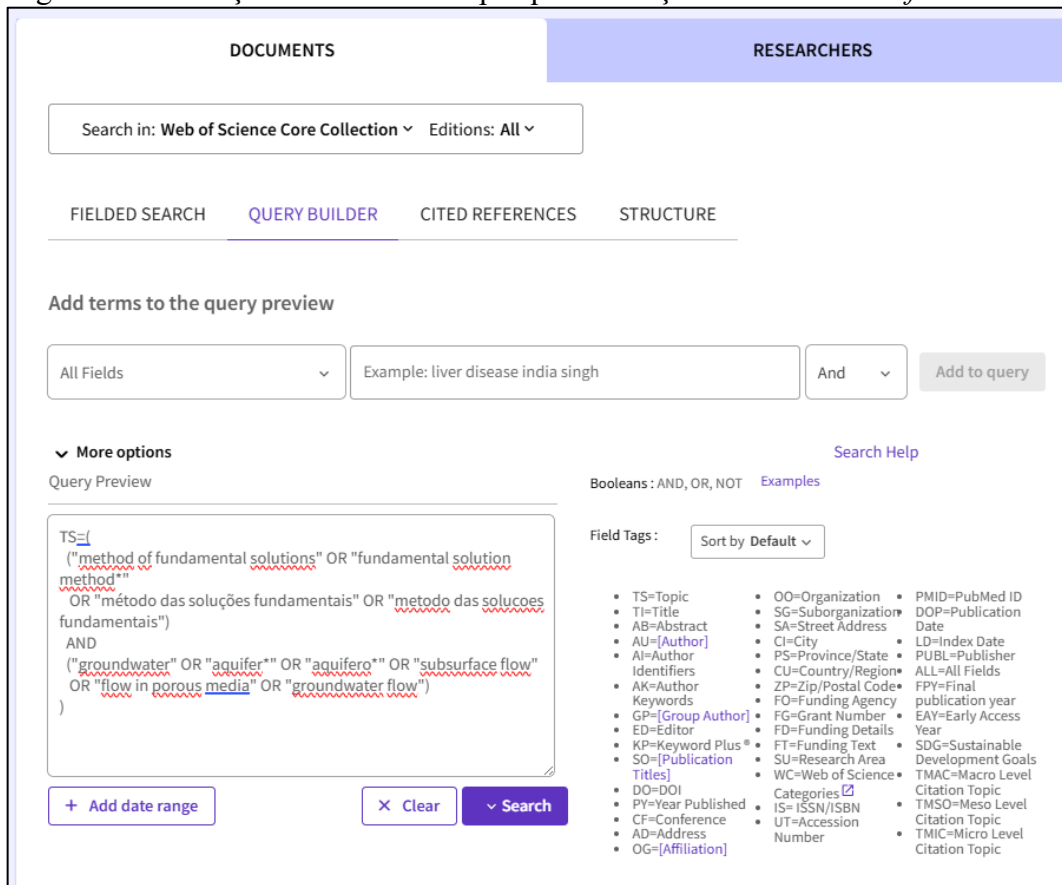
159 documents found Analyze results

All Export Download Citation overview More Show all abstracts Sort by Date (newest)

| Document title | Authors | Source | Year | Citations |
|--|---|---|------|-----------|
| 1 Article Development and real field application of meshless generalized finite difference method for unconfined groundwater flow modelling | Singh, K.G., Pathania, T. | Mathematics and Computers in Simulation, 240, pp. 332-346 | 2026 | 0 |
| 2 Article A computational framework for nonlinear multiphase flow in porous media using a meshfree method: numerical experiments and applications | Farkya, A., Himanshi, Dwivedi, G., Rana, A.S. | Journal of Engineering Mathematics, 155(1), 1 | 2025 | 0 |

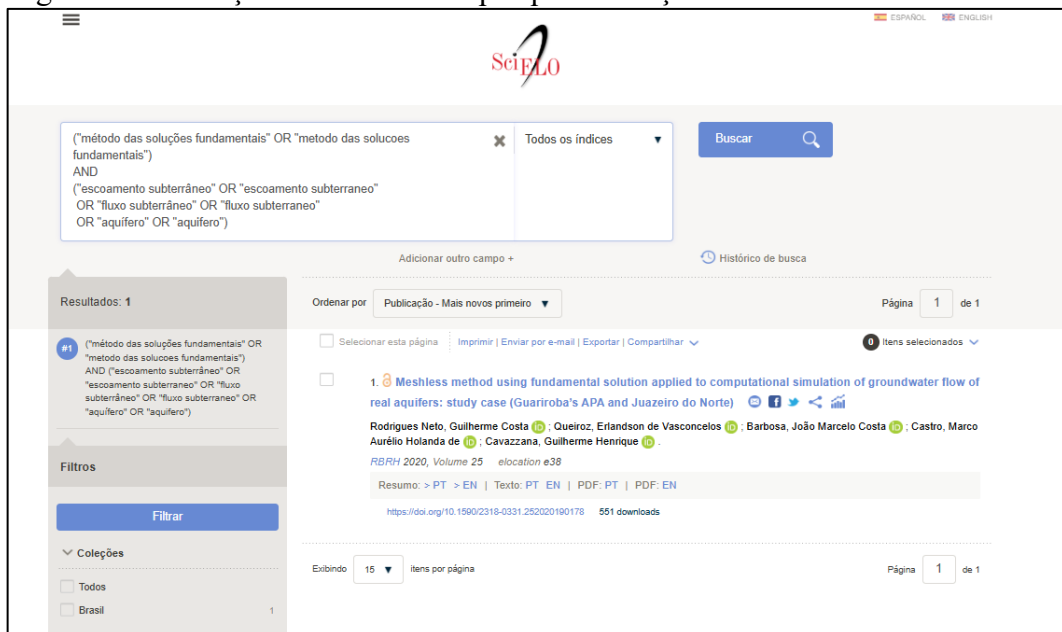
Fonte: O Autor

Figura 3 – Ilustração da interface de pesquisa avançada da base *Web of Science*



Fonte: O Autor

Figura 4 – Ilustração da interface de pesquisa avançada da base de dados *SciELO*



Fonte: O Autor

2.3 Resultados e discussão

Na presente seção foram apresentados os resultados da investigação bibliográfica conduzida por meio da revisão da literatura. Retomando o delineamento metodológico adotado, a construção do corpus da revisão foi guiada pela formulação de uma pergunta norteadora e pela delimitação explícita do escopo temático, do período de interesse e dos tipos de documentos elegíveis, conforme recomendam Galvão e Pereira (2014), ao descreverem os passos necessários para o planejamento e execução de revisões sistemáticas (Galvão; Pereira, 2014). A seleção e triagem dos estudos seguiram a lógica de identificação, triagem, elegibilidade e inclusão proposta pelas diretrizes PRISMA, que visam garantir transparência e rastreabilidade em revisões sistemáticas e meta-análises, por meio do relato estruturado do fluxo de inclusão e exclusão de trabalhos (Moher *et al.*, 2010). Uma vez constituído o portfólio bibliográfico, empregou-se o software VOSviewer para a construção e visualização de mapas bibliométricos, permitindo a identificação de clusters temáticos e o exame das relações de coautoria, cocitação e coocorrência de termos entre as publicações incluídas (Van Eck; WaltMan, 2010). Esse subtópico foi encerrado com uma discussão integrada dos resultados obtidos em cada uma das etapas anteriores.

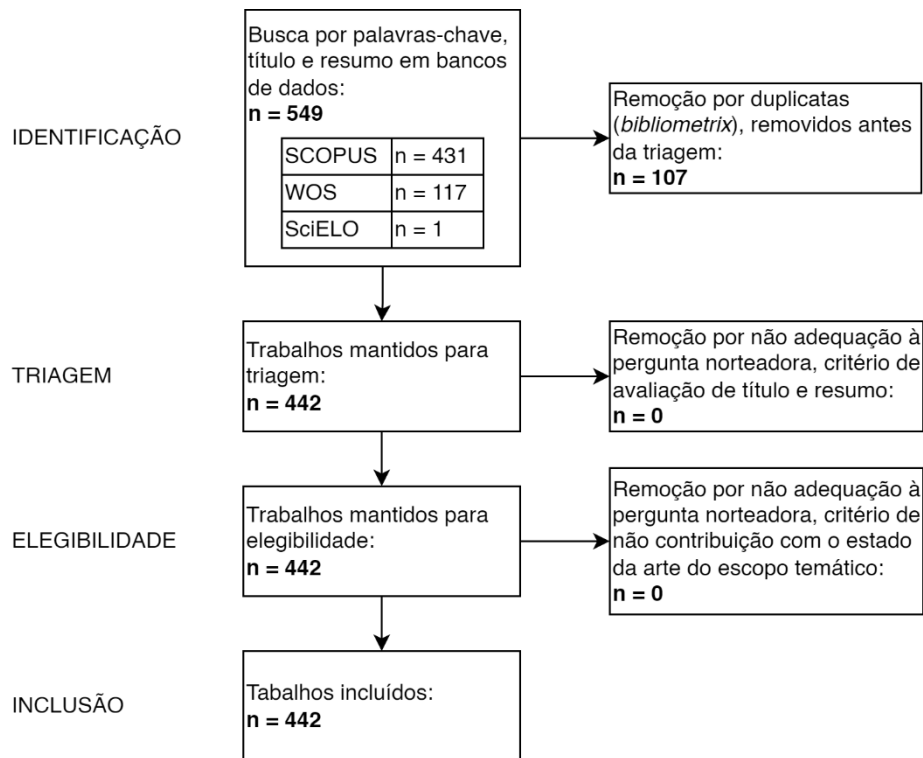
2.3.1 Fluxograma PRISMA

A Figura 5 apresentou o fluxograma PRISMA correspondente às etapas de identificação e seleção dos estudos que compuseram o portfólio final da revisão sistemática. A busca por palavras-chave, título e resumo, realizada no dia 17 de dezembro de 2025, nas bases Scopus, *Web of Science* e SciELO resultou em 549 registros, distribuídos em 431 artigos na Scopus, 117 artigos na *Web of Science* e 1 artigo na SciELO (palavras-chave em português). Em seguida, procedeu-se à remoção de duplicatas por meio do pacote *bibliometrix*, o que resultou na exclusão de 107 registros redundantes antes da triagem, permanecendo 442 trabalhos para a fase de avaliação de título e resumo. Nessa etapa, nenhum estudo foi excluído por não adequação à pergunta norteadora, de modo que os 442 artigos foram mantidos para avaliação de elegibilidade.

Para a elegibilidade, adotou-se como critério de exclusão a não adequação à pergunta norteadora associada à ausência de contribuição para a compreensão do estado da arte no escopo temático definido. Como resultado, nenhum trabalho foi excluído, de forma que todos os 442 estudos permaneceram incluídos no portfólio final. Essa decisão é coerente com o caráter de

revisão de estado da arte desta investigação bibliográfica, em que contribuições que não convergem diretamente para o objetivo específico da tese ainda são relevantes para mapear formulações, aplicações e desenvolvimentos metodológicos do Método das Soluções Fundamentais e de métodos *meshless* relacionados.

Figura 5 – Fluxograma PRISMA



Fonte: O Autor

A ausência de exclusões nas etapas de triagem e elegibilidade decorre, em grande medida, da eficácia dos critérios de levantamento previamente definidos, especialmente da construção cuidadosa das estratégias de busca e da escolha dos descritores em português e inglês, que permitiram delimitar de forma precisa o universo de estudos potencialmente relevantes. Como ressaltam Galvão e Pereira (2014), a definição rigorosa da pergunta de pesquisa, do escopo temático e das estratégias de busca tende a reduzir, já na fase de identificação, a entrada de estudos claramente irrelevantes, concentrando o esforço de triagem em publicações que dialogam, em maior ou menor grau, com a problemática investigada (Galvão; Pereira, 2014).

No presente caso, as combinações de termos relacionadas à modelagem de problemas elípticos, ao escoamento subterrâneo em meios porosos e à aplicação do Método das Soluções

Fundamentais e de outros métodos sem malha resultaram em um conjunto de trabalhos que, mesmo quando não abordam explicitamente todos os aspectos enfatizados na tese, contribuem para compor uma visão abrangente do campo. No contexto das análises bibliométricas, foi adotado o portfólio representado pelos resultados da base Scopus, por ele representar quantitativamente a maior contribuição em artigos detectados e porque a interseção entre essas duas principais bases (Scopus e WoS) devolveu mais de 100 duplicatas, indicando a semelhança entre os bancos de dados. Nesse sentido, a investigação bibliométrica performada exclusivamente sobre os resultados obtidos através dos resultados de Scopus não representa uma perda representativa de conteúdo científico relevante para esta RSL.

2.3.2 Bibliometria com o VOSviewer

Na sequência da apresentação do fluxograma PRISMA, os resultados da revisão bibliométrica foram discutidos à luz dos mapas gerados pelo VOSviewer, o qual foi empregado como ferramenta de apoio para a visualização de redes de coocorrência de termos e de coautorias. Como descrito na metodologia, a análise bibliométrica tem por objetivo identificar padrões estruturais na literatura, revelando autores, temas e relações de citação que configuram o campo de pesquisa em torno do Método das Soluções Fundamentais (MSF) e de métodos *meshless* aplicados a problemas elípticos. Nesse contexto, o VOSviewer foi utilizado para construir mapas em que os nós representam autores ou palavras-chave e as ligações traduzem relações de coocorrência ou colaboração, permitindo identificar clusters e tendências temporais de forma gráfica, conforme propõem Van Eck e Waltman (2010) ao descreverem o uso de mapas de ciência para investigação de campos de conhecimento (Van Eck; Walt Man, 2010).

Os mapas apresentados na Figura 6 foram gerados a partir do subconjunto de publicações recuperadas na base de dados Scopus. A escolha da Scopus como base de referência para a construção dos mapas fundamentou-se em sua ampla cobertura internacional nas áreas de engenharia, matemática aplicada e ciências ambientais, bem como na elevada representatividade de periódicos que publicam trabalhos sobre o MSF e métodos *meshless*. Conforme evidenciado no fluxograma PRISMA, a Scopus respondeu pela maior parcela dos registros inicialmente identificados, e, após a remoção de duplicatas e a aplicação dos filtros de tipo documental, período e idioma, obteve-se um conjunto de 419 artigos provenientes dessa base que atendiam aos critérios de elegibilidade. Esse corpus foi considerado suficientemente abrangente para caracterizar a estrutura do campo em termos de temas e redes de colaboração,

ao mesmo tempo em que mantinha uma coesão temática adequada à pergunta norteadora da revisão.

A Figura 6 foi organizada em dois painéis. O painel A apresenta um mapa de coocorrência de palavras-chave, construído a partir das *keywords* extraídas dos 419 artigos e filtrado por um limiar mínimo de 20 ocorrências, de modo a destacar apenas os termos mais centrais na literatura e evitar um grafo excessivamente fragmentado. Nesse mapa, o tamanho dos nós é proporcional à frequência de ocorrência das palavras-chave e as ligações indicam a frequência com que dois termos aparecem conjuntamente em um mesmo artigo. Os *clusters* de cores distintas representam grupos de termos que tendem a ocorrer em conjunto, configurando eixos temáticos do campo.

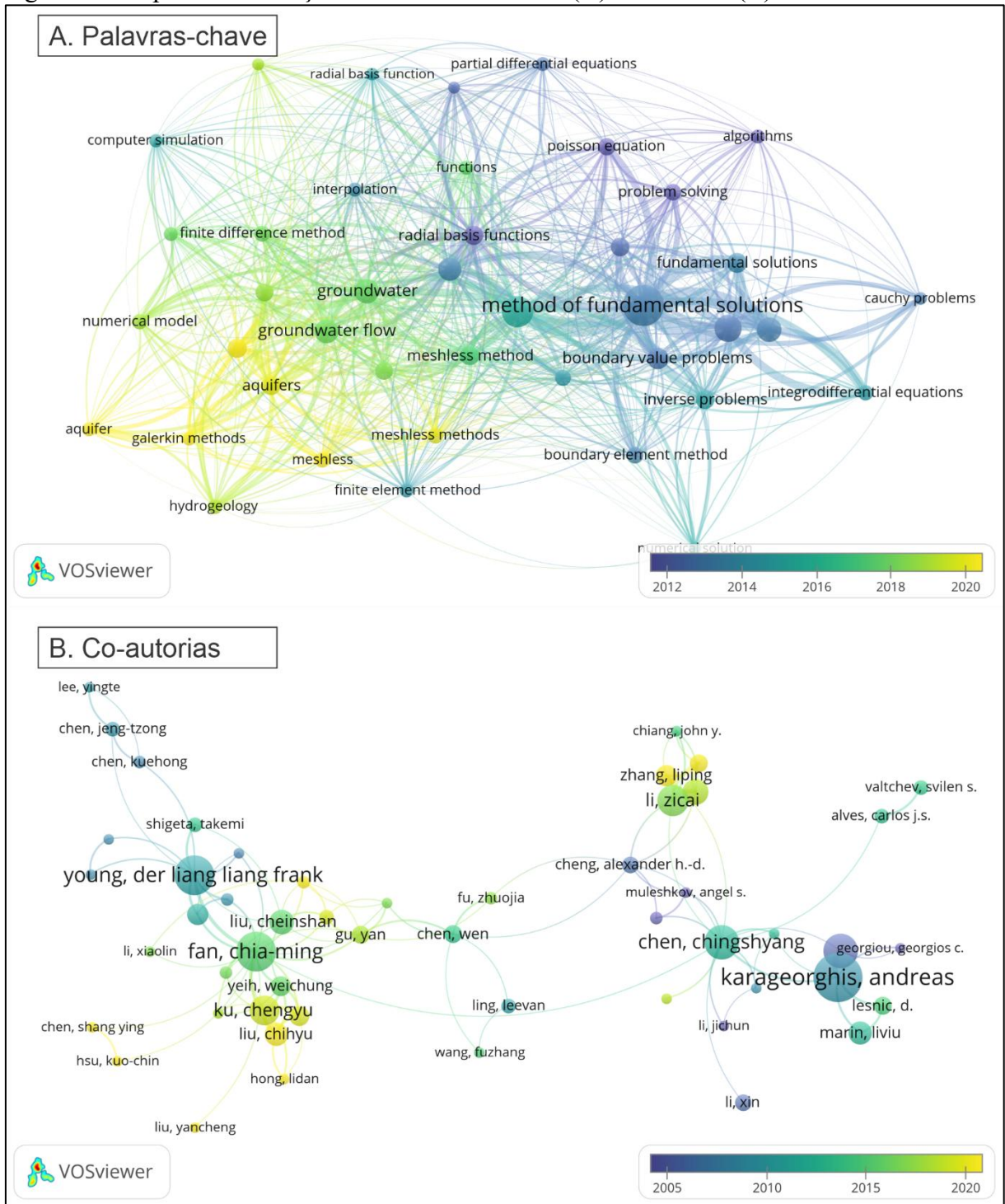
Já o painel B mostra um mapa de coautoria, em que cada nó corresponde a um autor e as ligações representam a existência de publicações conjuntas. Adotou-se, nesse caso, um limiar mínimo de três documentos por autor, o que permitiu focar nos pesquisadores com produção mais consolidada em MSF e métodos *meshless* sem perder a visão das principais redes de colaboração. Do ponto de vista bibliométrico, o mapa de palavras-chave revela a estrutura temática e sua evolução temporal, enquanto o mapa de coautorias evidencia os grupos de pesquisa e as conexões entre eles.

No caso do painel A, a visualização em modo *overlay* possibilita analisar simultaneamente a estrutura temática e a dimensão temporal da produção científica, uma vez que a escala de cores indica o ano médio de publicação associado a cada palavra-chave. Observou-se que os termos associados às publicações mais antigas, situadas predominantemente no intervalo entre 2012 e 2014 e representadas por tons mais escuros, concentram-se em um núcleo de caráter marcadamente teórico e numérico, incluindo palavras-chave como *inverse problems*, *boundary element method*, *problem solving*, *algorithms*, *partial differential equations*, *integro-differential equations* e *Cauchy problems*. Esses termos refletem o desenvolvimento metodológico do MSF e de técnicas relacionadas, com ênfase na formulação matemática de problemas de valor de contorno, na análise de condicionamento numérico e em estratégias de solução de problemas inversos.

A partir de aproximadamente 2018, nota-se o adensamento de termos associados a aplicações em recursos hídricos e meios porosos, como *groundwater*, *groundwater flow*, *aquifers* e *hydrogeology*, os quais aparecem em tons mais claros, indicando produções mais recentes. Essa mudança de tonalidade sugere um movimento progressivo de transição da ênfase em contribuições teóricas e metodológicas gerais para aplicações práticas em modelagem de

fluxo de água subterrânea e de aquíferos, o que dialoga diretamente com o foco desta tese em problemas elípticos governados pelo operador de Laplace em hidrogeologia.

Figura 6 – Mapas de associação entre Palavras-chave (A) e coautoria (B)



Fonte: O Autor

O mapa de coautorias do painel B evidencia a existência de alguns núcleos de colaboração científica particularmente ativos na literatura sobre MSF e métodos *meshless*.

Destacam-se, em um dos *clusters* centrais, os autores Chen, Ching-Shyang e Karageorghis, Andreas, cercados por colaboradores como Georgiou, Georgios C., Lesnic, D., Marin, Liviu e Alves, Carlos J. S., configurando uma rede que combina contribuições teóricas ao MSF com estudos aplicados a problemas elípticos clássicos. Entre as contribuições fundamentais desse grupo, encontra-se a obra de síntese em que Chen, Karageorghis e Smylirs apresentam o MSF como um método *meshless*, sistematizando a formulação para problemas de potencial, Helmholtz e difusão e discutindo aspectos práticos de implementação, como a escolha da fronteira fictícia e o tratamento do condicionamento numérico (Chen; Karageorghis; Smylirs, 2008).

Em outro *cluster* relevante, aparecem os autores Young, Der-Liang e Fan, Chia-Ming, frequentemente conectados a colaboradores como Tsai, C. C. e Gu, Yan. Os trabalhos desse grupo incluem análises detalhadas do condicionamento do MSF e de sua aplicação a problemas inversos da equação de Laplace, com destaque para o estudo em que Young e coautores investigam o número de condicionamento e propõem estratégias de regularização para problemas inversos (Young *et al.*, 2008), bem como avanços em formulações localizadas do MSF para problemas de elasticidade em larga escala, como discutido por Gu, Fan e Xu (Gu; Fan; Xu, 2019). Inserem-se ainda, no conjunto de autores com atuação destacada, pesquisadores como Wang e Zheng, que aplicam o MSF a problemas de fluxo subterrâneo em regime permanente, contribuindo para aproximar o método do contexto hidrogeológico (Wang; Zheng, 2015).

Em conjunto, esses núcleos de coautoria mostram que a literatura recente sobre o MSF combina uma base teórica robusta, centrada em autores como Chen e Karageorghis, com linhas de pesquisa que avançam na direção de problemas inversos, condicionamento numérico e aplicações em fluxo subterrâneo, nos quais se inserem as contribuições de Young, Fan e colaboradores, fornecendo o pano de fundo contemporâneo sobre o qual se apoia a metodologia proposta nesta tese.

2.3.3 Avaliação integrada do portfólio de artigos incluídos e análise bibliométrica

O portfólio bibliográfico obtido a partir do protocolo PRISMA foi analisado por meio do indicador TC (*Total Citations*), calculado a partir do número acumulado de citações de cada artigo nas bases indexadas até a data de extração dos dados. Em estudos bibliométricos, o TC constitui uma métrica simples, mas amplamente utilizada para evidenciar a influência relativa de documentos dentro de um campo de pesquisa, pois expressa o grau de reconhecimento que

um artigo alcança na comunidade científica ao longo do tempo. Embora apresente limitações (por exemplo, favorecer trabalhos mais antigos), o TC permanece uma referência importante para identificar publicações-chave, “clássicos” da área e contribuições que estruturam o desenvolvimento teórico e metodológico de um domínio específico (Moed, 2005; Aria; Cuccurullo, 2017). Nesse contexto, a seleção dos 30 artigos mais citados tem como objetivo destacar os trabalhos mais influentes do portfólio e, ao mesmo tempo, fornecer um panorama consistente das linhas de pesquisa que sustentam a evolução do Método das Soluções Fundamentais (MSF) e de técnicas *meshless* correlatas.

A Tabela 3 apresenta o recorte dos 30 artigos com maior TC no portfólio consolidado. O banco de dados utilizado corresponde ao conjunto de 442 artigos incluídos após o processo de busca, deduplicação e triagem descrito no fluxograma PRISMA, contemplando os resultados combinados das consultas na base Scopus. A tabela está organizada com quatro colunas principais: (i) autores, conforme listados na base bibliométrica; (ii) título do artigo; (iii) ano de publicação; e (iv) valor de TC. Esse arranjo facilita a identificação imediata dos trabalhos de maior impacto, bem como a percepção da distribuição temporal e temática das contribuições, servindo como base para a discussão subsequente sobre o equilíbrio entre estudos teóricos, metodológicos e aplicações práticas do MSF.

Tabela 3 – Rol de 30 artigos com maior quantidade de citações totais (TC) (continua)

| # | Autores | Título | Ano | TC |
|---|--------------------------------|---|------|-----|
| 1 | CHEN C; KARAGEORGHIS A; LI Y | <i>On choosing the location of the sources in the MFS</i> | 2016 | 169 |
| 2 | ŠARLER B | <i>Solution of potential flow problems by the modified method of fundamental solutions: formulations with the single layer and the double layer fundamental solutions</i> | 2009 | 164 |
| 3 | RAMACHANDRAN P | <i>Method of fundamental solutions: singular value decomposition analysis</i> | 2002 | 147 |
| 4 | FU Z; CHEN W; GU Y | <i>Burton–Miller-type singular boundary method for acoustic radiation and scattering</i> | 2014 | 125 |
| 5 | CHEN J; WU C; LEE Y; CHEN K | <i>On the equivalence of the Trefftz method and method of fundamental solutions for Laplace and biharmonic equations</i> | 2007 | 110 |
| 6 | LIU C | <i>An equilibrated method of fundamental solutions to choose the best source points for the Laplace equation</i> | 2012 | 99 |
| 7 | LI J; HON Y; CHEN C | <i>Numerical comparisons of two meshless methods using radial basis functions</i> | 2002 | 92 |
| 8 | YOUNG D; CHEN K; CHEN J; KAO J | <i>A modified method of fundamental solutions with source outside the domain for solving Laplace equations with circular and arbitrary domains</i> | 2007 | 90 |
| 9 | FAN C; HUANG Y; CHEN C; KUO S | <i>Localized method of fundamental solutions for solving two-dimensional Laplace and biharmonic equations</i> | 2019 | 90 |

| # | Autores | Título | Ano | TC |
|----|---|---|------|----|
| 10 | WANG F; FAN C; HUA Q; GU Y | <i>Localized MFS for the inverse Cauchy problems of two-dimensional Laplace and biharmonic equations</i> | 2020 | 87 |
| 11 | GOLBERG M; MULESHKOV A; CHEN C; CHENG A | <i>Polynomial particular solutions for certain partial differential operators</i> | 2003 | 85 |
| 12 | ALVES C; CHEN C | <i>A new method of fundamental solutions applied to nonhomogeneous elliptic problems</i> | 2005 | 82 |
| 13 | SMYRLIS Y; KARAGEORGHIS A | <i>Some aspects of the method of fundamental solutions for certain harmonic problems</i> | 2001 | 80 |
| 14 | JIANG F; OLIVEIRA M; SOUSA A | <i>Mesoscale SPH modeling of fluid flow in isotropic porous media</i> | 2007 | 74 |
| 15 | WANG F; LIU C; QU W | <i>Optimal sources in the MFS by minimizing a new merit function: energy gap functional</i> | 2018 | 71 |
| 16 | NOURANI V; MOUSAVI S | <i>Spatiotemporal groundwater level modeling using hybrid artificial intelligence–meshless method</i> | 2016 | 71 |
| 17 | LI J; CHEN Y; PEPPER D | <i>Radial basis function method for 1-D and 2-D groundwater contaminant transport modeling</i> | 2003 | 68 |
| 18 | WALKER R; INDRARATNA B | <i>Consolidation analysis of a stratified soil with vertical and horizontal drainage using the spectral method</i> | 2009 | 67 |
| 19 | QU W; FAN C; LI X | <i>Analysis of an augmented moving least squares approximation and the associated localized method of fundamental solutions</i> | 2020 | 63 |
| 20 | YOUNG D; TSAI C; CHEN C; FAN C | <i>The method of fundamental solutions and condition number analysis for inverse problems of Laplace equation</i> | 2008 | 63 |
| 21 | BALAKRISHNAN K; RAMACHANDRAN P | <i>Osculatory interpolation in the method of fundamental solution for nonlinear Poisson problems</i> | 2001 | 60 |
| 22 | MATEGAONKAR M; ELDHO T | <i>Groundwater remediation optimization using a point collocation method and particle swarm optimization</i> | 2012 | 60 |
| 23 | DEHGHAN M; ABBASZADEH M | <i>A combination of proper orthogonal decomposition–discrete empirical interpolation and local RBF-DQ approach for prevention of groundwater contamination</i> | 2018 | 59 |
| 24 | GUNESHWOR L; ELDHO T; VINOD K A | <i>Identification of groundwater contamination sources using meshfree RPCM simulation and particle swarm optimization</i> | 2018 | 57 |
| 25 | GOPAL A; TREFETHEN L | <i>Solving Laplace problems with corner singularities via rational functions</i> | 2019 | 57 |
| 26 | LIU C; YEIH W; ATLURI S | <i>On solving the ill-conditioned system $AX = B$: general-purpose preconditioners for the Laplace equation using Trefftz expansions with multiple length scales</i> | 2009 | 56 |
| 27 | LI M; CHEN C; KARAGEORGHIS A | <i>The MFS for the solution of harmonic boundary value problems with non-harmonic boundary conditions</i> | 2013 | 56 |
| 28 | YOUNG D; RUAN J | <i>Method of fundamental solutions for scattering problems of electromagnetic waves</i> | 2005 | 55 |
| 29 | MEENAL M; ELDHO T | <i>Simulation of groundwater flow in unconfined aquifer using meshfree point collocation method</i> | 2011 | 53 |

| # | Autores | Título | Ano | TC |
|----|-----------------------------------|---|------|----|
| 30 | CHEN W; SHEN L; SHEN Z; YUAN G | <i>Boundary knot method for Poisson equations</i> | 2005 | 53 |

Fonte: O Autor

A análise conjunta da Tabela 3 com os mapas bibliométricos obtidos no VOSviewer mostrou que os artigos mais citados são, em sua maioria, trabalhos de natureza teórica e metodológica, voltados à compreensão das propriedades numéricas do MSF e de métodos *meshless* correlatos. Destacam-se, por exemplo, o estudo sobre a localização ótima das fontes no MSF (Chen; Karageorghis; Li, 2016), a análise de decomposição em valores singulares para investigar o mal-condicionamento da matriz principal (Ramachandran, 2002) e as formulações modificadas do método para problemas de escoamento potencial (Šarler, 2009). Esses trabalhos, localizados nas primeiras posições de TC, dialogam diretamente com os *clusters* teóricos do mapa de palavras-chave (como *inverse problems*, *boundary element method*, *algorithms* e *problem solving*) e com os núcleos de coautoria em torno de autores como C. S. Chen, A. Karageorghis, D. L. Young e colaboradores, predominantemente em publicações entre 2001 e 2012. Essa distribuição temporal reforça a interpretação obtida anteriormente, a de que os primeiros anos de desenvolvimento do MSF concentraram-se na consolidação matemática, na análise de condicionamento e na comparação com outros métodos sem malha.

Entre esses trabalhos, alguns se destacam como pilares teóricos utilizados diretamente na fundamentação desta tese. O artigo de Ramachandran (2002) propôs uma análise detalhada do MSF por meio da decomposição em valores singulares, mostrando como a estrutura espectral da matriz de influência está associada ao mal-condicionamento e à sensibilidade aos parâmetros de posicionamento das fontes, fornecendo critérios objetivos para interpretar o comportamento numérico do método. Alves e Chen (2005) estenderam o MSF para problemas elípticos não homogêneos, introduzindo uma formulação que combina soluções fundamentais com termos particulares e, assim, ampliaram o escopo de aplicação do método para equações de Poisson com fontes espaciais. O trabalho de Young *et al.* (2008) aprofundou a análise do número de condicionamento em problemas inversos governados pela equação de Laplace, discutindo estratégias para mitigar instabilidades na solução e conectar o desempenho numérico à escolha da fronteira fictícia e da distribuição de pontos-fonte. Já o artigo de Chen, Karageorghis e Li (2016) retomou a questão da localização das fontes sob uma perspectiva sistemática, avaliando diferentes critérios geométricos e funcionais para minimizar o erro e o mal-condicionamento, o que foi particularmente relevante para a proposta desta tese, que propôs uma metodologia padronizada e robusta de implementação do MSF. Esses trabalhos, entre outros constantes na

tabela anterior, compõem o núcleo de referências teóricas que embasam o desenvolvimento metodológico apresentado nos capítulos seguintes.

A Tabela 3 evidenciou também a presença de trabalhos de aplicação prática do MSF e de métodos *meshless* em diferentes áreas da engenharia. Um exemplo central é o artigo de Fu, Chen e Gu (2014), que propôs um método de contorno singular do tipo Burton–Miller para problemas de radiação e espalhamento acústico, demonstrando a capacidade do MSF (e de variações como o *Singular Boundary Method*) de tratar geometrias complexas e frequências elevadas em acústica computacional. De forma complementar, Fan *et al.* (2019) introduziram o *Localized Method of Fundamental Solutions* (LMFS) para problemas governados pelas equações de Laplace e biharmônica, reduzindo o mal-condicionamento ao restringir o suporte das funções de base e abrindo caminho para aplicações eficientes em condução de calor e elasticidade em domínios complexos. Em abordagem semelhante, Wang *et al.* (2020) aplicaram uma versão localizada do MSF a problemas inversos de Cauchy, também envolvendo as equações de Laplace e biharmônica.

Além dessas contribuições, observou-se a presença de aplicações em recursos hídricos e hidrogeologia, como os trabalhos de Nourani e Mousavi (2016) sobre modelagem espaço-temporal de níveis freáticos com métodos híbridos inteligência artificial–*meshless*, de Li, Chen e Pepper (2003) em transporte de contaminantes com funções de base radial, e dos estudos de Mategaonkar e Eldho (2012), Dehghan e Abbaszadeh (2018), Guneshwor, Eldho e Vinod (2018) e Meenal e Eldho (2011) sobre remediação e escoamento subterrâneo com técnicas *meshfree*. Em conjunto, esses resultados mostram que, apesar de mais recentes, as aplicações práticas do MSF e de métodos *meshless* já despontam entre os artigos mais citados, evidenciando um movimento claro de transição da ênfase puramente teórica para o uso do método em problemas reais de engenharia acústica, térmica, estrutural e hidrogeológica.

2.4 Conclusões

A partir do portfólio bibliográfico construído na revisão de literatura e dos resultados bibliométricos obtidos com o VOSviewer, o estado da arte da aplicação do Método das Soluções Fundamentais (MSF) pode ser interpretado como uma trajetória em fases evolutivas, mais do que como um conjunto disperso de trabalhos. Ao longo do recorte 2000–2024, observou-se inicialmente a consolidação de um núcleo teórico e numérico robusto para o MSF e para métodos afins, seguida pelo desenvolvimento de variações e estratégias de estabilização do método, pela expansão para aplicações em problemas físicos prototípicos em engenharia e,

mais recentemente, pela entrada em problemas de recursos hídricos e hidrogeologia, em que o MSF e outros métodos *meshless* passam a ser adotados em fluxo subterrâneo, transporte de contaminantes e remediação de aquíferos. Os 30 artigos mais citados do portfólio, aliados aos demais estudos identificados, permitem organizar essa evolução em quatro grandes movimentos, que, em conjunto, delineiam o estado da arte de aplicação do MSF.

Em uma primeira fase, predominam contribuições de caráter teórico e analítico voltadas à compreensão das propriedades numéricas do MSF, em especial seu condicionamento e sua relação com outras formulações de contorno. Trabalhos como o de Ramachandran (2002), que analisa o MSF por meio da decomposição em valores singulares, evidenciam a estreita ligação entre o espectro da matriz de influência e o mal-condicionamento do sistema linear, oferecendo critérios para interpretar e mitigar instabilidades numéricas em função da geometria e da posição das fontes (Ramachandran, 2002). De forma complementar, Smyrlis e Karageorghis (2001) examinam aspectos fundamentais da aplicação do MSF a problemas harmônicos, discutindo precisão, convergência e sensibilidade a parâmetros, enquanto Alves e Chen (2005) ampliam o escopo do método para problemas elípticos não homogêneos, combinando soluções fundamentais com termos particulares e mostrando sua viabilidade em equações do tipo Poisson (Smyrlis; Karageorghis, 2001; Alves; Chen, 2005). Golberg *et al.* (2002), por sua vez, contribuem com a construção de soluções particulares polinomiais para operadores diferenciais, oferecendo uma base analítica que dialoga diretamente com formulações de MSF e métodos relacionados (Golberg *et al.*, 2002). Esses e outros trabalhos da mesma fase formam o arcabouço teórico sobre o qual se apoiam as evoluções posteriores do método.

Uma segunda fase é caracterizada pelo desenvolvimento de variações e estratégias de estabilização do MSF, com foco na escolha da fronteira fictícia, na localização ótima das fontes e na redução do mal-condicionamento. Nesse contexto, Chen, Karageorghis e Li (2016) propõem e avaliam critérios sistemáticos para posicionar as fontes em relação ao domínio físico, investigando como diferentes geometrias e distâncias influenciam simultaneamente o erro de aproximação e o número de condição da matriz (Chen; Karageorghis; Li, 2016). Young e colaboradores discutem, em uma série de trabalhos, modificações no MSF para problemas inversos da equação de Laplace, explorando a relação entre formulação, localização de fontes e condicionamento, com ênfase na análise de número de condição e em técnicas de regularização (Young *et al.*, 2008). Em paralelo, surgem variantes como o *Boundary Knot Method*, proposto por Chen e coautores para tratar equações de Poisson e outros problemas elípticos, bem como formulações baseadas em expansões de Trefftz com múltiplas escalas, voltadas a melhorar a robustez numérica em domínios complexos (Chen *et al.*, 2005; Liu; Yeh;

Atluri, 2009). Essa fase indica um deslocamento do campo em direção a questões de escalabilidade, estabilidade e aplicabilidade numérica do MSF em cenários mais gerais.

A terceira fase corresponde à expansão do MSF e de métodos *meshless* correlatos para aplicações em problemas físicos prototípicos de engenharia, ainda que em domínios relativamente controlados. Fu, Chen e Gu (2014), por exemplo, introduzem um método de contorno singular do tipo Burton–Miller para problemas de radiação e espalhamento acústico, demonstrando a capacidade de formulações derivadas do MSF de lidar com fenômenos de onda em altas frequências e geometrias complexas (Fu; Chen; Gu, 2014). Fan *et al.* (2019) e Wang *et al.* (2020) desenvolvem e aplicam o *Localized Method of Fundamental Solutions* (LMFS) a problemas regidos pelas equações de Laplace e biharmônica, mostrando que a localidade dos suportes reduz o mal-condicionamento e torna o método mais adequado para problemas de grande porte em condução de calor, elasticidade e problemas inversos de Cauchy (Fan *et al.*, 2019; Wang *et al.*, 2020). Outros estudos exploram aplicações em *scattering* eletromagnético, vibrações estruturais e análises de placas, evidenciando que o MSF deixa de ser apenas um objeto de investigação teórica e passa a ser efetivamente empregado como ferramenta numérica em diferentes ramos da engenharia.

Por fim, em uma quarta fase emergente, o portfólio revela a entrada de métodos *meshless* e, em alguns casos, de formulações diretamente ligadas ao MSF, em problemas de recursos hídricos e hidrogeologia. Li, Chen e Pepper (2003) utilizam métodos com funções de base radial para modelar o transporte unidimensional e bidimensional de contaminantes em aquíferos, demonstrando a capacidade de abordagens sem malha de tratar geometrias complexas e heterogeneidades espaciais em meios porosos (Li; Chen; Pepper, 2003). Nourani e Mousavi (2016) propõem uma modelagem espaço-temporal de níveis freáticos com um método híbrido inteligência artificial–*meshless*, combinando técnicas de aprendizagem com esquemas numéricos flexíveis para representar a variabilidade espacial e temporal de aquíferos (Nourani; Mousavi, 2016). Trabalhos de Mategaonkar e Eldho (2012), Meenal e Eldho (2011), Dehghan e Abbaszadeh (2018) e Guneshwor, Eldho e Vinod (2018) avançam nessa perspectiva ao empregar métodos sem malha em simulação de fluxo em aquíferos não confinados, otimização de sistemas de remediação, identificação de fontes de contaminação e prevenção de poluição da água subterrânea, frequentemente acoplados a técnicas de otimização como *particle swarm* (Mategaonkar; Eldho, 2012; Meenal; Eldho, 2011; Dehghan; Abbaszadeh, 2018; Guneshwor; Eldho; Vinod, 2018). Embora o número de estudos estritamente baseados no MSF em hidrogeologia ainda seja limitado em comparação com outras áreas, o conjunto desses trabalhos indica uma tendência clara de adoção de métodos sem malha em modelagem de fluxo

subterrâneo e processos associados, conectando o núcleo teórico do MSF a problemas diretamente relacionados à gestão de recursos hídricos.

Nesse panorama, a presente tese se posiciona em um ponto de interseção entre essas fases, pois parte de um corpo teórico maduro e bem documentado sobre formulação, condicionamento e variantes do MSF; reconhece o avanço recente de aplicações práticas em diferentes ramos da engenharia; e se volta, de forma explícita e orientada, para a construção de uma metodologia padronizada e operacional de aplicação do MSF a problemas governados pelo operador de Laplace que pode ser aplicado especialmente no contexto de fluxo subterrâneo. Ao propor um procedimento estruturado para escolha da fronteira fictícia, posicionamento de fontes, calibração de parâmetros e avaliação de acurácia, convergência e estabilidade numérica, este trabalho contribui tanto para consolidar o papel do MSF como ferramenta de modelagem numérica quanto para oferecer à comunidade científica e técnica um roteiro replicável para sua utilização em problemas de modelagem em recursos hídricos, de escassez, qualidade e gestão de água subterrânea, reforçando a relevância científica e social deste trabalho no quadro atual do estado da arte.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo, foi apresentado o referencial teórico que subsidiou o desenvolvimento desta pesquisa. O objetivo deste capítulo não foi esgotar cada tema, mas apresentar um esboço dos conteúdos principais necessários para a construção deste trabalho.

3.1 Equações diferenciais

As equações diferenciais constituem uma formalidade matemática amplamente utilizada para descrever fenômenos físicos a partir das suas taxas de variação. Modelar um problema utilizando essas ferramentas significa explicitar os critérios que descrevem seu funcionamento (hipóteses físicas, constitutivas e geométricas) e identificar as variáveis e parâmetros relevantes e como eles se interrelacionam entre si. Nesse sentido, um determinado problema físico ou até mesmo teórico pode ser representado por um operador diferencial e sua solução analítica ou numérica deve satisfazer com alguma precisão essa equação ou conjunto de equações (Leithold, 1994).

A completa definição de equações diferenciais requer a compreensão do que são derivadas. Para funções de uma única variável (equação 1), a sua derivada em um ponto pode ser definida como o limite expresso pela equação 2, a seguir. As derivadas de funções de múltiplas variáveis, definidas genericamente pela equação 3, podem ser definidas individualmente para cada uma das variáveis dependentes e, nesse caso, são chamadas de derivadas parciais (equação 4) (Leithold, 1994).

$$g: R \rightarrow R \mid y = g(x) \mid x, y \in R \quad (1)$$

$$\frac{\partial g(x)}{\partial x} = \frac{g(x + \Delta x) - g(x)}{\Delta x} \quad (2)$$

$$g: R^n \rightarrow R \mid y = g(m_1, \dots, m_i, \dots, m_n) \mid m_i, y \in R \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(m_1, \dots, m_i, \dots, m_n)}{\partial m_i} \\ = \frac{g(m_1, \dots, m_i + \Delta m_i, \dots, m_n) - g(m_1, \dots, m_i, \dots, m_n)}{\Delta m_i} \end{aligned} \quad (4)$$

As equações diferenciais são equações que apresentam termos de derivadas e podem ser classificadas quanto a sua ordem, tipo, linearidade e homogeneidade.

- Classificação quanto ao tipo

Elas podem ser do tipo *ordinárias* ou *parciais*. Uma equação diferencial ordinária (EDO) é uma relação que envolve uma função desconhecida de uma única variável independente (como por exemplo, o tempo t) e suas derivadas em relação a essa mesma variável (Leithold, 1994). Usualmente, esse tipo de equação é utilizado para modelar problemas unidimensionais, ou seja, que representam fenômenos que relacionam variáveis escalares (equações 5 e 6).

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + 6 \frac{\partial f(x)}{\partial x} + 9y = g(x) \quad (5)$$

$$y' = f(y) \quad (6)$$

As EDOs modelam sistemas “concentrados” no espaço, em que os estados variam sobretudo no tempo. Exemplos clássicos incluem decaimento exponencial e crescimento populacional, resfriamento de Newton, oscilador massa–mola–amortecido e circuitos RLC, todos formulados como EDOs de 1ª ou 2ª ordem (Boyce; DiPrima, 2010). Em dinâmica de populações e epidemiologia, as interações predador–presa (Lotka–Volterra) e os modelos SIR são sistemas de EDOs que capturam taxas de nascimento, morte, infecção e recuperação (Murray, 2002; Kermack; McKendrick, 1927). Esses problemas são tipicamente resolvidos como problemas de valor inicial, em que condições conhecidas num instante inicial determinam a evolução temporal do sistema.

Quando a relação envolve as derivadas parciais de uma função, tem-se as equações diferenciais parciais (EDP), como por exemplo, as equações 7 e 8.

$$\alpha^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \quad (7)$$

$$\frac{\partial g(x, y, z)}{\partial x} + \frac{\partial g(x, y, z)}{\partial y} + \frac{\partial g(x, y, z)}{\partial z} = 0 \quad (8)$$

As EDPs são empregadas usualmente quando os estados dependem de tempo e espaço, descrevendo campos físicos distribuídos. A equação do calor, por exemplo, modela difusão e condução térmica (Carslaw; Jaeger, 1959; Evans, 2010); a equação de Laplace e da advecção–dispersão são centrais em estudos de escoamento e transporte de massa em aquíferos (Bear, 1988; Freeze; Cherry, 1979; Fetter, 2018). A equação da onda/Helmholtz trata vibrações e acústica (Strauss, 2007); a elasticidade linear usa EDPs para o equilíbrio em meios contínuos (Timoshenko; Goodier, 1970); Navier–Stokes governa escoamentos de fluidos (Batchelor, 2012) e as equações de Maxwell modelam eletromagnetismo (Griffiths, 2017). Essa breve enumeração de aplicações de EDPs a sistemas físicos, ilustrou a sua ampla aplicação em diferentes áreas. Em geral, a modelagem de um problema utilizando EDPs exige condições de contorno (Dirichlet/Neumann/Robin) e, quando há transientes, condições iniciais, permitindo estudar difusão, frentes de onda, linhas de fluxo e potenciais em geometrias complexas.

As equações diferenciais podem ainda ser organizadas em sistemas de equações cuja resolução pode ser obtida através de mais de uma função ou por outro sistema de equações (Boyce; Diprima, 2010).

- Quanto a ordem

A classificação por ordem de uma equação diferencial refere-se à maior ordem de derivada que aparece na relação entre a função desconhecida e suas derivadas: para EDOs, a ordem é a maior derivada $y^{(n)}$ presente; para EDPs, é a maior ordem entre as derivadas parciais de $u(x, t, \dots)$ (Boyce; Diprima, 2010; Evans, 2010; Strauss, 2007). Exemplos clássicos incluem, em 1ª ordem (EDO), o crescimento/decrescimento exponencial $y'(t) = ky$ e o modelo logístico; em 2ª ordem (EDO), o oscilador massa-mola-amortecido $y'' = 2\zeta\omega y' + \omega^2 y = 0$ (Boyce; Diprima, 2010). Para EDPs, a equação do calor $u_t = \alpha^2 u_{xx}$ é de segunda ordem (1ª no tempo e 2ª no espaço), assim como a equação da onda $u_{tt} = c^2 u_{xx}$ e a equação de Laplace $u_{xx} + u_{yy} = 0$ (Evans, 2010; Strauss, 2007). Como exemplo de ordem superior, a equação de viga de Euler-Bernoulli $EIw_{xxxx} = q(x)$ é de quarta ordem em x e modela deflexões de barras esbeltas sob carregamento (Timoshenko; Gere, 1972).

- Quanto a linearidade

Equações diferenciais do tipo linear ocorrem quando a função desconhecida e todas as suas derivadas aparecem apenas ao primeiro grau, não multiplicadas entre si e com coeficientes que dependem apenas das variáveis independentes (ou são constantes). Em notação de EDO de ordem n , isso equivale a poder reescrevê-la como a equação 9, onde $y^{[n+1]}$ são os termos de derivadas. Para EDPs de segunda ordem, por exemplo, a forma linear geral foi apresentada na equação 10, onde A, \dots, F são funções ou constantes não relacionadas a u (Boyce; Diprima, 2010, Evans, 2010, Strauss, 2007).

$$b_0(t)y^{[n]} + b_1(t)y^{[n-1]} + \dots + b_n(t)y = f(t) \quad (9)$$

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = G \quad (10)$$

Por contraste, uma equação é não linear quando u (ou suas derivadas) aparece elevado a potências $\neq 1$, multiplicado por si mesmo/derivadas, ou dentro de outras funções não lineares. Assim, $u(x)u_{xx}(x) = 0$ é não linear, porque envolve o produto $u \cdot u_{xx}$, e $\cos f = g(t)$ é não linear devido a presença de $\cos f$. Exemplos clássicos adicionais incluem o modelo logístico $y' = ry(1 - y/k)$ e a Burgers $u_t + uu_x = \nu u_{xx}$ (Boyce; Diprima, 2010; Evans, 2010).

- Quanto a homogeneidade

A classificação de EDPs quanto à homogeneidade refere-se ao termo independente na forma linear $L[u] = f$. Diz-se homogênea quando $f = 0$ (ou seja, a equação é composta apenas por derivadas de u e coeficientes que podem depender das variáveis independentes) e não homogênea quando há um termo-fonte $f \neq 0$ que injeta/retira valor funcional no interior do domínio (Leithold, 1994; Evans, 2010).

Em hidrogeologia, essa inhomogeneidade tem significado físico direto. Ela representa fontes/sumidouros internos como áreas de recarga, poços de bombeamento/injeção ou trocas distribuídas, convertendo a equação de Laplace em Poisson (ou acrescentando termos de fonte no regime transiente); já a heterogeneidade de parâmetros não torna a EDP não-homogênea por si só — a não homogeneidade decorre do termo de força f (Bear, 1988; Freeze; Cherry, 1979; Fetter, 2018). Assim, exemplo homogêneos incluem a equação de Laplace $u_{xx} + u_{yy} = 0$;

exemplos não-homogêneos incluem a equação de Poisson $u_{xx} + u_{yy} = f(x, y)$ e o balanço hidrodinâmico com fontes $S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot (K\nabla h) + W(x, t)$, onde W modela recarga positiva ou extração por poços (Evans, 2010; Bear, 1988; Fetter, 2018; Freeze; Cherry, 1979).

3.1.1 Equações Diferenciais Parciais

As equações diferenciais parciais (EDPs) relacionam uma função desconhecida às suas derivadas parciais em múltiplas variáveis, permitindo descrever fenômenos multidimensionais no espaço e no tempo. Na classe linear de segunda ordem em duas variáveis, podem ser escritas na forma da equação 10 com coeficientes (eventualmente) dependentes das variáveis independentes e termo-fonte G (Evans, 2010; Strauss, 2007; Haberman, 2012).

Três EDPs de segunda ordem constituem exemplos históricos de ampla aplicação no campo das ciências naturais e teóricas: a equação de Laplace (equação 11), a equação do calor (equação 12) e a equação da onda (equação 13). Elas organizam grandes classes de problemas hidráulicos, elétricos, transporte difusivo, vibrações e acústica (Carslaw; Jaeger, 1959; Evans, 2010; Strauss, 2007)

$$\nabla^2 u = u_{xx} + u_{yy} = 0 \tag{11}$$

$$u_t = a^2 u_{xx} \tag{12}$$

$$u_{tt} = a^2 u_{xx} \tag{13}$$

A equação de Laplace leva o nome de Pierre-Simon Laplace, cujos trabalhos em potencial gravitacional e teoria dos potenciais consolidaram a forma $\nabla^2 u = 0$ para campos em regime estacionário. A estrutura sem fonte (igual a zero) explica sua aplicação em regiões onde não há produção/consumo local de quantidade (Axler; Bourdon; Ramey, 2001; Evans, 2010). Aplicações incluem escoamento subterrâneo confinado em regime permanente, eletroestática, equilíbrio térmico e filtração de fluídos em meios porosos (Bear, 1988; Fetter, 2018). Outros estudos exploram formulações analíticas e *meshless*, como o MSF, para problemas de Laplace (Liu, 2012; Wang; Zheng, 2015) e modelos analíticos regionais de aquíferos (AEM) (Strack, 2003).

A equação do calor originou-se das leis empíricas de condução térmica consolidadas por Joseph Fourier (1822), justificando o nome pelo papel em transferência de calor. O termo u_t mede variação temporal da temperatura, enquanto u_{xx} modela difusão espacial (Fourier, 1822; Carslaw; Jaeger, 1959). Hoje, variantes cobrem difusão de massa, filtração reativa e suavização de sinais/campos. Desenvolvimentos posteriores investigaram estabilidade/precisão de esquemas numéricos (Crank; Nicolson, 1996) e formulações bem-condicionadas para difusão anisotrópica (Evans, 2010; Haberman, 2012).

A equação da onda foi aplicada inicialmente para modelar vibrações de cordas, justificando o nome por descrever propagação com velocidade finita c (D'Alembert, 1747; Strauss, 2007). Aparece em acústica, sismologia e eletromagnetismo (formas hiperbólicas). Avanços incluem condições de contorno absorventes e métodos espectrais/espectrais-elementares para ondas sísmicas (Komatitsch; Tromp, 1999).

- Considerações sobre a homogeneidade

Diz-se que $L[u] = G$ é homogênea quando não há fonte interna ($G = 0$). Fisicamente, isso significa ausência de produção/consumo no domínio, como, por exemplo, no caso de um aquífero confinado sem recarga ou poço em bombeamento/injeção. Já a não homogeneidade representa a ocorrência desses fenômenos. No caso do aquífero anterior, poços, recarga ou trocas distribuídas. No contexto da equação de Laplace, a inclusão de inomogeneidades implica na sua transformação para uma equação de Poisson (Bear, 1988; Freeze; Cherry, 1979; Fetter, 2018).

Em problemas lineares homogêneos uma propriedade particularmente útil, principalmente para a implementação de soluções numéricas, é a possibilidade de combinar linearmente soluções individuais e garantir que essa combinação também funciona como solução da EDP. Isso se chama de superposição e permite encontrar mais facilmente soluções analíticas para problemas homogêneos. Em casos não homogêneos, a estratégia de resolução busca encontrar uma solução para a parte homogênea da equação e uma solução particular para considerar a inomogeneidade, sendo, portanto, a solução completa composta de duas partes, uma homogênea e outra particular. Essas estratégias fundamentam a obtenção de soluções analíticas e numéricas em problemas de calor (Carslaw; Jaeger, 1959), Laplace/Poisson e advecção-dispersão em aquíferos (Bear, 1988; Fetter, 2018; Wang; Zheng, 2015).

- Classificação das EDPs de segunda ordem

EDPs lineares de 2ª ordem se classificam por elípticas ($B^2 - 4AC < 0$), parabólicas ($= 0$) e hiperbólicas (> 0), classificação ligada ao método das características, que orienta estratégias de solução e interpretação física (Chapra; Canale, 2011; Strauss, 2007).

As EDPs lineares de segunda ordem elípticas são típicas de estados estacionários (como por exemplo, Laplace/Poisson) e sua solução apresenta forte dependência das condições de contorno; não há propagação no tempo (Evans, 2010). São exemplos de métodos que utilizam essa classe de EDPs para realizar aproximações numéricas: métodos variacionais/FEM, integrais de contorno/BEM, métodos sem malha (MSF) e AEM para aquíferos (Strack, 2003; Liu, 2012; Wang; Zheng, 2015). Elas encontram ainda aplicações em potencial hidráulico, eletroestática e usos do MSF/AEM em hidrogeologia (Wang; Zheng, 2015; Strack, 2003).

As equações parabólicas são utilizadas para modelar difusão e evolução com suavização de perfis. A solução propaga valores iniciais, mas as perturbações não se propagam com velocidade finita (Evans, 2010; Haberman, 2012). A equação do calor é a EDP mais conhecida e fundamenta aplicações em condução térmica e difusão de solutos. As técnicas de solução combinam separação de variáveis, transformadas e funções de Green, além de discretizações implícitas/semimplícitas como o esquema de Crank–Nicolson, cuja análise de estabilidade e consistência é amplamente documentada (Carslaw; Jaeger, 1959; Crank; Nicolson, 1996; Evans, 2010).

As equações hiperbólicas descrevem propagação com velocidade finita (ondas) (Strauss, 2007). O tratamento numérico envolve o método das características, diferenças/spectrais de alta ordem e condições de contorno absorventes para domínios truncados (Engquist; Majda, 1977). Aplicações típicas incluem acústica, vibrações mecânicas e sismologia e avanços aplicam o método espectral-elementar para ondas em meios complexos, com ganhos de precisão e paralelismo em geofísica computacional (Komatitsch; Tromp, 1999; Strauss, 2007).

- Existência, unicidade e estabilidade da solução

No campo da modelagem de problemas através de relações com EDPs, um problema é bem-posto (*well posed*) se a solução (i) existe, (ii) é única e (iii) depende continuamente dos dados (Hadamard, 1923). Para Laplace em fluxo subterrâneo, obtém-se unicidade ao prescrever condições de contorno adequadas, como por exemplo, Dirichlet (tipo 1) em parte do contorno

(carga hidráulica conhecida) e/ou Neumann (tipo 2) em outra parte (fluxo normal), evitando o caso Neumann puro sem a condição de compatibilidade que, mesmo satisfeita, determina a solução a menos de uma constante (Evans, 2010; Bear, 1988; Fetter, 2018). Em termos práticos, um domínio com trecho impermeável (Neumann = 0) e trecho em contato com reservatório (Dirichlet) é um exemplo de especificação mínima que conduz a uma única solução fisicamente coerente.

Ainda no campo da solução de problemas de valor inicial e de condições de contorno, a estabilidade da solução significa que pequenas variações nos dados (contorno, fontes) geram pequenas variações na solução. Na discretização numérica, isso se relaciona ao número de condicionamento $\kappa(A)$ (“Kappa de A”) grande implica amplificação de erros (Higham, 2002; Trefethen; Bau, 2022). Medidas práticas para monitorar essa estabilidade incluem espectro/razão de autovalores e análise via SVD. E técnicas utilizadas para proporcionar estabilidade em sistemas matriciais abrangem pré-condicionamento, regularização de Tikhonov e truncamento por SVD. Em métodos numéricos como o MSF, o mau condicionamento é conhecido e demanda cautela na escolha de parâmetros/posicionamento de fontes (Chen; Cho; Golberg, 2006; Liu, 2012).

3.1.2 Condições de contorno

Antes de resolver uma equação diferencial para um sistema físico, é preciso completar o modelo especificando condições de contorno, que representam relações impostas na fronteira e no domínio do problema entre a solução de estado físico e suas derivadas (fluxos). Elas traduzem como o sistema interage com o exterior (valores prescritos, fluxos impostos ou trocas), tornando o problema bem-posto (existência, unicidade e estabilidade da solução). Quando são combinadas adequadamente com a equação governante e, se houver a grandeza tempo, com condições iniciais, elas conduzem a uma solução para o problema analisado (Evans, 2010; Strauss, 2007; Haberman, 2012). Em hidrogeologia, por exemplo, essas condições representam cabeças hidráulicas, recargas/descargas ou trocas com rios/aquifugos (Bear, 1988; Fetter, 2018).

As condições de contorno são agrupadas em alguns tipos, conforme suas propriedades e significados matemáticos (Tabela 4) (Jazayeri; Werner, 2019). As condições de Dirichlet — também chamadas de condições essenciais ou tipo 1 — representam diretamente o valor da variável de estado na fronteira. Em termos práticos, são condições que fixam o potencial/temperatura/concentração na borda do domínio, sendo largamente utilizadas em

problemas elípticos e parabólicos por assegurarem, sob hipóteses padrão, unicidade da solução (Evans, 2010). Na modelagem do fluxo de água subterrânea, por exemplo, condições de Dirichlet representam cotas de carga hidráulica/potencial piezométrico obtidas em poços de observação ou valores mantidos por corpos hídricos superficiais (rios, lagos), servindo como referências de nível na formulação do problema (Bear, 1988; Fetter, 2018; Jazayeri; Werner, 2019). Em condução de calor, equivalem a temperaturas medidas em pontos ou faces do corpo em estudo. Em conformidade com o uso clássico na literatura de métodos de contorno (Tabela 4), essas condições correspondem ao valor funcional da variável dependente na fronteira (Brebbia, 1978). Tal como outras condições complementares, Dirichlet pode aparecer como condição inicial (no tempo) ou condição de borda (no espaço), conforme a natureza da análise e o objetivo do modelo (Jazayeri; Werner, 2019).

As condições de Neumann — também chamadas de condições naturais ou tipo 2 — impõem, na fronteira, o fluxo normal (ou, de forma equivalente, a derivada normal da variável de estado), classificando-se (Tabela 4) como condições associadas à primeira derivada da variável dependente (Brebbia, 1978). Em fluxo de água subterrânea, isso representa trechos de contorno com vazão conhecida. Regiões impermeáveis são modeladas por Neumann nula, enquanto trechos com entrada/saída de água impõem Neumann diferente de zero. Em formulações onde poços são mapeados em elementos/pontos de fronteira, poços de bombeamento ou injeção podem ser tratados como Neumann com valor compatível ao gradiente hidráulico induzido pela vazão (Jazayeri; Werner, 2019). Para problemas puramente elípticos (Laplace), a solução de um problema com condições de Neumann é única a menos de uma constante e precisam ser complementadas com condições do primeiro tipo para conduzir a uma solução única (Evans, 2010; Bear, 1988).

Tabela 4 – Tipos de condições de contorno, onde ω corresponde à variável dependente, a constante, tal que $a \in R$, Γ é o contorno e n é o vetor normal em determinado ponto do contorno (continua)

| Condição de contorno | Descrição |
|--------------------------------|--|
| Tipo 1, essencial ou Dirichlet | $\omega = \begin{cases} \omega_i, & \text{carga hidráulica} \\ f(x) _{x \in \Gamma}, & \text{carga especificada} \end{cases}$ |
| Tipo 2, natural ou Neumann | $\frac{\partial \omega}{\partial n} = \begin{cases} q_i, & \text{vazão retirada/entrada} \\ f(x) _{x \in \Gamma}, & \text{fluxo especificado} \end{cases}$ |
| Tipo 3 ou Robin | $\frac{\partial \omega}{\partial n} + a\omega = f(x) _{x \in \Gamma}$ |

| Condição de contorno | Descrição |
|----------------------|---|
| Cauchy | $\begin{cases} \omega = f(x) \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} = g(x) \end{cases} x \in \Gamma$ |
| Mista | $\begin{cases} \omega = f(x) x \in \Gamma_1 \\ \frac{\partial \omega}{\partial n} = g(x) x \in \Gamma_2 \end{cases} ; \text{onde } \Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma$ |

Fonte: Adaptado de Jazayeri e Werner (2019) e Rodrigues Neto (2020)

As condições de Robin descrevem, na fronteira, uma combinação linear do valor da variável e de seu fluxo normal, sendo por isso denominadas condições do tipo 3 (Tabela 4). Em fluxo de água subterrânea, essa forma captura trocas proporcionais com o meio adjacente, como por exemplo, a vazão através de uma fronteira induzida por rebaixamento (diferença de carga hidráulica) ou interações com rios e lagos quando o nível do leito está abaixo da carga do aquífero vizinho (Jazayeri; Werner, 2019). Em problemas térmicos, a mesma estrutura corresponde à convecção de Newton (troca proporcional ao salto de temperatura), reforçando a interpretação de Robin como condição de interface entre o domínio e um reservatório externo (Özisik, 1993; Bear, 1988; Fetter, 2018).

As condições de Cauchy (Tabela 4) especificam simultaneamente o valor de estado e da derivada normal na mesma porção da fronteira. Embora essa combinação apareça em certos problemas inversos e configurações experimentais, na modelagem de fluxo subterrâneo ela não possui significado direto e é usualmente evitada em favor de Dirichlet/Neumann/Robin, por razões físicas e por questões de modelagem (Jazayeri; Werner, 2019; Evans, 2010).

Em condições mistas, o contorno é particionado em trechos não sobrepostos, atribuindo-se tipos distintos a cada um. Por exemplo, Neumann nula em uma parede impermeável e Dirichlet (carga constante) ao longo de um reservatório ou corpo hídrico adjacente, o que representa uma configuração frequente em problemas de valor de contorno para escoamento subterrâneo (Jazayeri; Werner, 2019). Essa composição reflete a heterogeneidade física da borda e permite incorporar, de forma coerente, segmentos impermeáveis, contatos hidráulicos e interfaces de troca (Bear, 1988; Fetter, 2018).

3.2 Métodos numéricos

Nas últimas décadas do século XX, o aumento contínuo da capacidade de processamento e de memória dos computadores digitais modificou a forma de resolver equações diferenciais em engenharia. A partir dos anos 1950–1960, o desenvolvimento de

algoritmos acompanhou a evolução do hardware, com uma notável evolução na área no segundo metade do século XX, motivado justamente pela demanda por modelos computacionais precisos e pelo rápido avanço da arquitetura de computadores (Sloan; Süli; Vandewalle, 2001). O desenvolvimento de computadores digitais no final da década de 1960 permitiu resolver sistemas algébricos cada vez mais complexos, tornando viável a implementação rotineira de esquemas numéricos para EDPs de interesse prático. Nesse contexto, soluções analíticas passaram a referências conceituais e de verificação, enquanto métodos numéricos ganharam relevância pela capacidade de tratar geometrias, propriedades e condições de contorno incompatíveis com soluções fechadas.

Dentro desse cenário, os primeiros métodos com malha para EDPs, notadamente Diferenças Finitas e Elementos Finitos, consolidaram-se como ferramentas padrão para problemas de engenharia estrutural, mecânica dos fluidos, transferência de calor e muitos outros. A transição de diferenças finitas para elementos finitos marcou uma etapa central na evolução da análise numérica de EDPs, com forte influência de trabalhos pioneiros em estruturas e elasticidade (Zienkiewicz; Taylor; Zhu, 2005; Reddy, 2006). Esses métodos passaram a fundamentar, por exemplo, o projeto de fuselagens e trens de pouso de aeronaves com base em modelos tridimensionais que avaliam tensões, fadiga e redução de peso (Rossi, 2008) e outras obras estruturais que até o momento não encontravam infraestrutura computacional para proporcionar resultados seguros para permitir a construção de cascas, superfícies irregulares e materiais heterogêneos.

No campo específico da hidrogeologia, a combinação entre Diferenças Finitas e computação deu origem ao MODFLOW, código de diferenças finitas tridimensional desenvolvido pelo *U.S. Geological Survey* na década de 1980 para simular o fluxo de água subterrânea (McDonald; Harbaugh, 1988). O programa evoluiu de implementações iniciais como MODFLOW-88 e MODFLOW-96 para versões mais completas, como MODFLOW-2000 e MODFLOW-2005, incorporando rotinas de calibração, transporte e acoplamento com outros processos. Atualmente, a linha principal de desenvolvimento é o MODFLOW 6, distribuído gratuitamente como software de código aberto pelo USGS, reconhecido como padrão internacional para simulação de condições de aquíferos e de interação água superficial–subterrânea, com versão 6.6.3 disponível para diferentes sistemas operacionais.

Paralelamente, métodos de contorno e baseados em contorno, como o Método dos Elementos de Contorno (BEM) e métodos de colocação, tiveram sua implementação numérica viabilizada, ganhando notabilidade como técnica com crescimento no número de publicações e consolidação em livros de referência, como o de Brebbia, Telles e Wrobel (1984).

Reddy (2006) destaca que a principal razão para recorrer a métodos numéricos é a própria natureza dos problemas de engenharia. A maioria dos sistemas reais envolve domínios com geometrias irregulares, heterogeneidade de materiais, condições de contorno complexas e, não raramente, relações constitutivas não lineares. Nessas situações, a formulação de uma solução analítica exata ou mesmo aproximada torna-se impraticável. O caminho natural passa então por discretizar o domínio físico e as equações diferenciais em um sistema algébrico resolvido numericamente, que aceita uma solução aproximada, porém controlada em termos de erro e de convergência (Reddy, 2006). Esse raciocínio vale tanto para um problema de flexão de viga quanto para o escoamento em aquíferos heterogêneos, e explica por que métodos com malha, de contorno e sem malha se tornaram centrais no cotidiano da engenharia.

Um segundo ponto enfatizado por Reddy (2006) diz respeito à capacidade dos métodos numéricos de realizar estudos paramétricos extensivos com custo incremental relativamente baixo. Uma vez construído o modelo computacional, é possível estudar sistematicamente o efeito de variações na geometria, em parâmetros de material, em cenários de carregamento ou de operação, repetindo a solução para dezenas ou centenas de combinações de parâmetros. Na prática, isso permite comparar alternativas de projeto ou de manejo de recursos (como diferentes cenários de bombeamento em um aquífero) sem a necessidade de campanhas experimentais de grande porte. Isso resulta em economia de tempo, redução de custos e menor exposição a riscos durante a fase de desenvolvimento. Essa flexibilidade é uma das razões pelas quais análises por elementos finitos e outros métodos numéricos se tornaram rotina em setores como aeroespacial, automotivo, petrolífero e biomédico

Um terceiro grupo de vantagens apontadas está ligado à possibilidade de incorporar, em um mesmo modelo matemático, praticamente todas as características relevantes do processo físico, algo que seria inviável em abordagens exclusivamente analíticas. Em problemas de fluxo subterrâneo, por exemplo, torna-se possível representar heterogeneidade espacial de condutividade hidráulica, anisotropia, múltiplas camadas de aquífero, fronteiras mistas e condições transientes em um único modelo numérico, sem exigir uma solução fechada para o sistema de equações resultante. Essa capacidade de adicionar complexidade de forma controlada é especialmente importante quando se pretende reproduzir respostas observadas em campo ou em laboratório, ou ainda quando se deseja testar cenários de gestão que extrapolam os dados históricos de determinado fenômeno (Reddy, 2006).

Reddy (2006) também chama atenção para o risco de se tratar o software de simulação como um modelo “caixa-preta”, pois a facilidade de uso de programas comerciais ou de códigos abertos pode levar o usuário a pular etapas fundamentais de reflexão sobre o modelo

matemático, a qualidade dos dados de entrada e a interpretação dos resultados. O autor observa que até mesmo a preparação dos dados de entrada, como, por exemplo, escolha de malha, definição de propriedades, imposição de condições de contorno e de carregamentos, exige conhecimento sólido da teoria do problema e do método numérico subjacente; sem isso, há risco de obter resultados agradáveis do ponto de vista gráfico, mas fisicamente incorretos (Reddy, 2006). Em outras palavras, a crescente capacidade de cálculo não elimina a necessidade de julgamento crítico por parte do engenheiro ou pesquisador.

Essas vantagens gerais apontadas se traduzem diretamente no contexto da simulação hidrogeológica. Obras clássicas de escoamento subterrâneo mostram que aquíferos reais são, em geral, tridimensionais, heterogêneos e anisotrópicos, com condições de contorno complexas (Bear, 1979; Anderson; Woessner, 2015). Modelos numéricos permitem representar essa complexidade com malhas de diferenças ou elementos finitos, além de incorporar módulos de transporte de massa e reações, como discutido por Zheng e Bennett (2002) na modelagem de contaminantes. Em comparação com soluções analíticas clássicas, úteis para casos idealizados, como aquíferos homogêneos e de geometria simples, abordagens numéricas possibilitam modelar o comportamento de aquíferos, de contaminação e de conflitos de uso em escalas regional e local com muito mais realismo.

Em paralelo, a pesquisa em métodos de contorno e baseados em contorno — incluindo o Método dos Elementos de Contorno e técnicas correlatas, como formulações integrais para placas, cascas e problemas de potencial — acompanhou a mesma tendência de crescimento impulsionada pela computação. A partir da década de 1970, houve crescimento acelerado no número de artigos, livros e conferências dedicados ao BEM, consolidando uma comunidade ativa e diversificada (Cheng; Cheng, 2005; Brebbia; Telles; Wrobel, 1984). Esses métodos apresentam vantagens em problemas governados por equações elípticas, como o fluxo subterrâneo em regime estacionário, nos quais é possível reduzir a discretização ao contorno do domínio físico e, em muitos casos, representar variações de propriedades com menos graus de liberdade. Ainda que a aplicação prática em hidrogeologia seja mais recente e menos difundida que a de códigos de diferenças finitas, o aumento das publicações evidencia o interesse crescente da comunidade científica em explorar essas alternativas.

3.2.1 Métodos com malha

Os métodos com malha constituem uma classe de técnicas numéricas em que o domínio físico é discretizado em subdomínios (elementos, células, nós) sobre os quais se aproximam as soluções das equações diferenciais que descrevem o fenômeno. No caso de métodos como o das Diferenças Finitas (MDF) e o dos Elementos Finitos (MEF), a resposta é obtida a partir da propagação das condições de contorno e de compatibilidade interna entre esses subdomínios, permitindo descrever campos de deslocamentos, tensões, temperatura ou pressão em domínios com geometria complexa (Reddy, 2006; Zienkiewicz; Taylor; Zhu, 2005). Entretanto, a necessidade de construir e atualizar uma malha coerente com a evolução da geometria — em problemas com grandes deformações, crescimento de trincas, contato ou malhas adaptativas — é apontada por Liu e Gu (2005) como uma das principais limitações estruturais desses métodos, motivando o desenvolvimento de estratégias alternativas, como os métodos sem malha.

Pode-se afirmar que o MDF e MEF representam a forma contemporânea de tratar numericamente problemas de engenharia. Eles partem de um domínio contínuo, subdividem-no em elementos finitos ou células de diferença, impõem condições de contorno e compatibilidade entre elementos e, a partir daí, resolvem um sistema algébrico que aproxima a solução da equação diferencial original (Reddy, 2006; Zienkiewicz; Taylor; Zhu, 2005). A robustez dessa formulação explica seu uso difundido em análise estrutural, transferência de calor, escoamento de fluidos e fluxo subterrâneo. Porém, a forte dependência de uma malha de boa qualidade faz com que o desempenho desses métodos se deteriore quando a geometria muda de forma significativa ao longo da simulação, exigindo a criação de uma nova malha frequente ou técnicas sofisticadas de atualização geométrica.

À luz dessas características e limitações, este tópico concentrou-se na apresentação dos princípios de funcionamento do Método das Diferenças Finitas e do Método dos Elementos Finitos, considerados representantes clássicos dos métodos numéricos com malha. Foram abordadas, de forma sucinta, suas formulações básicas, suas formas usuais de implementação e os aspectos que justificam seu uso extensivo na modelagem de problemas em engenharia.

3.2.1.1 *Método das Diferenças Finitas*

O método das diferenças finitas (MDF) tem raízes nas primeiras formulações em diferenças para equações diferenciais no final do século XIX e início do século XX, mas ganhou estrutura moderna com o trabalho clássico de Courant, Friedrichs e Lewy, que analisou a

aproximação de equações de física matemática por equações em diferenças e estabeleceu a condição de estabilidade hoje conhecida como condição CFL (Courant; Friedrichs; Lewy, 1967; Thomée, 2001).

Ao longo das décadas de 1950 e 1960, o desenvolvimento dos computadores digitais permitiu que essas ideias deixassem de ser apenas construções teóricas e passassem a ser implementadas em larga escala, impulsionando uma consolidação do MDF como ferramenta padrão para a solução numérica de problemas de valor inicial e de contorno em equações diferenciais parciais (EDPs). Textos de referência como Richtmyer e Morton (1967), Smith (1985) e, mais recentemente, Leveque (2007) sistematizaram o arcabouço de consistência, estabilidade e convergência dos esquemas em diferenças finitas para EDPs elípticas, parabólicas e hiperbólicas, mostrando como, com o avanço da capacidade de computação, tornou-se mais econômico e generalizável substituir soluções analíticas fechadas por soluções aproximadas em malhas espaciais e temporais.

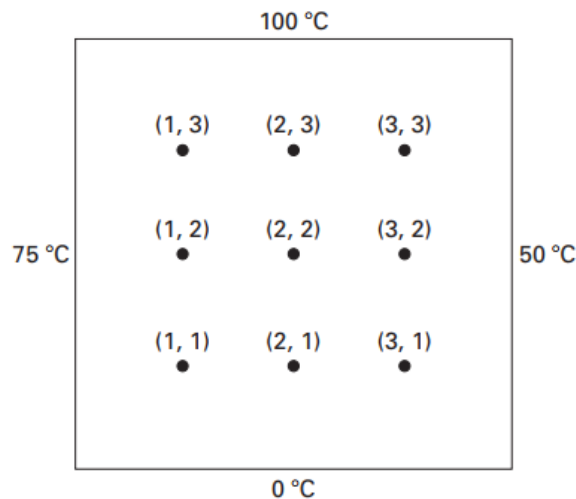
Do ponto de vista operacional, a aplicação do MDF começa pela formulação do modelo matemático contínuo, pela escolha da EDO ou EDP que representa o processo físico (por exemplo, equações de Laplace ou Poisson, equação do calor ou da onda), seguido pela definição do domínio geométrico e das condições de contorno e, quando pertinente, das condições iniciais. Em seguida, o domínio é discretizado por uma malha (tipicamente cartesiana e uniforme nas apresentações introdutórias), na qual a variável de interesse passa a ser representada por valores nodais. A escolha dos espaçamentos espaciais e temporais deve respeitar limites de precisão e, em muitos casos, de estabilidade numérica (Leveque, 2007; Strikwerda, 2004).

Sobre essa malha, derivam-se fórmulas em diferenças finitas que substituem derivadas espaciais e temporais nas equações diferenciais. O resultado é um sistema algébrico (linear ou não linear) que é resolvido a cada passo de tempo ou para o regime permanente com métodos de álgebra linear apropriados. Pré-processamentos típicos incluem a adimensionalização de equações, o escalonamento de variáveis para melhorar o condicionamento numérico, a interpolação de dados experimentais para os nós da malha e a atribuição de propriedades físicas (condutividade hidráulica, difusividade, dentre outras) às células ou nós. Quadros e Bortoli (2009) enfatizam, nesse contexto, a importância de avaliar erros de truncamento e de arredondamento em cada etapa, especialmente quando se trabalha com modelos de engenharia mais complexos.

A base matemática das fórmulas de diferenças finitas usadas no MDF é obtida por meio do truncamento da série de Taylor em torno de pontos nodais igualmente espaçados, como

apresentado no exemplo da Figura 7, em que Chapra e Canale (2008) exemplificaram a aplicação do método para determinar os valores de temperatura de uma placa metálica.

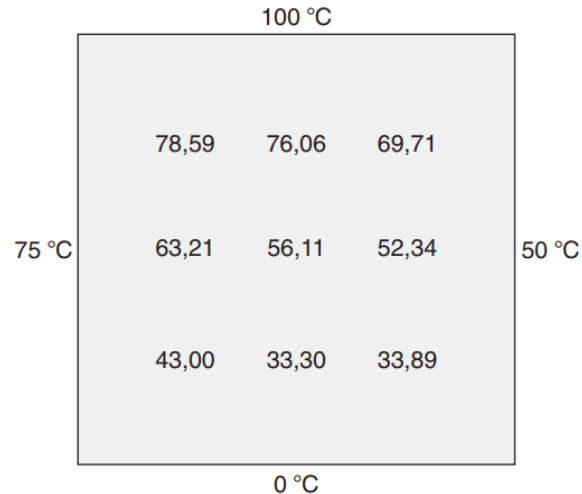
Figura 7 – Placa metálica discretizada em pontos internos segundo uma malha quadricular e com condições de contorno de Dirichlet aplicadas às suas fronteiras.



Fonte: Chapra e Canale (2008)

Expansões de Taylor da função $f(x)$ em torno de x_i , avaliadas em $x_{i+1} = x_i + h$ e em $x_{i-1} = x_i - h$, permitem escrever $f(x_{i+1})$ como combinações de $f(x_i)$, de suas derivadas em x_i e de potências de h . Subtraindo a expansão em x_{i-1} da expansão em x_{i+1} e truncando os termos de ordem superior, é possível obter uma aproximação em diferença central para a primeira derivada na forma $f'(x_i) \approx [f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})]/2h$, cujo erro de truncamento local é de ordem $O(h^2)$. Manipulações similares levam às fórmulas de diferenças progressivas e regressivas, igualmente utilizáveis no processo. Essa construção, apresentada por autores como Leveque (2007) e Quadros e Bortoli (2009), fornece o elo entre o modelo contínuo e o esquema discreto, permitindo quantificar explicitamente a ordem de precisão em função do número de termos retidos no truncamento da expansão de Taylor. A aplicação dessa metodologia, conduziu o exemplo apresentado aos resultados da Figura 8.

Figura 8 – Resultados obtidos com o MDF para o problema enunciado



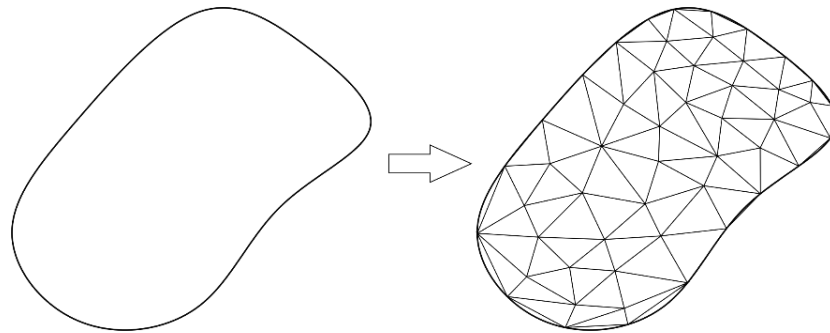
Fonte: Chapra e Canale (2008)

3.2.1.2 Método dos Elementos Finitos

O desenvolvimento histórico do Método dos Elementos Finitos (MEF) pode ser associado a uma sequência de contribuições que se iniciaram com a formulação variacional de Courant, na década de 1940, e se consolidou nos anos 1950–1960 com os trabalhos de Turner, Clough, Argyris e Zienkiewicz, entre outros, no contexto da análise estrutural de aeronaves, cascas e vigas contínuas (Gupta; Meek, 1996; Zienkiewicz; Taylor; Zhu, 2005). A partir dessa base, o MEF passou a ser empregado sistematicamente em problemas de tensões e deformações, vibrações, transferência de calor, escoamentos e campos eletromagnéticos, tornando-se um método geral para a solução numérica de equações diferenciais parciais.

O MEF discretiza o meio contínuo em elementos simples (triangulares, quadriláteros, tetraédricos etc.) (Figura 9), nos quais o campo de interesse é aproximado por funções polinomiais, preservando as propriedades globais do sistema (Reddy, 2006). Em áreas de aplicação prática, essa abordagem é rotina em engenharia estrutural, geotecnia, termomecânica, análise de escoamentos e em bioengenharia, com exemplos consolidados na odontologia, em que o MEF é usado para estudar tensões em implantes, próteses e estruturas orofaciais (Lotti *et al.*, 2006; Brito *et al.*, 2017).

Figura 9 – Exemplo de discretização e de um domínio de análise bidimensional segundo uma geometria triangular dos elementos



Fonte: Rodrigues Neto (2020)

O avanço das pesquisas sobre o método ocorreu em paralelo ao desenvolvimento de outros esquemas numéricos, como o Método das Diferenças Finitas (MDF), o Método dos Volumes Finitos e os métodos integrais, sendo fortemente impulsionado pelo aumento da capacidade computacional ao longo da segunda metade do século XX. Enquanto o MDF se apoia na substituição direta das derivadas por diferenças finitas em malhas, em geral regulares, o MEF parte de uma formulação fraca (variacional) das equações, o que favorece o tratamento de geometrias complexas, domínios irregulares e propriedades heterogêneas, por meio de malhas estruturadas ou não estruturadas (Reddy, 2006). Estudos comparativos recentes reforçam essa distinção. O MDF tende a ser mais simples de implementar e eficiente em domínios retangulares ou blocados, ao passo que o Método dos Elementos Finitos apresenta desempenho superior quando se busca maior flexibilidade geométrica, ordens elevadas de aproximação e formulações mistas ou acopladas (Pang; Chen; Sze, 2016). Essa diferença se reflete, por exemplo, na preferência histórica pelo MDF em malhas regulares de modelagem hidrológica regional, enquanto o MEF é amplamente adotado na análise de estruturas, em problemas de contato, em fraturas discretas e em domínios com fronteiras complexas, inclusive em hidrogeologia de minas e reservatórios heterogêneos (Parsasadr *et al.*, 2024).

Do ponto de vista conceitual, Segerlind (1984) destaca que a principal diferença do MEF em relação a outros métodos numéricos reside no fato de que ele se baseia explicitamente em uma formulação integral da equação diferencial, construída por meio do método dos resíduos ponderados (equação 14), para gerar o sistema de equações algébricas que aproxima a solução buscada (Segerlind, 1984; Reddy, 2006). Na equação 14, i e j são índices, $W(x)$ a função de ponderação dos resíduos e $R(x)$ é o resíduo.

$$\int_i^j W(x)R(x) dx = 0 \quad (14)$$

A partir de um domínio aproximado, definido por funções de forma dentro de cada elemento, é calculado o resíduo $R(x)$ da equação diferencial quando essa aproximação é substituída na equação original. Em seguida, impõe-se que o resíduo seja ortogonal a um conjunto de funções de ponderação $W(x)$, o que conduz, em sua forma mais simples, à condição da equação 14 em cada elemento ou no domínio como um todo (Reddy, 2006). Esse procedimento contrasta com técnicas puramente diferenciais, nas quais a equação é imposta ponto a ponto, e ressalta o papel central da função de ponderação dos resíduos na transição da equação diferencial contínua para o problema matricial discreto.

A implementação prática do MEF, tal como sistematizada por Segerlind (1984) pode ser descrita como uma sequência de etapas encadeadas. Em primeiro lugar, procede-se à discretização da região de interesse, dividindo-se o domínio contínuo em subdomínios finitos (elementos) segundo uma geometria adequada ao problema, como, por exemplo, malhas triangulares ou quadrilaterais em duas dimensões e tetraédricas ou hexaédricas em três dimensões. Nessa etapa, é definida a conectividade entre nós e elementos, bem como a densidade de malha em diferentes regiões; uma malha mais refinada tende a proporcionar maior precisão, ao custo de um sistema de equações de maior ordem (Segerlind, 1984; Zienkiewicz; Taylor; Zhu, 2005). Em seguida, são definidas as funções de interpolação ou funções de forma, que descrevem como a variável dependente varia no interior de cada elemento em função dos valores nodais. Essas funções podem ser lineares, quadráticas ou de ordem superior, e sua escolha afeta diretamente a capacidade de o modelo representar gradientes acentuados, descontinuidades e efeitos locais relevantes (Reddy, 2006).

Na etapa subsequente, é construído o sistema de equações elementares por meio da aplicação do método dos resíduos ponderados à formulação fraca do problema. A substituição da aproximação interpolada na equação diferencial, combinada com a escolha das funções de ponderação e com integrais avaliadas sobre o elemento (ou sobre o domínio de integração associado), conduz às matrizes de rigidez, massa e às forças equivalentes em cada elemento (Segerlind, 1984).

Essas contribuições elementares são então reunidas em um sistema global por meio de um processo de montagem, no qual se impõe a continuidade das variáveis nos nós compartilhados entre elementos e se obtém um sistema linear ou não linear que representa o problema discreto. As condições de contorno essenciais (por exemplo, valores prescritos de

deslocamento ou de carga hidráulica) são incorporadas diretamente nas equações globais por substituição dos graus de liberdade correspondentes, enquanto condições naturais (fluxos, forças distribuídas) aparecem naturalmente nos termos de força do sistema. A solução numérica desse sistema, usando *solvers* diretos ou iterativos apropriados para matrizes esparsas, fornece os valores discretos da variável principal, que podem ser pós-processados para obtenção de grandezas derivadas, como tensões, fluxos, gradientes ou campos de velocidade, por meio das próprias funções de forma e de suas derivadas (Reddy, 2006; Zienkiewicz; Taylor; Zhu, 2005).

Aplicações recentes mostram a relevância do MEF na modelagem de fenômenos complexos e no desenvolvimento de tecnologias em engenharia de recursos hídricos e estruturas. Na hidrogeologia de minas, Parsasadr *et al.* (2024) desenvolveram um modelo tridimensional de escoamento subterrâneo baseado em elementos finitos, com malha dinâmica, para simular a entrada de água e as pressões neutras nas paredes da mina a céu aberto de Dareh-Zar, no Irã, avaliando estratégias de drenagem com poços de bombeamento e drenos horizontais ao longo do ciclo de vida da mina. Em monitoramento de segurança de barragens, Vulovic *et al.* (2024) aprimoraram um *solver* de MEF acoplado a um sistema de monitoramento estrutural, desenvolvendo algoritmos de interpolação de pressões de poro e temperatura em pontos instrumentados não coincidentes com nós da malha, aumentando a robustez da comparação entre previsões numéricas e medições de campo. Esses estudos evidenciam que, apoiado em formulações variacionais robustas e em infraestrutura computacional cada vez mais sofisticada, o Método dos Elementos Finitos permanece como um dos principais instrumentos para a simulação numérica de problemas em engenharia, ciência dos materiais e recursos hídricos.

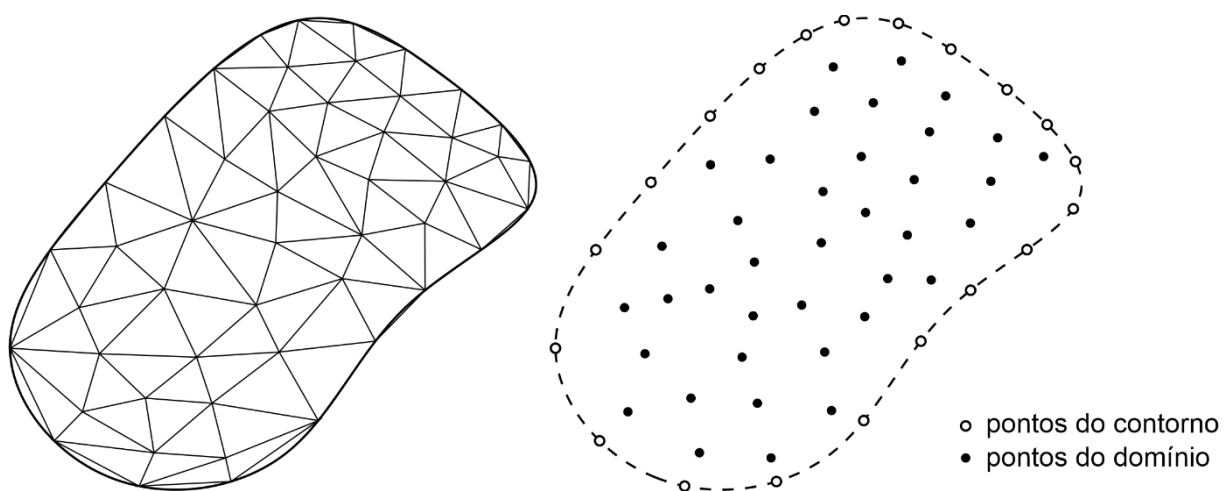
3.2.2 Métodos livres de malha

Os métodos livres de malha (*meshless* ou *meshfree*) distinguem-se dos métodos clássicos baseados em malha, como o Método das Diferenças Finitas (MDF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF), por aproximarem a solução analítica a partir de um conjunto de pontos ou partículas distribuídos no domínio, sem a necessidade de conectá-los em elementos ou volumes de controle. De acordo com Liu e Gu (2005), a exigência mínima para que uma técnica seja de fato classificada como livre de malha é que ela não exija a construção de uma malha de elementos na etapa de cálculo dos valores aproximados da variável de interesse. Em uma condição ideal, a malha é dispensável em todas as fases da modelagem. Nessa perspectiva, o modelo é construído em torno de domínios de influência associados a nós (ou partículas), nos

quais o campo de interesse é aproximado por funções de forma obtidas, por exemplo, por mínimos quadrados móveis ou por funções de base radial (Liu; Gu, 2005).

Do ponto de vista geométrico, os métodos *meshless* apresentam vantagens relevantes ao eliminar ou reduzir de forma significativa os erros de discretização associados à representação de fronteiras curvas, interfaces complexas e descontinuidades por elementos planos ou volumes poligonais, típicos de formulações com malha, conforme ilustrado simplificada na Figura 10. A flexibilidade para concentrar pontos em regiões de forte gradiente, em fraturas ou ao longo de contornos móveis permite representar a geometria real com maior fidelidade e adaptar o refinamento da discretização sem necessidade de reconstruir a malha inicial. Em recursos hídricos, por exemplo, modelos baseados em formulações locais de Petrov–Galerkin com mínimos quadrados móveis (MLPG) têm sido empregados em simulações de escoamento subterrâneo e em modelos acoplados de gestão de aquíferos, apresentando boa concordância com soluções de referência e explorando vantagens sobre técnicas em malha em domínios heterogêneos (Xiao *et al.*, 2017; Rodrigues Neto *et al.*, 2020). Em mecânica dos sólidos e otimização estrutural, algoritmos livres de malha têm sido aplicados à propagação tridimensional de trincas em cascas curvas e à otimização topológica sob múltiplos carregamentos, evitando reconstrução sucessiva de malha e mantendo boa acurácia quando comparados a modelos de elementos finitos de referência (Peng *et al.*, 2020; Li *et al.*, 2020).

Figura 10 – Croqui de um mesmo domínio discretizado em elementos finitos (à esquerda) e pontos (à direita)



Fonte: Rodrigues Neto (2020)

Conforme apresentado anteriormente, os métodos livres de malha destacam-se por oferecerem, em primeiro lugar, a eliminação do esforço de pré-processamento associado à

construção e ao refinamento de malhas; em segundo lugar, maior facilidade de implementação em domínios com geometria complexa ou altamente irregular; em terceiro lugar, maior flexibilidade para representar fraturas, falhas e seu crescimento em meios contínuos sem a necessidade de reconstrução de malha; e, por fim, um controle mais direto da precisão numérica por meio do ajuste da distribuição e da quantidade de pontos no domínio (Liu; Gu, 2005).

Do ponto de vista da formulação matemática, os métodos *meshless* podem ser agrupados em três classes principais: (i) métodos baseados em formulação fraca (*weak formulation*), (ii) métodos baseados em formulação forte ou técnicas de colocação (*strong formulation*) e (iii) métodos mistos, que combinam ambas as abordagens. Nos métodos fundamentados em formulação fraca, a equação diferencial que rege o problema é reescrita em forma variacional, e o sistema algébrico é obtido impondo que um resíduo ponderado da equação seja nulo em domínios globais ou locais, de maneira análoga aos esquemas de Galerkin e Petrov–Galerkin. Nessa categoria enquadram-se, por exemplo, o *Diffuse Element Method* (DEM), o *Element-Free Galerkin* (EFG) e as diversas variantes do *Meshless Local Petrov–Galerkin* (MLPG), que utilizam aproximações por mínimos quadrados móveis ou *kernels* de reprodução para construir funções de forma em torno de cada ponto, combinadas com integrais sobre subdomínios locais ou sobre o contorno (Nayroles; Touzot; Villon, 1992; Belytschko; Lu; Gu, 1994; Atluri; Zhu, 1998; Liu, 2009; Liu; Gu, 2005).

Já os métodos *meshless* baseados em formulação forte, ou em técnicas de colocação, impõem diretamente as equações diferenciais e as condições de contorno em um conjunto de pontos de colocação, sem recorrer a integrais de uma forma fraca. Esse procedimento equivale à escolha de funções de ponderação do tipo delta de Dirac, de modo que o resíduo seja anulado ponto a ponto no domínio ou no contorno (Brebbia; Dominguez, 1992; Liu; Gu, 2005). Exemplos representativos dessa classe incluem o método de Kansa, que emprega funções de base radial do tipo multiquádrica em um esquema de colocação e os métodos de fronteira baseados em soluções fundamentais, como o Método das Soluções Fundamentais (MSF) e variantes com RBF (Kansa, 1990; Fedoseyev; Friedman; Kansa, 2002; Chen, 2003; Liu, 2009).

Os métodos mistos combinam, em um mesmo esquema numérico, trechos em formulação fraca e trechos em formulação forte, explorando as vantagens de cada abordagem em regiões ou tipos de condição de contorno distintos. Em termos gerais, é comum que a formulação fraca seja empregada em subdomínios ou em condições de contorno de tipo Neumann, nas quais a integração local melhora a estabilidade e o tratamento das derivadas. A colocação direta é utilizada para condições de contorno essenciais (tipo Dirichlet) ou para pontos específicos em que se deseja impor a equação diferencial de forma mais rígida (Liu; Gu,

2005). Métodos como o *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH), originalmente proposto para problemas de astrofísica e posteriormente estendido a mecânica dos solos e outras áreas, e o *Meshfree Weak–Strong Form Method* (MWS), desenvolvido a partir da combinação de uma forma fraca local com a formulação forte em pontos selecionados, são exemplos típicos dessa categoria híbrida, na qual o equilíbrio entre custo computacional, robustez e facilidade de imposição das condições de contorno é obtido por meio da integração articulada das duas formas de formulação (Lucy, 1977; Gingold; Monaghan, 1977; Liu; Gu, 2003; Liu, 2009).

3.3 Método das Soluções Fundamentais

O Método das Soluções Fundamentais (MSF) é um procedimento numérico de contorno, verdadeiramente livre de malha, no qual a solução aproximada de um problema elíptico é escrita como combinação linear de soluções fundamentais do operador diferencial em estudo, e os coeficientes desconhecidos são associados a pontos-fonte situados fora do domínio físico (Cheng; Hong, 2020; Fairweather; Karageorghis, 1998, Chen; Karageorghis; Smyrlis, 2008). Essa ideia, hoje conhecida como MSF, remonta aos trabalhos de Kupradze e Aleksidze na década de 1960 (Kupradze; Aleksidze, 1964), em que equações funcionais com fontes externas foram propostas para resolver problemas de valor de contorno, e foi sistematizada posteriormente por Mathon e Johnston (Mathon; Johnston, 1977) e por revisões clássicas como a de Fairweather e Karageorghis (Fairweather; Karageorghis, 1998), que consolidaram o método como uma alternativa de método de contorno livre de malha.

Nessa perspectiva, a solução aproximada \tilde{u} é expressa, na equação 15, como soma ponderada de soluções fundamentais $F(x, x_i)$, definidas para o operador de interesse, cabendo aos coeficientes λ_i ajustar-se às condições de contorno impostas para cada ponto de colocação x_i em correspondência a pontos de fonte x .

$$\tilde{u} = \sum_i \lambda_i F(x, x_i) \mid x, x_i \in R^n \quad (15)$$

A formulação adotada considera um problema de valor de contorno para a equação de Laplace em domínio bidimensional, cuja fronteira Γ é subdividida em duas porções: Γ_1 , onde se especificam condições de Dirichlet (tipo 1), e Γ_2 , onde se estabelecem condições de Neumann (tipo 2). As condições de contorno são organizadas na equação 16, conforme apresentado por

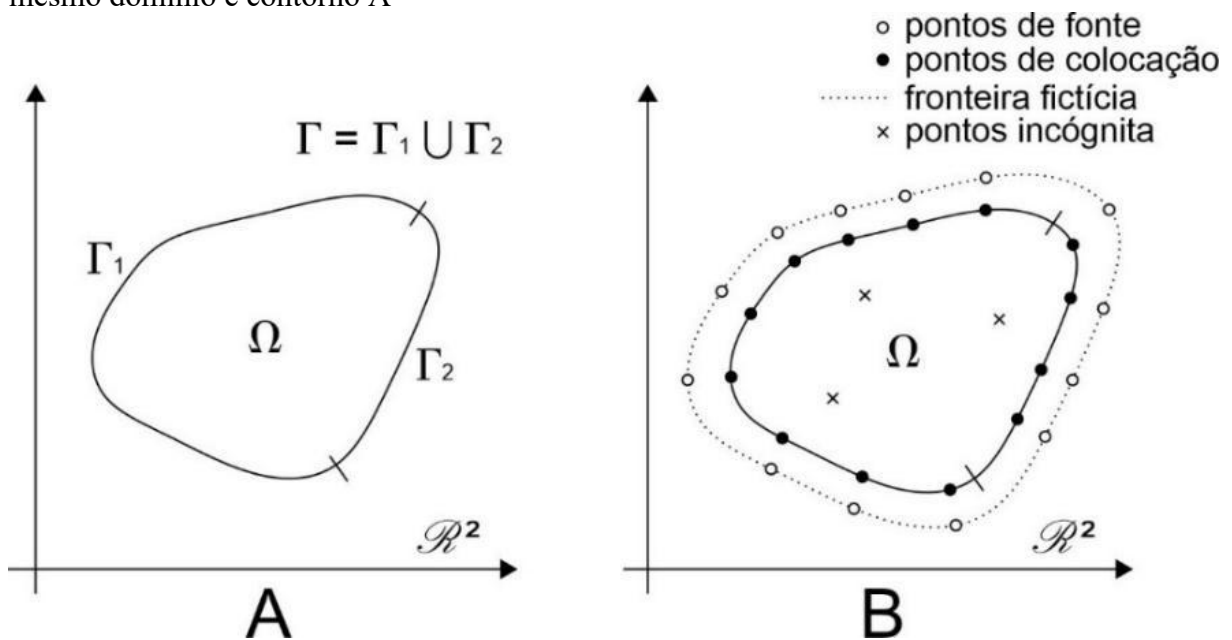
Rodrigues Neto (2020), que representa, de forma compacta, a imposição de valores prescritos da variável dependente nas duas subdivisões do contorno. Essa decomposição é particularmente conveniente no contexto do MSF porque permite agrupar, em blocos distintos, as informações de fronteira que serão utilizadas para formar o sistema algébrico resultante da aplicação do método, no qual as equações são satisfeitas em um conjunto finito de pontos sobre a fronteira (Fairweather; Karageorghis, 1998; Cheng; Hong, 2020).

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{u}(x_i) = u(x_i) \mid x_i \in \Gamma_1 \\ \frac{\partial \tilde{u}(x_j)}{\partial n} = \frac{\partial u(x_j)}{\partial n} \mid x_j \in \Gamma_2 \end{array} \right. \quad (16)$$

A solução fundamental do operador de Laplace em duas dimensões depende do vetor distância $r = x - x_i$ entre o ponto de observação e o ponto-fonte e apresenta singularidade logarítmica quando $r \rightarrow 0$. Do ponto de vista numérico, isso significa que, se fontes e pontos de colocação coincidirem, surgem entradas infinitas na matriz de coeficientes, inviabilizando a montagem do sistema algébrico (Fairweather; Karageorghis, 1998). Para contornar essa indeterminação, a formulação adotada desloca os pontos-fonte para fora do domínio físico, mantendo os pontos de colocação sobre a fronteira. A distância entre a fronteira real e a fronteira fictícia associada às fontes torna-se, assim, um parâmetro adicional do método, cuja escolha influencia tanto a precisão quanto a estabilidade numérica da solução (Chen; Wang, 2010; Li, 2005).

A Figura 11 esquematiza a configuração geométrica típica considerada no MSF para problemas bidimensionais. O domínio físico Ω encontra-se envolto por uma fronteira Γ sobre a qual são distribuídos os pontos de colocação. Uma segunda curva, exterior ao domínio, representa a fronteira fictícia, na qual se posicionam os pontos-fonte associados às soluções fundamentais. Os pontos de interesse no interior do domínio, nos quais se deseja estimar o potencial hidráulico, são calculados a posteriori a partir da combinação linear indicada na equação 15. Esse arranjo distingue claramente três conjuntos de pontos (contorno, fontes e domínio interno) e evidencia o caráter verdadeiramente livre de malha do MSF, uma vez que nenhuma discretização volumétrica é necessária para construir a aproximação (Rodrigues Neto, 2020; Rodrigues Neto *et al.*, 2020).

Figura 11 - (A) Domínio e contorno do problema (B) Modelagem aplicada ao MSF para o mesmo domínio e contorno A



Fonte: Rodrigues Neto (2020)

A partir da representação da solução na equação 15 e das condições de contorno organizadas na equação 16, é possível apresentar o problema em notação matricial, resultando no sistema de equações (equação 17) (Rodrigues Neto, 2020). Nessa expressão, $[\lambda]$ representa a matriz de coeficientes, $\begin{bmatrix} F(x, x_i) \\ \frac{\partial F(x, x_j)}{\partial n} \end{bmatrix}$ representa o bloco dos valores da solução fundamental e de suas derivadas normais avaliadas entre pontos-fonte e pontos de colocação sobre o contorno, enquanto os vetores $\begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}$ do lado direito agrupam os dados de Dirichlet e Neumann especificados na fronteira. A estrutura matricial deixa explícita a natureza de método de contorno do MSF, onde todas as entradas da matriz associam pares de pontos situados na fronteira do domínio físico e na fronteira fictícia, sem a necessidade de pontos de integração no interior do domínio (Fairweather; Karageorghis, 1998; Cheng; Hong, 2020).

$$[\lambda] \begin{bmatrix} F(x, x_i) \\ \frac{\partial F(x, x_j)}{\partial n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$[\lambda] = \begin{bmatrix} F(x, x_i) \\ \frac{\partial F(x, x_j)}{\partial n} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix} \quad (18)$$

$$\tilde{u}(s_i) = [\lambda][F(x_i, s_i)] = \sum \lambda_i F(x_i, s_i) \quad (19)$$

Ao isolar o vetor de coeficientes $[\lambda]$ no sistema (equação 17), obtém-se a equação 18, que expressa $[\lambda]$ como solução de um sistema linear cuja matriz principal depende apenas da geometria do contorno e da posição da fronteira fictícia enquanto a solução numérica depende da inversão dessa matriz e do produto interno com o bloco de condições de contorno. Uma vez determinados esses coeficientes, a equação 19 é utilizada para calcular a variável dependente em qualquer ponto do domínio de interesse, bastando avaliar as soluções fundamentais entre esse ponto e cada uma das posições de fonte. Em conjunto, as equações 17 a 19 sintetizam o núcleo operacional do MSF: (i) montar a matriz de coeficientes e os vetores de dados a partir das condições de contorno; (ii) resolver o sistema linear para obter os coeficientes; e (iii) pós-processar o campo de solução em pontos internos, traçando, por exemplo, curvas equipotenciais ou campos de fluxo (Cheng; Hong, 2020; Fairweather; Karageorghis, 1998).

A qualidade dos resultados fornecidos pelas equações 17 a 19 depende fortemente da posição relativa entre a fronteira fictícia e o contorno físico, bem como do número e da distribuição dos pontos-fonte. Estudos de análise numérica mostram que, para geometrias simples, a precisão tende a aumentar quando a fronteira fictícia é afastada do domínio e quando se eleva o número de fontes, mas esse ganho é acompanhado de crescimento acentuado do número de condicionamento da matriz, que pode tornar o sistema praticamente singular em aritmética de ponto flutuante (Li, 2005; Young *et al.*, 2008). Esse comportamento, para o caso da equação de Laplace em domínios circulares concentricamente deslocados, evidencia essa relação inversa entre precisão e condicionamento, o que motivou o desenvolvimento de formulações bem condicionadas e versões localizadas do MSF, destinadas a melhorar a estabilidade numérica sem sacrificar a acurácia (Drombosky; Meyer; Ling, 2009).

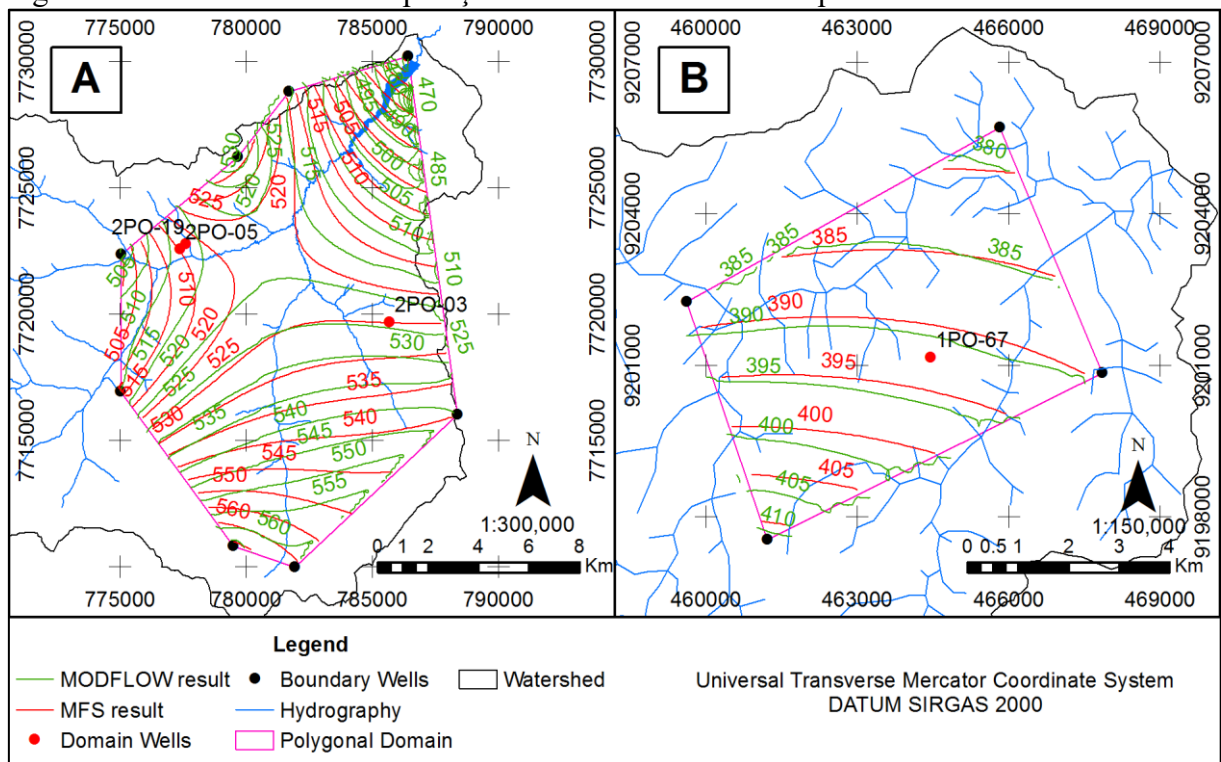
Outra limitação estrutural do MSF clássico, que decorre do uso exclusivo da solução fundamental do operador homogêneo, é a impossibilidade de considerar diretamente termos-fonte volumétricos e dependência temporal explícita. Para equações de Poisson ou problemas transientes regidos por operadores modificados, reiteradamente foram propostos esquemas nos quais uma solução particular é construída analiticamente ou por técnicas de recíprocas múltiplas e, em seguida, superposta à solução homogênea obtida pelo MSF. Trabalhos como os de Alves e Chen (2005), para problemas elípticos não homogêneos, de Chantasiriwan (2006) e de Johansson e Lesnic (2009), para condução de calor dependente do tempo demonstram que

diferentes combinações entre soluções particulares e a estrutura básica do MSF permitem estender o método a classes mais amplas de problemas, embora à custa de formulações específicas para cada tipo de equação e dado de contorno (Alves; Chen, 2005; Chantasiriwan, 2006; Johansson; Lesnic, 2009; Golberg; Chen, 1999).

No contexto de recursos hídricos, sob as hipóteses clássicas de Dupuit–Forchheimer, o escoamento subterrâneo em aquíferos sedimentares isotrópicos, em regime estacionário, é descrito pela equação de Laplace, o que torna o MSF particularmente atraente para a simulação de potenciais hidráulicos (Haitjema, 1995). Nesse cenário, a fronteira pode ser construída a partir de poços de observação cujos níveis estáticos representam condições de contorno de Dirichlet, enquanto a solução fundamental do operador de Laplace em duas dimensões é empregada nas equações (33) a (37) para estimar o potencial em qualquer ponto interno do domínio de interesse. Haitjema (1995) apresenta de forma sistemática essa ligação entre escoamento em aquíferos e equações harmônicas, e estudos mais recentes (Wang; Zheng, 2015; Xiao *et al.*, 2017; Ku; Xiao; Liu, 2019), ilustram a adequação do MSF para simular problemas de fluxo em meios porosos reais.

A aplicação do MSF à modelagem de aquíferos reais discutida neste trabalho segue a linha metodológica apresentada por Rodrigues Neto *et al.* (2020), em que dados de poços de observação delimitam o domínio de análise e alimentam as equações 17 a 19. A Figura 12, por exemplo, mostra o resultado da simulação para duas áreas de estudo, a Área de Proteção Ambiental do córrego Guariroba e um aquífero urbano em Juazeiro do Norte, comparando equipotenciais geradas pelo MSF com aquelas obtidas por um modelo de diferenças finitas implementado no MODFLOW. Nesses estudos, a distância entre a fronteira fictícia e o contorno físico foi tratada como parâmetro de calibração, escolhida de modo a minimizar o erro relativo entre valores simulados e níveis piezométricos observados, o que evidenciou a sensibilidade do método a esse parâmetro e, ao mesmo tempo, sua capacidade de reproduzir de forma consistente padrões de escoamento em sistemas hidrogeológicos reais (Rodrigues Neto, 2020; Rodrigues Neto *et al.*, 2020).

Figura 12 – Resultados da comparação do MSF e MODFLOW para dois estudos de caso



Fonte: Rodrigues Neto *et al.* (2020)

3.3.1 Solução Fundamental

A solução fundamental de um operador diferencial deriva do conceito de equação de Green. Segundo esse conceito, uma solução fundamental F (equação 20) é uma função que aplicada ao operador diferencial resulta na função Delta de Dirac, onde L representa o operador diferencial, F , a solução fundamental, e $\delta(t - t')$, a função Delta de Dirac, definida na equação 21, aplicada ao ponto $t' \in R^n$. Na equação 20 a subtração $(t - t')$ significa a distância euclidiana entre esses dois pontos para problemas no R^2 (Boas, 1983).

$$LF = \delta(t - t') \quad (20)$$

Uma interpretação física da definição anterior permite associar a solução fundamental a um estímulo unitário, um impulso, aplicado ao operador diferencial no ponto t' e medido no ponto t . São apresentados a função Delta de Dirac na equação 21 e uma propriedade na equação 22) Essa propriedade é consequência do fato de a integral da função Delta de Dirac ser igual a 1 ao longo da região em que a sua variável está definida, desde que o intervalo de integração contenha o ponto t' (Boas, 1983).

$$\delta(t - t') = \begin{cases} 0, & \text{se } t \neq t' \\ \infty, & \text{se } t = t' \end{cases} \quad (21)$$

$$f(t_0) = \int f(t)\delta(t - t_0) dt \quad (22)$$

Aplicando a definição apresentada na equação 20 ao operador Laplaciano (equação 11), obtêm-se a equação 23.

$$\nabla^2 F = \delta(t - t'), \quad t \in R^2 \quad (23)$$

Para duas dimensões, a solução fundamental do operador Laplaciano é igual a equação 24, onde r é o vetor distância entre os pontos t e t' da definição da equação 21. Essa função satisfaz o operador Laplaciano para qualquer ponto dentro do domínio e pode ser utilizada através da equação 20 para encontrar uma solução particular de uma situação não-homogênea aplicando a propriedade da equação 22, onde $f(t)$ representa a inhomogeneidade.

$$F(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi} \ln r \quad (24)$$

A partir da equação 24 é possível aplicar o processo de diferenciação ordinário para obter suas derivadas parciais. O primeiro passo é descrever a grandeza r como a distância euclidiana entre os pontos t e t' da equação 23. Assim, as coordenadas no plano x e y correspondem às coordenadas do ponto t e x' e y' às coordenadas do ponto t' .

$$r = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2} \quad (25)$$

Substituindo a equação 25 na equação 24, obtém-se o seguinte.

$$F(r) = -\frac{1}{2\pi} \ln \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2} \quad (26)$$

Ao derivar a equação 26 com relação a x e a y , após as devidas manipulações, é possível obter as equações 27 e 28, que representam as derivadas parciais da Solução Fundamental do operador Laplaciano no plano cartesiano em duas dimensões.

$$\frac{\partial F}{\partial x} = -\frac{1}{2\pi} \cdot \frac{(x - x')}{[(x - x')^2 + (y - y')^2]} \quad (27)$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = -\frac{1}{2\pi} \cdot \frac{(y - y')}{[(x - x')^2 + (y - y')^2]} \quad (28)$$

Ao utilizar os conceitos da álgebra vetorial, é possível determinar o valor da derivada direcional da solução fundamental do operador Laplaciano na direção de um vetor unitário n (equação 29). Para facilitar o entendimento do produto vetorial, os vetores $grad F$ (gradiente da função F) e n foram escritos em notação vetorial, evidenciando os componentes unitários do sistema cartesiano ortogonal canônico i e j , onde n_x é a componente de n no eixo x e n_y é a componente de n no eixo y .

$$\frac{\partial F}{\partial n} = \mathbf{grad} F \cdot \mathbf{n} \quad (29)$$

$$\frac{\partial F}{\partial n} = \left(\frac{\partial F}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial F}{\partial y} \mathbf{j} \right) \cdot (n_x \mathbf{i} + n_y \mathbf{j}) = \frac{\partial F}{\partial x} n_x + \frac{\partial F}{\partial y} n_y$$

$$\frac{\partial F}{\partial n} = -\frac{1}{2\pi} \cdot \left\{ \frac{(x - x') \cdot n_x + (y - y') \cdot n_y}{[(x - x')^2 + (y - y')^2]} \right\} \quad (30)$$

A equação 30 mostrou como determinar a derivada direcional da Solução Fundamental do Operador Laplaciano na direção de um vetor unitário n a partir da substituição das equações 27 e 28 na equação 29. Essa determinação é fundamentalmente importante para a correta aplicação do Método das Soluções Fundamentais em sua formulação básica, sobretudo para condições de contorno do tipo 2, 3 ou mistas.

3.3.2 Inomogeneidades e alternativas da literatura

Uma das limitações intrínsecas do Método das Soluções Fundamentais está na dificuldade de lidar com problemas transientes e equações diferenciais não-homogêneas. Isso ocorre porque o MSF, em sua formulação clássica, depende exclusivamente do uso de soluções fundamentais homogêneas — isto é, soluções da equação diferencial sem termo-fonte. Como destacado por Golberg e Chen (1999), a ausência de soluções fundamentais fechadas para muitos operadores e a incapacidade de representar diretamente termos não homogêneos impõem barreiras à aplicação direta do método em problemas dependentes do tempo ou com fontes distribuídas. Em tais casos, a formulação original do MSF não consegue reproduzir adequadamente o comportamento dinâmico ou espacial do sistema, levando a erros significativos ou à necessidade de estratégias suplementares.

Para contornar essa limitação, diversas abordagens foram propostas. Uma das alternativas é o uso de métodos de particularização, como a técnica do *dual reciprocity method* (DRM), que permite incorporar termos não homogêneos aproximando-os por funções de base conhecidas (Atkinson, 2010). O DRM expande o termo-fonte em funções radiais ou polinomiais, gerando uma solução particular aproximada que pode ser usada juntamente com a solução fundamental homogênea. Embora essa técnica amplie significativamente o alcance do MSF, sua precisão depende fortemente da qualidade da aproximação do termo-fonte, e pode resultar em sistemas numéricos maiores e mal condicionados, como observado por Chen, Karageorghis e Smyrlis (2008).

Uma alternativa discutida envolve o uso de soluções fundamentais modificadas, como soluções fundamentais transientes ou soluções fundamentais especializadas que incorporam termos de fonte ou condições temporais (Karageorghis; Fairweather, 1999). Essas abordagens geralmente exigem soluções fundamentais mais complexas — que nem sempre estão disponíveis em forma fechada — e podem resultar em implementações numericamente mais custosas. Em contrapartida, quando tais soluções existem, elas fornecem excelente fidelidade ao comportamento físico do problema, preservando as vantagens originais do MSF, incluindo a ausência de malha e a simplicidade geométrica.

3.4 Modelagem do fluxo de água subterrâneo

O objetivo da apresentação desse tópico foi o de mostrar, através da revisão da literatura, porque os problemas de fluxo de água subterrânea podem, sob algumas hipóteses, serem

modelados pela Equação Diferencial Parcial de Laplace. Para alcançar esse objetivo foram revisitados brevemente os conceitos básicos do fluxo de água de subterrâneo, de forma similar ao que foi realizado por Rodrigues Neto (2020), porém de forma menos detalhada, para alinhar as considerações técnicas e práticas desse tipo de aplicação. Esse tópico foi importante, porque um dos estudos de caso foi representado por um sistema aquífero real, sobre o qual recaem as considerações que foram apresentadas a seguir.

3.4.1 Lei de Darcy

A lei de Darcy pode ser enunciada, na formulação usada em hidrogeologia, como a relação linear entre descarga específica e gradiente hidráulico em um meio poroso saturado. Em uma geometria unidimensional simples, a forma original pode ser escrita como a equação 31, onde k é a condutividade hidráulica do meio, A é a área da seção de escoamento, Δh a diferença de carga e L o comprimento da coluna de solo (Haitjema, 1995).

$$Q = -k \cdot A \cdot \frac{\Delta h}{L} \quad (31)$$

Historicamente, a lei foi estabelecida por Henry Darcy em 1856, em um apêndice de sua obra *Les fontaines publiques de la ville de Dijon* (Darcy, 1856). No contexto da ampliação e racionalização do sistema de abastecimento de água de Dijon, Darcy realizou ensaios de permeâmetro em coluna, inicialmente no hospital de Dijon, com uma coluna cilíndrica de ferro preenchida com areia bem classificada, submetida a escoamento de água sob regime permanente. A coluna era alimentada por um reservatório com carga controlada e equipada com piezômetros em alturas conhecidas. Para diferentes combinações de altura de carga e espessura de areia, Darcy mediu a vazão e mostrou que a vazão é proporcional à diferença de carga entre duas seções e à área, e inversamente proporcional ao comprimento da coluna saturada. A partir dessa proporcionalidade, introduziu uma constante de proporcionalidade — hoje interpretada como condutividade hidráulica — e escreveu a relação linear que ficou conhecida como lei de Darcy. Esses experimentos, reinterpretados posteriormente em termos de número de Reynolds, mostram que a validade da lei está associada a escoamentos laminares em meios porosos, com efeitos inerciais desprezíveis (Hubbert, 1956; Simmons, 2003; Haitjema, 1995).

Atualmente, a lei de Darcy é a base para a formulação de modelos de fluxo subterrâneo em meio poroso equivalente, desde soluções analíticas e métodos integrais (como o método dos

elementos analíticos, em que a combinação de Darcy com continuidade leva a equações do tipo Laplace/Poisson para a carga hidráulica) até modelos numéricos de diferenças finitas, elementos finitos e elementos analíticos-híbridos (Haitjema, 1995; Strack, 2003; Schweizer, 2015).

A vazão específica, um conceito que decorre da formulação inicial é útil na forma da equação 32 em notação de índices, obtida através da divisão da equação 31 pela área da seção transversal.

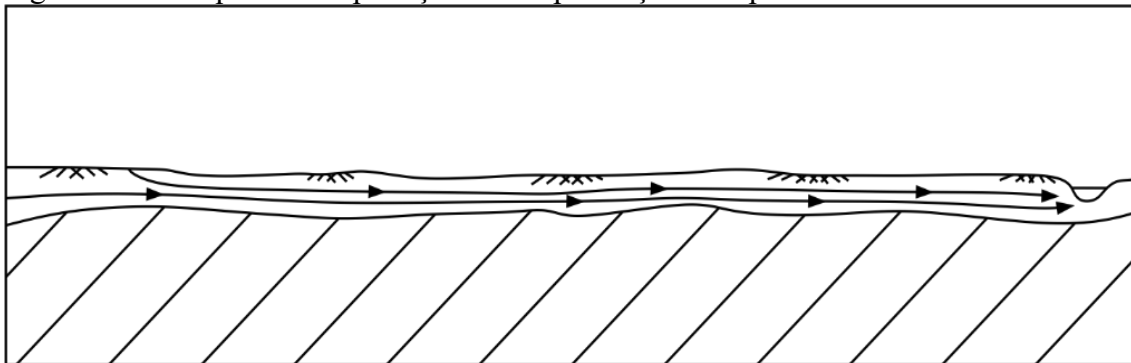
$$q_i = -k_{ij} \cdot \partial_j \phi \quad (32)$$

3.4.2 Simplificação de Dupuit-Forchheimer

A simplificação de Dupuit-Forchheimer consiste em um conjunto de hipóteses que permitem descrever o escoamento em aquíferos livres (lençol freático) tratando-o como essencialmente horizontal, isto é, bidimensional no plano, com o gradiente de carga vertical desprezado (Dupuit, 1863; Bear, 1979; Haitjema, 1995). Ela foi desenvolvida inicialmente por Jules Dupuit, na metade do século XIX, ao estudar o escoamento em lençóis freáticos e galerias de drenagem, e posteriormente refinada por Philipp Forchheimer no início do século XX, ao discutir limites de validade e generalizações para meios porosos (Dupuit, 1863; Forchheimer, 1901; Mussa; Mjemah; Muzuka, 2020).

Em termos conceituais, assume-se que a carga hidráulica pode ser aproximada pela cota da superfície freática e que as linhas de corrente são praticamente horizontais (Figura 13), o que facilita muito a formulação analítica do problema em comparação com uma descrição totalmente tridimensional (Haitjema, 1995; Haitjema; Mitchell-Bruker, 2005)

Figura 13 – Croqui da interpretação da simplificação e Dupuit-Forchheimer



Fonte: Rodrigues Neto (2020)

Na modelagem de aquíferos, essa simplificação é útil porque permite representar grandes sistemas hidrogeológicos com custo computacional e complexidade matemática muito menores, mantendo ainda uma boa aproximação do comportamento físico para aquíferos relativamente rasos e de grande extensão, com gradientes suaves (Haitjema, 1995; Mussa; Mjemah; Muzuka, 2020). Ela viabiliza soluções analíticas clássicas para fluxo em aquíferos livres (como problemas de rebaixamento em poços ou fluxo regional em bacias sedimentares) e fundamenta modelos numéricos bidimensionais, em que o aquífero é tratado como uma camada equivalente com espessura variável (Haitjema, 1995). Dessa forma, a simplificação de Dupuit-Forchheimer funciona como uma ponte entre a física detalhada do escoamento tridimensional e as ferramentas práticas de análise e modelagem, permitindo incorporar a dinâmica do lençol freático em estudos de disponibilidade hídrica, interação rio-aquífero e impacto de bombeamentos sem a necessidade de resolver explicitamente o campo de velocidades em profundidade (Haitjema; Mitchell-Bruker, 2005; Mussa; Mjemah; Muzuka, 2020).

3.4.3 Equação da continuidade

A equação da continuidade expressa matematicamente a conservação de massa em um volume de controle. A taxa de variação de armazenamento é igual à diferença entre o que entra e o que sai. Em forma diferencial, para um meio saturado incompressível, ela pode ser escrita como a equação 33, em que q é o vetor descarga específica e θ representa o conteúdo de água ou armazenamento por unidade de volume (Bear, 1979; Domenico; Schwartz, 1998). No caso estacionário, em meio incompressível e sem fontes ou sumidouros internos, a variação de armazenamento desaparece e a continuidade reduz-se a equação 34, que afirma simplesmente que o fluxo que entra em um elemento de volume é igual ao que sai (Fetter, 2018; Haitjema, 1995). Essa forma compacta é o ponto de partida para vincular o problema físico de escoamento subterrâneo a equações diferenciais de potencial.

$$\nabla \cdot q + \frac{\partial \theta}{\partial t} = 0 \quad (33)$$

$$\nabla \cdot q = 0 \quad (34)$$

Ao combinar a equação da continuidade com a lei de Darcy, obtém-se em regime estacionário e para um meio homogêneo e isotrópico a relação $\nabla \cdot (-K\nabla h) = 0$, que se simplifica para $K\nabla^2 h = 0$, ou simplesmente $\nabla^2 h = 0$, que é a equação de Laplace aplicada à carga hidráulica h (Bear, 1979; Strack, 1989; Haitjema, 1995). Em problemas de aquíferos livres, a adoção das hipóteses de Dupuit-Forchheimer — gradiente vertical desprezível, linhas de corrente praticamente horizontais e carga aproximada pela cota da superfície freática — permite reescrever a continuidade em termos da espessura saturada e da vazão integrada na vertical, levando à equação de Boussinesq, que em muitos casos se reduz a uma forma quase-laplaciana em h^2 (Boussinesq, 1878; Bear, 1979; Fetter, 2018). O tratamento algébrico dessas relações é, essencialmente, a passagem da descrição fluxo–armazenamento em um elemento de aquífero para uma equação de potencial cuja solução determina o campo de carga hidráulica.

Essa ligação é o núcleo teórico da modelagem de fluxo de água subterrânea. Uma vez que a continuidade garante a conservação de massa e a lei de Darcy relaciona fluxo e gradiente de carga, suas combinações sob hipóteses adequadas (homogeneidade, isotropia, fluxo estacionário, simplificação de Dupuit-Forchheimer) levam a equações elípticas do tipo Laplace, para aquíferos sem fontes internas, ou Poisson, quando há recarga ou bombeamento distribuído (Domenico; Schwartz, 1998; Haitjema, 1995; Strack, 1989). Assim, o problema hidrogeológico passa a ser formulado como a busca de uma função $h(x, y)$ em duas dimensões que satisfaça a equação de Laplace/Poisson e as condições de contorno que representam rios, fronteiras impermeáveis, poços e limites regionais do sistema aquífero. É essa estrutura matemática que viabiliza o uso de métodos analíticos, do método dos elementos analíticos e de métodos numéricos como diferenças finitas, elementos finitos e soluções fundamentais, todos operando sobre a mesma base, a continuidade acoplada à lei de Darcy e às simplificações geométricas apropriadas (Bear, 1979; Haitjema, 1995; Strack, 1989).

3.4.4 Aquíferos sedimentares

Os aquíferos sedimentares podem ser entendidos como sistemas aquíferos desenvolvidos em rochas sedimentares consolidadas ou em pacotes de sedimentos inconsolidados, nos quais a estrutura porosa é suficientemente contínua para permitir o armazenamento e a transmissão de água em quantidade aproveitável para abastecimento humano, irrigação e outros usos. Nesses meios, a circulação ocorre predominantemente por escoamento em poros intergranulares e, secundariamente, por fraturas, de modo que a

arquitetura deposicional e os processos diagenéticos controlam diretamente a distribuição espacial das propriedades hidráulicas (Fetter, 2018; Domenico; Schwartz, 1998; Bear, 1988).

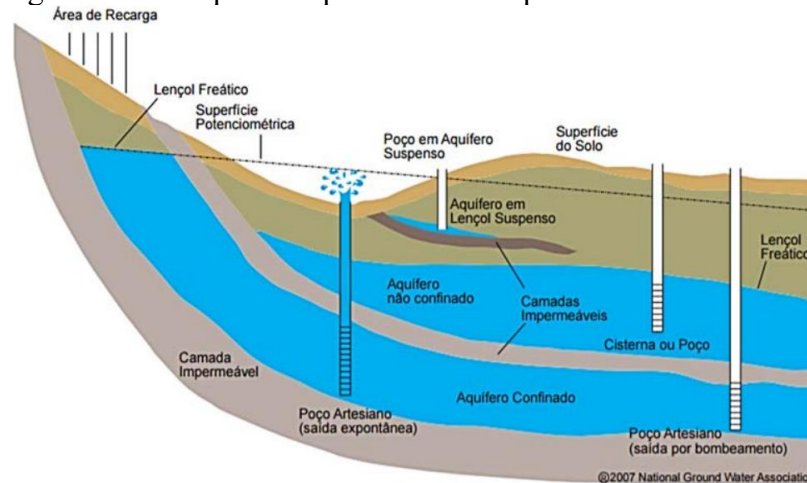
As principais variáveis físicas que caracterizam aquíferos sedimentares são a porosidade, o índice de vazios e a condutividade hidráulica, além de parâmetros hidráulicos derivados. A porosidade total n é definida como a razão entre o volume de vazios V_v e o volume total do meio V_t , isto é, $n = \frac{V_v}{V_t}$. O índice de vazios e relaciona o volume de vazios ao volume de sólidos, podendo ser expresso em função da porosidade por $e = n/(1 - n)$. Esses parâmetros descrevem a fração de espaço disponível para armazenamento de água e são fortemente dependentes da granulometria, da seleção e do grau de compactação dos sedimentos (Davis, 1969; Johnson; Moston; Morris, 1968; Bear, 1979; Domenico; Schwartz, 1998). A condutividade hidráulica, por sua vez, controla a facilidade com que a água escoar no interior da matriz porosa e varia em diversas ordens de grandeza entre fácies arenosas bem selecionadas, conglomerados, siltitos e argilitos, refletindo tanto a textura quanto o arranjo estrutural dos poros.

Do ponto de vista geológico, os aquíferos sedimentares são resultado de longos processos de intemperismo, erosão, transporte e deposição de partículas, geralmente associados a sistemas de rios, planícies de inundação, leques aluviais, ambientes deltaicos, depósitos eólicos, lacustres e glaciais. A sobreposição e a migração lateral desses ambientes, ao longo do tempo geológico, produzem corpos arenosos e conglomeráticos que formam as principais unidades aquíferas, frequentemente intercalados com camadas de silte e argila de menor permeabilidade (Domenico; Schwartz, 1998; Freeze; Cherry, 1979). Em muitos sistemas sedimentares continentais, a recarga principal ocorre por infiltração de água de chuva nas porções aflorantes das unidades aquíferas e nos vales aluviais, de forma difusa ou concentrada, estabelecendo gradientes hidráulicos regionais que controlam os padrões de fluxo.

Essa gênese sedimentar tende a produzir empilhamentos estratificados de camadas com condutividades hidráulicas contrastantes (Figura 14), com unidades mais permeáveis funcionando como aquíferos e níveis mais finos e compactos atuando como aquícludes, dependendo do grau de restrição ao fluxo vertical. Em bacias sedimentares extensas, é comum a ocorrência de sequências intercaladas de arenitos e conglomerados com siltitos e argilitos, resultando em sistemas aquíferos multicamadas, muitas vezes com trechos livres e confinados dentro de um mesmo conjunto estratigráfico (Bear, 1979; Domenico; Schwartz, 1998; Subyani; Sen, 1989; Bachu, 1995). Esse arranjo estratificado favorece a formação de aquíferos livres nas porções superiores, onde a superfície freática é livre para

oscilar, e aquíferos confinados ou semiconfinados em profundidade, separados por aquitardos que permitem fugas lentas de água entre os níveis, o que tem implicações diretas na resposta hidráulica a bombeamentos e na propagação de contaminantes.

Figura 14 – Croqui exemplificativo de aquífero



Fonte: Pinto-Coelho e Havens (2016)

Os parâmetros capacidade específica, armazenamento específico e armazenamento (ou coeficiente de armazenamento) descrevem quantitativamente como esses aquíferos armazenam e liberam água. A capacidade específica, frequentemente associada ao rendimento específico em aquíferos livres, representa o volume de água drenado por gravidade por unidade de volume de aquífero quando a superfície freática sofre um rebaixamento lento e é, portanto, sempre menor que a porosidade total. O armazenamento específico S_s é definido como o volume de água liberado de um volume unitário de aquífero saturado, por unidade de decréscimo de carga hidráulica, estando ligado à compressibilidade da água e da matriz porosa. Já o coeficiente de armazenamento S integra esses efeitos em escala de aquífero, podendo ser expresso, em formulação unidimensional simplificada, como $S = b S_s + S_y$, em que b é a espessura saturada do aquífero e S_y representa a contribuição gravitacional de drenagem (Fetter, 2018; Freeze; Cherry, 1979; Jonhson; Moston; Morris, 1968).

Na formulação matemática do fluxo em aquíferos sedimentares, Fetter (2018) combina a Lei de Darcy com a equação da continuidade para obter uma equação diferencial parcial que descreve a evolução da carga piezométrica $\phi(x, y, t)$ em função das coordenadas espaciais e do tempo, incorporando termos que representam fontes e sumidouros distribuídos, bem como efeitos de armazenamento (Fetter, 2018; Domenico; Schwartz, 1998; Haitjema, 1995). Para um aquífero horizontal de condutividade hidráulica e espessura efetiva constantes, a equação geral

de fluxo pode ser escrita como a equação 35, onde $T = Kb$ é a transmissividade e S é o coeficiente de armazenamento; essa forma é usual para aquíferos livres sob variações moderadas da superfície freática. Quando se considera um aquífero confinado com fuga vertical através de camadas semipermeáveis adjacentes, introduz-se um termo adicional que representa a taxa de fuga $l(x, y, t)$, conduzindo à equação 36, onde o termo l/T atua como termo de inhomogeneidade do sistema, associado ao ganho ou perda de água por interação com unidades de confinamento.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \frac{S_y}{T} \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (35)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{l}{T} = \frac{S}{T} \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (36)$$

Sob condições estacionárias, a ausência do termo temporal reduz essas expressões a formas do tipo Laplace ou Poisson, de modo que a análise do fluxo em aquíferos sedimentares passa a ser tratada em termos da equação de Laplace para a carga hidráulica, com termos de fonte representando recarga, bombeamento e fuga entre camadas.

3.5 Histórico de implementação computacional do método das Soluções Fundamentais

O Método das Soluções Fundamentais (MSF) constitui o objeto central de investigação desta pesquisa desde o ingresso do autor no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal do Ceará, no ano de 2018. As primeiras iniciativas de implementação computacional do método ocorreram ainda durante o desenvolvimento do curso de mestrado, a partir da adaptação de *scripts* previamente disponibilizados por pesquisadores que trabalharam com outros métodos numéricos do tipo *meshless*. Nessa etapa inicial, foi aproveitada a lógica de montagem das matrizes do sistema algébrico, comum a diferentes abordagens sem malha, respeitando-se as particularidades matemáticas do MSF.

A primeira versão funcional do algoritmo foi implementada na linguagem *SciLAB*, escolhida à época por sua vocação para cálculos numéricos e prototipagem científica. Os exemplos iniciais de aplicação foram direcionados a problemas teóricos em domínios unitários ou restritos, nos quais a solução analítica era conhecida. Essa estratégia permitiu avaliar a capacidade de aproximação do método, bem como validar a correta implementação das

soluções fundamentais e das condições de contorno, conforme prática consagrada na literatura especializada sobre métodos numéricos sem malha.

Com o avanço da pesquisa no mestrado, o algoritmo foi integralmente reimplementado na linguagem Java, motivado pela perspectiva de sua futura incorporação ao sistema de modelagem hidrológica e hidráulica desenvolvido na Universidade Federal do Ceará. À época, esse ecossistema computacional incluía outras ferramentas em desenvolvimento, como a interface gráfica do modelo MODFLOW, conhecida como UFC-Flow. Nesse contexto, foram desenvolvidos blocos modulares denominados “MSF-Root”, contendo o conjunto essencial de rotinas responsáveis pela montagem das matrizes do método e pela resolução do sistema linear associado, dentro do nível de complexidade então conhecido e dominado.

De forma interina, foi também desenvolvida uma interface gráfica simplificada, cuja finalidade era facilitar a execução, a depuração e o aprimoramento do código. Essa interface, bem como a versão Java do algoritmo, foram apresentadas e discutidas na Dissertação de Mestrado deste autor, na qual o MSF-Root representou a principal contribuição científica, tanto no que se refere à operacionalização do método quanto à sua aplicação em problemas de engenharia. Nesse trabalho, consolidou-se o entendimento conceitual e computacional necessário à aplicação do MSF em contextos hidrogeológicos.

Como desdobramento natural dessa etapa, foi proposta a publicação de um artigo científico cujo objetivo foi comparar os resultados obtidos pelo MSF com aqueles gerados pelo modelo MODFLOW, considerando um sistema aquífero real e ressaltando as diferenças fundamentais quanto às informações mínimas requeridas para a execução de cada método. Esse estudo resultou na publicação do artigo *Meshless method using fundamental solution applied to computational simulation of groundwater flow of real aquifers* (Rodrigues Neto *et al.*, 2020), no qual se demonstrou que, em determinados contextos hidrogeológicos, especialmente sob a hipótese de domínio homogêneo e regime permanente, os resultados obtidos pelos dois métodos foram estatisticamente similares. Ressalte-se que, nesse estágio, não foi considerada a presença de heterogeneidades no domínio de análise.

Apesar dos resultados promissores, um dos principais desafios identificados nessa fase foi a representação matemática de poços de bombeamento ou de injeção no escopo do MSF, uma vez que tais elementos introduzem inomogeneidades no sistema governado pela equação de Laplace. A incorporação dessas inomogeneidades na formulação do método e na montagem das matrizes ainda apresentava impasses teóricos, particularmente quanto à forma mais adequada de representar fontes e sumidouros pontuais no sistema de equações.

Desde então, trabalhos mais recentes passaram a lançar luz sobre alternativas para a consideração de homogeneidade no contexto do MSF. Destacaram-se, nesse sentido, contribuições posteriores, como o estudo de Liu *et al.* (2023), que propôs avanços na sobreposição de homogeneidade por meio de estratégias híbridas e formulações aprimoradas. Ainda assim, conforme discutido na Revisão Sistemática da Literatura apresentada nesta tese, persiste uma dificuldade em generalizar essas abordagens para aplicações práticas, sobretudo quando se busca conciliar robustez matemática, simplicidade operacional e reprodutibilidade computacional.

Diante desse cenário, foi concebida a presente tese, com o propósito de avançar na consolidação do MSF como ferramenta aplicável à modelagem do fluxo de água subterrânea em situações reais e outros problemas de engenharia. Nesse novo estágio da pesquisa, optou-se pela reimplementação do núcleo do algoritmo na linguagem R, amplamente utilizada pelo autor ao longo da pós-graduação para análise de dados, visualização e tratamento estatístico. Considerando que o MSF se baseia em operações numéricas fundamentais, comuns a diversas linguagens de programação, a adaptação do MSF-Root para R mostrou-se direta e eficiente.

A Figura 16, em seu bloco C, representou esse núcleo central do algoritmo, responsável pela montagem das matrizes do método e pelo cálculo da aproximação numérica. Essa rotina pode ser facilmente implementada na maioria das linguagens de programação contemporâneas. Os demais blocos ilustrados na figura correspondem a rotinas auxiliares destinadas à organização, verificação e formatação dos dados, de modo a adequá-los ao padrão de entrada requerido pelo MSF-Root. Ao longo das diferentes reimplementações, algumas modificações incrementais foram incorporadas ao código, inclusive registradas e discutidas ao longo deste trabalho. Dentre elas, destaca-se a otimização associada ao processo de inversão das matrizes, que resultou em redução do tempo computacional. Na linguagem R, por exemplo, a inversão ocorre de forma nativa, dispensando o uso de bibliotecas externas específicas, como aquelas empregadas na implementação em Java. Também foi adaptado no algoritmo do MFS-Root uma rotina para armazenar e exportar o valor do inverso do número de condicionamento, aplicação necessária para permitir a implementação da metodologia proposta.

Apesar dessas adaptações, a estrutura central do algoritmo foi preservada ao longo de todo o seu desenvolvimento, o que favoreceu sua depuração, reprodutibilidade e aperfeiçoamento contínuo. Nesse sentido, o bloco MSF-Root configura-se como um dos principais produtos científicos desta tese, materializando o esforço de investigação teórica, computacional e aplicada desenvolvido ao longo da trajetória de evolução da pesquisa.

4 METODOLOGIA

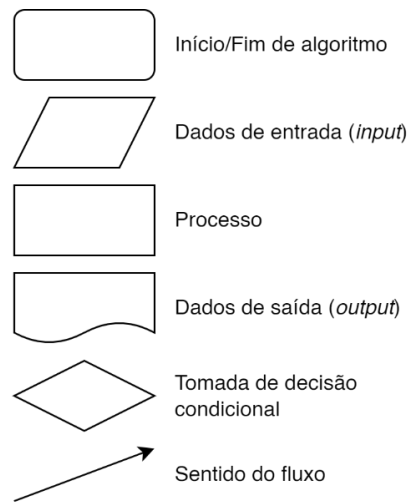
Neste capítulo foram apresentados o detalhamento da metodologia proposta, a definição dos problemas teóricos simulados para exemplificar e validar a sua aplicabilidade e foi caracterizado e delimitado o estudo de caso.

4.1 Detalhamento da metodologia proposta

Neste trabalho foi proposta uma metodologia de aplicação generalizada do Método das Soluções Fundamentais para problemas bidimensionais em domínios regidos pelo Operador Diferencial Laplaciano. Para alcançar esse objetivo (i) foi fixada a geometria da fronteira fictícia no formato circular com pontos igualmente espaçados entre si, onde o parâmetro raio, também chamado de *dvalue* variou dentro de um intervalo definido; (ii) foram definidos parâmetros a serem observados e monitorados conforme variou o raio da fronteira fictícia, esses parâmetros foram a métrica RMSE dos pontos do domínio, calculada entre os valores aproximados e esperados para cada um dos pontos, quando se conhecia a solução analítica (cenário dos testes em problemas teóricos), e o inverso do número de condicionamento (*rcond*) que monitorou a estabilidade da matriz principal e do sistema de equações, e (iii) foi proposta uma metodologia de verificação de convergência dos resultados, para permitir identificar dentre os diferentes valores de *dvalue*, raio da fronteira fictícia, aquela faixa que proporcionou um resultado de aproximação numérica dentro de um critério de convergência.

A representação gráfica dessa metodologia em formato de algoritmo adotou a padronização proposta por Ascêncio e Campos (2012), ilustrada na Figura 15. Esses autores indicaram que nesse tipo de representação gráfica cada elemento está dotado de um significado operacional que interrelaciona as variáveis e processos dentro de um diagrama unifilar do sistema que está sendo representado. Nesse sentido, retângulos de cantos arredondados representam o início e fim do algoritmo; paralelogramos representam dados de entrada; retângulos representam processos ou operações; formas de bloco de nota representam dados de saída; losangos representam operadores lógicos para tomada de decisão e as setas indicam o sentido do fluxo.

Figura 15 – Convenções de simbologia de representação esquemática de algoritmo

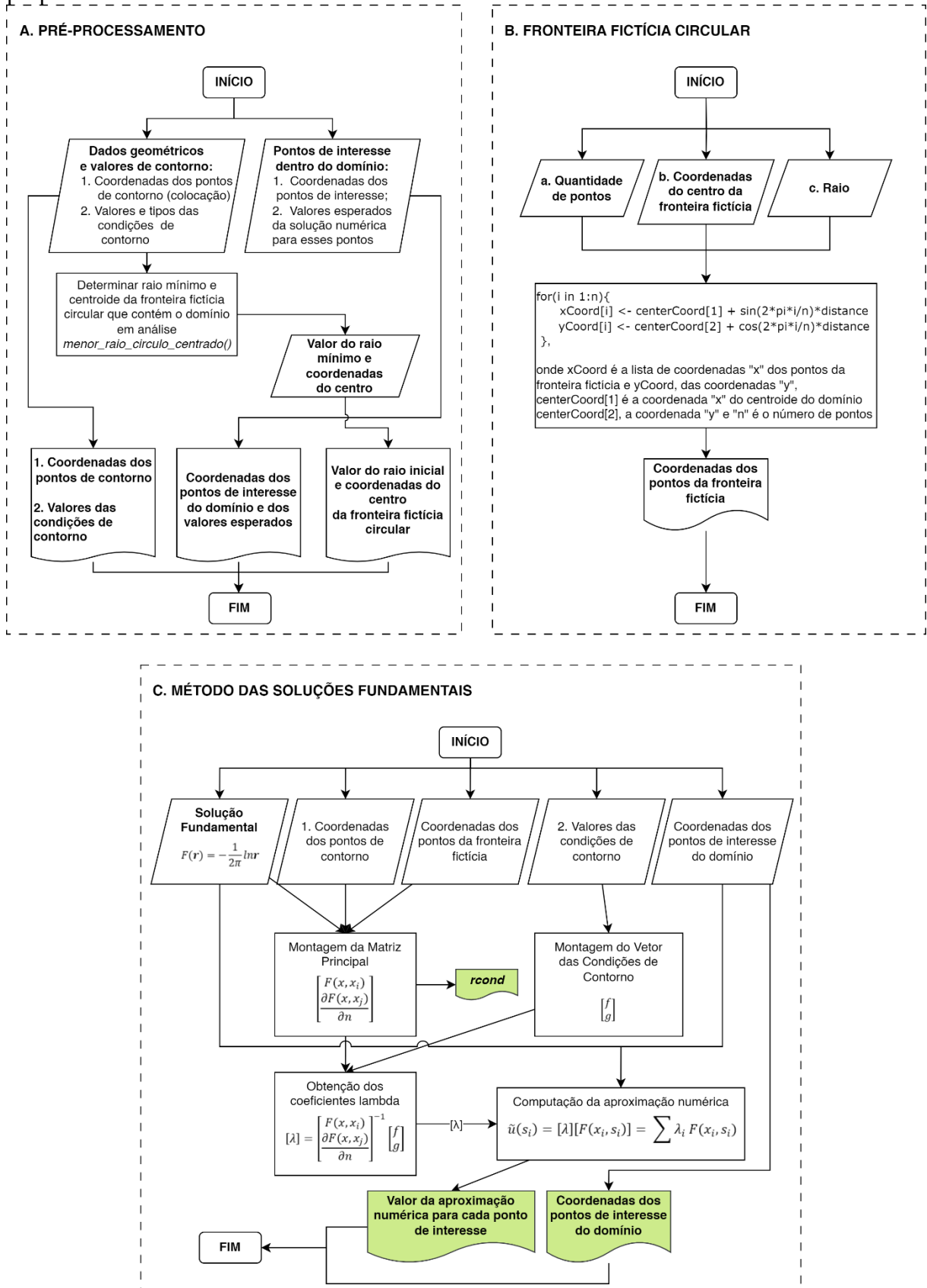


Fonte: Ascêncio e Campos (2012)

Seguindo essa notação, foram apresentados na Figura 16 três blocos de algoritmos, que representam o núcleo central da obtenção dos resultados através da operacionalização do tratamento dos dados, da automatização da obtenção da fronteira fictícia em formato circular e da aplicação do método das soluções fundamentais.

No bloco A, intitulado Pré-Processamento, são recebidos como dados de entrada os dados geométricos dos pontos de contorno e seus valores de condições de contorno, bem como os dados geométricos dos pontos de interesse, onde se pretende estimar o valor numérico da variável dependente localizados dentro do domínio. Em processos de modelagem, os pontos de interesse podem estar dotados de valores conhecidos ou esperados, o que permite avaliar os resultados numéricos obtidos. As coordenadas dos pontos de contorno são aplicadas a uma função (*menor_raio_circulo_centrado*) que extrai a média simples de seus valores correspondentes e determina as coordenadas do centroide. Essas coordenadas são utilizadas como centro da circunferência que subsidiará a determinação dos pontos da fronteira fictícia circular. Essa mesma função determina o menor raio de uma circunferência, cujo centro foi definido anteriormente, que contém geometricamente todos os pontos do contorno. A implementação desse algoritmo pode ser apresentada simplificada como a testagem das distâncias euclidianas entre o ponto do centro e cada ponto do contorno, após isso, é selecionado o maior valor entre essas distâncias para representar o menor valor de raio buscado. Os resultados dessa função representam uma parte do conjunto de saídas dessa etapa de pré-processamento.

Figura 16 – Fluxograma das etapas principais de processamento implementadas na metodologia proposta



O outro grupo de dados de saída dessa etapa são os arquivos de banco de dados (*dataframes*) com os valores de coordenadas dos pontos de contorno, os valores de suas respectivas condições de contorno e o arquivo de banco de dados com as coordenadas dos pontos de interesse e dos valores esperados da variável dependente para esses pontos. Esse conjunto de informações representam os resultados da etapa de pré-processamento e, dependendo do sistema físico que se pretende modelar, pode implicar na necessidade de utilização de ferramentas geoespaciais como Sistemas de Informação Geográfica (SIG) para definir coordenadas de pontos de contorno e de interesse, ou de algoritmos para gerar esses pontos.

No bloco B, intitulado Fronteira Fictícia Circular, foi detalhada a computação dos valores das coordenadas dos pontos da fronteira fictícia. Os dados de entrada são as coordenadas do centro, a quantidade de pontos – que deve ser igual à quantidade de pontos de contorno – e o raio. Esse algoritmo implementa uma distribuição de pontos ao longo de uma circunferência, cujas coordenadas do centro foram fornecidas, partindo de uma posição cujo ângulo de referência em uma circunferência de raio unitário é $\theta = 0$ ou 2π (rad). Ou seja, em sentido horário, partindo do ponto de coordenadas $(0, 1)$ devidamente escalado pelo raio informado e trasladado para o ponto de centro fornecido. Os demais pontos são distribuídos em ângulos igualmente espaçados entre si. As expressões para a obtenção de cada conjunto de coordenadas foram explicitadas no bloco B. O dado de saída desse algoritmo é um banco de dados com as coordenadas dos pontos dessa fronteira fictícia circular.

O bloco C representou a aplicação sistematizada do MSF. Esse fluxograma permite identificar todas as informações necessárias para performar a aproximação numérica segundo o MSF. De acordo com a figura, são necessários 1) a expressão da Solução Fundamental do Operador, 2) as coordenadas dos pontos de contorno, 3) as coordenadas dos pontos da fronteira fictícia, 4) os valores das condições de contorno e 5) as coordenadas dos pontos de interesse no domínio. A expressão da solução fundamental foi apresentada em tópico de revisão bibliográfica específico, as coordenadas dos pontos de contorno, os valores das condições de contorno e as coordenadas dos pontos de interesse são compiladas e organizadas na etapa de pré-processamento e as coordenadas dos pontos da fronteira fictícia são definidas na etapa do bloco B.

Uma vez disponíveis, os dados de entrada permitem a construção das matrizes do MSF. São duas: a matriz principal e o vetor das condições de contorno. A primeira é construída pela aplicação da solução fundamental entre os pontos de colocação (pontos do contorno) e pontos de fonte (fronteira fictícia), onde cada linha representa o resultado da solução fundamental

aplicada a cada um dos pontos de fonte para o mesmo ponto de colocação. Nesse sentido, a matriz principal é quadrada. O vetor das condições de contorno representa o valor de colocação para cada ponto do contorno e forçam o sistema de equações a ajustar os coeficientes λ , cujos valores são procurados. As operações algébricas, que incluem a inversão da matriz principal e resolução do sistema de equações, permitem definir os valores de cada coeficiente λ , gerando um vetor que pode ser utilizado para determinar numericamente o valor estimado de qualquer ponto dentro do domínio, desde que sejam mantidos constantes os pontos de fonte.

Uma vez determinados os valores de λ , uma nova matriz principal é montada, dessa vez entre os pontos de interesse e os pontos de fonte (fronteira fictícia) para os quais os coeficientes λ foram definidos. De forma direta, e até mesmo individualizada, o valor da aproximação numérica pelo MSF é obtido substituindo λ na combinação linear da aplicação da solução fundamental entre os pontos de fonte e cada ponto de interesse, representando, portanto, o núcleo de aplicação do método em sua formulação básica.

O detalhamento desses algoritmos foi importante para exemplificar as operações algébricas e numéricas envolvidas na aplicação do Método das Soluções Fundamentais e para ilustrar a pormenorização do fluxograma da metodologia proposta, que foi apresentada na síntese deste tópico.

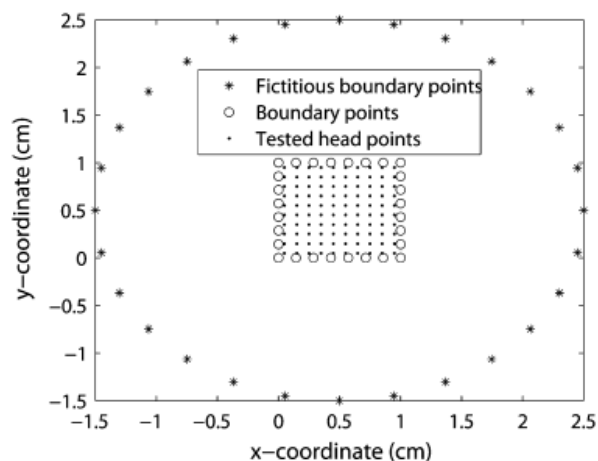
4.1.1 Fronteira fictícia em formato circular

A escolha da fronteira fictícia (ou pseudo-fronteira) no Método das Soluções Fundamentais (MSF) representa uma parte central do mecanismo de aproximação e da estabilidade numérica. A curva onde se localizam as fontes controla simultaneamente a taxa de convergência e o condicionamento do sistema linear, de modo que diferentes formatos, tais como círculos, curvas “*off-set*”, contornos obtidos por mapeamento conforme, levam a regimes de erro e de número de condicionamento distintos (Bogomolny, 1985; Fairweather; Karageorghis, 1998; Barnett; Betcke, 2008). Do ponto de vista da teoria de potencial, a pseudo-fronteira deve ser, em essência, uma curva de Jordan fechada, suficientemente suave, que envolva completamente o domínio físico, sem se cruzar com ele nem atravessar singularidades da continuação analítica, garantindo a existência de uma representação em termos de soluções fundamentais e a validade dos resultados de densidade (Katsurada, 1994; Cheng; Hong, 2020). Além disso, a distância entre essa curva e o contorno físico tem papel decisivo no equilíbrio

entre precisão e condicionamento, como enfatizado em análises de estabilidade do MSF e de métodos aparentados (Chen; Cho; Golberg, 2006; Zhang *et al.*, 2022).

A configuração mais explorada para pseudo-fronteiras é a circunferência concêntrica ou aproximadamente concêntrica ao domínio (Figura 17) (Bogomolny, 1985; Fairweather; Karageorghis, 1998; Alves; Chen, 2005). Em problemas canônicos, como discos e anéis, essa escolha permite tratar o raio da pseudo-fronteira como único parâmetro geométrico, viabilizando estudos sistemáticos do impacto da distância na precisão e no condicionamento. Em paralelo, autores investigaram pseudo-fronteiras não circulares, como curvas obtidas via mapeamento conforme, curvas de raio conforme constante ou contornos “inflados” ao longo da normal ao domínio, com o objetivo de adaptar a geometria das fontes a domínios com concavidades ou alongamentos acentuados (Figura 18) (Katsurada, 1994; Katsurada; Okamoto, 1996; Barnett; Betcke, 2008; Zhang *et al.*, 2022). Em geral, esses estudos concluem que fronteiras fictícias alinhadas com a geometria do domínio podem melhorar a eficiência local da aproximação, mas não alteram o fato de que a distância às singularidades externas e ao contorno físico é o determinante central do desempenho numérico.

Figura 17 – Exemplo de fronteira fictícia (asteriscos) distribuídos como uma circunferência em torno da fronteira real (pontos vazados)

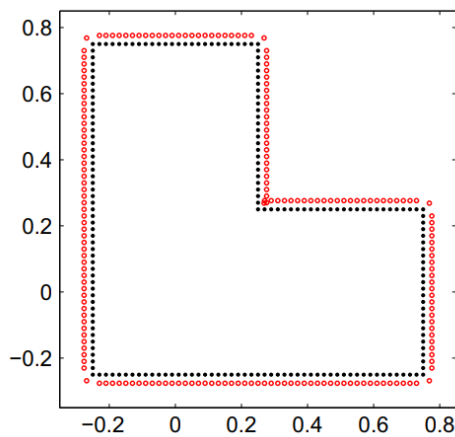


Fonte: Wang e Zheng (2015)

Um exemplo explícito de uso de pseudo-fronteiras do tipo *off-set* é o trabalho de Katsurada e Okamoto (1996), que estudaram a escolha de pontos de colação e de fontes para o MSF em problemas potenciais bidimensionais. Nessa formulação, as fontes foram colocadas sobre uma curva externa obtida, em muitos casos, por um afastamento quase uniforme do

contorno físico (ou da sua imagem em um plano conforme), de modo que a distância entre as duas curvas era controlada por um parâmetro geométrico. Os autores mostraram, por meio de estimativas assintóticas e testes numéricos, que aproximar muito a pseudo-fronteira do domínio físico proporcionou erros de arredondamento e forte crescimento do número de condicionamento, enquanto afastá-la demais degradou a precisão. Concluíram, portanto, que existe uma faixa “ótima” de distâncias para a qual o erro decai rapidamente com o número de fontes sem que o sistema se torne intratável numericamente (Katsurada; Okamoto, 1996).

Figura 18 – Exemplo de fronteira fictícia (pontos em vermelho) distribuídos como um *offset* da fronteira real (pontos de cor preto)



Fonte: Chen, Karageorghis, Li (2016)

Estudos mais recentes sobre pseudo-fronteiras suaves reforçaram esse quadro ao analisar famílias de curvas *off-set* e de formas variadas, mostrando que o ganho em precisão obtido ao “moldar” a curva às concavidades do domínio só é relevante se a distância às singularidades externas permanecer sob controle e se a pseudo-fronteira não introduzir auto-interseções ou segmentos excessivamente próximos (Zhang *et al.*, 2022; Barnett; Betcke, 2008). Em domínios altamente irregulares ou com reentrâncias, tais curvas *off-set* podem inclusive deixar de ser do tipo Jordan ou cruzar regiões de singularidade, o que motiva o uso de mapeamentos conformes ou curvas em espaço de raio conforme em vez de *offsets* geométricos diretos (Katsurada, 1994).

A utilização de uma geometria padrão do tipo circular, tal como proposto neste trabalho, apresenta vantagens, pois é uma curva regular, sem arestas nem reentrâncias, trivialmente parametrizável por um único ângulo, e sempre existe uma circunferência que envolve qualquer domínio limitado, o que simplifica a implementação e a automatização da metodologia. Em termos teóricos, o caso de discos é um dos poucos para os quais se dispõe de estimativas

rigorosas de convergência exponencial do MSF. Resultados de Katsurada e colaboradores, amplamente divulgados por Fairweather e Karageorghis (1998), mostraram que, ao resolver a equação de Laplace em um disco de raio r com fontes distribuídas uniformemente em uma circunferência concêntrica de raio $R > r$, o erro máximo decai essencialmente como $\|u - u_N\|_\infty = O((r/R)^N)$ quando o número N de fontes cresce (Katsurada; Okamoto, 1988; Katsurada, 1990; Fairweather; Karageorghis, 1998). Na prática, a estratégia adotada em inúmeros trabalhos consiste em distribuir as fontes uniformemente em torno do domínio, sobre uma circunferência a uma distância fixa do contorno físico, a mesma abordagem retomada aqui como caso canônico, sobre o qual se constrói o protocolo de varredura em distância da fronteira fictícia (Bogomolny, 1985; Fairweather; Karageorghis, 1998; Alves; Chen, 2005).

Chen, Cho e Golberg (2006) mostraram, por meio de uma análise baseada na decomposição em autovalores e valores singulares, que o crescimento extremo do número de condicionamento no MSF está intimamente ligado à combinação entre distância fonte–contorno e número de fontes, de modo que modificações moderadas na forma da curva de fontes, mantendo-se essencialmente a mesma distância média, tendem a ter efeito secundário sobre o condicionamento. Nessa mesma linha, Chen, Karageorghis e Li (2016) investigaram algoritmos sistemáticos para escolher o raio da circunferência de fontes em problemas modelo de Laplace e Helmholtz, demonstrando que é possível obter erros relativos da ordem de E^{-10} a E^{-12} usando exclusivamente fontes distribuídas em uma circunferência de raio adequado em torno do domínio, desde que a distância seja escolhida em uma faixa operacional “ótima” identificada por critérios de validação cruzada ou minimização do erro de contorno. As hipóteses adotadas nesses estudos (domínios simplesmente conexos, contornos moderadamente regulares e equações elípticas clássicas) são compatíveis com o contexto genérico de representação geométrica e descritivo-analítica de problemas físicos, como, por exemplo, problemas de fluxo subterrâneo em regime permanente. Essas considerações reforçam que a discussão sobre o formato da fronteira fictícia se torna relevante ao concentrar-se na sua parametrização radial e nas propriedades de condicionamento associadas ao parâmetro de distância/raio.

Os trabalhos baseados em mapeamentos conformes e em curvas de raio conforme constante refinam essa visão ao mostrar que, do ponto de vista da teoria de potencial, a forma exata da pseudo-fronteira é menos importante do que o fato de ela ser uma curva de Jordan fechada que envolve o domínio sem cruzar singularidades da continuação analítica. Katsurada (1994) propôs o uso do método de simulação de cargas em conjunto com funções de mapeamento exterior, mapeando o domínio físico em um disco unitário e posicionando as cargas em circunferências de raio maior que a unidade no plano mapeado. A pseudo-fronteira

no domínio original equivaleu então à imagem de um círculo por um mapeamento conforme, o que garantiu propriedades de analiticidade e permitiu derivar estimativas assintóticas de erro em termos do raio conforme da curva (Katsurada, 1994, 1990). Barnett e Betcke (2008), por sua vez, analisaram problemas de Helmholtz em domínios analíticos e mostraram que a escolha natural para a curva de fontes é precisamente uma curva de raio conforme constante associada ao mapeamento exterior, de modo que o círculo aparece como caso prototípico em que a análise fica particularmente “limpa” e tratável, enquanto curvas mais gerais podem ser interpretadas, grosso modo, como imagens de um círculo sob um mapeamento conforme. Do ponto de vista prático, essa abordagem é matematicamente elegante, mas demanda a construção de mapeamentos conformes numéricos de alta qualidade, o que torna sua adoção pouco competitiva em aplicações de engenharia com geometrias complexas e dados de campo ruidosos.

Optar por uma fronteira fictícia circular evita dificuldades intrínsecas a curvas *off-set* em domínios com inflexões ou concavidades. Um *off-set* geométrico de um contorno muito irregular pode introduzir auto-interseções, segmentos quase tangentes ou curvaturas extremas, comprometendo a hipótese de curva de Jordan e deteriorando o condicionamento da matriz do MSF. Como uma circunferência é sempre uma curva regular, sem inflexões nem concavidades, ela elimina esses problemas topológicos de partida e oferece um suporte geométrico uniforme para a distribuição de fontes. Essa regularidade é apontada na literatura como benéfica tanto para a qualidade das aproximações quanto para o condicionamento, sobretudo quando combinada com regras sistemáticas de escolha da distância e do número de fontes (Chen; Karageorghis; Li, 2016; Cheng; Hong, 2020; Chen; Karageorghis; Smyrlis, 2009). Em termos operacionais, trabalhar sempre com uma pseudo-fronteira circular permite parametrizar o problema apenas pelo raio fictício e pelo número de pontos, o que simplifica a implementação computacional, facilita a comparação entre diferentes casos de estudo e favorece a construção de procedimentos padronizados de varredura em distância.

A metodologia proposta neste trabalho não afirma que a fronteira fictícia circular é universalmente ótima para todos os problemas tratáveis pelo MSF, mas sim que ela satisfaz três requisitos fundamentais para a construção de um procedimento generalizado e operacional. Primeiro, trata-se de uma geometria universalmente disponível, no sentido de que qualquer domínio finito bidimensional pode ser contido em uma circunferência, de modo que a existência de uma pseudo-fronteira circular nunca depende de particularidades da forma do contorno físico. Segundo, essa escolha é coerente com o arcabouço teórico desenvolvido para discos e domínios analíticos na literatura do MSF e de métodos aparentados, nos quais círculos e curvas

de raio conforme constante são casos modelo amplamente estudados (Katsurada, 1990; Fairweather; Karageorghis, 1998; Barnett; Betcke, 2008; Cheng; Hong, 2020). Terceiro, a circunferência permite construir um procedimento padronizado, reproduzível e transferível de escolha de faixas operacionais de distância da fronteira fictícia no qual o parâmetro geométrico dominante é o raio fictício (ou *dvalue*), explorado por varredura sistemática para identificar faixas operacionais em que se obtém boa precisão com condicionamento numericamente viável.

Essas considerações justificam a adoção de uma geometria circular para a metodologia proposta. O foco da generalização está no protocolo de varredura e investigação do parâmetro de distância (*dvalue*), isso é, na forma de posicionar as fontes em relação ao contorno físico e de avaliar o compromisso entre erro e condicionamento, e não na exaustão de todas as geometrias possíveis de fronteira fictícia. A escolha da circunferência articula três atributos desejáveis: (a.) regularidade geométrica, (b.) simplicidade computacional e (c.) aderência à literatura que trata discos e círculos como casos modelo para o MSF. Outros formatos, como *offsets* geométricos, curvas definidas por mapeamento conforme ou curvas de raio conforme constante, podem de fato refinar os resultados em situações específicas, sobretudo em domínios com concavidades pronunciadas ou singularidades fortes (Katsurada, 1994; Barnett; Betcke, 2008; Zhang *et al.*, 2022), mas exigem pré-processamentos geométricos mais sofisticados que fogem ao escopo de uma metodologia generalizada e operacional voltada à aplicação do MSF à modelagem de sistemas reais, inclusive modelagem de fluxo de água subterrânea, com geometrias irregulares e dados de campo limitados. Assim, não se pretendeu provar que a fronteira circular é universalmente ótima, e sim argumentar que, para problemas de Laplace em domínios limitados com contornos moderadamente regulares, ela constitui uma escolha robusta, simples e suficientemente geral para fundamentar um procedimento padronizado de posicionamento da fronteira fictícia e de definição de faixas operacionais de *dvalue*.

4.1.2 Métrica RMSE

A qualidade da aproximação numérica foi medida através da utilização do parâmetro RMSE (“*Root Mean Square Error*”), ou ainda, Raiz Quadrada do Erro Quadrático Médio, definido na equação 37. Onde u_i é a solução analítica ou esperada (exata ou medida) do i -ésimo ponto, u'_i é a solução numérica (aproximada) do i -ésimo ponto e n é a quantidade de pontos.

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (u_i - u'_i)^2}{n}} \quad (37)$$

Para os modelos teóricos, o RMSE foi aplicado a um conjunto de pontos distribuídos no formato de uma malha dentro dos domínios. Para o estudo de caso, o RMSE foi aplicado ao conjunto de pontos com dados disponíveis dentro do domínio. Assim foi possível condensar em um único parâmetro a qualidade da aproximação para todo o domínio de análise, permitindo a plotagem em gráficos bidimensionais de RMSE vs. *dvalue* e avaliar como o condicionamento do sistema se comporta ao longo dessa variação.

Para complementar a avaliação da métrica RMSE, no estudo de caso, também foi utilizado o erro relativo, definido como o produto da diferença entre o valor calculado e o esperado sobre o esperado. Isso foi particularmente útil para discutir a aproximação numérica nos pontos de interesse.

4.1.3 Inverso do número de condicionamento (*rcond*)

O número de condicionamento quantifica a sensibilidade da solução de um problema às perturbações relativas nos dados. Para um sistema linear $Ax = b$, define-se $\kappa(A) = \|A\| \|A\|^{-1}$ (na norma escolhida) (κ lê-se “kapa”), o que fornece um limite de pior caso para a amplificação do erro relativo da solução devido a pequenas variações em A ou em b . Na norma 2, $\kappa_2(A) = \sigma_{max}(A)/\sigma_{min}(A)$, onde σ são os valores singulares. Nesse sentido, problemas com $\kappa \approx 1$ são bem condicionados, enquanto problemas com $\kappa \gg 1$, mal condicionados (Higham, 2002; Trefethen; Bau, 2022). Em linguagem de programação R, o número de condicionamento pode ser calculado diretamente pela função “kappa”, nativa de sua biblioteca básica.

Em aritmética de ponto flutuante, a precisão de máquina (ou *machine epsilon* ε) é a menor diferença positiva tal que $1 + \varepsilon > 1$ no formato adotado. Isso equivale à distância entre 1 e o próximo número representável e serve como limite superior típico para o erro relativo de arredondamento. Na literatura, o arredondamento unitário (u) é frequentemente definido como $u = \varepsilon/2$ quando o arredondamento é “ao mais próximo” (*round-to-nearest*) (Higham, 2002; Goldberg, 1991). Para os formatos IEEE 754 – *Institute of Electrical and Electronics Engineers* (em português, “Instituto dos Engenheiros Eletricistas e Eletrônicos”) – mais usuais, os valores são aproximadamente $\varepsilon_{single} = 2^{-23} \approx 1,1920929 \times 10^{-7}$ (precisão simples, *binary32*) e

$\varepsilon_{double} = 2^{-52} \approx 2,22044649 \times 10^{-16}$ (precisão dupla, *binary64*), sendo o valor de ponto flutuante *double* o utilizado na linguagem de programação utilizada para desenvolver este trabalho.

Foi proposto o monitoramento do inverso do número de condicionamento (*rcond*) da matriz principal do método conforme variou o raio da fronteira fictícia. Isso foi necessário para detectar as faixas de valores de *dvalue* que proporcionaram o mal-condicionamento do sistema de equações dentro do limiar de precisão de máquina para ponto flutuante e para permitir limitar esse valor a um limiar operacional prático.

Para limitar as operações algébricas e a computação do método numérico, foi definido um limiar de 1,0E-15 para o parâmetro *rcond* para evitar que a varredura de valores extrapolasse a precisão de máquina. Então esse valor foi definido como com uma ordem de grandeza acima de ε_{double} para capturar o comportamento dos resultados para sistemas matriciais cujo inverso do número de condicionamento fosse muito próximo da precisão de ponto flutuante, sem disparar um erro de singularidade da própria linguagem de programação. Isso permitiu controlar os limites e o armazenamento temporário de dados nas séries numéricas geradas e utilizadas, por exemplo, para a geração de gráficos e para a interpretação dos resultados.

4.1.4 Critério de convergência

Foi proposta a plotagem do gráfico de erros sucessivos para avaliar a convergência dos resultados de RMSE e do valor estimado no ponto. O teste de convergência implementado baseia-se na análise das diferenças sucessivas entre valores consecutivos da variável dependente obtida numericamente. Seja v_i o valor calculado para o parâmetro de interesse (por exemplo, o erro RMSE ou o valor de em um ponto) associado a um incremento d_i do valor de *dvalue*, define-se o erro entre iterações sucessivas como $\varepsilon_i = |v_{i+1} - v_i|$. A convergência é verificada quando esse erro atinge um valor inferior a um critério de tolerância τ , pré-estabelecido de acordo com a ordem de grandeza desejada (por exemplo, $\tau \leq 10^{-6}$). Assim, o ponto d_i^* é considerado como o limite de convergência quando $\varepsilon_i \leq \tau$ e $\varepsilon_{i+k} \leq \tau$ para um número k de iterações consecutivas, indicando que o valor calculado estabilizou dentro do nível de precisão numérica especificado (Chapra, Canale, 2011; Burden; Faires, 2016).

Do ponto de vista matemático, o teste adotado se aproxima do conceito de convergência de sequência numérica, onde uma sequência $\{v_i\}$ converge para um limite L se, para todo $\varepsilon > 0$, existe um índice N tal que $|v_i - L| < \varepsilon$ para todo $i > N$ (Stewart, 2013). No contexto

numérico, como L é desconhecido, a convergência é inferida indiretamente a partir da redução sucessiva de $|v_{i+1} - v_i|$ até valores compatíveis com o erro de arredondamento ou precisão de máquina. Essa abordagem é amplamente empregada em algoritmos iterativos e métodos numéricos de resolução de equações e sistemas lineares, sendo especialmente útil quando o comportamento assintótico pode ser observado empiricamente (Quarteroni; Sacco; Saleri, 2000).

No procedimento adotado, a convergência é considerada atingida numericamente quando a diferença sucessiva ε_i permanece inferior ao limiar τ por um número mínimo de passos consecutivos, o que reduz a possibilidade de falsos positivos devido a oscilações locais. O valor correspondente de *dvalue** é então identificado como aquele que fornece a solução numérica estável dentro da precisão requerida. Esse critério permite quantificar de forma objetiva o ponto de estabilização da solução, sem depender de uma função analítica de referência, garantindo reprodutibilidade e consistência com o comportamento esperado da solução numérica para problemas de simulação numérica (Chapra, Canale, 2011; Quarteroni; Sacco; Saleri, 2000).

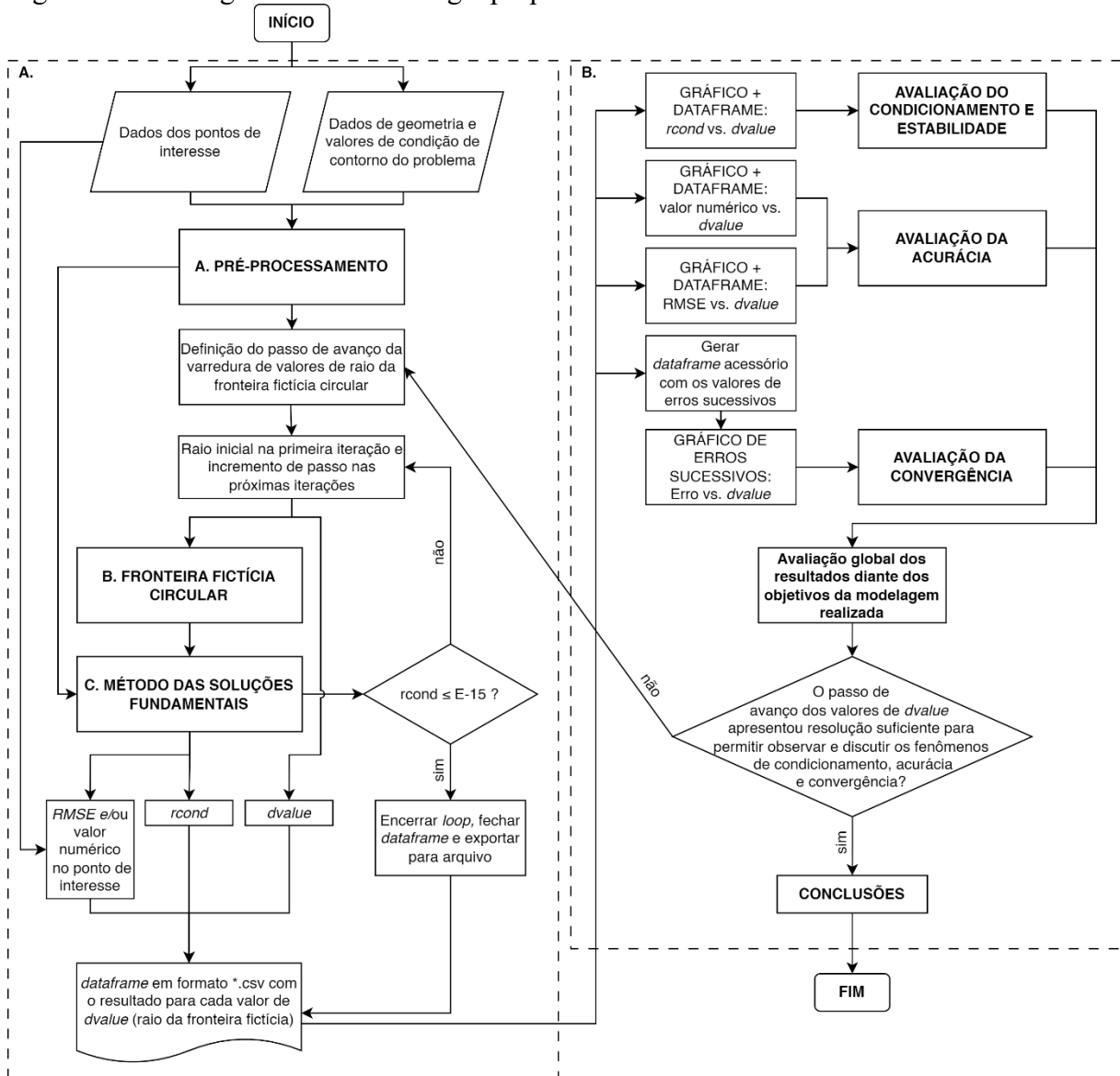
4.1.5 Fluxograma da metodologia proposta

A Figura 19 ilustrou a metodologia proposta. Esse fluxograma foi dividido em dois blocos. O primeiro, bloco A, representa a obtenção dos dados e a computação da aproximação numérica. O segundo, bloco B, representa a apresentação dos resultados obtidos.

No bloco A, o fluxograma inicia a partir da definição do conjunto de dados de entrada necessários. Foram enumerados um conjunto de dados associado aos pontos de interesse e outro associado aos pontos de contorno. Os pontos de interesse são pontos onde se deseja estimar o valor da variável dependente. No caso de simulações hidrogeológicas, eles podem ser definidos como aquele onde se deseja estimar a cota piezométrica de uma formação aquífera, em outros tipos de modelagem, como por exemplo, em simulações de fluxo de calor, os pontos de interesse podem ser pontos onde estão instalados sensores, termômetros, capazes de aferir os valores de temperatura e confrontá-los com os valores estimados. Nesse sentido, esses pontos de interesse são assim definidos, porque representam a materialização de um objetivo prático para a modelagem e simulação realizadas. No caso da modelagem de água subterrânea, poços de observação localizados no interior do domínio podem ser selecionados como pontos de interesse, onde os valores de cota piezométrica estimados pelo MSF serão confrontados com os valores observados em campo. Conforme exemplificado, o conjunto de pontos de interesse pode

conter para cada um deles, valores esperados. Esse conjunto de informações (coordenadas dos pontos de interesse e valores esperados da variável dependente) representa o tipo de dado de entrada apresentado no fluxograma.

Figura 19 – Fluxograma da metodologia proposta



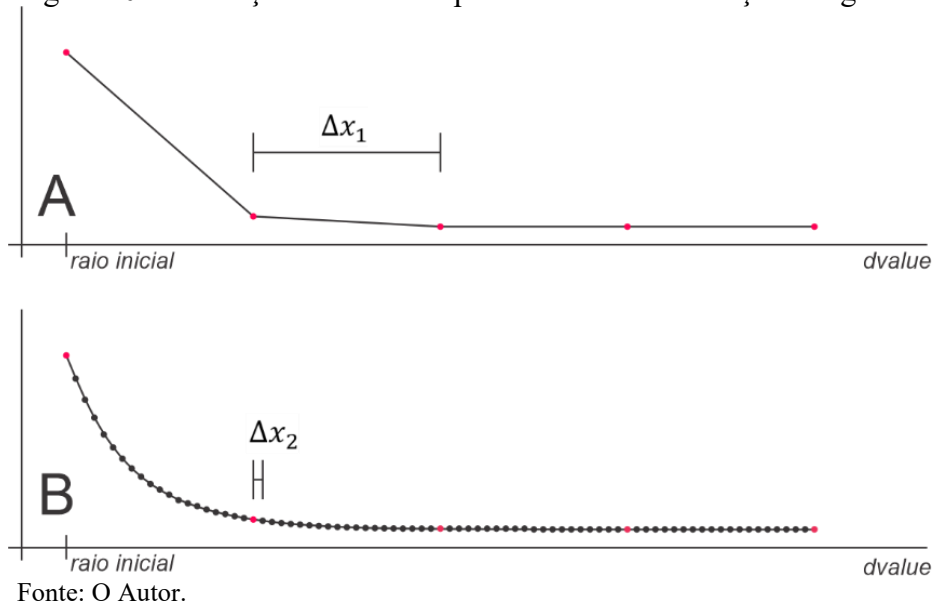
O segundo tipo de dados de entrada definidos foram os “Dados de geometria e valores de condição de contorno do problema”. Esse conjunto de dados deve conter todas as informações necessárias para que o problema seja bem definido, indicando que a modelagem seja de um problema bem-posto. Uma alternativa prática para garantir que um problema seja bem definido é, para o caso de problemas de contorno não transientes, que ele contenha pelo menos uma condição de contorno do tipo Dirichlet (Tipo 1), assim, mesmo que ocorram

condições de contorno de fluxo (Tipo 2), o sistema de equações sempre tem condições de fixar o nível de referência. Na hipótese contrária, um problema de contorno estacionário inteiramente definido com condições de contorno do tipo 2 só permitiria obter uma solução após a adoção de uma constante (Evans, 2010).

Esses dois conjuntos de dados subsidiam as etapas seguintes. É então executado o pré-processamento, que organiza os dados em bancos de dados formatados para a aplicação do método e são determinados os parâmetros principais para a definição da fronteira fictícia circular. Após o pré-processamento é necessário definir o passo de avanço da varredura de valores de raio. O ponto de partida é o raio mínimo encontrado pela função *menor_raio_circulo_centrado* e o passo pode ser definido como um valor que permita realizar a computação em tempo hábil e desenhar curvas com resolução suficiente para permitir a discussão dos resultados segundo os critérios adotados. Nesse ponto específico, sobre a definição do passo, pode ser necessário, ao longo da obtenção dos resultados, repetir o cálculo até que se encontre o intervalo apropriado, sem que o eixo das abcissas inviabilize a observação da acurácia e da convergência. Essa eventual necessidade de recalcular os valores para uma nova resolução de passos de raio (*dvalue*) foi ilustrada pela etapa condicional anterior à conclusão.

É possível exemplificar essa situação da seguinte forma. Em um determinado problema de condição de contorno, o valor do raio inicial determinou o ponto de partida dos testes de aplicação do MSF e foi adotado um passo Δx_1 , conforme o gráfico “A” da Figura 20. Na etapa de representação gráfica dos resultados obtidos, foi possível observar que o comportamento da curva não foi suave e que a resolução da representação foi inadequada para identificar a convergência assintótica dos valores de RMSE, valor do ponto e convergência. Em virtude disso, foi proposta a adoção de um passo $\Delta x_2 < \Delta x_1$ na tentativa de aumentar essa resolução e permitir verificar os comportamentos descritos anteriormente, característicos dos resultados obtidos através do MSF (Gráfico “B”). Isso permitiu observar o comportamento esperado em uma faixa de resolução compatível com a avaliação proposta. Esse processo é particularmente importante, porque, além de permitir construir a análise gráfica, permite obter bancos de dados com resolução suficiente para executar os testes de convergência sugeridos. O aumento de resolução proposto é importante apenas para visualizar o comportamento assintótico das curvas, essa diminuição do passo não implica em qualquer melhoria nos resultados numéricos obtidos, pois os valores dos parâmetros RMSE, valor no ponto e *rcond* permanecem iguais para o mesmo valor de raio, conforme ilustrado pelos pontos vermelhos da Figura 20.

Figura 20 – Ilustração do efeito do passo do raio na resolução dos gráficos

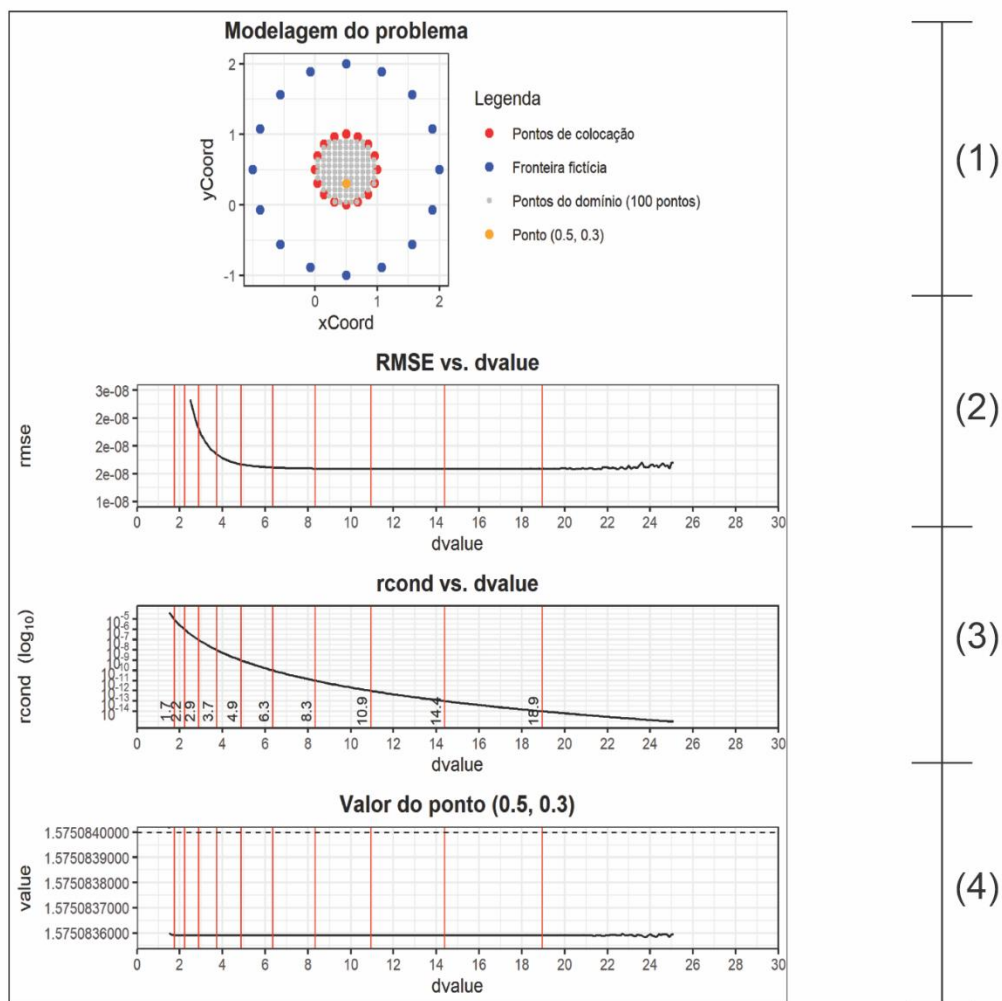


Em seguida são executados os algoritmos detalhados anteriormente: B. Fronteira Fictícia Circular e C. Método das Soluções Fundamentais. O algoritmo B recebe os dados do pré-processamento (coordenadas do centro da circunferência, quantidade de pontos e raio inicial) e determina a primeira fronteira fictícia (primeiro passo). Esse banco de dados é então encaminhado para o algoritmo C que recebe essas coordenadas, bem como os demais dados de entrada do algoritmo de Pré-processamento e realiza a aproximação numérica. Antes de executar a inversão da matriz, é realizada a determinação do parâmetro *rcond* (o inverso do número de condicionamento). Caso esse valor seja inferior ou igual ao limite adotado, igual a $E-15$, então a operação é abortada, o banco de dados é consolidado e exportado em formato de texto. Se isso ocorrer ainda na primeira iteração, o arquivo resultado será vazio. Enquanto essa condição não é alcançada, o algoritmo C realiza a aproximação numérica e armazena no banco de dados o valor de RMSE para o conjunto de pontos do domínio, o valor numérico obtido para um ponto de interesse, o valor de *rcond* e de *dvalue* da iteração. Ao final, ao atingir o limite estabelecido, o arquivo fica salvo para avaliação.

No bloco B, são utilizados os resultados gerados no bloco A para a plotagem dos gráficos e avaliação dos resultados. O banco de dados armazenado em formato de texto é importado para uma variável do tipo banco de dados e, com o auxílio das funções da biblioteca *ggplot2*, são montados os gráficos e extraídos os valores para avaliação. São construídos os gráficos, de acordo com a representação da Figura 21, de (1) Modelagem do problema, indicando a conformação geométrica do problema, com os pontos de contorno, pontos da fronteira fictícia para uma das iterações e pontos do domínio ou de interesse; (2) gráfico de

RMSE vs. $dvalue$; (3) gráfico de $rcond$ vs. $dvalue$, onde a escala do eixo “y” foi apresentada em formato logarítmico, para permitir visualizar o decaimento em décadas (E-01) dos valores desse parâmetro; e (4) gráfico do valor de um ponto escolhido para permitir avaliar localmente os resultados obtidos. Esse primeiro bloco de ilustrações foi apresentado inicialmente nos resultados para discutir os valores e detalhes específicos de cada simulação.

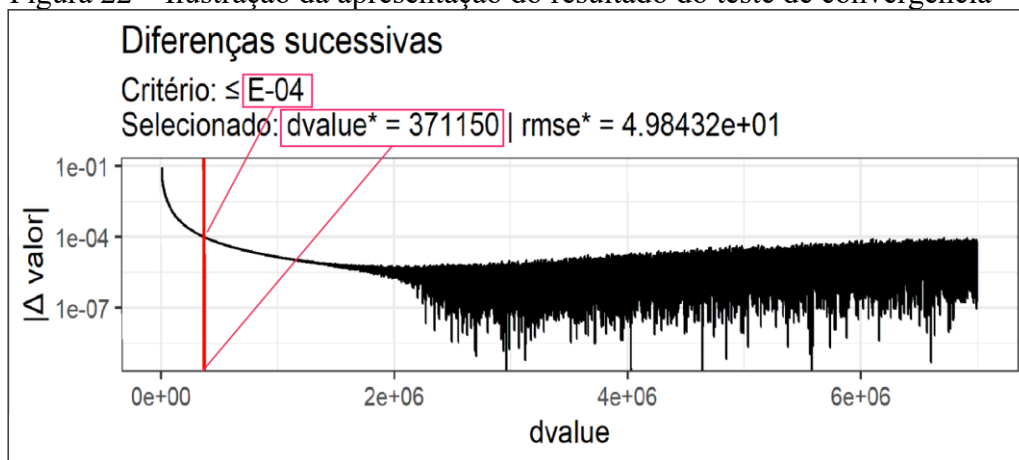
Figura 21 – Ilustração da apresentação do primeiro bloco de resultados



Fonte: O Autor.

O segundo conjunto de ilustrações se refere aos resultados do teste de convergência (Figura 22). Apresentados posteriormente, após a discussão detalhada dos resultados, esses gráficos mostram o comportamento dos erros sucessivos em escala \log_{10} . Nessa mesma representação, é apresentado ainda o valor de $dvalue$ que proporciona o valor inteiro de menor ordem para o erro sucessivo, detectado antes de eventual faixa de instabilidade. Esse valor representou o limite de precisão para a convergência tanto do RMSE e quanto do valor estimado para o ponto em questão segundo a metodologia proposta.

Figura 22 – Ilustração da apresentação do resultado do teste de convergência



Fonte: O Autor.

4.1.6 Hipóteses adotadas

A aplicação do Método das Soluções Fundamentais (MSF) pressupõe a adoção de um conjunto de hipóteses conceituais e matemáticas que asseguram a formulação de um problema bem-posto, compatível com a solução fundamental do operador diferencial considerado. Neste trabalho, as hipóteses adotadas são:

- (i) regime estacionário do fenômeno modelado,
- (ii) domínio homogêneo e isotrópico,
- (iii) governança do problema pela equação de Laplace,
- (iv) condições de contorno bem definidas e representativas do fenômeno físico,
- (v) ausência de inhomogeneidade internas explicitamente modeladas no domínio e
- (vi) disponibilidade limitada e espacialmente esparsa de dados observacionais.

A seguir, cada uma dessas hipóteses foi discutida de forma geral e, na sequência, especificada no contexto da aplicação ao fluxo de água subterrânea.

A primeira hipótese refere-se à consideração de um regime estacionário, no qual as variáveis de interesse não apresentam dependência temporal. Em termos gerais, essa hipótese é comum em problemas físicos nos quais se busca a solução de um estado de equilíbrio ou de um comportamento médio do sistema, permitindo a eliminação de termos transientes na formulação matemática. Tal suposição está alinhada com a aplicação clássica do MSF, cuja formulação básica é voltada à solução de problemas elípticos estacionários. No caso específico da simulação do fluxo de água subterrânea, essa hipótese implica assumir que o aquífero se

encontra em regime permanente, com cargas hidráulicas invariantes no tempo, condição compatível com campanhas de medição pontuais ou séries temporais previamente consolidadas.

A segunda hipótese considera o domínio de análise como homogêneo e isotrópico, isto é, com propriedades físicas constantes e independentes da direção espacial. Tal simplificação está alinhada com a formulação matemática do MSF aplicada à equação de Laplace e foi adotada tanto nos exemplos teóricos quanto nos estudos de caso reais analisados. Conforme discutido na Revisão Sistemática da Literatura, grande parte das aplicações do MSF em problemas de engenharia assume domínios homogêneos, em virtude das dificuldades associadas à representação explícita de heterogeneidades no sistema de equações e na montagem das matrizes do método. Essa hipótese também foi essencial para permitir a comparação direta entre os resultados do MSF e aqueles obtidos por métodos numéricos tradicionais, sem a introdução de fontes adicionais de incerteza. No caso do estudo de caso de aplicação a um aquífero, essa hipótese implica que o meio poroso é considerado isotrópico, sem variações espaciais de condutividade hidráulica ou anisotropia direcional.

A terceira hipótese estabelece que o fenômeno físico analisado é governado pela equação de Laplace, o que decorre da ausência de termos de fonte, sumidouro ou dependência temporal. De forma geral, essa equação descreve uma ampla classe de problemas físicos estacionários, incluindo campos potenciais em mecânica, eletrostática, transferência de calor em regime permanente e escoamentos ideais. A adoção dessa equação garante coerência entre a fundamentação teórica apresentada no Capítulo 3 e a aplicação do MSF, uma vez que o método utiliza diretamente a solução fundamental associada ao operador laplaciano. No contexto da modelagem do fluxo de água subterrânea, essa hipótese corresponde à adoção das condições clássicas de aquífero homogêneo, saturado e sob regime permanente, nas quais o campo de cargas hidráulicas pode ser descrito pela equação de Laplace.

A quarta hipótese diz respeito à definição adequada das condições de contorno, assumindo-se que estas são suficientes para caracterizar completamente o comportamento do sistema no interior do domínio. De forma geral, essa hipótese é fundamental para a aplicação de métodos de contorno, como o MSF, que dependem exclusivamente das informações impostas ao longo do limite do domínio para a construção da solução. Conforme discutido na fundamentação teórica, a correta definição das condições de contorno é determinante para a estabilidade e a unicidade da solução. No caso da aplicação ao fluxo de água subterrânea, essa hipótese implica que os valores de carga hidráulica utilizados no contorno do domínio são representativos do sistema físico e adequados para descrever o comportamento piezométrico no interior do aquífero analisado.

A quinta hipótese considera a ausência de inhomogeneidade internas explicitamente modeladas, tais como fontes, sumidouros ou descontinuidades no domínio. Em termos gerais, essa simplificação permite que o problema seja tratado exclusivamente como um problema elíptico homogêneo, compatível com a formulação clássica do MSF. Conforme discutido ao longo da fundamentação teórica, do histórico de desenvolvimento do algoritmo e da Revisão Sistemática da Literatura, a incorporação de inhomogeneidades internas no MSF ainda representa um desafio matemático relevante, sobretudo no que se refere à montagem das matrizes e à representação de fontes pontuais. No caso da modelagem do fluxo de água subterrânea, essa hipótese implica que poços de bombeamento ou de injeção não são representados explicitamente como fontes ou sumidouros no domínio, restringindo a análise a cenários compatíveis com a formulação básica do método.

A sexta hipótese reconhece a disponibilidade limitada e espacialmente esparsa de dados observacionais, condição recorrente em problemas reais de engenharia. De forma geral, essa característica não invalida a aplicação do MSF, mas, ao contrário, reforça sua atratividade como ferramenta numérica, uma vez que o método requer um conjunto reduzido de informações para sua execução, quando comparado a métodos baseados em malha. No contexto específico da simulação do fluxo de água subterrânea, essa hipótese reflete a realidade da escassez de dados hidrogeológicos detalhados, motivando a escolha do MSF como alternativa para a obtenção de estimativas do comportamento do sistema com menor dependência de parâmetros físicos adicionais.

Em conjunto, as hipóteses adotadas delimitam o escopo de aplicação dos modelos analisados nesta tese e asseguram a coerência entre a fundamentação teórica, a metodologia implementada e os resultados apresentados. As implicações dessas hipóteses, bem como suas limitações e possibilidades de extensão, foram retomadas de forma crítica no capítulo de conclusões e nas recomendações para trabalhos futuros.

4.1.7 Comportamento esperado dos gráficos e interpretação das curvas

Do ponto de vista da metodologia proposta, a observação do comportamento assintótico das curvas de RMSE e dos valores numéricos em cada ponto é o principal critério para aceitar ou rejeitar uma configuração de passos de avanço de *dvalue*. Espera-se que as curvas de decaimento de RMSE e de *rcond* exibam um trecho de queda seguida de estabilização, configurando uma faixa de bom condicionamento do sistema matricial. A partir de certos valores de *dvalue*, a piora do condicionamento (*rcond* muito pequeno) tende a produzir

instabilidades tanto na curva de RMSE vs. *dvalue* quanto nas curvas de teste de convergência nos pontos individuais.

Esse padrão é coerente com a teoria de condicionamento de matrizes e de estabilidade numérica, segundo a qual a escolha adequada do parâmetro de escala (no caso, a distância relativa da fronteira fictícia) deve simultaneamente minimizar o erro global e manter o número de condicionamento em uma faixa operacional aceitável (Higham, 2002; Li, 2005; Young *et al.*, 2008; Chen; Cho; Golberg, 2006). Na prática, isso justifica o redimensionamento do passo de avanço ilustrado anteriormente, pois o refino dos incrementos de *dvalue* permitem localizar o “ombro” da curva com maior precisão, caso não tenha sido observado inicialmente.

A leitura conjunta do comportamento global (RMSE) e local (curvas de convergência em pontos específicos) também fornecerá indícios importantes sobre a natureza dos dados de entrada utilizados como condições de contorno. Quando as curvas apresentarem um decaimento monótono do RMSE até um valor compatível com a ordem de grandeza da incerteza de medição e, simultaneamente, os valores estimados nos pontos internos convergirem assintoticamente para os valores observados/esperados, o quadro será consistente com um problema governado por uma solução harmônica do operador de Laplace, com dados de contorno compatíveis com essa solução (Evans, 2010; Li; Chen; Karageorghis, 2013).

Por outro lado, padrões de múltiplos mínimos locais, “vales” muito rasos ou convergência sistemática para valores deslocados sugerem que as condições de contorno incorporam componentes não harmônicas associadas a inhomogeneidades (fontes/sumidouros, transientes) ou a erros sistemáticos de medição, caso representem valores medidos ou observados em campo (Bear, 1988; Freeze; Cherry, 1979; Fetter, 2018). Nesses casos, a curva de RMSE deixará de refletir apenas o ajuste de um modelo Laplaciano ideal e passará a codificar a superposição entre a solução homogênea, esperada pelo MSF, e uma parcela particular associada a termos de Poisson ou a efeitos transientes não explicitamente modelados (Bear, 1988; Wang; Zheng, 2015; Li; Chen; Karageorghis, 2013).

Nesse contexto, é útil distinguir condições de contorno harmônicas e não harmônicas. Em termos matemáticos, uma condição de contorno harmônica é aquela que corresponde à restrição, sobre a fronteira, de uma função que satisfaz a equação de Laplace no interior do domínio, ou seja, os dados de Dirichlet (ou a combinação Dirichlet/Neumann) são consistentes com uma solução harmônica interna (Evans, 2010; Li; Chen; Karageorghis, 2013). Já condições de contorno não harmônicas são aquelas em que os dados observados na fronteira carregam a influência de fontes internas, transientes ou processos que, em rigor, deveriam ser modelados

por uma equação de Poisson ou por um operador modificado, e não pela forma puramente harmônica de Laplace (Bear, 1988; Fetter, 2018; Wang; Zheng, 2015).

Em sistemas naturais de fluxo subterrâneo que atendam às hipóteses de isotropia, homogeneidade e regime estacionário sob a simplificação de Dupuit–Forchheimer, a carga hidráulica é bem descrita pela equação de Laplace em duas dimensões (Haitjema, 1995; Domenico; Schwartz, 1998; Fetter, 2018), de modo que a observação de condições de contorno efetivamente harmônicas é um indicativo de que o sistema físico pode ser tratado como não transiente, e que o operador Laplaciano representa adequadamente o regime de escoamento em questão.

Quando as curvas assintóticas de convergência apontarem para valores significativamente distintos daqueles esperados a partir das observações de campo, sobretudo na modelagem de sistemas naturais, a interpretação desse comportamento envolverá o questionamento das hipóteses sobre a própria adequação das premissas do modelo. Em uma primeira investigação da justificativa para esse comportamento, caberá verificar se o domínio e os dados de contorno são compatíveis com um problema homogêneo regido por Laplace. Em aquíferos sedimentares, a presença de anisotropias hidráulicas marcantes, heterogeneidade estratigráfica ou poços em bombeamento/injeção durante a campanha de medição implica que os dados observados representam, na verdade, a superposição de uma solução homogênea com termos de fonte/dreno ou efeitos transientes (Bear, 1988; Fetter, 2018; Maier *et al.*, 2022). Nessa situação, tornar-se-á necessário reavaliar simultaneamente (a) a significância do operador Laplaciano como representação dominante do sistema físico e (b) a hipótese de condições de contorno harmônicas “puras”, livres de contaminação por erros de medição, efeitos de bombeamento ou outras perturbações.

À luz dessas considerações, espera-se que a metodologia proposta seja particularmente adequada à modelagem do fluxo de água subterrâneo em aquíferos sedimentares sob regime não transiente, desde que sejam explicitadas e respeitadas as hipóteses físicas que permitem a adoção da equação de Laplace. O fluxo é descrito pela combinação da lei de Darcy com a equação da continuidade, que, sob hipóteses de isotropia, homogeneidade, incompressibilidade da água e simplificação de Dupuit–Forchheimer, conduz a uma formulação elíptica bidimensional para a carga hidráulica (Haitjema, 1995; Domenico; Schwartz, 1998; Fetter, 2018). Sobre essa base, o MSF é aplicado de forma padronizada, ou seja, constroem-se as fronteiras a partir de poços de observação (Dirichlet) e outros elementos de contorno (Neumann/Robin), define-se uma fronteira fictícia circular e varre-se sistematicamente o parâmetro $dvalue$, avaliando-se RMSE, $rcond$ e testes de convergência nos pontos de interesse.

A aplicação prática exigirá cuidado especial na aquisição de dados primários. As campanhas de campo deverão ser planejadas para minimizar superposições com efeitos de bombeamento ou transientes, o domínio deverá ser escolhido de modo a se aproximar de um meio equivalente isotrópico e homogêneo, e eventuais inomogeneidades relevantes deverão ser tratadas explicitamente em formulações futuras (por exemplo, via Poisson ou superposição de soluções particulares).

Além disso, é importante destacar que, na hipótese de um sistema natural ser modelado pela metodologia proposta e, após a análise das curvas de RMSE, *rcond* e dos valores pontuais, observar-se uma divergência sistemática em relação aos valores esperados e tendo sido previamente afastada a possibilidade de erros significativos de medição ou de organização dos dados de entrada, tal comportamento passa a ser interpretado como um indício de inadequação estrutural do modelo adotado, isto é, da combinação da utilização da solução fundamental homogênea do operador laplaciano para representar aquele sistema físico específico.

Nesses casos, a metodologia cumprirá um papel diagnóstico ao mostrar que não há janela operacional de *dvalue* capaz de produzir simultaneamente boa acurácia global e convergência pontual compatível com as observações. Ela, portanto, apontará que a dinâmica real envolve termos-fonte (equações do tipo Poisson ou balanço hidrodinâmico com fontes e sumidouros) ou efeitos transientes que exigiriam uma formulação mais geral ou o uso de soluções fundamentais modificadas e técnicas de particularização, como DRM ou soluções fundamentais transientes, as quais extrapolam o escopo da forma puramente homogênea adotada e operacionalizada pela metodologia proposta (Evans, 2010; Bear, 1988; Fetter, 2018; Atkinson, 2010; Chen; Karageorghis; Smyrlis, 2008; Karageorghis; Fairweather, 1999) .

Em termos práticos, isso significa que, mesmo “falhando” em ajustar os dados, o protocolo proposto presta um serviço relevante ao descartar, de forma objetiva, um conjunto amplo de modelos estacionários simplificados baseados em Laplace, orientando o projetista a migrar, em etapas posteriores, para formulações com termo-fonte, modelos totalmente transientes ou ferramentas numéricas com malha, como códigos baseados em diferenças ou elementos finitos, que passam a ser mais coerentes com a complexidade diagnosticada para o sistema aquífero em estudo. Dessa forma, espera-se que a metodologia proposta seja particularmente útil em etapas iniciais de modelagem, pois o MSF necessita de dados geométricos, observações pontuais de carga hidráulica e da assunção de hipóteses simplificadoras para produzir resultados numéricos que, falhando ou aderindo aos valores esperados, permitem diagnosticar o sistema natural quanto a critérios de homogeneidade e

comportamento estacionário, sobretudo em cenários de escassez de monitoramento de dados hidrogeológicos.

4.2 Definição dos problemas teóricos simulados

A metodologia proposta foi aplicada a uma série de exemplos teóricos em domínios unitários. Foram adotadas duas geometrias unitárias: uma retangular e outra circular. A Figura 23 ilustrou ambas as geometrias, para o caso de 8 pontos de contorno e para uma fronteira fictícia montada com um raio de 1,5 no plano cartesiano.

Nas simulações dos exemplos teóricos, foram mantidos constantes o conjunto de pontos do domínio, responsáveis por estabelecer o valor de RMSE entre as geometrias correspondentes. Assim, foi possível realizar a discussão sobre como essa métrica, que define a acurácia do MSF para cada caso, se comportou conforme variaram o número de pontos de contorno.

Essa malha de pontos de domínio não é necessária para a aplicação MSF. Conforme apresentado por Rodrigues Neto *et al.* (2020), esse método numérico pode ser utilizado para computar o valor aproximado de até mesmo um único ponto do domínio, e, mesmo nessa hipótese, ele fornecerá a melhor aproximação possível independentemente da existência de eventuais outros pontos de interesse. Essa propriedade do MSF é uma das que o torna uma ferramenta computacional simples de ser implementada e distinta de outros métodos numéricos que utilizam malha para realizar as aproximações, conforme discutido anteriormente.

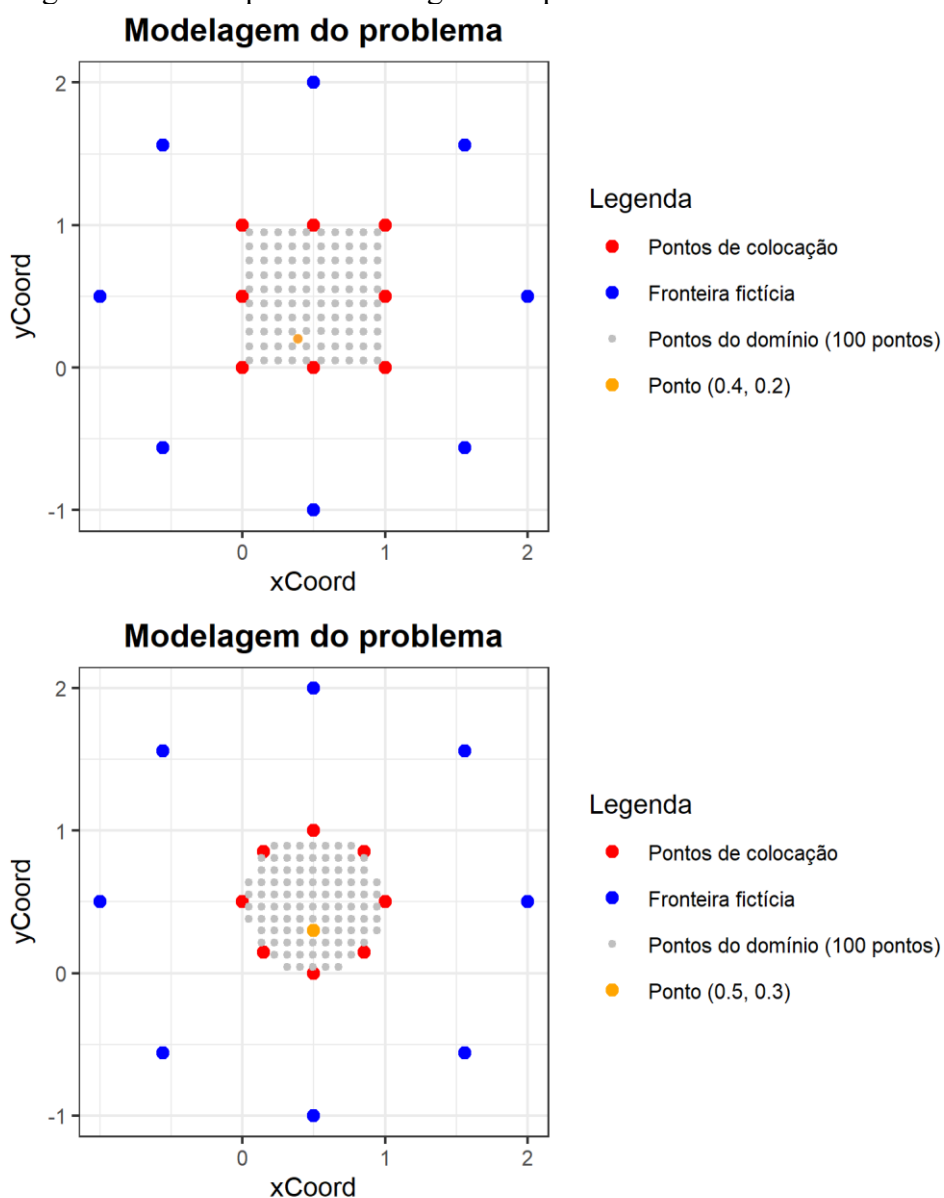
Os valores das condições de contorno foram determinados através de duas equações harmônicas, ou seja, que satisfazem o operador Laplaciano. A primeira foi a equação 38, que apresenta um formato polinomial, e a segunda, a equação 39, que apresenta formato exponencial. As equações estão definidas no espaço bidimensional e foram usadas para determinar o valor analítico para os pontos de contorno de cada geometria simulada. Dessa forma, os valores de condição de contorno equivalem, sem qualquer incerteza associada, aos valores analíticos, o que permite isolar qualquer eventual distorção observada nos valores numéricos calculados aos parâmetros de aplicação do MSF.

$$u(x, y) = x^2 - y^2 \quad (38)$$

$$u(x, y) = e^x \cdot \cos y \quad (39)$$

Os valores analíticos para cada ponto do domínio também foram obtidos através das soluções analíticas para serem comparados com os valores estimados pelo Método das Soluções Fundamentais. Ainda na Figura 23, foi possível observar um ponto de coordenadas (0,4;0,2) para o exemplo com contorno retangular e (0,5; 0,3) para o contorno circular. Nesses pontos foram realizadas as aproximações e verificada a convergência individual. Esses pontos foram escolhidos aleatoriamente para ilustrar as propriedades da aproximação em pontos individualizados do domínio.

Figura 23 – Exemplo de modelagem dos problemas teóricos



Fonte: O Autor

Ao todo foram simulados 12 exemplos, onde se fez variar a quantidade de pontos de contorno, geometria do contorno, solução analítica e raio da fronteira fictícia, que sempre iniciou em 1,5 e buscou alcançar uma faixa que evidenciasse os efeitos de instabilidade e até mesmo de alcance do limiar operacional estabelecido. A Tabela 5 a seguir apresentou de forma sintética os parâmetros principais de cada simulação realizada.

Tabela 5 – Testes em modelos teóricos

| | Pontos de contorno | Geom | Solução analítica | Raio da fronteira fictícia (dvalue) |
|----|--------------------|------------|----------------------------------|-------------------------------------|
| 1 | 8 | retangular | $u(x,y) = x^2 - y^2$ | 1,5 - 100 |
| 2 | 16 | retangular | $u(x,y) = x^2 - y^2$ | 1,5 - 30 |
| 3 | 32 | retangular | $u(x,y) = x^2 - y^2$ | 1,5 - 5 |
| 4 | 8 | circular | $u(x,y) = x^2 - y^2$ | 1,5 - 100 |
| 5 | 16 | circular | $u(x,y) = x^2 - y^2$ | 1,5 - 30 |
| 6 | 32 | circular | $u(x,y) = x^2 - y^2$ | 1,5 - 4 |
| 7 | 8 | retangular | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ | 1,5 - 100 |
| 8 | 16 | retangular | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ | 1,5 - 30 |
| 9 | 32 | retangular | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ | 1,5 - 5 |
| 10 | 8 | circular | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ | 1,5 - 100 |
| 11 | 16 | circular | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ | 1,5 - 30 |
| 12 | 32 | circular | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ | 1,5 - 4 |

Fonte: O Autor

Para construir os contornos, nos termos do que foi apresentado, foram construídos dois algoritmos em R, na forma de funções intituladas “boundary_rect_unit” e “boundary_circle_unit” que recebem como único parâmetro a quantidade de pontos requerida. Como retorno, devolvem um *data.frame* com a estrutura apresentada na Figura 24, onde as duas primeiras colunas representam as coordenadas dos pontos, a coluna “V3” os valores analíticos para a solução polinomial e a coluna “V4”, para a solução exponencial.

Figura 24 – Estrutura do *data.frame* retornado pelas funções criadas para gerar os pontos de contornos

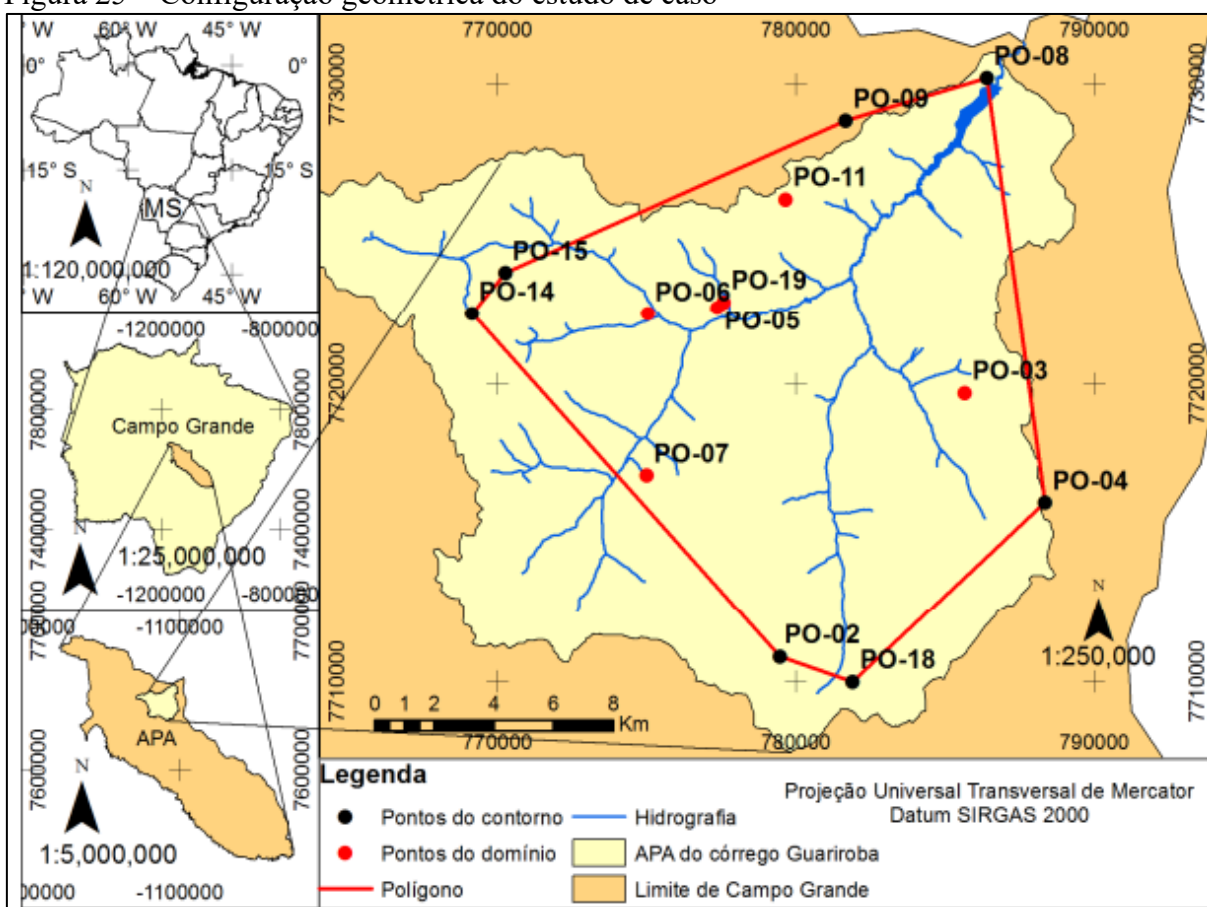
```
> boundary_circle_unit(8)
      V1      V2      V3      V4
[1,] 1.0000000 0.5000000 7.500000e-01 2.3855167
[2,] 0.8535534 0.8535534 0.000000e+00 1.5433462
[3,] 0.5000000 1.0000000 -7.500000e-01 0.8908079
[4,] 0.1464466 0.8535534 -7.071068e-01 0.7609757
[5,] 0.0000000 0.5000000 -2.500000e-01 0.8775826
[6,] 0.1464466 0.1464466 -3.469447e-17 1.1453208
[7,] 0.5000000 0.0000000 2.500000e-01 1.6487213
[8,] 0.8535534 0.1464466 7.071068e-01 2.3228422
> |
```

Fonte: O Autor

4.3 Delimitação do estudo de caso

A metodologia proposta foi aplicada a um conjunto de poços de observação onde foram tomadas medidas de cotas piezométricas ao longo de um monitoramento conduzido em uma bacia experimental localizada no município de Campo Grande. A Figura 25 apresentou a localização e caracterização dos poços de monitoramento, que no problema modelado foram representados por pontos de contorno e pontos de domínio. Esse conjunto de poços de observação foi monitorado por Cavazzana, Lastoria e Gabas (2019) em pesquisa dedicada à compreensão da interrelação entre escoamento superficial e subterrâneo. Os dados coletados, disponibilizados na forma de planilha foram selecionados para representarem uma amostra quase instantânea das condições de fluxo subterrâneo. Nesse sentido, os dados referentes à coleta realizada no dia 2 de março de 2015 foram utilizados como condições de contorno do estudo de caso aplicado à metodologia proposta. As coordenadas em projeção UTM SIRGAS 2000 21S e os valores das cotas piezométricas foram apresentados na Tabela 6.

Figura 25 – Configuração geométrica do estudo de caso



Fonte: Rodrigues Neto (2020)

Tabela 6 – Poços de observação aplicados na modelagem do estudo de caso

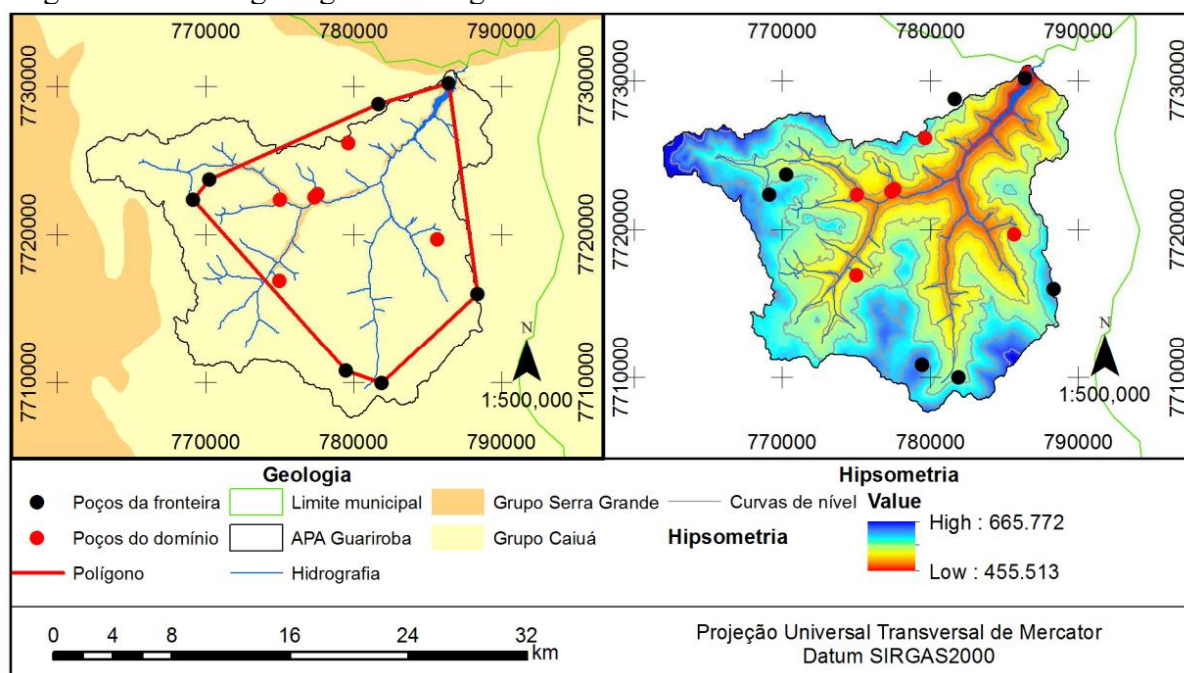
| | ID | Longitude | Latitude | Cota piezométrica (m) |
|--------------------------|-------|-----------|----------|-----------------------|
| Poços do contorno | PO-14 | 769141 | 7722366 | 569,758 |
| | PO-15 | 770264 | 7723731 | 554,128 |
| | PO-09 | 781682 | 7728795 | 518,458 |
| | PO-08 | 786404 | 7730206 | 456,945 |
| | PO-04 | 788362 | 7716011 | 539,921 |
| | PO-18 | 781915 | 7709978 | 561,026 |
| | PO-02 | 779471 | 7710815 | 566,485 |
| Poços do domínio | PO-03 | 785672 | 7719681 | 510,236 |
| | PO-05 | 777369 | 7722558 | 496,435 |
| | PO-06 | 775043 | 7722359 | 494,108 |
| | PO-07 | 775005 | 7716921 | 508,856 |
| | PO-11 | 779669 | 7726178 | 537,589 |
| | PO-19 | 777590 | 7722753 | 493,908 |

Fonte: Cavazza, Lastoria e Gabas (2019) *apud* Rodrigues Neto (2020)

A área de estudo proposta representa a Área de Proteção Ambiental do córrego Guariroba, localizada na cidade de Campo Grande, Mato Grosso do Sul. Essa área corresponde à bacia hidrográfica do referido córrego e apresenta uma área de aproximadamente 360 km² (Campo Grande, 1995, 2008, 2013). Ela foi alvo de um monitoramento das cotas piezométricas de 13 poços existentes entre os anos de 2015 e 2017, e, conforme indicado por Cavazzana, Lastoria e Gabas (2019), foi tomado cuidado de solicitar aos proprietários dos poços que suspendessem a captação em pelo menos dois dias anteriores ao dia agendado para a medição, reduzindo o potencial de ocorrência de incertezas nos valores medidos.

A conformação geológica da região, conforme apresentado na Figura 26, indica a sua localização em uma área de ocorrência do grupo Caiuá, cujas unidades indicam a composição predominante de arenitos finos e sedimentos selecionados com espessura de até 280 metros. O grupo Caiuá ocorre em camadas superiores ao grupo Serra Geral, formado por unidades de basalto com fraturas. Essa conformação faz parte do Sistema Aquífero Baurú, um sistema livre que ocorre em mais de 30% do estado do Mato Grosso (Fernandes; Coimbra, 1994; Batezelli, 2010; Governo do Estado de Mato Grosso do Sul, 2010; Uechi; Gabas; Lastoria, 2017; Cavazzana; Lastoria; Gabas, 2019).

Figura 26 – Geologia e geomorfologia da área de estudo



Fonte: Rodrigues Neto (2020)

4.3.1 Condições de contorno e hipóteses adotadas no estudo de caso

Para que o estudo de caso seja passível de simulação pela metodologia proposta (baseada no MSF com a solução fundamental do operador de Laplace), adotaram-se as seguintes hipóteses, em conformidade com o tópico 4.1.6. Hipóteses adotadas:

- (i) regime estacionário no instante da campanha (ausência de variação temporal relevante das cargas durante a coleta de dados);
- (ii) meio poroso homogêneo e isotrópico, com propriedades hidráulicas efetivas constantes no domínio de análise;
- (iii) ausência de fontes e drenos volumétricos ativos durante a coleta (bombeamento/injeção), de modo que a formulação permaneça homogênea (Laplace);
- (iv) domínio de análise bidimensional no plano (simplificação de Dupuit-Forchheimer), com geometria descrita por um contorno fechado definido a partir dos poços mais externos;
- (v) disponibilidade de condições de contorno do tipo Dirichlet (cotas piezométricas prescritas em pontos do contorno) e de um conjunto de pontos internos para verificação (pontos de interesse) e cálculo de métricas (RMSE) para monitorar desempenho e estabilidade numérica.

Essas escolhas alinham o estudo de caso ao tipo de EDP elíptica estacionária e à dependência forte de condições de contorno discutidas na fundamentação, além de compatibilizá-lo com os dados e com a estrutura operacional do fluxo metodológico (Evans, 2010; Hadamard, 1923).

A hipótese de estacionariedade é justificada, porque as cotas piezométricas usadas como base do estudo de caso foram obtidas em uma única campanha, com medições realizadas no dia 02 de março de 2015, caracterizando um recorte temporal curto, interpretável como “quase instantâneo” frente à escala de evolução de muitos sistemas aquíferos livres. Assim, as cargas medidas podem ser tratadas como um estado de referência (*snapshot*) para um problema elíptico em regime permanente, cuja solução depende primordialmente das condições de contorno (Evans, 2010).

A hipótese de homogeneidade (e, inicialmente, também de isotropia) é adotada como condição de primeira aproximação porque a área estudada se insere em contexto sedimentar, associada ao Grupo Caiuá (Sistema Aquífero Bauru), descrito como constituído por arenitos (predominantemente finos) e com espessura significativa, conforme apresentado na Figura 26. Essa caracterização sustenta o uso de parâmetros efetivos uniformes no domínio como ponto de partida. Ao mesmo tempo, a própria estratégia de análise prevê que tais adoções sejam posteriormente discutidas e tensionadas à luz do ajuste dos resultados e de eventuais padrões espaciais de erro/resíduo (Fetter, 2018; Bear, 1988).

A hipótese de não ocorrência de drenos ou fontes (no sentido de termos fonte volumétricos ativos durante a campanha) é, por um lado, uma condição prática para a aplicação direta da formulação homogênea com Laplace, na qual se supõe ausência de produção/consumo distribuído no domínio, e, por outro, é corroborada pelo procedimento reportado na fonte de dados, onde a coleta foi realizada após solicitação de suspensão temporária de captação por proprietários locais por, pelo menos, dois dias antes das medições. Isso, contudo, não elimina a possibilidade de existirem trocas naturais (fluxos verticais/intercâmbio entre unidades aquíferas/aquitardes, exfiltrações localizadas, recarga difusa) que, se relevantes, tenderiam a se manifestar como discrepâncias sistemáticas nos resultados obtidos e poderão demandar refinamentos (por exemplo, migração para Poisson ou estratégias com solução particular) (Bear, 1988; Fetter, 2018).

Do ponto de vista conceitual, as condições de contorno completam a formulação matemática e traduzem como o sistema interage com o exterior (valores prescritos, fluxos impostos e/ou trocas), sendo decisivas para tornar o problema bem-posto (existência, unicidade e estabilidade), conforme a discussão clássica associada a Hadamard (1923). Em hidrogeologia,

cada tipo de condição se associa a uma grandeza física: Dirichlet (tipo 1) representa diretamente carga hidráulica/cota piezométrica prescrita; Neumann (tipo 2) representa fluxo normal imposto (incluindo trechos impermeáveis com fluxo nulo); e condições mistas/Robin representam situações de troca/condutância. A nomenclatura e o significado matemático desses tipos são sistematizados por Jazayeri e Werner (2019), e conectam diretamente a escolha do dado de campo (carga ou fluxo) ao tipo de restrição matemática aplicada na fronteira (Jazayeri; Werner, 2019; Hadamard, 1923; Evans, 2010).

No estudo de caso, as cotas piezométricas medidas nos poços selecionados para o contorno serão usadas explicitamente como condições Dirichlet (valores prescritos) na fronteira do domínio. Conforme a Figura 25, os poços mais externos definem um polígono que representa a delimitação do domínio de análise, e, segundo a Tabela 6, compõem o conjunto de contorno: PO-14, PO-15, PO-09, PO-08, PO-04, PO-18 e PO-02. Já os poços situados no interior desse polígono serão tratados como pontos de interesse (verificação), nos quais as estimativas numéricas serão confrontadas com os valores observados em campo — PO-03, PO-05, PO-06, PO-07, PO-11 e PO-19 — permitindo calcular métricas globais como RMSE, além de avaliar estabilidade e convergência local a partir do comportamento das curvas de desempenho previstas no fluxo metodológico (Cavazzana; Lastoria; Gabas, 2019).

Dessa forma, ao fixar um contorno geométrico coerente (polígono externo) e ao prescrever condições de contorno compatíveis (com ênfase em Dirichlet), o problema se torna bem definido nos termos discutidos no tópico de existência, unicidade e estabilidade, isso é, a solução deve existir, ser única (sob especificação adequada das condições) e variar continuamente com os dados, o que fornece um quadro objetivo para interpretar tanto bons ajustes quanto falhas. Em particular, se os resultados evidenciarem desvios sistemáticos não atribuíveis a erros de medição, tais divergências funcionam como um diagnóstico preliminar sobre a inadequação (total ou parcial) das hipóteses (estacionariedade, homogeneidade, ausência de fontes/drenos) para representar o sistema natural naquele recorte, orientando o refinamento do modelo, através, por exemplo, de introdução de heterogeneidade, fontes distribuídas, ou formulações não estacionárias, em uma etapa investigativa mais aprofundada (Hadamard, 1923; Evans, 2010).

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo foi dividido em três tópicos principais. No primeiro, foram apresentados e discutidos os resultados da aplicação da metodologia proposta para problemas teóricos em um domínio unitário de contorno retangular e circular. No segundo, foram apresentados e discutidos os resultados da aplicação da mesma metodologia ao estudo de caso. No terceiro, foram apresentadas as considerações conjuntas sobre os testes realizados e sobre a aplicabilidade da metodologia proposta.

5.1 Resultados para os domínios unitários

Neste tópico, foram apresentados os resultados da aplicação da metodologia para os domínios unitários (quadrado e circular) onde se conhecia preliminarmente a solução analítica de cada ponto de interesse.

O primeiro exemplo simulado foi representado pela Figura 27. No painel (1), intitulado “Modelagem do problema”, foi apresentada a representação no espaço cartesiano dos pontos de colocação, que representam o contorno do problema; dos pontos da fronteira fictícia, que representam os pontos de fonte do MSF; dos pontos do domínio, onde se conhece a solução analítica e onde foi calculada a aproximação utilizando o MSF para determinar o RMSE da operação como um todo para cada valor de $dvalue$, raio da fronteira fictícia; e um ponto qualquer, para permitir a avaliação da aproximação numérica para um único ponto do domínio. Os pontos da fronteira fictícia foram representados para um valor de raio igual a 2 (dois), porém, no decorrer dos testes realizados, esse valor variou conforme os gráficos seguintes representaram em suas abcissas (eixo horizontal), conforme proposto na metodologia deste trabalho.

No painel (2) da Figura 27, intitulado “RMSE vs. $dvalue$ ”, foram apresentados os gráficos de RMSE (raiz quadrada do erro quadrático médio) calculado para todos os pontos do domínio, significando a qualidade média da aproximação do método para todo o domínio. No painel (3), “ $rcond$ vs. $dvalue$ ”, foi apresentada a curva de variação do inverso do número de condicionamento da matriz principal do problema, matriz A da equação 35. Essa matriz precisa sofrer uma inversão para permitir a aplicação do MSF. O objetivo desse gráfico foi rastrear o comportamento do condicionamento do sistema ao longo da variação do raio da fronteira fictícia $dvalue$ e, para facilitar sua interpretação, a escala do seu eixo vertical foi apresentado em escala \log_{10} . No painel (4), “Valor do ponto”, foi avaliado o comportamento do valor

numérico calculado pelo MSF para um ponto escolhido aleatoriamente dentro do domínio. Nesse gráfico foi indicado o valor da solução analítica na forma de uma linha tracejada, assim foi possível distinguir como o método numérico converge para esse valor conforme varia o raio da fronteira fictícia.

Para ampliar a discussão, ainda no painel “rcond vs. dvalue” foram marcados os decaimentos do valor do parâmetro *rcond* a cada década, isso é, a cada 10^{-1} ordem de grandeza. As linhas verticais de cor vermelha correspondem entre si em todos os painéis e identificam o valor do raio para quais ocorre o decaimento de uma década de *rcond*. Todos os gráficos replicaram essa mesma forma de apresentação dos resultados para permitir a comparação entre as diferentes geometrias de problemas simulados.

5.1.1 Solução analítica polinomial $u(x,y) = x^2 - y^2$

5.1.1.1 Domínio retangular com 8 pontos

A apresentou os resultados da simulação de um problema de domínio unitário retangular com os valores de condições de contorno (Tabela 7) extraídos da solução analítica polinomial $u(x,y) = x^2 - y^2$.

Tabela 7 – Condições de contorno do problema

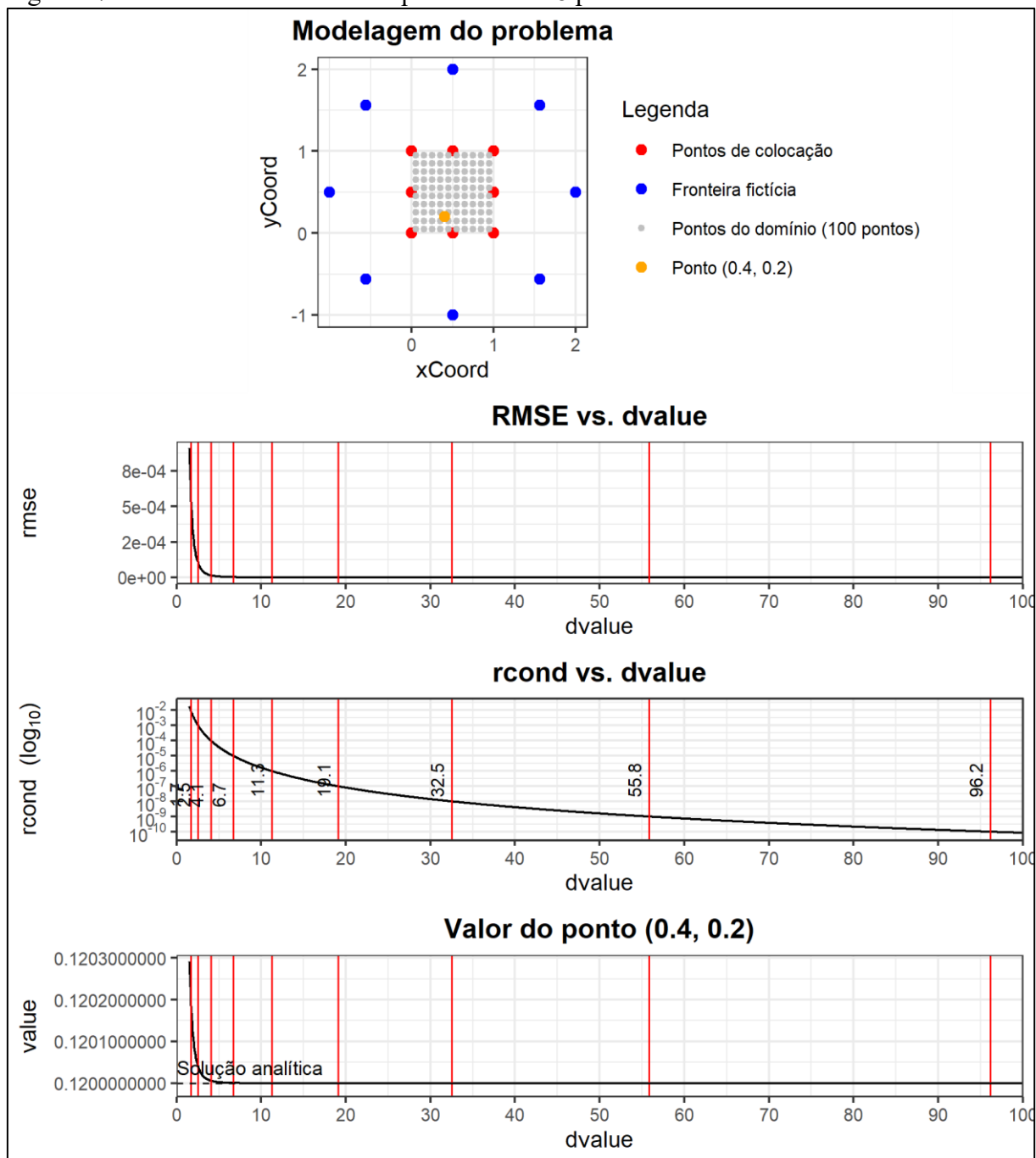
| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = x^2 - y^2$ |
|-------|--------|--------|----------------------|
| 1 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 2 | 0,50 | 0,00 | 0,25 |
| 3 | 1,00 | 0,00 | 1,00 |
| 4 | 1,00 | 0,50 | 0,75 |
| 5 | 1,00 | 1,00 | 0,00 |
| 6 | 0,50 | 1,00 | -0,75 |
| 7 | 0,00 | 1,00 | -1,00 |
| 8 | 0,00 | 0,50 | -0,25 |

Fonte: O Autor

Os gráficos desenhados (Figura 27) varreram um intervalo de *dvalue* entre 1,5 e 100, indicando que foram testados valores de raio da fronteira fictícia entre 1,5 e 100 vezes maiores do que a maior dimensão do domínio. O gráfico de “RMSE vs. dvalue” decresceu assintoticamente partindo de um valor de RMSE igual a 9,08E-04 com *dvalue* igual a 1,50 até o valor de 4,23E-11 para *dvalue* igual a 100,0. A curva em questão apresentou ainda a forma

de um “joelho” antes de ultrapassar o decaimento de $rcond$ inferior a E-04, indicando uma convergência acelerada de RMSE até antes desse limite.

Figura 27 – Resultados do domínio quadrado com 8 pontos



Fonte: O Autor

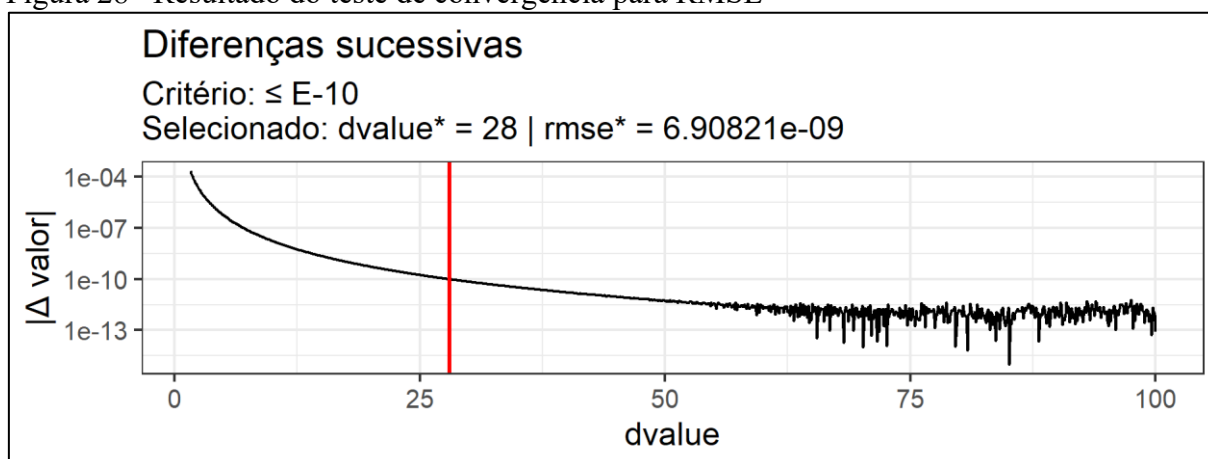
A curva de “rcond vs. dvalue”, apresentada com o eixo vertical em escala logarítmica, mostrou o decaimento de décadas nos valores de $dvalue$ iguais a 1,7; 2,5; 4,1; 6,7; ...; 96,2 para E-02, E-03, E-04, E-05; ..., E-10, respectivamente. Esses valores representaram uma faixa de

computação muito acima do limiar estabelecido de $1,0E-15$ como limite para a abortagem dos cálculos e de $\sim 2,26E-16$ do limiar de máquina para pontos flutuantes.

Avaliando o gráfico de “Valor do ponto (0.4, 0.2)”, cujo valor da solução analítica é exatamente 0,12, foi possível observar que a partir do decaimento de $rcond$ abaixo de $E-04$ o valor numérico estimado pelo MSF se aproximou do valor da solução analítica em convergência similar à curva “RMSE vs. $dvalue$ ”.

A Figura 28 mostrou o resultado do teste de convergência proposto aplicado ao parâmetro RMSE, que representa a raiz quadrada do erro quadrático médio dos pontos do domínio. Foi possível observar que o critério de erro sucessivo menor ou igual a $E-10$ permitiu selecionar o $dvalue$ igual a 28 que proporcionou um valor de RMSE igual a $6,91E-09$. A partir desse ponto, o erro sucessivo decresce, de tal forma que valores maiores de $dvalue$ indicariam uma convergência ainda maior do que a anterior, até que, a partir de $dvalue$ igual a 50, foi possível observar sinais de instabilidade no valor de RMSE computado na amplitude de $E-12$.

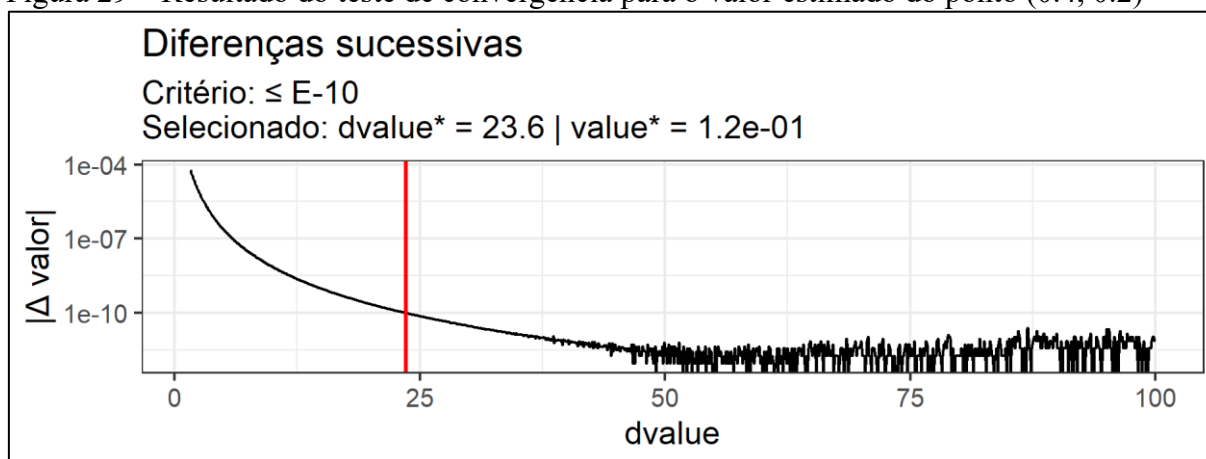
Figura 28– Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

A Figura 29 mostrou o resultado do teste de convergência para os valores aproximados pelo MSF para o ponto (0.4,0.2). Selecionando o critério de convergência como a diferença entre os erros sucessivos inferiores ou iguais a $E-10$, foi possível selecionar $dvalue$ igual a 23,6 e um valor estimado da variável dependente de $\sim 0,12000$ virtualmente igual ao valor esperado. A partir de $dvalue$ igual a 37,5 foi possível observar instabilidade nos erros sucessivos com uma amplitude da ordem de até $E-11$.

Figura 29 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2)



Fonte: O Autor

O critério de erro sucessivo E-10 foi adotado arbitrariamente, por ter sido identificado como a década exata antes da instabilidade, porém sua definição depende dos objetivos da simulação. Por exemplo, ao se trabalhar com a modelagem do fluxo de água subterrâneo, um erro sucessivo inferior a E-06 pode ser representativo e suficiente para devolver resultados com convergência eficaz para permitir a geração de mapas de curvas de nível de cotas piezométricas, sobretudo se as cotas piezométricas das condições de contorno estiverem na unidade de medida metro, onde uma divergência de E-06 sequer é capaz de ser detectada em um mapa e extrapola a precisão com que os dados primários são coletados em campo.

Na hipótese de o objetivo da aproximação ser identificar, por exemplo, variações de temperatura na superfície de um microchip ou circuito integrado, cujas dimensões são da ordem de milímetros, pode ser que o critério de erro sucessivo possa ser reavaliado para permitir uma convergência superior em virtude das particularidades da finalidade dessa aproximação numérica, pois nesse cenário, o valor de E-06 pode ainda provocar desvios de resultado importantes.

Apesar das considerações sobre a definição do critério de erro sucessivo, o gráfico tanto de RMSE quanto do valor do ponto (0.4,0.2) indicaram que dentro da faixa de varredura de *dvalue* o erro sucessivo alcançou cifras de até E-10 antes de alcançar o trecho com instabilidade. O teste de convergência aplicado unicamente aos resultados da aproximação do MSF para a geometria do modelo proposto indicou que, mesmo não se conhecendo o valor da solução analítica, o método foi capaz de convergir a um resultado único e estável dentro dos critérios de erro sucessivo discutidos.

5.1.1.2 Domínio retangular com 16 pontos

A Tabela 8 apresentou as condições de contorno para o problema modelado e simulado na Figura 30. Nessa simulação foram adotados 16 pontos ao longo da fronteira definida pelo quadrado unitário e pela solução analítica polinomial. Os gráficos desenhados também varreram um intervalo de *dvalue* entre 1,5 e 30 em passos de 0,1.

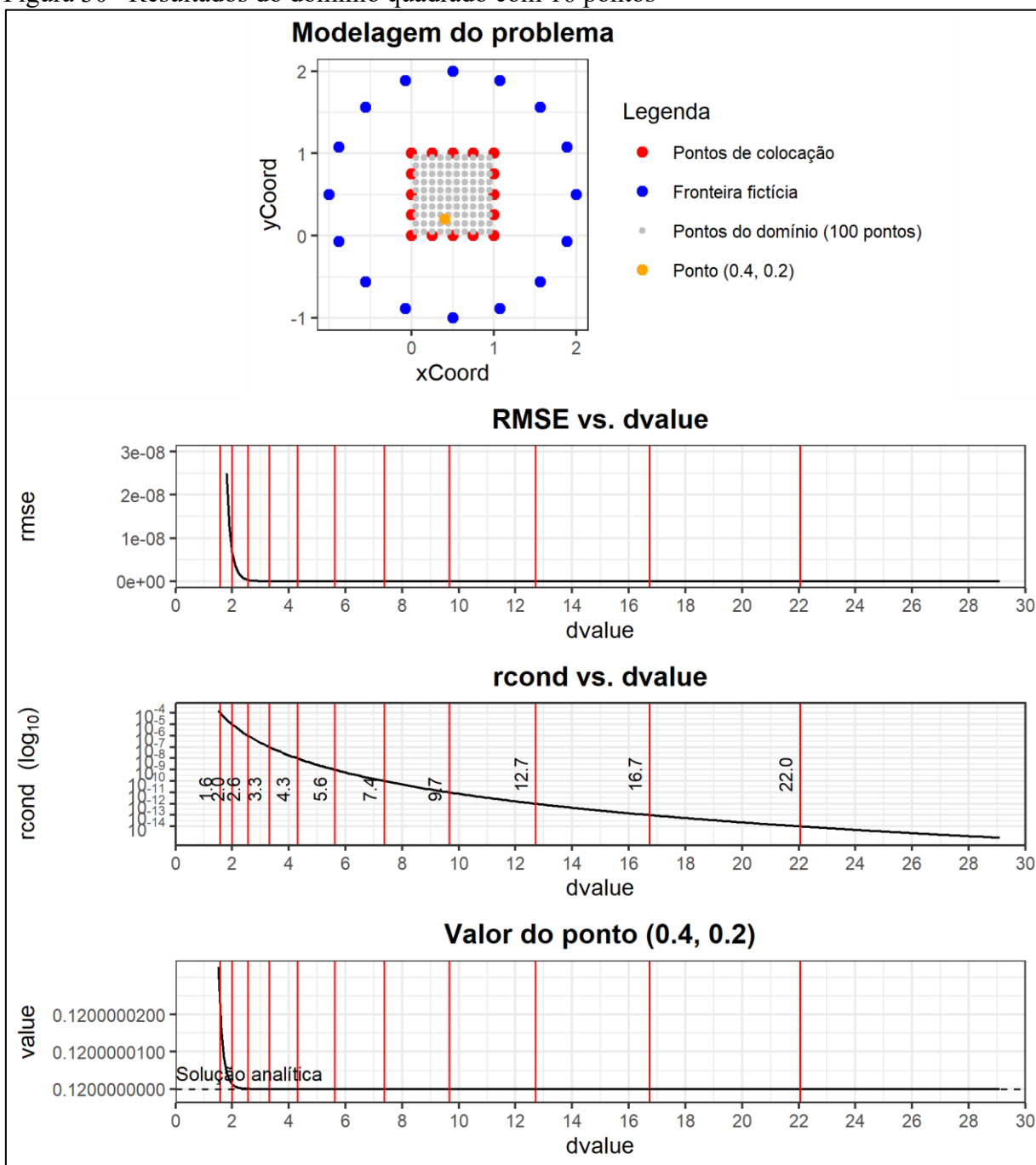
Tabela 8 – Condições de contorno do problema

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = x^2 - y^2$ |
|-------|--------|--------|----------------------|
| 1 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 2 | 0,25 | 0,00 | 0,06 |
| 3 | 0,50 | 0,00 | 0,25 |
| 4 | 0,75 | 0,00 | 0,56 |
| 5 | 1,00 | 0,00 | 1,00 |
| 6 | 1,00 | 0,25 | 0,94 |
| 7 | 1,00 | 0,50 | 0,75 |
| 8 | 1,00 | 0,75 | 0,44 |
| 9 | 1,00 | 1,00 | 0,00 |
| 10 | 0,75 | 1,00 | -0,44 |
| 11 | 0,50 | 1,00 | -0,75 |
| 12 | 0,25 | 1,00 | -0,94 |
| 13 | 0,00 | 1,00 | -1,00 |
| 14 | 0,00 | 0,75 | -0,56 |
| 15 | 0,00 | 0,50 | -0,25 |
| 16 | 0,00 | 0,25 | -0,06 |

Fonte: O Autor

O gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” decresceu assintoticamente partindo de um valor de RMSE igual a 2,91E-08 com *dvalue* igual a 1,50 até o valor de 2,74E-13 para *dvalue* igual a 25,1. Comparando com o exemplo anterior, com apenas 8 pontos de contorno, foi possível identificar que a duplicação da quantidade de pontos de colocação no problema permitiu iniciar a curva de RMSE em ordens de grandeza de erro inferiores, indicando um ganho na acurácia.

Figura 30– Resultados do domínio quadrado com 16 pontos



Fonte: O Autor

A curva de “rcond vs. dvalue”, apresentado com o eixo vertical em escala logarítmica, mostrou o decaimento de décadas nos valores de $dvalue$ iguais a 1,6; 2,0; 2,6 e 3,3 para E-04, E-05, E-06 e E-07, respectivamente, representando novamente uma faixa de computação muito acima do limiar estabelecido de $1,0E-15$ como limite para a abortagem dos cálculos e de $\sim 2,26E-16$ do limiar de máquina para pontos flutuantes, e, dessa vez, o decaimento das décadas aconteceu de forma antecipada iniciando de valores duas ordens de grandeza inferiores do que

o exemplo anterior (exemplo anterior E-02 vs. exemplo atual E-04) para os mesmos valores de *dvalue*.

Apesar da convergência acelerada e computação superior ao limiar de $1,0E-15$, os valores de *rcond* se aproximaram mais rapidamente de um cenário de instabilidade. Isso indicou que, para essa geometria, o aumento na quantidade de pontos de colocação implica no aumento da precisão e acurácia dos resultados em desfavor da faixa operacional de computação. Assim, faixas cada vez menores de *dvalue*, isso é, do raio da fronteira fictícia, estão disponíveis para a realização dos cálculos, se considerarmos um valor inicial de *dvalue* que atende ao critério de convergência específico do problema e um valor final de *dvalue* que não implica em instabilidade.

Investigando os valores de *rcond* para valores cada vez maiores quantidades de pontos para essa geometria de problema, foi possível determinar os valores de raio a partir dos quais se alcança o limiar $1,0E-15$, apresentados na Tabela 9. Conforme exposto, o aumento da quantidade de pontos reduziu o alcance de uma faixa de valores de raio da fronteira fictícia para o qual se obtém um condicionamento de matrizes acima do limite operacional definido. Para uma geometria definida com 8 pontos de contorno *dvalue* poderia alcançar o valor de 1540,3; enquanto para uma geometria definida com 64 pontos de contorno, *dvalue* sequer ultrapassaria o valor de 1,52 sem disparar a critério de abortagem de $1,0E-15$, representando, portanto, uma faixa operacional muito estreita ($1,5000 \leq dvalue \leq 1,5110$).

Tabela 9 – Valores máximos de *dvalue* para o domínio retangular unitário para os quais o limite de condicionamento $1,0E-15$ é alcançado

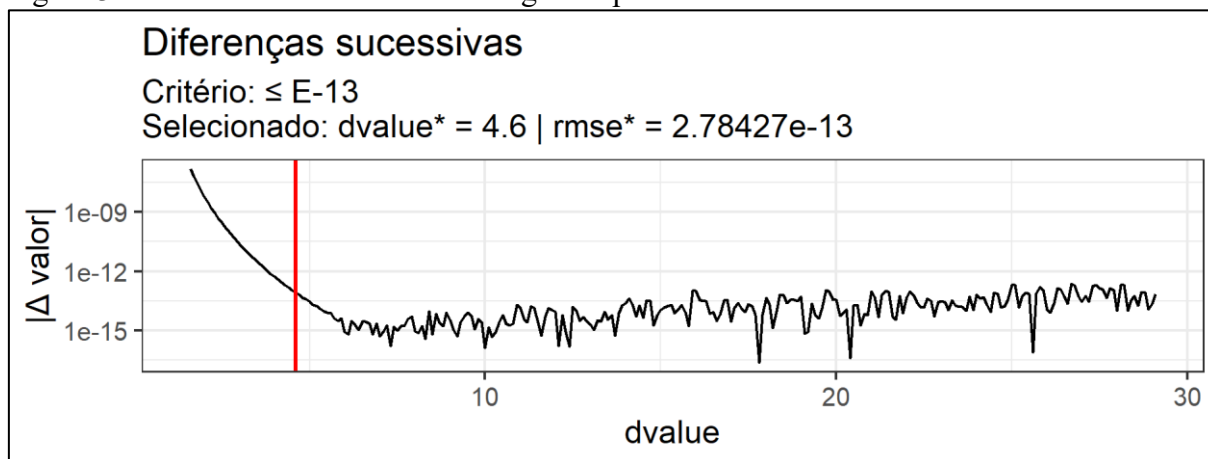
| Número de Pontos | <i>dvalue</i> até <i>rcond</i> inferior a $1,0E-15$ |
|------------------|---|
| 08 | 1540,3 |
| 16 | 29,04 |
| 32 | 4,04 |
| 64 | 1,5106 |

Fonte: O Autor

Na Figura 31, foi possível selecionar um valor de *dvalue* a partir do qual o erro sucessivo de RMSE para o problema simulado foi inferior a $E-13$ (*dvalue* = 4,6), o que significa uma convergência até a ordem da décima segunda casa decimal. A figura apresentou ainda indícios de instabilidade para valores de *dvalue* superiores a 5. No painel de “*rcond* vs. *dvalue*” da Figura 20, *dvalue* igual a 5 está localizado entre as décadas de $E-08$ e $E-09$. Para esse tipo de problema, foi possível estabelecer, portanto, que valores de *rcond* inferiores a $E-08$ conduzem o sistema

a um cenário de instabilidade, muito embora a instabilidade detectada seja da ordem de E-15, nos limites de precisão de máquina para pontos flutuantes.

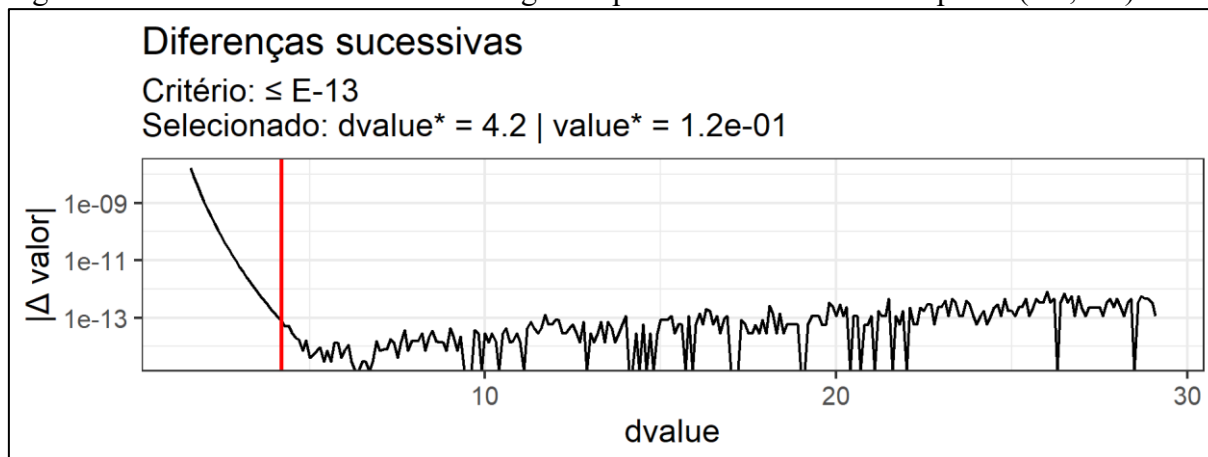
Figura 31– Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

O mesmo comportamento foi observado na Figura 32, que apresentou o gráfico de erros sucessivos calculados para o ponto (0.4,0.2). Antes mesmo de $dvalue$ igual a 5, foi possível observar sinais de instabilidade. Foi possível detectar também que mesmo nos valores iniciais de distância da fronteira fictícia a ordem de grandeza dos erros sucessivos já iniciou em $1,63E-08$, e que a partir de $dvalue$ igual a 2 o erro sucessivo passa a ser inferior a $1,08E-09$. Esse valor pode ser considerado suficiente para uma série de objetivos de modelagem conforme citado anteriormente. Ainda na Figura 32, para o critério de erro sucessivo inferior ou igual a E-13 foi possível selecionar $dvalue$ igual a 4,2.

Figura 32– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2)



Fonte: O Autor

5.1.1.3 Domínio retangular com 32 pontos

A Figura 33 apresentou os resultados e modelagem do problema com domínio retangular unitário com 32 pontos de contorno, cujas condições de contorno foram explicitadas na Tabela 10. Nessa simulação, o gráfico varreu valores de $dvalue$ entre 1,5 e 5, pois, conforme apresentado na Tabela 6, o sistema matricial encontra o limiar operacional de $rcond$ inferior a $1,0E-15$ para $dvalue$ acima de 4,04. Diferentemente das simulações anteriores, em virtude desse novo intervalo reduzido, os incrementos de $dvalue$ foram ajustados para 0,01 em detrimento de 0,1. Isso permitiu desenhar as curvas mais suaves dentro do intervalo proposto e a interpretação dos resultados.

Tabela 10 – Condições de contorno do problema (continua)

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = x^2 - y^2$ |
|-------|--------|--------|----------------------|
| 1 | 0,0000 | 0,0000 | 0,000000 |
| 2 | 0,1250 | 0,0000 | 0,015625 |
| 3 | 0,2500 | 0,0000 | 0,062500 |
| 4 | 0,3750 | 0,0000 | 0,140625 |
| 5 | 0,5000 | 0,0000 | 0,250000 |
| 6 | 0,6250 | 0,0000 | 0,390625 |
| 7 | 0,7500 | 0,0000 | 0,562500 |
| 8 | 0,8750 | 0,0000 | 0,765625 |
| 9 | 1,0000 | 0,0000 | 1,000000 |
| 10 | 1,0000 | 0,1250 | 0,984375 |
| 11 | 1,0000 | 0,2500 | 0,937500 |
| 12 | 1,0000 | 0,3750 | 0,859375 |
| 13 | 1,0000 | 0,5000 | 0,750000 |
| 14 | 1,0000 | 0,6250 | 0,609375 |
| 15 | 1,0000 | 0,7500 | 0,437500 |
| 16 | 1,0000 | 0,8750 | 0,234375 |
| 17 | 1,0000 | 1,0000 | 0,000000 |
| 18 | 0,8750 | 1,0000 | -0,234375 |
| 19 | 0,7500 | 1,0000 | -0,437500 |
| 20 | 0,6250 | 1,0000 | -0,609375 |
| 21 | 0,5000 | 1,0000 | -0,750000 |
| 22 | 0,3750 | 1,0000 | -0,859375 |
| 23 | 0,2500 | 1,0000 | -0,937500 |
| 24 | 0,1250 | 1,0000 | -0,984375 |
| 25 | 0,0000 | 1,0000 | -1,000000 |
| 26 | 0,0000 | 0,8750 | -0,765625 |
| 27 | 0,0000 | 0,7500 | -0,562500 |
| 28 | 0,0000 | 0,6250 | -0,390625 |
| 29 | 0,0000 | 0,5000 | -0,250000 |
| 30 | 0,0000 | 0,3750 | -0,140625 |

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = x^2 - y^2$ |
|-------|--------|--------|----------------------|
| 31 | 0,0000 | 0,2500 | -0,062500 |
| 32 | 0,0000 | 0,1250 | -0,015625 |

Fonte: O Autor

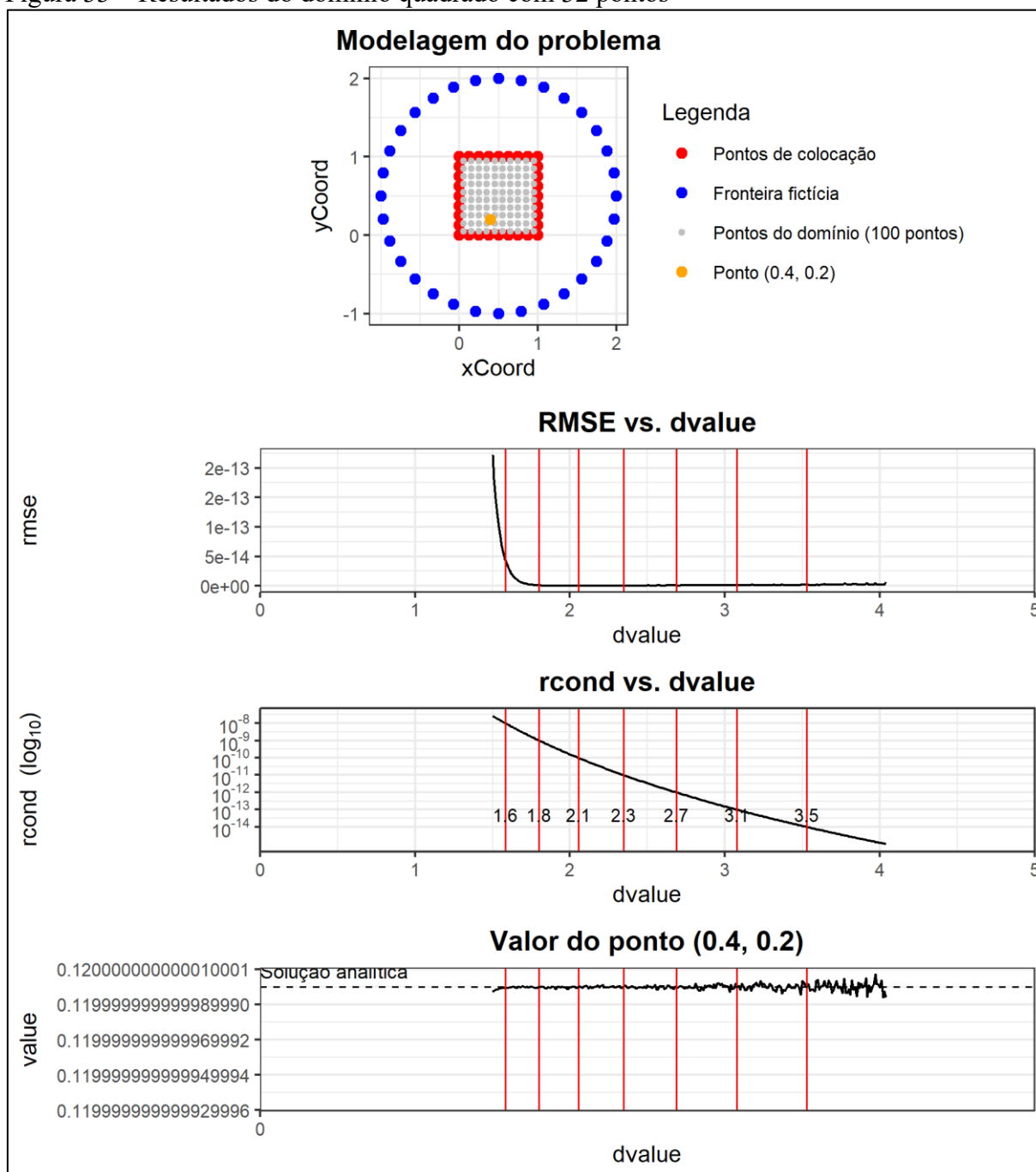
O gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” (Figura 33) decresceu assintoticamente, porém mais acelerado que no exemplo anterior, iniciando em $RMSE = 1,81E-12$ para $dvalue = 1,5$ até o valor de $RMSE = 5,95E-15$ para $dvalue = 4,04$, ponto em que o sistema alcança o limiar $rcond = 1,02E-15$ e a partir do qual o limite operacional é atingido e aborta a operação.

O gráfico de “ $rcond$ vs. *dvalue*” inicia com valores de $2,70E-08$ em *dvalue* igual a 1,5 e aborta em 4,04, conforme citado. Para essa quantidade de pontos de contorno nessa geometria de problema, a faixa de operação de *dvalue* fica estreita e o número de condicionamento já apresenta o potencial de inserir instabilidade nos valores numéricos calculados. Essa expectativa foi confirmada no painel “Valor do ponto (0.4,0.2)”, onde foi possível detectá-la mais sensivelmente a partir da década de $rcond$ E-12, apesar de ela ser perceptível de forma mais sutil já a partir de $rcond$ igual a E-08.

Na Figura 34, a instabilidade fica mais evidente a partir de valores de *dvalue* iguais a 1,75. Apesar disso, foi possível selecionar E-15 com limiar de erro sucessivo para selecionar o valor de *dvalue* dentro de alguma faixa de estabilidade. Apesar disso, na Figura 35, os erros sucessivos do teste de convergência resultaram em um gráfico errático que flutua entre casas decimais da ordem de grandeza de E-15 e aumentam para E-14 a partir de *dvalue* igual a 3, indicando o colapso do número de condicionamento e uma faixa instável de trabalho, muito embora não se tenha alcançado o limiar de operação para $rcond$ igual a $1,0E-15$ ou o limiar de máquina $\sim 2,26E-16$.

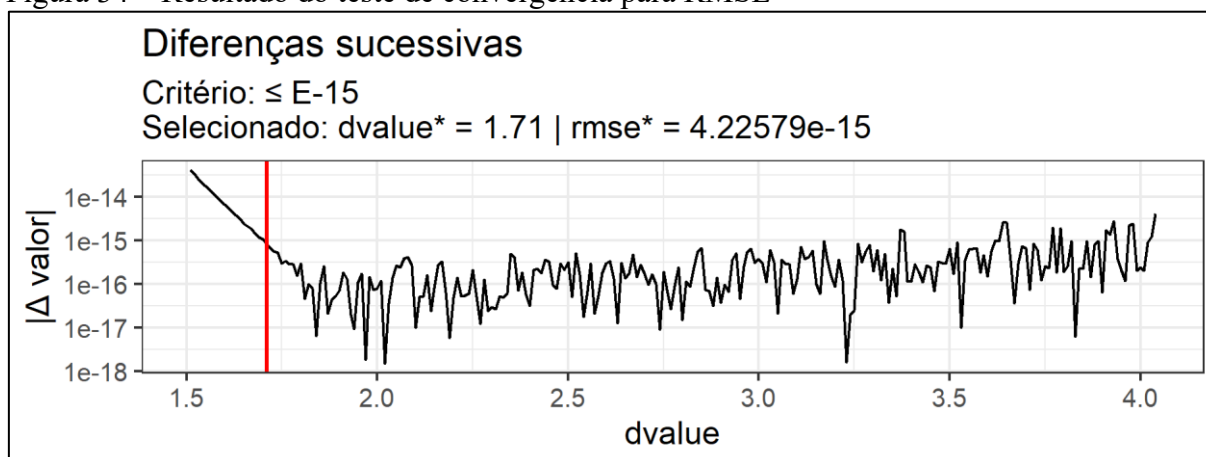
Esse comportamento distinto entre RMSE e valor de um ponto específico aponta para a necessidade de, mesmo considerando um valor médio de convergência calculado para um grupo de pontos, avaliar a convergência para cada ponto de interesse isoladamente. O RMSE carrega a média de todos os pontos de interesse, enquanto um ou outro ponto pode alcançar uma faixa de instabilidade antes dos valores apontados no gráfico de RMSE.

Figura 33 – Resultados do domínio quadrado com 32 pontos



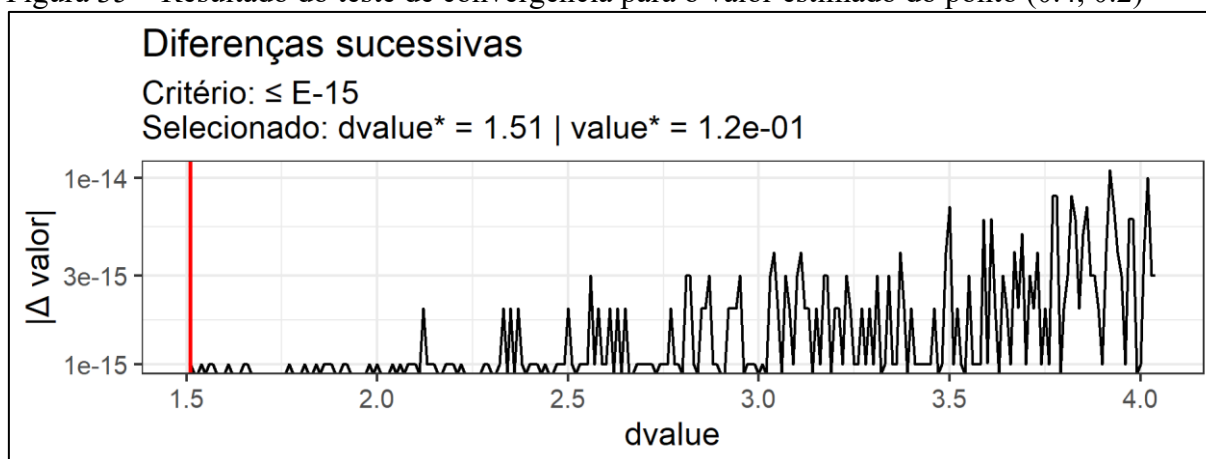
Fonte: O Autor

Figura 34 – Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

Figura 35 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2)



Fonte: O Autor

5.1.1.4 Domínio circular com 8 pontos

A Figura 36 apresentou os resultados da simulação executada em um domínio circular de raio unitário conforme as coordenadas e condições de contorno apresentadas na Tabela 11.

Tabela 11 – Condições de contorno do problema

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = x^2 - y^2$ |
|-------|---------|---------|----------------------|
| 1 | 1,00000 | 0,50000 | 0,75000 |
| 2 | 0,85355 | 0,85355 | 0,00000 |
| 3 | 0,50000 | 1,00000 | -0,75000 |
| 4 | 0,14645 | 0,85355 | -0,70711 |
| 5 | 0,00000 | 0,50000 | -0,25000 |
| 6 | 0,14645 | 0,14645 | 0,00000 |
| 7 | 0,50000 | 0,00000 | 0,25000 |
| 8 | 0,85355 | 0,14645 | 0,70711 |

Fonte: O Autor

O gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” (Figura 36) decresce assintoticamente assim como nos exemplos anteriores. Nessa simulação, RMSE inicia com o valor de $9,1E-04$ em *dvalue* igual a 1,5 e fecha o intervalo com $RMSE = 4,2E-11$ em *dvalue* igual a 100. Comparando esse resultado inicial com o problema com mesma quantidade de pontos de contorno, porém com domínio retangular unitário, onde os valores na faixa de *dvalue* foram ($RMSE = 9,08E-04$ com *dvalue* igual a 1,50; e $RMSE = 4,23E-11$ para *dvalue* igual a 100), foi possível observar que a ordem de grandeza do parâmetro RMSE permaneceu na mesma década $E-04$, com uma leve tendência de o problema com contorno circular proporcionar resultados mais precisos.

O gráfico de “*rcond* vs. *dvalue*” apresentou decaimento de décadas em valores similares ao exemplo com contorno retangular. Enquanto no contorno retangular as décadas $E-03$, $E-04$, $E-05$ foram superadas (decaíram) em valores de *dvalue* 2,5; 4,1 e 6,7, no exemplo circular as mesmas décadas decaíram em 2,1; 3,4 e 5,5, ou seja, antecipadamente.

Os gráficos das Figura 37 e Figura 38 mostraram o resultado do teste de convergência para o conjunto de pontos do domínio e para o ponto (0.5,0.3). Adotando o mesmo critério de $E-10$ para os dois gráficos, foi possível atingir a convergência desejada para valores de *dvalue* iguais a 25,2 para RMSE e 20,1 para o valor do ponto de interesse. Em contraste, no exemplo com domínio retangular, o mesmo critério foi atingido com *dvalue* igual a 28 e 23,6, respectivamente. Esse comportamento, dos gráficos de RMSE e *rcond* entre os contornos retangular e circular, indica que a geometria circular teve o potencial de convergir mais rapidamente para uma precisão superior na mesma faixa de *dvalue*.

Uma avaliação dos intervalos de operação, isso é, a partir de qual valor de *dvalue* o sistema matricial atinge o limite operacional de $1,0E-15$ (Tabela 12) para o problema de contorno circular de raio unitário, indicou valores, portanto, faixas de trabalho inferiores às do problema com contorno retangular unitário. Adicionalmente, para 64 pontos de contorno, mesmo o valor inicial de 1,5 para o raio da fronteira fictícia não permitiu obter um valor de *rcond* dentro do limite operacional estabelecido. Isso significa que problemas com essa geometria que possuam pelo menos 64 pontos de contorno precisarão ser ajustados para tratar previamente o condicionamento das matrizes principais, caso contrário, não poderão ser operados nos termos da metodologia proposta.

Figura 36– Resultados do domínio circular com 8 pontos

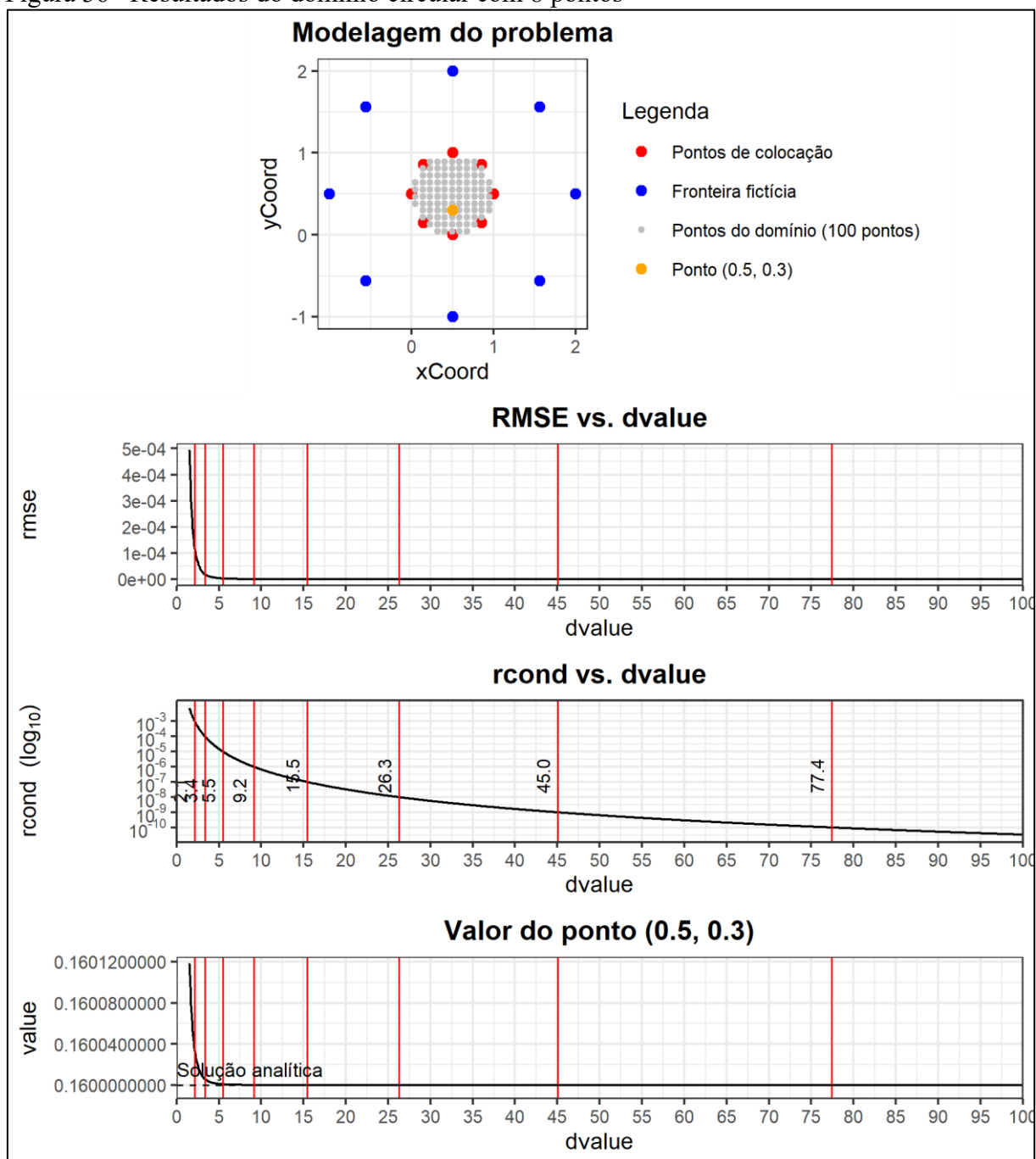
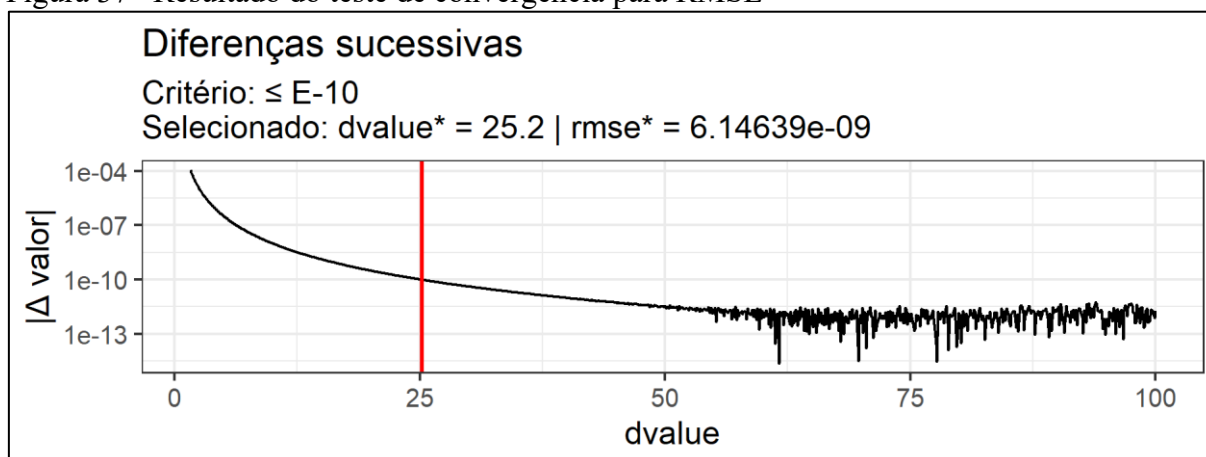
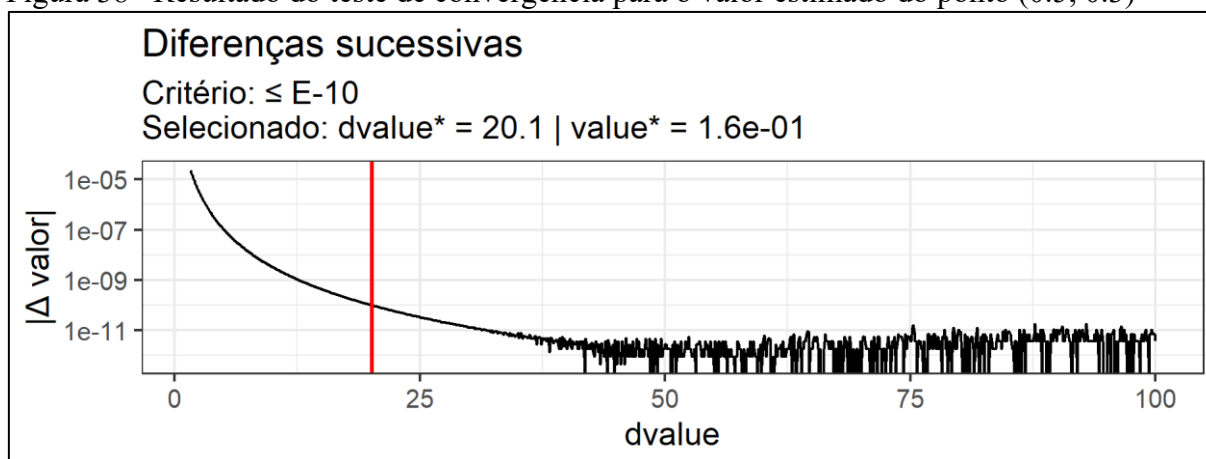


Figura 37– Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

Figura 38– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3)



Fonte: O Autor

Tabela 12 – Valores máximos de $dvalue$ para o domínio circular de raio unitário para os quais o limite de condicionamento $1,0E-15$ é alcançado

| Número de Pontos | $dvalue$ até $rcond$ inferior a $1,0E-15$ |
|------------------|---|
| 08 | 1211,5 |
| 16 | 25,1 |
| 32 | 3,58 |
| 64 | - |

Fonte: O Autor

5.1.1.5 Domínio circular com 16 pontos

A Figura 39 apresentou os resultados da simulação de um domínio circular com raio unitário com 16 pontos de contorno. As condições de contorno deste exemplo foram apresentadas na Tabela 13.

Nesta simulação, foi adotado um intervalo de variação de valores de *dvalue* entre 1,5 e 30 em intervalos de 0,1. Isso foi importante para evidenciar que para valores de *dvalue* superiores a 25,1 (Tabela 12) o sistema alcança o limiar de $1,0E-15$ e aborta a operação. Incluir esse limite permitiu ainda discutir a instabilidade observada nos resultados.

Tabela 13– Condições de contorno do problema

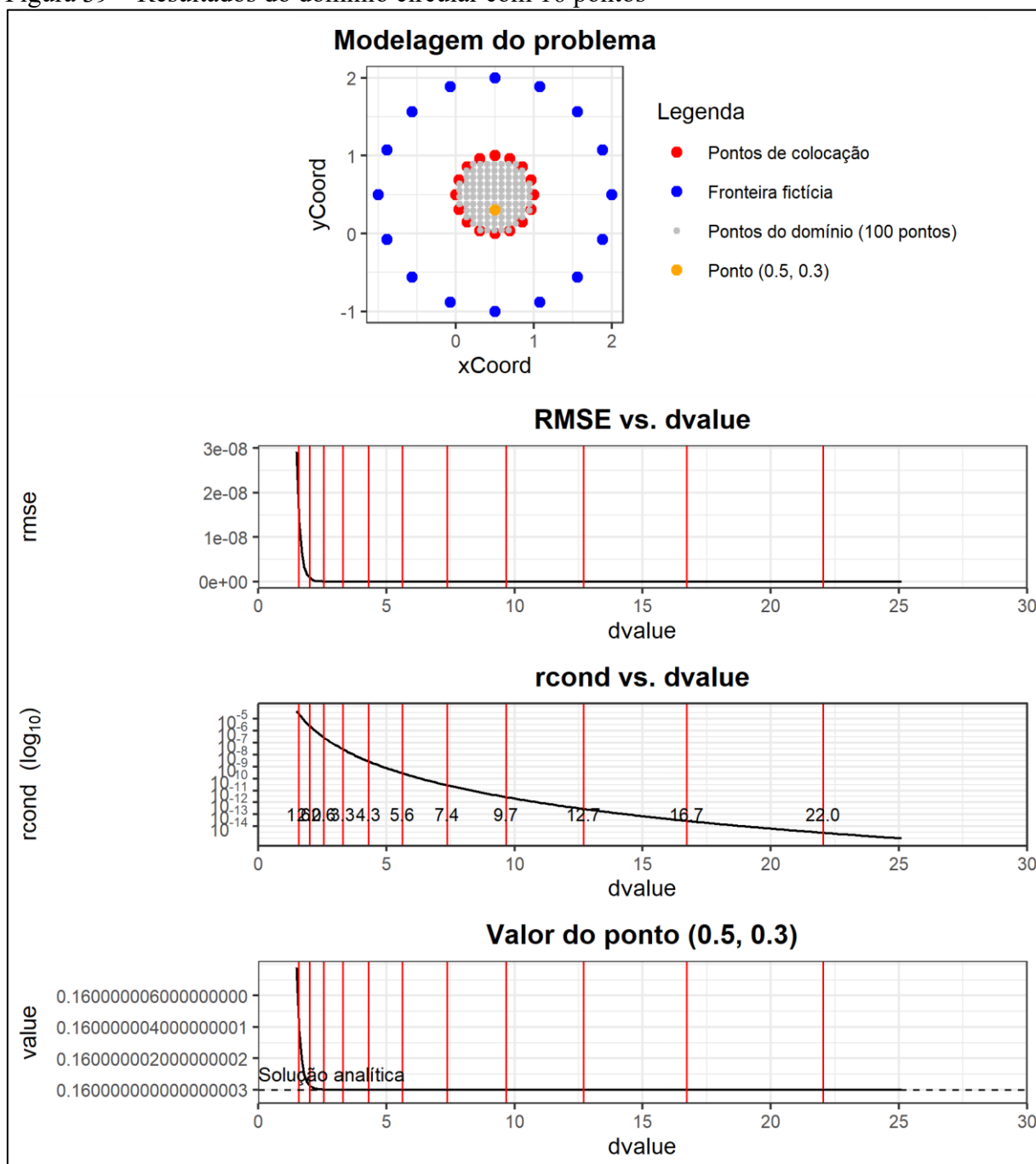
| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = x^2 - y^2$ |
|-------|---------|---------|----------------------|
| 1 | 1,00000 | 0,50000 | 0,75000 |
| 2 | 0,96194 | 0,69134 | 0,44737 |
| 3 | 0,85355 | 0,85355 | 0,00000 |
| 4 | 0,69134 | 0,96194 | -0,44737 |
| 5 | 0,50000 | 1,00000 | -0,75000 |
| 6 | 0,30866 | 0,96194 | -0,83006 |
| 7 | 0,14645 | 0,85355 | -0,70711 |
| 8 | 0,03806 | 0,69134 | -0,47650 |
| 9 | 0,00000 | 0,50000 | -0,25000 |
| 10 | 0,03806 | 0,30866 | -0,09382 |
| 11 | 0,14645 | 0,14645 | 0,00000 |
| 12 | 0,30866 | 0,03806 | 0,09382 |
| 13 | 0,50000 | 0,00000 | 0,25000 |
| 14 | 0,69134 | 0,03806 | 0,47650 |
| 15 | 0,85355 | 0,14645 | 0,70711 |
| 16 | 0,96194 | 0,30866 | 0,83006 |

Fonte: O Autor

O gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” decresce assintoticamente, porém de forma mais rápida, convergindo para o valor mínimo. O valor de RMSE inicia em $2,92E-08$ e colapsa em *dvalue* igual a 25,1 com o valor de $2,75E-13$. O “joelho” do gráfico ocorre de forma mais acentuada após o decaimento da segunda década quando o valor de *rcond* atinge valores inferiores a $E-06$ em *dvalue* igual a 2,2.

O gráfico de “*rcond* vs. *dvalue*” mostra o decaimento acentuado de décadas, alcançando os valores de intervalos apresentados na Tabela 14. O parâmetro *rcond* inicia o gráfico com o valor de $4,70E-05$ em *dvalue* igual a 1,5 e encerra com o valor de $1,001E-15$ em *dvalue* igual a 25,1, conforme citado anteriormente. Comparando os decaimentos para a mesma geometria considerando 8 e 16 pontos de contorno, o comportamento do condicionamento é similar para o caso de domínio retangular, onde o aumento da quantidade de pontos implicou na aceleração da degradação do condicionamento do exemplo.

Figura 39 – Resultados do domínio circular com 16 pontos



Fonte: O Autor

Tabela 14 – Decaimento de décadas do gráfico “rcond vs. dvalue” (continua)

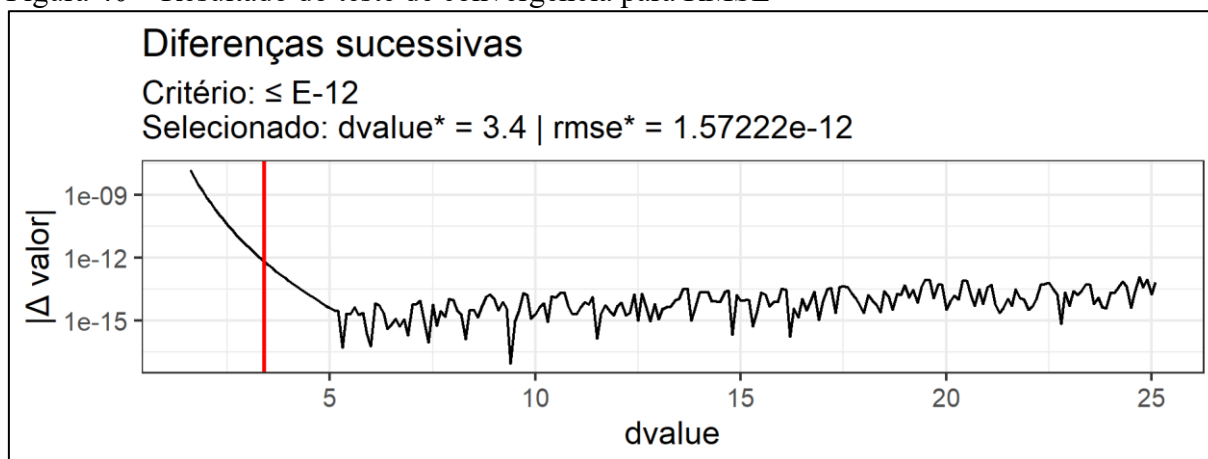
| Década | Nível | Dvalue |
|--------|----------|--------|
| -5 | 1,00E-05 | 1,7 |
| -6 | 1,00E-06 | 2,2 |
| -7 | 1,00E-07 | 2,9 |
| -8 | 1,00E-08 | 3,7 |
| -9 | 1,00E-09 | 4,9 |

| Década | Nível | Dvalue |
|--------|----------|--------|
| -10 | 1,00E-10 | 6,3 |
| -11 | 1,00E-11 | 8,3 |
| -12 | 1,00E-12 | 10,9 |
| -13 | 1,00E-13 | 14,4 |
| -14 | 1,00E-14 | 18,9 |

Fonte: O Autor

O gráfico do teste de convergência aplicado ao conjunto de pontos do domínio (Figura 40) indicou que, a partir de *dvalue* igual a 5, ocorreu instabilidade nos resultados na ordem de E-15, exatamente na faixa *rcond* entre E-09 e E-10. Similar ao que foi identificado em exemplos anteriores, mesmo sem atingir o limiar de 1,0E-15 a computação dos valores encontrou instabilidade de ordem E-15 em valores de *rcond* inferiores a E-09. Ao adotarmos o critério de erro sucessivo inferior ou igual a E-12, selecionamos o *dvalue* de 3,4.

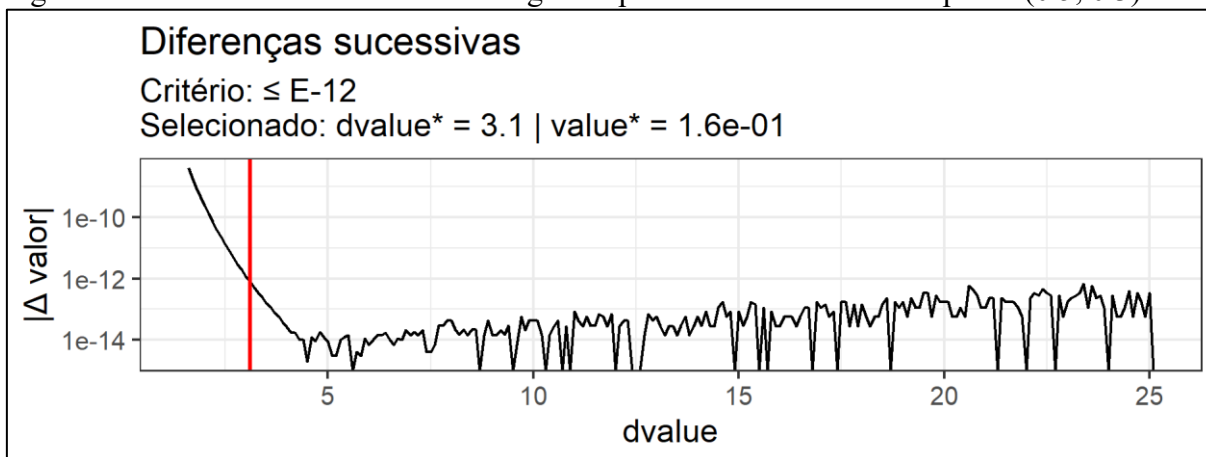
Figura 40 – Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

Na Figura 41, que apresentou o resultado do teste de convergência para os resultados no ponto (0.5,0.3), foi possível identificar que o cenário de instabilidade iniciou antes de *dvalue* igual a 5. Isso corrobora com a proposta de que, mesmo concluindo sobre a eventual instabilidade para um grupo de pontos, obtida através de uma métrica como o RMSE, é importante avaliar os pontos individualmente ao avaliar a convergência segundo o método das diferenças sucessivas. No gráfico, o valor calculado para o ponto em questão convergiu para 0,16 adotando o critério de erro sucessivo inferior ou igual E-12, virtualmente igual ao valor analítico para aquele ponto.

Figura 41 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3)



Fonte: O Autor

5.1.1.6 Domínio circular com 32 pontos

A Figura 42 apresentou os resultados e a modelagem proposta para o exemplo de domínio circular unitário com 32 pontos de contorno. As condições de contorno foram extraídas da solução analítica e foram apresentadas na Tabela 15. De acordo com os limites de operação detectados na Tabela 9, só foi possível avançar com o intervalo de valores de $dvalue$ até 3,58, valor a partir do qual o sistema matricial encontra valores de $rcond$ inferiores ao limiar estabelecido de $1,0E-15$. Nessa nova faixa de varredura, foi adotado o intervalo $1,5 \leq dvalue \leq 4$ em intervalos de 0,01 para permitir o desenho dos gráficos e interpretação dos resultados.

Tabela 15 – Condições de contorno do problema (continua)

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = x^2 - y^2$ |
|-------|---------|---------|----------------------|
| 1 | 1,00000 | 0,50000 | 0,75000 |
| 2 | 0,99039 | 0,59755 | 0,62382 |
| 3 | 0,96194 | 0,69134 | 0,44737 |
| 4 | 0,91573 | 0,77779 | 0,23362 |
| 5 | 0,85355 | 0,85355 | 0,00000 |
| 6 | 0,77779 | 0,91573 | -0,23362 |
| 7 | 0,69134 | 0,96194 | -0,44737 |
| 8 | 0,59755 | 0,99039 | -0,62382 |
| 9 | 0,50000 | 1,00000 | -0,75000 |
| 10 | 0,40245 | 0,99039 | -0,81891 |
| 11 | 0,30866 | 0,96194 | -0,83006 |
| 12 | 0,22221 | 0,91573 | -0,78919 |
| 13 | 0,14645 | 0,85355 | -0,70711 |
| 14 | 0,08427 | 0,77779 | -0,59785 |
| 15 | 0,03806 | 0,69134 | -0,47650 |
| 16 | 0,00961 | 0,59755 | -0,35697 |

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = x^2 - y^2$ |
|-------|---------|---------|----------------------|
| 17 | 0,00000 | 0,50000 | -0,25000 |
| 18 | 0,00961 | 0,40245 | -0,16188 |
| 19 | 0,03806 | 0,30866 | -0,09382 |
| 20 | 0,08427 | 0,22221 | -0,04228 |
| 21 | 0,14645 | 0,14645 | 0,00000 |
| 22 | 0,22221 | 0,08427 | 0,04228 |
| 23 | 0,30866 | 0,03806 | 0,09382 |
| 24 | 0,40245 | 0,00961 | 0,16188 |
| 25 | 0,50000 | 0,00000 | 0,25000 |
| 26 | 0,59755 | 0,00961 | 0,35697 |
| 27 | 0,69134 | 0,03806 | 0,47650 |
| 28 | 0,77779 | 0,08427 | 0,59785 |
| 29 | 0,85355 | 0,14645 | 0,70711 |
| 30 | 0,91573 | 0,22221 | 0,78919 |
| 31 | 0,96194 | 0,30866 | 0,83006 |
| 32 | 0,99039 | 0,40245 | 0,81891 |

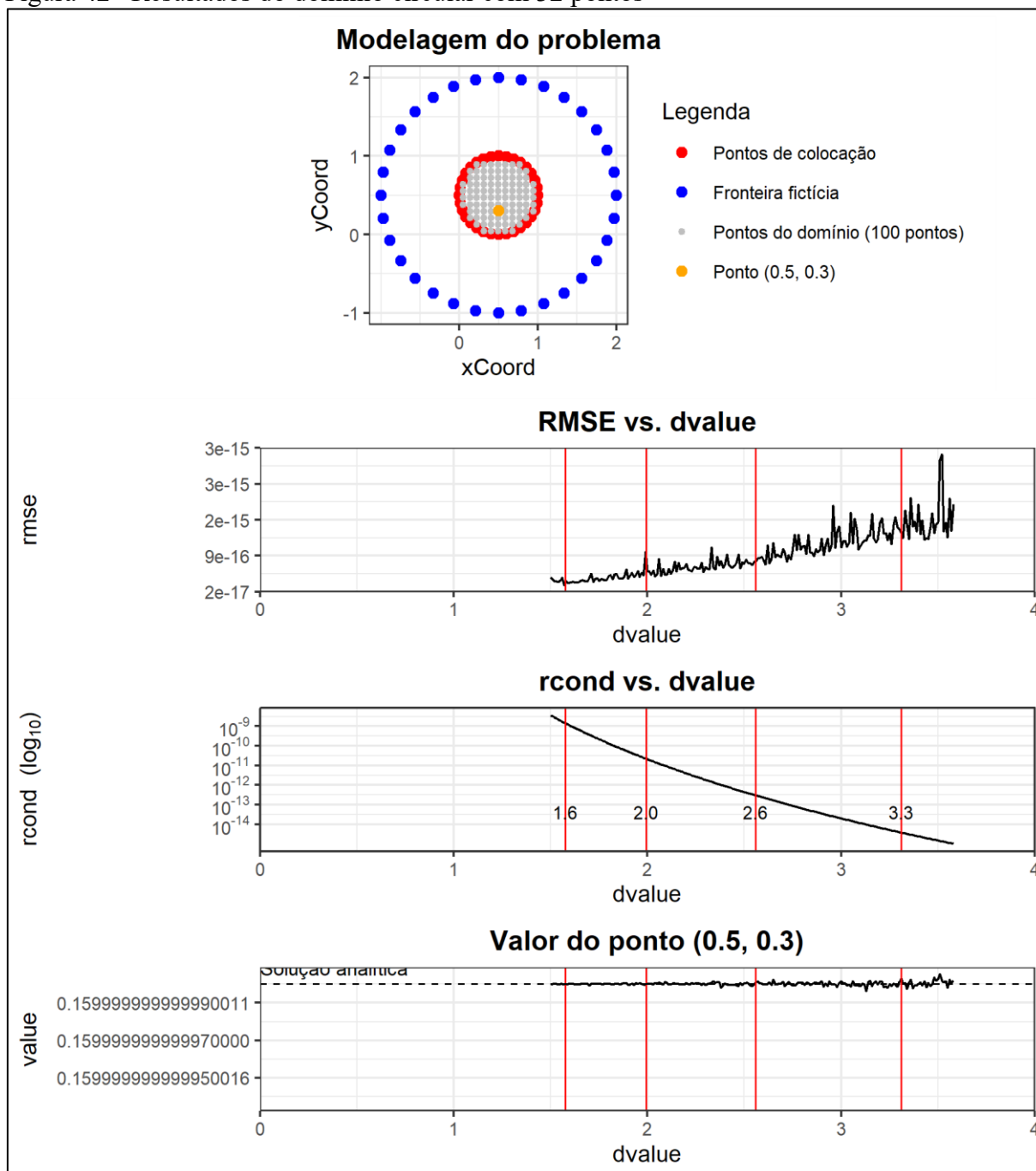
Fonte: O Autor

No gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” foi possível identificar o valor inicial de RMSE igual a $3,60E-16$ e no gráfico de “*rcond* vs. *dvalue*” o valor inicial de *rcond* igual a $3,58E-09$, ambos em *dvalue* igual a 1,5. Ao final do intervalo, em *dvalue* igual a 3,58, os valores de RMSE e *rcond* foram de $2,08E-15$ e $1,04E-15$, respectivamente. Esse cenário indicou que as operações de computação numérica ocorreram muito próximo ao limiar de operação, faixa onde efeitos de instabilidade são mais evidentes e detectáveis nos resultados.

Os gráficos de “RMSE vs. *dvalue*” e “Valor do ponto (0.5,0.3)” da Figura 42 refletem a instabilidade esperada para valores de *rcond* muito próximos do limiar de operação. O primeiro gráfico apresentou inclusive um comportamento destoante dos demais resultados, onde o valor de RMSE cresce com o avanço de *dvalue*. Isso representa a captura dessa instabilidade nos valores aproximados dos pontos, que se transformam em erro quadrático e aumentam o valor da métrica RMSE de forma caótica, errática e crescente.

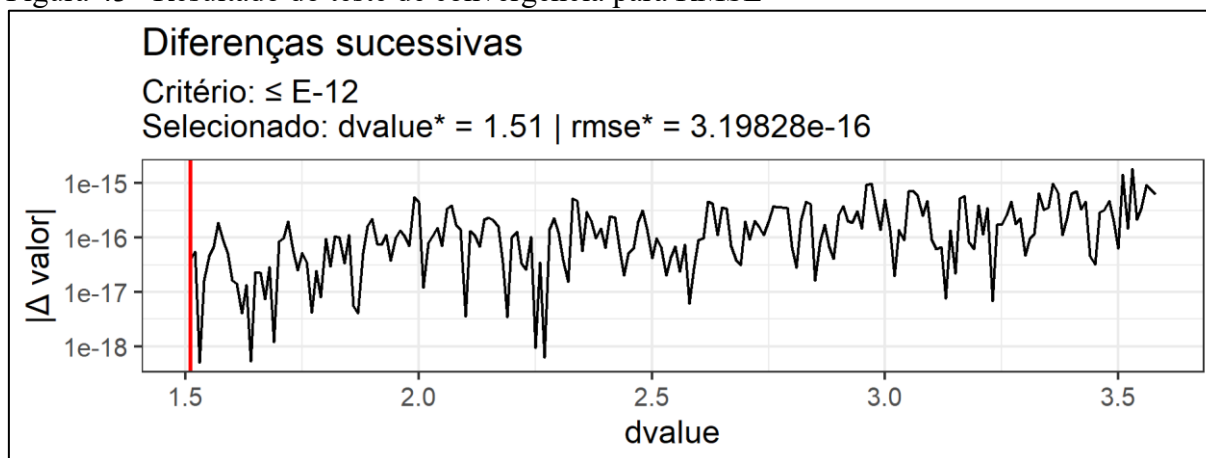
Nas Figura 43 e Figura 44, que mostram os resultados do teste de convergência para o RMSE e para o ponto citado, foi possível identificar que o intervalo avaliado já conduziu resultados com elevada instabilidade. Apesar disso, a flutuação de erro sucessivo ocorreu dentro de uma amplitude de $E-15$. Isso significa que, dependendo da finalidade da aproximação, os valores de convergência podem ser utilizados mesmo que ocorrendo no início do intervalo de *dvalue*. O valor no ponto (0.5,0.3) convergiu para 0,16 com um critério de erro sucessivo inferior a $E-12$, proporcionando uma aproximação virtualmente igual ao valor analítico para esse ponto.

Figura 42– Resultados do domínio circular com 32 pontos



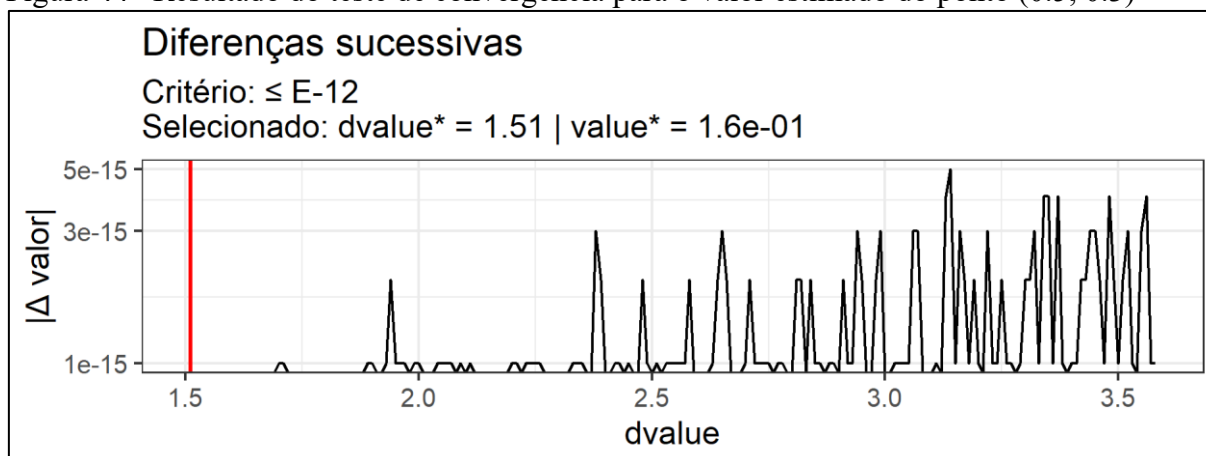
Fonte: O Autor

Figura 43– Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

Figura 44– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3)



Fonte: O Autor

5.1.2 Solução analítica exponencial $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$

5.1.2.1 Domínio retangular com 8 pontos

A Figura 45 apresentou os resultados e a modelagem do problema de contorno unitário retangular com 8 pontos de contorno, cujos valores das condições de contorno foram apresentados na Tabela 16. Os valores dessas condições de contorno foram obtidos através da solução analítica $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$, conforme apresentado na metodologia. Neste exemplo, os valores de $dvalue$ variaram entre 1,5 e 100 em passos de 0,1. Esse novo intervalo, diferente do intervalo que havia sido trabalhado nos exemplos anteriores com 8 pontos ($1,5 \leq dvalue \leq 10$), foi importante para mostrar que mesmo com 8 pontos, ainda na série de dados de RMSE e

de valor aproximado, foi possível detectar sinais de instabilidade para valores maiores de *dvalue*.

Tabela 16– Condições de contorno do problema

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ |
|-------|--------|--------|----------------------------------|
| 1 | 0,00 | 0,00 | 1,00000 |
| 2 | 0,50 | 0,00 | 1,64872 |
| 3 | 1,00 | 0,00 | 2,71828 |
| 4 | 1,00 | 0,50 | 2,38552 |
| 5 | 1,00 | 1,00 | 1,46869 |
| 6 | 0,50 | 1,00 | 0,89081 |
| 7 | 0,00 | 1,00 | 0,54030 |
| 8 | 0,00 | 0,50 | 0,87758 |

Fonte: O Autor

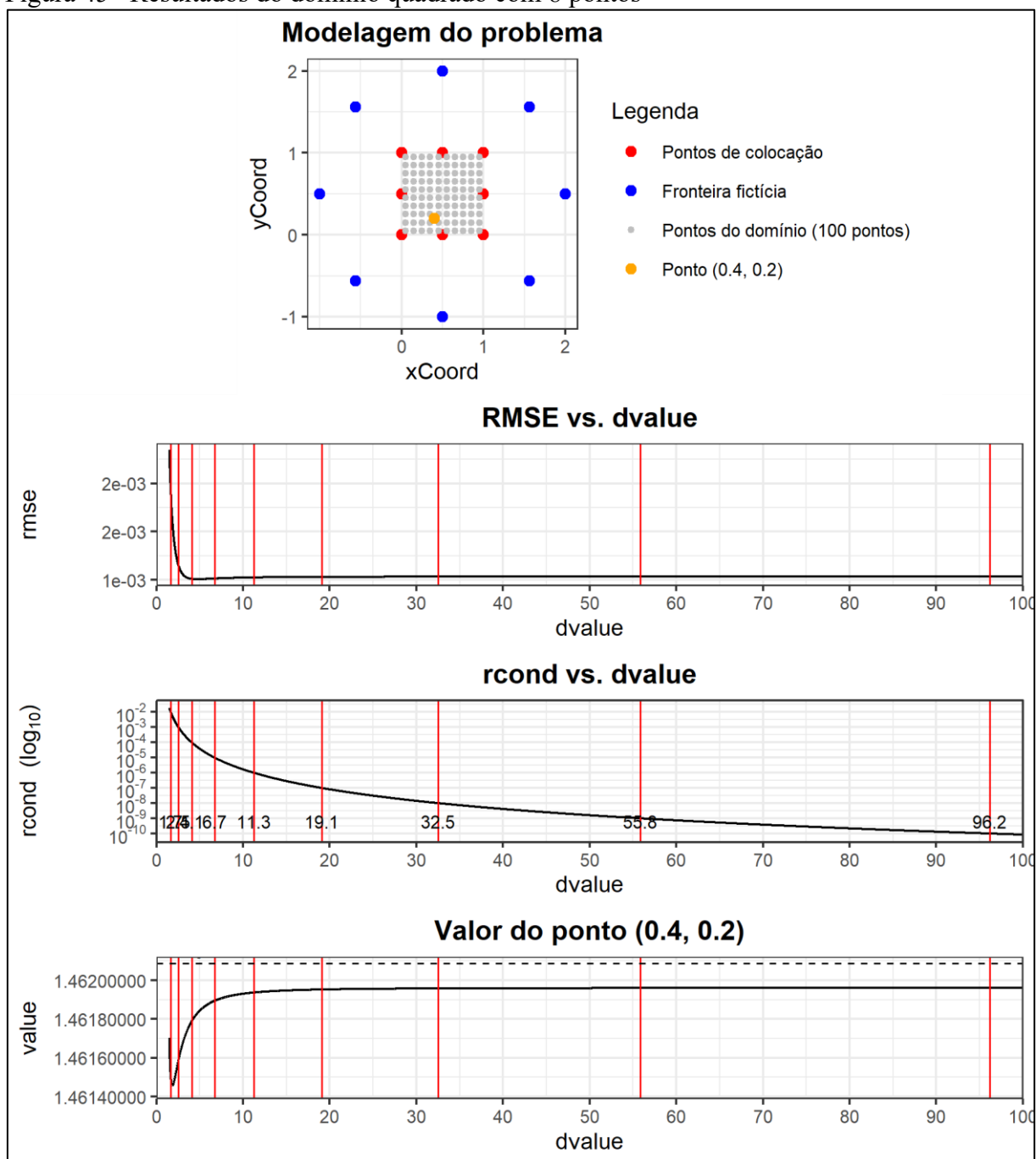
O gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” mostrou um decaimento assintótico até um valor mínimo na ordem de E-03. Uma avaliação dos valores numéricos da série utilizada para desenhar o gráfico indicou que ele inicia no valor 2,35E-03 em *dvalue* igual a 1,5 e encerra no valor de 1,03E-03, representando um decréscimo algébrico total de -1,31E-03, indicando que a métrica RMSE variou em uma amplitude inferior à dos exemplos anteriores, quando foi utilizada a função polinomial para a modelagem os problemas. Apesar disso, o decaimento desenhou um joelho bem definido antes do decaimento da segunda década de *rcond*.

Tabela 17 – Decaimento de décadas do gráfico “*rcond* vs. *dvalue*”

| Década | Nível | <i>dvalue</i> |
|--------|----------|---------------|
| -2 | 0,01 | 1,7 |
| -3 | 0,001 | 2,5 |
| -4 | 1,00E-04 | 4,0 |
| -5 | 1,00E-05 | 6,7 |
| -6 | 1,00E-06 | 11,3 |
| -7 | 1,00E-07 | 19,1 |
| -8 | 1,00E-08 | 32,5 |
| -9 | 1,00E-09 | 55,8 |
| -10 | 1,00E-10 | 96,2 |

Fonte: O Autor

Figura 45– Resultados do domínio quadrado com 8 pontos

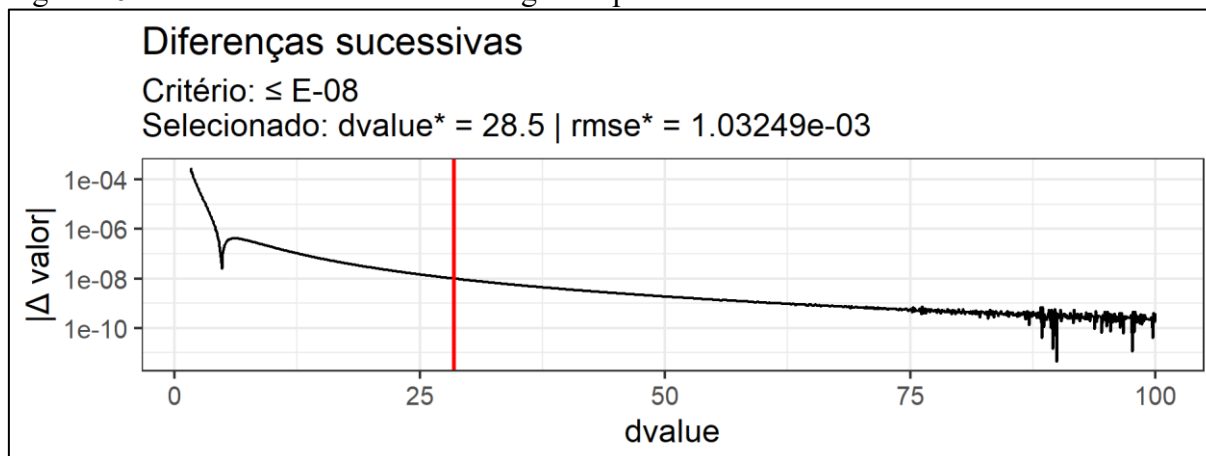


Fonte: O Autor

O gráfico de “rcond vs. dvalue” mostrou que as décadas de *rcond* decaíram rapidamente, indicando uma rápida convergência para a um cenário de instabilidade. Apesar do decaimento observado a faixa de *dvalue* investigada não atingiu o limiar de abortagem de $1,00E-15$, mas encerrou o gráfico alcançando *rcond* igual a $8,48E-11$ em *dvalue* igual a 100.

O gráfico da Figura 46 mostrou que a convergência para um critério de erro sucessivo inferior a $E-08$ foi alcançada em $dvalue$ igual a 28,5. Nesse mesmo gráfico, ficou evidente o início de instabilidade para valores de $dvalue$ a partir de 75 na escala observada.

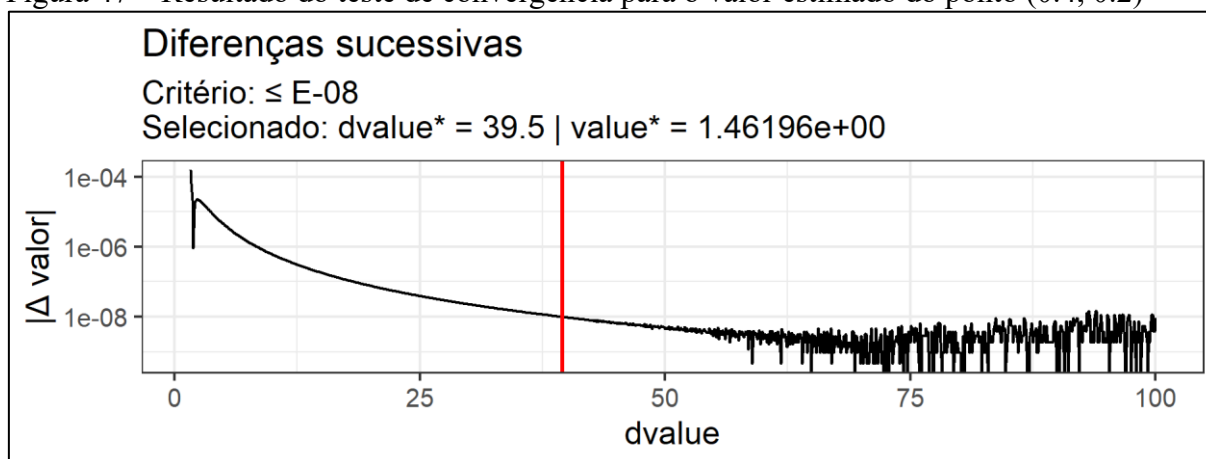
Figura 46– Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

No gráfico do teste de convergência para o ponto (0.4,0.2), representado pela Figura 47, foi possível identificar a ocorrência de instabilidade a partir do valor de $dvalue$ igual a 50 antes mesmo de alcançar uma convergência de $E-09$. Para esse exemplo, uma convergência de erros sucessivos inferiores a $E-08$ foi alcançada em $dvalue$ igual a 39,5, onde o valor estimado foi de 1,46196 para uma solução analítica igual a 1,462088, significando um erro de $-1,29E-04$ ($\sim 0,01\%$) entre a solução aproximada, selecionada por convergência, e a solução analítica conhecida para o problema. Esse comportamento ficou evidente no gráfico de “Valor do ponto (0.4, 0.2)” da Figura 45, indicando que a ordem de grandeza do erro obtido através do método numérico e da metodologia proposta ($\sim E-04$) podem ser significativos para algumas aplicações. Nesse mesmo gráfico, foi possível observar um vale bem definido antes da rampa de convergência para o valor do ponto em questão.

Figura 47 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2)



Fonte: O Autor

5.1.2.2 Domínio retangular com 16 pontos

A Figura 48 apresentou a modelagem e os resultados do problema de contorno unitário retangular com 16 pontos de contorno. Os valores das condições de contorno foram apresentados na Tabela 18. Neste problema os valores de *dvalue* variaram de 1,5 a 30 em passos de 0,1 para corresponder à faixa operacional até o limite onde o limiar operacional de *rcond* igual a $1,0E-15$ foi atingido.

Tabela 18 – Condições de contorno do problema

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ |
|-------|--------|--------|----------------------------------|
| 1 | 0.00 | 0.00 | 1.00000 |
| 2 | 0.25 | 0.00 | 1.28403 |
| 3 | 0.50 | 0.00 | 1.64872 |
| 4 | 0.75 | 0.00 | 2.11700 |
| 5 | 1.00 | 0.00 | 2.71828 |
| 6 | 1.00 | 0.25 | 2.63378 |
| 7 | 1.00 | 0.50 | 2.38552 |
| 8 | 1.00 | 0.75 | 1.98894 |
| 9 | 1.00 | 1.00 | 1.46869 |
| 10 | 0.75 | 1.00 | 1.14382 |
| 11 | 0.50 | 1.00 | 0.89081 |
| 12 | 0.25 | 1.00 | 0.69376 |
| 13 | 0.00 | 1.00 | 0.54030 |
| 14 | 0.00 | 0.75 | 0.73169 |
| 15 | 0.00 | 0.50 | 0.87758 |
| 16 | 0.00 | 0.25 | 0.96891 |

Fonte: O Autor

O gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” iniciou com RMSE igual a $1,50E-06$ em *dvalue* igual a 1,5 e decresceu assintoticamente para encerrar no valor $RMSE = 4,83E-08$ em *dvalue* = 29,1 logo antes de atingir o limite de abortagem de *rcond* inferior a $1,0E-15$. Assim como no exemplo anterior, o valor de RMSE convergiu para o mínimo mais rapidamente do que nos exemplos montados com a solução analítica polinomial. Além disso, neste exemplo, com 16 pontos o “joelho” de “RMSE vs. *dvalue*” ocorreu em uma década com ordem de grandeza inferior do que no exemplo com 8 pontos ($E-04$ para 8 pontos vs. $E-06$ para 16 pontos), bem como os valores de RMSE já iniciaram inferiores ao do exemplo anterior ($E-03$ com 8 pontos vs. $E-06$ com 16 pontos). Isso significou que, assim como ocorreu para os exemplos polinomiais, o aumento da quantidade de pontos favoreceu a velocidade de convergência do método, bem como sua acurácia, apesar de que antecipou o alcance do limiar de condicionamento e estreitou a faixa operacional de *dvalue*.

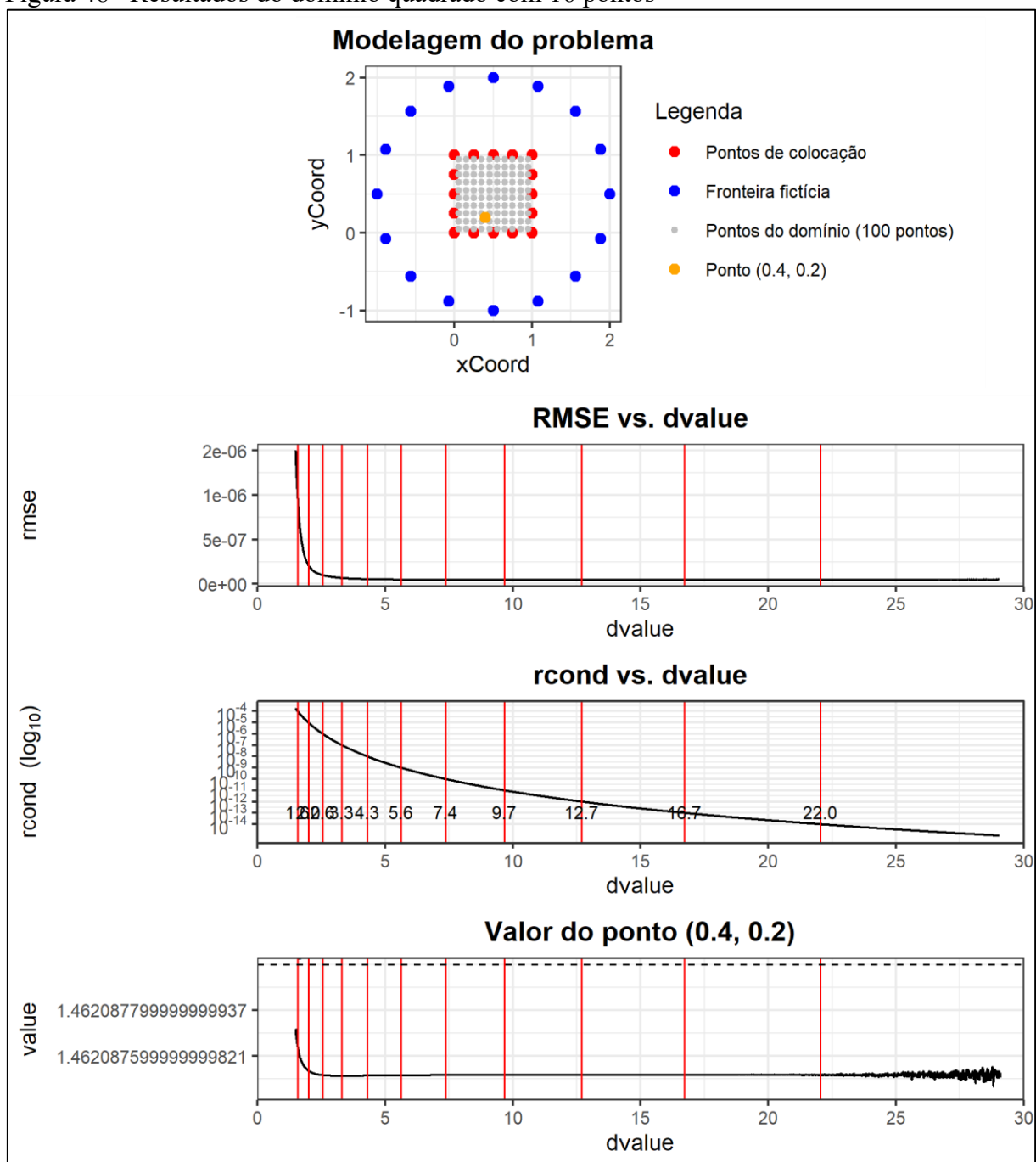
No gráfico de “*rcond* vs. *dvalue*”, observamos o decaimento de décadas nos valores de *dvalue* indicados na Tabela 19. Ficou evidente que o decaimento foi expressivo e o parâmetro *rcond* alcançou a década $E-11$ antes da metade do intervalo (*dvalue* = 9,7) até atingir o limiar de operação em 29,1. Os valores de *rcond* iniciaram em $1,66E-04$, inferiores ao valor do exemplo com 8 pontos de contorno, cuja ordem foi de $E-02$; e encerraram em $1,004E-15$ imediatamente antes de disparar a abortagem.

Tabela 19 – Decaimento de décadas do gráfico “*rcond* vs. *dvalue*”

| Década | Nível | Dvalue |
|--------|------------|--------|
| -4 | $1,00E-04$ | 1,6 |
| -5 | $1,00E-05$ | 2,0 |
| -6 | $1,00E-06$ | 2,6 |
| -7 | $1,00E-07$ | 3,3 |
| -8 | $1,00E-08$ | 4,3 |
| -9 | $1,00E-09$ | 5,6 |
| -10 | $1,00E-10$ | 7,4 |
| -11 | $1,00E-11$ | 9,7 |
| -12 | $1,00E-12$ | 12,7 |
| -13 | $1,00E-13$ | 16,7 |
| -14 | $1,00E-14$ | 22,0 |

Fonte: O Autor

Figura 48– Resultados do domínio quadrado com 16 pontos

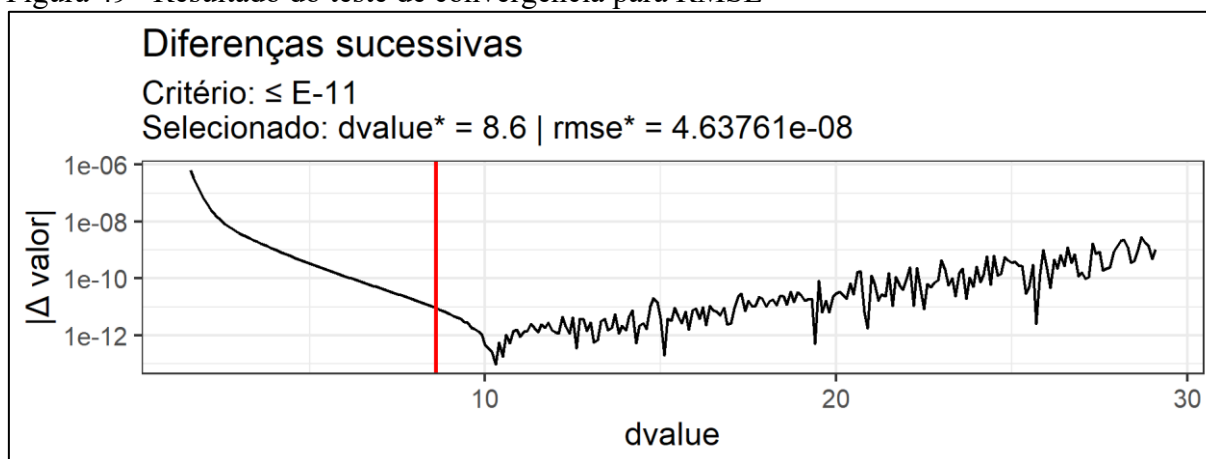


Fonte: O Autor

O resultado do teste de convergência do RMSE para o conjunto de pontos do domínio (Figura 49) apresentou valores estáveis até *dvalue* nas proximidades do valor 10, ponto a partir do qual os erros sucessivos capturaram uma instabilidade com tendência crescente. Esse comportamento indicou um ponto ótimo para essa geometria de problema em que a convergência alcança seu melhor resultado. Ao observarmos o gráfico de “rcond vs. dvalue” nas proximidades de *dvalue* igual a 10, o valor de *rcond* está localizado na década de E-11.

Resta lembrar que em outros exemplos, já era possível observar instabilidade no gráfico de RMSE em décadas a partir de E-09, como, por exemplo, no caso polinomial. Isso indica que a função analítica utilizada para modelar o problema conduziu a uma geometria e condições de contorno mais estáveis.

Figura 49– Resultado do teste de convergência para RMSE

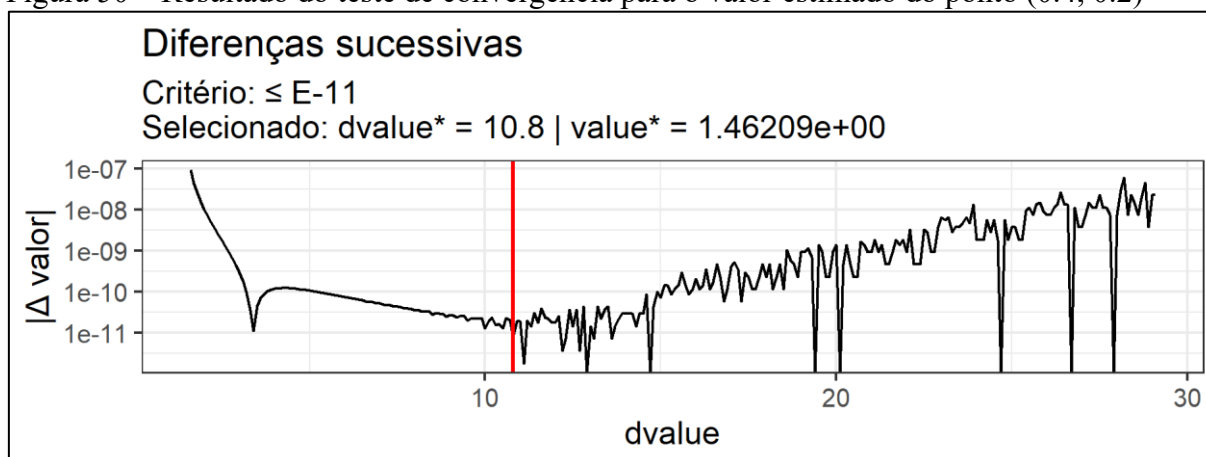


Fonte: O Autor

O gráfico de “Valor do ponto (0.4,0.2)” indicou uma convergência para um valor distinto do valor da solução analítica conhecida, igual a 1,462088. A análise conjunta dos gráficos de “Valor do ponto (0.4,0.2)” da Figura 40 mostraram que o valor obtido para esse ponto com um critério de convergência de E-11 foi de $\sim 1,46209$, um valor virtualmente igual ao esperado. Nesse sentido, a divergência observada no gráfico “Valor do ponto (0.4,0.2)” pode ser considerado um preciosismo de escala, mas relembrou que os valores obtidos pelo método numérico são aproximações e sempre estão sujeitos a alguma distorção de acurácia e precisão.

Ainda no gráfico da Figura 50, foi selecionado um critério de erro sucessivo menor ou igual a E-11, nos limites de uma região de instabilidade, que, a partir de $dvalue$ igual a 10, apresenta tendência crescente. Esse comportamento demonstra mais uma vez que a análise de convergência deve ser realizada individualmente para cada ponto de interesse, pois cada ponto guarda características funcionais específicas dentro do domínio analisado e a métrica RMSE representa uma média entre um conjunto de pontos, que podem ter sua estabilidade comprometida acima ou abaixo da média.

Figura 50 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2)



Fonte: O Autor

5.1.2.3 Domínio retangular com 32 pontos

Os resultados e a representação gráfica do problema com contorno retangular unitário e 32 pontos de contorno foi apresentado na Figura 51. Os valores das condições de contorno foram apresentados na Tabela 20, seguindo a metodologia de testes propostas. Similar aos problemas modelados com uma solução analítica polinomial, a faixa de varredura de $dvalue$ foi estabelecida da seguinte forma: $1,5 \leq dvalue \leq 5$ em passos de 0,01. Isso foi necessário, pois conforme apresentado na Tabela 9, para essa geometria, o limiar de $rcond$ é atingido em $dvalue$ 4,04.

Apesar de os valores das condições de contorno serem diferentes entre si, a matriz principal do método, a que precisa ser invertida, continua a mesma. Ou seja, a propriedade de estabilidade do problema é puramente geométrica e depende unicamente do conjunto de pontos de contorno e de fronteira fictícia adotados.

Tabela 20 – Condições de contorno do problema (continua)

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ |
|-------|--------|--------|----------------------------------|
| 1 | 0,0000 | 0,0000 | 1,000000 |
| 2 | 0,1250 | 0,0000 | 1,133148 |
| 3 | 0,2500 | 0,0000 | 1,284025 |
| 4 | 0,3750 | 0,0000 | 1,454991 |
| 5 | 0,5000 | 0,0000 | 1,648721 |
| 6 | 0,6250 | 0,0000 | 1,868246 |
| 7 | 0,7500 | 0,0000 | 2,117000 |
| 8 | 0,8750 | 0,0000 | 2,398875 |
| 9 | 1,0000 | 0,0000 | 2,718282 |
| 10 | 1,0000 | 0,1250 | 2,697073 |

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = \exp(x).\cos(y)$ |
|-------|--------|--------|----------------------------|
| 11 | 1,0000 | 0,2500 | 2,633777 |
| 12 | 1,0000 | 0,3750 | 2,529382 |
| 13 | 1,0000 | 0,5000 | 2,385517 |
| 14 | 1,0000 | 0,6250 | 2,204426 |
| 15 | 1,0000 | 0,7500 | 1,988937 |
| 16 | 1,0000 | 0,8750 | 1,742410 |
| 17 | 1,0000 | 1,0000 | 1,468694 |
| 18 | 0,8750 | 1,0000 | 1,296118 |
| 19 | 0,7500 | 1,0000 | 1,143820 |
| 20 | 0,6250 | 1,0000 | 1,009418 |
| 21 | 0,5000 | 1,0000 | 0,890808 |
| 22 | 0,3750 | 1,0000 | 0,786135 |
| 23 | 0,2500 | 1,0000 | 0,693762 |
| 24 | 0,1250 | 1,0000 | 0,612243 |
| 25 | 0,0000 | 1,0000 | 0,540302 |
| 26 | 0,0000 | 0,8750 | 0,640997 |
| 27 | 0,0000 | 0,7500 | 0,731689 |
| 28 | 0,0000 | 0,6250 | 0,810963 |
| 29 | 0,0000 | 0,5000 | 0,877583 |
| 30 | 0,0000 | 0,3750 | 0,930508 |
| 31 | 0,0000 | 0,2500 | 0,968912 |
| 32 | 0,0000 | 0,1250 | 0,992198 |

Fonte: O Autor

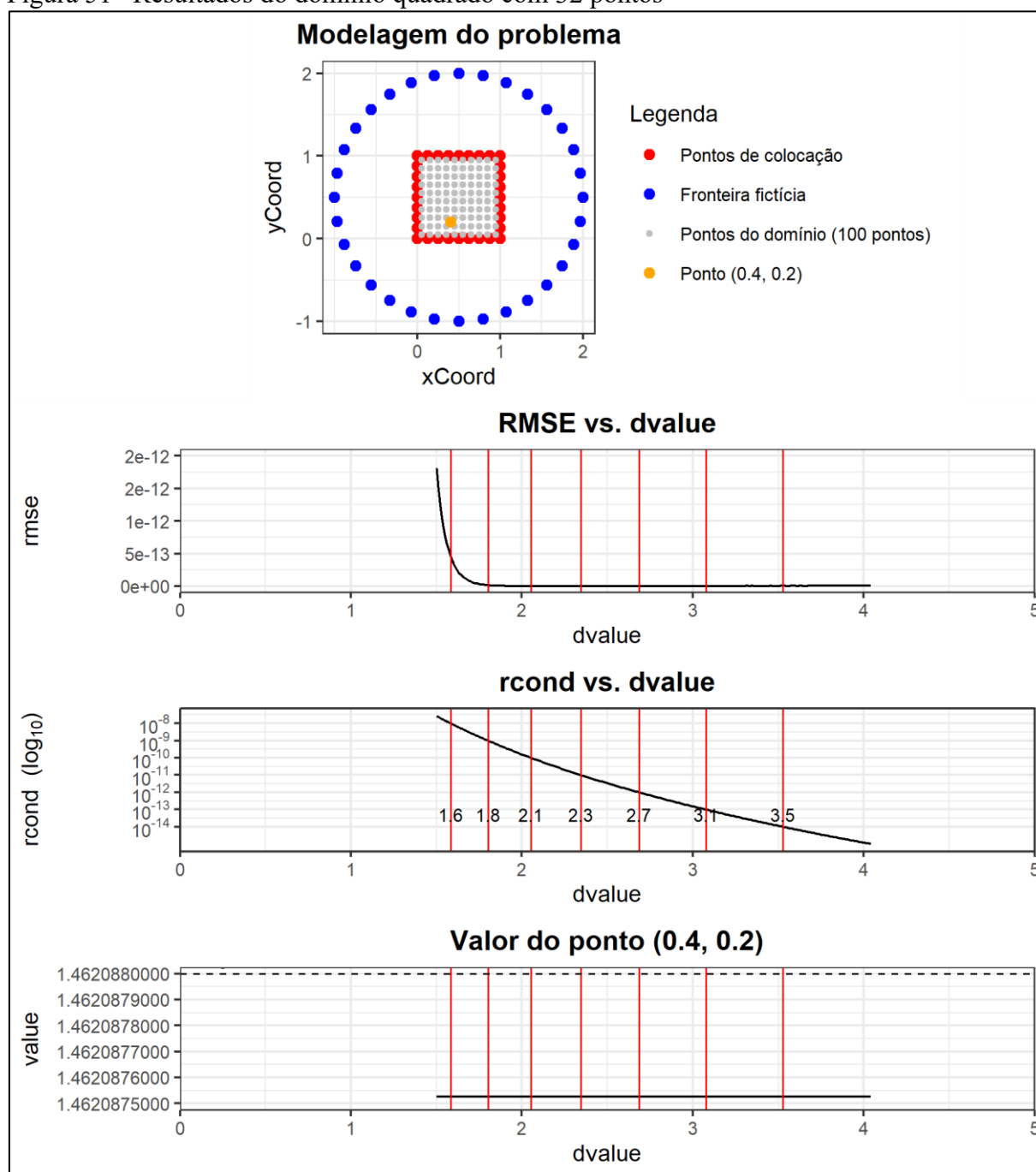
No gráfico “RMSE vs. *dvalue*” da Figura 51, observamos um decaimento assintótico similar ao observado nos exemplos anteriores. Neste exemplo, entretanto, os valores de RMSE iniciam em 1,81E-12 e encerram em 5,95E-15 em *dvalue* igual a 4,04. O “joelho” ainda é perceptível e ocorre antes do segundo decaimento de década de *rcond*.

No gráfico de “*rcond* vs. *dvalue*” as décadas decaem mais suavemente do que nos exemplos com 8 e 16 pontos. Entretanto, os seus valores já iniciam em 2,7E-08 até atingirem o valor de 1,02E-15 imediatamente antes de alcançar o limiar operacional. Isso estreita a faixa de valores operacionais para o problema, conforme ocorreu nos exemplos com 32 pontos, tanto em domínios retangulares quanto circulares.

No resultado do teste de convergência para os valores de RMSE (Figura 52), observamos uma estreita faixa de estabilidade, antes do valor de *dvalue* igual a 2. Apesar disso, foi possível selecionar o valor da distância da fronteira fictícia para o critério de erros sucessivos inferior ou igual a E-14. O resultado do teste de convergência para o valor do ponto de interesse (Figura 53) indicou que os valores calculados estiveram em uma faixa de instabilidade de uma ordem de grandeza de E-15, garantindo uma solução unívoca para o critério de erro sucessivo

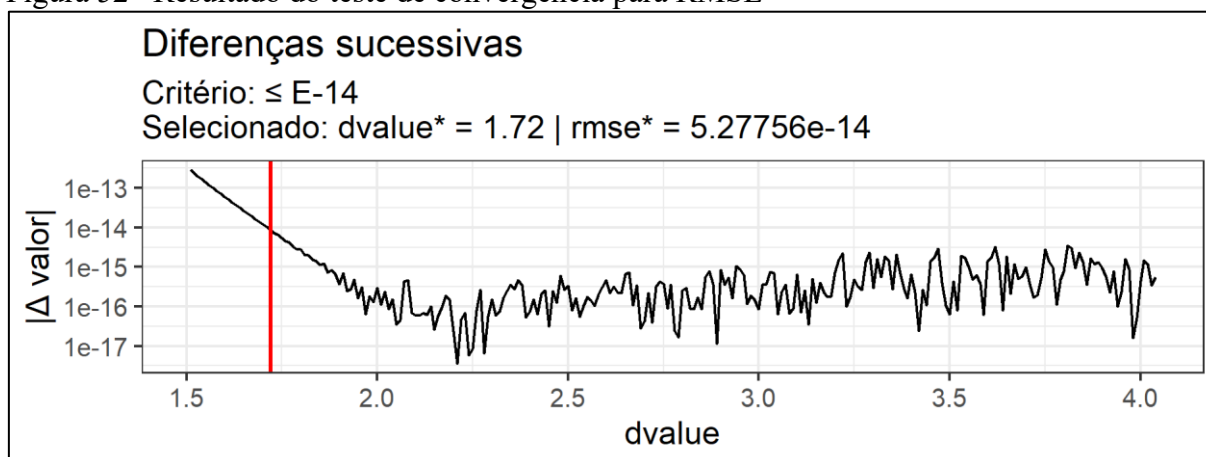
menor ou igual a $E-14$, conduzindo a um valor estimado virtualmente igual ao valor analítico para aquele ponto.

Figura 51– Resultados do domínio quadrado com 32 pontos



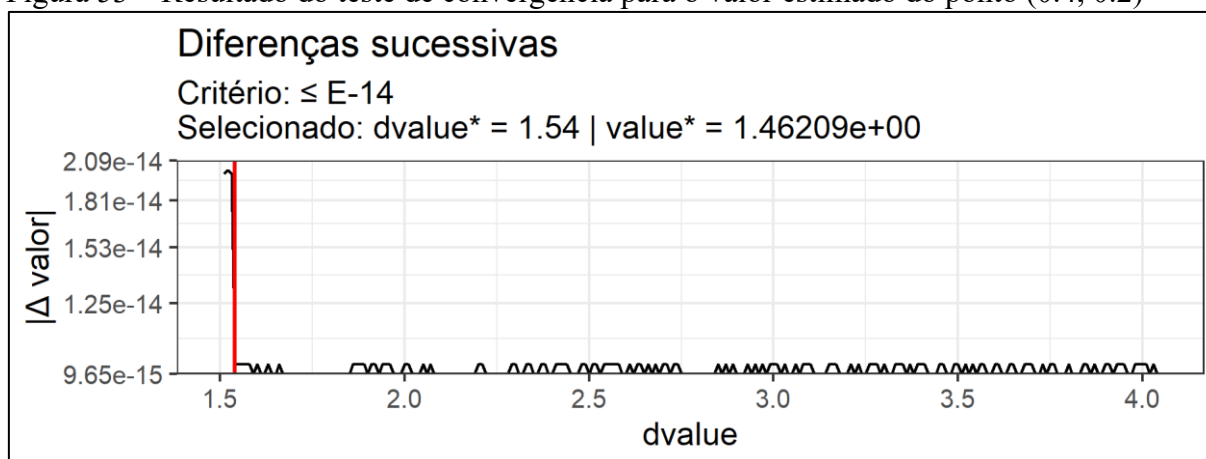
Fonte: O Autor

Figura 52– Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

Figura 53 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.4, 0.2)



Fonte: O Autor

Os resultados do problema com contorno retangular unitário para 32 pontos de contorno, tanto para a equação polinomial quanto para a equação exponencial, foram similares entre si. A convergência para o ponto (0.4, 0.2) foi alcançada em $dvalue$ 1,51 e 1,54, enquanto o erro sucessivo do RMSE para os dois casos foram E-14 e E-15, respectivamente. Isso indica que essa quantidade de pontos de contorno produziram os resultados com melhor precisão, corroborando com a afirmação de que a maior quantidade de pontos de contorno representa maior quantidade de informação inicial para que os valores calculados alcancem um resultado convergente de forma mais precisa e rápida.

5.1.2.4 Domínio circular com 8 pontos

Os resultados da simulação do problema de contorno circular unitário com 8 pontos de contorno foram apresentados na Figura 54. Os valores das condições de contorno foram apresentados na Tabela 21.

Tabela 21 – Condições de contorno do problema

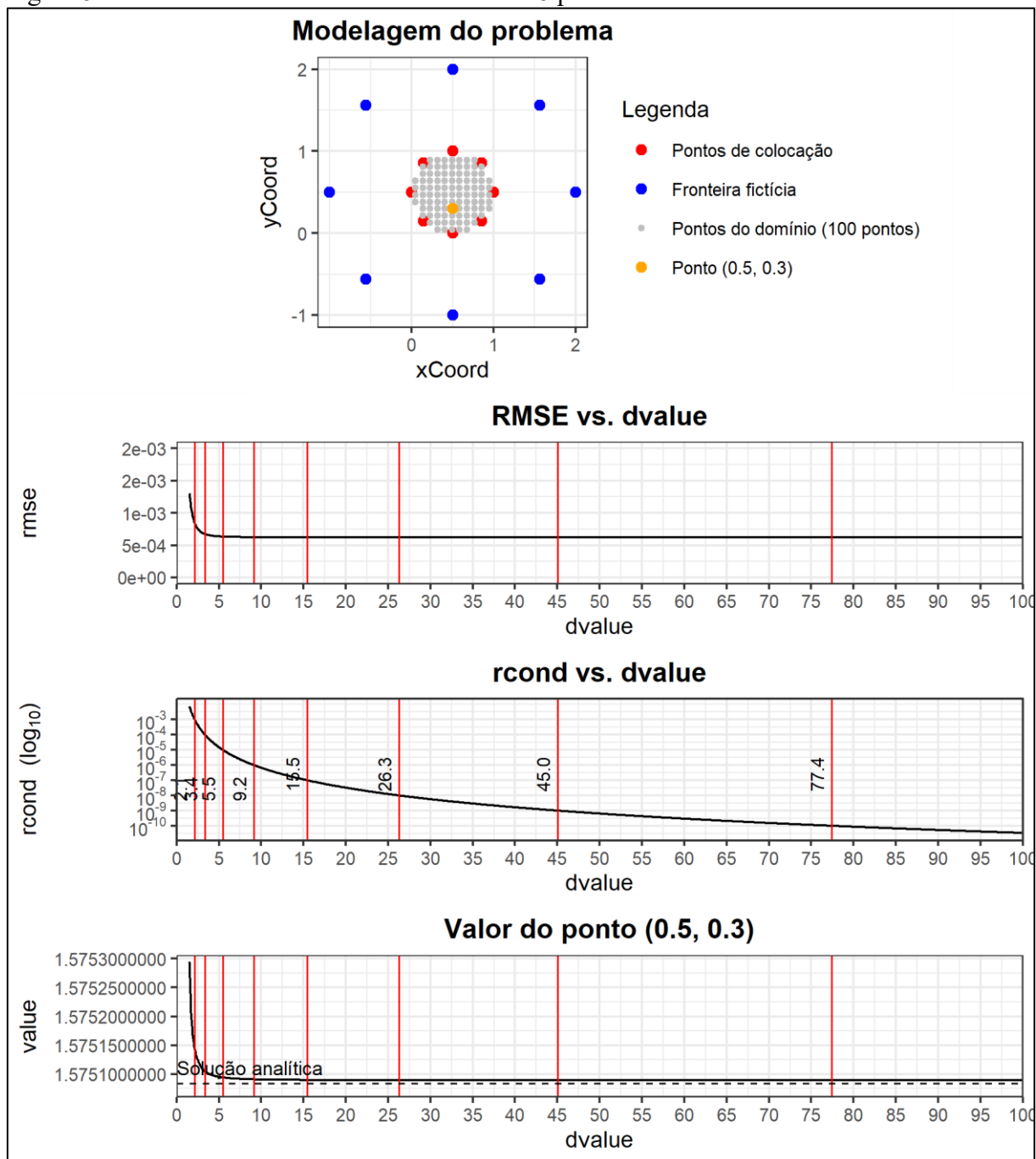
| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ |
|-------|---------|---------|----------------------------------|
| 1 | 1,00000 | 0,50000 | 2,38552 |
| 2 | 0,85355 | 0,85355 | 1,54335 |
| 3 | 0,50000 | 1,00000 | 0,89081 |
| 4 | 0,14645 | 0,85355 | 0,76098 |
| 5 | 0,00000 | 0,50000 | 0,87758 |
| 6 | 0,14645 | 0,14645 | 1,14532 |
| 7 | 0,50000 | 0,00000 | 1,64872 |
| 8 | 0,85355 | 0,14645 | 2,32284 |

Fonte: O Autor.

No gráfico de “RMSE vs. $dvalue$ ” os valores de RMSE variaram de $1,3E-03$ a $6,2E-04$ dentro da faixa de valores de $dvalue$ aplicada. Comparando esses valores com os valores obtidos no exemplo com domínio retangular, foi possível observar que apesar de a série iniciar em valores similares ($1,3E-03$ para contorno circular e $2,35E-03$ para contorno retangular) eles convergiram para um valor uma ordem de grandeza inferior no caso circular ($6,2E-04$ circular; $1,03E-03$, retangular).

O gráfico de “ $rcond$ vs. $dvalue$ ” mostrou que $rcond$ variou entre $7,61E-03$ e $3,39E-11$, acima do limiar de operação definido como $1,0E-15$, mas já alcançando ordem de grandeza em que outros exemplos mostraram sinais de instabilidade. Comparando o decaimento das décadas entre os dois tipos de geometria de contorno, foi possível identificar que o exemplo circular alcançou décadas de menor ordem primeiro. Por exemplo, no caso retangular, a década de $E-03$ foi alcançada em $dvalue$ igual a 2,5; enquanto no caso circular, a mesma década foi alcançada em 2,1. A última década do gráfico, $E-10$, foi alcançada em 77,4 no caso circular, enquanto no caso retangular, a mesma década só foi alcançada em 96,2, quase no final do intervalo. Esse mesmo comportamento foi observado nos exemplos montados com a solução analítica polinomial. O gráfico de “Valor do ponto (0.5, 0.3)” mostrou que o valor estimado convergiu para o valor esperado acompanhando o mesmo comportamento da curva de RMSE.

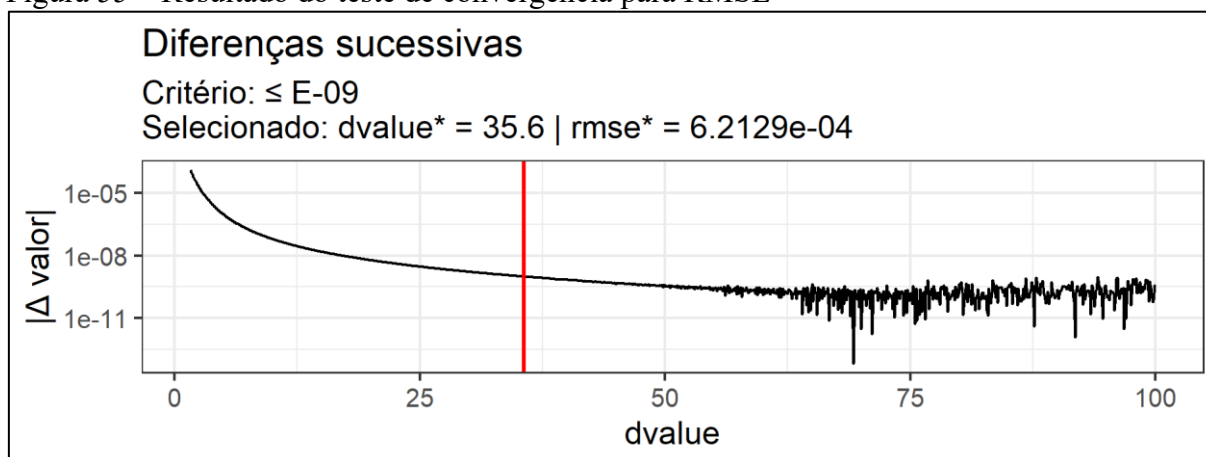
Figura 54 – Resultados do domínio circular com 8 pontos



Fonte: O Autor

O resultado do teste de convergência para a métrica RMSE (Figura 55) mostrou que erros consecutivos da ordem $\leq E-09$ foram encontrados para *dvalue* igual ou superior a 35,6. Isso mostra que existe uma faixa extensa de trabalho e que convergências superiores podem ser encontradas, caso isso seja desejável dentro dos objetivos da aproximação, para valores maiores de *pvalue*, desde que não ultrapassem o limiar de *rcond* igual a $1,0E-15$ ou entrem em uma faixa de instabilidade.

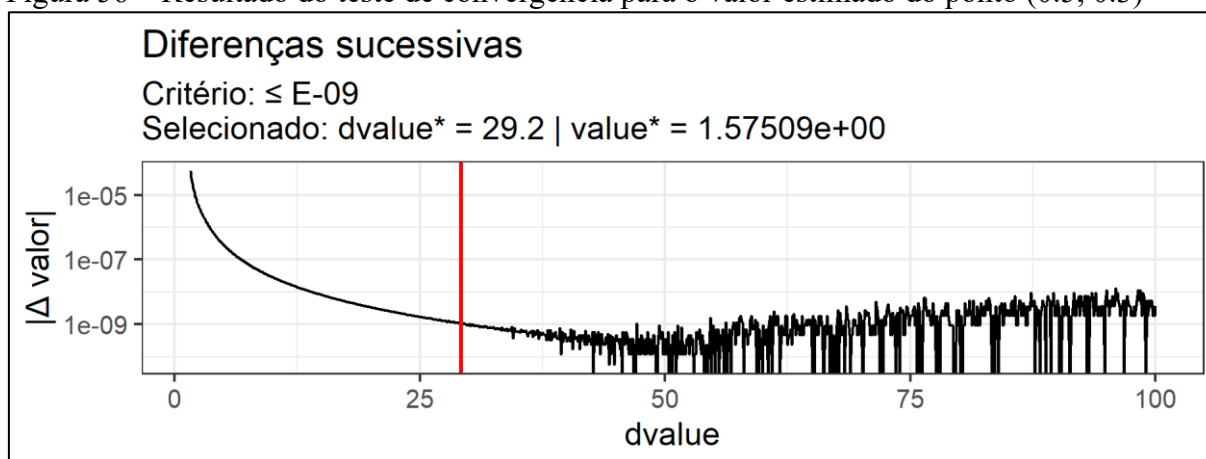
Figura 55 – Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

Para o mesmo critério de convergência, erro sucessivo igual ou inferior a $E-09$, foi possível selecionar $dvalue$ igual a 29,2 e um valor estimado de 1,57509 que equivale aproximadamente ao valor analítico da solução para aquele ponto. Isso demonstrou a convergência do valor calculado ao valor esperado dentro dessa precisão de $E-09$ casas decimais (Figura 56).

Figura 56 – Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3)



Fonte: O Autor

5.1.2.5 Domínio circular com 16 pontos

O problema com contorno circular unitário com 16 pontos de contorno foi modelado e seus resultados apresentados na Figura 57. Os valores das condições de contorno foram apresentados na Tabela 22. Neste problema, $dvalue$ variou entre 1,5 e 30 em passos de 0,1, para explicitar o ponto em que o teste alcançou o limiar operacional.

Tabela 22 – Condições de contorno do problema

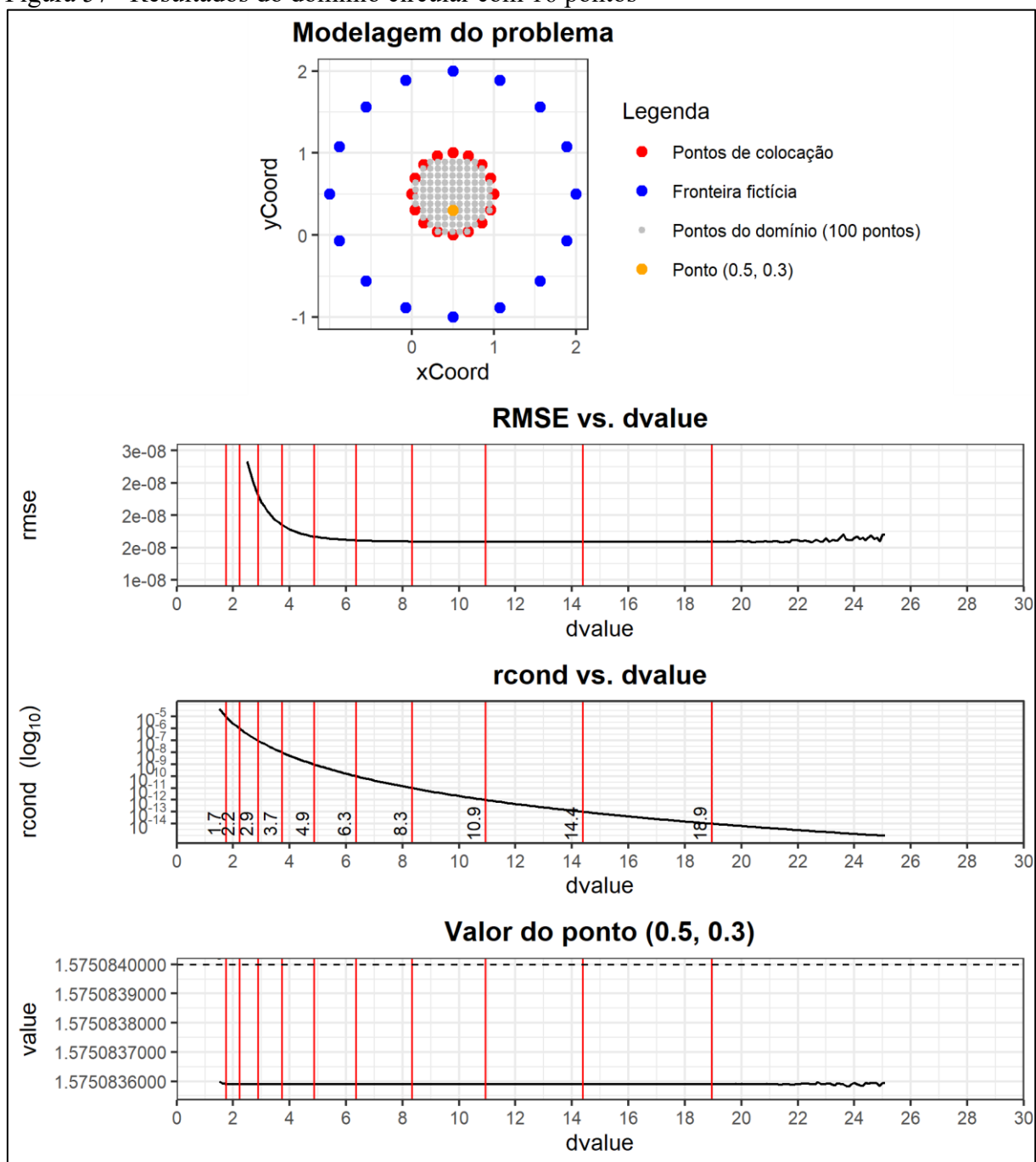
| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ |
|-------|---------|---------|----------------------------------|
| 1 | 1,00000 | 0,50000 | 2,38552 |
| 2 | 0,96194 | 0,69134 | 2,01593 |
| 3 | 0,85355 | 0,85355 | 1,54335 |
| 4 | 0,69134 | 0,96194 | 1,14180 |
| 5 | 0,50000 | 1,00000 | 0,89081 |
| 6 | 0,30866 | 0,96194 | 0,77874 |
| 7 | 0,14645 | 0,85355 | 0,76098 |
| 8 | 0,03806 | 0,69134 | 0,80028 |
| 9 | 0,00000 | 0,50000 | 0,87758 |
| 10 | 0,03806 | 0,30866 | 0,98970 |
| 11 | 0,14645 | 0,14645 | 1,14532 |
| 12 | 0,30866 | 0,03806 | 1,36061 |
| 13 | 0,50000 | 0,00000 | 1,64872 |
| 14 | 0,69134 | 0,03806 | 1,99495 |
| 15 | 0,85355 | 0,14645 | 2,32284 |

Fonte: O Autor

No gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” (Figura 57) foi possível observar uma convergência mais rápida ao eixo assintótico do que no exemplo com 8 pontos. Esse comportamento também foi observado nos exemplos anteriores. Os valores de RMSE variaram de $2,91E-08$ a $2,75E-07$ e os valores de *dvalue*, de 1,5 a 25,1. Esses valores de RMSE são inferiores, desde o início até o final do intervalo, aos valores testados no exemplo com 8 pontos de contorno, indicando a acurácia dos resultados para maior quantidade de pontos de contorno. A curva desenhou o “joelho” antes do decaimento da década de $E-09$ e explicitou um cenário de instabilidade após *dvalue* igual a 20, antes de alcançar o limiar operacional.

O gráfico de “*rcond* vs. *dvalue*” iniciou com valores de *rcond* iguais a $4,7E-05$ e encerrou com valores de $1,001E-15$ logo antes de disparar o limiar. Ao longo da faixa de valores de *dvalue*, o decaimento de *rcond* varreu 10 décadas alcançando valores de décadas iguais de forma antecipada ao exemplo com 8 pontos, o mesmo comportamento observado para os exemplos polinomiais.

Figura 57– Resultados do domínio circular com 16 pontos

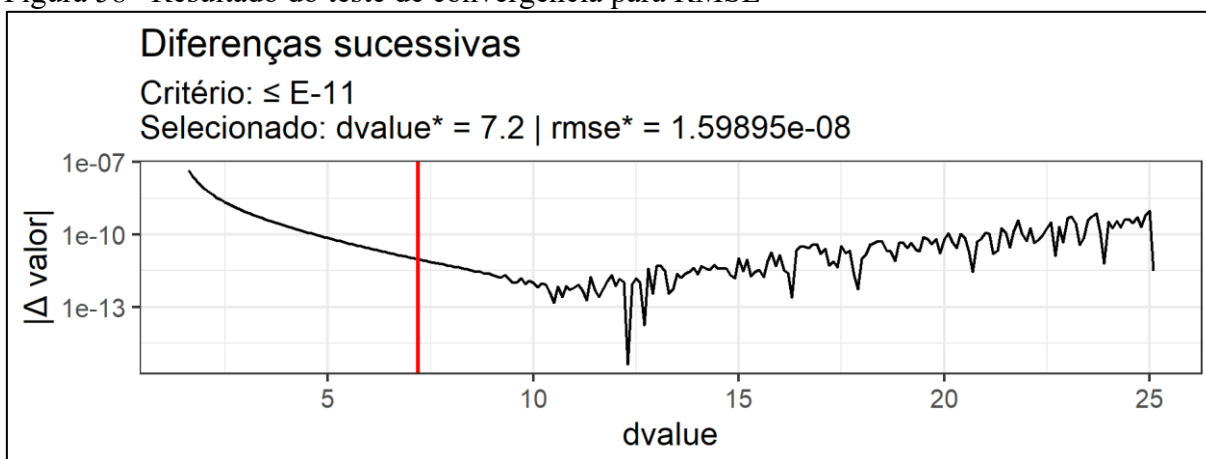


Fonte: O Autor

O gráfico de “Valor no ponto (0.5,0.3)” mostrou uma curva quase retilínea, com sugestão de instabilidade após $dvalue$ igual a 19. Apesar disso, esse gráfico não permite rastrear essa instabilidade, pois sua escala vertical pode comprometer a interpretação da curva. O gráfico da Figura 59 mostrou que a instabilidade ocorre bem antes, ainda na faixa antes de $dvalue$ igual a 5, valor a partir do qual os erros sucessivos mostram instabilidade de forma crescente. Apesar disso, foi possível detectar o valor de convergência igual 1,57508 para um critério de convergência de E-11 (11 casas decimais).

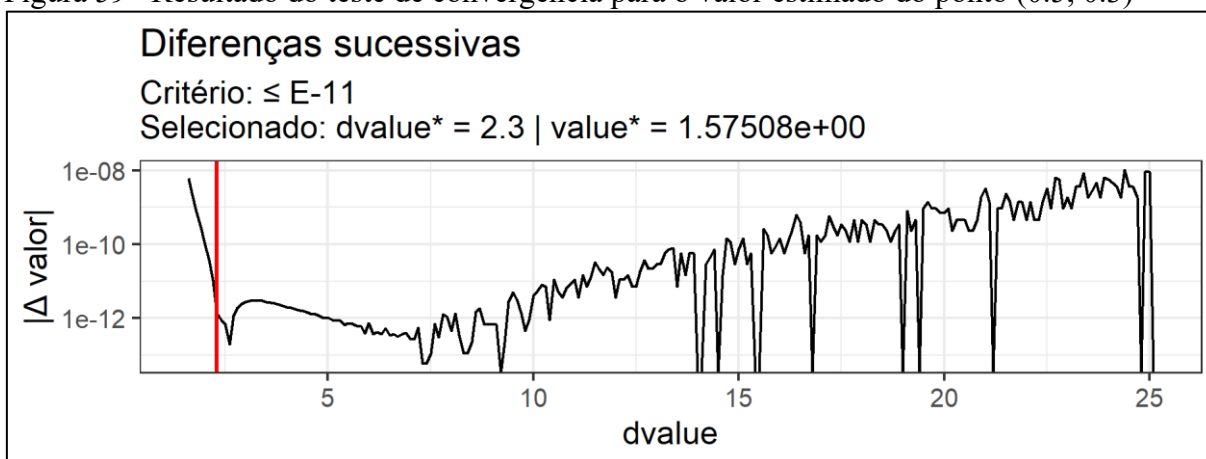
Ao serem comparados os gráficos de convergência entre a métrica RMSE (Figura 58) e o valor do ponto (0.5,0.3) (Figura 59) foi possível constatar que a métrica RMSE indicou instabilidade nas proximidades e a partir de *dvalue* igual a 8, enquanto no ponto em questão esse fenômeno já pode ser observado a partir de *dvalue* igual a 5. Isso reforça a importância de os critérios de estabilidade serem avaliados ponto a ponto, pois se trata de uma propriedade de ponto e não de geometria do problema.

Figura 58– Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

Figura 59– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3)



Fonte: O Autor

5.1.2.6 Domínio circular com 32 pontos

O problema de contorno circular unitário com 32 pontos de contorno foi modelado e seu resultados apresentados na Figura 60. Os valores das condições de contorno foram apresentados na Tabela 23. A faixa de *dvalue* aplicada foi de 1,5 a 4 em passos de 0,01, pois o sistema converge rapidamente para o valor de *rcond* igual ao limiar estabelecido em $1,0E-15$ em *dvalue* igual a 3,58, conforme apresentado na Tabela 9 anteriormente.

O gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” (Figura 60) apresentou uma curva com instabilidade crescente, sugerindo que o sistema matricial já se encontra, desde os primeiros valores de *dvalue* no seu limite de condicionamento e já propaga instabilidade para os resultados. Apesar disso, essa instabilidade ocorre em um nível de precisão de E-14. Os valores de RMSE iniciam em $1,42E-15$.

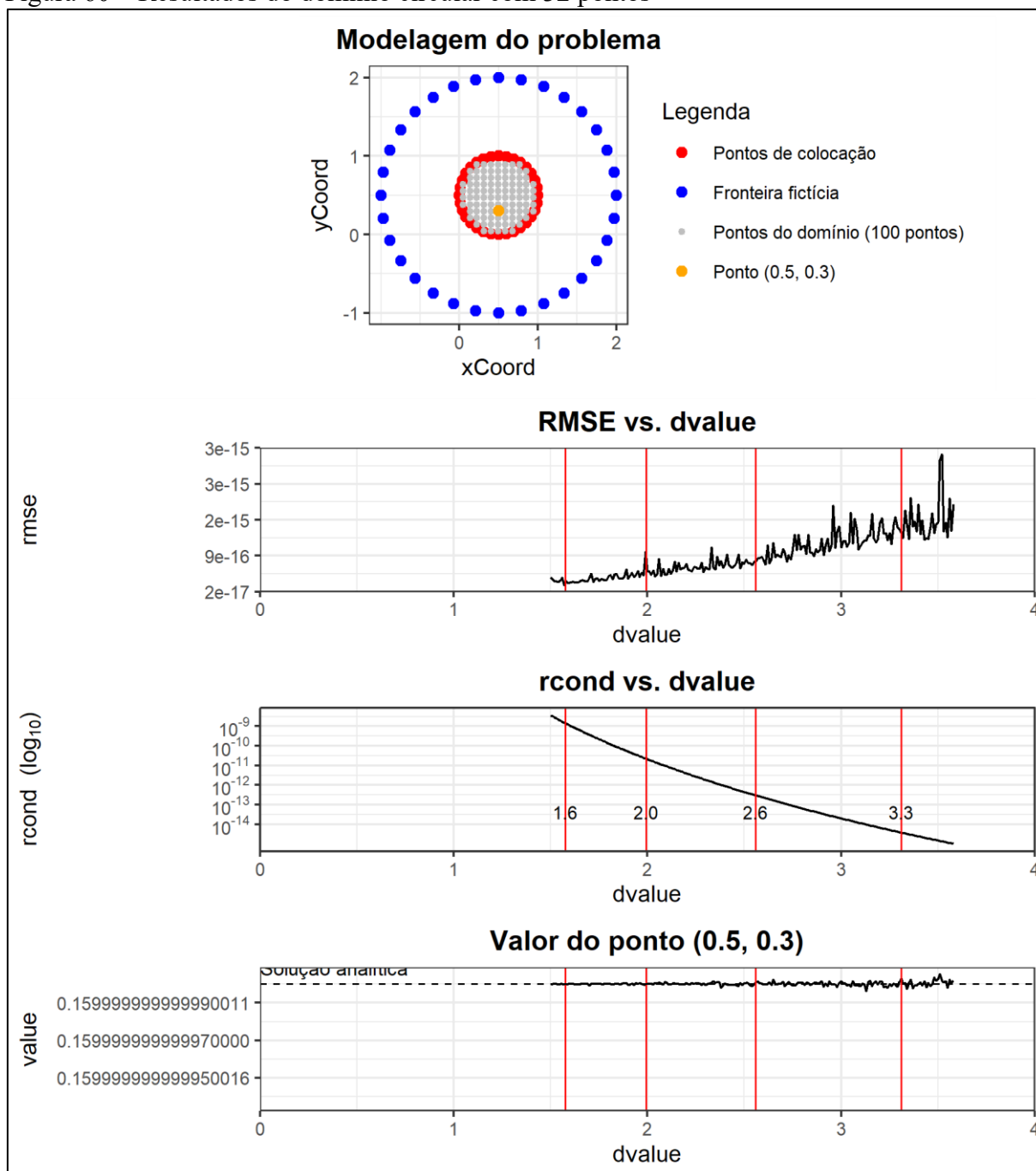
Tabela 23 – Condições de contorno do problema (continua)

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ |
|-------|---------|---------|----------------------------------|
| 1 | 1,00000 | 0,50000 | 2,38552 |
| 2 | 0,99039 | 0,59755 | 2,22577 |
| 3 | 0,96194 | 0,69134 | 2,01593 |
| 4 | 0,91573 | 0,77779 | 1,78018 |
| 5 | 0,85355 | 0,85355 | 1,54335 |
| 6 | 0,77779 | 0,91573 | 1,32603 |
| 7 | 0,69134 | 0,96194 | 1,14180 |
| 8 | 0,59755 | 0,99039 | 0,99673 |
| 9 | 0,50000 | 1,00000 | 0,89081 |
| 10 | 0,40245 | 0,99039 | 0,82007 |
| 11 | 0,30866 | 0,96194 | 0,77874 |
| 12 | 0,22221 | 0,91573 | 0,76080 |
| 13 | 0,14645 | 0,85355 | 0,76098 |
| 14 | 0,08427 | 0,77779 | 0,77511 |
| 15 | 0,03806 | 0,69134 | 0,80028 |
| 16 | 0,00961 | 0,59755 | 0,83470 |
| 17 | 0,00000 | 0,50000 | 0,87758 |
| 18 | 0,00961 | 0,40245 | 0,92898 |
| 19 | 0,03806 | 0,30866 | 0,98970 |
| 20 | 0,08427 | 0,22221 | 1,06117 |
| 21 | 0,14645 | 0,14645 | 1,14532 |
| 22 | 0,22221 | 0,08427 | 1,24441 |
| 23 | 0,30866 | 0,03806 | 1,36061 |
| 24 | 0,40245 | 0,00961 | 1,49542 |
| 25 | 0,50000 | 0,00000 | 1,64872 |
| 26 | 0,59755 | 0,00961 | 1,81757 |
| 27 | 0,69134 | 0,03806 | 1,99495 |

| Ponto | xCoord | yCoord | $u(x,y) = \exp(x) \cdot \cos(y)$ |
|-------|---------|---------|----------------------------------|
| 28 | 0,77779 | 0,08427 | 2,16892 |
| 29 | 0,85355 | 0,14645 | 2,32284 |
| 30 | 0,91573 | 0,22221 | 2,43717 |
| 31 | 0,96194 | 0,30866 | 2,49310 |
| 32 | 0,99039 | 0,40245 | 2,47718 |

Fonte: O Autor

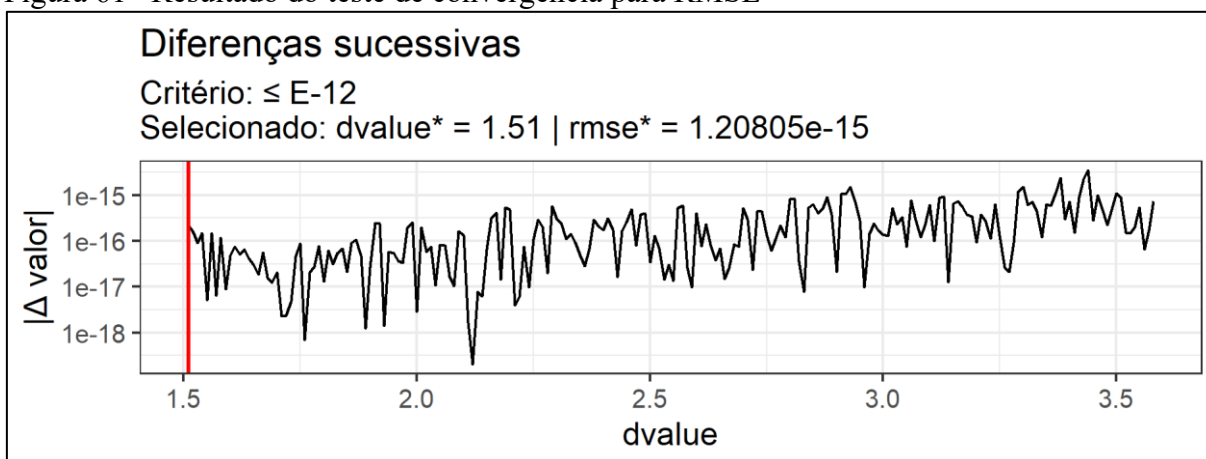
Figura 60 – Resultados do domínio circular com 32 pontos



Fonte: O Autor

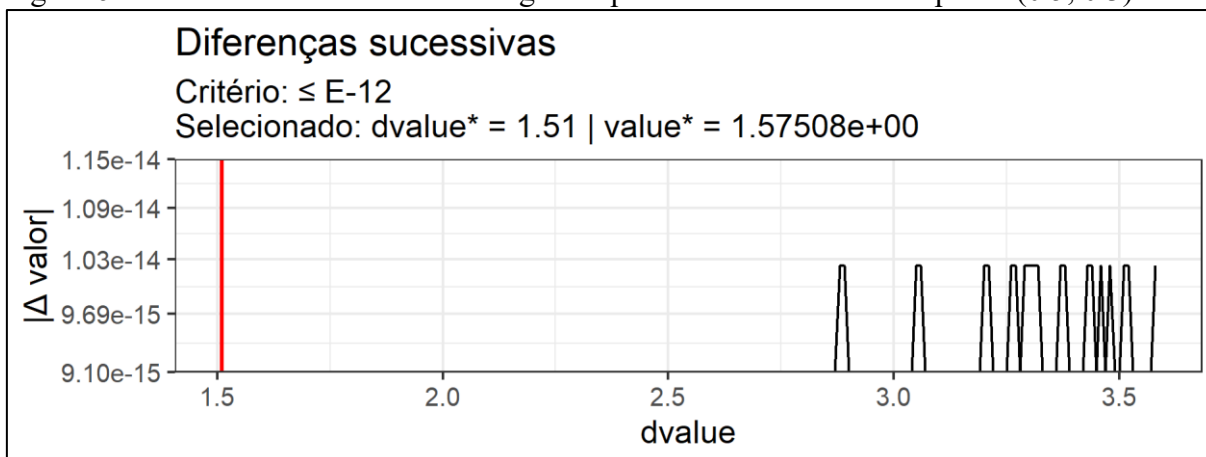
O gráfico de “rcond vs. dvalue” mostrou que os valores de *rcond* já iniciam em $3,6E-09$ e decresce até o limiar de operação, que é alcançado e aborta a operação em *dvalue* igual a 3,58. Nesse cenário não é possível identificar um “joelho” em “RMSE vs. dvalue”, os resultados apresentados já estão na faixa de instabilidade. Avaliando o gráfico do teste de convergência para a métrica RMSE (Figura 61) e para o valor estimado (Figura 62), a instabilidade fica evidente e o valor calculado se aproxima instantaneamente do valor esperado no ponto citado.

Figura 61– Resultado do teste de convergência para RMSE



Fonte: O Autor

Figura 62– Resultado do teste de convergência para o valor estimado do ponto (0.5, 0.3)



Fonte: O Autor

5.1.3 Síntese e discussão global dos resultados dos exemplos teóricos

A Tabela 24 resumiu os valores obtidos, bem como o critério de convergência obtido em cada caso e o valor de raio em que ocorreu. As colunas com índice (1) indicam o valor numérico do parâmetro; as colunas com índice (2) indicam o melhor critério de convergência encontrado e as colunas com índice (3) indicam o valor de *dvalue* para o par de valores anterior.

Tabela 24 – Síntese dos resultados dos testes em modelos teóricos

| | Pontos de contorno | Geom | Solução analítica | Raio da fronteira fictícia (<i>dvalue</i>) | RMSE | | | Valor no ponto | | |
|----|--------------------|------|-------------------|--|----------|------|------|----------------|------|------|
| | | | | | (1) | (2) | (3) | (1) | (2) | (3) |
| 1 | 8 | ret | poli | 1,5 - 100 | 6,91E-09 | E-10 | 28 | 0,12 | E-10 | 23,6 |
| 2 | 16 | ret | poli | 1,5 - 29,1 | 2,78E-13 | E-13 | 4,6 | 0,12 | E-13 | 4,2 |
| 3 | 32 | ret | poli | 1,5 - 4,04 | 4,23E-15 | E-15 | 1,71 | 0,12 | E-15 | 1,51 |
| 4 | 8 | circ | poli | 1,5 - 100 | 6,15E-09 | E-10 | 25,2 | 0,16 | E-10 | 20,1 |
| 5 | 16 | circ | poli | 1,5 - 25,1 | 1,57E-12 | E-12 | 3,4 | 0,16 | E-12 | 3,1 |
| 6 | 32 | circ | poli | 1,5 - 3,58 | 3,20E-16 | E-12 | 1,51 | 0,16 | E-12 | 1,51 |
| 7 | 8 | ret | exp | 1,5 - 100 | 1,03E-03 | E-08 | 28,5 | 1,46196 | E-08 | 39,5 |
| 8 | 16 | ret | exp | 1,5 - 29,1 | 4,64E-08 | E-11 | 8,6 | 1,46209 | E-11 | 10,8 |
| 9 | 32 | ret | exp | 1,5 - 4,04 | 5,28E-14 | E-14 | 1,72 | 1,46209 | E-14 | 1,54 |
| 10 | 8 | circ | exp | 1,5 - 100 | 6,21E-04 | E-09 | 35,6 | 1,57509 | E-09 | 29,2 |
| 11 | 16 | circ | exp | 1,5 - 25,1 | 1,60E-08 | E-11 | 7,2 | 1,57508 | E-11 | 2,3 |
| 12 | 32 | circ | exp | 1,5 - 3,58 | 1,21E-15 | E-12 | 1,51 | 1,57508 | E-12 | 1,51 |

Fonte: O Autor

Foi possível observar que aumentar o número de pontos melhorou a acurácia e a precisão dos resultados. Em geral, duplicar a quantidade de pontos no contorno permitiu obter critérios de convergência com ordem de grandeza duas vezes maior tanto para a métrica RMSE quanto para os valores estimados nos pontos, o que representou o aumento da precisão. Ainda segundo essa variação, os valores de RMSE diminuíram em média 4 ordens de grandeza, indicando aumento de acurácia. No caso dos valores no ponto, todos os exemplos, com exceção do exemplo 7, alcançaram valores muito próximos dos valores esperados e, mesmo no exemplo 7, o erro entre valor esperado e calculado foi de apenas $\sim 0,1\%$.

Nos testes com soluções harmônicas (todas as soluções analíticas do operador Laplaciano são harmônicas), o aumento da quantidade de pontos de contorno proporcionou uma convergência acelerada tanto de RMSE quanto dos valores nos pontos testados, porém com decaimentos de décadas em *rcond* mais adiantados em *dvalue*. Em termos práticos, o ganho na convergência implicou em uma janela operacional mais estreita de *dvalue* antes do início da instabilidade numérica. Esse comportamento é consistente com a literatura do Método das Soluções Fundamentais (MSF), que descreve o ganho de precisão com o afastamento da

fronteira fictícia até o ponto em que o sistema se torna mal-condicionado (Mathon; Johnston, 1977; Liu, 2012; Chen; Karageorghis; Smyrlis, 2008).

Uma avaliação dos intervalos de operação, isso é, a partir de qual valor de *dvalue* o sistema matricial atinge o limite operacional de $1,0E-15$ (Tabela 12) para o problema de contorno circular de raio unitário, indicou valores, portanto, faixas de trabalho, inferiores às do problema com contorno retangular unitário. Adicionalmente, para 64 pontos de contorno, mesmo o valor inicial de 1,5 para o raio da fronteira fictícia não permitiu obter um valor de *rcond* dentro do limite operacional estabelecido. Isso significa que problemas com essa geometria, que possuam pelo menos 64 pontos de contorno, precisarão ser ajustados para tratar previamente o condicionamento das matrizes principais, caso contrário, não poderão ser operados nos termos da metodologia proposta.

Nos exemplos com 8 e 16 pontos de contorno, as curvas de decaimento de RMSE e *rcond* apresentaram comportamento assintótico coerente com uma faixa de bom condicionamento do sistema matricial. Isso se refletiu também nas curvas de teste de convergência. Na medida em que o condicionamento se tornava ruim, a partir de valores de *rcond* inferiores a $E-08$ em alguns casos, foi possível observar a ocorrência de instabilidade nas curvas de RMSE vs. *dvalue* e nas curvas do teste de convergência tanto para RMSE quanto para os valores estimados nos pontos.

Observou-se ainda que, ao comparar o início da faixa de instabilidade entre as curvas de erro sucessivo de RMSE e de valor no ponto, em todos os exemplos, ela começou em valores inferiores de *dvalue* para o ponto em detrimento da métrica RMSE. Esse comportamento indica que a instabilidade é uma propriedade local de cada ponto e, embora o gráfico de convergência para o RMSE represente em média a convergência para o conjunto de pontos estabelecido, é importante avaliar individualmente cada um dos pontos de interesse quanto a esse critério. Em um mesmo domínio, poderá haver pontos que alcançam determinado valor de convergência enquanto outros não.

O mal condicionamento das matrizes para quantidades de pontos superiores (16 e 32 pontos de contorno) apontou para um limite operacional da metodologia. Entretanto, conforme discutido por Chen, Cho e Golberg (2006), podem ser utilizadas ferramentas tais como *Singular Value Decomposition* (SVD - Decomposição do valor singular), regularização de Tikhonov e *Truncated Singular Value Decomposition* (TSVD – Decomposição truncada do valor singular) para transformar a matriz mal condicionada e viabilizar a aplicação do método, conforme esse mal condicionamento provoque resultados com instabilidade numérica não aceitável. Essas metodologias podem ser aplicadas aos exemplos unitários a partir de 32 pontos de contorno,

apesar disso, foi importante apresentar os resultados com a metodologia proposta em sua forma básica para permitir a interpretação da variação dessa quantidade de pontos nos resultados discutidos.

Uma vez que a geometria da fronteira fictícia foi fixada (circular), esse parâmetro foi mantido constante para viabilizar a construção da metodologia generalizada proposta. Apesar disso, autores como Liu (2012) explicaram que a escolha dos pontos de fonte (pontos da fronteira fictícia) tem o potencial de alterar os resultados numéricos obtidos. Conforme explicado anteriormente, os dois tipos principais de fronteiras fictícias utilizadas são um *offset* da fronteira real ou uma fronteira fictícia circular.

A construção de uma fronteira do tipo *offset* pode levar a geometrias não regulares, na hipótese de contornos côncavos ou pontos aleatórios de um problema real, dessa forma, uma fronteira circular, conforme proposto, é uma alternativa regular e simplificada de implementar a distribuição de pontos de fonte. Essa regularidade foi apontada por Chen, Karageorghis, Li (2016) e, mais recentemente por Cheng e Hong (2020) como fatores que favorecem a qualidade das aproximações obtidas. Os mesmos autores afirmaram ainda que, conforme se aumenta a distância da fronteira fictícia em problemas com condições de contorno harmônicas (teóricas), melhores são os resultados obtidos. Esse comportamento foi observado em todos os testes realizados, sendo essa melhoria ocorrida principalmente no critério de convergência.

Cheng e Hong (2020) apontaram ainda que problemas reais dificilmente serão modelados com condições de contorno harmônicas puras, cenário que abre margem para a calibração do valor de *dvalue* e determinação de seu valor ótimo obtido segundo alguma função objetivo de minimização de erros. Para esses casos, usualmente associados a modelagens de problemas reais, os gráficos de “RMSE vs. *dvalue*” e “Valor do ponto vs. *dvalue*” representam resultados importantes de serem avaliados caso a caso, podendo inclusive suplantarem o critério de convergência na decisão de adotar o valor de raio da fronteira fictícia.

Foi possível observar também que a matriz do MSF depende unicamente da geometria do problema e independe dos valores das condições de contorno. Esse comportamento permite processar o gráfico de “*rcond* vs. *dvalue*” antes mesmo de serem estimados os valores funcionais no domínio em pontos de interesse. Por conta disso, é recomendado que esses gráficos possam ser avaliados inicialmente, antes mesmo da interpretação dos resultados numéricos, pois um mal condicionamento interfere *a priori* na aplicação do MSF. Ou seja, a propriedade de estabilidade do problema é puramente geométrica e depende unicamente do conjunto de pontos de contorno e de fronteira fictícia adotados, independente dos valores das condições de contorno. Qualquer mal condicionamento eventualmente identificado nessa etapa

deve conduzir à necessidade de adaptar a matriz, seja por recondicionamento ou transformação, para permitir a aplicação da metodologia proposta.

5.2 Resultado para o estudo de caso

O algoritmo de detecção de centro e raio da circunferência que contém todos os pontos do contorno retornou os seguintes valores (Figura 63), evidenciando que o centro seria o ponto (779605.6, 7720271.7) com raio mínimo de 12037,8. Assim, foi adotado o raio inicial igual a 12050 e o valor final de $7E+07$ em passos de 100. Esses valores foram usados para parametrizar a metodologia proposta juntamente com os valores de condição de contorno do exemplo.

A Figura 64 apresentou o resultado da metodologia proposta aplicada aos dados de Rodrigues Neto (2020). O contorno sugerido para o problema foi apresentado em linha tracejada de cor vermelha. Essa definição, entretanto, é simplificada, pois, antes de definir o contorno, é necessário considerar outros aspectos do sistema físico, como, por exemplo, a eventual ocorrência de fronteiras impermeáveis. Apesar disso, a representação tracejada ajudou a visualizar a geometria do problema; e, uma vez que os cálculos serão limitados aos 6 pontos de interesse, ou seja, não será aplicada uma malha para desenhar as curvas piezométricas, essa representação não implicará em qualquer incerteza para os resultados avaliados.

Figura 63– Resultado do algoritmo de menor círculo centrado

```
> menor_raio_circulo_centrado(cavazzanaData)
$center
      x      y
779605.6 7720271.7

$radius
[1] 12037.8

$idx_boundary
[1] 4

$point_boundary
      x      y
786404 7730206

$distances
[1] 10672.080 9961.507 8772.568 12037.801 9738.004
[6] 10549.598 9457.672

attr(,"class")
[1] "circulo_centrado" "list"
```

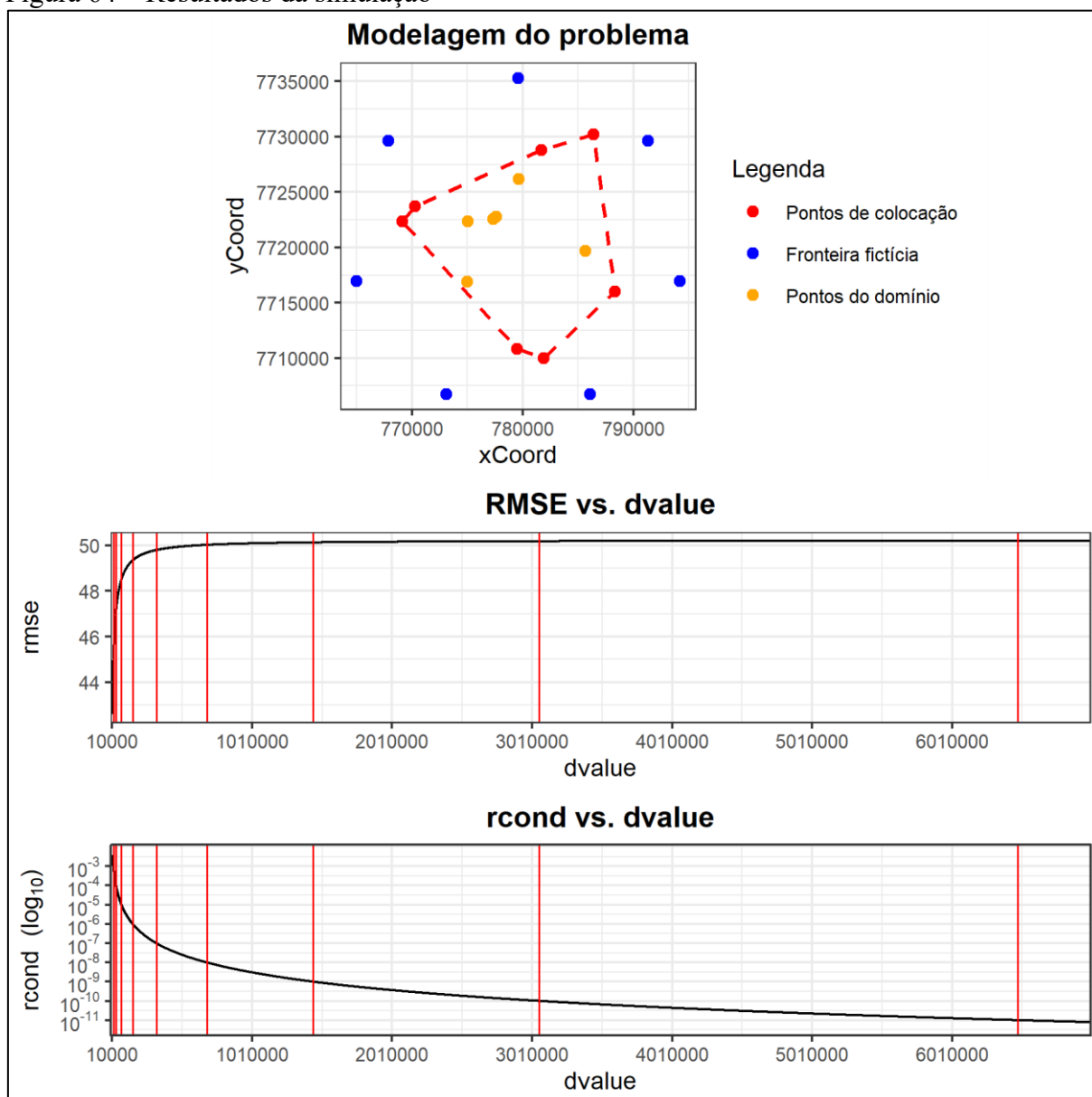
Fonte: O Autor

O gráfico de “RMSE vs. *dvalue*” iniciou em 42,61 com *dvalue* igual a 12050 e se aproximou assintoticamente do valor de 49,84. Ao contrário do comportamento para os demais exemplos simulados, a curva projeta um “joelho” crescente. Isso indica que a convergência dos resultados se distancia de um valor mínimo. Apesar disso, o gráfico de “*rcond* vs. *dvalue*” se comportou da forma esperada. A Tabela 22 apresentou os valores de *dvalue* para cada faixa de década alcançada. O “joelho” crescente se consolidou antes de *rcond* superar a década de E-08 em *dvalue* igual a 686018.

A Figura 65 mostrou os resultados da aproximação numérica para cada um dos 6 pontos. Foi possível observar que, para os pontos PO-03, PO-07e PO-19, os valores calculados decrescem assintoticamente na direção dos valores esperados, porém não os alcançam. Para os pontos PO-05 e PO-06, o comportamento da curva de valor calculado segue o comportamento da curva de RMSE. Para o cálculo de RMSE, pode-se afirmar que os resultados para esses dois pontos, em erro quadrático, tiveram o potencial de inverter o comportamento esperado dessa curva, pois a métrica RMSE é bastante sensível a erros a de maior ordem. Para o ponto PO-11, apesar de os valores decrescerem conforme o comportamento usual, eles divergem do valor esperado.

O gráfico do resultado do teste de convergência para a métrica RMSE (Figura 66) tomada para os 6 pontos do domínio indicou que foi possível alcançar em média o critério de convergência menor ou igual a E-04 em *dvalue* igual a 371150, mas antes de esse valor ser adotado como representativo, foi investigada a convergência para cada um dos pontos na Figura 67.

Figura 64 – Resultados da simulação



Fonte: O Autor

Ainda na Figura 66, foi possível observar que a partir de $dvalue$ igual a $2E+06$ ocorreram sinais de instabilidade, exatamente no intervalo de $rcond$ com ordem de grandeza $E-06$, comportamento similar ao observado para os exemplos teóricos, ocorrendo, porém, em algumas ordens de grandeza anterior.

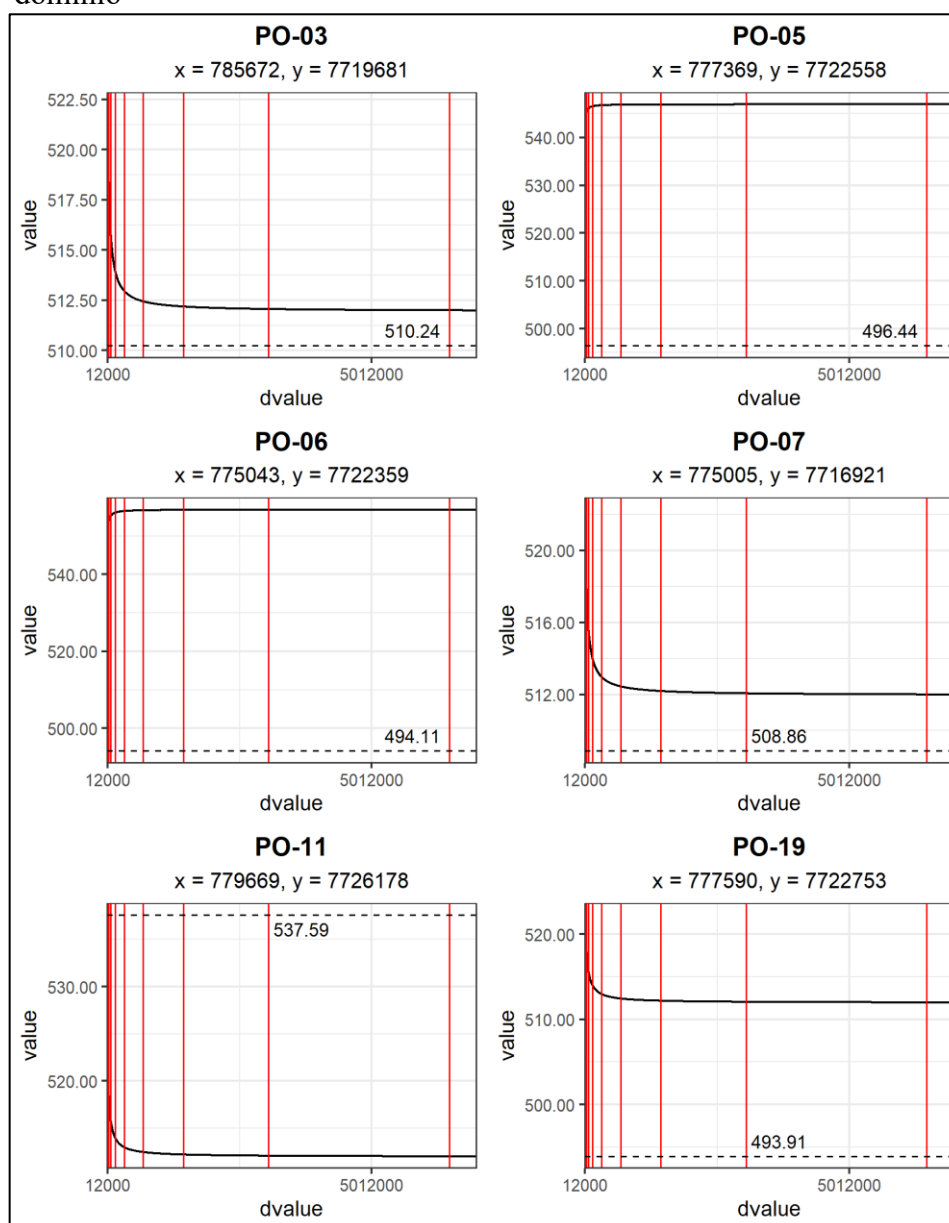
Observando as Figura 67 e Figura 68, que mostraram os resultados dos testes de convergência aplicados, foram seleccionados os valores 512,58; 546,86; 556,70; 585,24; 528,90; 545,20 para os pontos PO-03, PO-05, PO-06, PO-07, PO-11 e PO-19 respectivamente. Os critérios de convergência alcançados foram da ordem de erros sucessivos inferiores a $E-04$ e $E-05$.

Tabela 25 – Decaimento de décadas do gráfico $rcond$ vs. $dvalue$

| década | nível | dvalue |
|--------|----------|---------|
| -3 | 0,001 | 19116 |
| -4 | 1,00E-04 | 37816 |
| -5 | 1,00E-05 | 76235 |
| -6 | 1,00E-06 | 156786 |
| -7 | 1,00E-07 | 326702 |
| -8 | 1,00E-08 | 686018 |
| -9 | 1,00E-09 | 1446847 |
| -10 | 1,00E-10 | 3059338 |

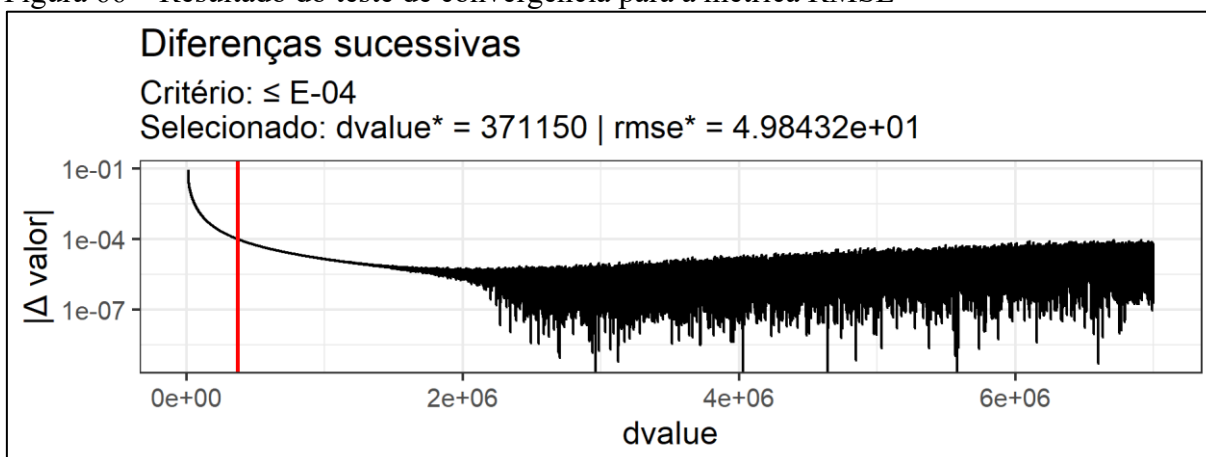
Fonte: O Autor

Figura 65– Resultados da aproximação numérica para cada ponto do domínio



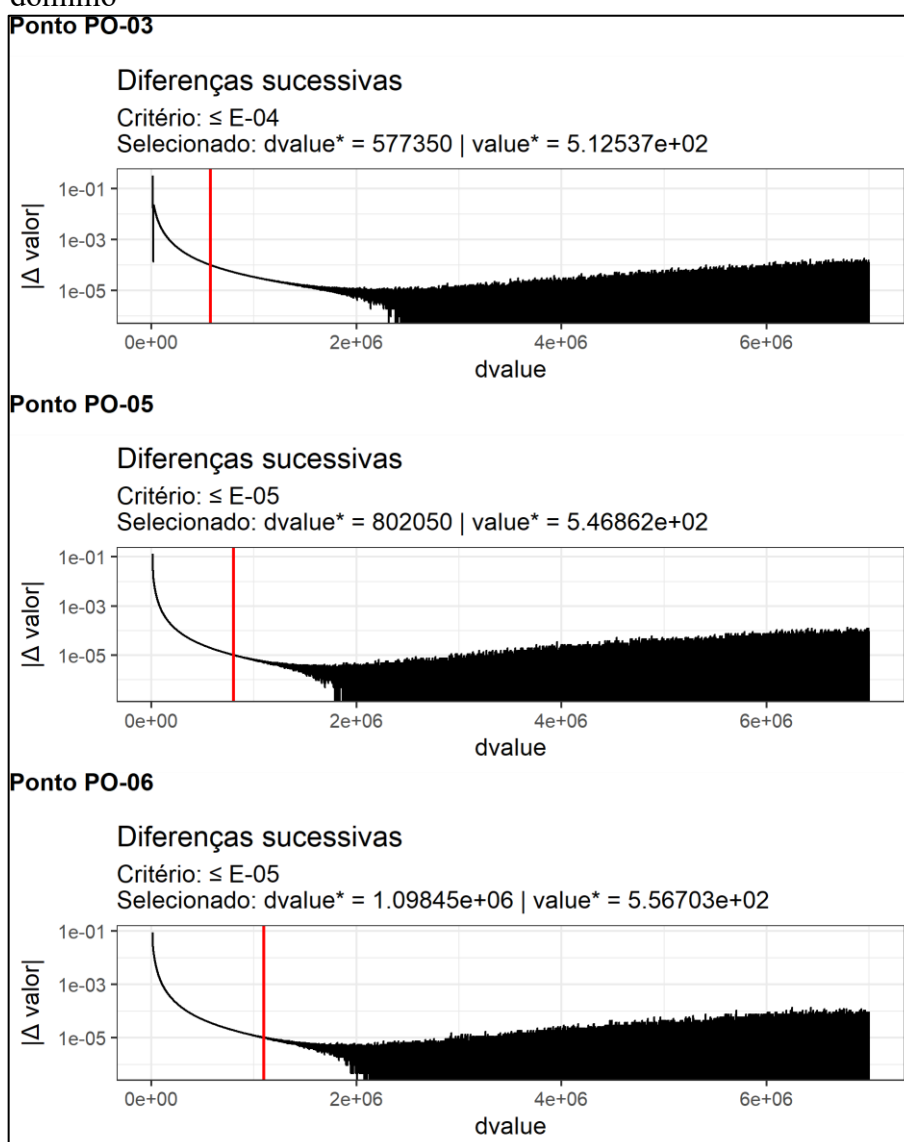
Fonte: O Autor

Figura 66 – Resultado do teste de convergência para a métrica RMSE



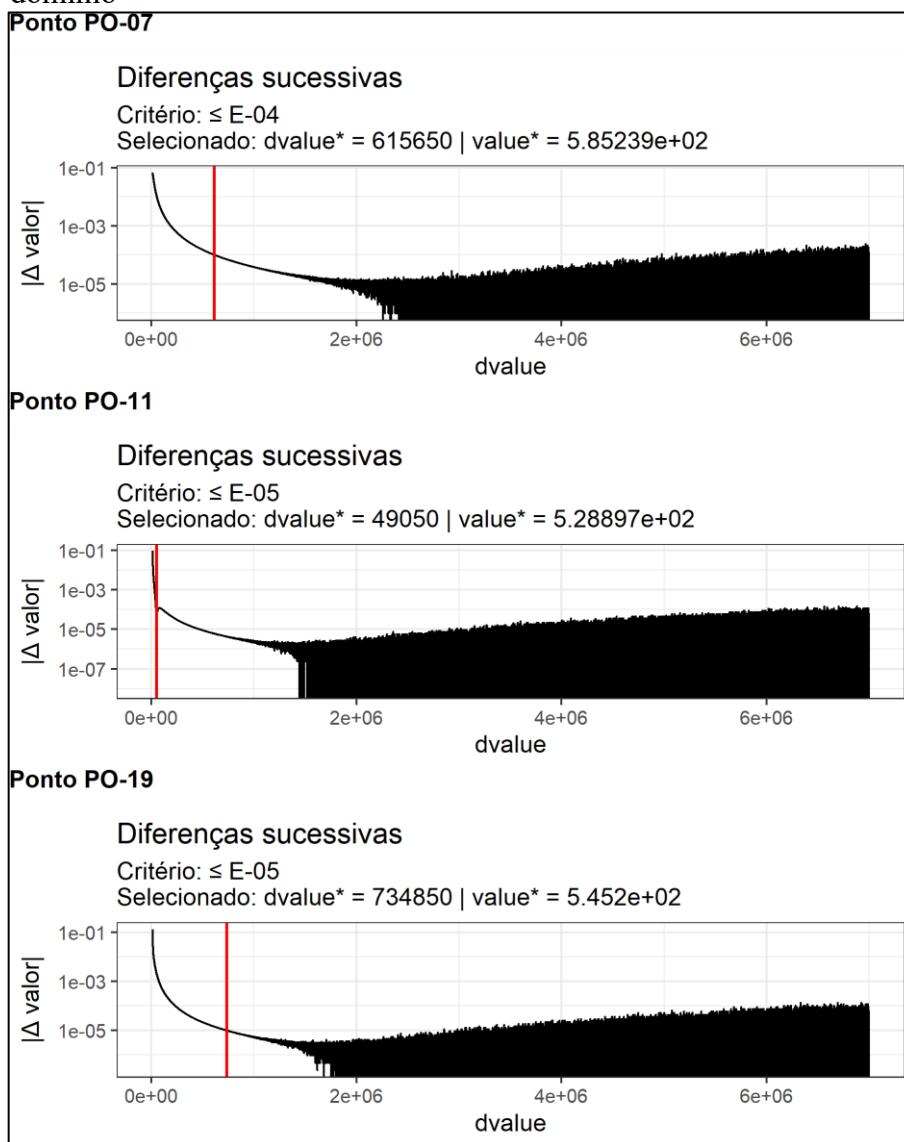
Fonte: O Autor

Figura 67 – Resultado dos testes de convergência para cada ponto do domínio



Fonte: O Autor

Figura 68 – Resultado dos testes de convergência para cada ponto do domínio



Fonte: O Autor

5.2.1 Síntese e discussão dos resultados

A Tabela 26 apresentou o resumo dos resultados obtidos com o estudo de caso. Foi possível observar que os valores previstos através da metodologia proposta permitiram aproximar os valores esperados com um erro relativo que variou de 0,46% a 15,01% em módulo.

Resgatando as considerações apresentadas na metodologia, no tópico 4.1.6. Comportamento esperado dos gráficos e interpretação das curvas, foi possível discutir a diferença entre os valores calculados e esperados da simulação realizada para o estudo de caso. As faixas de erro relativo observadas nos resultados podem ter duas origens principais. A

primeira, é a incerteza associada aos valores de condição de contorno. Uma vez que seus valores foram obtidos através de leituras realizadas em campo, eles podem estar embutidos de erros. Os erros associados à medição de dados primários são tradicionalmente classificados em erros sistemáticos, erros aleatórios e erros grosseiros. Os erros sistemáticos são desvios que ocorrem de forma consistente, decorrentes de imperfeições do instrumento, calibração inadequada, variações ambientais ou procedimentos padronizados incorretos, levando a um viés constante nas medições. Já os erros aleatórios resultam de flutuações imprevisíveis inerentes ao processo de medição, como pequenas variações operacionais, limitações humanas e ruídos ambientais, manifestando-se como dispersão estatística dos valores obtidos. Por fim, os erros grosseiros (ou *blunders*) são valores totalmente incompatíveis com o comportamento esperado da variável medida, geralmente provocados por falhas humanas, leitura equivocada ou problemas graves no equipamento, devendo ser identificados e removidos (Montgomery; Runger, 2014; Taylor, 1997; ISO/IEC GUIDE 98-3:2008).

Tabela 26 – Resultados numéricos obtidos através da metodologia proposta aplicada aos estudos de caso

| | Ponto | Valores de campo | RMSE | | | Valor no ponto | | | erro % |
|-----------------------|-------|------------------|-------|-------|--------|----------------|-------|----------|--------|
| | | | Valor | Conv. | dvalue | Valor | Conv. | dvalue | |
| Rodrigues Neto (2020) | PO-03 | 510.24 | 49.84 | E-04 | 371150 | 512.58 | E-04 | 5.12E+02 | 0.46% |
| | PO-05 | 496.44 | | | | 546.86 | E-05 | 5.47E+02 | 10.16% |
| | PO-06 | 494.11 | | | | 556.70 | E-05 | 5.57E+02 | 12.67% |
| | PO-07 | 508.86 | | | | 585.24 | E-04 | 5.85E+02 | 15.01% |
| | PO-11 | 537.59 | | | | 528.90 | E-05 | 5.29E+02 | -1.62% |
| | PO-19 | 493.91 | | | | 545.20 | E-05 | 5.45E+02 | 10.38% |

Fonte: O Autor

De acordo com essas definições, o conjunto de dados amostrado pode estar associado a erros que contaminam os valores das condições de contorno antes mesmo de a aproximação numérica ser computada. Para identificar eventuais *outliers*, isso é, pontos fora da curva, que comprometem a qualidade das aproximações e da modelagem proposta, um estudo estatístico detalhado seria necessário. Porém, 4 dos 6 pontos simulados apresentaram desvio de mais de 10% dos valores esperados. Dentro do espaço amostral de 6 pontos, 4 deles representa uma quantidade de 66,7% da amostra. A menos que maior quantidade de pontos esteja disponível, os indícios indicam ou se trata de um erro sistemático ou então que outra justificativa pode ter causado essa distorção.

A segunda origem que pode justificar esses resultados se refere à própria conformação do sistema físico que está sendo modelado. O Método das Soluções Fundamentais, nessa

formulação básica, conforme apresentado por Rodrigues Neto *et al.* (2020), apresenta uma restrição de aplicação que envolve o atendimento ao operador Laplaciano dentro do domínio simulado, e, para atender essa restrição, os aquíferos modelados precisam ser isotrópicos e homogêneos. Porém, os aquíferos sedimentares podem exibir características de anisotropia hidráulica e heterogeneidade espacial, de modo que suas propriedades de condução hidráulica variam em função da direção e da posição do domínio (Maier *et al.*, 2022). Conforme as dimensões espaciais em projeção crescem, maiores as chances de determinado domínio simulado conter alguma inomogeneidade, tal como um poço em bombeamento ou em injeção, durante, por exemplo, uma campanha de coleta de dados. Nessa hipótese, os valores coletados de cotas piezométricas representariam não uma condição homogênea, mas uma superposição de uma solução homogênea com pontos ou áreas de fonte ou dreno (*fill/sink*) ou ainda condições transientes, ambas representando inomogeneidades. Assumir um valor contaminado com essas considerações como uma condição de contorno homogênea implicaria em propagar esse erro para o domínio e obter resultados distorcidos.

Nesse sentido, as coletas de dados primários que forem planejadas ou dimensionadas para servirem como condições de contorno para uma modelagem segundo o MSF, e, portanto, segundo a metodologia proposta, devem buscar garantir que não ocorra essa superposição e que o domínio se aproxime o máximo possível de um sistema isotrópico. Caso contrário, desvios nos resultados serão observados. Cavazzana, Lastoria e Gabas (2019) indicaram que foi solicitado aos proprietários de poços que suspendessem a captação em pelo menos dois dias antes do dia da medição das cotas piezométricas, o que representa a implementação dessa prática recomendada, apesar disso, se torna necessário dispor de mecanismos físicos para aumentar a segurança desses resultados sempre que possível, não deixando margem para incertezas.

Ainda sobre os resultados apresentados na Figura 55, onde os valores de convergência para cada ponto foram distintos dos valores esperados, foi possível apresentar as seguintes considerações. De acordo com a discussão anterior, se existem garantias geológicas de que o sistema modelado é isotrópico ou se aproxima desse comportamento, resultados destoantes entre os valores calculados e os valores medidos nos pontos de interesse sugerem a ocorrência de alguma inomogeneidade no domínio estudado. Essa conclusão é importante, pois do ponto de vista da gestão de recursos hídricos, a captação de água subterrânea desempenha um papel estratégico sobretudo nas áreas que enfrentam escassez hídricas. Se um conjunto de poços de monitoramento de uma área aproximadamente isotrópica passa a apresentar cotas piezométricas

muito destoantes daquelas esperadas para o sistema homogêneo, implica que ocorre algum fenômeno de fuga ou entrada de massa (inomegeneidade) na região.

Os córregos e riachos apresentam comportamento hidrológico diretamente relacionado à perenidade, isto é, à capacidade de manter escoamento ao longo do ano. Cursos d'água perenes mantêm fluxo contínuo mesmo em períodos secos, enquanto cursos intermitentes apresentam vazão apenas em parte do ano, e cursos efêmeros escoam somente após eventos de chuva. A principal razão para essa diferença está no papel do fluxo subterrâneo, também chamado de vazão de base (*baseflow*), que corresponde à parcela do escoamento alimentada pelo aquífero. Durante períodos sem precipitação significativa, o lençol freático sustenta o nível de água no canal, liberando gradualmente água armazenada e garantindo a continuidade da vazão. Assim, a perenidade de um curso d'água reflete a capacidade do sistema hidrogeológico local de armazenar e transferir água subterrânea para o canal, sendo influenciada por características como permeabilidade, porosidade, transmissividade e conectividade hidráulica das formações geológicas (Tucci, 2009; Winter *et al.*, 1998; Fetter, 2018).

Na Figura 55, foi possível observar que todos os pontos, com exceção do ponto PO-11, apresentaram valores estimados superiores aos valores observados e, no mapa da Figura 15, todos esses pontos citados estão localizados nas proximidades de leitos de córregos ou riachos. O comportamento observado através dessa comparação inicial, sugere que o aquífero proporciona a manutenção da vazão de base, o que seria detectado pela diferença entre os valores calculados e observados através da aplicação da metodologia proposta. O ponto PO-11, em contraste, sugere que ocorre uma inomegeneidade associada a uma área de recarga ou ponto de injeção, por exemplo. Essas considerações só são válidas caso o sistema seja isotrópico.

Essas hipóteses ilustram o potencial da aplicação da metodologia proposta aliada ao detalhamento cuidadoso do sistema hidrogeológico modelado, como ferramenta de diagnóstico do sistema aquífero. Outras ferramentas, tal como o MODFLOW ou FEFLOW, também permitem esse tipo de modelagem diagnóstica, porém, conforme discutido anteriormente, o Método das Soluções Fundamentais apresenta simplicidade e facilidade de implementação, exemplifica isso o fato de que ele sequer requereu, nesses exemplos desenvolvidos, por exemplo, a definição de parâmetros hidrogeológicos tais como condutividade hidráulica, porosidade, armazenamento, dentre outras, necessárias para construir um modelo completo segundo as demais ferramentas citadas.

5.3 Discussão sobre aplicabilidade da metodologia proposta

5.3.1 Hipótese testada

A hipótese central foi que a metodologia proposta permite aplicar o MSF de forma sistemática e reproduzível, em dois níveis complementares: (i) nos problemas teóricos com solução analítica, validando o comportamento esperado do método e as tendências de aproximação; e (ii) em problemas reais, fornecendo um diagnóstico preliminar do sistema, inclusive quando houver divergência entre valores calculados e observados, a partir de uma leitura conjunta de estabilidade, convergência e acurácia. Nesse sentido, a metodologia estrutura uma forma de interpretar o que os resultados significam para a adequação (ou não) do modelo físico-matemático adotado.

A hipótese instrumental (critério de sucesso) estabelece que existe uma faixa operacional de posicionamento da fronteira fictícia (*dvalue*) na qual coexistem: (i) estabilidade numérica (matriz invertível e com condicionamento aceitável), (ii) convergência (redução e estabilização do RMSE e dos valores em pontos de interesse) e (iii) acurácia (erro relativo compatível com a referência, seja a solução analítica nos domínios teóricos, seja um critério de aderência definido no aplicado). Assim, a metodologia é bem-sucedida quando identifica essa faixa e a utiliza para sustentar uma interpretação consistente dos resultados.

5.3.2 Metodologia proposta

A metodologia proposta se organiza em uma estrutura padrão de testes (aplicável tanto aos exemplos teóricos quanto ao estudo de caso). Envolve definir o contorno (pontos de colocação) e a fronteira fictícia (pontos-fonte), adotar uma forma geométrica controlada (com ênfase na fronteira fictícia circular, pela regularidade e padronização), e então realizar uma varredura paramétrica do *dvalue*. Para cada *dvalue*, a interpretação é feita por um conjunto mínimo de leituras: RMSE vs. *dvalue* (métrica global), *rcond* vs. *dvalue* (estabilidade/condicionamento), valor do ponto vs. *dvalue* (métrica local) e testes de convergência (global e local), de modo a evitar conclusões apoiadas em um único indicador.

Um ponto metodológico essencial foi a pré-verificação geométrica. Como a construção da matriz do MSF decorre primariamente da geometria (posicionamento relativo de pontos de contorno e fontes), o comportamento de *rcond* vs. *dvalue* permite uma triagem de estabilidade antes de qualquer discussão física. Isso cria uma camada de controle numérico, na qual,

primeiro identifica-se “onde o método pode operar” (estabilidade), depois “como ele opera” (convergência e acurácia).

Para problemas reais, a decisão da faixa operacional de *dvalue* não deve depender apenas de um critério idealizado de convergência, mas deve ser guiada pela compatibilidade entre indicadores e pela coerência do comportamento observado. Em contextos não estritamente harmônicos (típicos de estudos de caso e modelos montados a partir de dados de campo), RMSE e valores em pontos podem desempenhar papel mais determinante, permitindo inclusive formular uma função-objetivo (minimização de erro) e tratar a escolha do *dvalue* como um problema de calibração numérica dentro de limites de estabilidade previamente estabelecidos.

5.3.3 Resultados observados

Nos problemas teóricos (controle), a aplicação da metodologia tende a confirmar o comportamento esperado, i.e., existe uma região em que o aumento de *dvalue* melhora a aproximação e estabiliza os valores, seguida por uma região em que a instabilidade numérica emerge quando o condicionamento se degrada. Isso fortalece a hipótese central ao mostrar que o protocolo proposto não apenas performa a aproximação numérica, mas identifica a zona em que a solução é numericamente confiável.

Um resultado relevante é que a instabilidade pode ser local antes de ser global. Alterações abruptas e oscilações podem aparecer primeiro no gráfico valor do ponto vs. *dvalue*, enquanto o RMSE ainda aparenta comportamento aceitável. Portanto, a metodologia exige que a avaliação local (em pontos de interesse) seja tratada como critério necessário, e não apenas como um complemento, pois é justamente ela que revela sinais precoces de perda de confiabilidade.

Também se observa que o refinamento (por exemplo, aumento do número de pontos) pode impor limites operacionais devido ao mal condicionamento, evidenciando que o aumento do número de pontos do contorno não significa automaticamente uma melhor aplicabilidade da metodologia sem a adoção de técnicas auxiliares. Esse comportamento reforça a necessidade de incorporar, quando aplicável, estratégias como regularização e diagnósticos de estabilidade para garantir robustez numérica.

No estudo de caso (aplicado), a metodologia estrutura um diagnóstico, pois, mesmo quando o condicionamento se comporta de forma compatível com a geometria adotada, a curva de RMSE pode apresentar tendências atípicas (por exemplo, ausência de mínimo claro ou

crescimento em certas faixas), e os erros relativos em pontos podem revelar limitações importantes da modelagem adotada. Isso não invalida a metodologia, mas confirma seu papel como ferramenta de detecção de incompatibilidades entre hipótese física e dados do sistema.

A leitura interpretativa dos resultados aplicados se desdobra naturalmente. Discrepâncias sistemáticas podem ser compatíveis tanto com (i) incertezas/erros nas condições de contorno e na campanha de dados (coleta de dados) quanto com (ii) violação das hipóteses de Laplace, como heterogeneidade/anisotropia relevantes, fontes e sumidouros internos, ou transiência não desprezível. Assim, a metodologia entrega um produto técnico concreto, um diagnóstico preliminar e um direcionamento claro de quais hipóteses devem ser revisadas ou testadas em seguida.

5.3.4 Critérios de aplicabilidade

Do ponto de vista matemático, a metodologia é mais adequada quando o problema físico pode ser representado por um operador compatível com a equação de Laplace no domínio, isto é, um cenário em que a variável de interesse se comporta como um potencial harmônico sob as hipóteses adotadas. Além disso, é necessário que o problema esteja bem definido por condições de contorno, no sentido prático de haver dados suficientes e geometricamente representativos para sustentar a solução por contorno.

Do ponto de vista físico, os critérios mínimos de compatibilidade (no enquadramento desta tese) incluem estacionariedade (regime permanente), homogeneidade do meio (propriedades constantes no domínio considerado), isotropia (ou anisotropia desprezível na escala do modelo), e ausência (ou irrelevância) de fontes/sumidouros internos não representados explicitamente. Quando esses elementos não são atendidos, a metodologia ainda pode ser aplicada, mas a interpretação deve migrar de “aproximação fiel” para “diagnóstico de inadequação do modelo simplificado”.

Do ponto de vista geométrico e de dados, a aplicabilidade depende de: (i) um contorno que seja coerente com o domínio físico e suas restrições (por exemplo, fronteiras impermeáveis quando pertinentes), (ii) distribuição de pontos que evite concentrações e lacunas que agravem o condicionamento, e (iii) consistência de dados de contorno, reduzindo contaminações por efeitos não modelados. Esses critérios formam um filtro objetivo para seleção de problemas compatíveis com a metodologia proposta.

5.3.5 Pontos fortes, fracos e pontos de atenção

Como pontos fortes, a metodologia consolida um protocolo generalizável. A mesma sequência de leitura (estabilidade → convergência → acurácia) sustenta tanto validações teóricas quanto aplicações práticas. Além disso, o uso de *rcond* como triagem geométrica permite antecipar limitações numéricas antes de discutir significados físicos, reduzindo o risco de interpretar ruído numérico como fenômeno hidrogeológico.

Como limitações, destaca-se a sensibilidade intrínseca do MSF ao mal condicionamento, especialmente em refinamentos, e a restrição conceitual do arcabouço básico aos cenários laplacianos/homogêneos/estacionários. Também é limitação o fato de métricas globais (RMSE) poderem mascarar instabilidades locais, exigindo disciplina na avaliação ponto a ponto.

Como pontos de atenção (em forma de boas práticas), recomenda-se: (i) realizar sempre a pré-verificação de *rcond* vs. *dvalue* e definir uma faixa de estabilidade; (ii) interpretar RMSE em conjunto com o comportamento dos pontos de interesse; (iii) tratar valores abruptos/oscilações em pontos como sinal de alerta, mesmo com RMSE aceitável; e (iv) diante de erros elevados, investigar primeiro consistência e representatividade do contorno, e depois a adequação das hipóteses físicas (homogeneidade/isotropia/estacionariedade/ausência de fontes).

5.3.6 Critérios de avaliação dos gráficos

No gráfico *rcond* vs. *dvalue*, o objetivo é delimitar a faixa em que o problema permanece numericamente tratável. Quedas acentuadas do *rcond* (ou aproximação de patamares críticos) indicam aumento do risco de instabilidade e sugerem necessidade de ajustes, tais como reposicionamento da fronteira fictícia, redução/redistribuição de pontos, ou uso de técnicas de estabilização (regularização).

No gráfico RMSE vs. *dvalue*, busca-se uma região de melhora e estabilização (no teórico, frequentemente associada a um “joelho” ou patamar), evitando faixas em que o RMSE cresce ou oscila. No estudo de caso, a ausência de mínimo claro deve ser tratada como informação diagnóstica, que pode indicar inconsistência dos dados de contorno, presença de processos não representados ou inadequação das hipóteses de Laplace.

No gráfico valor do ponto vs. *dvalue*, o critério é a estabilidade local. Valores devem convergir/estabilizar dentro de uma faixa operacional, sem oscilações ou inversões abruptas.

Essa leitura é decisiva porque instabilidades podem surgir primeiro localmente; portanto, aceitar um *dvalue* requer que o comportamento local esteja coerente com a faixa de estabilidade definida por *rcond* e com o comportamento global do RMSE.

Nos testes de convergência (global e local), o critério é a confirmação de que a solução está se tornando estável do ponto de vista numérico. Eles funcionam como validação cruzada da leitura dos gráficos e como mecanismo de controle para evitar conclusões baseadas em um único indicador.

5.3.7 Síntese dos critérios e encaminhamento conclusivo

À luz dos resultados e discussões apresentados, os critérios de aplicabilidade da metodologia proposta podem ser consolidados como um protocolo de decisão baseado em três pilares complementares: estabilidade, convergência e acurácia. Em primeiro lugar, a estabilidade deve ser verificada por meio da leitura de *rcond* vs. *dvalue*, delimitando a faixa operacional em que o sistema linear associado ao MSF permanece numericamente tratável. Em seguida, dentro dessa faixa, a convergência deve ser avaliada de forma global e local, combinando o comportamento de RMSE vs. *dvalue* com a estabilização dos valores em pontos de interesse, de modo a evitar que um bom desempenho médio mascare instabilidades pontuais. Por fim, a acurácia deve ser quantificada por comparação com referência. Nos problemas teóricos, frente à solução analítica; no estudo de caso, por meio do erro relativo e da coerência espacial do campo obtido frente às condições impostas.

Sob essa estrutura, a seleção de problemas físicos compatíveis passa a ser tratada como condição necessária para interpretação confirmatória. A metodologia proposta é mais apropriada quando o sistema pode ser representado por um operador laplaciano sob hipóteses de homogeneidade, isotropia (ou anisotropia desprezível), estacionariedade e ausência de fontes/sumidouros internos relevantes não representados. Quando essas condições não são atendidas integralmente, cenário frequentemente possível em dados de campo, a metodologia mantém utilidade ao deslocar o foco para um resultado igualmente relevante, um diagnóstico preliminar do sistema, evidenciando inconsistências potenciais nas condições de contorno e/ou limitações do modelo simplificado adotado, e orientando de forma objetiva quais hipóteses físicas e quais componentes da parametrização devem ser reavaliados em etapas subsequentes.

Dessa forma, o tópico se encerra reforçando que a metodologia proposta foi bem-sucedida na testagem da hipótese levantada inicialmente. Nos problemas teóricos, conduziu a aproximações satisfatórias dentro de faixas operacionais identificáveis; e, no estudo de caso,

mesmo diante de discrepâncias, produziu um diagnóstico preliminar coerente com os resultados esperados de sua aplicação. Essa síntese estabelece a transição natural para o capítulo de conclusões, no qual serão retomados os principais achados, limitações e implicações do trabalho, à luz do domínio de aplicabilidade aqui explicitado.

6 CONCLUSÕES

Este trabalho propôs uma metodologia generalizada para a aplicação do Método das Soluções Fundamentais (MSF) a problemas bidimensionais governados pelo operador de Laplace, fixando uma fronteira fictícia circular com pontos igualmente espaçados e varrendo sistematicamente o seu raio ($dvalue$) para avaliar o desempenho numérico. A formulação e a aplicação da metodologia basearam-se nas seguintes hipóteses fundamentais: (i) regime estacionário do fenômeno analisado, (ii) domínio homogêneo e isotrópico, (iii) governança do problema pela equação de Laplace, (iv) condições de contorno bem definidas e representativas, (v) ausência de inhomogeneidades internas explicitamente modeladas e (vi) disponibilidade limitada e espacialmente esparsa de dados observacionais. Essas hipóteses, discutidas ao longo da fundamentação teórica e da metodologia, delimitam o escopo de validade dos resultados apresentados e asseguram a coerência entre o modelo matemático, o algoritmo implementado e as análises realizadas.

A qualidade e a estabilidade das soluções foram monitoradas por meio do RMSE em pontos do domínio, do inverso do número de condicionamento ($rcond$) da matriz principal e de leituras pontuais no interior do domínio. Adicionalmente, foi implementado um teste de convergência por erros sucessivos, permitindo a seleção objetiva de valores operacionais de $dvalue$ dentro de um critério de tolerância previamente definido, antes do aparecimento de instabilidades numéricas. A abordagem foi aplicada a dois conjuntos distintos: (i) exemplos teóricos, envolvendo contornos retangular e circular unitários com soluções polinomial e exponencial conhecidas, totalizando doze cenários, e (ii) um estudo de caso associado à simulação do fluxo de água subterrânea em aquífero, a partir de dados observados de piezometria.

Nos exemplos teóricos, verificou-se que o aumento do número de pontos de contorno (N) acelerou a redução do RMSE e elevou a precisão pontual das soluções, porém à custa do estreitamento da janela operacional de $dvalue$, em função do decaimento antecipado das décadas de $rcond$. Esse efeito mostrou-se mais pronunciado para o contorno circular, que, embora tenha alcançado valores de RMSE ligeiramente inferiores, apresentou uma faixa útil de $dvalue$ mais restrita quando comparada ao contorno retangular. Em particular, foram identificados limites práticos de $dvalue$ em função de N (contorno circular unitário: $8 \rightarrow \approx 1211,5$; $16 \rightarrow \approx 25,1$; $32 \rightarrow \approx 3,58$; $64 \rightarrow$ inviável sem tratamento numérico), consolidando de forma objetiva o conceito de janela operacional do método. Observou-se, ainda, que a avaliação da estabilidade por meio de leituras pontuais no domínio frequentemente antecipa a

identificação de instabilidades em relação ao RMSE, evidenciando o caráter local da perda de estabilidade numérica.

No estudo de caso, a metodologia demonstrou capacidade de diagnosticar limites operacionais do MSF e de orientar a interpretação de desvios entre valores calculados e observados, sugerindo a influência de incertezas associadas às condições de contorno e/ou à presença de heterogeneidades e anisotropias não explicitamente representadas no modelo. Esse resultado reforçou a utilidade prática do procedimento proposto como ferramenta de pré-avaliação e triagem de configurações do MSF e de sistemas físicos reais, particularmente em contextos nos quais a obtenção de dados é onerosa ou restrita.

A validação nos exemplos teóricos mostrou que a metodologia identificou, de forma objetiva e reproduzível, valores de *dvalue* que maximizaram a precisão sem ultrapassar o limiar de estabilidade, tanto por métricas globais (RMSE) quanto por critérios pontuais, e que a leitura por décadas de *rcond* constituiu um marco operacional confiável para orientar a escolha de faixas admissíveis de *dvalue*. A principal inovação deste trabalho residiu na integração, em um fluxo único e generalizado, de: (i) uma fronteira fictícia circular com escalonamento sistemático por *dvalue*, (ii) métricas complementares de avaliação (RMSE, *rcond* e leituras pontuais) e (iii) um teste de convergência simples, aplicável tanto a problemas com solução analítica conhecida quanto a aplicações reais.

Diante desses resultados, conclui-se que a metodologia proposta apresentou potencial para se consolidar como um procedimento padrão em contextos específicos, sobretudo em cenários de simulação do fluxo de água subterrânea caracterizados por disponibilidade limitada de dados hidrogeológicos. Nessas situações, a dependência reduzida de parâmetros físicos adicionais e a possibilidade de avaliar, de forma objetiva, a estabilidade e a acurácia das soluções conferem ao MSF uma vantagem operacional relevante em relação a métodos tradicionais baseados em discretização de malha, posicionando-o como ferramenta complementar ou alternativa em estudos exploratórios, diagnósticos preliminares e análises de suporte à tomada de decisão.

Adicionalmente, a metodologia desenvolvida nesta tese preencheu a lacuna identificada na Revisão Sistemática da Literatura, a qual evidenciou a ausência de procedimentos claros, reproduzíveis e generalizáveis para a escolha dos parâmetros operacionais do MSF em aplicações práticas. Ao transformar a seleção da fronteira fictícia e de seus parâmetros em um processo guiado por métricas numéricas e critérios objetivos, este trabalho contribuiu diretamente para a operacionalização do método, superando abordagens empíricas e fragmentadas anteriormente reportadas na literatura.

Além dos avanços metodológicos e dos resultados obtidos, destaca-se como produto deste trabalho o *MSF-Root*, núcleo computacional desenvolvido e progressivamente aperfeiçoado ao longo da pesquisa. Esse algoritmo materializa a operacionalização do Método das Soluções Fundamentais por meio de uma estrutura modular, reproduzível e independente de linguagem de programação específica, sendo implementado e validado em diferentes ambientes computacionais. O *MSF-Root* concentra as rotinas essenciais para a montagem das matrizes do método, avaliação do condicionamento numérico e cálculo da aproximação, incorporando melhorias que reduziram o tempo computacional e ampliaram a estabilidade das soluções. Sua preservação estrutural ao longo das sucessivas reimplementações favorece a depuração, a reprodução dos resultados e a extensibilidade do método, configurando-o como um produto científico e computacional diretamente associado às contribuições desta tese.

Com base nos resultados obtidos, recomenda-se, para a aplicação do MSF, (i) a utilização integrada da tríade RMSE–rcond–ponto(s) na escolha de *dvalue*, (ii) a inclusão sistemática de pontos de controle internos, uma vez que a instabilidade tende a se manifestar inicialmente em nível local, (iii) cautela no uso de valores elevados de N em contornos circulares sem tratamento numérico adicional, (iv) a análise preliminar do comportamento de rcond em função de *dvalue* como indicativo geométrico das limitações do problema e (v), quando necessário, a adoção de técnicas de estabilização, como SVD/TSVD ou regularização de Tikhonov, para operar além da janela natural de estabilidade.

A tese demonstrou que é possível transformar a aplicação do MSF em problemas laplacianos em um procedimento operacional guiado por evidências numéricas, no qual a escolha de parâmetros deixa de ser empírica e passa a obedecer a uma lógica explícita de estabilidade, convergência e acurácia. A metodologia proposta amplia a reproduzibilidade e a comparabilidade entre simulações e posiciona o MSF como uma ferramenta robusta de triagem, diagnóstico e apoio à modelagem em sistemas físicos naturais. Quando o ajuste é consistente, o protocolo confirma a faixa operacional do método; quando não é, orienta de forma objetiva quais hipóteses e elementos do modelo físico-matemático devem ser revisitados.

6.1 Recomendações para trabalhos futuros

Os resultados obtidos nesta tese indicaram que o Método das Soluções Fundamentais (MSF) apresenta elevado potencial para a modelagem de problemas governados pela equação de Laplace, incluindo sua aplicação ao fluxo de água subterrânea em domínios bidimensionais.

No entanto, a consolidação do método como ferramenta mais abrangente requer avanços adicionais, os quais foram indicados a seguir como recomendações para trabalhos futuros.

Uma primeira linha de investigação refere-se à extensão do MSF para problemas transientes. A formulação clássica do método é intrinsicamente associada a problemas estacionários, o que limita sua aplicação em fenômenos com variação temporal. A incorporação de termos transientes, seja por meio de formulações híbridas ou pela combinação com técnicas auxiliares, permitiria ampliar significativamente o escopo do método, tornando-o aplicável a análises dinâmicas de sistemas físicos, incluindo a evolução temporal do fluxo subterrâneo.

Outra recomendação relevante diz respeito à aplicação do MSF em problemas tridimensionais. Embora a formulação bidimensional seja adequada para diversos problemas de engenharia, a modelagem em três dimensões representa um avanço natural, especialmente para aplicações hidrogeológicas mais complexas. Entretanto, essa extensão implica desafios matemáticos e computacionais adicionais, relacionados à definição das soluções fundamentais, à maior complexidade geométrica e ao aumento do custo computacional, os quais devem ser investigados de forma sistemática.

Recomenda-se também o aprofundamento dos estudos voltados à incorporação explícita de inhomogeneidades internas no domínio, tais como fontes, sumidouros e descontinuidades. A representação de poços de bombeamento ou de injeção, por exemplo, ainda constitui um desafio relevante na aplicação do MSF em sua formulação clássica. Avanços nesse sentido permitirão ampliar a aplicabilidade do método a cenários mais realistas, aproximando-o das demandas práticas da engenharia e da hidrogeologia.

Outra frente importante consiste na comparação sistemática do MSF com métodos numéricos tradicionais, como Diferenças Finitas e Elementos Finitos, sob diferentes configurações geométricas, condições de contorno e níveis de disponibilidade de dados. Estudos comparativos mais abrangentes, envolvendo análises de estabilidade numérica, sensibilidade a parâmetros e custo computacional, contribuiriam para delimitar com maior precisão os contextos nos quais o MSF se apresenta como alternativa ou complemento mais adequado.

Sugere-se, ainda, a aplicação do método em problemas hipotéticos e em bases de dados provenientes de projetos em andamento, especialmente em situações nas quais a aquisição de dados de campo é limitada ou onerosa. O uso de cenários controlados e dados sintéticos pode auxiliar na investigação do comportamento do método sob condições específicas, além de permitir a validação de novas estratégias de formulação e implementação do MSF antes de sua aplicação em sistemas reais mais complexos.

Recomenda-se a disponibilização pública do algoritmo *MSF-Root* em um repositório on-line, acompanhado de documentação técnica adequada. Essa iniciativa favoreceria a reprodutibilidade científica, a auditoria independente do código e o aprimoramento colaborativo da ferramenta, além de contribuir para a difusão do método junto à comunidade acadêmica e técnica. A disponibilização do código também pode estimular novas aplicações e extensões do MSF em diferentes áreas da engenharia.

REFERÊNCIAS

- AFONSO, M. H.; SOUZA, J. D.; ENSSLIN, S. R.; ENSSLIN, L. Como construir conhecimento sobre o tema de pesquisa? Aplicação do processo ProKnow-C na busca de literatura sobre avaliação do desenvolvimento sustentável. **Revista de Gestão Social e Ambiental**, São Paulo, v. 5, n. 2, p. 47-62, 2011. DOI: 10.5773/rgsa.v5i2.424. Disponível em: <https://rgsa.openaccesspublications.org/rgsa/article/view/424>. Acesso em: 14 nov. 2025.
- ALVES, C. J. S.; CHEN, C. S. A new method of fundamental solutions applied to nonhomogeneous elliptic problems. **Advances in Computational Mathematics**, [S. l.], v. 23, p. 125-142, 2005. DOI: 10.1007/s10444-004-1833-5.
- ANDERSON, M. P.; WOESSNER, W. W. **Applied groundwater modeling: simulation of flow and advective transport**. 2. ed. [S. l.]: Elsevier, 2015.
- ARIA, M.; CUCCURULLO, C. bibliometrix: an R-tool for comprehensive science mapping analysis. **Journal of Informetrics**, [S. l.], v. 11, n. 4, p. 959-975, 2017. DOI: 10.1016/j.joi.2017.08.007.
- ASCÊNCIO, A. F. G.; CAMPOS, E. A. V. **Fundamentos da programação de computadores: algoritmos, Pascal, C/C++ (padrão ANSI) e Java**. 3. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2012. ISBN 978-85-64574-16-8.
- ATKINSON, K. **The numerical solution of integral equations of the second kind**. Cambridge: Cambridge University Press, 2010. DOI: 10.1017/CBO9780511626340.
- ATLURI, S. N.; ZHU, T. A new meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics. **Computational Mechanics**, [S. l.], v. 22, p. 117-127, 1998. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s004660050346>. Acesso em: 14 nov. 2025.
- AXLER, S.; BOURDON, P.; RAMEY, W. **Harmonic function theory**. 2. ed. New York: Springer, 2001. Disponível em: <https://www.axler.net/HFT.pdf>. Acesso em: 14 nov. 2025.
- BACHU, S. Flow of variable-density formation water in deep sloping aquifers: review of methods of representation with case studies. **Journal of Hydrology**, [S. l.], v. 164, p. 19-38, 1995. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(94\)02578-Y](https://doi.org/10.1016/0022-1694(94)02578-Y). Acesso em: 14 nov. 2025.
- BARNETT, A. H.; BETCKE, T. Stability and convergence of the method of fundamental solutions for Helmholtz problems on analytic domains. **Journal of Computational Physics**, Amsterdam, v. 227, n. 14, p. 7003-7026, 2008. DOI: 10.1016/j.jcp.2008.04.008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.04.008>. Acesso em: 14 nov. 2025.
- BATCHELOR, G. K. **An introduction to fluid dynamics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511800955>. Acesso em: 14 nov. 2025.

BATEZELLI, A. Arcabouço tectono-estratigráfico e evolução das Bacias Caiuá e Bauru no Sudeste brasileiro. **Revista Brasileira de Geociências**, [S. l.], v. 40, n. 2, p. 265-285, jun. 2010.

BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media**. New York: Dover, 1988. Disponível em: <https://store.doverpublications.com/0486656756.html>. Acesso em: 14 nov. 2025.

BEAR, J. **Hydraulics of groundwater**. New York: McGraw-Hill, 1979.

BELYTSCHKO, T.; LU, Y. Y.; GU, L. Element-free Galerkin methods. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, [S. l.], v. 37, n. 2, p. 229-256, 1994. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/nme.1620370205>. Acesso em: 14 nov. 2025.

BOAS, M. L. **Mathematical methods in the physical sciences**. 2. ed. [S. l.]: John Wiley & Sons, 1983. ISBN 978-0-471-04409-3.

BOGOMOLNY, A. Fundamental solutions method for elliptic boundary value problems. **SIAM Review**, [S. l.], v. 22, n. 4, p. 770-807, 1985. DOI: 10.1137/1029140. Disponível em: <https://epubs.siam.org/doi/10.1137/0722040>. Acesso em: 14 nov. 2025.

BOUSSINESQ, J. Essai sur la théorie des eaux courantes. **Journal de mathématiques pures et appliquées**, Paris, t. 4, p. 335-376, 1878. Série 3. Disponível em: https://www.numdam.org/item/JMPA_1878_3_4_335_0.pdf. Acesso em: 14 nov. 2025.

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno**. 9. ed. Tradução e revisão de Valéria de Magalhães Iório. Rio de Janeiro: LTC, 2010. ISBN 978-85-216-1756-3.

BREBBIA, C. A. **The boundary element method for engineers**. London: Pentech Press, 1978.

BREBBIA, C. A.; DOMINGUEZ, J. **Boundary elements: an introductory course**. Boston; Southampton: WIT Press; Computational Mechanics Publications, 1992.

BREBBIA, C. A.; TELLES, J. C. F.; WROBEL, L. C. **Boundary element techniques: theory and applications in engineering**. Berlin: Springer, 1984.

BRITO, J. V. C. et al. Aplicação de elementos finitos na Odontologia: uma revisão de literatura. **Journal of Dentistry & Public Health**, Salvador, v. 8, n. 3, p. 90-93, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.17267/2238-2720revbahianaodonto.v8i3.1116>. Acesso em: 14 nov. 2025.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Numerical analysis**. 10. ed. Boston: Cengage Learning, 2016.

CAMPO GRANDE. Decreto n. 7.183, de 21 de setembro de 1995. Campo Grande, 1995.

CAMPO GRANDE. **Plano de manejo da Área de Proteção Ambiental dos Mananciais do Córrego Guariroba**: APA do Guariroba. Campo Grande, 2008.

CAMPO GRANDE. **Plano municipal de saneamento básico de Campo Grande**. Campo Grande, 2013.

CARSLAW, H. S.; JAEGER, J. C. **Conduction of heat in solids**. 2. ed. Oxford: Oxford University Press, 1959.

CAVAZZANA, G. H.; LASTORIA, G.; GABAS, S. G. Surface-groundwater interaction in unconfined sedimentary aquifer system in the Brazil's tropical wet region. **RBRH**, Porto Alegre, v. 24, n. 8, 2019. DOI: 10.1590/2318-0331.241920180136.

CHANTASIRIWAN, S. Methods of fundamental solutions for time-dependent heat conduction problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, [S. l.], v. 65, n. 11, p. 1855-1871, 2005. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.1549>. Acesso em: 14 nov. 2025.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Métodos numéricos para engenharia**. 5. ed. Porto Alegre: AMGH, 2011. Tradução técnica de Helena Castro.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Numerical methods for engineers**. 5. ed. New York: McGraw-Hill, 2008.

CHEN, C. S.; CHO, H. A.; GOLBERG, M. A. Some comments on the ill-conditioning of the method of fundamental solutions. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 30, n. 5, p. 405-410, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2006.01.001>. Acesso em: 14 nov. 2025.

CHEN, C. S.; KARAGEORGHIS, A.; LI, Y. On choosing the location of the sources in the MFS. **Numerical Algorithms**, Cham, v. 72, n. 1, p. 107-130, 2016. DOI: 10.1007/s11075-015-0036-0. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11075-015-0036-0>. Acesso em: 14 nov. 2025.

CHEN, W. et al. Boundary knot method for Poisson equations. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 29, n. 8, p. 756-760, 2005. DOI: 10.1016/j.enganabound.2005.04.001.

CHEN, W. New RBF collocation methods and kernel RBF with applications. *In*: GRIEBEL, M.; SCHWEITZER, M. A. (ed.). **Meshfree methods for partial differential equations**. Berlin: Springer, 2003. p. 75-86.

CHEN, W.; KARAGEORGHIS, A.; SMYRLIS, G. **The method of fundamental solutions: a meshless method**. [S. l.]: Dynamic Publishers, 2008. ISBN 1890888-04-4.

CHEN, W.; WANG, F. Z. A method of fundamental solutions without fictitious boundary. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 34, n. 5, p. 530-532, 2010. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S095579970900232X?via%3Dihub>. Acesso em: 14 nov. 2025.

CHENG, A. H.-D.; CHENG, D. T. Heritage and early history of the boundary element method. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 29, n. 3, p. 268-302,

2005. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0955799705000020>. Acesso em: 14 nov. 2025.

CHENG, A. H.-D.; HONG, Y. An overview of the method of fundamental solutions: solvability, uniqueness, convergence, and stability. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 120, p. 118-152, 2020. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0955799720302150>. Acesso em: 14 nov. 2025.

COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial difference equations of mathematical physics. **IBM Journal of Research and Development**, [S. l.], v. 11, n. 2, p. 215-234, 1967. Disponível em: <https://ieeexplore.ieee.org/document/5391985>. Acesso em: 14 nov. 2025.

CRANK, J.; NICOLSON, P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. **Advances in Computational Mathematics**, [S. l.], v. 6, p. 207-226, 1996. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF02127704>. Acesso em: 14 nov. 2025.

D'ALEMBERT, J. Recherches sur la courbe que forme une corde tendue mise en vibration. *In*: HISTOIRE de l'Académie royale des sciences et belles-lettres de Berlin pour l'année 1747. Paris, 1747. P. 214-219. Disponível em: <https://webusers.imj-prg.fr/~david.aubin/cours/Textes/Dalembert-HAB-1747-cordes-vibrantes.pdf>. Acesso em: 14 nov. 2025.

DARCY, H. **Les fontaines publiques de la ville de Dijon**. Paris: Victor Dalmont, 1856.

DAVIS, S. N. Porosity and permeability of natural materials. *In*: DE WIEST, R. J. M. (ed.). **Flow through porous media**. New York: Academic Press, 1969. p. 54-89.

DE SOUZA, M. G. **Um panorama bibliométrico do uso de isótopos ambientais na hidrogeologia no período 2000-2020: cenário mundial e perspectivas de estudos emergentes**. 2021. Monografia (Graduação em Geologia) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2021.

DEHGHAN, M.; ABBASZADEH, M. A combination of proper orthogonal decomposition-discrete empirical interpolation method (POD-DEIM) and meshless local RBF-DQ approach for prevention of groundwater contamination. **Computers & Mathematics with Applications**, [S. l.], v. 75, n. 4, p. 1390-1412, 2018. DOI: 10.1016/j.camwa.2017.11.012.

DOBRESCU, A. I. et al. Restricting evidence syntheses of interventions to English-language publications is a viable methodological shortcut for most medical topics: a systematic review. **Journal of Clinical Epidemiology**, [S. l.], v. 137, p. 209-217, 2021. DOI: 10.1016/j.jclinepi.2021.04.012.

DOMENICO, P. A.; SCHWARTZ, F. W. **Physical and chemical hydrogeology**. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, 1998.

DROMBOSKY, T. W.; MEYER, A. L.; LING, L. Applicability of the method of fundamental solutions. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 33, n. 5, p. 637-643, 2009. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0955799708001914>. Acesso em: 14 nov. 2025.

DUPOIT, J. **Études théoriques et pratiques sur le mouvement des eaux dans les canaux découverts et à travers les terrains perméables**. 2. éd. Paris: Dunod, 1863.

ENGQUIST, B.; MAJDA, A. Absorbing boundary conditions for numerical simulation of waves. **Mathematics of Computation**, [S. l.], v. 31, n. 139, p. 629-651, 1977. Disponível em: <https://www.jstor.org/stable/2005997>. Acesso em: 14 nov. 2025.

ENSSLIN, L. et al. Processo para evidencição do estado da arte aplicado ao tema gestão de produção científica. **Transinformação**, Campinas, v. 27, n. 3, p. 219-228, 2015. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/tinf/a/S6F75sK7gyVFwggwprd4Dcc/?lang=pt>. Acesso em: 14 nov. 2025.

EVANS, L. C. **Partial differential equations**. 2. ed. Providence: American Mathematical Society, 2010.

FAIRWEATHER, G.; KARAGEORGHIS, A. The method of fundamental solutions for elliptic boundary value problems. **Advances in Computational Mathematics**, Dordrecht, v. 9, p. 69-95, 1998. DOI: 10.1023/A:1018981221740. Disponível em: <https://doi.org/10.1023/A:1018981221740>. Acesso em: 14 nov. 2025.

FAN, C. M. et al. Localized method of fundamental solutions for solving two-dimensional Laplace and biharmonic equations. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 101, p. 188-197, 2019. DOI: 10.1016/j.enganabound.2018.11.008.

FEDOSEYEV, A. I.; FRIEDMAN, M. J.; KANSA, E. J. Improved multiquadric method for elliptic partial differential equations via PDE collocation on the boundary. **Computers & Mathematics with Applications**, [S. l.], v. 43, n. 3-5, p. 439-455, 2002. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0898-1221\(01\)00297-8](https://doi.org/10.1016/S0898-1221(01)00297-8). Acesso em: 14 nov. 2025.

FERNANDES, L. A.; COIMBRA, A. M. O Grupo Caiuá (Ks): revisão estratigráfica e contexto deposicional. **Revista Brasileira de Geociências**, [S. l.], v. 24, n. 3, p. 164-176, set. 1994.

FETTER, C. W. **Applied hydrogeology**. 4. ed. Long Grove: Waveland Press, 2018.

FORCHHEIMER, P. Wasserbewegung durch Boden. **Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure**, [S. l.], v. 45, p. 1782-1788, 1901.

FOURIER, J. **Théorie analytique de la chaleur**. Paris: Didot, 1822. Edição digital. Disponível em: <https://www3.nd.edu/~powers/ame.20231/fourier1822.pdf>. Acesso em: 14 nov. 2025.

FREEZE, R. A.; CHERRY, J. A. **Groundwater**. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1979. Disponível em: <https://fc79.gw-project.org/portugues/>. Acesso em: 14 nov. 2025.

FU, Z. J.; CHEN, W.; GU, Y. Burton-Miller-type singular boundary method for acoustic radiation and scattering. **Journal of Sound and Vibration**, [S. l.], v. 333, n. 16, p. 3776-

3793, 2014. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022460X14002909>. Acesso em: 14 nov. 2025.

GALVÃO, M. C. B.; RICARTE, I. L. M. Revisão sistemática da literatura: conceituação, produção e publicação. **Logeion: filosofia da informação**, Rio de Janeiro, v. 6, n. 1, p. 57-73, 2019. DOI: 10.21728/logeion.2019v6n1.p57-73.

GALVÃO, T. F.; PEREIRA, M. G. Revisões sistemáticas da literatura: passos para sua elaboração. **Epidemiologia e Serviços de Saúde**, Brasília, v. 23, n. 1, p. 183-184, 2014. DOI: 10.5123/S1679-49742014000100018.

GINGOLD, R. A.; MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, [S. l.], v. 181, p. 375-389, 1977. Disponível em: <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1977MNRAS.181..375G/abstract>. Acesso em: 14 nov. 2025.

GOLBERG, M. A. et al. Polynomial particular solutions for certain partial differential operators. **Numerical Methods for Partial Differential Equations**, [S. l.], v. 19, n. 1, p. 112-133, 2002. DOI: 10.1002/num.10033.

GOLBERG, M. A.; CHEN, C. S. The method of fundamental solutions for potential, Helmholtz and diffusion problems. In: GOLBERG, M. A. (ed.). **Boundary integral methods: numerical and mathematical aspects**. Southampton: Computational Mechanics Publications, 1999. p. 103-176.

GOLDBERG, D. What every computer scientist should know about floating-point arithmetic. **ACM Computing Surveys**, [S. l.], v. 23, n. 1, p. 5-48, 1991. DOI: 10.1145/103162.103163.

GORDIN, M. D. **Scientific Babel: how science was done before and after global English**. Chicago: University of Chicago Press, 2015.

GRIFFITHS, D. J. **Introduction to electrodynamics**. 3. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2017. DOI: 10.1017/9781108333511.

GU, Y.; FAN, C. M.; XU, R. P. Localized method of fundamental solutions for large-scale modeling of two-dimensional elasticity problems. **Applied Mathematics Letters**, [S. l.], v. 93, p. 8-14, 2019. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0893965919300424?via%3Dihub>. Acesso em: 14 nov. 2025.

GUNESHWOR, L.; ELDHO, T. I.; VINOD, K. A. Identification of groundwater contamination sources using meshfree RPCM simulation and particle swarm optimization. **Water Resources Management**, [S. l.], v. 32, p. 1517-1538, 2018. DOI: 10.1007/s11269-017-1885-1.

GUPTA, K. K.; MEEK, J. L. A brief history of the beginning of the finite element method. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, Hoboken, v. 39, p. 3761-3774, 1996.

GUSENBAUER, M. Search where you will find most: comparing the disciplinary coverage of 56 bibliographic databases. **Scientometrics**, [S. l.], v. 127, n. 10, p. 5953-5995, 2022.

GUSENBAUER, M.; HADDAWAY, N. R. Which academic search systems are suitable for systematic reviews or meta-analyses? Evaluating retrieval qualities of Google Scholar, PubMed, and 26 other resources. **Research Synthesis Methods**, [S. l.], v. 11, n. 2, p. 181-217, 2020.

HABERMAN, R. **Applied partial differential equations with Fourier series and boundary value problems**. 5. ed. Boston: Pearson, 2012.

HADAMARD, J. **Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations**. New Haven: Yale University Press, 1923. Reimpressões posteriores.

HAITJEMA, H. M. **Analytic element modeling of groundwater flow**. London: Academic Press, 1995. ISBN 0-12-316550-4.

HAITJEMA, H. M.; MITCHELL-BRUKER, S. Are water tables a subdued replica of the topography? **Ground Water**, [S. l.], v. 43, n. 6, p. 781-786, 2005. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2005.00090.x. Disponível em: <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2005.00090.x>. Acesso em: 14 nov. 2025.

HARTLING, L. et al. Grey literature in systematic reviews: a cross-sectional study of the contribution of non-English reports, unpublished studies and dissertations to the results of meta-analyses in child-relevant reviews. **BMC Medical Research Methodology**, [S. l.], v. 17, n. 64, 2017. DOI: 10.1186/s12874-017-0347-z.

HIGGINS, J. P. T.; GREEN, S. (ed.). **Cochrane handbook for systematic reviews of interventions**. Chichester: John Wiley & Sons, 2008. DOI: 10.1002/9780470712184.

HIGHAM, N. J. **Accuracy and stability of numerical algorithms**. 2. ed. Philadelphia: SIAM, 2002. DOI: 10.1137/1.9780898718027. Disponível em: <https://epubs.siam.org/doi/10.1137/1.9780898718027>. Acesso em: 14 nov. 2025.

HUBBERT, M. K. Darcy's law and the field equations of the flow of underground fluids. **Petroleum Transactions**, [S. l.], v. 207, p. 222-239, 1956.

INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION; INTERNATIONAL ELECTROTECHNICAL COMMISSION. **Guide 98-3:2008: uncertainty of measurement — part 3: guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM:1995)**. Geneva: ISO, 2008.

JAZAYERI, A.; WERNER, A. D. Boundary condition nomenclature confusion in groundwater flow modeling. **Groundwater**, [S. l.], v. 57, n. 5, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1111/gwat.12893>. Acesso em: 14 nov. 2025.

JOHANSSON, B. T.; LESNIC, D. A method of fundamental solutions for transient heat conduction in layered materials. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 32, n. 12, p. 1362-1367, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2009.04.014>. Acesso em: 14 nov. 2025.

JOHNSON, A. I.; MOSTON, R. P.; MORRIS, D. A. **Physical and hydrologic properties of water bearing deposits from core holes in the Las Banos-Kettleman City area, California.** Washington, DC: U.S. Geological Survey, 1968. (Professional Paper, 497-A). Disponível em: <https://pubs.usgs.gov/pp/0497a/report.pdf>. Acesso em: 14 nov. 2025.

KANSA, E. J. Multiquadrics: a scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics. II: solutions to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential equations. **Computers & Mathematics with Applications**, [S. l.], v. 19, n. 8-9, p. 147-161, 1990. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/089812219090270T>. Acesso em: 14 nov. 2025.

KARAGEORGHIS, A.; FAIRWEATHER, G. The method of fundamental solutions for axisymmetric potential problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, [S. l.], v. 44, n. 11, p. 1653-1669, 1999. Disponível em: [https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19990420\)44:11%3C1653::AID-NME558%3E3.0.CO;2-1](https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/(SICI)1097-0207(19990420)44:11%3C1653::AID-NME558%3E3.0.CO;2-1). Acesso em: 14 nov. 2025.

KATSURADA, M. Asymptotic error analysis of the charge simulation method in a Jordan region with an analytic boundary. **Journal of the Faculty of Science, Section IA, Mathematics**, Tokyo, v. 37, n. 3, p. 635-657, 1990.

KATSURADA, M. Charge simulation method using exterior mapping functions. **Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics**, Tóquio, v. 11, n. 1, p. 47-61, 1994. DOI: 10.1007/BF03167213. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF03167213>. Acesso em: 14 nov. 2025.

KATSURADA, M.; OKAMOTO, H. A mathematical study of the charge simulation method I. **Journal of the Faculty of Science, Section IA, Mathematics**, Tokyo, v. 35, n. 3, p. 507-518, 1988.

KATSURADA, M.; OKAMOTO, H. The collocation points of the fundamental solution method for the potential problem. **Computers & Mathematics with Applications**, Oxford, v. 31, n. 1, p. 123-137, 1996. DOI: 10.1016/0898-1221(95)00186-3. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0898-1221\(95\)00186-3](https://doi.org/10.1016/0898-1221(95)00186-3). Acesso em: 14 nov. 2025.

KERMACK, W. O.; MCKENDRICK, A. G. A contribution to the mathematical theory of epidemics. **Proceedings of the Royal Society A**, [S. l.], v. 115, n. 772, p. 700-721, 1927. Disponível em: <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1927.0118>. Acesso em: 14 nov. 2025.

KOMATITSCH, D.; TROMP, J. Introduction to the spectral element method for 3-D seismic wave propagation. **Geophysical Journal International**, [S. l.], v. 139, n. 3, p. 806-822, 1999. DOI: 10.1046/j.1365-246X.1999.00967.x. Disponível em: <https://doi.org/10.1046/j.1365-246X.1999.00967.x>. Acesso em: 14 nov. 2025.

KU, C.-Y.; XIAO, J.-E.; LIU, C.-Y. The method of fundamental solutions for three-dimensional nonlinear free surface flows using the iterative scheme. **Applied Sciences**, [S. l.],

v. 9, n. 8, art. 1715, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/app9081715>. Acesso em: 14 nov. 2025.

KUPRADZE, V. D.; ALEKSIDZE, M. A. The method of functional equations for the approximate solution of certain boundary value problems. **USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics**, [S. l.], v. 4, p. 82-112, 1964. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0041555364900060>. Acesso em: 14 nov. 2025.

LEITHOLD, L. **O cálculo com geometria analítica**. 3. ed. São Paulo: Harbra, 1994. v. 1. Tradução de Cyro de Carvalho Patarra.

LEVEQUE, R. J. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems**. Philadelphia: SIAM, 2007. Disponível em: <https://epubs.siam.org/doi/book/10.1137/1.9780898717839>. Acesso em: 14 nov. 2025.

LI, J.; CHEN, Y.; PEPPER, D. W. Radial basis function method for 1-D and 2-D groundwater contaminant transport modeling. **Computational Mechanics**, [S. l.], v. 32, p. 10-15, 2003. DOI: 10.1007/s00466-003-0447-y.

LI, J.; GUAN, Y.; WANG, G.; WANG, G.; ZHANG, H.; LIN, J. A meshless method for topology optimization of structures under multiple load cases. **Structures**, [S. l.], v. 25, p. 173-179, 2020. DOI: 10.1016/j.istruc.2020.03.005. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S2352012420300886>. Acesso em: 14 nov. 2025.

LI, M.; CHEN, C. S.; KARAGEORGHIS, A. The MFS for the solution of harmonic boundary value problems with non-harmonic boundary conditions. **Computers & Mathematics with Applications**, [S. l.], v. 66, n. 11, p. 2400-2424, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2013.09.004>. Acesso em: 14 nov. 2025.

LI, X. On convergence of the method of fundamental solutions for solving the Dirichlet problem of Poisson's equation. **Advances in Computational Mathematics**, [S. l.], v. 23, n. 1, p. 265-277, 2005. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10444-004-1782-z>. Acesso em: 14 nov. 2025.

LIU, C. S. An equilibrated method of fundamental solutions to choose the best source points for the Laplace equation. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 36, n. 8, p. 1235-1245, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2012.03.001>. Acesso em: 14 nov. 2025.

LIU, C.; YEIH, W.; ATLURI, S. N. On solving the ill-conditioned system $Ax=b$: general-purpose conditioners obtained from the boundary-collocation solution of the Laplace equation, using Trefftz expansions with multiple length scales. **Computer Modeling in Engineering & Sciences**, [S. l.], v. 44, n. 3, p. 281-312, 2009. DOI: 10.3970/cmcs.2009.044.281.

LIU, G. R. **Meshfree methods: moving beyond the finite element method**. 2. ed. Boca Raton: CRC Press, 2009.

LIU, G. R.; GU, Y. T. A meshfree weak-strong (MWS) form method. *In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE BOUNDARY ELEMENT METHOD, 25., 2003. Proceedings [...].* [S. l.]: [s. n.], 2003. p. 339-348.

LIU, G. R.; GU, Y. T. **An introduction to meshfree methods and their programming.** Dordrecht: Springer, 2005. Disponível em: <https://link.springer.com/book/10.1007/1-4020-3468-7>. Acesso em: 14 nov. 2025.

LOTTI, R. S. et al. Aplicabilidade científica do método dos elementos finitos. **Revista Dental Press de Ortodontia e Ortopedia Facial**, Maringá, v. 11, n. 2, p. 35-43, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/S1415-54192006000200006>. Acesso em: 14 nov. 2025.

LUCY, L. B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. **Astronomical Journal**, [S. l.], v. 82, p. 1013-1024, 1977. Disponível em: https://ui.adsabs.harvard.edu/link_gateway/1977AJ.....82.1013L/doi:10.1086/112164. Acesso em: 14 nov. 2025.

MAIER, R. et al. Revealing vertical aquifer heterogeneity and hydraulic anisotropy by pumping partially penetrating wells. **Hydrogeology Journal**, [S. l.], v. 30, p. 463-477, 2022. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10040-022-02458-9>. Acesso em: 14 nov. 2025.

MATEGAONKAR, M. M.; ELDHO, T. I. Groundwater remediation optimization using a point collocation method and particle swarm optimization. **Environmental Modelling & Software**, [S. l.], v. 32, p. 37-48, 2012.

MATHON, R.; JOHNSTON, R. L. The approximate solution of elliptic boundary-value problems by fundamental solutions. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, [S. l.], v. 14, n. 4, p. 638-650, 1977. Disponível em: <https://www.jstor.org/stable/2156484>. Acesso em: 14 nov. 2025.

MATO GROSSO DO SUL. Secretaria de Estado de Meio Ambiente, do Planejamento, da Ciência e Tecnologia. **Plano estadual de recursos hídricos de Mato Grosso do Sul.** Campo Grande: Editora UEMS, 2010.

MCDONALD, M. G.; HARBAUGH, A. W. **A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model.** Reston: U.S. Geological Survey, 1988. (Techniques of Water-Resources Investigations, book 6, chap. A1). Disponível em: <https://pubs.usgs.gov/publication/twri06A1>. Acesso em: 14 nov. 2025.

MEENAL, M.; ELDHO, T. I. Simulation of groundwater flow in an unconfined aquifer using meshfree point collocation method. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 35, n. 4, p. 700-707, 2011.

MENGHINI, R.; PACKER, A. L. Is there science beyond English? Initiatives to increase the quality and visibility of non-English publications might help to break down language barriers in scientific communication. **EMBO Reports**, [S. l.], v. 8, n. 2, p. 112-116, 2007.

MOED, H. F. **Citation analysis in research evaluation.** Dordrecht: Springer, 2005.

MOHER, D. et al. Preferred reporting items for systematic reviews and meta-analyses: the PRISMA statement. **International Journal of Surgery**, London, v. 8, n. 5, p. 336-341, 2010. DOI: 10.1016/j.ijssu.2010.02.007. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijssu.2010.02.007>. Acesso em: 14 nov. 2025.

MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C. **Applied statistics and probability for engineers**. 6. ed. Hoboken: Wiley, 2014.

MUÑOZ-ALEGRÍA, J. A. et al. A bibliometric-systematic literature review (B-SLR) of machine learning-based water quality prediction: trends, gaps, and future directions. **Water**, [S. l.], v. 17, n. 20, 2025.

MURRAY, J. D. **Mathematical biology**: I. An introduction. 3. ed. New York: Springer, 2002. DOI: 10.1007/b98868. Disponível em: <https://link.springer.com/book/10.1007/b98868>. Acesso em: 14 nov. 2025.

MUSSA, K. R.; MJEMAH, I. C.; MUZUKA, A. N. N. A review on the state of knowledge, conceptual and theoretical contentions of major theories and principles governing groundwater flow modeling. **Applied Water Science**, [S. l.], v. 10, art. 149, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s13201-020-01202-6>. Acesso em: 14 nov. 2025.

NAYROLES, B.; TOUZOT, G.; VILLON, P. Generalizing the finite element method: diffuse approximation and diffuse elements. **Computational Mechanics**, [S. l.], v. 10, p. 307-318, 1992. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF00364252>. Acesso em: 14 nov. 2025.

NOURANI, V.; MOUSAVI, S. P. Spatiotemporal groundwater level modeling using hybrid artificial intelligence-meshless method. **Journal of Hydrology**, [S. l.], v. 536, p. 10-25, 2016. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2016.02.030.

ÖZISIK, M. N. **Heat conduction**. 2. ed. New York: Wiley, 1993.

PAGANI, R. N.; KOVALESKI, J. L.; RESENDE, L. M. M. Methodi Ordinatio: a proposed methodology to select and rank relevant scientific papers encompassing the impact factor, number of citation, and year of publication. **Scientometrics**, Dordrecht, v. 105, n. 3, p. 2109-2135, 2015. DOI: 10.1007/s11192-015-1744-x.

PANG, G.; CHEN, W.; SZE, K. Y. A comparative study of finite element and finite difference methods for two-dimensional space-fractional advection-dispersion equation. **Advances in Applied Mathematics and Mechanics**, [S. l.], v. 8, n. 1, p. 166-186, 2016. DOI: 10.4208/aamm.2014.m693.

PARSASADR, H. et al. Development of a finite element groundwater flow model to test drainage management strategies for the expansion of the Dareh-Zar open pit mine, Iran. **Hydrogeology Journal**, Heidelberg, v. 32, p. 1145-1165, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10040-024-02792-0>.

PENG, Y. X.; ZHANG, A. M.; MING, F. R. A 3D meshfree crack propagation algorithm for the dynamic fracture in arbitrary curved shell. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [S. l.], v. 367, p. 113139, 2020.

PINTO-COELHO, R. M.; HAVENS, K. **Gestão de recursos hídricos em tempos de crise**. [S. l.]: Artmed, 2016.

QUADROS, R. S. de; BORTOLI, A. L. de. **Fundamentos de cálculo numérico para engenheiros**. Porto Alegre: [s. n.], 2009.

QUARTERONI, A.; SACCO, R.; SALERI, F. **Numerical mathematics**. New York: Springer, 2000.

RAMACHANDRAN, P. A. Method of fundamental solutions: singular value decomposition analysis. **Communications in Numerical Methods in Engineering**, [S. l.], v. 18, n. 11, p. 789-801, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/cnm.537>. Acesso em: 14 nov. 2025.

REDDY, J. N. **An introduction to the finite element method**. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 2006.

RICHTMYER, R. D.; MORTON, K. W. **Difference methods for initial-value problems**. 2. ed. New York: Wiley-Interscience, 1967.

RODRIGUES NETO, G. C. et al. Meshless method using fundamental solution applied to computational simulation of groundwater flow of real aquifers: study case (Guariroba's APA and Juazeiro do Norte). **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, [S. l.], v. 25, e38, p. 1-15, 2020.

RODRIGUES NETO, G. C. **Método sem malha utilizando solução fundamental aplicado à simulação computacional de fluxo de água subterrânea em aquíferos reais**. 2020. 135 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2020.

ROSSI, M. A. **Design and analysis of a composite fuselage**. 2008. Dissertação (Mestrado em Engenharia Aeronáutica) – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, 2008.

ŠARLER, B. Solution of potential flow problems by the modified method of fundamental solutions: formulations with the single layer and the double layer fundamental solutions. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 33, n. 12, p. 1378-1386, 2009.

SCHWEIZER, B. Darcy's law and groundwater flow modelling. **Snapshots of Modern Mathematics from Oberwolfach**, [S. l.], n. 7, p. 1-11, 2015.

SEGERLIND, L. J. **Applied finite element analysis**. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, 1984.

SIMMONS, C. T. Happy 200th birthday Mr Darcy and our thanks for your law! A tribute editorial celebrating the life and times of the father of our science, Henry Darcy (1803-1858). **Hydrogeology Journal**, [S. l.], v. 11, p. 611-614, 2003.

SINDHUSUTA, S. et al. A text-mining-based approach for conducting literature review of selected meshfree methods. **Computer Assisted Methods in Engineering and Science**, [S. l.], v. 28, n. 4, p. 373-397, 2021.

SLOAN, D. M.; SÜLI, E.; VANDEWALLE, S. (ed.). Partial differential equations. *In*: NUMERICAL analysis 2000. Oxford: Oxford University Press, 2001. v. 7. Disponível em: <https://pureportal.strath.ac.uk/en/publications/partial-differential-equations/>. Acesso em: 14 nov. 2025.

SMITH, G. D. **Numerical solution of partial differential equations**: finite difference methods. 3. ed. [S. l.]: Oxford University Press, 1985.

SMYRLIS, Y. S.; KARAGEORGHIS, A. Some aspects of the method of fundamental solutions for harmonic problems. **Journal of Scientific Computing**, [S. l.], v. 16, p. 341-371, 2001. DOI: 10.1023/A:1012873712701.

STEWART, J. **Cálculo**: volume 1. 7. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2013.

STRACK, O. D. L. **Groundwater mechanics**. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1989.

STRACK, O. D. L. Theory and applications of the analytic element method. **Reviews of Geophysics**, [S. l.], v. 41, n. 2, 2003. DOI: 10.1029/2002RG000111. Disponível em: <https://doi.org/10.1029/2002RG000111>. Acesso em: 14 nov. 2025.

STRAUSS, W. A. **Partial differential equations**: an introduction. 2. ed. Hoboken: Wiley, 2007.

STRIKWERDA, J. C. **Finite difference schemes and partial differential equations**. 2. ed. Philadelphia: SIAM, 2004.

SUBYANI, A. M.; SEN, Z. Geostatistical modelling of the Wasia aquifer in central Saudi Arabia. **Journal of Hydrology**, [S. l.], v. 110, p. 295-314, 1989. DOI: 10.1016/0022-1694(89)90193-5.

TAYLOR, J. R. **An introduction to error analysis**: the study of uncertainties in physical measurements. 2. ed. Sausalito: University Science Books, 1997.

THOMÉE, V. From finite differences to finite elements: a short history of numerical analysis of partial differential equations. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, [S. l.], v. 128, p. 1-54, 2001. DOI: 10.1016/S0377-0427(00)00507-0.

TIMOSHENKO, S. P.; GERE, J. M. **Mechanics of materials**. New York: Van Nostrand Reinhold, 1972.

TIMOSHENKO, S. P.; GOODIER, J. N. **Theory of elasticity**. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 1970.

TREFETHEN, L. N.; BAU, D., III. **Numerical linear algebra**. 25th anniversary ed. Philadelphia: SIAM, 2022. DOI: 10.1137/1.9781611977165. Disponível em: <https://epubs.siam.org/doi/10.1137/1.9781611977165>. Acesso em: 12 nov. 2025.

TUCCI, C. E. M. (org.). **Hidrologia: ciência e aplicação**. 4. ed. Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2009.

UECHI, D. A.; GABAS, S. G.; LASTORIA, G. Analysis of the heavy metals in the Bauru Aquifer System in Mato Grosso do Sul. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, [S. l.], v. 22, n. 1, p. 155-167, jan./fev. 2017.

VAN ECK, N. J.; WALTMAN, L. Software survey: VOSviewer, a computer program for bibliometric mapping. **Scientometrics**, Dordrecht, v. 84, n. 2, p. 523-538, 2010. DOI: 10.1007/s11192-009-0146-3. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11192-009-0146-3>. Acesso em: 14 nov. 2025.

VOSVIEWER. **VOSviewer: visualizing scientific landscapes**. Leiden: Centre for Science and Technology Studies, Leiden University, 2025. Disponível em: <https://www.vosviewer.com/>. Acesso em: 14 nov. 2025.

VULOVIC, S. et al. Advancement of finite element method solver used in dam safety monitoring system by interpolation of pore pressure and temperature values. **Applied Sciences**, Basel, v. 14, n. 21, art. 9680, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/app14219680>. Acesso em: 12 nov. 2025.

WANG, F. et al. Localized MFS for the inverse Cauchy problems of two-dimensional Laplace and biharmonic equations. **Applied Mathematics and Computation**, [S. l.], v. 364, p. 124658, 2020. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0096300319306502>. Acesso em: 14 nov. 2025.

WANG, F. Z.; ZHENG, K. H. The method of fundamental solutions for steady-state groundwater flow problems. **Journal of the Chinese Institute of Engineers**, [S. l.], v. 39, n. 2, p. 236-242, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/02533839.2015.1082936>. Acesso em: 14 nov. 2025.

WINTER, T. C.; HARVEY, J. W.; FRANKE, O. L.; ALLEY, W. M. **Ground water and surface water: a single resource**. Denver: U.S. Geological Survey, 1998. (U.S. Geological Survey Circular, 1139).

XIANG, S. et al. Groundwater pollution simulation: a systematic review and bibliometric analysis from 1990 to 2024. **Environment, Development and Sustainability**, [S. l.], v. 27, n. 8, p. 18021-18049, 2025.

XIAO, J.-E. et al. On solving free surface problems in layered soil using the method of fundamental solutions. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, [S. l.], v. 83, p. 96-106, 2017. DOI: 10.1016/j.enganabound.2017.07.011.

YOUNG, D. L. et al. The method of fundamental solutions and condition number analysis for inverse problems of Laplace equation. **Computers & Mathematics with Applications**, [S. l.], v. 55, n. 6, p. 1189-1200, 2008.

ZHANG, L. P. et al. Stability analysis of the method of fundamental solutions with smooth closed pseudo-boundaries for Laplace's equation: better pseudo-boundaries. **Numerical Algorithms**, Cham, v. 89, p. 1183-1222, 2022. DOI: 10.1007/s11075-021-01150-5. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11075-021-01150-5>. Acesso em: 12 nov. 2025.

ZHENG, C.; BENNETT, G. D. **Applied contaminant transport modeling**. 2. ed. New York: Wiley, 2002. ISBN 978-0-471-38477-9.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.; ZHU, J. Z. **The finite element method: its basis and fundamentals**. 6. ed. Oxford: Elsevier, 2005.