

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

LEONARDO AGUIAR DO AMARAL

**ESTUDO DE ARENITOS ATRAVÉS DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS DE
RECONSTRUÇÃO 3D EM MEIOS FRACTAIS E PERCOLATIVOS**

VITÓRIA
2015

LEONARDO AGUIAR DO AMARAL

**ESTUDO DE ARENITOS ATRAVÉS DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS DE
RECONSTRUÇÃO 3D EM MEIOS FRACTAIS E PERCOLATIVOS**

COMISSÃO EXAMINADORA:

Prof. Dr. Humberto Belich Jr (Orientador)
Universidade Federal do Espírito Santo - UFES

Prof. Dr. Carlos Augusto Passos
Universidade Federal do Espírito Santo - UFES

Prof. Dr. Thiago Prudêncio de Oliveira
Universidade Federal do Maranhão - UFMA

VITÓRIA
2015

LEONARDO AGUIAR DO AMARAL

**ESTUDO DE ARENITOS ATRAVÉS DE PROCESSOS
ESTOCÁSTICOS DE RECONSTRUÇÃO 3D EM MEIOS
FRACTAIS E PERCOLATIVOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica, na área de concentração de Ciências Mecânicas.

ORIENTADOR: PROF. DR. HUMBERTO BELICH JUNIOR

Vitória

22 de maio de 2015

© 2015, Leonardo Aguiar do Amaral.
Todos os direitos reservados.

Aguiar do Amaral, Leonardo

D1234p ESTUDO DE ARENITOS ATRAVÉS DE PROCESSOS
ESTOCÁSTICOS DE RECONSTRUÇÃO 3D EM MEIOS
FRACTAIS E PERCOLATIVOS / Leonardo Aguiar do
Amaral. — Vitória, 2015
xiv, 83 f. : il. ; 29cm

Dissertação (mestrado) — Universidade Federal do
Espírito Santo

Orientador: Prof. Dr. Humberto Belich junior

1. — Dissertações. 2. — Dissertações. I. Orientador.
II. Título.

CDU 000.0*00.00

[Folha de Aprovação]

Quando a secretaria do Curso fornecer esta folha,
ela deve ser digitalizada e armazenada no disco em formato gráfico.

Se você estiver usando o `pdflatex`,
armazene o arquivo preferencialmente em formato PNG
(o formato JPEG é pior neste caso).

Se você estiver usando o `latex` (não o `pdflatex`),
terá que converter o arquivo gráfico para o formato EPS.

Em seguida, acrescente a opção `approval={nome do arquivo}`
ao comando `\ppgcufig`.

Se a imagem da folha de aprovação precisar ser ajustada, use:
`approval=[ajuste] [escala] {nome do arquivo}`
onde *ajuste* é uma distância para deslocar a imagem para baixo
e *escala* é um fator de escala para a imagem. Por exemplo:
`approval=[-2cm] [0.9] {nome do arquivo}`
desloca a imagem 2cm para cima e a escala em 90%.

*À minha esposa e filhos,
Minha fonte de inspiração.*

Agradecimentos

Primeiramente agradeço á minha esposa Desiree Victor e aos meus filhos Arthur e Bianca, pelo apoio, paciência, carinho e parceria.

À CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro e provimento dos meios necessários para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos professores Dr. Humberto Belich, Dr. Marcos Tadeu e Carlos Augusto Passos pela orientação e colaboração, desde a época da graduação.

Ao professor Thiago Prudêncio por ter aceito o convite para participar da banca examinadora deste trabalho.

Aos pesquisadores do Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas (LMPT) do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina. Em especial o professor Dr. Paulo Cesar Philippi pela colaboração ao ceder a licença do software IMAGO, fundamental para a produção deste trabalho. Agradecemos também a Dr^a Iara Frangiotti Mantovani pelo auxílio e consultoria do software.

Aos colegas e amigos: Cássio Cecato Favarato, Alan Romanel, Amanda Ziviani, Evandro Giuseppe Betini, Ivan Meloti Capucho, Túlio Permino, Gislane Giro, Cristina Ferreira da Silveira, Josué Lima Lopes, Arthur Sant'Ana Cavichini, Leandro Amorim, Gustavo Medeiros Claudino, Cesar Tonon e a todos aqueles que de alguma forma contribuíram com este trabalho.

Aos meus pais e irmãos: Jaime Delfino, Nilza Maria, Luciana Aguiar e Léo Jr.

À Universidade Federal do Espírito Santo e ao programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - PPGEM.

“Arrisque-se: se você vencer, será feliz; se perder, será sábio.”

(PETER KREEFT)

Resumo

Este trabalho tem como objetivo investigar aspectos morfológicos de materiais porosos através de técnicas de reconstrução de imagens digitais. Especificamente, iremos utilizar processos estatísticos de análise para realizar uma reconstrução 3-D, que significa fazer uma estimativa tridimensional de uma estrutura porosa através de uma única imagem 2-D da amostra estudada. Isso é feito através de métodos de reconstrução 2-D que consistem na aplicação de processos estocásticos em imagens 2-D de uma amostra para gerar diversas outras imagens, também 2-D, que conservam algumas das características topológicas da imagem original. Na etapa seguinte, denominada reconstrução 3-D, executamos o empilhamento dessas imagens para obter uma estrutura tridimensional que também mantém essas características, citamos como exemplo: Porosidade, correlação entre pontos, distribuição de tamanho de grãos e de poros, entre outras. Publicações recentes indicam que o processamento de imagem digital da amostra porosa têm se mostrado uma excelente alternativa aos métodos tradicionais de análise, pois garante boa reprodutibilidade, reduz custos e tempo de processamento além de fornecer informações topológicas da amostra estudada. Apesar das técnicas discutidas nesta dissertação serem aplicáveis a materiais porosos em geral, nossos estudos concentram-se na investigação de um material particular denominado Arenito, onde serão realizadas simulações em algumas imagens 2-D de amostras publicadas em artigos científicos da área, para posterior comparação dos resultados. Materiais porosos, de uma maneira geral, podem ser considerados meios complexos e desordenados cuja formação se dá de maneira aleatória, por isso também discutiremos como as teorias de percolação e fractal podem contribuir na melhoria das técnicas de reconstrução.

Palavras-chave: Materiais Porosos, Fractais, Teoria da Percolação, Reconstrução 3D, Reconhecimento Simulado.

Abstract

This work aims to investigate morphology of porous materials through digital image reconstruction techniques. Specifically, we will use statistical analysis processes to perform a 3-D reconstruction, which means making a three-dimensional estimate of a porous structure through a single 2-D image of the sample. This is done through 2-D reconstruction methods involving the application of stochastic processes on 2-D images of a sample to generate various other images, too 2-D, which retain some of the topological features of the original image. The next step, called 3-D reconstruction performed stacking these images to obtain a three dimensional structure that also maintains these characteristics, we cite as an example: porosity, correlation points, grain size and pore distribution, among others. Recent publications indicate that the digital image processing of the porous sample have been shown to be an excellent alternative to traditional methods of analysis, it ensures good reproducibility, reduces costs and processing time as well as providing topological information of the sample. Although the techniques discussed in this paper are applicable to porous materials in general, our studies focus on the investigation of a particular material called Sandstone, which will be conducted simulations in some 2-D images of samples published in scientific articles in the field for later comparison results. Porous materials, in general, may be considered complex and cluttered means whose formation takes place randomly, so we will also discuss how percolation theory and fractal can contribute to the improvement of reconstruction techniques.

Keywords: Porous material, Fractal, Percolation theory, 3D Reconstruction, Simulated annealing.

Lista de Figuras

2.1	Auto-Similaridade: Fractais Isotrópicos.	4
2.2	Auto-Afinidade: Fractais Anisotrópicos.	5
2.3	Triângulo de Sierpinsky - Formação com crescimento interior ao iniciador.	5
2.4	Triângulo de Sierpinsky - Formação com crescimento exterior ao iniciador.	5
2.5	Quadro comparativo: Fractais determinístico e estatístico.	6
2.6	Curva de Koch.	7
2.7	Processo Iterativo da Formação Curva de Koch.	7
2.8	Relação entre Comprimento Linear, Massa e Dimensão obtidos através da Geometria Euclidiana.	7
2.9	Box Conting: Dimensão fractal da costa da Grã-Bretanha.	11
2.10	Box Conting: Determinação Gráfica da Dimensão fractal da costa da Inglaterra.	12
2.11	Massa no Triângulo de Sierpinsky.	13
2.12	Decaimento da densidade fractal no triângulo de Sierpinsky.	14
2.13	Formação Quadrado de Sierpinsky.	16
2.14	Decaimento da densidade fractal no quadrado de Sierpinsky.	17
3.1	Exemplo de malha quadrada	19
3.2	Exemplo de outras malhas importantes.	20
3.3	Clusters: Exemplo de quatro clusters distribuídos em uma malha.	20
3.4	Ocupação da malha 10 por 10: (a) 20/100 de ocupação, (b) 30/100 de ocupação, (c) 50/100 de ocupação e (d) 70/100 de ocupação.	21
3.5	Probabilidade de percolação para uma malha finita.	21
3.6	Malha unidimensional infinita.	22
3.7	Tamanho de cluster de corte.	25
3.8	Divergência do Tamanho Médio de Cluster.	27
3.9	Distribuição de clusters: a) Cluster com 1 sítio ocupado, b) Cluster com 2 sítios ocupados e c) Cluster com 3 sítios ocupados.	30
4.1	Representação do processo de AMOSTRAGEM e QUANTIZAÇÃO de imagens. A: Imagem real, B: Imagem amostrada, C: Imagem quantizada.	33

4.2	Matriz $Im(i,j)$ de tamanho M por N. Cada elemento desta matriz é denominado pixel.	34
4.3	A: Imagem original, B: Imagem codificada em tons de cinza 8 bits/pixel.	35
4.4	Imagens com seus respectivos histogramas: Exemplo de imagem após ajuste de contraste.	36
4.5	Função de correlação two-points: Possibilidades de aplicação	41
4.6	Representação matricial de imagens: Tipos de malhas	45
4.7	Função de correlação two-points de referência aplicada à reconstrução de malhas quadradas	46
4.8	Malhas Hexagonais: Contagem de pontos e aplicação de condições de contorno periódicas	47
4.9	Função de correlação two-points de referência aplicada à reconstrução de malhas Hexagonais	47
4.10	Exemplo de sistemas com mesma representação matricial, mesmo com a adoção de diferentes malhas: Quadrada ou hexagonal	48
5.1	Representação esquemática da reconstrução SPME	57
5.2	Decaimento do percentual de aceite da permuta entre pixels	60
5.3	Exemplo de reconstrução via recozimento simulado convencional	61
5.4	Imagem segmentada tomada como exemplo na reconstrução por recozimento simulado	61
5.5	Representação do método box-covering para determinação da função de controle fractal.	62
5.6	Recozimento simulado melhorado - Exposição de todas as etapas da aplicação do Algoritmo de Intermutabilidade Múltipla.	63
5.7	Comparação entre as funções de controle da amostra reconstruída 3D e amostra de referência.	63
5.8	Exemplo de reconstrução 3D via recozimento simulado melhorado como o algoritmo de Intermutabilidade Múltipla.	65
5.9	Simulação microestrutural após reconstrução via recozimento simulado melhorado.	65
6.1	Segmentação de imagem digital	67
6.2	Histograma de imagem em tons de cinza	68
6.3	Gaussiana Truncada: Imagens reconstruídas a partir de diferentes parâmetros a partir da mesma imagem 2-D segmentada.	69
6.4	Determinação da melhor configuração para reconstrução via Gaussiana truncada	69
6.5	Exemplo de distribuição de tamanho de poro	70
6.6	Exemplo de reconstrução 3-D via Gaussiana Truncada	70
6.7	Esferas sobrepostas - ES: Resultado de distribuição de tamanho de poro e função de correlação. Técnica aplicada na amostra apresentada na figura 6.1	71

6.8	Exemplo de distribuição de tamanho de poro em amostras reconstruídas via Esferas Sobrepostas	71
6.9	Exemplo de distribuição de tamanho de poro em amostras reconstruídas via Esferas Sobrepostas	72
6.10	Segmentação de imagem extraída da publicação de COBALEDA 2000 [1]	73
6.11	Esferas sobrepostas - ES: Exemplo de distribuição de tamanho de poro e função de conectividade. Técnica aplicada na amostra apresentada na figura 6.1	74
6.12	Várias secções da amostra reconstruída via SPME	74
6.13	Exemplo de Reconstrução 3D via SPME	75

Lista de Tabelas

2.1	Box Counting.	12
2.2	Triângulo de Sierpinsky: Decaimento da Densidade.	13
2.3	Quadrado de Sierpinsky: Decaimento da Densidade.	16
3.1	Malhas e suas probabilidades críticas.	22
3.2	Probabilidade de ocupação de sítios.	23
5.1	Parâmetros Topológicos da amostra de referência e da amostra reconstruída . . .	65
6.1	Quadro resumo: Resultado do processo de segmentação e determinação da po- rosidade.	68
6.2	Dimensão fractal das configurações.	70
6.3	Dimensão fractal das seções transversais da amostra reconstruída.	72
6.4	Quadro resumo: Resultado do processo de segmentação e determinação da po- rosidade - SPME.	73
6.5	Dimensão fractal de seções da imagem 3D reconstruída por SPME	75

Sumário

Agradecimentos	v
Resumo	vii
Abstract	viii
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xii
1 INTRODUÇÃO	1
2 FRACTAIS	3
2.1 Introdução aos Fractais	3
2.2 Auto-Similaridade e Comportamento Fractal	3
2.3 Auto-Afinidade	4
2.4 A construção de Fractais	5
2.5 A Dimensão Fractal	6
2.5.1 Densidade Linear	8
2.5.2 Densidade Superficial	8
2.5.3 Densidade Volumétrica	9
2.5.4 Contagem de Caixas - Box Counting	11
2.6 A Densidade de Fractais	12
3 TEORIA DA PERCOLAÇÃO	18
3.1 Introdução	18
3.2 Definições Preliminares	18
3.3 Percolação em 1d	22
3.4 Distribuição do Número de Cluster	29
3.5 Hipótese de Escala	29
4 PROCESSAMENTO DE IMAGEM DIGITAL	32
4.1 Imagem	32

4.2	Imagem Digital	32
4.3	Imagem em Tons de Cinza	34
4.4	Histograma de Imagens Digitais	35
4.5	Segmentação	35
4.5.1	Grey Scale Thresholding	36
4.6	Caracterização Geométrica	37
4.6.1	Momentos de Fase	38
4.6.2	Porosidade	38
4.7	Função de Conectividade	39
4.7.1	Função de Correlação N-Point	39
4.7.2	Função de Correlação One-Point	40
4.7.3	Função de Correlação Two-Point	40
4.7.4	Generalizando para Materiais Heterogêneos	44
4.8	Tipos de Malhas	44
4.8.1	Malha Quadrada	45
4.8.2	Malha Hexagonal	46
4.8.3	Representação Morfológica de sistemas através das malhas	46
5	RECONSTRUÇÃO 3D	49
5.1	Gaussiana Truncada - GT	50
5.2	Esferas Sobrepostas - ES	53
5.3	Sistemas de Percolação Multiescala - SPME	56
5.4	Algoritmo de Intermutabilidade Múltipla	58
5.4.1	Recozimento Simulado Convencional	58
5.4.2	Multiple Interchanging Process - MIP	60
5.4.3	Função de Controle Fractal	61
5.4.4	Procedimento Pré-Condicionado	64
5.4.5	Reconstrução 3D	64
5.4.6	Análise dos resultados	64
6	RESULTADOS	67
6.1	Segmentação e Porosidade	67
6.2	Gaussiana Truncada	68
6.3	Esferas Sobrepostas	71
6.4	Sistema de Percolação Multiescala - SPME	73
7	CONCLUSÃO	76
	Referências Bibliográficas	77

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

A caracterização de rochas e materiais porosos em geral encontra uma vasta aplicação em ciências e nas engenharias. A avaliação de reservatórios de petróleo e escoamento de fluidos são exemplos de linhas de pesquisa nessa área.

A microestrutura dos meios porosos influencia fortemente em suas características macroscópicas tais como condutividade, constantes elásticas, tempos de relaxação, permeabilidade, ou propriedades térmicas entre outras. Estabelecer uma relação entre a microestrutura geométrica e essas propriedades físicas é um problema fundamental em aberto cuja solução é importante para muitas áreas de aplicações, tais como: geofísica, física de polímeros e ciência dos materiais.

Neste trabalho iremos apresentar propostas de modelagens geométricas de meios porosos através de procedimentos estocásticos que visam gerar estruturas precisas a partir de dados morfológicos que fazem uso de descritores estatísticos, tomados de acordo com a conveniência do trabalho, nesta dissertação assumiremos a função de correlação entre dois pontos e porosidade como descritores.

Evidentemente a conformidade entre os parâmetros de controle não garante uma boa reconstrução, por isso combinações de diferentes métodos podem ser aplicados para atender a necessidades específicas.

O caráter estatístico da reconstrução, bem como a natureza porosa das amostras estudadas, conferem uma certa complexidade que permite utilizar as teorias de percolação e fractal no auxílio e aprimoramentos das técnicas tradicionais de reconstrução.

Dessa forma, o objetivo deste trabalho é discutir métodos de reconstrução, e/ou combinação deles, com a finalidade de se estimar aspectos morfológicos em imagens 3-D a partir de uma única imagem 2-D, viabilizando a obtenção de procedimentos não destrutivos de análise de

propriedades macroscópicas, reduzido custos e tempo de processamento.

Dessa forma, a dissertação será apresentada da seguinte forma:

- No capítulo 2, desenvolvemos uma breve revisão bibliográfica sobre a teoria fractal;
- No capítulo 3, discutimos a teoria da Percolação;
- No capítulo 4 introduzimos noções elementares sobre processamento de imagem digital;
- No capítulo 5, apresentamos algumas das principais técnicas de reconstrução;
- No capítulo 6, aplicamos algumas dessas técnicas em amostras já estudadas por outros pesquisadores com o intuito de comparar os resultados;
- No capítulo 7, está a conclusão deste trabalho e recomendações para trabalhos futuros.

Capítulo 2

FRACTAIS

2.1 Introdução aos Fractais

Derivado da palavra latina *fractus* ("fragmentado", ou "quebrado"), o termo *fractal*, foi introduzido pela primeira vez em 1975 pelo matemático polonês *Benoit B. Mandelbrot* [2]. Os fractais são conhecidos como uma classe de formas geométricas complexas, que frequentemente possuem *dimensão fracionária*, conceito abordado em 1918 pelo matemático Felix Hausdorff [3].

Antes de Mandelbrot a noção de fractal já era conhecida, no entanto, pouco estudada por membros da comunidade científica. Seu trabalho elevou a teoria fractal a um patamar científico sem precedentes, transformando-a em uma das áreas de vanguarda no que diz respeito a descrição de sistemas complexos e desordenados, já que é capaz de descrever com notável precisão objetos naturais tais como: galáxias, paisagens, terremotos, fraturas, agregados, colóides, superfícies, interfaces difíceis, vidros, polímeros, proteínas e outras moléculas grandes, forma de uma folha ou flor, forma de uma nuvem, forma de um leito de rio, padrões de pele, superfície de um sólido poroso, forma de um cristal de neve, ritmo da pulsação do coração, fenômenos ecológicos, superfície e formato de moléculas, conforme publicações da área [4,5].

2.2 Auto-Similaridade e Comportamento Fractal

A ideia de auto-similaridade é uma ampliação da noção de similaridade, originada na geometria elementar. Introduzindo, assim, um novo termo matemático que não é encontrado na geometria tradicional.

Um objeto é dito portador de auto-similaridade quando apresenta invariância de sua forma quando submetido a uma transformação de escala, se considerarmos como exemplo a ampliação de um objeto por um mesmo fator em todas as direções, ele manterá o mesmo

formato só que maior do que era antes. Este fator é denominado *Fator de Escala* e a transformação entre os objetos de *Transformação de Similaridade*.

Classificamos a auto-similaridade em dois tipos: A exata e a estatística. A primeira é caracterizada pelo fato de que partes do objeto são exatamente iguais a totalidade do objeto, já a segunda, tal igualdade é aproximada ou estatística, sendo a mais recorrente na natureza.

Vale ressaltar que a noção de auto-similaridade não é nova, pois já se sabia que a turbulência nos rios poderia ser decomposta em pequenas redemoinhos, conforme figura 2.1, mantendo assim sua auto-similaridade [5]. Por outro lado, interpretações quantitativas passaram a ser estudadas recentemente.

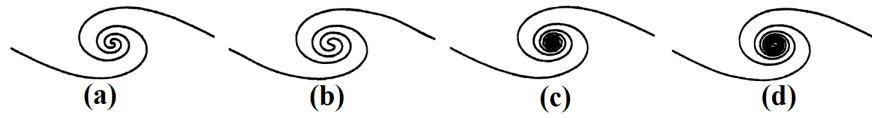


Figura 2.1. Auto-Similaridade: Fractais Isotrópicos.

2.3 Auto-Afinidade

Em um estudo mais abrangente da auto-similaridade, devemos considerar os casos onde o *Fator de Escala* das *Transformações de Similaridade* não são mais os mesmos em todas as direções. Ou seja, fractais anisotrópicos também apresentam invariância de sua forma sobre determinadas transformações, podendo manifestar uma simetria de dilatação anisotrópica, em tal caso, falamos de auto-afinidade.

Dessa forma, pensamos nas transformações de *auto-similaridade* como um caso particular das transformações de *auto-afinidade* onde os fatores de escala são os mesmos em todas as direções, um exemplo é o fractal mostrado na figura 2.2, onde o iniciador é um quadrado unitário e o gerador consiste em subdividir o iniciador em uma malha retangular $b_1 \times b_2$, onde apenas n células são retiradas ($b_1 b_2$ menos n células são descartadas). Nesse caso $b_1 = 3$, $b_2 = 2$ e $n = 3$.

As transformações de escala são diferentes sob a dilatação ao longo das direções a horizontal (x) e vertical (y) e para recuperar o fractal original deve-se ampliar uma subunidade de um factor de três ao longo da direcção x , e por um factor de dois ao longo da direcção y .

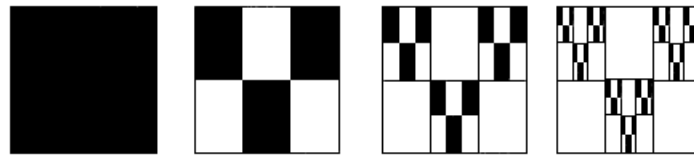


Figura 2.2. Auto-Afinidade: Fractais Anisotrópicos.

2.4 A construção de Fractais

A definição precisa dos fractais bem como suas propriedades elementares demanda um ferramental matemático que foge aos objetivos deste trabalho. Para os nossos propósitos a melhor maneira de estudar as características básicas de fractais é através de exemplos, omitindo formalidades matemáticas sempre que possível, nesse sentido assumiremos que a formação de fractais requer dois elementos de formação: O *Iniciador* e o *Gerador*.

O iniciador é a peça fundamental da formação do fractal, de onde parte as diversas transformações de *auto-afinidade*. O gerador, por sua vez, é o algoritmo de formação do fractal que define as transformações de *auto-afinidade*, para o caso onde o algoritmo contém apenas operações fixas o fractal gerado é dito *Determinístico* e quando contém elementos aleatórios o fractal produzido é chamado de *Estatístico* [6].

Todos os fractais determinísticos são obtidos da mesma forma: através de processos iterativos fixos cuja a construção começa a partir do *iniciador*, citamos como exemplo o fractal conhecido como *Triângulo de Sierpinsky*, que utiliza um triângulo equilátero como iniciador onde o gerador pode promover um crescimento interno ou externo ao iniciador, conforme figuras 2.3 e 2.4.



Figura 2.3. Triângulo de Sierpinsky - Formação com crescimento interior ao iniciador.



Figura 2.4. Triângulo de Sierpinsky - Formação com crescimento exterior ao iniciador.

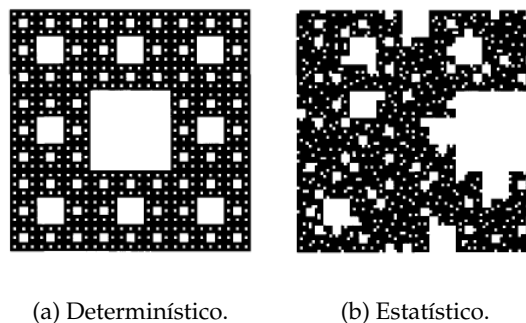


Figura 2.5. Quadro comparativo.

Para tratar fractais estatísticos iremos tomar como exemplo o quadrado de Sierpinski. A figura 2.5 apresenta um quadro comparativo entre os fractais determinístico e estatístico, nestes casos o iniciador é um quadrado e o gerador o divide em nove partes iguais fazendo o descarte do quadrado central para o caso determinístico ou de qualquer quadrado escolhido aleatoriamente para o caso estatístico.

Claramente, as duas imagens estão correlacionadas, já que a distribuição de buracos é semelhante em todos os comprimentos escalas [6]. Além disso, em média, a "massa" deste objeto (as áreas pretas na figura) aumenta por um fator de oito, quando o espaço é dilatado por um fator de três.

Assim, para o nosso exemplo, os dois fractais da figura 2.5 possuem a mesma dimensão fractal, conceito que será tratado na seção 2.5.

2.5 A Dimensão Fractal

A dimensão fractal é uma das características mais importantes utilizadas para definir um fractal. A melhor maneira de entendê-la é através de exemplos, para tal, fazemos uso da curva de Koch, figura 2.6, que é construída a partir de um segmento de reta unitário.

O terço médio da seção é substituída por outros dois segmentos de comprimento $1/3$, fazendo uma forma de tenda, como pode ser observado na segunda iteração na figura 2.7. O mesmo procedimento é repetido para cada um dos quatro segmentos restantes [6].

Este processo é iterativo e se estende indefinidamente, a curva limite é de comprimento infinito, no entanto está confinada a uma região finita do plano. Desse modo, a *Curva de Koch* é um pouco "mais densa" do que uma curva regular de dimensão $d = 1$ e certamente "menos densa" do que um objeto bidimensional, intuitivamente, supomos que a sua dimensão deve estar entre um e dois.

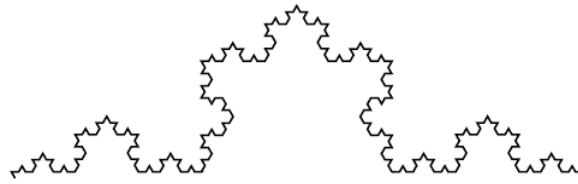


Figura 2.6. Curva de Koch.

A dimensão d pode ser estimada através de um fator b , onde o objeto original caberia b^d vezes na primeira ampliação, essa definição intuitiva da *dimensão fractal* atende aos propósitos deste trabalho e é possível imaginar que num fractal há partes da figura que são cópia do todo, no caso da Curva de Koch, cada etapa da construção é uma união de 4 cópias reduzidas da etapa anterior. Essa propriedade, como já mencionamos antes, é chamada de auto-semelhança ou auto-similaridade [7].

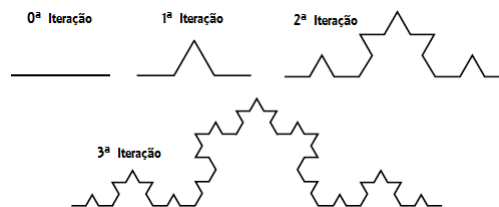


Figura 2.7. Processo Iterativo da Formação Curva de Koch.

Buscando um método geral para determinar a dimensão fractal, partimos de noções elementares da geometria Euclidiana: Dimensão, Reta, Área e Volume. Ver figura 2.8.

Considere um sistema regular, com densidade uniforme, como fios, placas ou cubos sólidos, idealizados como sendo isotrópicos. A seguir vamos avaliar cada caso em termos de suas densidades.

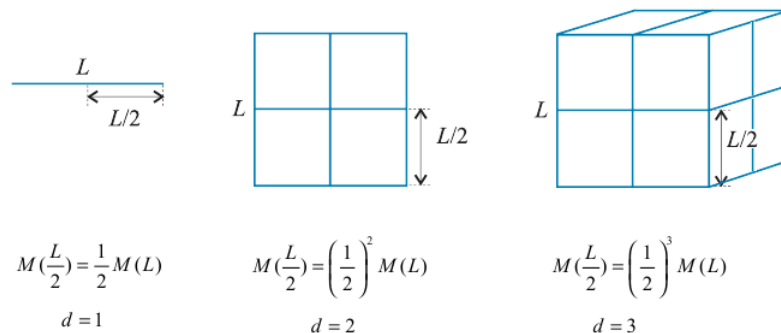


Figura 2.8. Relação entre Comprimento Linear, Massa e Dimensão obtidos através da Geometria Euclidiana.

2.5.1 Densidade Linear

Considere um fio de comprimento $V(L) = L$ e que sua massa é função do comprimento ¹, $M(L)$. Então sua *densidade linear* também é função de L , sendo expressa como:

$$\rho(L) = \frac{M(L)}{V(L)} = \frac{M(L)}{L}. \quad (2.1)$$

Vamos considerar agora uma fração do comprimento L original, digamos $L/2$. Nesse caso a massa dessa fração será $M(L/2)$ e o comprimento $V(L/2) = L/2$, então a *densidade linear* é expressa como:

$$\rho\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{M\left(\frac{L}{2}\right)}{V\left(\frac{L}{2}\right)} = \frac{M\left(\frac{L}{2}\right)}{\left(\frac{L}{2}\right)}. \quad (2.2)$$

Considerando a mesma densidade para os dois casos, obtemos a relação entre as massas ao igualar as equações 2.1 e 2.2:

$$\begin{aligned} \rho(L) &= \rho\left(\frac{L}{2}\right), \\ \frac{M(L)}{V(L)} &= \frac{M\left(\frac{L}{2}\right)}{V\left(\frac{L}{2}\right)}, \\ \frac{M(L)}{L} &= \frac{M\left(\frac{L}{2}\right)}{\frac{L}{2}}, \\ M\left(\frac{L}{2}\right) &= \left(\frac{1}{2}\right)^1 M(L). \end{aligned} \quad (2.3)$$

2.5.2 Densidade Superficial

Considere uma placa quadrada de área $V(L) = A(L) = L^2$, onde sua massa é função do comprimento $M(L)$ e o comprimento linear do lado é L , então sua *densidade superficial* também é função de L , sendo expressa como ²:

$$\rho(L) = \frac{M(L)}{V(L)} = \frac{M(L)}{A(L)} = \frac{M(L)}{L^2}. \quad (2.4)$$

¹Em nosso estudo, a noção de volume está diretamente ligada à dimensão. Neste caso, o volume $V(L)$ em uma dimensão é o comprimento linear L .

²Neste caso, o volume $V(L)$ em duas dimensões é a área $A(L)$.

Considerando agora uma fração da área desse quadrado original, ou seja, outro quadrado de lado igual a $L/2$. Nesse caso a massa dessa fração será $M(L/2)$ e a área $V(L/2) = A(L/2) = (L/2)^2$, dessa forma a *densidade superficial* é expressa como:

$$\rho\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{M\left(\frac{L}{2}\right)}{V\left(\frac{L}{2}\right)} = \frac{M\left(\frac{L}{2}\right)}{A\left(\frac{L}{2}\right)} = \frac{M\left(\frac{L}{2}\right)}{\left(\frac{L}{2}\right)^2}. \quad (2.5)$$

Em conformidade com as hipóteses iniciais, a densidade para os dois casos é a mesma. Por processo análogo ao do caso linear, igualamos as equações 2.4 e 2.5 para obter:

$$M\left(\frac{L}{2}\right) = \left(\frac{1}{2}\right)^2 M(L). \quad (2.6)$$

2.5.3 Densidade Volumétrica

Seja um cubo de volume $V(L) = L^3$ onde o comprimento linear das arestas mede L , assim como nos casos anteriores, sua massa é função do comprimento, $M(L)$, dessa forma sua *densidade volumétrica* também é função de L , sendo expressa como:

$$\rho(L) = \frac{M(L)}{V(L)} = \frac{M(L)}{L^3}. \quad (2.7)$$

Considerando agora uma fração desse volume, ou seja, outro cubo de arestas de comprimento $L/2$, nesse caso a massa dessa fração será $M(L/2)$ e o volume $V(L/2) = (L/2)^3$. Então podemos expressar a *densidade volumétrica* como:

$$\rho\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{M\left(\frac{L}{2}\right)}{V\left(\frac{L}{2}\right)} = \frac{M\left(\frac{L}{2}\right)}{\left(\frac{L}{2}\right)^3}. \quad (2.8)$$

Assumindo a mesma densidade para os dois casos, e por processo análogo aos casos anteriores, igualamos as equações 2.7 e 2.8 para obter:

$$M\left(\frac{L}{2}\right) = \left(\frac{1}{2}\right)^3 M(L). \quad (2.9)$$

Assim, fica estabelecida de forma explícita a relação entre comprimento linear, massa e dimensão, a partir de princípios euclidianos, a figura 2.8 resume estes resultados (equações 2.3, 2.6 e 2.9). Podemos estender essas ideias para escrever uma fração genérica de um determinado objeto, formalmente assumimos a existência de um fio homogêneo, de comprimento L e massa $M(L)$ onde uma fração dele é representada por outro fio de comprimento bL ($0 < b \leq 1$), e massa $M(bL)$, a relação entre as massas é dada por:

$$M(bL) = bM(L) \quad 0 < b < 1. \quad (2.10)$$

Da mesma forma, para uma placa quadra e homogênea cuja medida linear do lado é L e a massa é $M(L)$, podemos obter uma fração de sua área através de outro quadrado de lado bL e massa $M(bL)$, então:

$$M(bL) = b^2M(L) \quad 0 < b < 1. \quad (2.11)$$

E, analogamente, considerando um cubo homegêneo de aresta L , podemos extrair dele uma fração volumétrica em forma de outro cubo cuja aresta mede bL e obtemos:

$$M(bL) = b^3M(L) \quad 0 < b < 1. \quad (2.12)$$

Intuitivamente, é fácil observar que podemos escrever os três casos através de uma expressão única, que leva em conta a massa M , comprimento linear L e dimensão d do sistema considerado, conforme consta na literatura [2,4,6,7].

$$M(bL) = b^dM(L) \quad 0 < b < 1. \quad (2.13)$$

Vamos usar essa propriedade para estimar a dimensão de um fractal d_f , onde:

$$M(bL) = b^{d_f}M(L) \quad 0 < b < 1. \quad (2.14)$$

A utilização da equação 2.14 é demasiadamente simples, basta estudar a formação do fractal levando em conta seu *iniciador*, *gerador* e a relação entre as massa em seus diferentes estágios de *iteração*.

Tomamos novamente como exemplo a curva de Koch, onde o *iniciador* é um segmento de reta de comprimento L , no primeiro processo de iteração apresentado na figura 2.7 o segmento de reta é reduzido a terça parte para formar a próxima figura, que é constituída de quatro desses segmentos de reta. Comparando as massas das figuras das iterações 0 e 1, observamos que, tomando uma redução do fractal de $1/3$ e reunindo adequadamente 4 cópias dessa redução, obtém-se o fractal original, assim podemos afirmar que a massa $M(L/3)$ dessa redução corresponde a $1/4$ da massa $M(L)$ do fractal original, isto é

$$M(L/3) = \frac{1}{4}M(L). \quad (2.15)$$

Levando em conta o *iniciador* e o *gerador* desse fractal e usando a equação 2.14 obtemos a seguinte relação:

$$M(L/3) = \frac{1}{3^{d_f}}M(L). \quad (2.16)$$

Igualando as equações 2.15 e 2.16 temos que

$$\frac{1}{4} = \left(\frac{1}{3}\right)^{d_f}.$$

e finalmente obtemos a dimensão fractal da curva de Koch

$$d_f = \frac{\log 4}{\log 3} \cong 1,26185.$$

2.5.4 Contagem de Caixas - Box Counting

Este é outro método para se determinar a dimensão fractal e é bastante utilizado por ser de fácil implementação. A técnica consiste em avaliar o objeto fractal em diferentes escalas denotadas por s , dividindo o objeto em diversas caixas e contabilizando o número $N(s)$ de todas as que se sobrepõem ao objeto.

Plotamos um gráfico linearizado de $N(s) \times 1/s$, onde dimensão fractal será o coeficiente angular da reta.

$$d_f = \frac{\log N(s)}{\log(1/s)}. \quad (2.17)$$

Apresentamos um exemplo clássico da aplicação da técnica: A determinação da dimensão fractal da costa Grã-Bretanha.

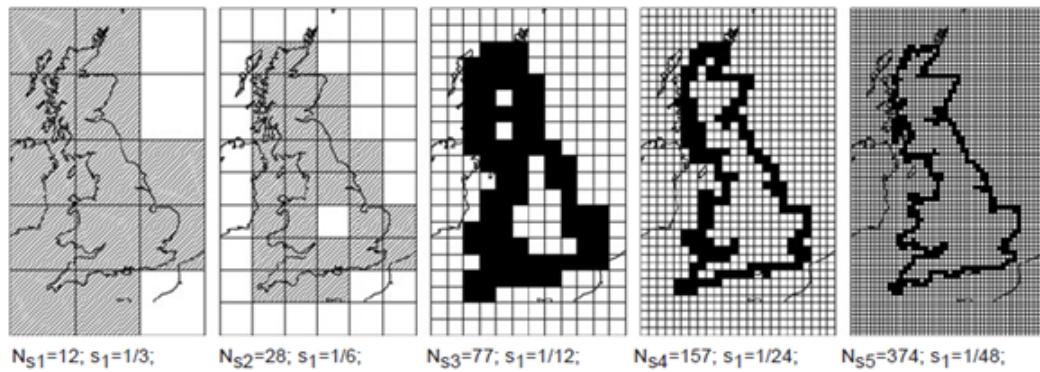
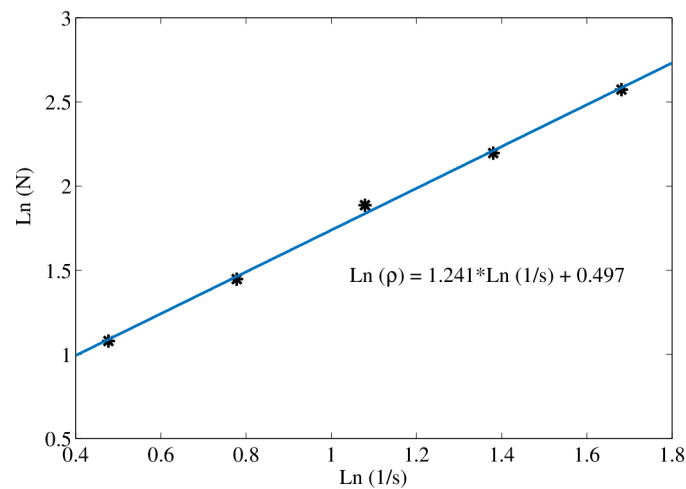


Figura 2.9. Box Conting: Dimensão fractal da costa da Grã-Bretanha.

Dessa forma, o valor da dimensão fractal obtido com a aplicação da técnica foi de $d_f = 1,241$. No capítulo 4 este procedimento será amplamente aplicado no cálculo da dimensão fractal de amostras de arenito e juntamente com os conceitos da teoria da percolação tratados no capítulo 3, seremos capazes de melhor descrever os materiais em termos topográficos objetivando melhor eficiência no processo de reconstrução tridimensional.

Tabela 2.1. Box Counting.

$N(s)$	$1/s$	$\log N(s)$	$\log 1/s$
12	3	1,0792	0,4771212
28	6	1,4472	0,7781512
77	12	1,8865	1,0791812
157	24	2,1959	1,3802112
374	48	2,5729	1,6812412

**Figura 2.10.** Box Conting: Determinação Gráfica da Dimensão fractal da costa da Inglaterra.

2.6 A Densidade de Fractais

A densidade também é uma característica peculiar dos fractais, ao contrário dos resultados obtidos com a geometria Euclidiana na seção 2.5, um fractal possui densidade que varia com a escala adotada. Para avaliar os aspectos correlatos à densidade de fractais, estudaremos um fractal particular para depois estender os resultados aos demais, para tal elegemos o Triângulo de Sierpinsky.

Analisando a figura 2.11 percebemos que a peça fundamental para a formação (*iniciador*) do fractal é um triângulo. O *gerador* atribuído a esse fractal promove uma infundável reprodução desses triângulos em diferentes escalas, com posterior agrupamento específico para formar o fractal [5], onde cada um desses triângulos individuais preservam as características previstas pela geometria Euclidiana, inclusive a densidade, no entanto, o fractal formado por eles não possui tal propriedade conforme mostra a figura 2.11.

Esse resultado é perfeitamente factível, já que quanto maior o tamanho da figura, maior será

a quantidade de furos triangulares presentes [8].

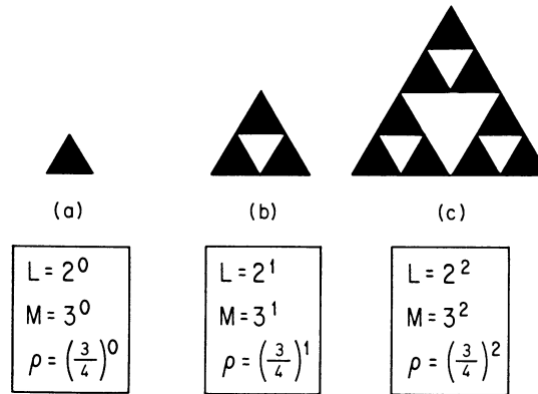


Figura 2.11. Massa no Triângulo de Sierpinsky.

Conforme definimos anteriormente através da equação 2.1 a densidade é representada por:

$$\rho(L) = \frac{M(L)}{V(L)}.$$

Assumimos que o *iniciador* possui massa e comprimento linear, ambos unitários. Ao prosseguirmos como as iterações somos capazes de produzir dados que *relacionam comprimento linear L, massa M(L) e densidade rho(L)*.

A tabela 2.2 lista estes dados até a terceira iteração, no entanto é possível observar que a densidade $\rho(L)$ diminui monotonamente com L, sem limite, de modo que através de suficientes iterações podemos alçar objetos de densidade tão pequena quanto quisermos. O decaimento da densidade ocorre com o aumento de L, seu comportamento é previsível e pode ser descrito por uma lei de potência da seguinte forma genérica:

$$y = Ax^b. \quad (2.18)$$

Onde A é a amplitude e b é o expoente da lei de potência.

Tabela 2.2. Triângulo de Sierpinsky: Decaimento da Densidade.

Iteração	Comprimento Linear L	Densidade $\rho(L)$	Massa M(L)
0	2^0	$\left(\frac{3}{4}\right)^0$	3^0
1	2^1	$\left(\frac{3}{4}\right)^1$	3^1
2	2^2	$\left(\frac{3}{4}\right)^2$	3^2
3	2^3	$\left(\frac{3}{4}\right)^3$	3^3

Para os estudos que se seguem, não será atribuído a amplitude nenhum grau de importância, pois a mesma depende da escolha feita para $M(L)$ e L . No entanto, o expoente b é de grande interesse já que depende do processo de formação, sendo único para cada fractal.

No exemplo adotado, o primeiro ponto a ser plotado (primeira iteração) é $L = 1$ e $\rho(1) = 1$, que após linearização fornece $\log L = \log \rho(1) = 0$. Conclui-se que a amplitude da lei de potência em questão é a unidade e que a lei de potência correspondente é escrita como $\rho(L) = L^b$, já o expoente pode ser obtido calculando-se a inclinação da reta. Veja figura 2.12.

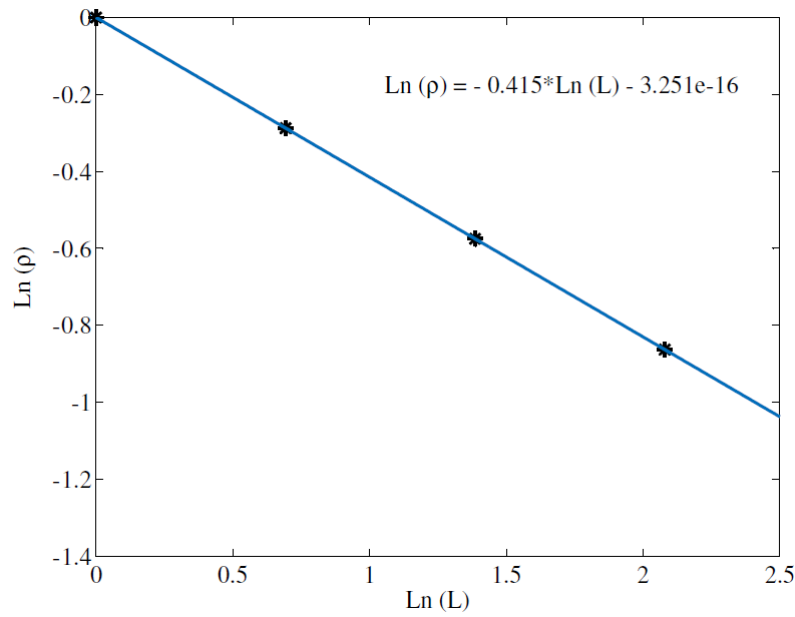


Figura 2.12. Decaimento da densidade fractal no triângulo de Sierpinsky.

Podemos oferecer uma definição alternativa para a determinação da dimensão fractal através dessa análise. Seja a massa definida como:

$$M(L) = AL^{d_f}. \quad (2.19)$$

Conforme já discutimos na seção 2.6, considerando a geometria euclidiana a noção de volume depende da dimensão considerada, dessa forma podemos reescrever a equação 2.1 como sendo:

$$\rho(L) = \frac{M(L)}{L^d}. \quad (2.20)$$

Substituindo a equação 2.19 na equação 2.20 Obtemos:

$$\rho(L) = \frac{M(L)}{L^d},$$

$$\rho(L) = \frac{AL^{d_f}}{L^d},$$

$$\rho(L) = AL^{d_f-d} \quad d \geq 2. \quad (2.21)$$

Onde:

- A = Amplitude da lei de potência
- L = Comprimento linear do iniciador e suas cópias
- d_f = Dimensão do fractal
- d = Dimensão do iniciador
- $d_f - d$ é o coeficiente angular da reta linearizada, conforme ilustração da figura 2.12

Podemos demonstrar esse comportamento através da seguinte dedução:

Tendo em vista o gráfico da figura 2.12 bem como a tabela 2.2 da densidade no triângulo de Sierpinsky, calculamos a inclinação da reta.

$$b = \frac{\log 1 - \log\left(\frac{3}{4}\right)}{\log 1 - \log 2},$$

$$b = \frac{\log\left(\frac{3}{4}\right)}{\log 2},$$

$$b = \frac{\log 3}{\log 2} - \frac{\log 4}{\log 2},$$

$$b = \frac{\log 3}{\log 2} - 2.$$

Como a dimensão fractal atribuída ao triângulo de Sierpinsky é $d_f = \log 3 / \log 2$, podemos escrever:

$$b = d_f - 2,$$

$$b \cong -0,41504.$$

Que é exatamente o mesmo valor obtido pela análise gráfica, apresentada na figura 2.12.

A exemplo do triângulo de Sierpinsky, podemos aplicar este procedimento para qualquer fractal cujo iniciador possua dimensão maior que dois.

Consideramos agora, o quadrado de Sierpinsky, cujo *iniciador* é um quadrado e seu *gerador* o divide em nove partes, sucessivas vezes, e organiza essas cópias menores de uma forma específica para formar o fractal, conforme figura 2.13.

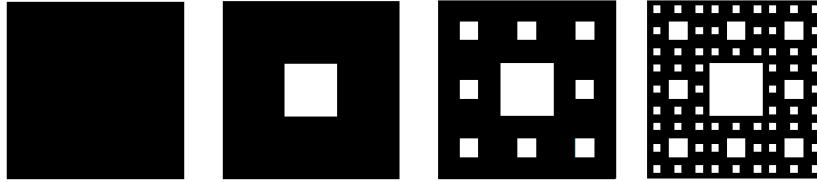


Figura 2.13. Formação Quadrado de Sierpinsky.

Como já discutido anteriormente é possível utilizar a geometria euclidiana para obter uma relação entre comprimento linear, massa e dimensão. Com extensão dessas ideias para o caso fractal, conforme as relações matemáticas que se seguem.

$$M\left(\frac{L}{3}\right) = \frac{1}{8}M(L),$$

$$M\left(\frac{L}{3}\right) = \left(\frac{1}{3}\right)^{d_f} M(L),$$

$$d_f = \frac{\log 8}{\log 3}.$$

Tabela 2.3. Quadrado de Sierpinsky: Decaimento da Densidade.

Iteração	Comprimento Linear L	Densidade $\rho(L)$	Massa $M(L)$
0	3^0	$\left(\frac{8}{9}\right)^0$	8^0
1	3^1	$\left(\frac{8}{9}\right)^1$	8^1
2	3^2	$\left(\frac{8}{9}\right)^2$	8^2
3	3^3	$\left(\frac{8}{9}\right)^3$	8^3

Plotamos no plano cartesiano (gráfico log-log) os dados relacionados na tabela 2.3 para estudar o expoente da lei de potência, apresentada na equação 2.21.

A linearização da equação 2.21, fornece:

$$b = d_f - 2,$$

$$b \cong -0,10721.$$

Que coincide com a análise gráfica.

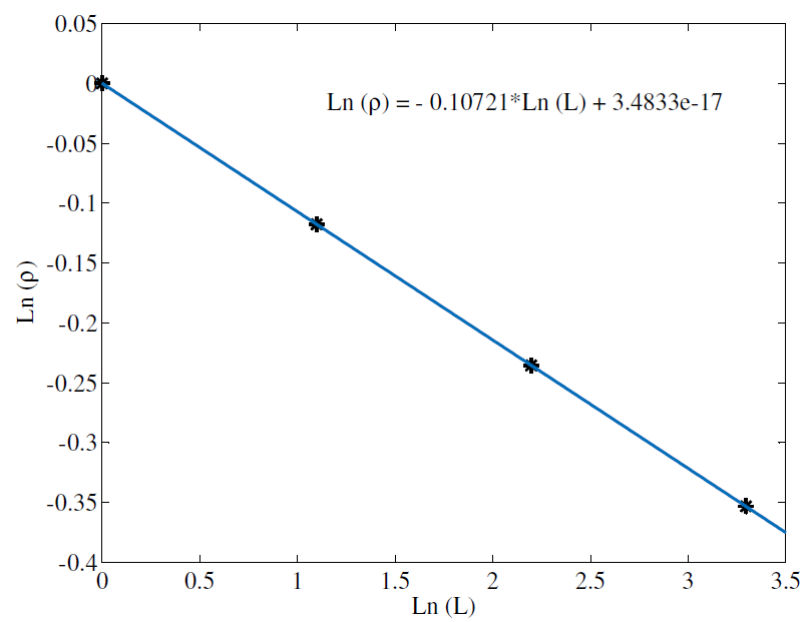


Figura 2.14. Decaimento da densidade fractal no quadrado de Sierpinsky.

Capítulo 3

TEORIA DA PERCOLAÇÃO

3.1 Introdução

A teoria da percolação representa um importante ramo da área de fenômenos críticos e de transição de fase, com importante aplicação ao estudo de meios complexos e desordenados. O que torna o método percolativo particularmente interessante e distinto dos demais é a ausência da necessidade de uma hamiltoniana, em detrimento de argumentos puramente estatísticos que dependem exclusivamente das características do "meio" e não do "fluido".

O início do desenvolvimento desta teoria é atribuído ao trabalho de Broadbent e Hammersley, publicado em 1959 [9] (*bond percolation*), muito embora em 1941 Flory e Stockmayer tenham publicado o trabalho "Molecular size distribution in three dimensional polymers" [10], hoje conhecido como rede de Bethe. Em 1959, Dom propôs uma nova abordagem para o estudo da percolação (*site percolation*) com a publicação do trabalho *Fluctuation phenomena and stochastic processes* [11], utilizaremos esta abordagem nesse trabalho.

Nas décadas subsequentes houve um expressivo crescimento no número de publicações científicas sobre percolação, sobretudo nas linhas de pesquisa que se dedicam à fenômenos críticos [2, 4, 6, 8, 12–16]. Na atualidade a teoria da percolação é tida como uma ferramenta poderosa em física estatística e demais ramos da ciência que se prestam a explorar fenômenos críticos e de transição de fase.

3.2 Definições Preliminares

A teoria da percolação é um ramo da física que possui abordagem e terminologia típica, nesse sentido, propomos para esta seção as principais definições e terminologias aplicáveis ao estudo da percolação.

Neste trabalho abordaremos a percolação através de uma perspectiva simplificada, baseada em exemplos e aplicações, de modo que definições matemáticas precisas serão abandonadas sempre que possível. Dessa forma faremos algumas definições apenas com o intuito de aplicação.

Definição 3.2.1 Uma *malha quadrada* é definida como sendo um conjunto de retas ortogonais que formam uma infinidade de pequenos quadrados, conforme figura 3.1. Seu tamanho é denotado por L por L .

É recorrente a utilização de outros tipos de malhas na teoria da percolação, conforme figura 3.2, mas tais malhas não serão tratadas neste trabalho. Em nossa abordagem tomaremos L suficientemente grande de modo que os efeitos de borda possam ser desconsiderados.

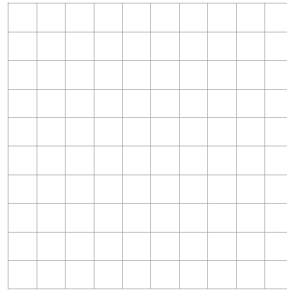


Figura 3.1. Malha quadrada 10 por 10.

Definição 3.2.2 Os *sítios* de uma malha são definidos como sendo cada um dos pequenos quadrados que formam a malha.

A ocupação dos sítios pode se dar através de vínculos atrativos, repulsivos ou até mesmo de maneira aleatória, conforme trabalho de Stauffer [15]. Este trabalho se propõe a estudar a ocupação estatística dos sítios, onde todos eles possuem a mesma probabilidade p de ocupação e a mesma probabilidade $(1 - p)$ de não estar ocupado, tal que $0 \leq p \leq 1$, a figura 3.4 apresenta alguns exemplos de concentração de ocupação.

Definição 3.2.3 Um *cluster* é o conjunto de sítios vizinhos ocupados, unidos necessariamente por uma face em comum. Veja figura 3.3.

Definição 3.2.4 O *tamanho do cluster* (s), também chamado de *s-cluster*, é a quantidade de sítios que formam um cluster.

No exemplo da figura 3.3 temos clusters com tamanhos 2, 4, 9 e 16. A relevância de s para o estudo percolativo está diretamente relacionada ao tamanho da malha, nesse sentido para a malha 10 por 10 tomada como exemplo, o cluster de tamanho $s = 16$ possui certa notoriedade frente a totalidade de sítios da malha, no entanto, o mesmo cluster em uma

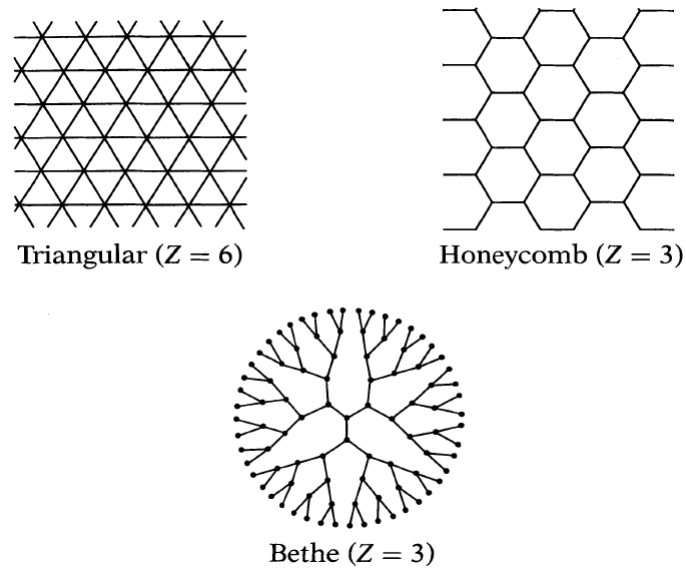


Figura 3.2. Exemplo de outras malhas importantes.

malha de 1000 por 1000 seria insignificante.

Para os nossos propósitos, não é interessante trabalhar com quantidades que dependam do tamanho da malha. Por outro lado, expressar a influência do tamanho do cluster é de fundamental importância.

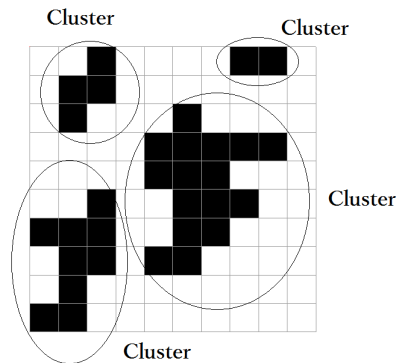


Figura 3.3. Clusters: Exemplo de quatro clusters distribuídos em uma malha.

Definição 3.2.5 O *número de cluster* $n_s(p)$ denota o número de clusters de tamanho s , s -clusters, por sítio da malha, no limite em que a malha tende ao infinito.

O $n_s(p)$ nada mais é do que o s -number normalizado para todas as malhas, ou seja, sua definição exclui dependência da malha. Podemos concluir que o **número (médio) de clusters** de tamanho s em uma rede hipercúbica de tamanho linear L é $L^d n_s(p)$, onde d é a dimensão da rede utilizada.

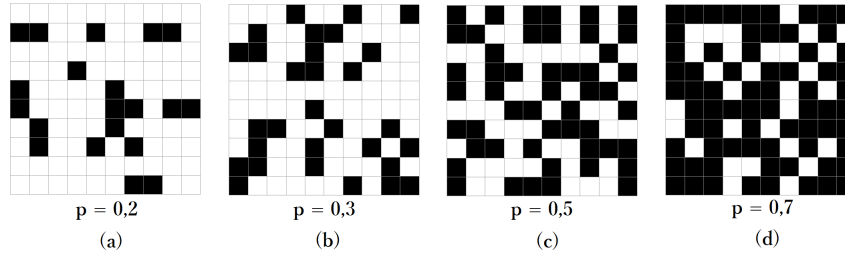


Figura 3.4. Ocupação da malha 10 por 10: (a) 20/100 de ocupação, (b) 30/100 de ocupação, (c) 50/100 de ocupação e (d) 70/100 de ocupação.

Definição 3.2.6 O *limiar de percolação* p_c é a concentração p (probabilidade de ocupação) em que um cluster infinito surge pela primeira vez numa malha também infinita.

É importante salientar que p_c depende apenas do formato e da dimensão da malha escolhida, a tabela 3.1 apresenta alguns exemplos. Quando ocorre o surgimento de um gluster infinito dizemos que o sistema percolou, no entanto para malhas finitas interpretamos um cluster infinito como sendo aquele que une duas extremidade opostas da rede, sendo assim, acima de p_c existe probabilidade do sistema percolar e abaixo de p_c não.

Definição 3.2.7 A *probabilidade de percolação (P)* é a probabilidade de um sítio arbitrário (ocupado ou não) pertencer a um cluster infinito.

Do total de sítios de uma malha, P representa a fração de sítios pertencentes ao cluster infinito, assumindo os seguintes valores:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} P = \begin{cases} 0 & p < p_c \\ 1 & p > p_c \end{cases} \quad (3.1)$$

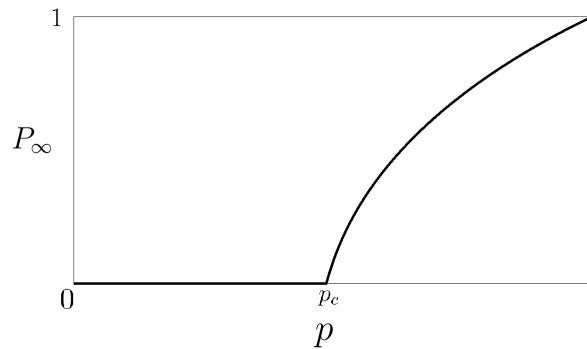


Figura 3.5. Probabilidade de percolação para uma malha finita.

Tal relação pode ser melhor estudada considerando o gráfico da figura 3.5. O problema da continuidade da função $P(p)$ em $p = p_c$ ainda é uma questão em aberto na teoria da percolação.

Existem alguns trabalhos que comprovam a continuidade da função em algumas condições especiais, mas esta discussão foge ao escopo deste trabalho.

Tabela 3.1. Malhas e suas probabilidades críticas.

Tipo de Malha	Z	Percolação por Sítios	Percolação por Ligação
1d	2	1	
2d Honeycomb	3	0,6962	$1 - 2 \sin(\pi/18) \approx 0,65271$
2d Quadrada	4	0,592746	1/2
2d Triangular	6	1/2	$\sin(\pi/18) \approx 0,34729$
3d Diamante	4	0,43	0,388
3d Cubo Simples	6	0,3116	0,2488
3d BCC	8	0,246	0,1803
3d FCC	12	0,198	0,119
Rede de Bethe	Z	$1/(z - 1)$	$1/(z - 1)$

3.3 Percolação em 1d

Avaliar a teoria da percolação em uma dimensão, na prática, é de pouca serventia porque só ocorre percolação com total ocupação da malha. No entanto, é de fundamental importância em termos teóricos, pois conduz a solução analítica de diversas questões da percolação que podem se estender a dimensões superiores.



Figura 3.6. Malha unidimensional infinita.

Considere uma malha unidimensional e infinita, conforme figura 3.6, onde cada sítio possui probabilidade independente de ocupação. Ao avaliar o caráter simultâneo de tal probabilidade em relação a diversidade de sítios da malha podemos catalogar os dados conforme tabela 3.2, dessa forma, para a malha do exemplo a probabilidade de se obter um cluster de tamanho 5 (*five-cluster*) requer cinco sítios consecutivos ocupados delimitados por dois sítios não ocupados, um em cada extremidade, e estas restrições aplicadas simultaneamente fornecem:

$$n_5(p) = (1 - p)p^5(1 - p) = p^5(1 - p)^2.$$

Generalizando para um cluster de tamanho s , temos:

$$n_s(p) = p^s(1 - p)^2. \quad (3.2)$$

Tabela 3.2. Probabilidade de ocupação de sítios.

Número de sítios considerados	Probabilidade de ocupação	Probabilidade de não estar ocupado
1	p	$(1-p)^1$
2	p^2	$(1-p)^2$
3	p^3	$(1-p)^3$
n	p^n	$(1-p)^n$

Sabendo que cada s -cluster contem s sítios, a probabilidade de um sítio qualquer pertencer a esse cluster é dada por sn_s . Para $p < p_c$, toda probabilidade de ocupação p está distribuída entre os clusters finitos (que não percolam), logo o somatório dessas probabilidade deve ser igual a p .

$$\sum_{s=1}^{\infty} sn_s = p. \quad (3.3)$$

É possível verificar a validade dessa relação substituindo a equação 3.2 na 3.3, atentando para alguns detalhes operacionais que envolvem derivadas¹ e somatórios².

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\infty} sn_s &= \sum_{s=1}^{\infty} sp^s(1-p)^2 = (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} sp^s, \\ \sum_{s=1}^{\infty} sn_s &= (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} p \frac{d}{dp}(p^s) = (1-p)^2 p \frac{d}{dp} \sum_{s=1}^{\infty} (p^s), \\ \sum_{s=1}^{\infty} sn_s &= (1-p)^2 p \frac{d}{dp} \left(\frac{p}{1-p} \right) = (1-p)^2 p \frac{(1-p) - p(-1)}{(1-p)^2} = p. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Para $p > p_c$, entretanto, toda a probabilidade de ocupação p esta distribuída entre os clusters que não percolam e o cluster infinito que percola, ou seja, é a soma das duas probabilidades. Então podemos escrever a seguinte relação:

$$P + \sum_{s=1}^{\infty} sn_s = p \quad \forall \quad p > p_c. \quad (3.5)$$

¹ $\frac{d}{dp}(p^s) = sp^{s-1} \Rightarrow p \frac{d}{dp}(p^s) = sp^{s-1}p \Rightarrow sp^s = p \frac{d}{dp}(p^s)$
² $\sum_{s=1}^{\infty} p^s = \sum_{s=0}^{\infty} p^{1+s} = \sum_{s=0}^{\infty} pp^s = p \sum_{s=0}^{\infty} p^s = p \frac{1}{1-p} \quad \forall \quad |p| < 1$

Aplicando o método de Monte Carlo, é possível determinar computacionalmente o gráfico de $P(p)$, conforme figura 3.5. Dessa forma a probabilidade crítica p_c , é definida como o maior valor de p tal que $P=0$. Formalmente temos:

$$p_c = \sup [p, \text{ tal que } P(p) = 0].$$

Definição 3.3.1 Definimos *Tamanho de cluster caraterístico* ou *Tamanho de cluster de corte (cut-off)*, denotado por s_ξ , pela seguinte relação algébrica:

$$s_\xi = \frac{1}{\ln(p)}. \quad (3.6)$$

Levando em conta o ponto crítico³ e a expansão em série do logaritmo⁴, s_ξ pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} s_\xi &= -\frac{1}{\ln[p_c - (p_c - p)]}, \\ s_\xi &= -\frac{1}{\ln[1 - (p_c - p)]}, \\ s_\xi &\cong \frac{-1}{-(p_c - p)}. \\ s_\xi &\cong (p_c - p)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Definição 3.3.2 Estudando o comportamento do tamanho de cluster característico s_ξ próximo ao ponto crítico p_c , observamos que esta quantidade se comporta conforme uma lei de potência, *power-law*, cujo expoente σ é denominado **expoente crítico**, também chamado de **coeficiente gap**, conforme consta na publicação de Staufer [15].

$$s_\xi \propto (p_c - p)^{-1/\sigma} \quad \text{para } p \rightarrow p_c. \quad (3.8)$$

Obviamente, para 1d temos $\sigma = 1$, conforme equação 3.7. Também podemos constatar que s_ξ diverge quando $p \rightarrow p_c$. Notamos também que para o decaimento exponencial descrito, é pouco provável a existência de clusters com $s \gg s_\xi$ (Veja figura 3.7), o que justifica o nome atribuído a s_ξ : Comprimento de cluster de corte, por isso, a equação 3.2 pode ser reescrita como:

$$n_s(p) = p^s(1 - p)^2,$$

³Em 1d $\Rightarrow p_c = 1$

⁴ $\ln(1 - x) = -x - \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} - \dots$

$$n_s(p) = \exp[\ln(p^s)] (1-p)^2,$$

$$n_s(p) = \exp[s \ln(p)] (p_c - p)^2,$$

$$n_s(p) = \exp\left(\frac{s}{s_\xi}\right) (p_c - p)^2. \quad (3.9)$$

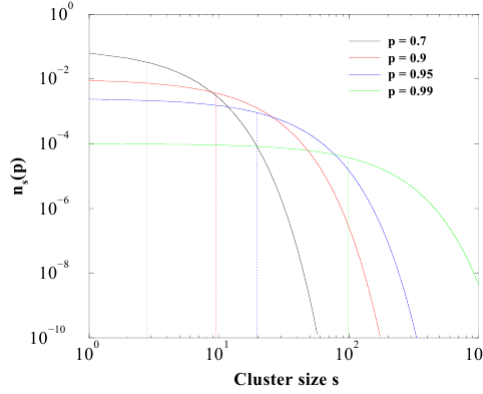


Figura 3.7. Tamanho de cluster de corte.

Definição 3.3.3 A probabilidade de um cluster finito possuir s sítios w_s é definida pela seguinte expressão:

$$w_s = \frac{sn_s(p)}{p},$$

$$w_s = \frac{sn_s(p)}{\sum_{s=1}^{\infty} sn_s(p)}. \quad (3.10)$$

Definição 3.3.4 O tamanho médio de um cluster $S(p)$ é definida pela seguinte expressão:

$$S(p) = \sum_{s=1}^{\infty} sw_s, \quad (3.11)$$

$$S(p) = \frac{p_c + p}{p_c - p} \quad \text{para } 1d. \quad (3.12)$$

que pode ser obtida substituindo a equação 3.2 e 3.10 em 3.11 para obter:

$$S(p) = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{s^2 n_s(p)}{\sum_{s=1}^{\infty} sn_s(p)} = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{s^2 p^s (1-p)^2}{p} = \frac{(1-p)^2}{p} \sum_{s=1}^{\infty} (s^2 p^s). \quad (3.13)$$

Após algumas manipulações⁵.

$$\begin{aligned}
 S(p) &= \frac{(1-p)^2}{p} \sum_{s=1}^{\infty} \left(p \frac{d}{dp} \right)^2 p^s = \frac{(1-p)^2}{p} \left(p \frac{d}{dp} \right)^2 \sum_{s=1}^{\infty} p^s, \\
 S(p) &= \frac{(1-p)^2}{p} \left(p \frac{d}{dp} \right)^2 \frac{p}{1-p} = \frac{(1-p)^2}{p} \left(p \frac{d}{dp} \right) p \frac{d}{dp} \left(\frac{p}{1-p} \right), \\
 S(p) &= \frac{(1-p)^2}{p} \left(p \frac{d}{dp} \right) \left[\frac{p}{(1-p)^2} \right] = \frac{(1-p)^2}{p} p \left[\frac{(1-p)^2 - 2p(1-p)(-1)}{(1-p)^4} \right], \\
 S(p) &= \frac{1+p}{1-p} \quad \forall \quad p < p_c.
 \end{aligned}$$

Sabendo que em 1d $p_c = 1$, podemos escrever:

$$S(p) = \frac{p_c + p}{p_c - p}.$$

Notoriamente o tamanho médio de cluster $S(p)$ diverge para $p \rightarrow p_c^-$, o que era de se esperar para uma malha 1d, no entanto, o caso onde $p \rightarrow p_c^+$ não é possível já que em 1d temos que $p_c = 1$. Essa é a principal diferença entre percolação em 1d e dimensões superiores, onde $p_c < 1$ e p pode ser aproximado de p_c pela direita ou pela esquerda.

Assim, em 1d, o tamanho médio de cluster diverge como uma lei de potência da quantidade $(p_c - p)$ quando $p \rightarrow p_c^-$, conforme figura 3.7. O mesmo comportamento será observado em dimensões superiores, podemos dizer que no limite quando $p \rightarrow p_c^-$, temos $p_c + p \rightarrow 2p_c$:

$$\begin{aligned}
 S(p) &= \frac{p_c + p}{p_c - p} = \frac{2p_c}{p_c - p} \propto (p_c - p)^{-1}, \\
 S(p) &\propto (p_c - p)^{-1}.
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

⁵Derivamos $\frac{d}{dp}(p^s)$ e multiplicamos por p .

Derivada primeira: $p \frac{d}{dp}(p^s) = p s p^{s-1} = s p^s \Rightarrow$ Derivada segunda: $p \frac{d}{dp}(s p^s) = p s^2 p^{s-1} = s^2 p^s$.

Então escrevemos: $\left(p \frac{d}{dp} \right) \left(p \frac{d}{dp} \right) p^s = s^2 p^s \Rightarrow \left(p \frac{d}{dp} \right)^2 p^s = s^2 p^s$.

Definição 3.3.5 Próximo ao ponto crítico p_c , o tamanho médio de cluster $S(p)$ se comporta como uma função de potência (power-law), cujo expoente γ é denominado **expoente crítico**.

$$S(p) \propto (p_c - p)^{-\gamma} \quad \text{para } p \rightarrow p_c. \quad (3.15)$$

Obviamente, para 1d temos $\gamma = 1$, conforme equação 3.14.

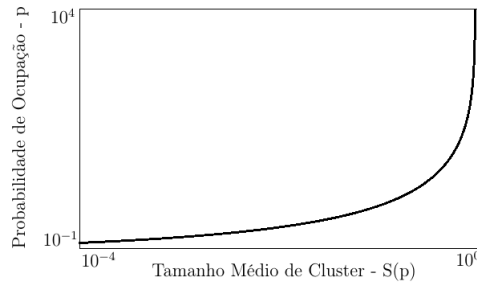


Figura 3.8. Divergência do Tamanho Médio de Cluster.

Definição 3.3.6 Definimos **função de correlação** ou **conectividade de pares** $g(r)$ como sendo a probabilidade de um sítio, a uma distância r , de outro sítio pertencente a um cluster finito, também pertencer ao mesmo cluster.

Nota-se que a contribuição de um cluster infinito é desconsiderada, no entanto tal discussão é irrelevante em 1d, vez que todos os clusters são finitos para $p < p_c$.

Sendo $r = |\mathbf{r}|$, a definição de g também garante que $g(\mathbf{r} = \mathbf{0}) = 1$, já que assumimos que o sítio pertencente ao cluster está ocupado. Em uma dimensão, para um sítio na posição \mathbf{r} estar ocupado e ao mesmo tempo pertencer a um cluster infinito, $(r - 1)$ sítios intermediários devem estar ocupados, então:

$$g(\mathbf{r}) = p^1 p^{r-1}.$$

$$g(\mathbf{r}) = p^r. \quad (3.16)$$

g vai a zero exponencialmente quando $r \rightarrow \infty$, uma vez que $|p| < 1$.

Manipulando a equação 3.16, temos:

$$g(\mathbf{r}) = \exp [\ln(p^r)],$$

$$g(\mathbf{r}) = \exp [r \ln(p)],$$

Usando a equação 3.18.

$$g(\mathbf{r}) = \exp \left(-\frac{r}{\xi} \right). \quad (3.17)$$

Definição 3.3.7 Definimos **comprimento de correlação** ξ como sendo a distância média entre dois sítios pertencentes a um mesmo cluster infinito. ξ pode ser escrito como:

$$\ln(p) = -\frac{1}{\xi}. \quad (3.18)$$

Levando em conta o ponto crítico p_c , em uma dimensão⁶, e a expansão em série do logaritmo⁷, temos:

$$\begin{aligned} \xi &= -\frac{1}{\ln(p)} = -\frac{1}{\ln[p_c - (p_c - p)]}, \\ \xi &= -\frac{1}{\ln[1 - (p_c - p)]} \cong \frac{-1}{-(p_c - p)}, \\ \xi &\cong (p_c - p)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Definição 3.3.8 Estudando o comportamento do comprimento de correlação ξ próximo ao ponto crítico p_c , observamos que esta quantidade se comporta conforme uma lei de potência, power-law, cujo expoente ν é denominado **expoente crítico**.

$$\xi \propto (p_c - p)^{-\nu} \quad \text{para } p \rightarrow p_c. \quad (3.20)$$

Obviamente, para 1d temos $\nu = 1$, conforme equação 3.19, também podemos constatar que ξ diverge quando $p \rightarrow p_c$. Outra relação que é de particular importância para este trabalho é a equivalência entre as quantidades s_ξ e ξ , conforme as equações 3.6 e 3.18:

$$s_\xi = \xi \quad \text{para } 1d.$$

⁶Em 1d $\Rightarrow p_c = 1$

⁷ $\ln(1-x) = -x - \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} - \dots$

Entretanto, para dimensões superiores temos:

$$s_\xi \propto \xi^D.$$

Onde D é a dimensão fractal do cluster.

3.4 Distribuição do Número de Cluster

O estudo da teoria da percolação em dimensões superiores a 1d, revela que não é possível determinar de forma exata o número de cluster n_s , a mesma inviabilidade é observada para a famosa rede de Bethe. Isso ocorre porque, ao contrário de uma rede em 1d, existem muitas formas diferentes de se organizar um cluster, mantendo a mesma ocupação.

A enumeração exata de pequenos clusters "animais da rede" tem sido catalogado na literatura. Numa malha 2d, por exemplo, resultados computacionais contabilizaram um total de 68.557.762.666.345.165.410.168.738 configurações possíveis para um cluster de $s = 46$, conforme publicação de Jesen [17], mesmo assim, é possível explicar comportamentos gerais de dimensionamento de certas quantidades que caracterizam os clusters.

Definição 3.4.1 Definimos o *perímetro* t de um cluster como sendo o número de sítios que são ao mesmo tempo, primeiros vizinhos e vazios, em outras palavras, é o número de sítios vazios que circunda o cluster.

Definição 3.4.2 Definimos *número de animais* g_{st} como sendo o número de configurações geométricas, invariantes à translações, que um cluster contendo s sítios pode assumir.

Dessa forma, a probabilidade de existir um cluster de tamanho s , conforme a definição 3.2.5, pode ser escrita como:

$$n_s = \sum_t g_{st} p^s (1-p)^t. \quad (3.21)$$

A figura 3.9 exemplifica alguns exemplos de baixa complexidade.

3.5 Hipótese de Escala

Nesta seção assumimos a possibilidade da existência de dois expoentes críticos σ e τ , que podem ser determinados através de simulação computacional.

$$n_s(p_c) \propto s^{-\tau}. \quad (3.22)$$

Está é a chamada *hipótese de escala*, onde τ é conhecido como coeficiente de Fisher, a vantagem de tal hipótese se deve ao fato de que todos os outros expoentes críticos podem

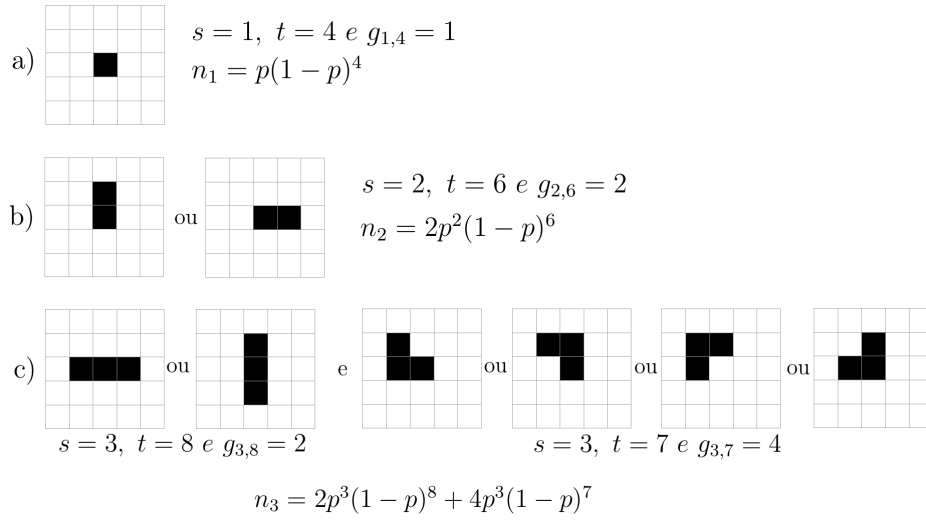


Figura 3.9. Distribuição de clusters: a) Cluster com 1 sítio ocupado, b) Clurter com 2 sítios ocupados e c) Cluster com 3 sítios ocupados.

ser obtidos a partir de σ e τ . Neste sentido a teoria de escala é considerada "*fenomenológica*", ou seja, apenas relaciona diferentes quantidades mensuráveis sem calculá-las diretamente.

Em oposição as sessões anteriores, que tratam de técnicas numéricas, ditas "*microscópicas*", onde desenvolvemos mecanismos que visavam determinar as quantidades mensuráveis de maneira direta [18]. A distinção e aplicação das técnicas "*fenomenológica*" e "*microscópica*" pode ser observada em problemas térmicos de transição de fase entre outros, conforme publicações de Stanley [19] e Domb [20].

Este trabalho parte do princípio de que para estudar s – cluster nas proximidades de p_c , s deve ser muito grande e $(p - p_c)$ deve ser muito pequeno. Exceto quando indicado de outra forma. Para investigar a distribuição de números de cluster em mais detalhes, devemos estudar n_s para $p = p_c$, ou seja, $n_s(p_c)$, fazemos isso avaliando a equação 3.13

$$S(p) = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{s^2 n_s(p)}{\sum_{s=1}^{\infty} s n_s(p)}.$$

Sendo $s n_s$ a probabilidade de um sítio pertencer a um cluster, concluímos que o somatório do denominador deve convergir. Então, para um caso de convergência⁸, usando o denominador da equação 3.13 e a equação 3.22 devemos ter:

$$\sum_{s=1}^{\infty} s n_s(p) = \sum_{s=1}^{\infty} s s^{-\tau} = \sum_{s=1}^{\infty} s^{1-\tau},$$

$$\sum_{s=1}^{\infty} s^b = \begin{cases} \text{Converge} & b < -1 \\ \text{Diverge} & b \geq -1 \end{cases}$$

$$1 - \tau < -1 \Rightarrow \tau > 2. \quad (3.23)$$

Em contraponto, avaliamos agora o numerador da equação 3.13. Verificamos que, por definição, em p_c , devemos ter um cluster infinito pois o sistema percola, ou seja, $S(p) \rightarrow \infty$, desta forma, usando o numerador da equação 3.13 e a equação 3.22 devemos ter:

$$\sum_{s=1}^{\infty} s^2 n_s(p) = \sum_{s=1}^{\infty} s^2 s^{-\tau} = \sum_{s=1}^{\infty} s^{2-\tau}, \quad (3.24)$$

$$2 - \tau \geq -1 \Rightarrow \tau \leq 3.$$

Portanto, em p_c , o expoente de fisher está limitado no intervalo entre 2 e 3. Reunindo as equações 3.23 e 3.24, temos:

$$2 < \tau \leq 3. \quad (3.25)$$

Também podemos calcular τ uma vez que os expoentes γ e σ não são independentes.

Capítulo 4

PROCESSAMENTO DE IMAGEM DIGITAL

4.1 Imagem

Definimos imagem como a representação espacial de um objeto, conforme Marques [21], que é discretizado em um espaço Z^2 , onde suas propriedades são definidas através de métricas usuais desses espaços, de acordo com Fernandes [22]. Nos próximos capítulos iremos apresentar uma definição precisa de Z (conforme equação 4.4) bem como as características e aplicações do estudo da reconstrução de imagens digitais.

No âmbito das ciências em geral, é rotineiro o processo de discretização do espaço objetivando o estudo do contínuo em um espaço R^n , sendo assim, podemos assumir que nossa percepção da realidade consiste de uma representação análoga em 3D no espaço R^3 (espaço contínuo com métrica euclidiana) da mesma forma que uma fotografia é uma representação em 2D no espaço R^2 . Nesse sentido, a representação discreta de uma imagem pode ser feita por uma matriz num intervalo de Z^2 , constituindo um espaço de níveis de cinza.

4.2 Imagem Digital

Uma imagem do mundo real é constituída pela união de infinitos pontos de tamanhos infinitesimais, ou seja, a imagem real é representada por uma incontável quantidade de pontos. No entanto, a representação computacional só é possível através de uma quantidade finita de pontos, felizmente essa dificuldade é facilmente superada através de uma técnica largamente utilizada na aquisição de imagens denominada *amostragem*.

Esta técnica consiste em amostrar alguns dos infinitos pontos da imagem real e armazená-los no computador de forma contável. Da mesma maneira, uma imagem real também é formada

por uma infinidade de cores onde o computador não é capaz de realizar tal contagem.

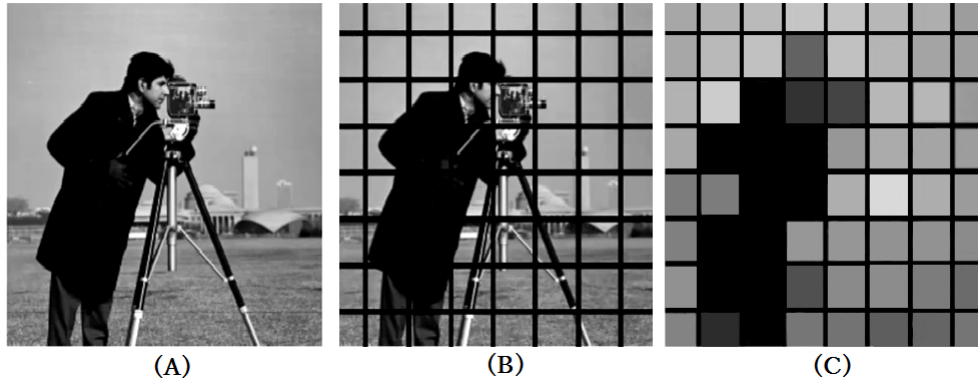


Figura 4.1. Representação do processo de AMOSTRAGEM e QUANTIZAÇÃO de imagens. A: Imagem real, B: Imagem amostrada, C: Imagem quantizada.

Mas isso também é de fácil solução, usamos um procedimento bastante conhecido chamado *quantização*. Ele divide a imagem real em pequenos fragmentos através de uma malha ou matriz onde cada elemento (sítio) é uma sub imagem da imagem real onde é escolhida uma única cor predominante. Os sítios dessa malha são denominados *pixels*, apresentamos a figura 4.3 como um exemplo do processo.

Podemos definir uma imagem digital como sendo uma função $f(x, y)$ discretizada nas coordenadas espaciais e de brilho [23]. A representação numérica de uma imagem é obtida através da transformação indicada pela equação 4.1, conforme publicação de Fernandes [22].

$$f_A(P) = \frac{1}{S_P} \iint_{S_P} f(x, y) dx dy. \quad (4.1)$$

Onde:

- P pertence ao domínio desmembrado de R^2 .
- V_P é o elemento de superfície associado a P .
- S_P é a área associada ao elemento de superfície.

Na equação 4.1 cada ponto P , bem como a vizinhança V_P , são definidos escolhendo uma malha para representação no espaço discreto, onde cada ponto P possui coordenadas quantizadas (i, j) . Para este propósito a malha quadrada é a mais utilizada, já que ela é compatível com uma considerável parcela dos captadores de imagem e coincide com a estrutura de dados de uma matriz clássica conforme descrito no trabalho de Chassery [24].

Dessa forma, a imagem discretizada é codificada e representada por uma matriz Im de tamanho M por N onde $Im(i, j) = f_A(P)$ e P é denominado pixel da imagem. A figura 4.2 exemplifica o processo de digitalização de imagem.

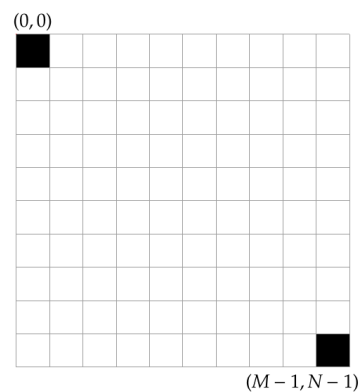


Figura 4.2. Matriz $Im(i,j)$ de tamanho M por N . Cada elemento desta matriz é denominado pixel.

A convenção adotada na indexação da matriz Im faz referência ao primeiro e ao último elemento da matriz como $(0,0)$ e $(M-1, N-1)$ respectivamente, vale salientar que esta convenção não é absoluta e pode variar dependendo da linguagem de programação adotada. Sendo assim, o processo de discretização está relacionado com a resolução espacial, ou seja, com o tamanho físico representado por cada pixel usualmente expresso em dpi (dots per inch – pontos por polegada).

O processo de discretização das intensidades luminosas, denominado de quantização, está associado com a sensibilidade dos captadores utilizados na aquisição da imagem, que usualmente varia de 1 bit/pixel a 24 bits/pixel. Assim, imagens de 1 bit/pixel comportam 2^1 níveis, sendo então uma imagem binária, imagens com 8 bits/pixel comportam 2^8 intensidades diferentes para cada pixel, ou seja, 256 níveis de cinza. Existe ainda o modelo RGB, constituído de 24 bits/pixels, que atinge cerca de 16 milhões de cores, de acordo com o manual científico IMAGO [25].

4.3 Imagem em Tons de Cinza

A imagem em níveis de cinza corresponde a uma representação onde cada pixel assume um valor em um intervalo $[0, L-1]$ de Z , onde o valor 0 é associado ao preto, o valor $(L-1)$ corresponde ao branco, e os valores intermediários constituem um “degradê” de tons de cinza. O caso mais frequente corresponde a $L = 256$, sendo a imagem codificada em uma estrutura de dados 8 bits/pixel.

A Figura 4.3, obtida e processada conforme [26], apresenta um exemplo de imagem em níveis de cinza 8 bits/pixel.

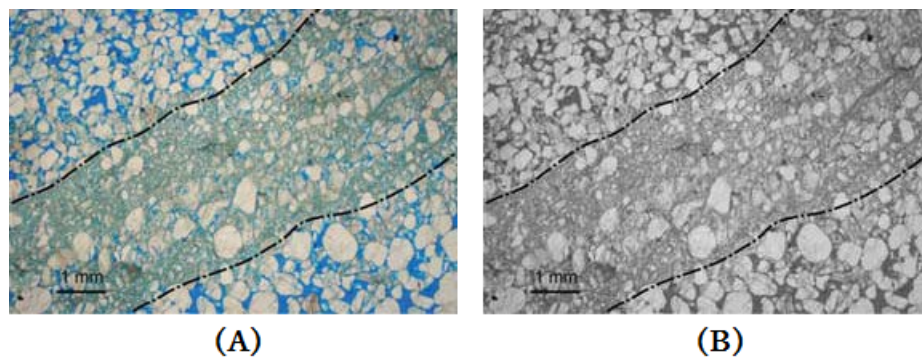


Figura 4.3. A: Imagem original, B: Imagem codificada em tons de cinza 8 bits/pixel.

4.4 Histograma de Imagens Digitais

Segundo GONZALEZ e WOODS 1992 [23], o histograma de uma imagem digital em níveis de cinza é uma função dada por:

$$p(r_k) = \frac{n_k}{n}. \quad (4.2)$$

Onde:

- r_k é o k-ésimo tom de cinza.
- n_k número de pixels da imagem com k-ésimo tom de cinza.
- n é o número total de pixels presentes na imagem
- k é um inteiro positivo, $k = 0, 1, 2, 3, \dots, L - 1$.

Em outras palavras, o histograma de uma imagem digital é uma função discreta e também uma fonte de informações muito importante, principalmente no que diz respeito à melhoria no contraste da imagem. Nesse sentido, um histograma que apresenta pixels agrupados em uma faixa estreita de níveis de cinza indica que a imagem apresenta pouco contraste, como pode ser verificado na figura 4.4.

Histogramas de imagens digitais são a base para inúmeras técnicas de processamento de domínio espacial e sua manipulação visa fornecer a melhoria da imagem. Também é aplicável a outras técnicas de processamento, tais como: compressão e segmentação.

4.5 Segmentação

A segmentação de uma imagem é o procedimento de dividir a imagem em regiões, isolando todos os pixels que não fazem parte dos objetos de interesse.

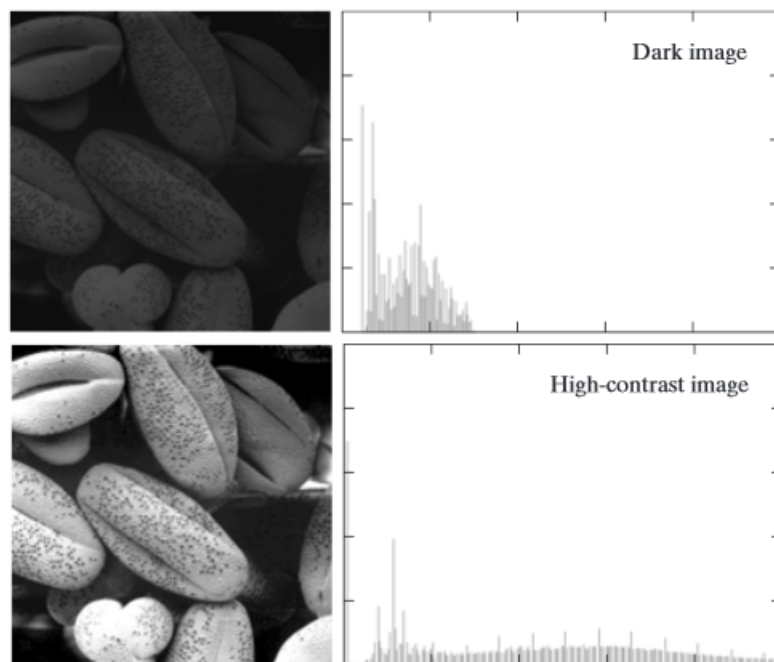


Figura 4.4. Imagens com seus respectivos histogramas: Exemplo de imagem após ajuste de contraste.

No desenvolvimento deste trabalho iremos utilizar a segmentação de imagens digitais para identificação de poros e/ou espaços vazios de amostras de arenito muito embora ela possa ser aplicada a diversos outros estudos. Em uma abordagem tradicional, a segmentação de imagem é vista como um estágio de pré-processamento para reconhecimento ou análise. Dessa forma, a imagem é segmentada e depois processada.

Uma das técnicas de segmentação mais antigas, e que será utilizada neste trabalho, é a segmentação por limiarização em tons de cinza, também conhecida como *Grey scale thresholding*. Utilizamos o software IMAGO para a segmentação das imagens apresentadas.

4.5.1 Grey Scale Thresholding

O limiar ou *Threshold*, é um valor numérico de referência imposto aos pixel durante o processo de segmentação, através dele podemos dizer se o pixel em questão faz parte da fase de interesse. Dessa forma, um pixel com valor acima (ou abaixo) do valor tomado como *Threshold* é considerado pertencente ao objeto e o pixel abaixo (ou acima) é pertencente ao fundo da imagem.

Devido a agilidade operacional e simplicidade de implementação, a segmentação *Grey scale thresholding* é tida como a abordagem mais popular e tem sido amplamente utilizada na literatura da área. Existem diversas técnicas para determinação do *Threshold* e o leitor

interessado em se aprofundar nesse assunto pode consultar [27,28].

No entanto, segundo [23] a determinação de um limiar que melhor segmenta a imagem é um desafio e a experiência do operador pode interferir decisivamente na escolha de um *Threshold* mais adequado e/ou representativo. Conforme mencionamos antes, todas as segmentações deste trabalho foram realizadas através do software IMAGO, os limiares aplicados foram praticamente os mesmos que os recomendados pelo programa, indicando que os algoritmos para obtenção desta quantidade possuem razoável aplicabilidade para as amostras estudadas, maiores detalhes sobre algoritmos de determinação automática do limiar (*threshold*) podem ser obtidos em [29,30].

Evidentemente a segmentação threshold pode produzir erros de classificação cuja intensidade depende do número de pixel de mesmo tom pertencentes ao objeto e o fundo, em outras palavras, o erro está associado a sobreposição de picos. Estudos aprofundados sobre esse assunto não serão abordados nesta dissertação, maiores detalhes podem ser obtidos em [31,32].

Dessa forma, o processo de segmentação também é um processo de binarização, podemos descrever o processo matematicamente, da seguinte maneira: Seja uma imagem digital definida por $Im(i, j)$, sua binarização fornece outra função $Im_{bin}(i, j)$ definida por:

$$Im_{bin}(i, j) = \begin{cases} 0, & \text{se } I(i, j) \leq T_h \\ 255, & \text{se } I(i, j) > T_h \end{cases} \quad (4.3)$$

Este procedimento converte uma imagem, originalmente em tons de cinza, em outra imagem, porém em preto e branco. Na seção 6.1 do capítulo 6 aplicamos e discutimos em detalhes o processo de segmentação e sua possível aplicabilidade na determinação da porosidade da amostra sob investigação.

4.6 Caracterização Geométrica

Nesta seção iremos abordar a manipulação de imagens digitais com o objetivo de caracterizar e avaliar aspectos quantitativos e geométricos de microestruturas presentes nas imagens digitais. Isso será feito através de parâmetros que envolvem a morfologia (forma e tamanho dos objetos) e a topologia (relações de conectividade espacial entre os objetos).

Esta abordagem é amplamente aplicada ao estudo de imagens digitais em 2D, para extração de dados quantitativos, tais como: fração de fases, distribuição de tamanhos de grãos, de partículas e de poros, fatores de forma dos objetos constituintes e funções descritoras da organização espacial das fases. Os conceitos e técnicas associados à caracterização destes parâmetros serão abordados nesta sessão com foco na aplicação em imagens de materiais

porosos, metálicos e cerâmicos.

Conforme discutimos na seção 4.2 e exemplificamos na figura 4.2, uma imagem digital pode ser representada por uma matriz M por N . Além disso ela também pode ser considerada oriunda de processos estocásticos, ou seja, de origem aleatória.

Esta abordagem proporciona diversas ferramentas ao estudo e análise da imagem digital. Sendo assim, partindo de uma imagem binária (composta de duas fases: fase 01 e fase 02), e assumindo o caráter estocástico, definimos as chamadas *funções de fase* associadas às fases 01 e 02 que constituem a imagem.

Então definimos o espaço $Z_{\mathfrak{J}}$ (que pode se referir a fase 01 ou 02) como sendo um subespaço de Z que reúne todas as posições $\mathbf{X}=(i,j)$ pertencentes a fase \mathfrak{J} .

Matematicamente temos:

$$Z_{\mathfrak{J}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{x} \text{ pertence a fase } \mathfrak{J}. \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.4)$$

Iremos assumir, *a priori*, que todas as imagens representativas de microestruturas possuem homogeneidade estatística.

4.6.1 Momentos de Fase

Matematicamente, o estudo de processos aleatórios, ou estocásticos, viabilizam a análise e caracterização de sistemas sob investigação. Tais características são denominadas de *momento*, e descrevem a probabilidade de ocorrência de determinado evento de interesse.

Em nosso trabalho, desejamos saber qual a probabilidade de um pixel, escolhido aleatoriamente, pertencer a um poro, neste caso teremos um *momento* de primeira ordem. Para o caso onde se deseja saber qual a chance de 2 pixels, tomados estocasticamente, pertencerem a um poro, teremos um *momento* de segunda ordem e assim sucessivamente.

4.6.2 Porosidade

A partir da função de fase descrita na equação 4.4, definimos a fração volumétrica da fase como sendo:

$$\phi_{\mathfrak{J}} = \langle Z_{\mathfrak{J}}(\mathbf{x}) \rangle. \quad (4.5)$$

Onde:

- $0 \leq \phi_{\mathfrak{J}} \leq 1$.
- $\phi_{fase1} + \phi_{fase2} = 1$.

Adotamos o uso tradicional do símbolo $\langle \rangle$ para denotar o valor médio.

Dessa forma, ϕ_{fase1} pode representar a fase de poros ou de grãos, dependendo da convenção adotada.

4.7 Função de Conectividade

Este trabalho aborda o estudo de materiais compostos de diferentes domínios ou fases, por isso as amostras apresentadas aqui são denominadas heterogêneas. Segundo [33], a microestrutura de tais amostras só pode ser caracterizada estatisticamente através de métodos específicos de análise, o parâmetro essencial para tais métodos é a função de *correlação n-point*.

No trabalho de [34], verificamos a aplicabilidade de tal abordagem em fenômenos de transporte, mecânica, propriedades eletromagnéticas, entre outras. O leitor interessado em mais aplicações do método pode consultar os seguintes trabalhos: [35–43].

4.7.1 Função de Correlação N-Point

Considere a caracterização de um material heterogêneo bifásico pertencente ao espaço euclidiano d -dimensional \mathbb{R}^d , similar ao que discutimos na sessão 4.6. Queremos estudar este sistema binário, onde a fração volumétrica de cada fase é denotada por ϕ_i , onde $i = 1, 2$. Neste ponto, é comum introduzir a *função indicadora*, e de acordo com [44], temos:

$$I^{(i)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{x} \text{ pertence a fase } \mathfrak{I}. \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.6)$$

Dessa forma, a caracterização estatística das variações espaciais do sistema binário envolve o cálculo das funções de correlação *n-point*.

$$S_n^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \langle S^{(i)}(\mathbf{x}_1) S^{(i)}(\mathbf{x}_2) \dots S^{(i)}(\mathbf{x}_n) \rangle. \quad (4.7)$$

Onde $\langle \rangle$ denota a ensemble médio sobre o conjunto de realizações independentes do meio aleatório estudado.

Para nossos propósitos, no que diz respeito ao processamento de meios estatisticamente homogêneos, a *função de correlação n-point* não depende das posições absolutas, mas dos deslocamentos relativos. Dessa forma, a equação 4.7 pode ser reescrita de modo a não possuir nenhuma origem preferencial. Na equação abaixo adotamos o ponto \mathbf{x}_1 , escolhido, como origem.

$$S_n^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = S_n^{(i)}(\mathbf{x}_{12}, \mathbf{x}, \dots, \mathbf{x}_{1n}). \quad (4.8)$$

onde:

- $n \geq 1$.
- $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i$. Onde \mathbf{x} é o vetor posição do pixel na matriz.
- Para meios estatisticamente isotrópicos, é invariante sob rotação de coordenadas espaciais de corpos rígidos.
- Se $n \leq d$ temos que $S_n^{(i)}$ depende somente das distâncias $x_{ij} = |\mathbf{x}_{ij}| \quad \forall 1 \leq i < j \leq n$.
- Se $n \geq d + 1$, geralmente é necessário reter variáveis vetoriais devido a quiralidade do meio.

4.7.2 Função de Correlação One-Point

Em termos restritos, a função de correlação de um ponto (*one-point*), deve ser constante, assumindo um valor que coincide com a fração volumétrica ϕ_i da fase i [33]. Matematicamente, temos:

$$S_1^{(i)} = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}) \rangle = \phi_i. \quad (4.9)$$

A equação 4.9 diz que a função de correlação *one-point* é a probabilidade de um ponto da matriz pertencer a uma fase i . Dessa forma, se a fase i representa a fase porosa temos que ϕ_i representa a porosidade do material investigado pelo método.

4.7.3 Função de Correlação Two-Point

A função de correlação *two-point*, denotada por $S_2^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, é definida matematicamente como:

$$S_2^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}_1) I^{(i)}(\mathbf{x}_2) \rangle. \quad (4.10)$$

De acordo com o trabalho de [45] esta função constitui um dos mais importantes descritores estatísticos para estudos direcionados à meios aleatórios, em termos operacionais, no que diz respeito a imagem binária, a equação 4.10 é interpretada como a probabilidade de dois sítios, \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 escolhidos aleatoriamente, pertençam a mesma fase i . Para meios estatisticamente homogêneos, $S_2^{(i)}$ depende apenas da distância relativa entre esses pontos, conforme ilustrado na figura 4.5, em termos matemáticos temos:

$$S_2^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = S_2^{(i)}(\mathbf{r}). \quad (4.11)$$

Onde $\mathbf{r} = \mathbf{x}_{12}$ e $r = |\mathbf{r}|$.

Usando a notação de [44] denotaremos alguns itens fundamentais para a determinação de $S_2(r)$ da seguinte forma:

- $N_S(r)$ é o número de sítios da malha, *lattice-point*, separados por uma distância r .
- $N_p(r)$ é o número de pares de sítios, separados por uma distância r .

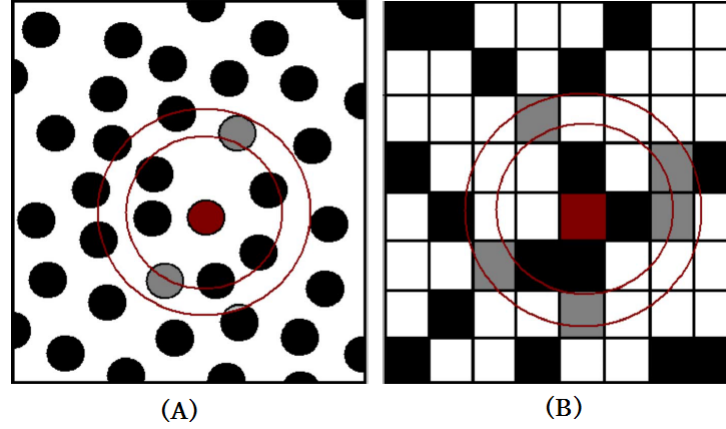


Figura 4.5. Função de correlação de pares *Two-points*: Na figura A apresentamos o modelo molecular e na figura B, o modelo matricial que será utilizado na análise de imagens digitais 2D.

Dessa forma, a função de correlação *two-point* pode ser escrita como:

$$S_2(r) = \frac{N_p(r)}{N_S(r)}. \quad (4.12)$$

No entanto, a tarefa de determinar todas as condições necessárias e suficientes para se determinar $S_2(r)$ é muito complexa e foge aos propósitos deste trabalho, para o estudo aprofundado do assunto recomendamos as seguintes referências [33, 46].

De acordo com [47] é possível estudar S_2 de meios bifásicos e estatisticamente homogêneos, coletando apenas algumas condições necessárias. Este fato também pode ser verificado na publicação de [48], nesse contexto, é possível demonstrar as seguintes sentenças e identidades matemáticas acerca da função de correlação *two-point*, conforme [16]:

- As funções de correlação estão relacionados através da expressão:

$$S_2^2(\mathbf{r}) = S_2^1(\mathbf{r}) - 2\phi_1 + 1. \quad (4.13)$$

- É preciso ter prudência na interpretação de escalas de comprimento associados à S_2 . Por isso é conveniente definir a função de autocovariância $\chi(\mathbf{r})$ para a fase 1 e 2. Tal função pode ser escrita em termos de S_2 da seguinte forma:

$$\chi(\mathbf{r}) \equiv S_2^1(\mathbf{r}) - \phi_1^2 = S_2^2(\mathbf{r}) - \phi_2^2. \quad (4.14)$$

- Generalizando, para $\mathbf{r} = 0$ podemos escrever:

$$S_2^i(\mathbf{0}) = \phi_i. \quad (4.15)$$

$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} S_2^i(\mathbf{r}) \rightarrow \phi_i^2. \quad (4.16)$$

- A transformada de Fourier da função autocovariante $\chi(\mathbf{r})$, denotada por $\tilde{\chi}(\mathbf{K})$, deve ser positiva para todos os vetores de onda \mathbf{K} , em um processo contínuo estatisticamente homogêneo, tal que $\{\mathbf{Y}(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathfrak{R}^d\}$. A representação espectral da função autocovariante é

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dZ(\mathbf{K}). \quad (4.17)$$

Onde $Z(\mathbf{K})$ é uma medida finita e não negativa. Se adotarmos $\chi(\mathbf{r})$ absolutamente integrável, ou seja,

$$\int_{\mathfrak{R}^d} |\chi(\mathbf{r})| d\mathbf{r} < \infty. \quad (4.18)$$

Podemos substituir $dZ(\mathbf{K})$ por $\tilde{\chi}(\mathbf{K})d\mathbf{K}$ na definição de função autocovariante descrita na equação 4.17 para obter a representação padrão de Fourier.

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \tilde{\chi}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{K}. \quad (4.19)$$

Onde a função $\tilde{\chi}(\mathbf{K})$ é positiva, isto é,

$$\tilde{\chi}(\mathbf{r}) = \int \chi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad \forall \mathbf{K}. \quad (4.20)$$

Este resultado às vezes é chamado de condição de *Wiener-Khintchine*, que resulta de experimentos físicos onde $\tilde{\chi}(\mathbf{r})$ é proporcional à intensidade da dispersão de radiação, sendo um caso particular do teorema de *Bochner*. A abordagem geral detalhada desse teorema foge ao objetivo deste trabalho, no entanto informações adicionais podem ser obtidas em [49, 50]. Destacamos algumas propriedades específicas:

- A função de correlação é limitada

$$0 \leq S_2^i(\mathbf{r}) \leq \phi_i \quad \forall \mathbf{r}. \quad (4.21)$$

- A função autocovariante é limitada

$$- \min(\phi_1^2, \phi_2^2) \leq \chi(\mathbf{r}) \leq \phi_1 \phi_2 \quad \forall \mathbf{r}. \quad (4.22)$$

- O ínfimo de qualquer função de correlação **two-point** de um meio estatisticamente homogêneo precisa atender a seguinte sentença:

$$\max(0, 2\phi_i - 1) \leq \inf[S_2^i(\mathbf{r})] \leq \phi_i^2. \quad (4.23)$$

- $S_2^i(\mathbf{r})$ e $\chi(\mathbf{r})$ dependem apenas da distância $r \equiv |\mathbf{r}|$ e suas derivadas em $r = 0$ são estritamente negativas para todo $0 < \phi_i < 1$, ou seja

$$\left. \frac{dS_2^i}{dr} \right|_{r=0} = \left. \frac{d\chi}{dr} \right|_{r=0} < 0. \quad (4.24)$$

- Outra condição necessária, talvez pouco conhecida, é denominada de *inequação triangular*. Também é abordada em [47].

$$S_2^i(\mathbf{r}) \geq S_2^i(\mathbf{s}) + S_2^i(\mathbf{t}) - \phi_i \quad \text{onde } \mathbf{r} = \mathbf{t} - \mathbf{s}. \quad (4.25)$$

Observe que se a autocovariância $\chi(\mathbf{r})$ de um meio isotrópico e estatisticamente homogêneo for monotonamente decrescente e não negativa, ou seja, se $d^2\chi/d^2r \geq 0$ a equação 4.25 continua sendo satisfeita.

Desta forma, a *desigualdade triangular* implica em varias condições pontuais da função de correlação *two-point* $S_2(\mathbf{r})$.

Um exemplo desse fato é a equação 4.24, onde a declividade de $S_2(\mathbf{r})$ é mais intensa na origem.

$$\left| \left. \frac{dS_2^i(\mathbf{r})}{dr} \right|_{r=0} \right| \geq \left| \left. \frac{dS_2^i(\mathbf{r})}{dr} \right|_{r=0} \right|. \quad (4.26)$$

Aliada ao fato de que $S_2^i(r)$ precisa ser convexo na origem temos

$$\left. \frac{d^2 S_2^i}{dr^2} \right|_{r=0} = \left. \frac{d^2 \chi}{dr^2} \right|_{r=0} \geq 0. \quad (4.27)$$

Torquato mostrou em sua publicação [47] que a desigualdade triangular 4.25 é um caso particular de um caso mais geral ainda, definimos uma variável ϵ^1 , então escrevemos:

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \epsilon_i \epsilon_j \chi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \geq 1. \quad (4.28)$$

¹ $\epsilon_i = \pm 1$; $i = 1, \dots, m \quad \forall m \text{ ímpar.}$

Observa-se que se tomarmos $m = 3$ podemos concluir que $\epsilon_1\epsilon_2 = \epsilon_1\epsilon_3 = \epsilon_2\epsilon_3 = 1$. Podemos obter outra inequação triangular:

$$S_2^i(\mathbf{r}) \geq -S_2^i(\mathbf{s}) - S_2^i(\mathbf{t}) + (4\phi_i^2 - \phi_i). \quad (4.29)$$

Onde, $\mathbf{r} = \mathbf{t} - \mathbf{s}$.

Como podemos observar, a equação 4.28 possui uma forte condição necessária, já que pode gerar outras condições e segundo [33] talvez até outras condições não conhecidas até o momento. No entanto sua determinação prática é de difícil obtenção e avaliar essa problemática foge ao objetivo deste trabalho.

4.7.4 Generalizando para Materiais Heterogêneos

Considere uma representação digitalizada de um material heterogêneo e processada conforme descrito na subsubseção 4.5.1. Neste caso o meio é bifásico e composto por pixels compatíveis com marcadores que possuem relação com as cores preto e branco, sendo representado por uma matriz cujos elementos são 1 e 0.

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} I_{11} & I_{12} & \cdots & I_{1N} \\ I_{21} & I_{22} & \cdots & I_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ I_{N1} & I_{N2} & \cdots & I_{NN} \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

Onde:

- N denota o comprimento linear do sistema.
- N^2 é o número total do sistema.
- I_{ij} , com $i, j = 1, \dots, N$ é o elemento de matriz. Cada elemento só pode assumir valores representados por 0 ou 1.

4.8 Tipos de Malhas

De acordo com [33] um material digitalizado em 2D pode ser representado por uma matriz também 2D e a real morfologia do material depende da malha em que o sistema de pixels é construído. Nesta seção iremos apresentar apenas duas das malhas mais encontradas na literatura: a malha quadrada e hexagonal, conforme figura 4.6, no entanto em nossos resultados iremos utilizar apenas malhas quadradas.

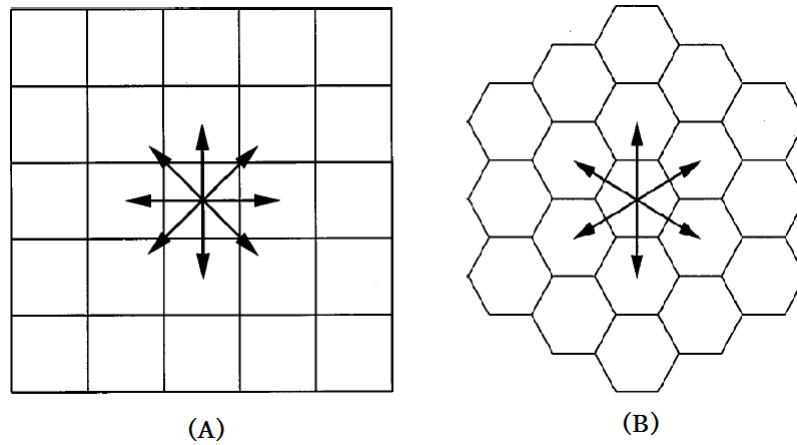


Figura 4.6. Tipos de malhas: Na figura A temos uma malha quadrada com quatro direções de amostragem e na figura B uma malha hexagonal com três direções de amostragem.

4.8.1 Malha Quadrada

Nos casos onde há *interação de curto alcance* faz-se necessário o aumento do número de instruções de amostragem ao longo do sistema a ser otimizado. A amostragem em uma matriz quadrada é formidável nesse aspecto, já que utiliza eixos ortogonais, o que possibilita um maior número de direções de amostragem conforme pode ser observado na figura 4.6.

Foi proposto por [33] que imagens são reconstruídas tomando como destino a equação 4.31.

$$S_2(r) = \phi_1^2 + \phi_1\phi_2 e^{-r/r_0} \frac{\sin(kr)}{kr}. \quad (4.31)$$

Podemos citar como exemplo a reconstrução/construção mostrada na figura 4.7. Dessa forma, a figura original tem seus pixels (com marcadores 0 e 1) permutados ao longo da matriz de maneira aleatória, a permuta será aceita caso a porosidade se mantenha constante e a função de correlação possua uma certa proximidade com a função de correlação da imagem original, sendo assim, a imagem obtida através desse processo é dita reconstruída a partir da original.

Em nosso exemplo, a porosidade permaneceu inalterada e a função de correlação das amostras original (Linha cheia) e reconstruída (pontos) apresentaram boa sobreposição, o que indica que o processo de reconstrução foi bem sucedido.

Alguns dos principais aspectos de tal aplicação serão abordada em sessões posteriores. A anisotropia do sistema pode ser avaliada, medindo S_2 diretamente da imagem reconstruída e verificando se eles correspondem a função de correlação de referência, isso evidencia que o número de direções de amostragem influenciam na qualidade da simulação, eliminando a indesejável anisotropia das imagens reconstruídas.

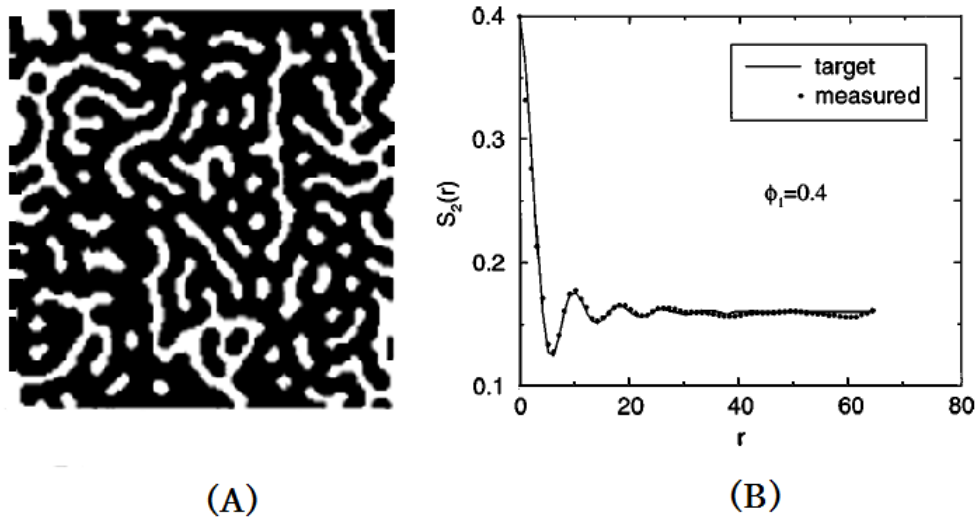


Figura 4.7. Imagem construída/reconstruída obtida através da função de correlação de referência apresentada na equação 4.31: Em A) apresentamos uma imagem reconstruída com $\phi = 0,4$ de porosidade e em B) é apresentada a função de correlação S_2 de referência em linha cheia e valores experimentais coletados da figura para os pontos.

4.8.2 Malha Hexagonal

Esta malha permite que a função de correlação seja avaliada em três direções, o que também diminui os efeitos anisotrópicos, conforme figura 4.6. A figura também mostra como as células unitárias se repetem nas direções vertical e horizontal, tal célula é escolhida de maneira conveniente de modo a viabilizar a implementação de condições de contorno periódicas, como pode ser observado na figura 4.8.

Obviamente a escolha de diferentes condições implicarão no tamanho do sistema escolhido, por isso, é interessante fixar o tamanho do sistema para dar segmento ao estudo destes. Na publicação [33], por exemplo, sistemas hexagonais são fixados em 128x128 pixels.

Avaliando a anisotropia de sistemas hexagonais, assim como no caso das malhas quadradas (figura 4.7), concluímos que o número de direções de amostragens dessas malhas são suficientes para excluir efeitos anisotrópicos. A figura 4.9 mostra que a função de referência 4.31 e os pontos obtidos de medidas diretas coincidem com relativa perfeição, o que justifica a afirmação de que a anisotropia é inexistente para este sistema.

4.8.3 Representação Morfológica de sistemas através das malhas

A representação matricial da morfologia do material apresentada na subseção 4.7.4 é abstrata e depende da malha adotada. Dessa forma é possível que a mesma amostra, estudada com malhas quadradas e hexagonais, possuam a mesma representação matricial.

A figura 4.10 é um excelente exemplo de tal fato, nesse caso, discos sobrepostos em uma malha

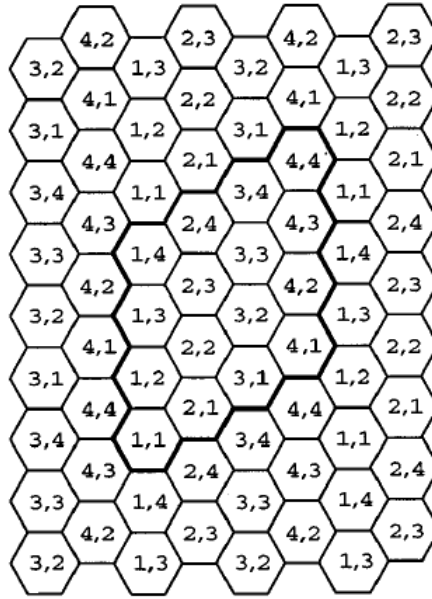
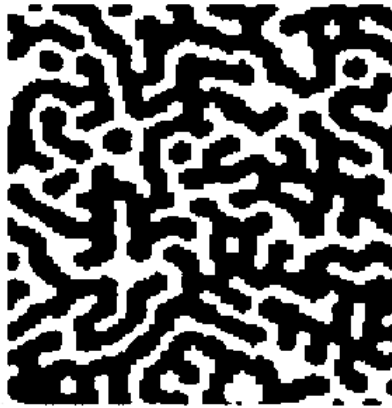
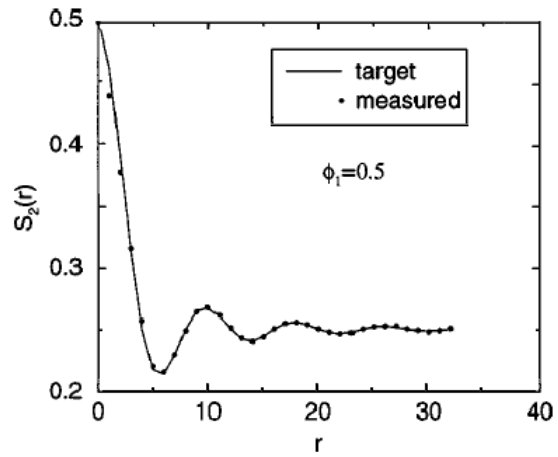


Figura 4.8. Malhas Hexagonais: Contagem de pontos e aplicação de condições de contorno periódicas.



(A)



(B)

Figura 4.9. Imagem construída/reconstruída obtida através da função de correlação de referência apresentada na equação 4.31: Em A) apresentamos uma imagem reconstruída com $\phi = 0,5$ de porosidade e em B) é apresentada a função de correlação S_2 de referência em linha cheia e valores experimentais coletados da figura para os pontos.

quadrada e elipses em uma malha hexagonal possuem a mesma representação matricial. O vetor distância para ambas as malhas podem ser escritos de maneira única, como se segue:

$$\mathbf{r} = n_1 \mathbf{e}_1 + n_2 \mathbf{e}_2. \quad (4.32)$$

Onde:

- \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 são vetores específicos (base) de cada malha escolhida: quadrada ou hexagonal.
- Numa matriz quadra: $\mathbf{e}_1 = \mathbf{i}$ e $\mathbf{e}_2 = \mathbf{j}$.
Onde \mathbf{i} e \mathbf{j} são vetores unitários nas direções horizontal e vertical respectivamente.
- Numa matriz hexagonal: $\mathbf{e}_1 = \sqrt{3}\mathbf{i} + \mathbf{j}/2$ e $\mathbf{e}_2 = \mathbf{j}$.
- De maneira geral, outras malhas diferentes das que foram abordadas neste trabalho potencialmente podem ser utilizadas. No entanto a questão da anisotropia artificial discutida nas subseções 4.8.1 e 4.8.2 deverá ser observada.

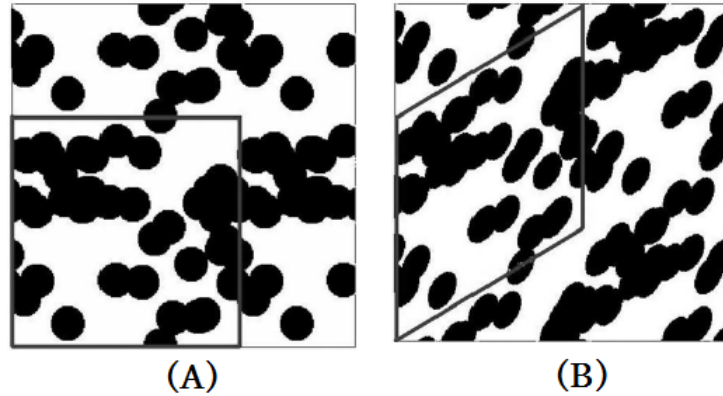


Figura 4.10. A) Discos em uma malha quadrada. B) Elipses em uma malha hexagonal. Ambos os casos possuem a mesma representação matricial.

Capítulo 5

RECONSTRUÇÃO 3D

A técnica de reconstrução é um método de modelagem tridimensional que visa reproduzir a geometria microestrutural de materiais porosos [51], a partir de seções planas desses sistemas, sendo garantida a manutenção de determinados parâmetros geométricos observados na imagens 2-D do material.

No entanto, também pode ser adaptada e aplicada a materiais bifásicos em geral. Nos últimos anos tem se encontrado aplicações da técnica em diversos ramos da ciência, tais como engenharia de petróleo, biologia e medicina, porque em muitos casos, apenas imagens 2D estão disponíveis para análise.

A literatura é rica em diversidade métodos de reconstrução, entre elas, talvez a mais notória tenha sido desenvolvida por [52] e aprimorada por [53, 54] com a acomodação de condições de contorno periódicas. Também é possível encontrar outras técnicas mais aprimoradas que utilizam campos gaussianos independentes [54, 55] para viabilizar um filtro não linear. Em seguida, obtém-se um limiar de corte para o campo que viabiliza a geração da última estrutura reconstruída.

Outra abordagem, também baseada na filtragem, foi desenvolvida por [56]. Esta por sua vez, passou por diversos aprimoramentos e o leitor interessado em maiores detalhes pode consultar [57–62]. Existe ainda outro método largamente utilizado para reconstruções de imagens 3D a partir de imagens 2D chamado recozimento simulado amplamente abordado em uma série de trabalhos publicados por Torquato [16, 33, 34, 42, 43, 45, 47, 48, 51, 62, 63].

Apesar da enorme variedade de métodos, este trabalho será restrito aos da Gaussiana Truncada (GT), Esferas Sobrepostas (ES) e Sistemas de Percolação Multiescala (SPME) conforme [22, 64, 65], todos os autores são renomados pesquisadores do Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas (LMPT) do departamento de engenharia mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC).

5.1 Gaussiana Truncada - GT

O método da Gaussiana Truncada (GT) é um método de reconstrução baseado em um modelo matemático que visa gerar imagens 3-D a partir de imagens 2-D, originalmente proposta por [52] e aprimorada por [53, 54]. Durante o processo, as medidas de porosidade e autocorrelação são mantidas constantes e as condições de contorno periódicas são adequadamente acomodadas.

Uma imagem binária será a representação do material bifásico a ser estudado e posteriormente essa representação será associada a um processo estocástico através de uma função de fase. De acordo com as principais publicações sobre o assunto [53, 66, 67], podemos assumir que para sistemas estatisticamente homogêneos e isotrópicos é possível descrever uma estrutura bifásica através da porosidade e da função de autocorrelação, também é possível verificar que o método possui um alto custo computacional e tal obstáculo pode ser potencializado em imagens com alto comprimento de correlação já que o processo matemático envolve resolução de sistemas não-lineares.

Dessa forma a técnica consiste em assumir que a imagem binária contém uma fase de poro representada pela função de fase, nos moldes da discussão que forneceu a equação 4.4, conforme já mencionamos antes, uma estrutura porosa pode ser gerada apenas com os dois primeiros momentos: porosidade e função de correlação. Isso se dá através de um campo gaussiano normal (média igual a 0 e variância igual a 1) não correlacionado $X(\mathbf{x})$.

Em seguida, um operador linear transforma $X(\mathbf{x})$ em outro campo, denotado por $Y(\mathbf{x})$, que também será gaussiano normal, porém correlacionado. No entanto, $Y(\mathbf{x})$ ainda não assume a correlação desejada, então é realizado o truncamento por intermédio de um filtro não linear que o transforma em um campo binário $Z(\mathbf{x})$ para que finalmente as características referentes a porosidade e função de correlação sejam satisfatórias.

Em outras palavras:

$$X(\mathbf{x}) \rightarrow Y(\mathbf{x}) \rightarrow Z(\mathbf{x}). \quad (5.1)$$

Para reduzir custo computacional iremos utilizar neste trabalho o método de Liang [65, 68], que gera o campo $Y(\mathbf{x})$ diretamente da correlação $R_Y(u)$, ou seja, não realiza a transformação $X(\mathbf{x}) \rightarrow Y(\mathbf{x})$. Para isso, usamos como ferramenta o teorema de Wiener-Khinchine.

Neste trabalho foi utilizado o software IMAGO para reconstrução de imagens 3-D via gaussiana truncada, que trabalha no domínio transformado de Fourier conforme [65, 68]. O processamento das imagens analisadas e reconstrução seguem critérios estabelecidos na publicação de [69, 70].

5.1.0.1 Detalhes da Técnica - GT

Sabe-se que a análise de imagens digitais frequentemente envolve o uso de transformações lineares, especificamente transformadas de Fourier. Então, para um campo vetorial denotado por $f(x, y)$ podemos definir:

- Transformada de Fourier discreta de $f(x, y)$, denotada por $\mathfrak{F}\{f(x, y)\} = \widehat{f}(u, v)$;
- (x, y) pertence ao domínio espacial;
- (u, v) pertence ao domínio de frequência (transformado);
- O espectro de $f(x, y)$ é denotado por $|\widehat{f}(u, v)|$;
- O quadrado do espectro de $f(x, y)$, também conhecido como *power spectrum* é denotado por $\wp[f(x, y)] = |\widehat{f}(u, v)|^2$.

Observa-se que teorema de Wiener-Khinchin garante que a transformada de Fourier da função de correlação $R_Y(\mathbf{u})$ de um campo $f(\mathbf{r})$ é o *power spectrum* do campo, ou seja:

$$\widehat{R}_Y(\mathbf{p}) = \mathfrak{F}(R_Y(\mathbf{u})) = |\mathfrak{F}(Y)|^2 = |\widehat{Y}|^2. \quad (5.2)$$

Este teorema explicita o fato de que a transformada de Fourier da função autocovariante normalizada R está relacionada como o módulo da transformada de Fourier do campo Y ao quadrado. Primeiramente determina-se a função de fase Z apresentada na equação 4.4 e a porosidade ϕ , conforme a expressão 5.4, reescrevendo estas expressões temos:

$$Z_{\mathfrak{Y}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{x} \text{ pertence a fase } \mathfrak{Y} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.3)$$

$$\phi_{\mathfrak{Y}} = \langle Z_{\mathfrak{Y}}(\mathbf{x}) \rangle. \quad (5.4)$$

Na sequência, calcula-se a função de correlação $C(\mathbf{u})$ e a função de autocorrelação normalizada $R(\mathbf{u})$, definidas matematicamente pelas respectivas expressões:

$$C_Z(\mathbf{u}) = \langle Z(\mathbf{x})Z(\mathbf{x} + \mathbf{u}) \rangle, \quad (5.5)$$

$$R_Z(\mathbf{u}) = \frac{\langle [Z(\mathbf{x}) - \phi][Z(\mathbf{x} + \mathbf{u}) - \phi] \rangle}{\phi - \phi^2}. \quad (5.6)$$

A essa altura faz-se necessário a determinação de $R_Y(u)$, segundo [66], é possível relacionar as funções de autocovariância normalizada dos campos Z e Y através da seguinte expansão em série:

$$R_Z(u) = \sum_{m=0}^{\infty} B_m^2 R_Y^m(u). \quad (5.7)$$

onde:

- m é o número de termos da série;
- $B_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi m!}} \int_{-\infty}^{\infty} b(y) e^{-y^2/2} H_m(y) dy$;
- $Z_{\mathfrak{Y}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{\phi-1}{\sqrt{\phi(1-\phi)}}, & \text{se } P(y) \leq \phi \\ \frac{\phi}{\sqrt{\phi(1-\phi)}}, & \text{se } P(y) < \phi \end{cases}$;
- $H_m(y) = (-1)^m e^{y^2/2} \frac{d^m}{dy^m} (e^{-y^2/2})$ (Polinômios de Hermite).

Em termos práticos, o cálculo da integral de B_m é realizado numericamente através do método de Simpson considerando o intervalo de -10 a 10 , A série é limitada em seu número de termos, ou seja, assumimos $m = 35$. De acordo com [66], na região onde $R_Y > 0,90$ a equação 5.7 pode ser aproximada a outra função mais simples, a saber:

$$R_Z \simeq 1 - a_1(1 - R_Y)^{1/2}. \quad (5.8)$$

O passo seguinte é calcular a transformada de Fourier da equação 5.2, para isso será utilizado o algoritmo de Singleton. Com o cálculo desta transformada de Fourier inversa (aplicada a $\widehat{Y}(\mathbf{p})$) obtemos $Y(\mathbf{x})$ que possui uma distribuição normal de probabilidade $P(y)$ dada pela equação 5.9, já que $Y(\mathbf{x})$ é normal com média zero e variância 1.

$$P(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{y'} e^{-y^2/2} dy. \quad (5.9)$$

E por ultimo, aplica-se o filtro não linear, dado pela equação número 5.10, que transforma o campo Y no campo Z .

$$Z = F_{N-Linear} = \begin{cases} 1, & \text{se } P(y) \leq \phi \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (5.10)$$

Principais características:

- Y é normal, correlacionado e definido em \mathfrak{R} ;
- Z é binário, possui média igual a porosidade ϕ e variância igual a $\phi - \phi^2$.

5.2 Esferas Sobrepostas - ES

Nesta sessão iremos discutir o método de reconstrução por Esferas Sobrepostas (ES), abordada no trabalho de [64]. A técnica baseia-se no estudo da distribuição do tamanho de grãos sólidos através da morfologia matemática, segundo a metodologia publicada em [71], este estudo visa a manutenção da distribuição do tamanho de grão e da porosidade durante a reconstrução 3-D advinda da imagem 2-D.

Os métodos da Gaussiana Truncada (GT) e Sistemas de Percolação Multiescala (SPME), são efetivos em manter a correlação e a porosidade durante o processo de reconstrução. No entanto, não apresentam a mesma eficiência na conservação da distribuição do tamanho de grão, o que em alguns casos pode comprometer a eficácia do processo de reconstrução.

O método ES consiste em modelar os grãos sólidos da amostra como se fossem esferas e impor a conservação do tamanho dos grãos. É preciso critério na aplicação do método, já que segundo o trabalho [64], o alto desempenho do método se verifica em amostras de baixa porosidade que possuem a geometria de seus grãos mais simples que a geometria dos poros.

Esta característica do método, o lança como uma alternativa aos métodos da Gaussiana Truncada (GT) e Sistemas de Percolação Multiescala (SPME) na simulação de estruturas fortemente correlacionadas espacialmente, já que nestes caso tais métodos mostraram-se ineficientes em preservar a geometria original da amostras de antes da reconstrução.

Dessa forma, o método de reconstrução de imagens, visa coletar informações relevantes de uma imagem 2-D e transmiti-las para uma imagem 3-D, de modo que qualquer secção transversal dessa imagem tridimensional contenha as características da imagem 2-D original. No caso das Esferas Sobrepostas (ES) as informações relevantes são a porosidade e a distribuição de diâmetro de grão.

5.2.0.2 Detalhes da Técnica ES

Em TORQUATO 2002 [16] é definido a distribuição superficial de grãos que neste trabalho iremos denotar como $P_A(D)$. Esta grandeza é a representação da fração da área da imagem 2-D correspondente aos grãos, também em 2-D, de diâmetro D .

$$P_A(D) = \frac{\rho \pi D^2}{4} = \frac{N}{L^2} \frac{\pi D^2}{4}. \quad (5.11)$$

Onde:

- $P_A \in [0, \phi]$;
- N é o número de esferas;
- D é o diâmetro de das esferas;
- L é o comprimento da malha quadrada utilizada.

Já a publicação [64] define a distribuição volumétrica de diâmetro de poro, denotada por $P_V(D)$, como sendo a fração do volume da imagens 3-D reconstruída correspondente ao aos grãos, também tridimensional, de diâmetro D , escrevemos:

$$P_V(D) = \frac{n_e \pi D^3}{6L^3}. \quad (5.12)$$

Onde:

- $P_V \in [0, \phi]$
- n_e é o número de esferas.
- D é o diâmetro de das esferas.
- L é o comprimento da malha quadrada utilizada.

É nesta etapa do desenvolvimento do método que surge sua principal característica: A manutenção da distribuição do tamanho de grãos. Para isso, tomamos a igualdade das equações 5.11 e 5.12 para obter o número de esferas associadas a cada diâmetro D que deverão ser geradas, a saber:

$$n_e(D) = \frac{6L^3 P_A(D)}{\pi D^3}. \quad (5.13)$$

Faz-se necessário ainda, a definição de mais dois parâmetros de controle do teste: o *fator de borda* f_B e o *fator de sobreposição* f_S .

No domínio do contínuo, considerar ou não, a região de fronteira como parte integrante do sólido é irrelevante. No entanto, no domínio discreto onde processamos as imagens digitais das amostras objetos de estudo, tal consideração é de extrema relevância. Em outras palavras, considerar ou não as regiões de fronteira causam apreciáveis variações no cálculo do volume.

Existem ainda casos mais complexos, onde, na mesma amostra, certas regiões de fronteiras são consideradas e outras não. Isto impõe uma dificuldade adicional ao processo de geração de esferas, que pode ser facilmente contornada com a introdução do *fator de borda* f_b .

Onde:

- $f_b = 1$, para designar que a região de contorno em questão faz parte do sólido;
- $f_b = 0$, para designar que a região de contorno em questão não faz parte do sólido.

Esses valores podem ser inferidos ou sorteados aleatoriamente, dependendo do caso.

O *fator de sobreposição* f_s regula a sobreposição entre as esferas geradas permitindo o controle da conectividade da imagem gerada.

Em continuidade ao desenvolvimento do método, iniciamos à simulação computacional que consiste de um *looping* gerador das esferas, onde cada iteração corresponde a diâmetro de esfera. A evolução do diâmetro é decrescente durante o processo e a posição da esferas geradas na malha é aleatória, no entanto para as esferas subseqüentes a primeira, onde $D < f_s$, há um vínculo que as obriga a se sobrepor a qualquer uma das outras esferas geradas.

Principais características:

- Um elevado f_s resulta da geração de esferas conectadas, parcialmente sobrepostas;
- Um baixo f_s resulta em uma imagem aleatória, podendo estar conectados ou não.

Contudo, precisamos retomar a equação 5.13 que descreve $n_e(D)$ sem considerar o fator de sobreposição f_s . Dessa forma, essa expressão precisa ser reformulada com o objetivo de manter a porosidade da imagem original, por isso recorreremos a definição de *volume sobreposto* $V_s(D)$ que é o volume da região de intersecção entre as esferas.

Neste ponto, damos início a um segundo *looping*, que a cada passo corrige o erro gerado pela sobreposição adicionando um volume extra, chamado volume de esferas de correção $V_c(D)$, através da adição de mais esferas até que o erro ou volume residual $V_{resid}(D)$ seja menor ou igual a zero. Em outras palavras, o segundo *looping* deve estar ativo até que a condição $V_{resid}(D) = V_c(D) - V_s(D) \leq 0$ seja satisfeita e só assim prosseguimos para o próximo passo do primeiro *looping* adotando o próximo diâmetro, menor que o anterior em um unidade, ou seja, $D - 1$.

5.3 Sistemas de Percolação Multiescala - SPME

Proposta inicialmente por [72] e posteriormente estudada por [73–76], o método SPME surge como uma excelente alternativa aos métodos de reconstrução citados anteriormente devido a sua simplicidade e redução do custo computacional em simulações numéricas de permeabilidade, conforme consta em [77].

A técnica de reconstrução SPME pode ser interpretada como a superposição de diversas redes de percolação namoescala em que a representação dos poros e grãos sólidos, de cada rede, se dá de maneira aleatória, para tal, é necessário o conhecimento da distribuição do tamanho de poro e a distribuição de tamanho de grão sólidos.

Em outras palavras, neste modelo os dados estatísticos são determinados levando em consideração os pixels da imagem que formam as fases sólida e porosa, tratando-as como estruturas polidispersas que se modificam juntamente com a alteração da escala [77]. Também assumimos que o meio poroso a ser estudados possui homogeneidade e isotropia em termos estatísticos.

Tais sistemas percolativos se diferenciam dos sistemas convencionais, já que não é necessária a escolha de um número de coordenação. Como resultado do processo de superposição de escalas, verifica-se o surgimento intrínseco de estreitamentos nas junções dos poros maiores (constrições), diferentemente dos sistemas clássicos, que em geral são aleatórios e possuem correlação com comprimentos de escala menores que o tamanho dos maiores poros.

5.3.0.3 Detalhes da Técnica - SPME

O método de reconstrução 3D SPME considera n níveis de discretização do espaço e cada um deles representa uma escala que possui classes de poro e de grãos sólidos com tamanhos específicos, designados nesse trabalho como blocos. Em outras palavras, associamos a escala 1 aos blocos de maior tamanho d_1 . A escala decai até atingir um n correspondente aos blocos de menor tamanho d_n .

Por uma questão de simplificação, neste trabalho vamos explorar o caso particular onde os blocos possuem formato cúbico e a razão d_i/d_{i+1} é uniforme e igual a dois. O método realiza sucessivas sobreposições, em todas as escalas de tamanho $d_i = 2^{n-1}d_n$ onde cada escala $i \in 1 \leq i < n$, dessa forma, no âmbito da escala n , a ocupação de blocos de tamanho d_n se dá de maneira aleatória, com as seguintes características:

- Blocos vazios ou poros de classe n possuem uma probabilidade de ocupação p_n ;
- Blocos sólidos ou grãos sólidos classe n possuem uma probabilidade de ocupação $s_n = 1 - p_n$;

- Os blocos podem constituir elementos denominados de "cinzas" passíveis de ocupação prévia por poros ou grãos sólidos. A fração volumétrica da região cinza de classe i é dada por $q_i = 1 - (p_i + s_i)$.

A reconstrução toma início na escala 1 e vai até a escala i e a fração aparente (visível) dos poros de cada classe pode ser expressa como:

$$u_1 = p_1, \quad u_i = p_i q_{i-1} q_{i-2} \dots q_1. \quad (5.14)$$

Dessa forma, a porosidade total da estrutura reconstruída é

$$\phi = \sum_{i=1}^n u_i. \quad (5.15)$$

Analogamente a fração ocupada por partículas sólidas é representada por

$$w_1 = s_1, \quad w_i = s_i q_{i-1} q_{i-2} \dots q_1. \quad (5.16)$$

A amostra reconstruída é tratada como uma rede de percolação de sítios cujos dados de entrada são os volumes u_i e w_i . Nesta dissertação iremos utilizar o software IMAGO, onde tais parâmetros são obtidos através de uma técnica de abertura morfológica de imagens 2D, conforme as publicações [30,71], o IMAGO resolve as equações 5.14 e 5.16 e determina p_i e s_i .

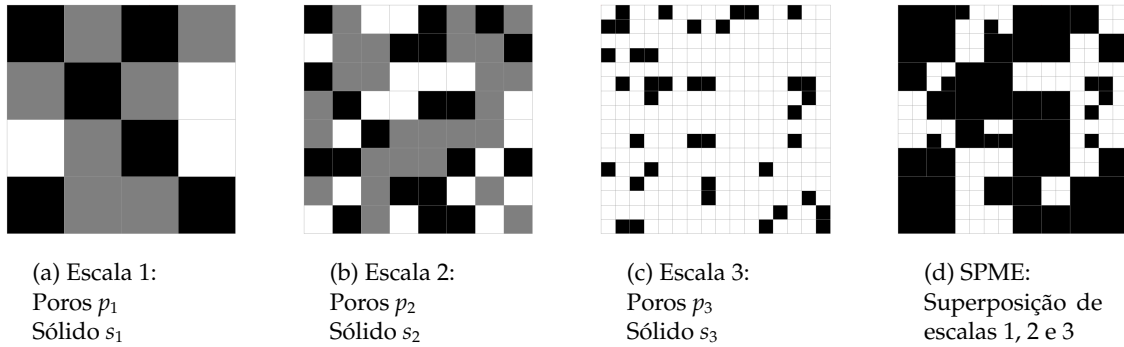


Figura 5.1. Representação esquemática da reconstrução SPME.

É possível observar que as imagens reconstruídas pelo método SPME são constituídas fundamentalmente de estruturas aleatórias, isso implica que quando quando blocos de classe $i - 1$ são sobrepostos sobre blocos de classe i o sistema adquire correlação para deslocamento inferiores à dimensão d_{i-1} . Isso permite abordar um bloco de tamanho d_{i-1} como um aglomerado de blocos de tamanho d_i .

5.4 Algoritmo de Intermutabilidade Múltipla

Nesta sessão discutimos o algoritmo de otimização denominado *Algoritmo de Intermutabilidade Múltipla* apresentado na publicação de [78]. Ele foi desenvolvido com o objetivo de ser mais preciso e eficiente na criação de modelos tridimensionais de estruturas porosas, objetivando uma melhor previsão e análise de parâmetros físicos e comportamento mecânico das amostras estudadas.

A técnica originalmente foi aplicada à amostras porosas de arenitos com alto grau de ligação que possivelmente sejam intratáveis pelas técnicas apresentadas até o momento. A reconstrução dessas estruturas em 3D é otimizada através da integração do algoritmo de *recozimento simulado melhorado* (*simulated annealing algorithm -SAA*) e uma função de controle do sistema fractal. Para isso foi desenvolvido um descritor de fractal cuja a proposta é melhorar a caracterização morfológica de poros complexos, além disso, um algoritmo de atualização do sistema denominado de *algoritmo de pré-condicionamento*, é proposto para melhorar a eficiência da reconstrução na fase posterior, fazendo o processo de reconstrução convergir mais rapidamente.

5.4.1 Recozimento Simulado Convencional

Damos início a apresentação de uma visão geral da técnica de reconstrução denominada recozimento simulado (*simulated annealing algorithm -SAA*), primeiramente em sua versão original. A técnica baseia-se na movimentação de pixels da imagem 2D com conservação de certas características, algumas das principais publicações sobre o assunto elegem a porosidade e função de correlação como parâmetros a serem preservados [51,62,79,80].

Dessa forma, a parte *a* da imagem apresentada na figura 5.4 é submetida a aplicação da técnica, a imagem foi obtida no artigo de [78], processada e segmentada conforme [28,81–88]. Tal amostra é tomada como referência, de onde é feita uma distribuição dos pixel pretos e brancos que servirá de modelo para a reconstrução inicial onde o números desses pixels pretos e brancos permanece exatamente o mesmo durante o processo de reconstrução.

Para controlar a eficiência da reconstrução é estabelecida a função de controle $f_0(r_i)$ que relaciona parâmetros estatísticos das amostras de referência e reconstruída. Sendo assim, a reconstrução é iniciada como uma configuração denominada *posição de teste*, que é um rearranjo dos pixel da amostra de referência envolvendo troca de posição entre pixels brancos e pretos.

O passo seguinte do procedimento é verificar se a mudança é aceitável ou não, para tal análise definimos:

- $f_0(r_i)$, função de controle do modelo de referência;
- $f(r_i)$, função de controle antes da mudança de posição dos pixels;
- $f'(r_i)$, função de controle depois da mudança de posição dos pixels (posição de teste).

A diferença entre as duas funções de controle das amostras reconstruídas e a função de controle da amostra de referência é chamada de *Energia*, conforme equações 5.17, 5.18 e 5.19.

$$E = \sum_i [f(r_i) - f_0(r_i)]^2, \quad (5.17)$$

$$E' = \sum_i [f'(r_i) - f_0(r_i)]^2, \quad (5.18)$$

$$\Delta E = E' - E. \quad (5.19)$$

Onde:

- E é a energia do sistema antes do rearranjo de pixels.
- E' é a energia do rearranjo depois do rearranjo de pixels.

Conforme o critério de Metropolis, publicado em [86] a posição de teste será aceita apenas para uma probabilidade $p(\Delta E)$, conforme

$$p(\Delta E) = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta E \leq 0 \\ \exp(-\Delta E/T), & \text{se } \Delta E > 0. \end{cases} \quad (5.20)$$

O parâmetro T é a *temperatura*, e em se tratando de simulação numérica atribuímos a ele um valor inicial elevado que posteriormente deve decair muito lentamente, conforme [78]. O trabalho de [33] menciona ainda que a temperatura inicial deve ser escolhida de modo a garantir que a probabilidade de mudança inicial entre os pixels seja aproximadamente 0,5, o artigo também sugere uma evolução ao *estado fundamental* com um cronograma de recozimento onde a temperatura decai conforme $T(k) \sim 1/\ln(k)$.

No entanto um recozimento tão lento causa dificuldades operacionais aumentando a demanda computacional. Por isso é adotado um cronograma de recozimento mais simplificado com o objetivo de otimizar o tempo, dado por:

$$\frac{T(k)}{T(0)} = \lambda^k. \quad (5.21)$$

onde λ é uma constante que precisa ser menor do que 1. Sobre esse assunto, citamos como exemplo o trabalho de [45] que utiliza $T_0 = 5 \times 10^{-5}$ e $\lambda = 0,9$.

Dessa forma, verifica-se um decaimento drástico do percentual de aceite da permuta entre pixels, sendo esta uma característica intrínseca do método. O gráfico da figura 5.2 apresenta em detalhes tal propriedade.

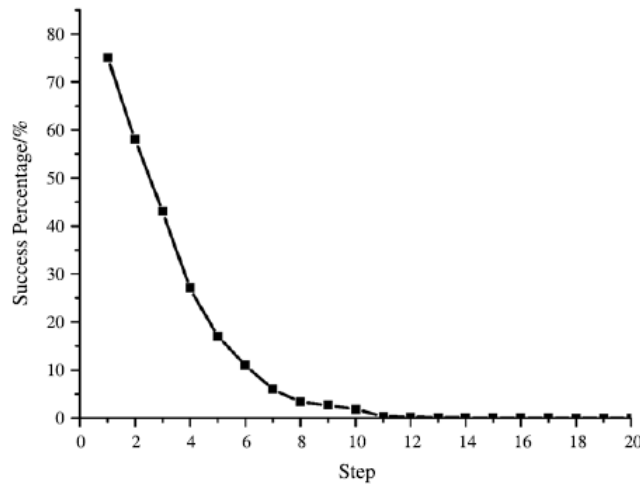


Figura 5.2. Decaimento do percentual de aceite da permuta entre pixels.

Levando em consideração que a cada paço da simulação, a função de controle f' da imagem reconstruída se aproxima mais rapidamente da função f_0 da imagem de referência do que f , a variação de energia ΔE mais provável é positiva, conforme equação 5.17. Além disso, a probabilidade de aceitação se torna ainda menor quando T diminui, por isso apenas uma proporção muito pequena de permutações são aceitas, e a evolução da estrutura reconstruída torna-se muito lenta, consequentemente a maior parte do tempo despendido na atualização funções de controle é ineficaz.

Observou-se que a maioria dos pontos de grade que obtiveram sucesso na permuta possuem maior chance de formar pontos isolados, conforme figura 5.3.

5.4.2 Multiple Interchanging Process - MIP

Observa-se que durante a reconstrução preliminar de amostras de arenito altamente conectados, num processo de recozimento simulado convencional, ocorre a formação de blocos brancos devido a agregação de grades brancas distribuídas aleatoriamente. No entanto, mesmo com a simplificação proposta na equação 5.21, devido a pequena taxa de decaimento da temperatura T , o processo de reconstrução continua demasiadamente lento.

Buscando contornar essa dificuldade o trabalho de [78] propõe um melhoramento da reconstrução por recozimento simulado com a introdução do algoritmo chamado *Multiple Interchanging Process - MIP*. Diferentemente do recozimento simulado convencional, que faz a permuta entre pares de pixel pretos e brancos, o MIP realiza tal permutação com vários

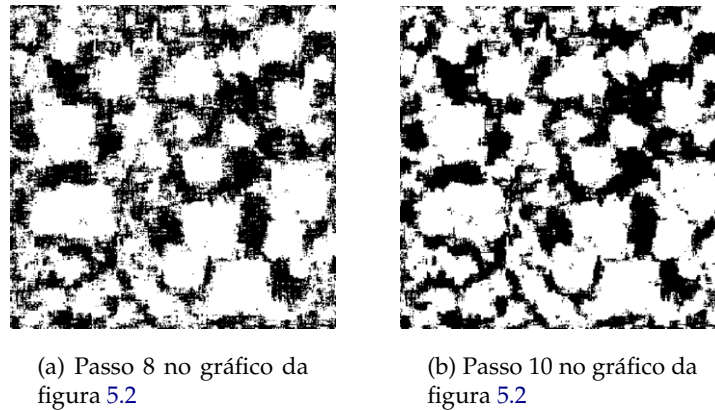


Figura 5.3. Execução de uma reconstrução via recozimento simulado convencional.

pixels colhidos aleatoriamente e pertencentes a um mesmo bloco.

Caraterísticas da reconstrução tais como tamanho do bloco de destino e números de blocos são definidas de acordo com a informação estatística extraída da imagem de referência. Um exemplo de aplicação do MIP pode ser observado no item b da figura 5.4. O critério de aceitação da reconstrução continua sendo fornecido pela equação 5.20.

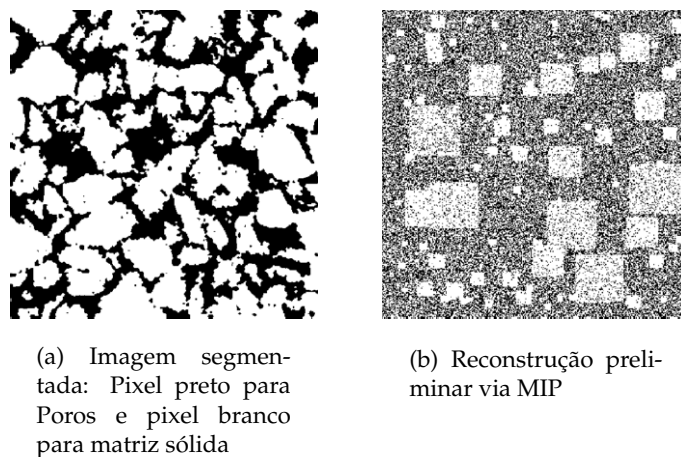


Figura 5.4. Imagem tomada como exemplo para aplicação da técnica *Recozimento Simulado*. Extraída de YANG JU 2014 *et al.*.

5.4.3 Função de Controle Fractal

O caráter fractal de microestruturas de rochosas é um fato científico comprovado por diversos estudos [81, 82, 89] e o trabalho de YANG JU 2014 utiliza esse fato para caracterizar a

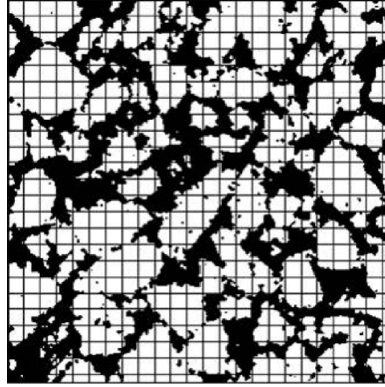


Figura 5.5. Representação do método box-covering para determinação da função de controle fractal.

morfologia de estruturas porosas e complexas, levando em conta a dimensão fractal da estrutura. O leitor interessado em maiores detalhes sobre o cálculo da dimensão fractal de rochas pode consultar [90,91]. Dessa forma, foi desenvolvido um descritor fractal com base numa técnica denominada *box covering*, com o objetivo de configurar a função de controle do sistema fractal, conforme [92]. Esse descritor consiste em cobrir a imagem com pequenos quadrados de tamanhos fixos, conforme figura 5.5. Na sequência, calcula-se a probabilidade de todos os pixel contidos na caixa sejam brancos.

Por uma questão de simplificação do código de reconstrução a função de controle do sistema fractal é determinada apenas das direções ortogonais do espaço tridimensional. Para exemplificar, apresentaremos um estudo no plano XY, dessa forma, a função de controle do sistema fractal da seguinte forma:

$$F^j(r) = \left\langle I^j(x, y, z) \ I^j(x+1, y+1, z+1) \ ... \ I^j(x+r, y+r, z+r) \right. \\ I^j(x, y+1, z) \ I^j(x+1, y+1, z) \ ... \ I^j(x+r, y+1, z) \\ \vdots \\ \left. I^j(x, y+r, z) \ I^j(x+1, y+r, z) \ ... \ I^j(x+r, y+r, z+r) \right\rangle. \quad (5.22)$$

Onde:

- r é o comprimento do lado dos pequenos quadrados.
- j indica da fase estudada, ou seja, fase sólida.
- Percentagem de cobertura das caixas de lado r completamente preenchida por pixels brancos. $I^j(r_i)$ foi definida pela equação 4.6, a saber:

$$I^{(i)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{x} \text{ pertence a fase } \mathfrak{I}, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

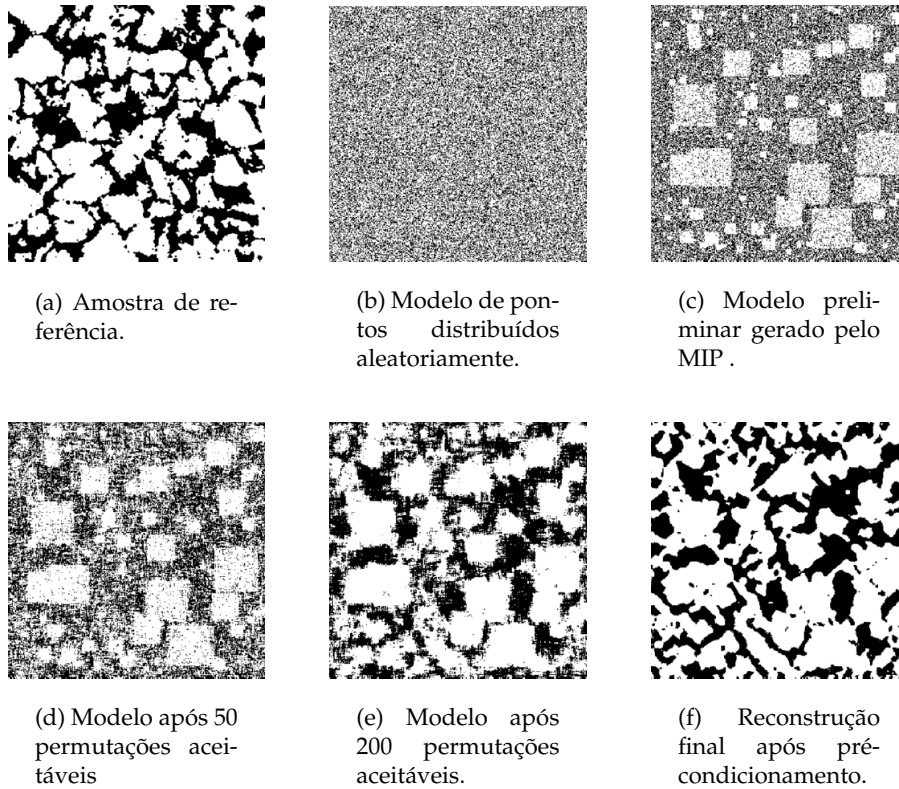


Figura 5.6. Recozimento simulado melhorado - Exposição de todas as etapas da aplicação do Algoritmo de Intermutabilidade Múltipla.

Dessa forma, a função de controle fractal carrega informação da conectividade do sistema relativa aos poros ou fase sólida. Diferentemente da função de correlação, que reúne informações sobre a distribuição de pixel pretos e brancos, a função de controle fractal guarda informações sobre a conectividade das fases porosa ou sólida.

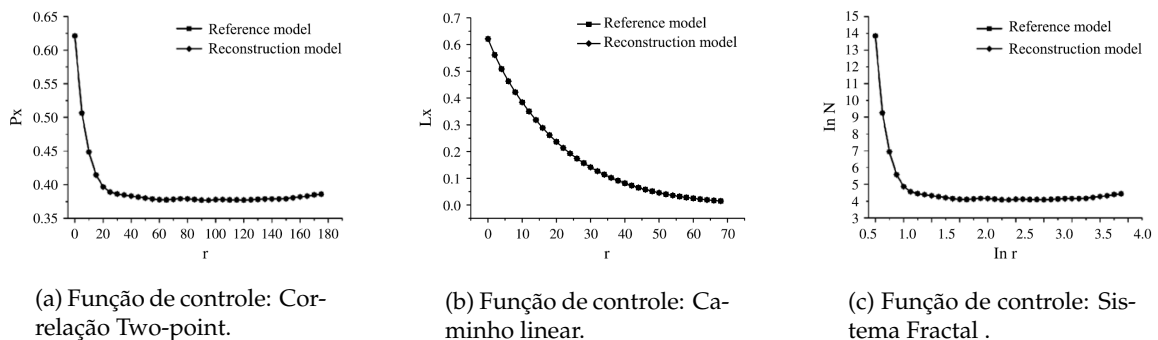


Figura 5.7. Comparação entre as funções de controle da amostra reconstruída 3D e amostra de referência.

5.4.4 Procedimento Pré-Condicionado

A análise dos resultados mostraram que grande parte dos pontos que obtiveram sucesso na permuta possuem maior chance de formar pontos isolados. A proposta de [78] para contornar tal dificuldade foi o desenvolvimento de um procedimento de pré-condicionamento, realizado antes de se estudar as funções de controle.

Nesse procedimento um par de pixels isolados, preto e branco, são selecionados de forma totalmente arbitrária ao invés da tradicional escolha aleatória, em seguida recorreremos às funções de controle de modo a verificar se a troca é aceitável. Assim, o pré-condicionamento melhora a percentagem de aceitação e reduz o tempo gasto desnecessariamente na determinação de funções de controle na fase posterior de reconstrução.

Este procedimento foi realizado após a estrutura básica da reconstrução porosa ter sido estabelecida, as imagens *e* e *f* da figura 5.6 apresentam de maneira clara o efeito do procedimento. De maneira geral, a mesma figura apresenta o processo de reconstrução via recozimento simulado melhorado na integra, considerando todos algoritmos de melhoria discutidos anteriormente.

5.4.5 Reconstrução 3D

O processo de reconstrução utilizado na técnica adotou a função de correlação entre dois pontos como função de controle, sendo tomada como fonte dos dados morfológicos da imagem de referência. Conforme esperado, durante o processo de reconstrução, a porosidade da amostra de referência foi mantida e após a construção da estrutura preliminar via recozimento simulado convencional foram aplicadas as funções de controle de probabilidade de dois pontos, a função de controle de trajetória linear e a função de controle fractal.

O algoritmo de YANG JU 2014, prevê que após 200 tentativas de permutação mal sucedidas deve-se dar início ao procedimento de pré-condicionamento antes da determinar das funções de controle, e após esses procedimentos, os parâmetros de controle da amostra reconstruída em 3D são similares aos parâmetros de controle da amostra de referência, conforme figura 5.7 e finalmente a imagem 3-D reconstruída por este é apresentada na figura 5.8.

5.4.6 Análise dos resultados

Além da função de correlação two-point e porosidade, a excelência do processo de reconstrução também depende de parâmetros microestruturais. Por isso YANG JU avaliou a microestrutura da imagem reconstruída de acordo com as publicações de [79, 93, 94], onde coleta-se informações quantitativas que serão utilizadas em tal avaliação, neste estudo foi dada atenção especial às propriedades estatísticas estruturais.

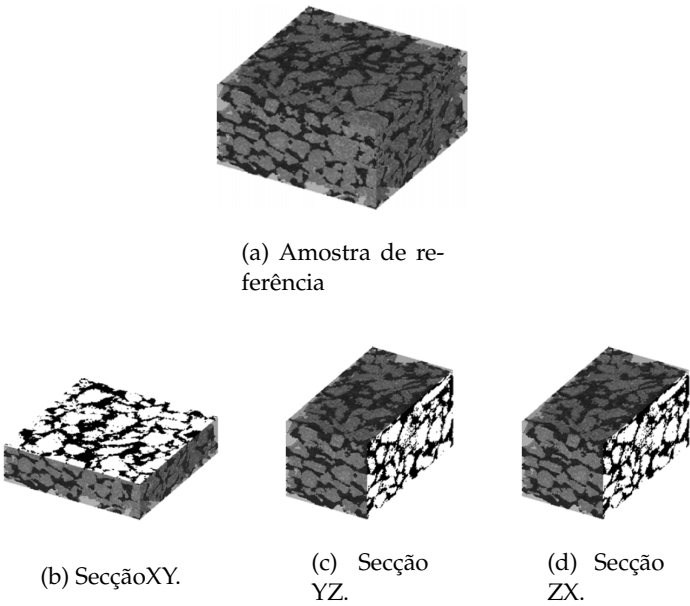


Figura 5.8. Reconstrução 3D via recozimento simulado melhorado como o algoritmo de Inter-mutabilidade Múltipla.

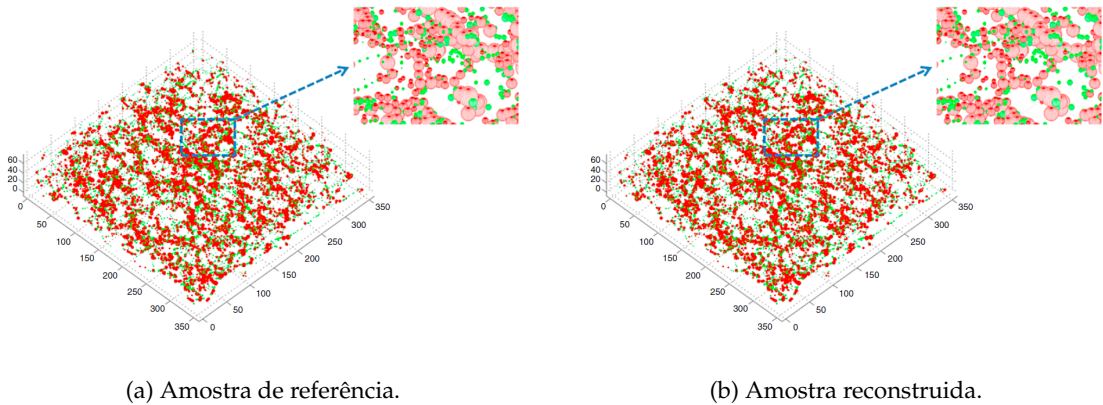


Figura 5.9. Simulação microestrutural: Poros como esferas vermelhas e gargantas como esferas verdes

Tabela 5.1. Parâmetros Topológicos da amostra de referência e da amostra reconstruída

Amostra	Número de Poros	Número de Gargantas	Número Médio de Coordenação de Poros
Referência	3394	5675	4,082
Reconstruída	3161	5240	4,067

Os autores tomam alguns parâmetros morfológicos considerados relevantes para avaliar a eficiência da reconstrução, são eles:

- Número de poros (em relação poros dilatados);
- Número de gargantas (poros estreitos que ligam grandes poros);
- Número médio coordenação dos poros (número médio de gargantas que liga um poro).

Para tal, foi utilizado um código chamado *Geometric and Topological Properties Analysis of Porous Rock Structure* para realizar tal tarefa. Os detalhes do código fogem ao escopo deste trabalho, no entanto o leitor interessado pode consultar as publicações de [95, 96] para maiores informações.

Aliado a um algoritmo de queima, os autores foram capazes de simular um esqueleto da microestrutura de setores específicos da estrutura porosa e depois reuni-los em uma única imagem, conforme pode ser observado na figura 5.9. Os resultados da simulação são apresentados na tabela 5.1.

Como pode ser observado os parâmetros topológicos estudados foram praticamente mantidos, indicando a alta eficiência do método de reconstrução com a utilização do algoritmo de Intermutabilidade Múltipla.

Capítulo 6

RESULTADOS

6.1 Segmentação e Porosidade

A fim de verificar a funcionalidade do método de segmentação na determinação da porosidade, extraímos a imagem de uma rocha que consta no artigo de [26], cuja porosidade foi estudada e estimada nesta mesma publicação.

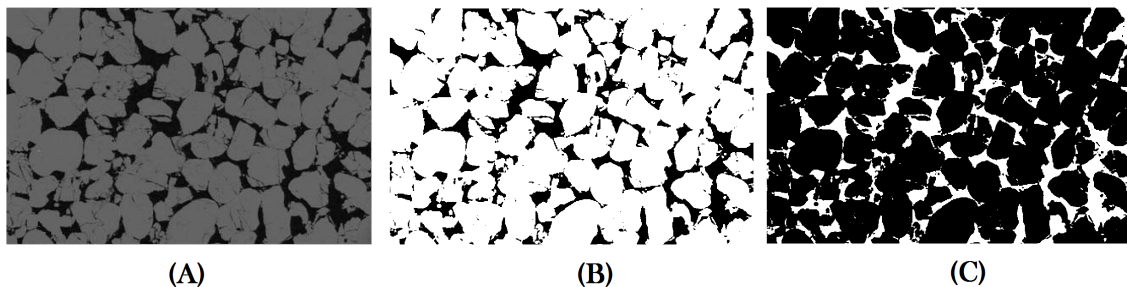


Figura 6.1. Segmentação: A) Imagem original extraída de TORABORI B) Grãos na cor branca e poros na cor preta C) Grãos na cor preta e poros na cor branca (Imagem negativa).

Na figura 6.1 é possível visualizar o resultado do procedimento de segmentação, o item A da figura apresenta a imagem original estudada por TORABORI, já os itens B e C indicam duas possíveis segmentações com o objetivo de separar as fases de grão e de poro, realizadas para esta dissertação.

A escolha do limiar (*threshold*) foi feita com base no histograma da distribuição da intensidade de pixels da imagem original, que pode ser visualizado na figura 6.2. É possível identificar dois picos bem definidos em torno das intensidades 15 e 100, associados as fases de poros e grãos respectivamente.

Embora este trabalho não tenha realizado estudos aprofundados relativos a incerteza associada ao processo de classificação, mostramos que tais erros estão associados predomina-

temente a sobreposição de picos.

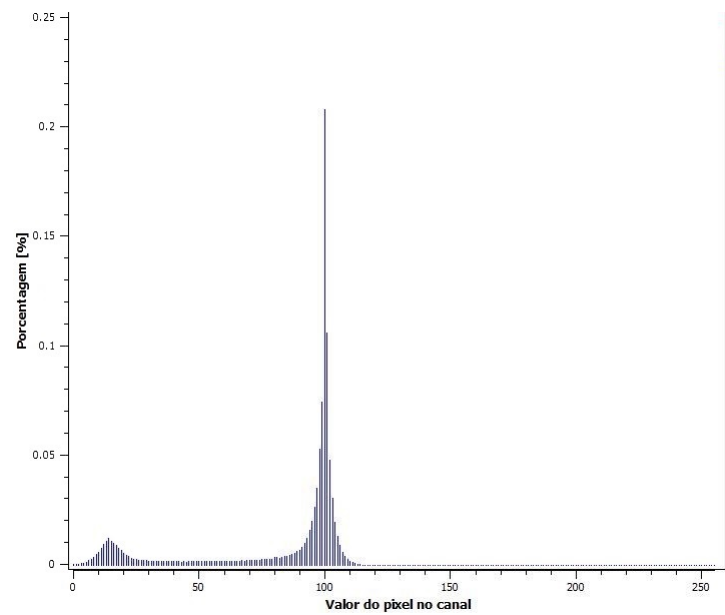


Figura 6.2. Histograma do item A da figura 6.1.

Sendo assim, podemos assumir que estes são minimizados consideravelmente vez que o histograma obtido é bimodal sem interseção entre os picos. Por isso utilizamos um limiar de corte próximo ao ponto médio entre eles. A tabela 6.1 resume os resultados obtidos.

Tabela 6.1. Quadro resumo: Resultado do processo de segmentação e determinação da porosidade.

Amostra	limiar <i>threshold</i>	Porosidade segundo TORABORI	Porosidade segundo nossos testes
Publicação de TORABORI	60	21%	20%

6.2 Gaussiana Truncada

Executamos o processo de reconstrução tridimensional via gaussiana truncada utilizando software IMAGO. Por questões de otimização, além dos aspectos visuais, avaliamos diversas configurações e parâmetros disponíveis no software para fins de reconstrução.

Daremos continuação ao processo de segmentação da amostra de TORABORI discutido na seção anterior. Desta forma, a imagem segmentada exposta na figura 6.1 sofrerá reconstrução em diferentes condições, que iremos designar por C70, C75, C80, C90 e C100. Não

discutiremos os detalhes destas configurações pois encaramos este procedimento como uma mera calibração dos recursos que necessita ter suas funcionalidades verificadas. A figura 6.3 mostra o resultado da reconstrução para cada um desses casos.

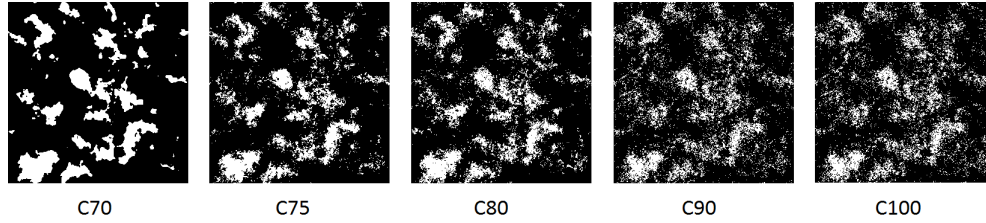


Figura 6.3. Imagens reconstruídas por Gaussiana Truncada a partir da mesma imagem 2-D segmentada (figura 6.1), com diferentes configurações no programa IMAGO.

A eficiência do processo de reconstrução 3-D pode ser avaliada, primeiramente por uma inspeção visual da figura 6.3, já que publicações de TORQUATO propõem que os pixels de cada uma das fases não devem estar difusos pela matriz. Também avaliamos o processo através do descritor estatístico *função de correlação entre dois pontos* (S_2), conforme figura 6.4. Em ambos os casos a configuração que melhor se adequou foi a C70.

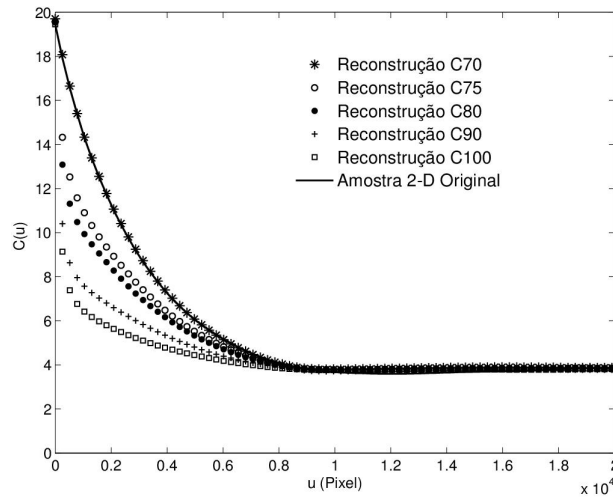


Figura 6.4. Determinação da melhor configuração para reconstrução via GT. Funções de Correlação: Amostra original segmentada 2-D e diversas configurações relacionadas na figura 6.3.

Com relação distribuição dos tamanhos de poros, também concluímos que a configuração C70, foi a que melhor se adequou a distribuição de tamanho de poros da imagem original, conforme figura 6.5. Mesmo para a melhor configuração, C70, é possível observar que os pontos do gráfico não possuem uma sobreposição tão precisa quanto no caso da função S_2 , tal fato já era previsto [69,70].

Analisando a imagem reconstruída como um fractal, podemos constatar que uma distribuição difusa dos pixels, além de comprometer a reconstrução, dificulta a estimativa da

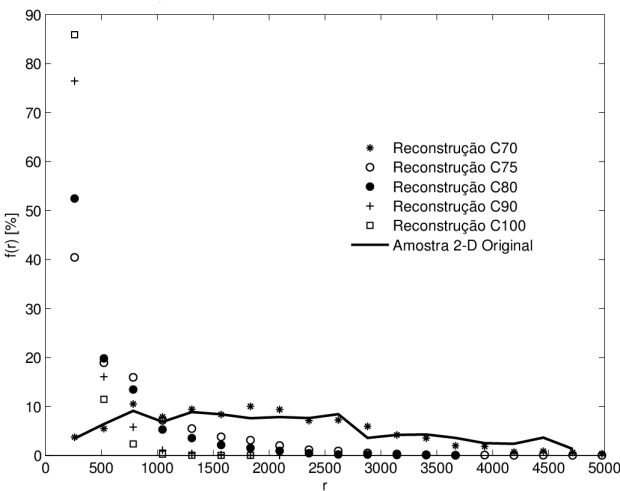


Figura 6.5. Distribuição de tamanho de poro gerada pelo software IMAGO.

dimensão fractal aumentando a incerteza associada, o que certamente influencia da distribuição de tamanho de poros. A tabela 6.2 apresenta os dados obtidos.

Tabela 6.2. Dimensão fractal das configurações.

Amostra	Dimensão fractal
TORABORI	1,5403 ± 0,16204
C70	1,4111 ± 0,16204
C75	1,5486 ± 0,26347
C80	1,5856 ± 0,20200
C90	1,6543 ± 0,33081
C100	1,6733 ± 0,34303

Realizamos o processo de reconstrução 3D e o resultado pode ser observado na figura 6.6

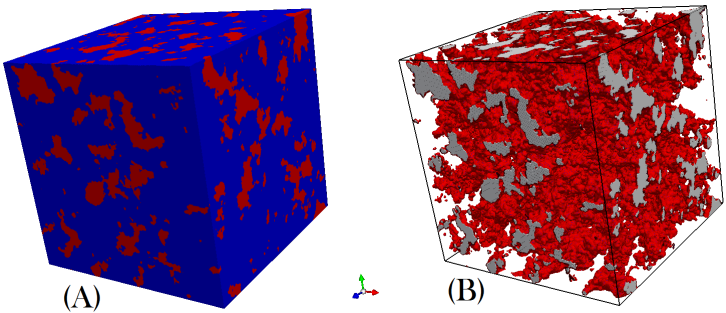


Figura 6.6. Reconstrução 3-D: A cor azul destaca a fase sólida e a vermelha a fase porosa. (A)Vista externa da imagem reconstruída em 3-D. (B) Vista interna da figura com destaque à fase porosa.

6.3 Esferas Sobrepostas

Aplicamos a técnica de reconstrução, via esferas sobrepostas, na amostra de TORABORI discutida nas seções anteriores. Desta vez iremos omitir os procedimentos que envolvem a obtenção da configuração ideal, vez que o procedimento já foi discutido em detalhes anteriormente.

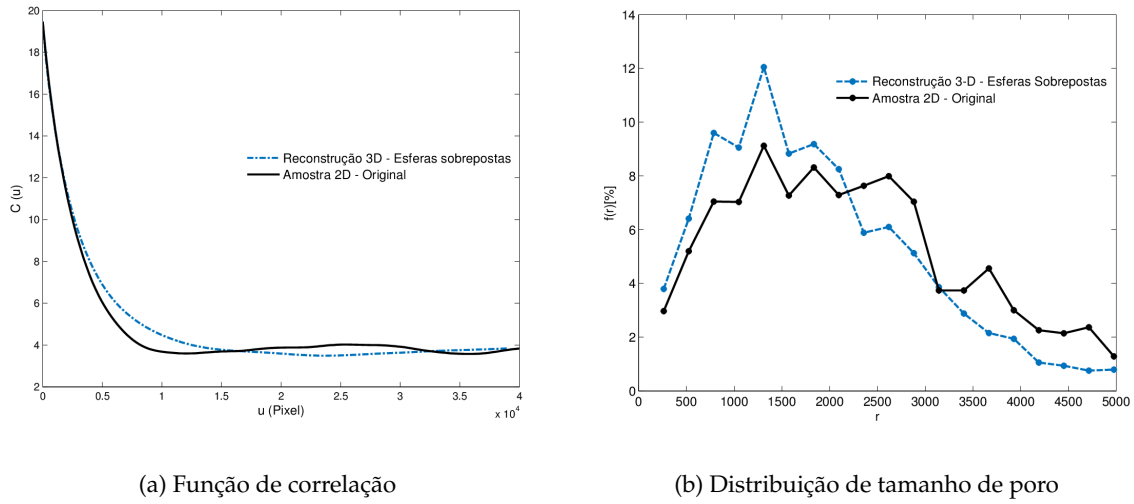


Figura 6.7. Reconstrução por Esferas sobrepostas: Parâmetros de controle.

A figura 6.7 apresenta os gráficos das função de correlação e da distribuição de tamanho de poro, que são tomados como parâmetros de controle. É possível constatar que a aplicação do método das esferas sobrepostas oferece uma maneira de aumentar a representatividade da distribuição do tamanho de grão em detrimento de uma piora da representatividade da

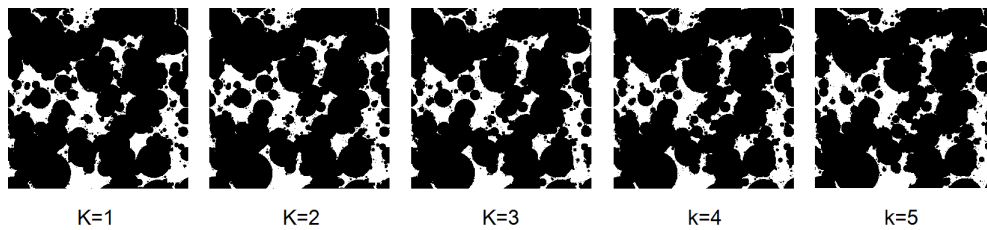


Figura 6.8. varias secções da mesma reconstrução. Amostra utilizada é a mesma da figura 6.1

função de correlação, conforme previsto em [69, 70]. Tal aspecto deve ser levado em consideração no momento da escolha do método. Para a amostra analisada por exemplo, a tentativa de aproximar a distribuição de tamanho de poro da amostra reconstruída 3D a amostra original 2D, através da aplicação da reconstrução por Esferas Sobrepostas, apresentou relativo sucesso e como esperado o procedimento piorou a representatividade da curva de correlação. Também investigamos as fatias individuais da amostra reconstruída final. Apresentamos algumas delas na figura 6.8 e catalogamos os na tabela 6.3. Podemos obser-

var que as características do método conferem uma maior estabilidade na distribuição de tamanho de poros, que pode ser detectada nas medidas da dimensão fractal das fatias, já que os resultados indicam pequenas variações tanto em valores médios, quanto em incerteza.

Tabela 6.3. Dimensão fractal das seções transversais da amostra reconstruída.

Amostra	Dimensão fractal
k=1	$1,4538 \pm 0,23397$
k=2	$1,4519 \pm 0,21138$
k=3	$1,4562 \pm 0,23215$
k=4	$1,4594 \pm 0,23675$
k=5	$1,4621 \pm 0,23836$

Finalmente, a figura 6.9 mostra a imagem reconstruída em 3D obtida a partir da mostra 2D, apresentada na figura 6.1, a través da aplicação do método das Esferas Sobrepostas.

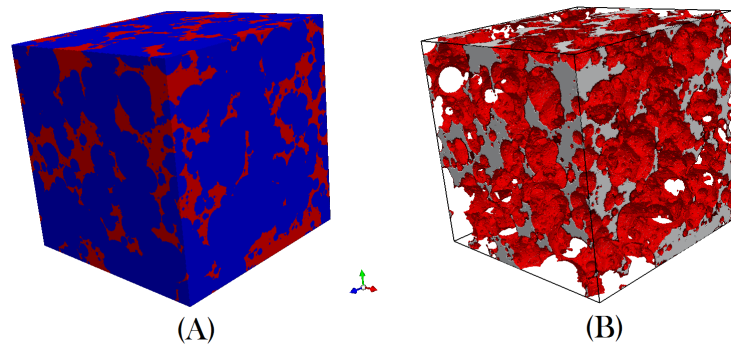


Figura 6.9. Reconstrução por ES da amostra da fig. 6.1. Fase porosa em vermelho.

6.4 Sistema de Percolação Multiescala - SPME

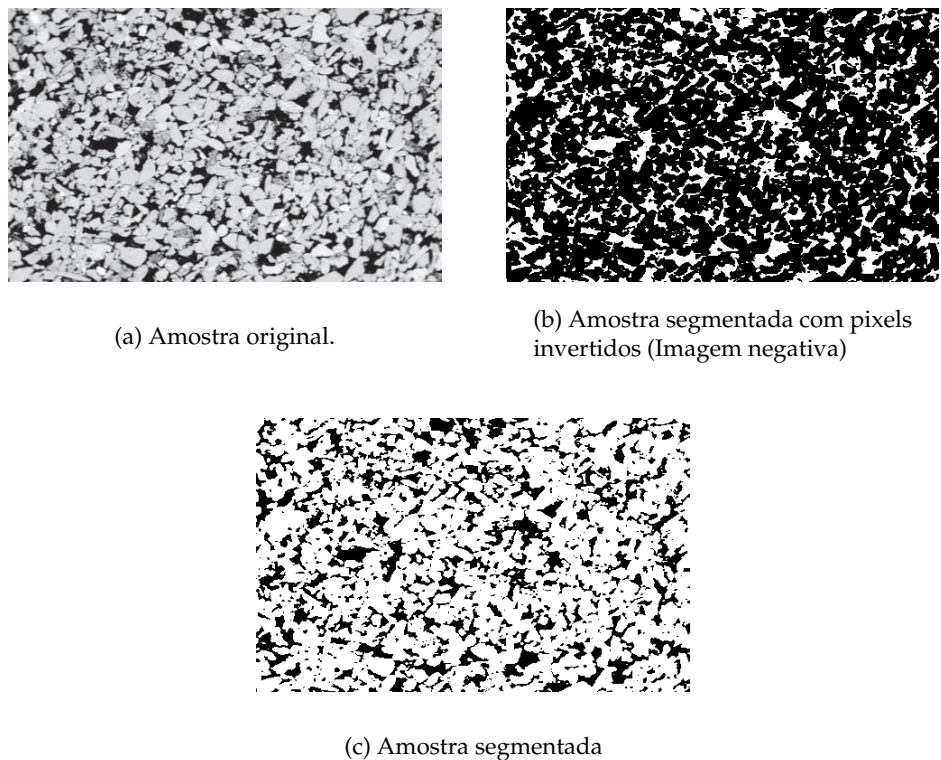


Figura 6.10. Segmentação de imagem extraída da publicação de COBALEDA 2000 [1]

Aplicamos a técnica de reconstrução a uma imagem digital da amostra k157, publicada em [1]. Realizamos o processo de segmentação conforme figura 6.10 e o processo de obtenção da melhor configuração foi realizado a exemplo das seções anteriores.

Os resultados referentes a segmentação e porosidade encontram-se na tabela 6.4.

Tabela 6.4. Quadro resumo: Resultado do processo de segmentação e determinação da porosidade - SPME.

Amostra	limiar <i>threshold</i>	Porosidade segundo TORABORI	Porosidade segundo nossos testes
Publicação de COBALEDA	140	24,2%	26,9%

Conforme publicação de [74], amostras reconstruídas por SPME apresentam-se menos conectadas do que a amostra original, o que gera um desvio nos valores da função de controle

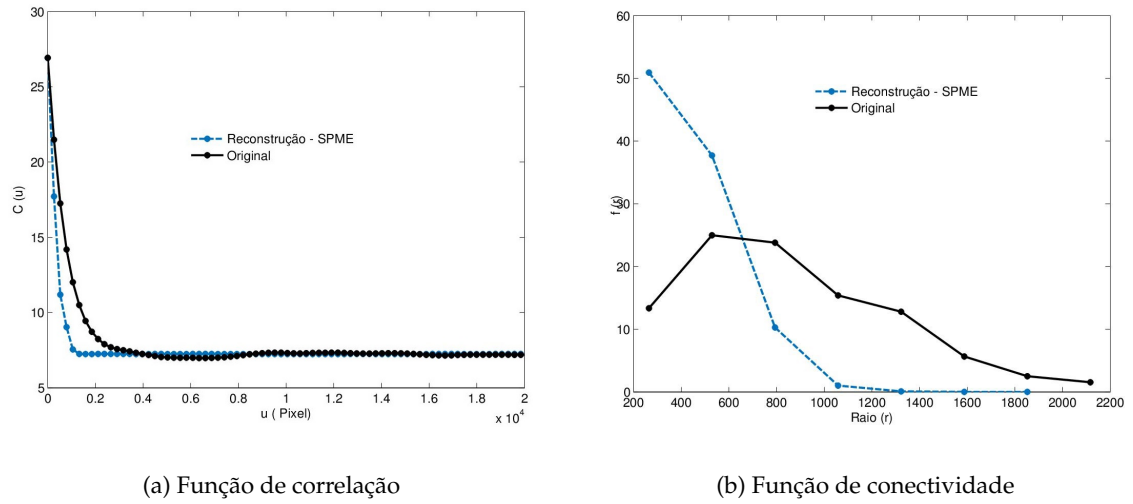


Figura 6.11. Reconstrução por SPME: Função de correlação e de conectividade da amostra apresentada na figura 6.10.

S_2 quando comparada a amostra original. Tal fato pode ser observado na imagem "a" da figura 6.11.

Já a distribuição de tamanho de poros sofre uma queda abrupta quando comparada a amostra original e o estudo da dimensão fractal de diversas seções transversais da amostra reconstruída final, dispostas na figura 6.12, apresentaram boa repetibilidade o que sugere boa precisão para o método porém baixa exatidão, em termos fractais. Os resultados são apresentados na tabela 6.5

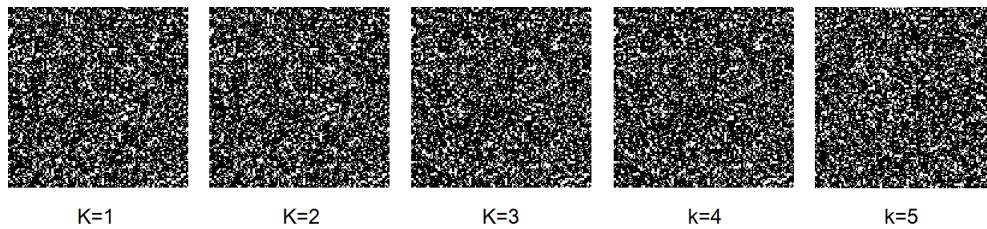
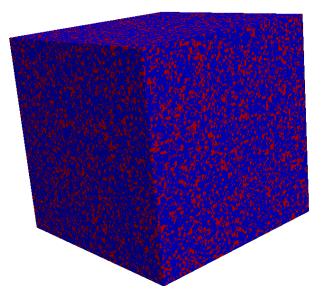


Figura 6.12. Varias secções da amostra reconstruída via SPME.

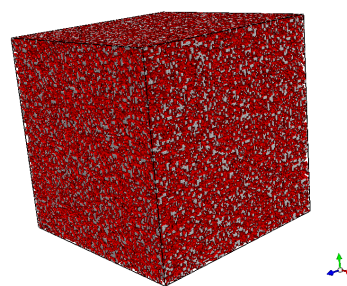
Finalmente, a figura 6.13 apresenta reconstrução 3D da amostra estudada nesta seção.

Tabela 6.5. Dimensão fractal de seções da imagem 3D reconstruída por SPME

Amostra	Dimensão fractal
k=1	$1,6859 \pm 0,35311$
k=2	$1,6859 \pm 0,35311$
k=3	$1,6853 \pm 0,35256$
k=4	$1,6848 \pm 0,3522$
k=5	$1,6844 \pm 0,35183$



(a) Vista externa



(b) Vista interna da fase porosa

Figura 6.13. Reconstrução 3D via SPME da amostra da figura 6.10.

Capítulo 7

CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentamos as principais técnicas de reconstrução de imagens 3D a partir de uma única imagem 2D através de processos estocásticos. Discutiu-se diversos aspectos microestruturais onde as teorias fractal e de percolação tiveram papel decisivo na elucidação de problemas típicos inerentes ao procedimento de reconstrução, tais como tempo de processamento computacional e preservação de parâmetros morfológicos.

Abordamos os aspectos teóricos e práticos que envolvem o processamento de imagem digital e exploramos as principais funcionalidades do software IMAGO, desenvolvido por pesquisadores do Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas de Materiais do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina em parceria com a ESSS – *Engineering Simulation and Scientific Software Ltda.*

Como visto, a escolha adequada da técnica a ser aplicada perpassa por parâmetros intrinsecamente correlacionados à distribuição espacial da amostra a ser estudada. Foi possível mostrar que a técnica de reconstrução via Gaussiana Truncada é uma técnica altamente sofisticada, aliando precisão com baixo tempo de processamento. No entanto, apresenta certa fragilidade ao tratar de amostras com alta complexidade estrutural por considerar apenas os dois primeiros momentos, a saber: Porosidade e função de correlação.

Ficou evidenciado que para tais amostras as técnicas mais indicadas são esferas sobrepostas e recozimento simulado melhorado.

Os resultados de uma reconstrução tridimensional também são úteis para simulação de propriedades físicas do material testado. Nesse sentido a reconstrução via SPME mostrou-se relevante, pois contribui para a simplificação da simulação da permeabilidade de materiais porosos, por isso recomendamos como trabalhos futuros um aprofundamento nos estudos de como a dimensão fractal pode auxiliar no refinamento do método mantendo sua simplicidade.

Todas as técnicas de reconstrução apresentadas constituem uma forma relativamente precisa e de baixo custo para se estudar propriedades físicas de rochas e materiais porosos em geral, muito embora este trabalho tenha se dedicado a expor questões relativas ao arenito.

Referências Bibliográficas

- [1] Cobaleda, G. A study of image autocorrelation as a method to characterize porosity and estimate permeability. *CT&F-Ciencia, Tecnología y Futuro* **2**, 69–81 (2000).
- [2] Mandelbrot, B. B. *Fractals: form, change and dimension*. San Francisco: WH Freeman and Company (1977).
- [3] Hausdorff, F. Dimension und äußeres maß. *Mathematische Annalen* **79**, 157–179 (1918).
- [4] Bunde, A. & Havlin, S. *Fractals and disordered systems* (Springer-Verlag New York, Inc., 1991).
- [5] Birdi, K. *Fractals in chemistry, geochemistry, and biophysics* (1993).
- [6] Ben-Avraham, D. & Havlin, S. *Diffusion and reactions in fractals and disordered systems* (Cambridge University Press, 2000).
- [7] Sallum, É. M. Fractais no ensino médio. *Revista do professor de Matemática* **57**, 1–8 (2005).
- [8] Stauffer, D. & Stanley, E. *From newton to mandelbrot: a primer in theoretical physics with fractals for the macintosh* (1996).
- [9] Broadbent, S. R. & Hammersley, J. M. Percolation processes. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 53, 629–641 (Cambridge Univ Press, 1957).
- [10] Flory, P. J. Molecular size distribution in three dimensional polymers. i. gelation. *Journal of the American Chemical Society* **63**, 3083–3090 (1941).
- [11] Domb, C. *Fluctuation phenomena and stochastic processes* (1959).
- [12] Gunton, J., San Miguel, M., Sahni, P. S., Domb, C. & Lebowitz, J. *Phase transitions and critical phenomena* (1983).
- [13] Hu, C.-K. Percolation, clusters, and phase transitions in spin models. *Physical Review B* **29**, 5103 (1984).
- [14] Stanley, H. E. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Reviews of modern physics* **71**, S358 (1999).

- [15] Stauffer, D. & Aharony, A. *Introduction to percolation theory* (Taylor and Francis, 1994).
- [16] Torquato, S. *Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties*, vol. 16 (Springer, 2002).
- [17] Jensen, I. Enumerations of lattice animals and trees. *Journal of Statistical Physics* **102**, 865–881 (2001).
- [18] Stauffer, D. Scaling theory of percolation clusters. *Physics reports* **54**, 1–74 (1979).
- [19] Stanley, H. E. Introduction to phase transitions and critical phenomena. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, by H Eugene Stanley, pp. 336. Foreword by H Eugene Stanley. Oxford University Press, Jul 1987. ISBN-10: 0195053168. ISBN-13: 9780195053166 1 (1987).
- [20] Domb, C. & Green, M. Phase transition and critical phenomena (1971).
- [21] Marques Filho, O. & Neto, H. V. *Processamento digital de imagens* (Brasport, 1999).
- [22] Fernandes, C. P. Engenharia de microestruturas: análise quantitativa de imagens e simulação de processos físicos. *Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis* (2002).
- [23] Gonzalez, R. C. & Woods, R. E, 1992, digital image processing. *Addison-Wesley* **5**, 11–15 (1800).
- [24] Chassery, J. & Montanvert, A. Geometrie discrete en analyse d'images, 1991. *Editions Hermes, Paris* .
- [25] LMPT-ESSS. Software imago (2014).
- [26] Torabi, A., Fossen, H. & Alaei, B. Application of spatial correlation functions in permeability estimation of deformation bands in porous rocks. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* (1978–2012) **113** (2008).
- [27] Leung, C.-K. & Lam, F. Maximum segmented image information thresholding. *Graphical Models and Image Processing* **60**, 57–76 (1998).
- [28] Otsu, N. A threshold selection method from gray-level histograms. *Automatica* **11**, 23–27 (1975).
- [29] Coster, M. & Chermant, J. Précis d'analyse d'images, 1989. *Presses du CNRS, Paris* .
- [30] Moschetto, C. Caractérisation de la structure poreuse des matériaux par analyse d'images: Apport des distances discrètes a la morphologie mathématique. *Rapport de Stage, LTHE, Grenoble* **49** (1991).
- [31] Chow, C. & Kaneko, T. Automatic boundary detection of the left ventricle from cineangiograms. *Computers and biomedical research* **5**, 388–410 (1972).

- [32] Bernsen, J. Dynamic thresholding of grey-level images. In *International conference on pattern recognition*, 1251–1255 (1986).
- [33] Jiao, Y., Stillinger, F. & Torquato, S. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions: Basic principles. *Physical Review E* **76**, 031110 (2007).
- [34] Torquato, S. Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties. 2002.
- [35] Sahimi, M. *Heterogeneous Materials I: Linear transport and optical properties*, vol. 1 (Springer, 2003).
- [36] Sahimi, M. *Heterogeneous Materials II: Nonlinear and Breakdown Properties and Atomistic Modeling*, vol. 2 (Springer, 2003).
- [37] Lindquist, W. B., Venkatarangan, A., Dunsmuir, J. & Wong, T.-f. Pore and throat size distributions measured from synchrotron x-ray tomographic images of fontainebleau sandstones. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* (1978–2012) **105**, 21509–21527 (2000).
- [38] Peebles, P. J. E. *Principles of physical cosmology* (Princeton University Press, 1993).
- [39] Gabrielli, A., Labini, F. S., Joyce, M. & Pietronero, L. *Statistical physics for cosmic structures* (Springer, 2006).
- [40] Pommerening, A. & Stoyan, D. Reconstructing spatial tree point patterns from nearest neighbour summary statistics measured in small subwindows. *Canadian journal of forest research* **38**, 1110–1122 (2008).
- [41] Surendiran, A., Sandhiya, S., Pradhan, S. & Adithan, C. Novel applications of nanotechnology in medicine. (2009).
- [42] Torquato, S. Exact expression for the effective elastic tensor of disordered composites. *Physical review letters* **79**, 681 (1997).
- [43] Torquato, S. Effective stiffness tensor of composite media: Ii. applications to isotropic dispersions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **46**, 1411–1440 (1998).
- [44] Jiao, Y. A generalized lattice-point method for reconstructing heterogeneous materials from lower-order correlation functions. *Ann J Materials Sci Eng* **1**, 11 (2014).
- [45] Sheehan, N. & Torquato, S. Generating microstructures with specified correlation functions. *Journal of Applied Physics* **89**, 53–60 (2001).
- [46] McMillan, B. History of a problem. *Journal of the Society for Industrial & Applied Mathematics* **3**, 119–128 (1955).

- [47] Torquato, S. Necessary conditions on realizable two-point correlation functions of random media. *Industrial & engineering chemistry research* **45**, 6923–6928 (2006).
- [48] Torquato, S. Statistical description of microstructures. *Annual Review of Materials Research* **32**, 77–111 (2002).
- [49] Loomis, L. H. *Introduction to abstract harmonic analysis* (Courier Dover Publications, 2011).
- [50] Rudin, W. *Fourier analysis on groups* (John Wiley & Sons, 2011).
- [51] Yeong, C. & Torquato, S. Reconstructing random media. *Physical Review E* **57**, 495 (1998).
- [52] Joshi, M. *A class of stochastic models for porous materials*. Ph.D. thesis, Ph. D. thesis, University of Kansas, Lawrence (1974).
- [53] Quiblier, J. A. A new three-dimensional modeling technique for studying porous media. *Journal of Colloid and Interface Science* **98**, 84–102 (1984).
- [54] Adler, P. *Porous media: geometry and transports* (Elsevier, 2013).
- [55] Giona, M. & Adrover, A. Closed-form solution for the reconstruction problem in porous media. *AIChE journal* **42**, 1407–1415 (1996).
- [56] Cahn, J. W. Phase separation by spinodal decomposition in isotropic systems. *The Journal of Chemical Physics* **42**, 93–99 (1965).
- [57] Berk, N. Scattering properties of a model bicontinuous structure with a well defined length scale. *Physical review letters* **58**, 2718 (1987).
- [58] Berk, N. Scattering properties of the leveled-wave model of random morphologies. *Physical Review A* **44**, 5069 (1991).
- [59] Roberts, A. & Teubner, M. Transport properties of heterogeneous materials derived from gaussian random fields: Bounds and simulation. *Physical Review E* **51**, 4141 (1995).
- [60] Roberts, A. & Knackstedt, M. Structure-property correlations in model composite materials. *Physical Review E* **54**, 2313 (1996).
- [61] Roberts, A. P. Statistical reconstruction of three-dimensional porous media from two-dimensional images. *Physical Review E* **56**, 3203 (1997).
- [62] Rintoul, M. D. & Torquato, S. Reconstruction of the structure of dispersions. *Journal of Colloid and Interface Science* **186**, 467–476 (1997).
- [63] Roberts, A. P. & Torquato, S. Chord-distribution functions of three-dimensional random media: Approximate first-passage times of gaussian processes. *Phys. Rev. E* **59**, 4953–4963 (1999). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.59.4953>.

- [64] Dos Santos, L. O. E., Philippi, P. C., Fernandes, C. P. & Gaspari, H. Reconstrução tridimensional de microestruturas porosas com o método das esferas sobrepostas. *Proceedings of the ENCIT* (2002).
- [65] Zhirong, L., Philippi, P., Fernandes, C. & Magnani, F. A reconstruction technique for 3-d porous media using image analysis and fourier transform,“. *Journal of Petroleum Science Engineering* 273–283 (1998).
- [66] Adler, P., Jacquin, C. & Quiblier, J. Flow in simulated porous media. *International Journal of Multiphase Flow* **16**, 691–712 (1990).
- [67] Fernandes, C. P. *Caracterização morfotopológica de espaços porosos: reconstituição multiescala e simulação de processos de invasão de fluidos não-molhantes*. Ph.D. thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. (1994).
- [68] Liang, Z. *et al.* Computer generation and application of 3-d reconstructed porous structure:: from 2-d images to the prediction of permeability (1997).
- [69] Bueno, A. D., Santos, L., Fernandes, C. P. & Philippi, P. C. Reconstrução tridimensional da micro-estrutura de rochas reservatório a partir de lâminas finas. In *Caxambú-MG-Brasil. IX Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas-ENCIT*, 12 (2002).
- [70] Bueno, A. D. *et al.* Estudo geométrico das representações tridimensionais da estrutura porosa e grafo de conexão serial para a determinação da permeabilidade intrínseca de rochas-reservatório de petróleo (2001).
- [71] Coster, M. & Chermant, J. *Précis d’analyse d’images’*, 22 édition, presses du cnrs, paris. Tech. Rep., ISBN 2-87682-020-X (1989).
- [72] Neimark, A. Multiscale percolation systems. *Sov. Phy* **96**, 1386–1396 (1989).
- [73] Daian, J.-F., Fernandes, C., Philippi, P. & da Cunha Neto, J. B. 3d reconstitution of porous media from image processing data using a multiscale percolation system. *Journal of Petroleum Science and Engineering* **42**, 15–28 (2004).
- [74] Fernandes, C. P., Magnani, F. S., Philippi, P. C. & Daian, J. Multiscale geometrical reconstruction of porous structures. *Physical Review E* **54**, 1734 (1996).
- [75] Xu, K., Daian, J.-f. & Quenard, D. Multiscale structures to describe porous media part i: theoretical background and invasion by fluids. *Transport in porous media* **26**, 51–73 (1997).
- [76] Xu, K., Daian, J.-F. & Quenard, D. Multiscale structures to describe porous media part ii: transport properties and application to test materials. *Transport in Porous Media* **26**, 319–338 (1997).

- [77] Fernandes, C. P., Philippi, P. C., Daian, J. F., Damiani, M. C. & CUNHA NETO, J. Determinação da permeabilidade de rochas reservatório reconstruídas em sistemas de percolação multiescala. In *ENCIT 2000-8th Brazilian Conference on Thermal Engineering and Sciences* (2000).
- [78] Ju, Y. *et al.* 3d numerical reconstruction of well-connected porous structure of rock using fractal algorithms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **279**, 212–226 (2014).
- [79] Manwart, C., Torquato, S. & Hilfer, R. Stochastic reconstruction of sandstones. *Physical Review E* **62**, 893 (2000).
- [80] Cule, D. & Torquato, S. Generating random media from limited microstructural information via stochastic optimization. *Journal of applied physics* **86**, 3428–3437 (1999).
- [81] Krohn, C. & Thompson, A. Fractal sandstone pores: automated measurements using scanning-electron-microscope images. *Physical Review B* **33**, 6366 (1986).
- [82] Schlueter, E., Zimmerman, R., Witherspoon, P. & Cook, N. The fractal dimension of pores in sedimentary rocks and its influence on permeability. *Engineering Geology* **48**, 199–215 (1997).
- [83] Kaestner, A., Lehmann, E. & Stampanoni, M. Imaging and image processing in porous media research. *Advances in Water Resources* **31**, 1174–1187 (2008).
- [84] Iassonov, P., Gebrenegus, T. & Tuller, M. Segmentation of x-ray computed tomography images of porous materials: A crucial step for characterization and quantitative analysis of pore structures. *Water Resources Research* **45** (2009).
- [85] Berthod, M., Kato, Z., Yu, S. & Zerubia, J. Bayesian image classification using markov random fields. *Image and Vision Computing* **14**, 285–295 (1996).
- [86] Lindquist, W. & Venkatarangan, A. Investigating 3d geometry of porous media from high resolution images. *Physics and Chemistry of the Earth, Part A: Solid Earth and Geodesy* **24**, 593–599 (1999).
- [87] Zack, G., Rogers, W. & Latt, S. Automatic measurement of sister chromatid exchange frequency. *Journal of Histochemistry & Cytochemistry* **25**, 741–753 (1977).
- [88] Pal, N. R. & Pal, S. K. Entropic thresholding. *Signal processing* **16**, 97–108 (1989).
- [89] Xie, H. *Fractals in rock mechanics*, vol. 1 (CRC Press, 1993).
- [90] Radliński, A. *et al.* Fractal geometry of rocks. *Physical Review Letters* **82**, 3078 (1999).
- [91] Yu, B. & Li, J. Some fractal characters of porous media. *Fractals* **9**, 365–372 (2001).

- [92] Peng, R.-D., Xie, H.-p. & Ju, Y. Computation method of fractal dimension for 2-d digital image. *Zhongguo Kuangye Daxue Xuebao(Journal of China University of Mining & Technology)* **33**, 19–24 (2004).
- [93] Schlüter, S. & Vogel, H.-J. On the reconstruction of structural and functional properties in random heterogeneous media. *Advances in Water Resources* **34**, 314–325 (2011).
- [94] Jerram, D. A. & Higgins, M. D. 3d analysis of rock textures: quantifying igneous microstructures. *Elements* **3**, 239–245 (2007).
- [95] Meyer, F. Topographic distance and watershed lines. *Signal processing* **38**, 113–125 (1994).
- [96] Roerdink, J. B. & Meijster, A. The watershed transform: Definitions, algorithms and parallelization strategies. *Fundamenta informaticae* **41**, 187–228 (2000).