

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE  
ESCOLA DE ENGENHARIA INDUSTRIAL METALÚRGICA DE VOLTA REDONDA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA METALÚRGICA

CAIO COSTA ABRANTES FERREIRA

**RECONSTRUÇÃO MICROESTRUTURAL 2D E 3D DE FERRO FUNDIDO  
NODULAR PELO MÉTODO DE YEONG-TORQUATO**

Volta Redonda, RJ  
2021

CAIO COSTA ABRANTES FERREIRA

**RECONSTRUÇÃO MICROESTRUTURAL 2D E 3D DE FERRO FUNDIDO  
NODULAR PELO MÉTODO DE YEONG-TORQUATO**

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica (PPGEM), da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Metalúrgica. Área de concentração: Modelamento e Simulação de Processos e Fenômenos.

Orientador: **Prof. Paulo Rangel Rios, Ph.D.**

Coorientador: **Prof. Wesley Luiz da Silva Assis, D.Sc.**

Área de concentração: **Modelamento e Simulação de Processos e Fenômenos**

Volta Redonda, RJ  
2021

Ficha catalográfica automática - SDC/BEM  
Gerada com informações fornecidas pelo autor

F383r Ferreira, Caio Costa Abrantes  
Reconstrução microestrutural 2D e 3D de ferro fundido  
nodular pelo Método de Yeong-Torquato / Caio Costa Abrantes  
Ferreira ; Paulo Rangel Rios, orientador ; Wesley Luiz da  
Silva Assis, coorientador. Volta Redonda, 2021.  
105 f. : il.

Dissertação (mestrado)-Universidade Federal Fluminense,  
Volta Redonda, 2021.

DOI: <http://dx.doi.org/10.22409/PPGEM.2021.m.15999888794>

1. Reconstrução tridimensional. 2. Simulação por  
computador. 3. Metalografia. 4. Produção intelectual. I.  
Rios, Paulo Rangel, orientador. II. Assis, Wesley Luiz da  
Silva, coorientador. III. Universidade Federal Fluminense.  
Escola de Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta  
Redonda. IV. Título.

CDD -



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL  
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE  
ESCOLA DE ENGENHARIA INDUSTRIAL METALÚRGICA DE VOLTA REDONDA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA METALÚRGICA

**CAIO COSTA ABRANTES FERREIRA**

***Dissertação de Mestrado***

**“RECONSTRUÇÃO MICROESTRUTURAL 2D E 3D DE FERRO  
FUNDIDO NODULAR PELO MÉTODO DE YEONG-TORQUATO”**

**Aprovada em 25 de novembro de 2021.**

---

Prof. Dr. Paulo Rangel Rios – Orientador – UFF

---

Prof. Dr. Wesley Luiz da Silva Assis – Coorientador – UFF

---

Prof. Dr. Gláucio Soares da Fonseca – UFF

---

Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Márcia Regina Baldissera Rodrigues – UNIFEI

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço à minha família, que sempre guiará os meus esforços e que, através de seu amor incondicional e exemplo, me deu forças e motivos para concluir esta grande etapa da minha vida, mesmo através de tempos desafiadores.

Aos meus orientadores e amigos Paulo Rangel Rios e Wesley Luiz da Silva Assis, cujos ensinamentos passados transcendem muito a prática acadêmica. Sou grato pela paciência e direcionamento, e considero-me muito privilegiado pela oportunidade de aprender com vocês não só sobre Ciência, mas sobre o quão transformador o papel de um professor pode ser.

Ao corpo docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica (PPGEM), cujos conhecimentos transmitidos ajudaram a embasar este trabalho e que enriqueceram a minha trajetória acadêmica como um todo. O trabalho de vocês sempre será inspirador para mim.

Aos amigos do Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM), que nunca hesitaram em compartilhar seus amplos conhecimentos e experiência comigo. Em especial, agradeço ao amigo Harrison Ventura, que sugeriu o tema desta dissertação e deu todo o auxílio necessário nas etapas iniciais, e ao amigo Daniel Gomes, que nunca poupou esforços para me ajudar com todo tipo de assunto relacionado ao Mestrado.

*“Whenever one honestly defies a tradition, one becomes, in reality, the more responsible to it.”*

(Glenn Gould)

## RESUMO

A reconstrução de meios aleatórios heterogêneos tem sido um tema cada vez mais popular em Materiais, uma vez que este tipo de meio é amplamente encontrado na natureza e em materiais desenvolvidos pelo homem. Uma reconstrução ideal inclui todas as características microestruturais da referência, e permite simulações de grandezas físicas compatíveis com as obtidas por meios experimentais. Um dos métodos mais consagrados nesta área é o desenvolvido por Yeong e Torquato, baseado na técnica de otimização de *simulated annealing*. Este método inicia com uma matriz aleatória e, por meio de trocas sucessivas de pixels, procura-se baixar a energia até uma tolerância próxima de zero. Neste trabalho, são feitas três reconstruções 2D e três reconstruções 3D de um ferro fundido, todas elas baseadas numa única seção plana, e suas medidas estereológicas e metalográficas são comparadas com aquelas da referência. Em cada uma delas, usou-se alguma combinação de três funções de correlação disponíveis na literatura (função de correlação de co-ocorrência - CCF, função de correlação de dois pontos -  $S_2$  e função de correlação por cluster -  $C_2$ ) e duas técnicas de amostragem (uma baseada no formalismo partícula-sítio, ou *Gas-Lattice Particle* - GLP, e outra ortogonal). As reconstruções usando  $S_2$  e  $C_2$  com amostragem GLP forneceram os melhores resultados tanto no caso 2D como no 3D, reunindo morfologia realista e compatibilidade com as medidas estereológicas. Observou-se efeito de borda razoável que distorceu algumas métricas, mas que pôde ser amenizado com um simples corte nas bordas da microestrutura gerada. Os resultados deste estudo inicial sugerem que o método de Yeong-Torquato tem amplo potencial de aplicação na Ciência dos Materiais e, em particular, em Metalurgia. No futuro, o procedimento poderá permitir reconstruções 3D a partir de seções planas de microestruturas muito mais complexas quando combinado com funções de correlação mais descritivas.

**Palavras-chave:** Otimização. Recozimento simulado. Reconstrução de meios heterogêneos. Microestrutura. Caracterização. Ferro fundido nodular.

## ABSTRACT

Reconstruction of random heterogeneous media has been an increasingly popular theme in Materials Science, as such media is largely found in nature and in man-made materials. An ideal reconstruction includes every microstructural feature of the reference image and allows simulations of physical quantities that agrees with experimental data. One of the foremost methods of reconstruction is the one developed by Yeong and Torquato, which is based on the simulated annealing optimization technique. This method starts with a random matrix, and, through successive pixels swaps, the energy is minimized up to a small tolerance. In this work, three 2D reconstructions and three 3D reconstructions are produced, all six based on a single planar section, and its stereological and metallographic features are compared to those of the reference. In each case, some combination of three correlation functions that are available in literature (cooccurrence correlation function - CCF, two-point correlation function -  $S_2$  and two-point cluster function -  $C_2$ ) and two sampling techniques (one orthogonal and one based on the lattice-gas formalism, named Gas-Lattice Particle - GLP). The reconstructions that used  $S_2$  and  $C_2$  with GLP sampling provided the best results in both 2D and 3D cases, combining realistic morphology and good compatibility with the reference stereological measures. Moderate border distortion was observed with some impact to the stereological metrics, but a simple border removal was enough to greatly diminish its effects. The results of this early study suggest that Yeong-Torquato method has great potential for further exploration in Materials Science and particularly in Metallurgy. In the future, the same procedure could allow 3D reconstruction from planar sections of much more complex microstructures when paired with more descriptive correlation functions.

**Keywords:** Optimization. Simulated annealing. Heterogeneous media reconstruction. Microstructure. Characterization. Nodular cast iron.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Fluxograma genérico representando o método de <i>simulated annealing</i> ...	23
Figura 2 – Demonstração da função de correlação de dois pontos [24].	25
Figura 3 – Demonstração da função de correlação de caminho linear [24].	28
Figura 4 – Diagrama que mostra que a combinação <i>S2-C2</i> é mais restritiva que a combinação <i>S2-S3</i> .	30
Figura 5 – Seccionamento de três estruturas 3D com um plano (acima), e suas interseções no plano (abaixo) na forma de uma área (2D), um conjunto de pontos e um conjunto de linhas (1D).	34
Figura 6 - Exemplo de medida de fração volumétrica em micrografia de ferro fundido nodular, setas em vermelho indicam pontos da fase preta.	35
Figura 7 – Exemplo de contagem de nódulos de grafita em ferro fundido nodular (tamanho da imagem original: 566 x 459).	37
Figura 8 - Exemplo de contagem de interseções com os contornos dos nódulos de grafita em ferro fundido nodular (tamanho da imagem original: 566 x 459).	38
Figura 9 - Exemplo de diâmetros de Feret tirados em duas direções: horizontal ( $F_h$ ) e vertical ( $F_v$ ).	40
Figura 10 – Esquema simplificado do processo de reconstrução microestrutural.	41
Figura 11 - Primeira micrografia (de um total de 57) de ferro fundido nodular, obtida por seccionamento serial, aumento de 200x.	42
Figura 12 - Planejamento das três reconstruções 2D.	43
Figura 13 - Planejamentos das três reconstruções 3D.	44
Figura 14 - Interface gráfica do software ImageJ, com ferramenta Balde de Tinta selecionada.	46
Figura 15 - Importação de sequência de imagens no software ImageJ, com opção de converter para escala de cinza de 8 bits selecionada.	47
Figura 16 - Micrografia antes (esquerda) e depois (direita) do tratamento de imagem no software ImageJ.	47
Figura 17 – Ilustração das duas distâncias características utilizadas para o cálculo do fator de normalização.	49

Figura 18 – Condição de contorno periódica aplicada a um segmento qualquer .....	51
Figura 19 – Linhas e colunas cujas contribuições devem ser removidas (em vermelho) e adicionadas (em verde) para atualizar uma função de correlação pelo algoritmo de amostragem ortogonal .....	53
Figura 20 – Pares de pontos cujas contribuições serão removidas (em vermelho) e adicionadas (em verde) para atualizar uma função de correlação pelo algoritmo Lattice-Point.....	54
Figura 21 – Exemplos de pixels que (a) não alteram e (b) alteram a quantidade de clusters no sistema após uma iteração.....	55
Figura 22 – Gráfico da energia total em função da porcentagem concluída de reconstrução usando otimização superficial .....	56
Figura 23 - Interface do ambiente de desenvolvimento Jupyter Notebook .....	58
Figura 24 - Interface gráfica do programa de visualização de gráficos ParaView 5.6.2 .....	59
Figura 25 – Ilustração do processo de corte de 5% para uma microestrutura originalmente de 300x300 (indicado pelo retângulo vermelho): (a) antes, (b) depois .....	62
Figura 26 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção, microestruturas 300x300: (a) referência, (b) reconstrução usando <i>CCF</i> , (c) reconstrução usando <i>S2</i> , (d) reconstrução híbrida usando <i>S2 – C2</i> .....	65
Figura 27 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção, microestruturas com bordas cortadas para tamanho final 270x270: (a) original, (b) reconstrução usando <i>CCF</i> , (c) reconstrução usando <i>S2</i> , (d) reconstrução híbrida usando <i>S2 – C2</i> .....	66
Figura 28 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção: histogramas de distribuição de tamanho de nódulo e curvas ajustadas pelo método KDE, sem corte: (a) referência, (b) <i>CCF</i> , (c) <i>S2</i> , (d) <i>S2 – C2</i> .....	70
Figura 29 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção: histogramas de distribuição de tamanho de nódulo e curvas ajustadas pelo método KDE, com corte de 5%: (a) referência, (b) <i>CCF</i> , (c) <i>S2</i> , (d) <i>S2 – C2</i> .....	71
Figura 30 – Comparação das distribuições de tamanho de nódulo para reconstrução 2D a partir de uma única seção: (a) sem corte, (b) com corte de 5% .....	72
Figura 31 – Comparação dos valores de $L2(r)$ para as reconstruções 2D a partir de uma única seção: (a) completa, (b) vista ampliada .....	73
Figura 32 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas isométricas opacas, sem corte: (a) referência, (b) <i>CCF</i> , (c) <i>S2</i> , (d) <i>S2 – C2</i> .....	74

Figura 33 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas isométricas opacas, cortadas para 90x90x90: (a) referência, (b) <i>CCF</i> , (c) <i>S2</i> , (d) <i>S2 – C2</i> .....	75
Figura 34 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas transparentes com clusters coloridos, método <i>CCF</i> : (a) reconstrução completa, (b) detalhe .....	77
Figura 35 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas transparentes com clusters coloridos, método <i>S2</i> : (a) reconstrução completa, (b) detalhe .....	78
Figura 36 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas transparentes com clusters coloridos, método <i>S2 – C2</i> : (a) reconstrução completa, (b) detalhe .....	79
Figura 37 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção – seções transversais ao centro da reconstrução: (a) referência, (b) <i>CCF</i> , (c) <i>S2</i> , (d) <i>S2 – C2</i> .....	81
Figura 38 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção: histogramas de distribuição de tamanho de nódulo e curvas ajustadas pelo método KDE, sem corte: (a) referência, (b) <i>CCF</i> , (c) <i>S2</i> , (d) <i>S2 – C2</i> .....	84
Figura 39 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção: histogramas de distribuição de tamanho de nódulo e curvas ajustadas pelo método KDE, com corte de 5%: (a) referência, (b) <i>CCF</i> , (c) <i>S2</i> , (d) <i>S2 – C2</i> .....	85
Figura 40 – Comparação das distribuições de tamanho de nódulo para reconstrução 3D a partir de uma única seção: (a) sem corte, (b) com corte de 5% .....	86
Figura 41 - Comparação dos valores de $L2(r)$ para as reconstruções 3D a partir de uma única seção: (a) completa, (b) vista ampliada .....	87
Figura 42 - Funções de correlação da reconstrução 2D via <i>CCF</i> .....	96
Figura 43 - Funções de correlação da reconstrução 2D via <i>S2</i> .....	97
Figura 44 - Funções de correlação da reconstrução 2D via método híbrido <i>S2 – C2</i> .....	97
Figura 45 - Funções de correlação da reconstrução 3D via <i>CCF</i> .....	98
Figura 46 - Funções de correlação da reconstrução 3D via <i>S2</i> .....	99
Figura 47 - Funções de correlação da reconstrução 3D via método híbrido <i>S2 – C2</i> .....	99
Figura 48 - Representação 3D (esquerda) e seção 2D (direita) de simulação pelo método do cone causal .....	100
Figura 49 – Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal, vista isométrica sem alterações: (a) original, (b) reconstrução .....	102
Figura 50 – Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal, vista isométrica com bordas removidas: (a) original, (b) reconstrução .....	103

Figura 51 - Reconstrução 3D a partir da simulação via cone causal, vista transparente geral: (a) original, (b) reconstrução .....103

Figura 52 - Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal, seções transversais ao centro: (a) original, (b) reconstrução .....104

Figura 53 – Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal: funções de correlação de referência e da reconstrução,  $S_2(r)$  (acima) e  $C_2(r)$  (abaixo) .....105

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros $k$ para cada nível de confiança [33].....	36
Tabela 2 – Parâmetros para reconstruções 2D com base em uma única seção plana .....	44
Tabela 3 – Parâmetros para todas as reconstruções 3D a partir de uma única seção plana.....	45
Tabela 4 - Distâncias características das referências após o redimensionamento e os fatores de conversão pixels→ $\mu\text{m}$ para os casos 2D e 3D.....	48
Tabela 5 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção: comparação das medidas estereológicas (sem corte).....	68
Tabela 6 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção: comparação das medidas estereológicas (com corte de 5%).....	68
Tabela 7 – Reconstrução 2D a partir de uma única seção: desvios das medidas estereológicas com relação à referência para os casos sem corte e com corte de 5% (menores desvios estão destacados).....	69
Tabela 8 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção – comparação das medidas estereológicas (sem corte).....	82
Tabela 9 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção: comparação das medidas estereológicas (com corte de 5%).....	82
Tabela 10 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção: desvios das medidas estereológicas com relação à referência para os casos sem corte e com corte de 5% (menores desvios estão destacados).....	83
Tabela 11 – Parâmetros para reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal .....	101
Tabela 12 - Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal: medidas estereológicas não-normalizadas.....	104

## LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

$f_s(r)$	função de correlação qualquer para um sistema digitalizado
$f_0(r)$	função de correlação qualquer para um sistema digitalizado de referência
$E_k$	energia (diferença quadrática) no passo $k$
$I^{(j)}(\mathbf{r})$	função indicadora da fase $j$ na posição $\mathbf{r}$
$S_2^{(j)}(r)$	função de correlação de dois pontos da fase $j$ considerando uma distância numérica $r$
$r$	distância numérica entre um par de pontos qualquer
$N$	tamanho linear do sistema digitalizado
$\phi_j$	fração volumétrica da fase $j$
$BN(r)$	histograma de distâncias de pares de pontos pretos (partículas)
$SN(r)$	histograma de distâncias de pares de pontos brancos (sítios)
$L^{(j)}(r)$	função de correlação de caminho linear da fase $j$ considerando uma distância numérica $r$
$CCF(r)$	função de correlação de co-ocorrência considerando uma distância numérica $r$
GLCM	<i>gray-level co-occurrence matrix</i> (matrix de co-ocorrência de tons de cinza)
$S_n(r)$	função de correlação de $n$ pontos considerando uma distância numérica $r$
$C_2(r)$	função de correlação de dois pontos por clusters considerando uma distância numérica $r$
$D_2(r)$	probabilidade de dois pontos separados por uma distância $r$ caírem na mesma fase, mas em clusters diferentes
$w_{\alpha,j}$	peso da função de correlação $\alpha$ relativa à fase $j$
$\Delta E$	diferença de energia em uma dada troca de pixels
$p(\Delta E)$	probabilidade de aceitar uma troca de pixels com diferença de energia $\Delta E$
$T$	temperatura de Monte Carlo

$V_V$	fração volumétrica da fase de interesse
$N_A$	número por unidade de área
$N_V$	número por unidade de volume
$S_V$	área superficial por unidade de volume
$l_0$	fator de calibração (em $\mu m/px$ )
IUA	isotrópico, uniforme e aleatório
$\bar{D}$	calibre médio
$F$	diâmetro de Feret médio
$\lambda$	comprimento médio de interseção ( <i>mean intercept length</i> )
$F_h, F_v$	diâmetros de Feret horizontal e vertical
$d_{\mu m}$	distância em micrometros
$d_{px}$	distância em pixels
$L_{ref}$	tamanho linear da referência
$L_{rec}$	tamanho linear da reconstrução
$T_k$	temperatura no passo $k$
$T_0$	temperatura inicial de Monte Carlo

## SUMÁRIO

1	Introdução .....	18
2	Objetivos .....	21
2.1	Objetivo geral .....	21
2.2	Objetivos específicos .....	21
3	Revisão bibliográfica .....	22
3.1	Reconstrução com <i>simulated annealing</i> .....	22
3.1.1	Visão geral.....	22
3.1.2	Reconstrução de meios aleatórios.....	23
3.1.3	Função de correlação de dois pontos .....	24
3.1.4	Função de correlação de caminho linear .....	27
3.1.5	Função de correlação de co-ocorrência .....	28
3.1.6	Função de correlação de dois pontos por clusters .....	29
3.1.7	Uso de múltiplas funções de correlação .....	31
3.1.8	Temperatura e critérios de parada.....	32
3.2	Ferramentas para análise de microestruturas.....	33
3.2.1	Estereologia aplicada aos ferros fundidos nodulares.....	33
3.2.2	Diâmetro médio de Feret ( $F$ ) .....	39
4	Materiais e métodos.....	41
4.1	Planejamento e parâmetros para cada reconstrução .....	43
4.1.1	Reconstruções 2D.....	43
4.1.2	Reconstruções 3D.....	44
4.2	Pré-processamento.....	45
4.2.1	Remoção das endentações e binarização.....	45
4.2.2	Redimensionamento e cálculo das funções de correlação .....	48
4.3	Processamento .....	50

4.3.1	Cálculo e atualização das funções de correlação.....	51
4.3.2	Identificação de clusters.....	54
4.3.3	Otimização superficial .....	55
4.3.4	Plano de resfriamento e critério de parada.....	57
4.4	Pós-processamento .....	58
4.4.1	Geração dos gráficos e microestruturas .....	58
4.4.2	Obtenção das medidas estereológicas.....	59
5	Resultados e discussão .....	63
5.1	Reconstrução 2D a partir de uma única seção .....	63
5.1.1	Microestruturas geradas.....	63
5.1.2	Análise quantitativa das reconstruções .....	67
5.2	Reconstrução 3D a partir de uma única seção .....	74
5.2.1	Microestruturas geradas.....	74
5.2.2	Análise quantitativa das reconstruções .....	82
6	Conclusões .....	88
7	Sugestões para trabalhos futuros.....	89
8	Referências Bibliográficas .....	90
9	Apêndice .....	96
9.1	Funções de correlação para todas as reconstruções.....	96
9.1.1	Reconstruções 2D.....	96
9.1.2	Reconstruções 3D.....	98
9.2	Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal .....	100

## 1 INTRODUÇÃO

A reconstrução de meios aleatórios heterogêneos é um problema relevante em diversas áreas da Engenharia. Por estudo de “meios aleatórios”, entende-se uma interpretação geométrica em escala muito maior do que a escala molecular, porém muito menor do que o comprimento total de um espécime em escala prática. Particularmente em Metalurgia, grande parte das propriedades macroscópicas de uma liga, tais como elasticidade, limite de resistência, módulo de elasticidade e condutividades térmica e elétrica e tenacidade à fratura são fortemente dependentes da sua microestrutura [1–4]. Uma reconstrução satisfatória deverá, portanto, reproduzir o meio aleatório com acurácia suficiente para viabilizar simulações que permitam obter tais propriedades.

Os primeiros trabalhos em reconstrução [5, 6] usaram funções de autocorrelação (correlação de uma imagem com sua versão deslocada no espaço) e função densidade de probabilidade passadas por filtros de Gauss para obter uma matriz binária. Entre as primeiras estruturas reconstruídas estão o calcário oolítico e o arenito de Fontainebleau, escolhidos por sua simplicidade (apenas duas fases após binarização). Estes métodos assumem isotropia do sistema e só permitem uso de funções de correlação bastante simples (de um ponto e dois pontos), sendo sua extensão para sistemas multifásicos e anisotrópicos praticamente impossível.

Posteriormente, Rintoul & Torquato [7] formularam uma metodologia baseada em *simulated annealing* (SA, ou recozimento simulado) para simulação de dispersões em situação de equilíbrio e não-equilíbrio, usando uma função de distribuição radial (RDF). Segundo a avaliação dos autores, bons resultados foram obtidos somente para sistemas com pouca agregação de partículas. Uma das conclusões deste trabalho é que, mesmo com boa concordância entre as funções de correlação de referência e a obtida da reconstrução, não necessariamente a microestrutura gerada será fiel à original. Assim, torna-se fundamental compreender quais tipos de funções de correlação se adequam bem para cada classe de meio aleatório que se deseja reconstruir.

Num trabalho seminal da área, Torquato & Yeong [8] estenderam o trabalho anterior para meios aleatórios heterogêneos. Segundo os autores, as principais

vantagens desta formulação incluem (i) facilidade de implementação, (ii) possibilidade de usar diversas funções de correlação e (iii) adaptabilidade para sistemas multifásicos e anisotrópicos. Em linhas gerais, o algoritmo inicia com a referência sendo discretizada e binarizada. Uma matriz aleatória, que é a base da reconstrução, é alocada na memória. O que se segue então são trocas aleatórias de pixels; após cada troca, a “energia” é calculada. Esta energia, que motiva o nome “*simulated annealing*” para a técnica, é tipicamente o erro quadrático médio entre as funções de correlação de referência e reconstruída.

O método de Yeong-Torquato se destaca pela versatilidade. O trabalho de Torquato é o principal representativo da classe de métodos de reconstrução por otimização, além do trabalho de Chen et al [9]. Outros métodos incluem estatísticas multiponto [10–12], que visam reduzir custos computacionais, e, mais recentemente, redes neurais [13–16], cujos modelos demoram a treinar, mas podem gerar novas realizações de cada microestrutura em poucos segundos após a etapa inicial.

Muitos esforços foram feitos com intuito de aprimorar o método inicial proposto por Yeong e Torquato, incluindo métodos aprimorados para escolha de pixels por Tang et al [17] e implementações paralelizadas [18]. Num trabalho por Feng et al [19], é proposta a função de correlação de co-ocorrência (CCF), que é uma função de correlação de mais alta ordem e, portanto, capaz de captar mais informação de longo alcance. A CCF foi construída como uma simplificação de um método tradicional de análise de imagens, e seu uso forneceu bons resultados para a reconstrução da microestrutura porosa do arenito, com pouca diferença de performance com relação à função de correlação de dois pontos tradicional.

A função de correlação de dois pontos foi o descritor estrutural padrão para a maioria dos trabalhos iniciais em reconstrução, mas tipicamente as referências eram amostradas de maneira ortogonal. Numa tentativa de remover o viés ortogonal das reconstruções e considerar todas as direções no cálculo das funções de correlação, Torquato et al [20] conceberam uma nova maneira de amostrar meios aleatórios, baseada no formalismo “partícula-sítio” (*gas-lattice particle*). Esse conceito foi facilmente estendido para a função de correlação de dois pontos por cluster [21], e permitiu aos autores reconstruírem meios aleatórios comuns na Ciência dos Materiais e na Cosmologia.

O objetivo do presente trabalho é trazer o método de Yeong-Torquato para o cotidiano da Engenharia Metalúrgica através da reconstrução de uma microestrutura importante e não muito complexa, que é o ferro fundido nodular, usando para isso as funções de correlação e métodos de amostragem de maior relevância na literatura. Com intuito de validar as reconstruções, o uso de métricas estereológicas e metalográficas é fundamental, uma vez que grande parte destas métricas se relacionam com as propriedades macroscópicas de maior interesse.

Com a maior disponibilidade de poder de computação e maior número de funções de correlação elaboradas e estudadas, espera-se obter um conjunto de parâmetros que permita boas reconstruções, reconstruções essas que podem ser usadas como ponto de partida para outras simulações [22]. Uma reconstrução suficientemente precisa é uma alternativa poderosa à prática experimental, pois permite uma análise aprofundada e flexível aliada aos atuais recursos computacionais, tudo por uma fração do custo e do tempo.

## **2 OBJETIVOS**

### **2.1 Objetivo geral**

Implementar um algoritmo de reconstrução microestrutural 2D e 3D baseado no método de Yeong-Torquato e avaliar sua performance por meio da reconstrução de um ferro fundido nodular, usando para isso as medidas estereológicas mais usuais.

### **2.2 Objetivos específicos**

Tem-se como objetivos pontuais:

- Desenvolver um algoritmo altamente modular e com eficiência razoável para malhas de ordem das centenas de elementos em cada direção (2D e 3D), que permita fácil variação e combinação de parâmetros de entrada;
- Avaliar a influência da escolha das funções de correlação na microestrutura final;
- Avaliar o efeito do método de amostragem das funções de correlação sobre a microestrutura final, especialmente com relação ao efeito de borda;
- Verificar se as reconstruções geradas pelo método de Yeong-Torquato são estereologicamente compatíveis com a referência usada como entrada e, nos casos que isso não ocorre, entender se o efeito de borda tem influência apreciável nesse resultado.

### 3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 3.1 Reconstrução com *simulated annealing*

##### 3.1.1 VISÃO GERAL

O método de *simulated annealing* (SA, ou recozimento simulado em português) é um algoritmo probabilístico baseado no processo metalúrgico de recozimento, em que um material é aquecido até acima da temperatura de recristalização e resfriado em seguida. Conforme a temperatura é reduzida, a microestrutura se aproxima de um estado de mínima energia livre, com grãos maiores e menor quantidade de defeitos.

Visando reproduzir este fenômeno, o algoritmo de SA inicia com temperaturas elevadas. Um esquema é apresentado na Figura 1. Neste estágio, a candidata a solução ótima varia muito, o que permite ao algoritmo pesquisar todo o espaço de soluções e evitar mínimos locais, o que é uma das grandes vantagens do método. Isto é feito ao permitir não somente soluções que reduzam a “energia livre”, mas também as que a aumentam com uma certa probabilidade [23]. A temperatura é reduzida conforme uma tabela de resfriamento adequada a cada caso; conforme a temperatura cai, a probabilidade de atualização desfavorável da solução ótima se aproxima de zero, encaminhando a solução para um estado de mínima energia livre. O ajuste dos parâmetros para um algoritmo de SA é altamente subjetivo, e deve ser feito com cautela para maximizar a performance nas suas diversas aplicações.

A medida de o quão adequada uma solução é para um determinado problema é denominada função objetivo. A função objetivo é uma expressão que mede o erro entre a solução simulada num determinado instante e a solução experimental ou solução de referência, que o algoritmo deve reproduzir. Um ponto positivo da metodologia de recozimento simulado é que muitas vezes um modelo matemático não é fundamental, e apenas um conhecimento básico do sistema estudado é necessário. Estes fatores, aliados à facilidade de implementação e versatilidade do algoritmo, tornaram o método muito popular nos últimos anos.

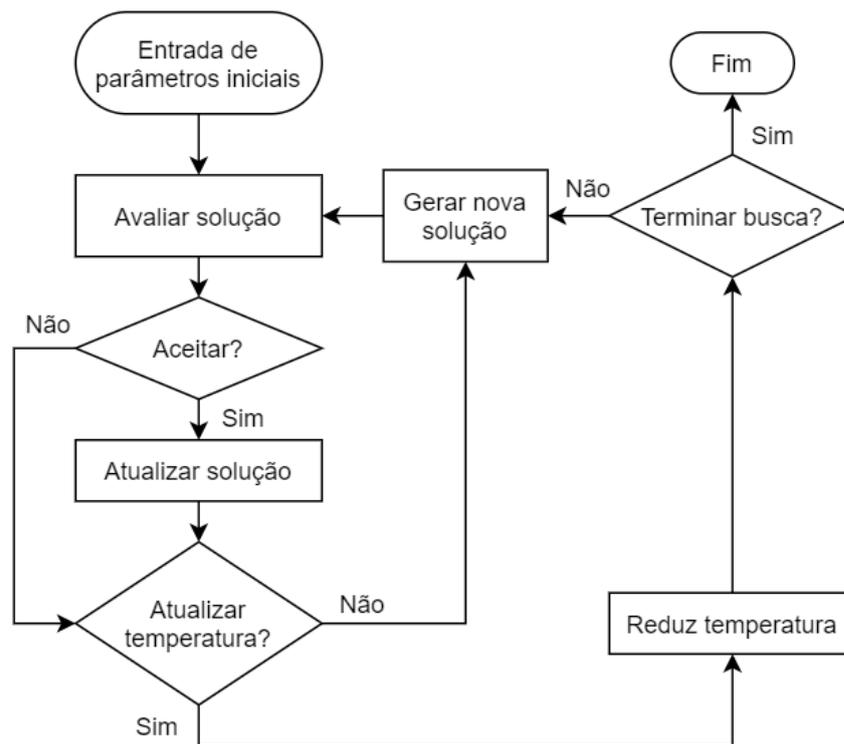


Figura 1 - Fluxograma genérico representando o método de *simulated annealing* [23]

### 3.1.2 RECONSTRUÇÃO DE MEIOS ALEATÓRIOS

A descrição a seguir é baseada no trabalho de Torquato & Yeong [8], baseado em trabalho anterior por Rintoul & Torquato [7]. O método é facilmente extensível para sistemas multifásicos e anisotrópicos, mas, por simplicidade, a descrição inicial será feita para um sistema isotrópico de duas fases codificado por uma única função de correlação.

Considere um sistema isotrópico bifásico com uma função de correlação de referência  $f_0(r)$  para uma determinada fase (fase 1 ou fase 2, neste caso), onde  $r$  é a distância entre dois pontos da microestrutura. Uma matriz aleatória inicial é gerada com a proporção exata de pixels de fase 1 e fase 2 da referência. Seja  $f_s(r)$  a função de correlação do sistema digitalizado. O objetivo é “evoluir” a função  $f_s(r)$  para a função de referência  $f_0(r)$  através de sucessivas trocas de pixels entre as fases. A

medida da evolução de  $f_s(r)$  num dado passo  $k$  do algoritmo é dada pelo erro quadrático entre as funções de correlação ao longo de todas as distâncias entre dois pontos válidas, isto é,

$$E_k = \sum_r [f_0^k(r) - f_s^k(r)]^2 \quad (1)$$

Note que, como a nova solução é gerada apenas por troca de pixels, as frações volumétricas das fases são preservadas em todos os passos do algoritmo. Além disso, o processo de troca de pixels atende a hipótese ergódica: todas as matrizes possíveis podem ser construídas em um número finito de passos no tempo a partir de qualquer configuração inicial [24].

### 3.1.3 FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DE DOIS PONTOS

Seja  $I^{(j)}(\mathbf{r})$  a função indicadora da fase  $j$  e  $\mathbf{r}$  a posição de um pixel qualquer da matriz; isto é,

$$I^{(j)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{r} \text{ está na fase } j \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2)$$

A função de correlação de dois pontos  $S_2^{(j)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  para a fase  $j$  é definida pela probabilidade de se encontrar dois pontos separados por um vetor  $\mathbf{r}$  na mesma fase, ou seja,

$$S_2^{(j)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle I^{(j)}(\mathbf{r}_1) I^{(j)}(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (3)$$

onde as chaves angulares representam a média aritmética de todos os pares. A Figura 2 demonstra a função de correlação de dois pontos, incluindo uma extensão do caso acima, onde a função cobre duas fases. A função de correlação de dois pontos está relacionada com a área superficial [8].

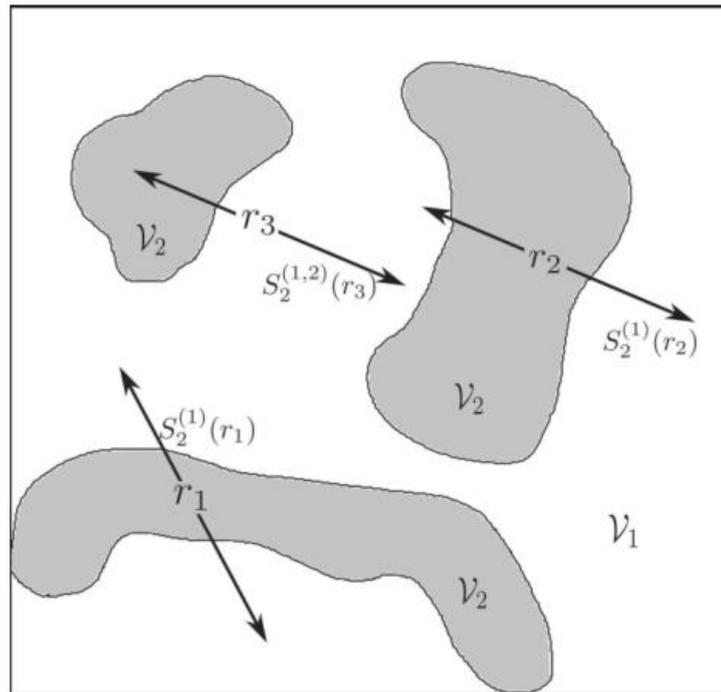


Figura 2 – Demonstração da função de correlação de dois pontos [25].

Num *meio estatisticamente homogêneo*, a função de correlação depende apenas das posições relativas entre os pontos, e não das suas posições absolutas. Um caso particularmente importante é o estatisticamente isotrópico, em que a função de correlação depende somente da distância entre os pontos, ou seja,

$$S_2^{(j)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = S_2^{(j)}(r) \quad (4)$$

onde  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ . Um fato relevante para a implementação deste tipo de função é que a  $S_2$  é par para um meio periódico; portanto, para um sistema quadrado de largura  $N$  pixels com condição de contorno periódica, só é necessário calcular a função até a distância máxima de  $r = N/2$  pixels.

A função de correlação de dois pontos não possui informações de longo alcance sobre a fase considerada [26]. É importante observar que, num sistema de apenas duas fases, a função de correlação de cada fase não é distinguível, uma vez que  $S_2^{(1)}(r) - \phi_1^2 = S_2^{(2)}(r) - \phi_2^2$ , sendo  $\phi_j$  a fração volumétrica da fase  $j$ . Portanto, usar duas funções de correlação num sistema bifásico não traz benefício, pois não

adiciona nova informação morfológica. Para meios isotrópicos sem ordem de longo alcance, vale

$$S_2^{(j)}(0) = \phi_j \quad \text{e} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} S_2^{(j)}(r) = \phi_j^2 \quad (5)$$

É natural estender esta definição para funções de correlação de três, quatro ou mais pontos. Porém, funções com mais alta ordem são consideravelmente mais custosas em termos de processamento e fornecem comparativamente pouco benefício para a qualidade da reconstrução. Atualmente, é bem estabelecido que somente a função de correlação de dois pontos não fornece informação topológica suficiente para a reconstrução da maioria das microestruturas. Isso ocorre devido à alta degeneração causada pela não-unicidade da informação neste tipo de função; i.e., várias microestruturas compartilham a mesma função de correlação de dois pontos [20].

Num meio digitalizado em que cada pixel da matriz está assinalado com uma fase, o cálculo da  $S_2^{(j)}(r)$  pode ser feito trasladando uma linha de tamanho  $r$  pela imagem e contando quantas vezes as duas extremidades da linha caem na fase  $j$ ; ao final do cálculo, basta dividir pelo número total de tentativas. Em teoria, um cálculo exato da função de correlação de dois pontos exigiria verificar todos os pares de pontos contidos na imagem, o que teria custo computacional extremamente alto. Contudo, uma boa estimativa pode ser obtida deslizando a linha apenas nas direções ortogonais  $x$  e  $y$  (*orthogonal-sampling algorithm*), o que já fornece um perfil suave para a  $S_2(r)$  suficiente para reconstrução [8].

Mais recentemente, Jiao et al [27] desenvolveram o algoritmo *Lattice-Point* (Malha-Ponto) com o intuito de capturar a função de correlação em todas as direções possíveis, mantendo eficiência semelhante à da amostragem ortogonal. Em vez de pensar na matriz como uma coletânea de pontos brancos e pretos, é útil pensar como um sistema malha-gás (*lattice-gas*): um pixel preto representa um sítio ocupado por uma molécula de gás, enquanto um pixel branco representa um sítio livre que pode posteriormente ser ocupado. Suponhamos que todas as quantidades de pares de moléculas de gás são registradas conforme suas distâncias num histograma  $BN(r)$ . Analogamente, registramos todos os pares de sítios disponíveis na matriz (ocupados

e não ocupados) num histograma  $SN(r)$ . Neste caso, a função de correlação de dois pontos é dada por

$$S_2(r) = \frac{BN(r)}{SN(r)} \quad (6)$$

Note que  $SN(r)$  depende unicamente do tamanho do sistema, e só precisa ser calculado uma vez. Entre duas iterações da reconstrução,  $BN(r)$  deve ser eficientemente atualizado para que se aceite ou não a troca de pixels.

### 3.1.4 FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DE CAMINHO LINEAR

A função de caminho linear (*lineal-path function*) para uma determinada fase  $j$ , denotada por  $L^{(j)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ , é definida como a probabilidade do segmento que liga os pontos de posições  $\mathbf{r}_a$  e  $\mathbf{r}_b$  estarem completamente na fase  $j$ , ou seja,

$$L^{(j)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \langle I^{(j)}(\mathbf{r}_a) I^{(j)}(\mathbf{r}_1) I^{(j)}(\mathbf{r}_2) \dots I^{(j)}(\mathbf{r}_n) I^{(j)}(\mathbf{r}_b) \rangle \quad (7)$$

onde  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$  são as posições dos pontos intermediários deste segmento. A Figura 3 mostra a função de correlação de caminho linear aplicada a duas fases. Diferentemente da função de correlação de dois pontos, esta função contém informações de conectividade da fase considerada, trazendo, portanto, informação topológica de longo alcance da microestrutura. Além disso, para um sistema bifásico, as funções de caminho linear das duas fases não são complementares, o que requer uma escolha mais cautelosa da fase reconstruída [8].

Da mesma maneira que a função de correlação de dois pontos, para um meio isotrópico, a função de caminho linear só depende do tamanho do segmento, isto é,

$$L^{(j)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = L^{(j)}(r) \quad (8)$$

onde  $r = |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$ . Ao contrário da função anterior, a função de caminho linear não é par; portanto, avaliar a função somente até metade da imagem como no caso anterior pode não ser suficiente caso existam *clusters* de fase  $j$  maiores que  $\frac{N}{2}$  pixels.

Claramente, para meios com fração volumétrica de fase  $j$  igual a  $\phi_j$ , tem-se  $L^{(j)}(0) = \phi_j$ .

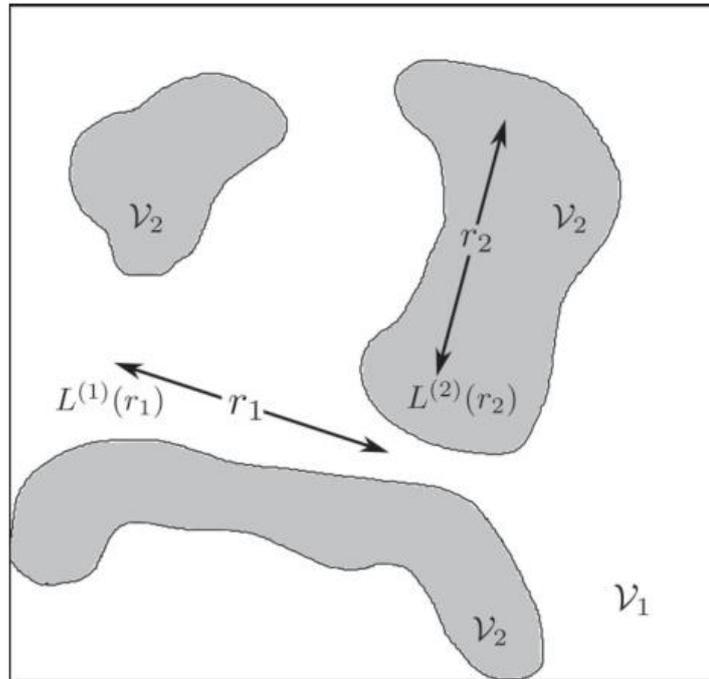


Figura 3 – Demonstração da função de correlação de caminho linear [25].

Da mesma maneira que para a função de correlação de dois pontos, a amostragem da função de caminho linear  $L(r)$  para a fase de interesse pode ser feita de maneira ortogonal ao deslizar um segmento de tamanho  $r$  pela imagem, registrando apenas os eventos em que o segmento inteiro cai inteiramente dentro da fase. Ao final, divide-se pelo número de tentativas e obtemos uma estimativa de  $L(r)$  para um meio digitalizado.

### 3.1.5 FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DE CO-OCORRÊNCIA

A função de correlação de co-ocorrência (CCF, *co-occurrence correlation function*) como descritor microestrutural foi inicialmente proposta por Feng et al [19], e é baseada na matriz de co-ocorrência de tons de cinza (GLCM – *gray-level co-*

*occurrence matrix*) [28], método tradicional em análise de imagem e de texturas. Dado um sistema bifásico, a função de correlação de co-ocorrência é dada por

$$CCF(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \begin{bmatrix} N_{11}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & N_{12}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \\ N_{21}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & N_{22}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \end{bmatrix} \quad (9)$$

onde  $N_{ij}$  ( $i, j = 1, 2$ ) é o número de pares  $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  de pontos que pertencem às fases  $i$  e  $j$ , nesta ordem. Para que a definição seja igualmente válida para todos os tamanhos de sistemas, sugere-se a sua versão normalizada, isto é,

$$CCF(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \begin{bmatrix} p_{11}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & p_{12}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \\ p_{21}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & p_{22}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \end{bmatrix} \quad (10)$$

onde  $p_{ij} = N_{ij}/N$ , sendo  $N = \sum_i \sum_j N_{ij}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ . Para um sistema isotrópico, a função pode ser reescrita como  $CCF(r)$  onde  $r = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$ , da mesma maneira que as funções apresentadas anteriormente.

A  $CCF(r)$  é uma função par em meios periódicos, e, portanto, pode ter seu cálculo feito mais rapidamente em meios digitalizados se considerarmos seu domínio indo somente até  $r = N/2$  pixels. Os principais benefícios de se usar as quatro funções apresentadas na Equação (10), ainda que só uma delas seja independente, é que a forma geral da GLCM é mantida, e o cálculo de medidas estatísticas é facilitado posteriormente. As simulações dos autores indicaram que a  $CCF(r)$  representa melhor a informação de conectividade das fases em relação à função de correlação de dois pontos  $S_2(r)$ , e requer relativamente pouco custo extra de computação.

O cálculo também é feito por amostragem ortogonal, da mesma maneira que para a função de correlação de dois pontos tradicional, mas considerando os quatro casos contidos na matriz separadamente.

### 3.1.6 FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DE DOIS PONTOS POR CLUSTERS

Funções de correlação de  $n$  pontos  $S_n(r)$  de baixa ordem não são capazes de representar aglomerados (*clusters*) e percolação de meios aleatórios. Numa tentativa de capturar essa informação com uma função de baixa ordem, Torquato et al [21]

definem a função de correlação de dois pontos por clusters (*two-point cluster function*). Denotada por  $C_2^{(j)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , é definida como a probabilidade de encontrar dois pontos  $\mathbf{r}_1$  e  $\mathbf{r}_2$  no mesmo cluster de fase  $j$ . Num meio estatisticamente homogêneo e binário, a função de correlação de dois pontos por clusters para a fase de interesse pode ser escrita como função somente da distância  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  entre os dois pontos na forma  $C_2(r)$ , da mesma maneira que para as funções de correlação anteriores.

A função de correlação de dois pontos por clusters, apesar de ser apenas de “dois pontos” (i.e., de baixa ordem), é muito mais sensível à informação estrutural e de conectividade do que a função de correlação de dois pontos clássica, ou mesmo as versões de maior ordem  $S_n(r)$  [20]. A combinação  $S_2$ - $C_2$  é mais restritiva, isto é, representa um universo menor de microestruturas, do que combinações de  $S_2(r)$  com funções de mais alta ordem, como mostra a Figura 4. Apesar de esta função ser um desenvolvimento recente, é esperado que a  $C_2(r)$  forneça reconstruções e simulações muito melhores, já que é amplamente estabelecido que *clusters* em microestruturas afetam drasticamente as propriedades macroscópicas de um material [10, 13].

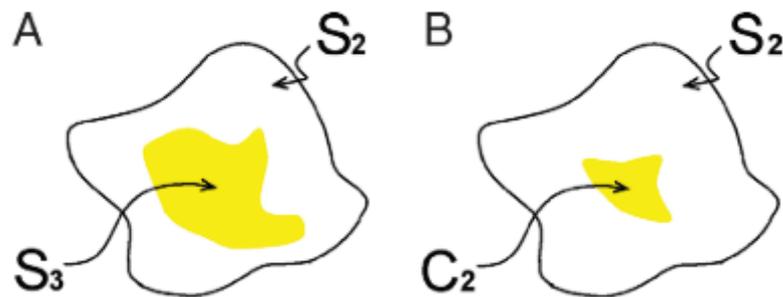


Figura 4 – Diagrama que mostra que a combinação  $S_2$ - $C_2$  é mais restritiva que a combinação  $S_2$ - $S_3$  [21].

O motivo de a  $C_2(r)$  ser um descritor microestrutural superior à  $S_2(r)$  pode ser melhor entendido se entendermos que a função de correlação tradicional é a soma de duas contribuições [21],

$$S_2(r) = C_2(r) + D_2(r) \quad (11)$$

onde  $D_2(r)$  é a probabilidade de dois pontos separados por uma distância  $r$  caírem na mesma fase, mas em dois clusters diferentes. Por essa razão, a função de correlação  $S_2(r)$  é particularmente insensível a *clusters* e percolação, impasse este defeito ao considerarmos a parcela  $C_2(r)$  da soma, que reflete a “conectividade” da topologia considerada.

O cálculo da  $C_2(r)$  em meios digitalizados é feito de maneira semelhante aos casos anteriores – pode ser feito por amostragem ortogonal ou usando o algoritmo *Lattice-Point* [20], mas contando apenas pares de pontos que caem no mesmo cluster, i.e., existirá um histograma de pares de moléculas de gás  $BN^k(r)$  para cada cluster  $k$ . Assim, a  $C_2(r)$  é dada por

$$C_2(r) = \frac{\sum_k BN^k(r)}{SN(r)} \quad (12)$$

No cálculo da função de correlação de dois pontos por clusters, não só o método de atualizar  $BN^k(r)$  entre duas iterações, mas o método usado para identificar e etiquetar os clusters tem grande importância na eficiência do programa final.

### 3.1.7 USO DE MÚLTIPLAS FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO

Um dos grandes benefícios do algoritmo apresentado por Yeong & Torquato [8] é a facilidade de incorporar um número arbitrário de funções de correlação de qualquer ordem no processo de reconstrução, bem como mais fases e anisotropia. Se  $f^{(\alpha,j)}(\mathbf{r}^n)$  é um tipo  $\alpha$  de função de correlação de  $n$  pontos de fase  $j$ , então a energia passa a ser escrita como

$$E = \sum_{\alpha} \sum_j \sum_r w_{\alpha,j} [f_s^{(\alpha,j)}(\mathbf{r}^n) - f_0^{(\alpha,j)}(\mathbf{r}^n)]^2 \quad (13)$$

onde os índices subscritos  $s$  e  $0$  indicam o sistema reconstruído e o de referência, respectivamente. O fator  $w_{\alpha,j}$  indica um peso para cada função de correlação de cada

fase, e pode ser variado ao longo da reconstrução para fornecer resultados mais refinados à medida que a microestrutura simulada evolui.

Incluir diversas funções de correlação é importante pois cada tipo permite introduzir um recurso novo na reconstrução. A função de correlação de dois pontos ( $S_2$ ), por exemplo, traz informação morfológica de curto alcance, mas não traz informação de conectividade, recurso este que funções como a de caminho linear e função de correlação por clusters representam melhor. O custo computacional extra de se avaliar diversas funções de correlação pode se tornar inviável; portanto, um fator providencial para a performance são métodos eficientes de atualização das funções entre um passo de tempo e o próximo.

### 3.1.8 TEMPERATURA E CRITÉRIOS DE PARADA

O funcionamento da reconstrução tem base na troca de pixels de fases diferentes até atingir um estado de energia inferior a uma pequena tolerância. Para evitar que a solução fique estacionada em um mínimo local, o algoritmo de *simulated annealing* tipicamente aceita também trocas energeticamente desfavoráveis no começo da reconstrução, com o intuito de pesquisar extensivamente o espaço de soluções. Seja  $\Delta E$  a diferença de energia entre a solução atual e a nova solução. Uma das maneiras de aceitar a troca é através do algoritmo de Metropolis et al [30], isto é,

$$p(\Delta E) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right), & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1, & \text{se } \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (14)$$

onde  $p(\Delta E)$  é a probabilidade de aceitação da troca e  $T$  é uma “temperatura virtual”, que deve ser reduzida conforme a reconstrução evolui. Assim, cada vez menos trocas desfavoráveis são aceitas, reduzindo o ruído e melhorando a qualidade da reconstrução nos estágios finais. A temperatura é um dos pontos mais importantes da reconstrução, e a frequência e velocidade com que a temperatura é reduzida no tempo de execução do algoritmo são normalmente encontradas de forma empírica. Estes parâmetros em conjunto são denominados *plano de resfriamento*.

O objetivo da reconstrução é atingir uma solução cujas funções de correlação sejam idênticas às da referência, ou seja, energia igual a zero. Na prática, entretanto, a tolerância deve ser apenas *próxima de zero*. Como é possível obter mínimos locais, o algoritmo pode nunca encerrar; nesse caso, o algoritmo deve conter também um critério alternativo, que geralmente é um número máximo de tentativas de troca de pixels ou número máximo de tentativas não-aceitas de troca de pixels.

### **3.2 Ferramentas para análise de microestruturas**

Para que se compare adequadamente duas ou mais microestruturas, é importante que se leve em consideração características quantitativas que as representem de maneira apropriada. Serão tratadas aqui duas maneiras de caracterizar microestruturas: medidas estereológicas, frequentemente usadas em metalografia clássica; e o diâmetro de Feret médio das seções, de comum utilização na mensuração de partículas irregulares.

#### **3.2.1 ESTEREOLOGIA APLICADA AOS FERROS FUNDIDOS NODULARES**

Uma das ferramentas mais importantes dentro da Metalurgia é a Metalografia, que trata do estudo da morfologia e estrutura dos metais e suas ligas. Sabe-se que a microestrutura de um material tem grande influência sobre suas propriedades macroscópicas, incluindo propriedades de transporte, eletromagnéticas e mecânicas [1, 16].

Uma das maneiras de quantificar propriedades microscópicas é por meio da Estereologia, que permite relacionar geometricamente medidas tridimensionais de uma estrutura com suas micrografias, que são naturalmente bidimensionais. A tecnologia relacionada à obtenção dessas amostras teve grandes avanços nos últimos tempos, mas em geral as micrografias são obtidas de seções preparadas de material que são levadas ao microscópio (óptico ou eletrônico) ou por projeções através destas

seções [32]. A Figura 5 mostra três estruturas típicas com as quais a estereologia trabalha: uma predominantemente volumétrica, uma linear e uma superficial. Suas impressões no plano são, respectivamente, uma área, um conjunto de pontos e um conjunto de linhas.

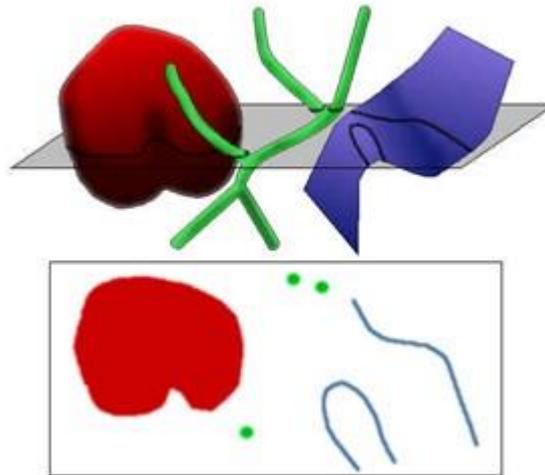


Figura 5 – Seccionamento de três estruturas 3D com um plano (acima), e suas interseções no plano (abaixo) na forma de uma área (2D), um conjunto de pontos e um conjunto de linhas (1D) [CD-ROM, 15]

Para os propósitos deste trabalho, são suficientes as medidas estereológicas clássicas de fração volumétrica ( $V_V$ ), número por unidade de área ( $N_A$ ), número por unidade de volume ( $N_V$ ) e área por unidade de volume ( $S_V$ ). Todas as definições e métodos deste capítulo seguem a metodologia de Russ & Dehoff [32].

Todas as relações estereológicas, clássicas ou não-convencionais requerem amostragem para a obtenção de uma média e um erro. A amostragem ideal é sempre isotrópica, uniforme e aleatória (IUA), de modo a representar sem qualquer tipo de viés a microestrutura analisada. Apesar de simples em teoria, nem sempre é fácil efetuar amostragens que atendam aos três requisitos. Se uma microestrutura apresenta um recurso com mais frequência perto da superfície, medir somente nesta região iria fornecer uma amostragem anisotrópica, por exemplo. Porém, supondo que as condições são atendidas, então se torna apenas uma limitação estatística obter a medida desejada com precisão arbitrária. A seguir, são apresentados os processos

tradicionais para obtenção das propriedades estereológicas mais usuais aplicando diretamente ao caso de ferro fundido nodular.

### 3.2.1.1 Fração volumétrica ( $V_V$ )

A Figura 6 apresenta uma micrografia de ferro fundido nodular com uma grade de pontos com dimensão 12 x 10, totalizando 120 pontos. A fase de interesse, neste caso, é aquela composta pelos nódulos de grafita (em preto).

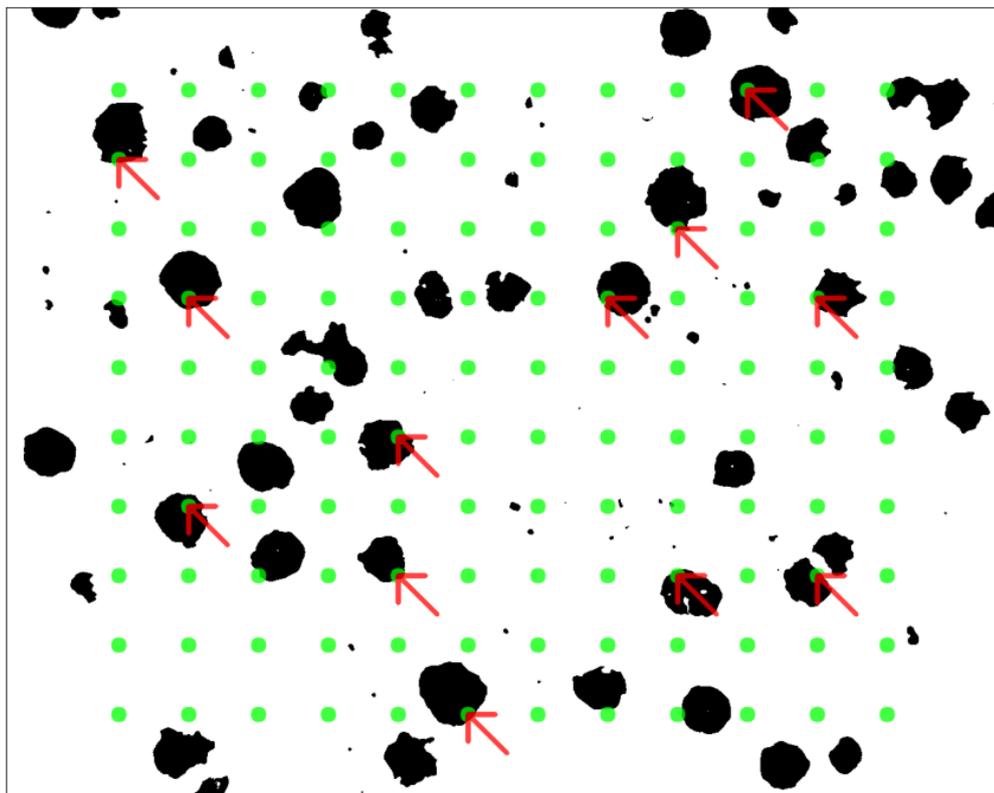


Figura 6 - Exemplo de medida de fração volumétrica em micrografia de ferro fundido nodular, setas em vermelho indicam pontos da fase preta (adaptado de [33])

A razão entre a quantidade de pontos da grade que caem sobre a fase preta e a quantidade total de pontos da malha dá a contagem normalizada de pontos, ou  $P_P$ . Uma das relações estereológicas fundamentais é

$$V_V = A_A = P_P \quad (15)$$

Ou seja, a fração volumétrica, fração de área da fase de interesse e a fração de pontos têm o mesmo valor. Para melhor significância estatística, essa análise deve ser feita repetidas vezes até que se atinja o nível de precisão desejado de acordo com a teoria da inferência [32,34]. Para  $N$  medidas, sendo a amostra grande o suficiente ( $N > 30$ ), então

$$V_V = \overline{P_p} \pm k \frac{\sigma_{\overline{P_p}}}{\sqrt{N}} \quad (16)$$

onde  $\overline{P_p}$  é a média da fração de pontos de todas as seções e  $\sigma_{\overline{P_p}}$  é o desvio padrão da série. O parâmetro  $k$  é dado pelo nível de confiança desejado; um valor usual é  $k = 2$ , que implica nível de confiança de aproximadamente 95%. A Tabela 1 apresenta os valores de  $k$  para os níveis de confiança mais usuais. As mesmas considerações estatísticas valem para todas as outras medidas estereológicas a seguir, valendo a hipótese de isotropia, uniformidade e aleatoriedade (IUA).

Tabela 1 – Parâmetros  $k$  para cada nível de confiança [34]

<b>Nível de confiança</b>	<b>parâmetro <math>k</math></b>
68,27%	1,00
90%	1,645
95%	1,96 $\cong$ 2,00
99%	2,58
99,73%	3

### 3.2.1.2 Número por unidade de área ( $N_A$ )

Dada uma microestrutura bifásica, como por exemplo o ferro fundido nodular apresentado na Figura 7, pode ser de interesse calcular o número de elementos característicos (*features*) da fase de interesse por unidade de área – neste caso, os elementos característicos são os nódulos de grafita.

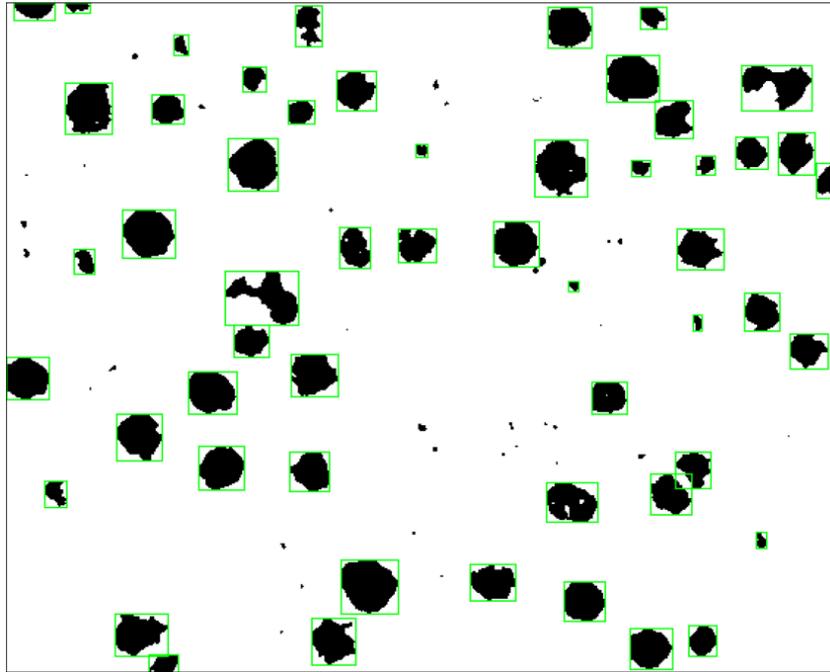


Figura 7 – Exemplo de contagem de nódulos de grafita em ferro fundido nodular (tamanho da imagem original: 566 x 459) (adaptado de [33])

O número por unidade de área ( $N_A$ ) é dado por

$$N_A = \frac{N}{A} \quad (17)$$

onde  $N$  é a contagem dos nódulos de grafita na seção avaliada e  $A$  é a área. Para a imagem apresentada, temos da escala da imagem original que 46 *pixels* equivalem a  $20 \mu m$ , ou seja,  $1 \text{ pixel} = 0,435 \mu m$ . Desse modo, considerando que a imagem apresenta 54 nódulos,

$$N_A = \frac{54}{566 \cdot 459 \cdot (0,435)^2} = 1,098 \cdot 10^{-3} \mu m^{-2}$$

### 3.2.1.3 Área superficial por unidade de volume ( $S_V$ ) e comprimento médio de interceptação ( $\lambda$ )

A área superficial por unidade de volume para um elemento característico numa microestrutura é definida pela razão desta área superficial pelo volume de material avaliado:

$$S_V = \frac{S}{V} \quad (18)$$

Normalmente, essa medida é encontrada indiretamente através da contagem de interseções por unidade de comprimento. A Figura 8 ilustra esse procedimento.

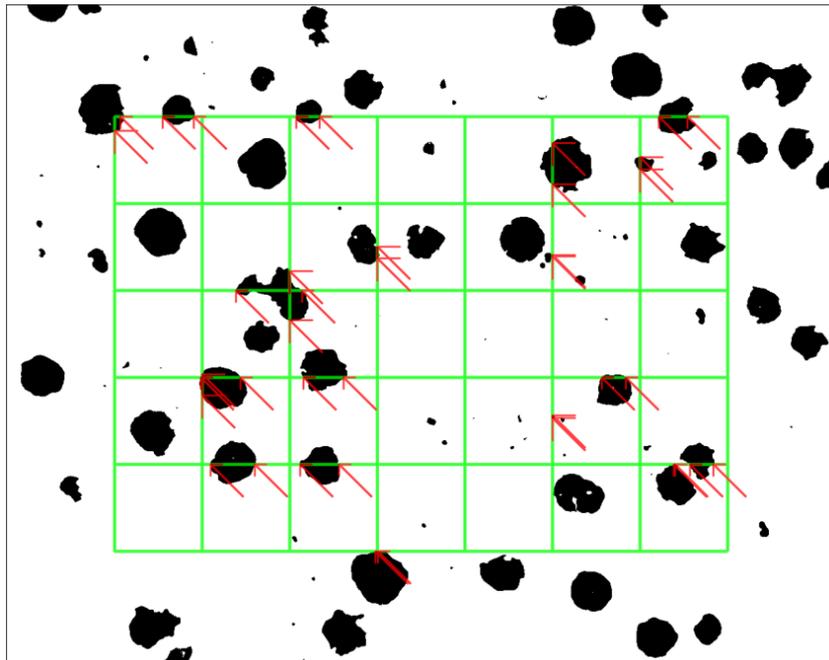


Figura 8 - Exemplo de contagem de interseções com os contornos dos nódulos de grafita em ferro fundido nodular (tamanho da imagem original: 566 x 459) (adaptado de [33])

O número de interseções por unidade de comprimento é simplesmente a razão entre o número de vezes que a malha intercepta um contorno pelo comprimento total de malha útil usada na aferição. A área superficial por unidade de volume se

relaciona com a contagem de interseções pela seguinte relação estereológica fundamental:

$$\langle P_L \rangle = \frac{1}{2} S_V \quad (19)$$

Portanto, com um valor estatisticamente significativo e seções cuidadosamente selecionadas dentro do critério IUA, a área superficial por unidade de volume é o dobro da contagem de interseções por unidade de comprimento. Como a visualização desta propriedade não é muito intuitiva, uma medida intimamente relacionada com a área por unidade de volume é o comprimento médio de interseção  $\lambda$ , caracterizado pelo comprimento médio entre dois contornos de elementos característicos. Uma relação que permite calcular o seu valor estimado é

$$\lambda = \frac{4S_V}{V_V} \quad (20)$$

onde o  $V_V$  é a fração volumétrica da fase de interesse.

### 3.2.2 DIÂMETRO MÉDIO DE FERET ( $F$ )

O diâmetro de Feret é uma grandeza relacionada ao tamanho de cada elemento característico da fase de interesse (neste caso, os nódulos de grafita). É muito usado na mensuração de tamanho de partículas irregulares [35,36]. Como em grande parte das vezes os elementos característicos não apresentam uma simetria particular nem tamanhos aproximadamente iguais, uma maneira de quantificar suas dimensões é tomando a média dos diâmetros medidos em diferentes direções, como as direções ortogonais  $x$  e  $y$ .

Merkus [37] define o diâmetro de Feret como “a distância entre duas tangentes paralelas em lados opostos de uma partícula orientada aleatoriamente”. Medidas em outras dimensões também podem ser utilizadas. A Figura 9 apresenta a medição de dois diâmetros ortogonais para duas rotações de uma região arbitrária.

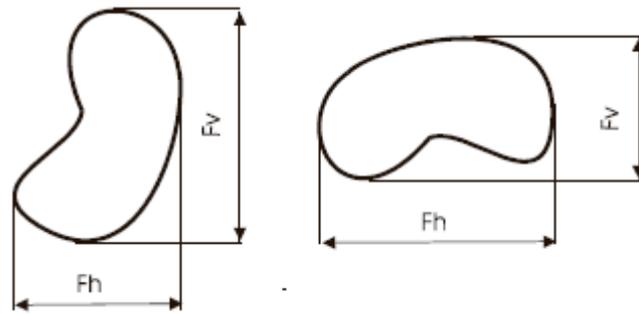


Figura 9 - Exemplo de diâmetros de Feret tirados em duas direções: horizontal ( $F_h$ ) e vertical ( $F_v$ )

Considerando  $F_h$  e  $F_v$  dois diâmetros de Feret de um único nódulo de grafita, medidos horizontalmente e verticalmente, então o diâmetro médio de Feret para esta partícula é dado por

$$F = \frac{F_h + F_v}{2} \quad (21)$$

Para uma micrografia, o diâmetro médio é dado pela média para todas as partículas,

$$\bar{F} = \langle F \rangle \quad (22)$$

O diâmetro médio de Feret da microestrutura é então dado por

$$\bar{F} = \frac{\sum F_h + \sum F_v}{2N} \quad (23)$$

## 4 MATERIAIS E MÉTODOS

Em linhas gerais, o processo adotado para este trabalho é o mostrado na Figura 10. Os principais objetivos do algoritmo finalizado são (i) flexibilidade na modificação e inserção de um número arbitrário de funções de correlação, (ii) suporte a reconstruções 2D e 3D, (iii) suporte a diferentes critérios de parada e planos de resfriamento. As partes principais do algoritmo serão descritas nas seções a seguir.

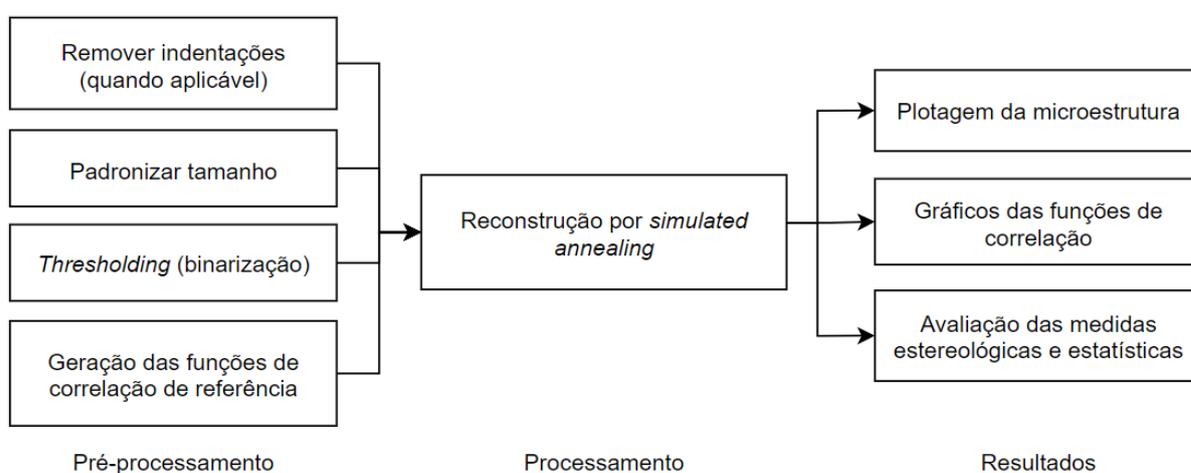


Figura 10 – Esquema simplificado do processo de reconstrução microestrutural

As reconstruções são baseadas principalmente em uma série de 57 micrografias de ferro fundido nodular obtidas por seccionamento serial, como visto na Figura 11, que foram gentilmente cedidas pela autora Artiane Freitas [33]. O objetivo é implementar o método de Yeong-Torquato na reconstrução bidimensional e tridimensional de um ferro fundido nodular e avaliar usando medidas comuns da Metalografia. Para isso, serão usadas as funções de correlação CCF,  $S_2$  e  $C_2$  em associação com os dois métodos de amostragem já apresentados: GLP e ortogonal. Planeja-se fazer um total de 6 reconstruções usando estas seções – as combinações de funções de correlação e métodos de amostragem, bem como os parâmetros de reconstrução, serão apresentados na próxima seção.

Todas os processamentos das reconstruções foram feitos em um dos servidores do Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM), da Universidade Federal Fluminense, cujas configurações são: dois processadores físicos Intel Xeon E5-2650 v2 ® 2.60 GHz 64 bits, 128 GB de memória RAM e 2 TB de armazenamento em disco rígido, rodando o sistema operacional Windows Server 2008 R2®. Todo o código utilizado está disponível no GitHub do autor [38].

Em relação ao pré-processamento e pós-processamento, que são tarefas menos intensivas, foi usado o computador pessoal do autor, cujas configurações são: processador AMD Ryzen 5 3600 6-Core Processor 3.60 GHz, 16GB de memória RAM de frequência 3200 MHz e 512 GB de armazenamento de estado sólido, rodando o sistema operacional Windows 10 versão 20H2 (compilação 19042.1288).

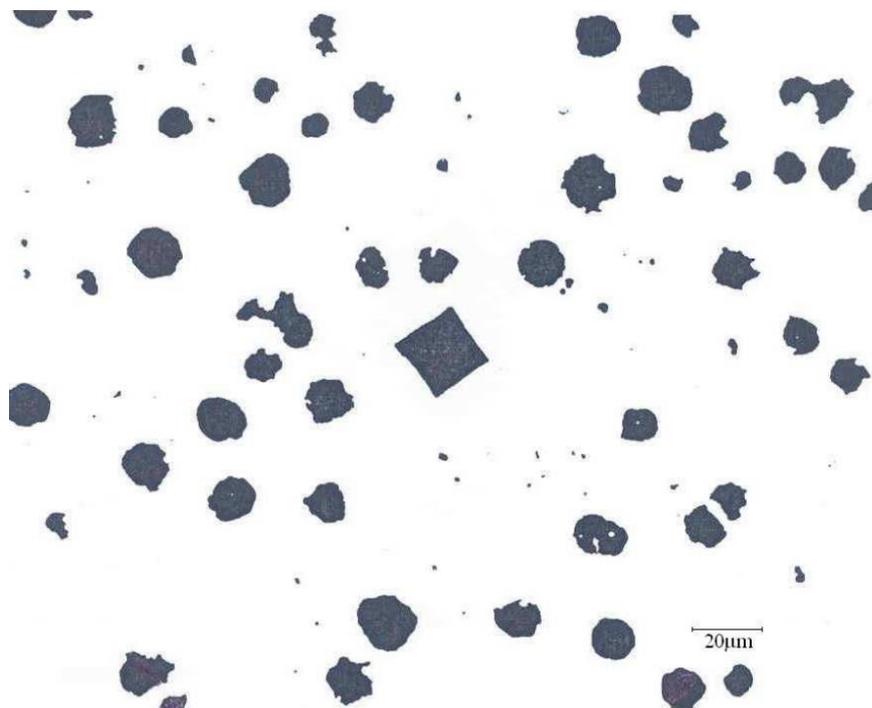


Figura 11 - Primeira micrografia (de um total de 57) de ferro fundido nodular, obtida por secionamento serial, aumento de 200x [33]

## 4.1 Planejamento e parâmetros para cada reconstrução

Sendo o objetivo avaliar o potencial do processo de Yeong-Torquato e o uso das funções de correlação mais modernas para reconstrução 2D e, de maior interesse prático, reconstrução 3D, serão feitas 3 reconstruções 2D e 3 reconstruções 3D. Em cada reconstrução, usa-se uma combinação variada de funções de correlação e de métodos de amostragem. Os parâmetros para todas as reconstruções foram obtidos empiricamente, mas foram usados como pontos de partida os trabalhos de Feng et al [19] e os diversos trabalhos de Torquato e colaboradores [8,20,29,39]. Os tamanhos das saídas foram escolhidos levando em consideração a disponibilidade do equipamento e o tempo de reconstrução em cada caso.

### 4.1.1 RECONSTRUÇÕES 2D

Serão feitas 3 reconstruções com saídas bidimensionais. A Figura 12 apresenta o planejamento das reconstruções 2D, e a Tabela 2 mostra os parâmetros usados nos três processos.

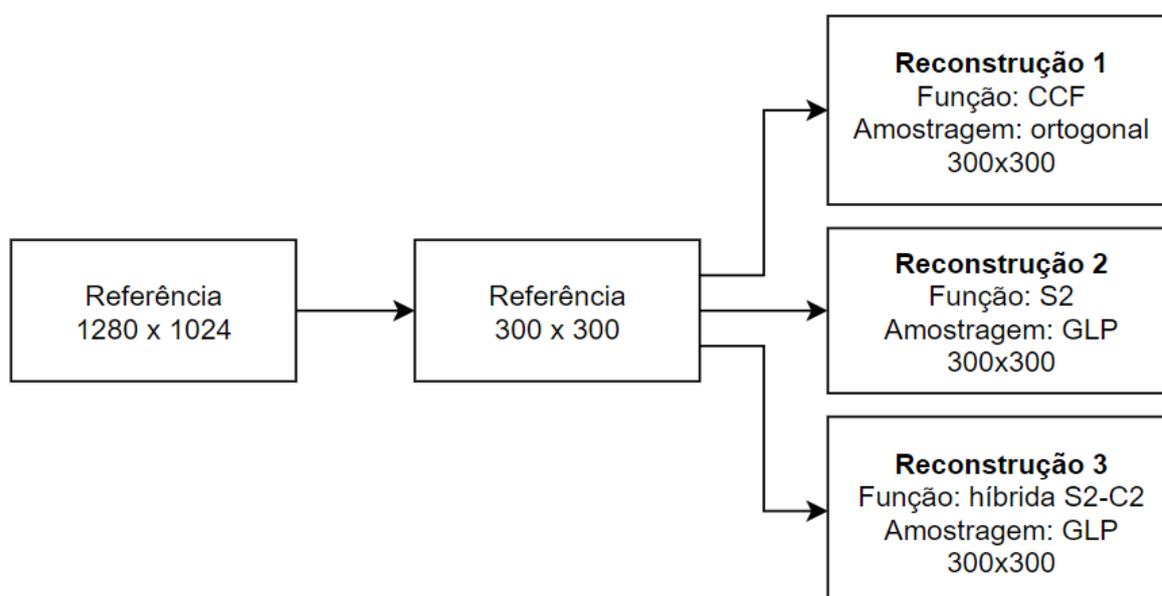


Figura 12 - Planejamento das três reconstruções 2D

Tabela 2 – Parâmetros para reconstruções 2D com base em uma única seção plana

Tamanho da matriz de entrada, $N \times N$ (pixels)	300 x 300
Tamanho da matriz de saída, $N \times N$ (pixels)	300 x 300
Distância diagonal máxima (pixels)	424
Tempo máximo de reconstrução, $t_{max}$	15.000.000
Tolerância de energia, $E_{tol}$	$10^{-11}$
Probabilidade de aceitação no início da reconstrução, $p_0$	0,5
Fator de resfriamento, $\lambda$	0,92
Passos iniciais, $t_{inicial}$	2500
Passos para cada resfriamento, $t_{resf}$	2500

#### 4.1.2 RECONSTRUÇÕES 3D

Da mesma maneira que antes, serão feitas 3 reconstruções tridimensionais, incorporando em cada caso uma melhoria na função de correlação ou na amostragem. A Figura 13 mostra o planejamento das reconstruções 3D, e a Tabela 3 mostra os parâmetros usados nos três casos.

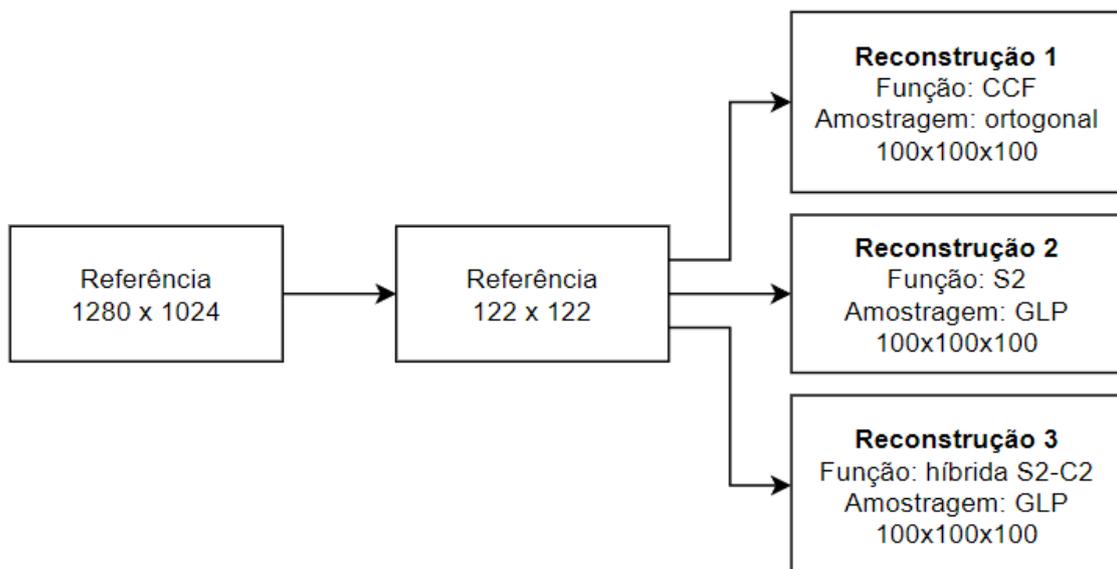


Figura 13 - Planejamentos das três reconstruções 3D

Tabela 3 – Parâmetros para todas as reconstruções 3D a partir de uma única seção plana

Tamanho da matriz de entrada, $N \times N$ (pixels)	122 x 122
Tamanho da matriz, $N \times N$ (pixels)	100 x 100 x 100
Distância diagonal máxima (pixels)	173
Tempo máximo de reconstrução, $t_{max}$	30.000.000
Tolerância de energia, $E_{tol}$	$10^{-6}$
Probabilidade de aceitação no início da reconstrução, $p_0$	0,4
Fator de resfriamento, $\lambda$	0,90
Passos iniciais, $t_{inicial}$	2500
Passos para cada resfriamento, $t_{resf}$	2500

## 4.2 Pré-processamento

O pré-processamento consiste basicamente em tratar as micrografias de ferro fundido nodular e calcular suas funções de correlação de interesse, que servirão de entrada para a reconstrução.

### 4.2.1 REMOÇÃO DAS ENDENTAÇÕES E BINARIZAÇÃO

A série de 57 micrografias de ferro fundido nodular foi obtida inicialmente com objetivo de constituir uma reconstrução microestrutural 3D pelo método de seccionamento serial [33]. Para auxiliar no alinhamento adequado das seções no momento do tratamento computacional, impressões de microdureza Vickers foram feitas a cada certo número de polimentos da amostra. Para o presente uso, entretanto, as impressões são desnecessárias e podem causar distorção nas medidas metalográficas das seções. Além disso, para o caso do ferro fundido nodular, a microestrutura já é essencialmente bifásica. Após uma simples binarização pelo método de Otsu, a microestrutura já está no formato ideal para servir de base para a reconstrução pelo método de Yeong-Torquato.

A remoção das indentações Vickers e binarização são feitas com a distribuição Fiji 2.1.0 [40] do software ImageJ 1.53c . O software ImageJ foi ideal neste caso pois a remoção das indentações é uma tarefa inerentemente manual; a interface gráfica do programa e ferramentas intuitivas tornam o processo mais rápido. Uma imagem da interface gráfica pode ser vista na Figura 14. As imagens foram fornecidas no formato .tif com tamanho 1280 x 1024 pixels, e o software permite conversão para escala de cinza de 8 bits já no momento da importação, como pode ser visto na Figura 15. A segmentação binária é feita pelo método de Otsu usando um plugin do próprio Fiji e a ferramenta Balde de Tinta é então usada nas indentações. O resultado do tratamento para uma das imagens é mostrado na Figura 16.

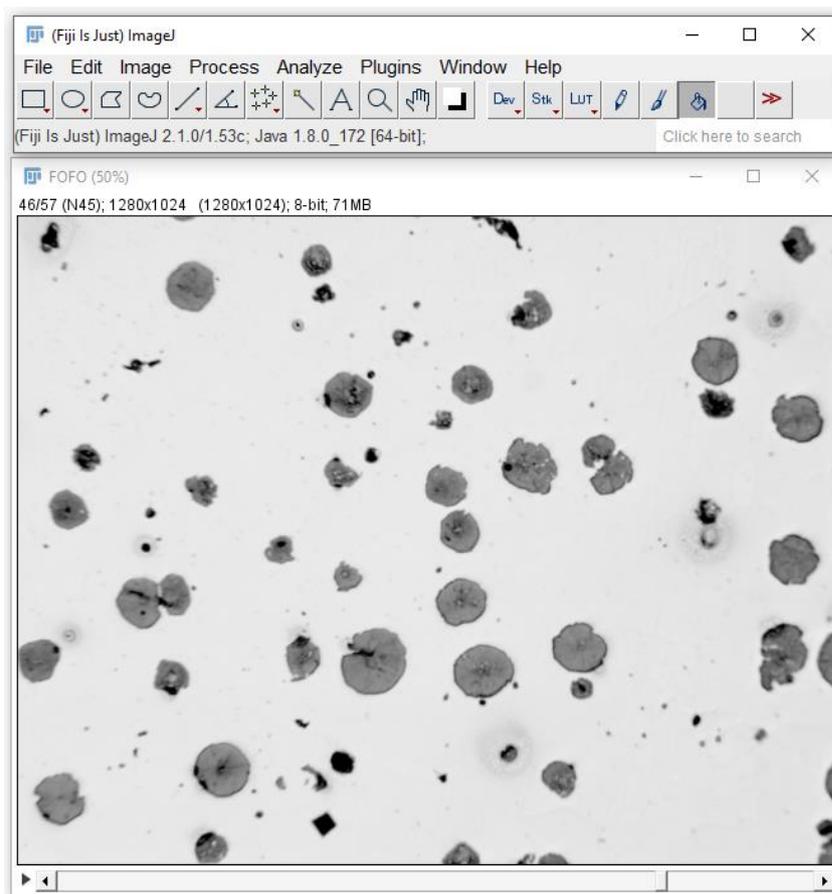


Figura 14 - Interface gráfica do software ImageJ, com ferramenta Balde de Tinta selecionada

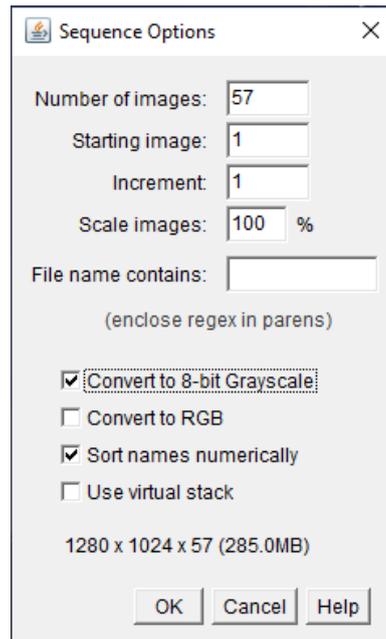


Figura 15 - Importação de sequência de imagens no software ImageJ, com opção de converter para escala de cinza de 8 bits selecionada

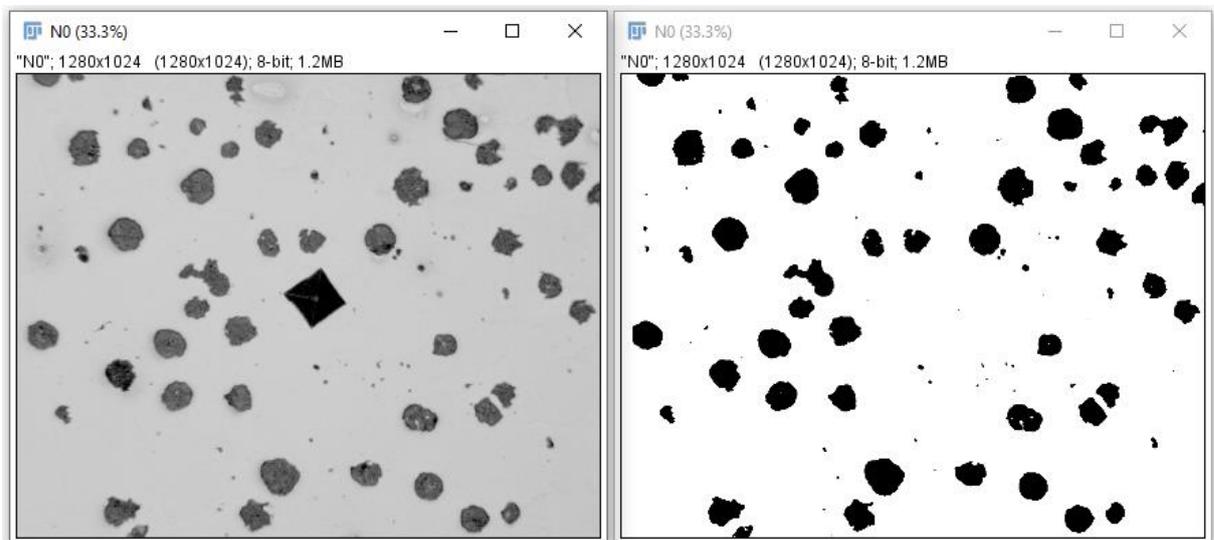


Figura 16 - Micrografia antes (esquerda) e depois (direita) do tratamento de imagem no software ImageJ

#### 4.2.2 REDIMENSIONAMENTO E CÁLCULO DAS FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO

A seguir, as imagens produzidas pelo ImageJ são abertas com a biblioteca OpenCV 4.4.0 do Python. A biblioteca OpenCV, inicialmente desenvolvida pela Intel na linguagem de programação C/C++, é destinada à visão computacional e dispõe de diversos métodos para tratamento eficiente de imagens estáticas e vídeos.

As imagens são então redimensionadas para servirem de entrada para o algoritmo de reconstrução. Para posterior normalização das medidas estereológicas obtidas da reconstrução e comparação com outros trabalhos, é preciso saber ampliação utilizada com relação à imagem original. Por isso, em cada imagem de referência utilizada, foi utilizada a média de duas distâncias características, escolhidas como mostra a Figura 17. Em conjunto com a escala da imagem original, é possível estimar quanto um pixel da reconstrução vale em micrômetros apenas observando as proporções das distâncias em cada caso. Obtido o fator de conversão  $k$ , então qualquer distância linear pode ser obtida por meio de

$$d_{\mu m} = k \cdot d_{px} \quad (24)$$

A Tabela 4 apresenta as distâncias características e os fatores de conversão obtidos delas. Estes serão os valores utilizados para a normalização posterior das medidas estereológicas da reconstrução.

Tabela 4 - Distâncias características das referências após o redimensionamento e os fatores de conversão pixels→ $\mu m$  para os casos 2D e 3D

	Original	Rec. 2D	Rec. 3D
Tamanho da referência (px)	-	300 x 300	122 x 122
Escala	$20 \mu m = 55 px$	-	-
$d_1$ (px)	449	245	99
$d_2$ (px)	86	48	19
$d_{m\u00e9dio}$ (px)	267,5	146,5	59
Fator de conversão ( $\mu m/px$ )	0,3636	0,6639	1,6485

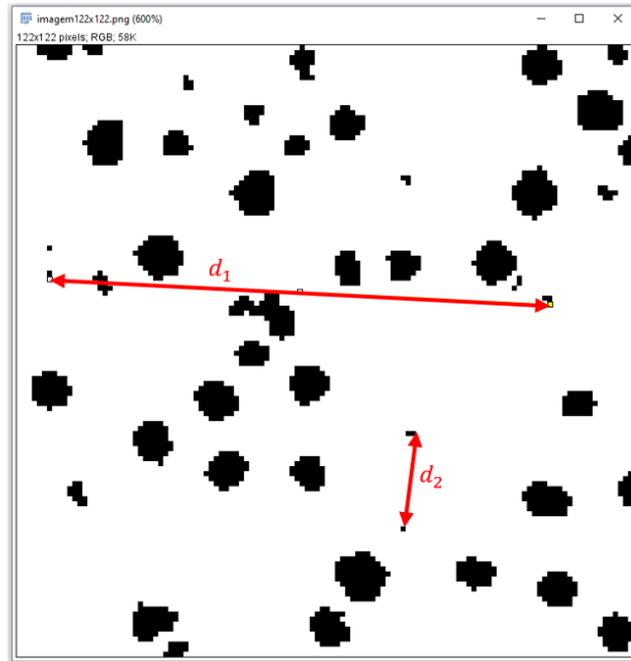


Figura 17 – Ilustração das duas distâncias características utilizadas para o cálculo do fator de normalização

O tamanho escolhido para as reconstruções foi baseado num compromisso entre resolução satisfatória e performance do equipamento disponível para execução do algoritmo. Em particular para o caso 3D, como a distância limite para as funções de correlação pelo método GLP é obtida do tamanho da diagonal da seção de referência, então o tamanho linear necessário da seção de referência  $L_{ref}$  e o tamanho  $L_{rec}$  da reconstrução cúbica resultante respeitam a seguinte relação (em pixels):

$$L_{ref} \cdot \sqrt{2} = L_{rec} \cdot \sqrt{3} \quad (25)$$

Ou seja, para usar uma função de correlação originada de seção 2D, a diagonal da seção de referência deve ter o mesmo tamanho que a diagonal da matriz cúbica reconstruída. Desse modo, uma seção de 122 x 122 pixels foi necessária para obter uma reconstrução 3D de dimensões 100x100x100.

O cálculo das funções de correlação de referência, que servirão de entrada para o programa, será feito da mesma maneira que durante o processamento. Os detalhes

estão na próxima seção. As funções de correlação são então escritas em arquivos com extensão .dat para serem lidas pelo programa principal.

### 4.3 Processamento

A reconstrução será feita num algoritmo desenvolvido em C++, usando o Microsoft Visual Studio 2019 Community. O principal objetivo deste algoritmo é a flexibilidade, tanto na facilidade de adicionar novas funções de correlação, como implementar novos critérios de energia e de parada. Por isso, um paradigma de programação orientada a objetos foi explorado na forma de três classes: (i) `Microstructure`, que gerencia a solução e todos os seus pontos; (ii) `CorrFunction`, que é uma classe abstrata que contém todos os métodos necessários para manipulação de funções de correlação; e (iii) `Reconstructor`, que escolhe os pontos a serem trocados, invoca os métodos de atualização das funções de correlação e atualiza a temperatura.

O algoritmo segue rigorosamente o procedimento de Yeong-Torquato [8], com uma matriz inteira vetorizada (que só contém 0's e 1's para estruturas binárias) representando a microestrutura em cada instante de tempo. Num dado momento, as posições dos pixels de cada fase são armazenadas em vetores separados – desse modo, é sempre possível escolher um pixel branco e um pixel preto por iteração, evitando iterações com trocas de pixels iguais.

Por conta da vetorização, o programa é facilmente extensível para o caso 3D, e é fácil adicionar novas fases à simulação, bastando adicionar novos números para representar as fases adicionais. O método de aceitação de trocas de pixels é o de Metropolis et al [30], já descrito anteriormente.

### 4.3.1 CÁLCULO E ATUALIZAÇÃO DAS FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO

Os cálculos completos das funções de correlação são feitos apenas no início do programa; sendo assim, sua eficiência não tem impacto apreciável no tempo de execução. O método de atualização da função de correlação após uma troca de pixels, entretanto, é um dos principais fatores que mais influenciarão a performance do algoritmo.

As funções de correlação podem ser calculadas supondo que as microestruturas são periódicas ou não-periódicas – para fins de reconstrução, adotaremos a função de contorno periódica. Se um segmento ultrapassar as bordas da imagem, ele “continua” artificialmente na borda oposta da imagem, mantendo a direção e sentido originais. A Figura 18 mostra a condição de contorno aplicada a um destes segmentos. De acordo com Torquato [8], esse tipo de amostragem gera um perfil mais suave do que usando segmentos aleatórios obtido arbitrariamente.

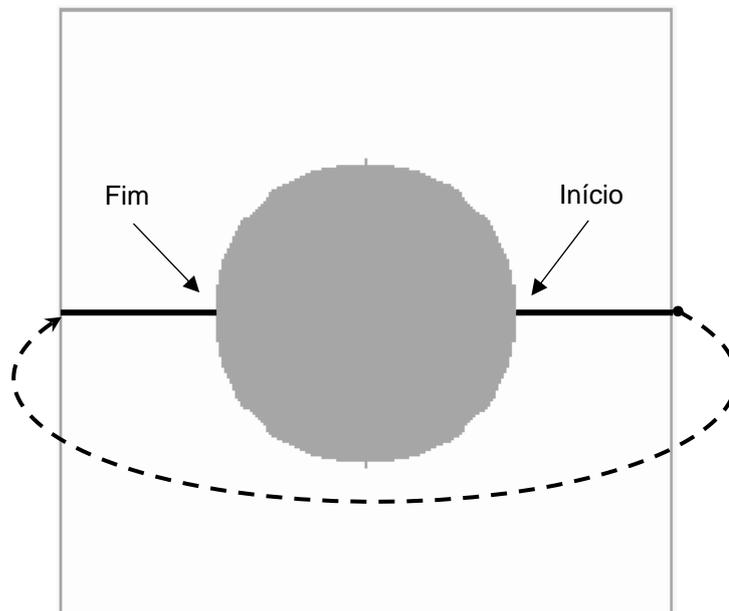


Figura 18 – Condição de contorno periódica aplicada a um segmento qualquer

Existem dois casos a serem considerados: algoritmo de amostragem ortogonal e o algoritmo Lattice-Point.

#### 4.3.1.1 Algoritmo de amostragem ortogonal

Para um meio digitalizado periódico para o qual se deseja obter a função de correlação  $f(r)$  pelo método de amostragem ortogonal, basta deslizar um segmento de tamanho  $r$  por todos os pixels da imagem, para cada tamanho  $0 \leq r < r_{max}$ . Observe que  $r_{max} = N/2$  pixels é suficiente para os casos de função de correlação de dois pontos e de co-ocorrência [3, 5], que são funções pares. O processo deve ser repetido em todas as dimensões de interesse e, ao final, a média é tomada em relação a todas as tentativas feitas.

Note que, quando dois pixels (um de cada fase) são trocados durante a reconstrução, somente a parte da função de correlação relativa a aquelas linhas e colunas que possuem estes pixels será modificada. Portanto, é desnecessário calcular as funções de correlação por completo a cada etapa, bastando desfazer a contribuição do pixel preto que passou a branco, e adicionar a contribuição do pixel branco que passou a ser preto. No caso da função de correlação de co-ocorrência, por exemplo, a atualização seria [19]

$$CCF_{nova}(r) = CCF_{antiga}(r) - CCF_{preto \rightarrow branco}(r) + CCF_{branco \rightarrow preto}(r) \quad (26)$$

A Figura 19 mostra as linhas e colunas relevantes para uma troca em que o pixel marcado em vermelho passa de preto a branco, e o pixel verde passa de branco a preto. As linhas marcadas em vermelho terão sua contribuição removida, e as linhas marcadas em verde terão sua contribuição adicionada. A mesma ideia será aplicada à função de correlação de dois pontos e a de caminho linear quando amostradas ortogonalmente.

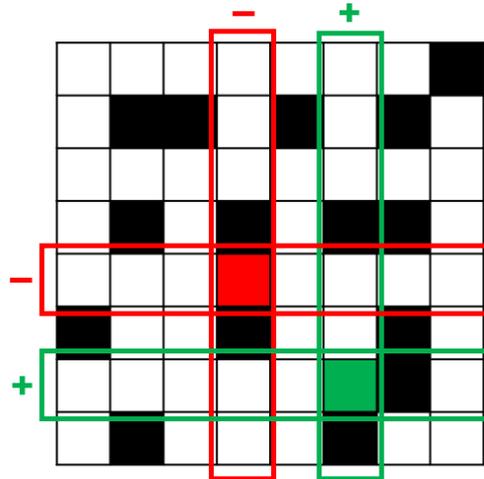


Figura 19 – Linhas e colunas cujas contribuições devem ser removidas (em vermelho) e adicionadas (em verde) para atualizar uma função de correlação pelo algoritmo de amostragem ortogonal

#### 4.3.1.2 Algoritmo Lattice-Point

No caso de funções de correlação calculadas pelo algoritmo Lattice-Point, o cálculo inicial é feito comparando todos os pares de pixels das fases de interesse (moléculas de gás) e alocando cada par num histograma particionado por distância, conforme mostrado na seção 3.1.3. Um segundo histograma, feito comparando todas as distâncias entre pares de sítios e particionando por distância, é computado e salvo – este histograma não muda ao longo de toda a reconstrução.

Uma vez que a função de correlação de referência e da matriz inicial (aleatória) de reconstrução são calculadas no início do programa, todas as novas funções de correlação serão obtidas da última de maneira similar ao algoritmo de amostragem ortogonal – através de atualização da função de correlação anterior. Suponha a troca de pixels mostrada na Figura 20, em que se troca o pixel verde (previamente branco) pelo pixel vermelho (previamente preto). Para o cálculo da  $S_2(r)$ , por exemplo, a função após a troca pode ser escrita como

$$S_{2nova}(r) = S_{2antiga}(r) - S_{2preto \rightarrow branco}(r) + S_{2branco \rightarrow preto}(r) \quad (27)$$

Ou seja, a nova função de correlação é a anterior após remover a contribuição dos pares em que o pixel vermelho estava, e adicionar a contribuição dos pares dos quais o novo pixel verde da fase de interesse faz parte na nova configuração.

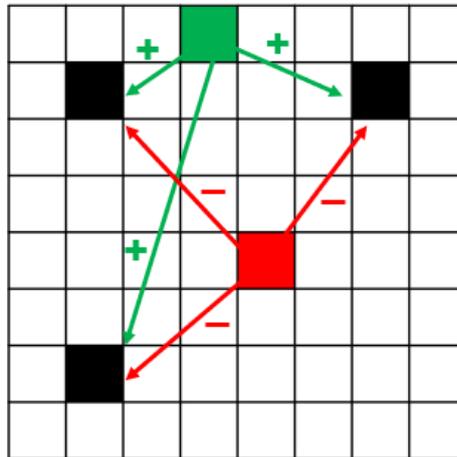


Figura 20 – Pares de pontos cujas contribuições serão removidas (em vermelho) e adicionadas (em verde) para atualizar uma função de correlação pelo algoritmo Lattice-Point

O mesmo processo vale para a função de correlação por *clusters* (seção 3.1.6), com a diferença de que somente pares dentro dos mesmos *clusters* devem ser considerados no cálculo inicial e na atualização. Como uma vez que o par de pixels a serem trocados é imutável para um mesmo passo no tempo, o processamento das distâncias e atualização das funções de correlação foram paralelizados usando OpenMP.

#### 4.3.2 IDENTIFICAÇÃO DE CLUSTERS

Para o cálculo da função de correlação por clusters  $C_2(r)$ , é necessário primeiramente identificar e etiquetar todos os clusters na matriz inicial. Para isso, o algoritmo de queimada (*burning algorithm*, em inglês) é utilizado. Esse algoritmo é basicamente uma especialização do algoritmo de busca em profundidade (*depth-first search*, em inglês), amplamente utilizado em Teoria dos Grafos. Um pseudocódigo é dado por Stauffer & Aharony [41]. Embora existam algoritmos mais eficientes, como o de Hoshen-Kopelman [42], a busca em profundidade é consideravelmente mais

simples de implementar e a diferença de performance é desprezível para esta escala de aplicação.

Durante a leitura inicial da matriz aleatória, todos os pontos de cada cluster são armazenados em *arrays* e cada pixel recebe um valor associado ao cluster que pertence. Nas próximas iterações, em vez de percorrer toda a matriz novamente para identificar os clusters, é feita a verificação de se os pontos trocados quebram um cluster em mais componentes ou unem dois ou mais clusters. Na Figura 21, por exemplo, o ponto em azul, que é interno, e o ponto verde, que é superficial e isolado de outros clusters, não modificam a quantidade de clusters caso estejam envolvidos numa troca de pixels. A remoção do pixel vermelho, entretanto, ocasiona a criação de um novo cluster. Os *arrays* representativos dos clusters são então adequadamente alterados para a próxima iteração.

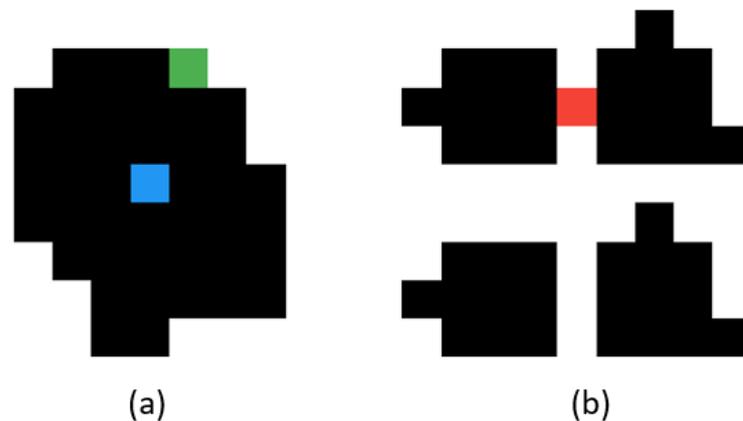


Figura 21 – Exemplos de pixels que (a) não alteram e (b) alteram a quantidade de clusters no sistema após uma iteração

#### 4.3.3 OTIMIZAÇÃO SUPERFICIAL

Trabalhos anteriores observam que a troca aleatória de pixels se torna muito ineficiente após a formação inicial de clusters no meio reconstruído. A razão para isso é que, quando os aglomerados maiores se formam, a maior parte dos pixels pretos (i.e. fase de interesse) selecionados são internos; deste modo, é energeticamente desfavorável mudá-los de posição e a maioria das trocas são rejeitadas [27].

Uma maneira de amenizar o problema é implementar uma troca “enviesada” de pixels, selecionando apenas pixels superficiais para troca a partir de certo ponto da reconstrução. Para isso, definimos *energia livre* de um pixel como o número de pixels vizinhos ao original com fase diferente. Essa quantidade pode ser definida tanto para pixels brancos como para pixels da fase de interesse. Por exemplo: em duas dimensões, um pixel preto com 4 vizinhos também pretos tem energia livre nula, enquanto um pixel preto com 4 vizinhos brancos tem energia livre, que é a maior energia livre possível. Em 3D, a maior energia livre possível é 6.

Uma vez que uma função para cálculo da energia livre está implementada, basta calculá-la em cada iteração e aceitar apenas trocas de pixels com energia livre diferente de zero, desprezando as outras e evitando cálculos potencialmente desnecessários. Para este trabalho, implementou-se otimização superficial a partir de 50% do número máximo de iterações em todos os casos. A Figura 22 mostra o impacto da otimização superficial em termos de energia. Veja que a troca enviesada de pixels permite vencer o *plateau* que se obtém pelas trocas aleatórias e melhorar a acurácia da reconstrução.

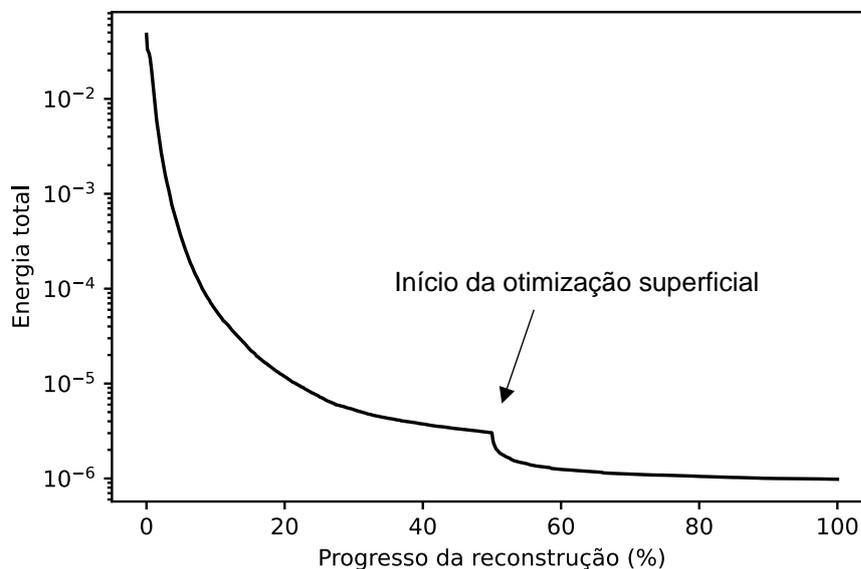


Figura 22 – Gráfico da energia total em função da porcentagem concluída de reconstrução usando otimização superficial

#### 4.3.4 PLANO DE RESFRIAMENTO E CRITÉRIO DE PARADA

A temperatura inicial é aquela que permite que uma taxa  $p_0$  das trocas desfavoráveis energeticamente ocorram, com o objetivo de pesquisar adequadamente o espaço de soluções [8]. No início da reconstrução, executa-se um número de trocas iniciais  $t_{inicial}$ , e a energia das trocas desfavoráveis é armazenada. Então, a média aritmética é tomada ( $\overline{\Delta E}_{inicial}$ ) e a temperatura inicial é obtida da resolução da equação contida no critério de Metropolis [30] para  $T_0$ , i.e.,

$$\ln\left(-\frac{\overline{\Delta E}_{inicial}}{T_0}\right) = p_0 \quad (28)$$

Um valor usado amplamente na literatura é  $p_0 = 0,5$  [1, 7, 10, 16–18]. Após a determinação da temperatura inicial, resfria-se a temperatura segundo uma lei de potência,

$$T_k = T_0 \lambda^k \quad (29)$$

onde  $k$  é o número da etapa de resfriamento e  $\lambda$  é um fator de resfriamento, tipicamente próximo de 1. O resfriamento é feito a cada certo número  $t_{resf}$  de tentativas de troca de pixels, ou seja,

$$k = \left\lceil \frac{t}{t_{resf}} \right\rceil \quad (30)$$

Os critérios de terminação implementados foram o de número máximo de tentativas de troca de pixels  $t_{max}$  e de tolerância de energia  $E_{tol}$ .

## 4.4 Pós-processamento

### 4.4.1 GERAÇÃO DOS GRÁFICOS E MICROESTRUTURAS

O programa principal emite as funções de correlação da reconstrução em DAT, bem como a microestrutura reconstruída em formato VTK [45] já com os *clusters* identificados. Gráficos de todas as seções 2D são gerados usando a biblioteca Matplotlib [46] no Python 3 com ambiente de desenvolvimento Jupyter Notebook [47], bem como todos os gráficos de funções de correlação e gráficos relacionados às medidas estereológicas, incluindo histogramas de distribuição de tamanho de nódulo. Sua interface é mostrada na Figura 23. Devido às capacidades limitadas desta biblioteca para o caso 3D, microestruturas tridimensionais serão processadas com o ParaView 5.6.2 [48], que oferece suporte nativo a arquivos VTK – a interface é mostrada na Figura 24.

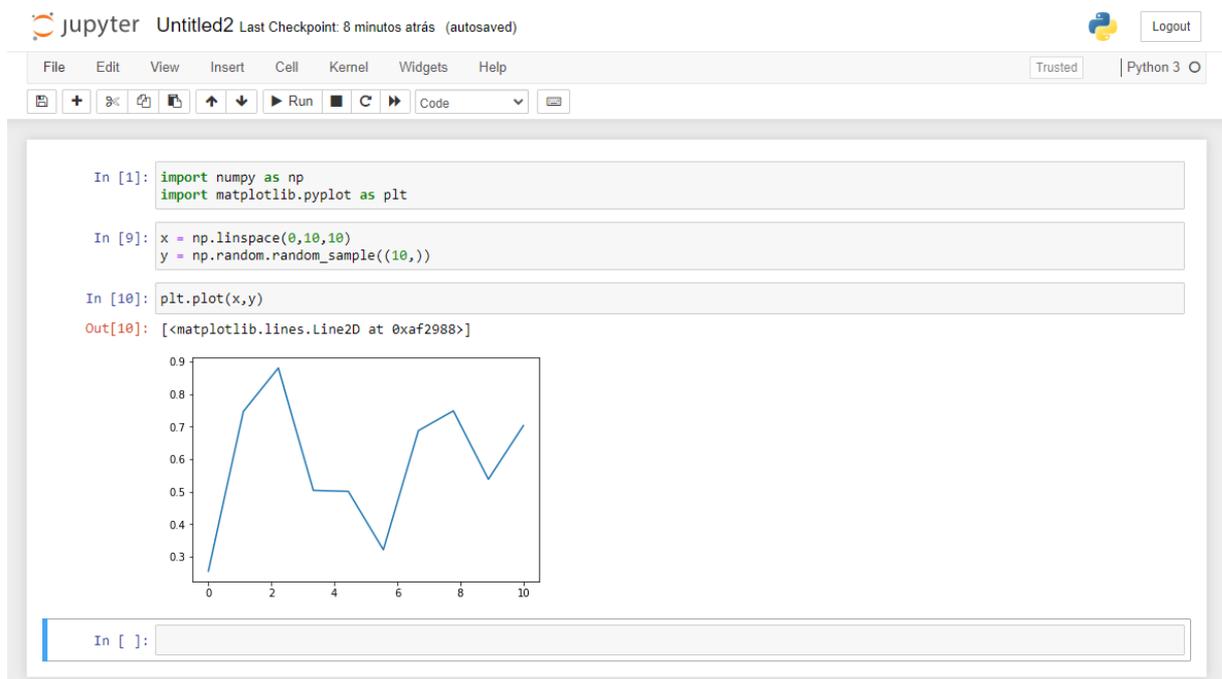


Figura 23 - Interface do ambiente de desenvolvimento Jupyter Notebook

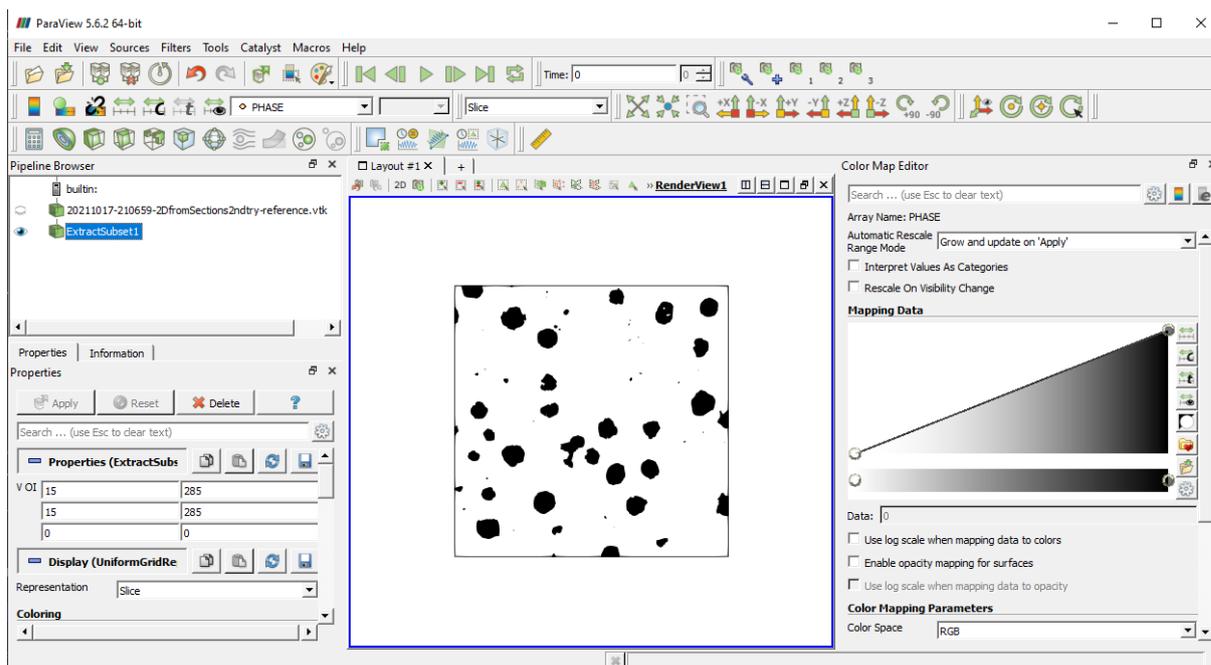


Figura 24 - Interface gráfica do programa de visualização de gráficos ParaView 5.6.2

#### 4.4.2 OBTENÇÃO DAS MEDIDAS ESTEREOLÓGICAS

As medidas estereológicas da referência e da reconstrução são obtidas com o uso da biblioteca OpenCV [49] para Python. Além disso, para o tratamento rápido das matrizes geradas, foi usado o NumPy [50], uma biblioteca popular em Python para cálculo numérico.

Na seção 3.2.1, foram apresentadas as ferramentas metalográficas mais usuais para quantificar uma microestrutura, aplicadas especificamente ao caso de ferro fundido nodular. As grandezas que são medidas diretamente da microestrutura e que serão utilizadas neste trabalho são a fração volumétrica, número de nódulos por unidade de área e número de interseções por unidade de comprimento. Entretanto, no caso de um meio digitalizado, não é necessário se ater a uma grade tão pequena, como uma grade 6x5 frequentemente utilizada na prática laboratorial. Todas as linhas e colunas de pixels podem ser utilizadas para o cálculo das medidas estereológicas.

Será necessário avaliar microestruturas 2D e 3D neste trabalho. No caso das microestruturas tridimensionais, todas as seções em todas as direções são extraídas individualmente e o cálculo é feito sobre as seções 2D resultantes. As medidas finais são então obtidas por média aritmética. Em linhas gerais, após a leitura da imagem original, uma matriz binária é gerada (“0” indicando sítios vazios – pixels brancos – e “1” indicando sítios cheios – pixels pretos). As medidas não-normalizadas são obtidas da seguinte maneira:

- O *número de pixels da fase preta* ( $P_{pretos}$ ) correspondente aos nódulos de grafita pode ser encontrada apenas iterando sobre todos os pixels da imagem e contando os pretos;
- A *contagem de clusters por unidade de área* ( $N_{clusters}$ ) foi feita usando a função `connectedComponents()` do OpenCV-Python. Esta função também traz como saída o tamanho dos retângulos que comportam o nódulo – seus comprimentos e larguras servirão como diâmetros de Feret (a Figura 7 mostra um exemplo de uso da função e os retângulos gerados);
- A *contagem de interseções com superfície* ( $I_S$ ) pode ser calculada iterando sobre todos os pixels da imagem (primeiro na vertical e depois na horizontal) e contando todos aqueles que são pretos e tem exatamente um vizinho preto e um vizinho branco.

Assim, as medidas estereológicas daquela seção, de tamanho  $M \times N$ , tamanho de um pixel  $l_0$  (medido em  $\mu m$ ), são obtidas através das seguintes fórmulas, que já incluem o fator de normalização:

$$V_V = \frac{P_{pretos}}{P_{total}} = \frac{P_{pretos}}{MN} \quad (31)$$

$$N_A = \frac{N_{clusters}}{MNl_0^2} \quad (32)$$

$$P_L = \frac{I_S}{2MNl_0} \quad (33)$$

$$S_V = 2 P_L \quad (34)$$

$$\lambda = 4 \frac{V_V}{S_V} \quad (35)$$

Os diâmetros médios de Feret são calculados pela média dos valores obtidos pela função `cv2.connectedComponents()` do OpenCV-Python [51], e seus histogramas são feitos com o Matplotlib. Na tentativa de facilitar a comparação das distribuições de tamanho de nódulo (diâmetro de Feret) da referência com cada uma das reconstruções, serão ajustadas curvas ao histograma pelo método de Estimativa de Densidade Kernel (*Kernel Density Estimation*, ou KDE, em inglês), que é um método não-paramétrico para estimar funções de densidade de probabilidade de uma variável aleatória [52]. A implementação foi feita usando a biblioteca SciPy 1.7.1 [53] do Python, e em todos os casos a largura de banda é a padrão. A função é a `scipy.stats.gaussian_kde()`, e mais informações podem ser encontradas na documentação [54].

#### 4.4.2.1 Cortes para avaliação do efeito de borda

Em particular nos casos de reconstrução por amostragem GLP, espera-se algum efeito de borda devido à falta de condição de contorno periódica. Portanto, as medidas estereológicas serão calculadas sobre a reconstrução sem modificação, mas também serão calculadas sobre uma versão da reconstrução com uma porcentagem das bordas removida.

Em testes preliminares, remover 5% em cada borda da microestrutura gerada parece eliminar a maioria dos artefatos tanto no caso 2D como no caso 3D, incluindo estruturas estriadas e conjuntos de clusters muito pequenos (1-3 pixels de área/volume). Com isso, espera-se obter alguma indicação sobre os benefícios ou

malefícios de remover artificialmente o efeito de borda sobre as medidas estereológicas mais comuns. Note que remover 5% em cada borda da figura 2D reduz um total de 10% em cada dimensão linear da microestrutura, o que significa que a área após o corte é 81% do original (caso 2D) e o volume após o corte é 73% do original (caso 3D).

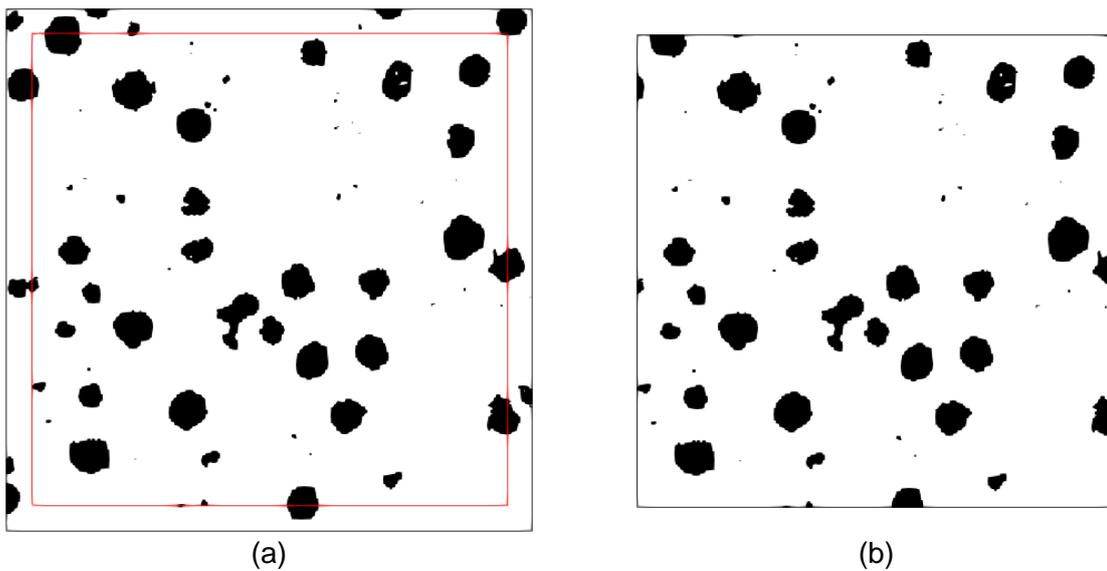


Figura 25 – Ilustração do processo de corte de 5% para uma microestrutura originalmente de 300x300 (indicado pelo retângulo vermelho): (a) antes, (b) depois

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A seguir, são apresentados os resultados das reconstruções propostas, incluindo as microestruturas geradas por meio de simulação e medidas estereológicas. Todas as funções de correlação da referência da reconstrução estão no apêndice. Incluem-se os casos sem e com corte de 5% nas bordas da microestrutura. Tanto em 2D (saída 300x300), como em 3D (saída 100x100x100), são apresentados os resultados para os três casos a seguir:

- reconstrução do tipo 1: **CCF** (função de correlação de co-ocorrência *amostrada ortogonalmente*);
- reconstrução do tipo 2:  **$S_2$**  (função de correlação de dois pontos *amostrada pelo método GLP*);
- reconstrução do tipo 3: **combinação  $S_2$  e  $C_2$**  (sendo esta a função de correlação por clusters *amostrada pelo método GLP*).

### 5.1 Reconstrução 2D a partir de uma única seção

#### 5.1.1 MICROESTRUTURAS GERADAS

A referência e as microestruturas 2D geradas a partir de uma única seção são apresentados na Figura 26, incluindo os três métodos: *CCF* (Figura 26b),  $S_2$  (Figura 26c) e a combinação  $S_2 - C_2$  (Figura 26d). Espera-se que os melhores resultados sejam obtidos por este último, tanto qualitativamente como nas medidas estereológicas.

A reconstrução usando *CCF* (Figura 26b) preservou bem os clusters menores da microestrutura de referência, e apresenta boa distribuição espacial dos nódulos de uma maneira geral. Como é feita usando condição de contorno periódica, não existe

distorção notável nas bordas das imagens. De uma maneira geral, a morfologia dos nódulos não é compatível com as da referência (Figura 26a) – esperava-se nódulos aproximadamente circulares, mas a reconstrução mostra estruturas alongadas. Isso é uma indicação de que a CCF não é capaz de representar sozinha informações detalhadas sobre conectividade, mas é suficiente para representar uma boa distribuição no espaço.

A reconstrução usando  $S_2$  pura pelo método de amostragem GLP (Figura 26c) apresenta morfologia muito melhor dos nódulos (Figura 26c) em relação à CCF (Figura 26b), que são arredondados como os da referência. Porém, a reconstrução com  $S_2$  pura sozinha ainda carece de informações detalhadas de conectividade – existem estruturas alongadas, análogas às estruturas da reconstrução por CCF. A característica mais notável desta reconstrução comparada com a anterior, por CCF, é o pronunciado efeito de borda. Nas quinas da matriz reconstruída, existem estruturas muito distintas das esperadas, incluindo estruturas estriadas e um conjunto de clusters de pouca massa. Estes pixels isolados em uma das quinas ajudam a explicar a falta dos clusters menores dispersos pela microestrutura, que estão na referência e foram bem representados pela reconstrução via CCF.

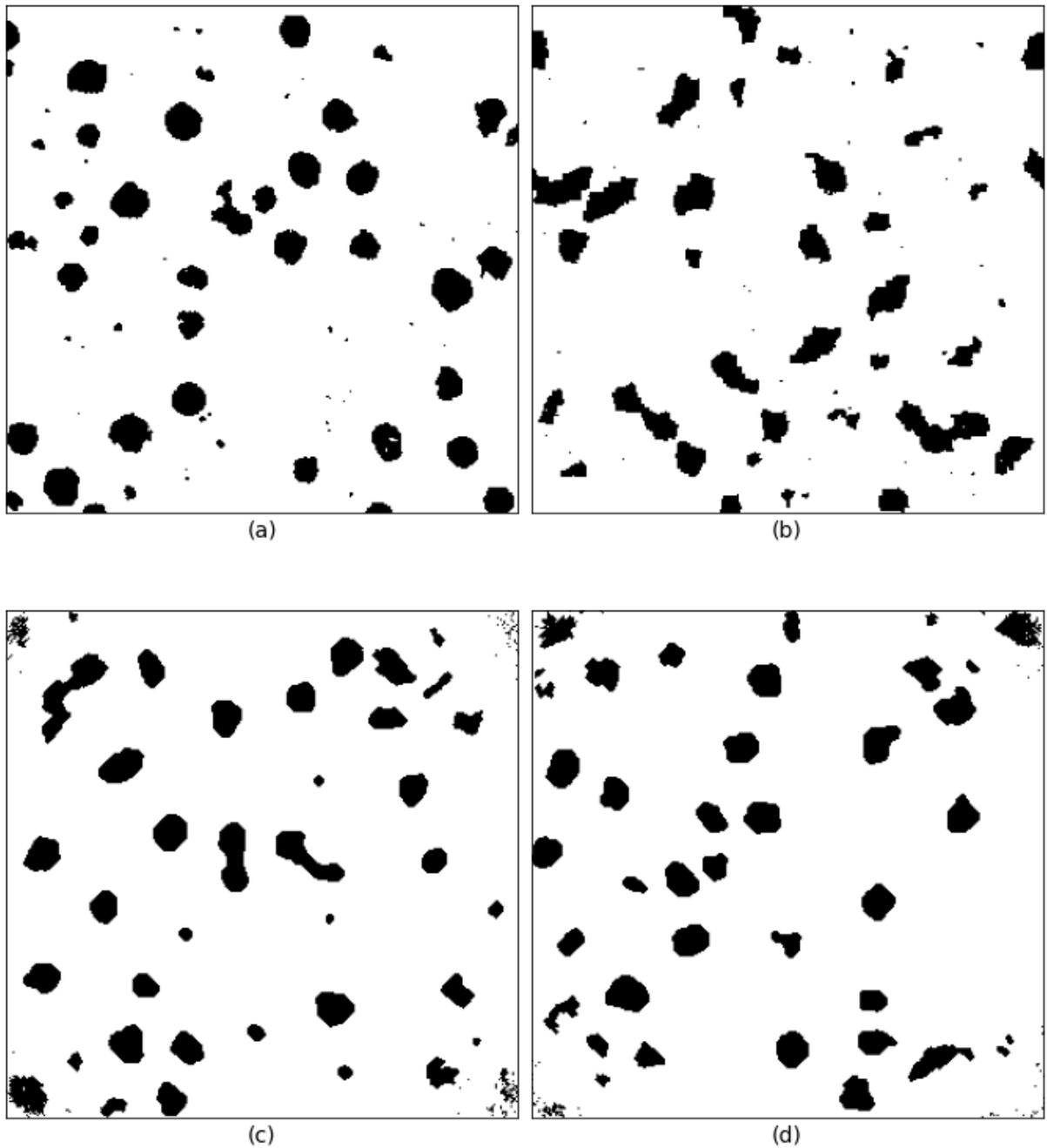


Figura 26 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção, microestruturas 300x300: (a) referência, (b) reconstrução usando  $CCF$ , (c) reconstrução usando  $S_2$ , (d) reconstrução híbrida usando  $S_2 - C_2$

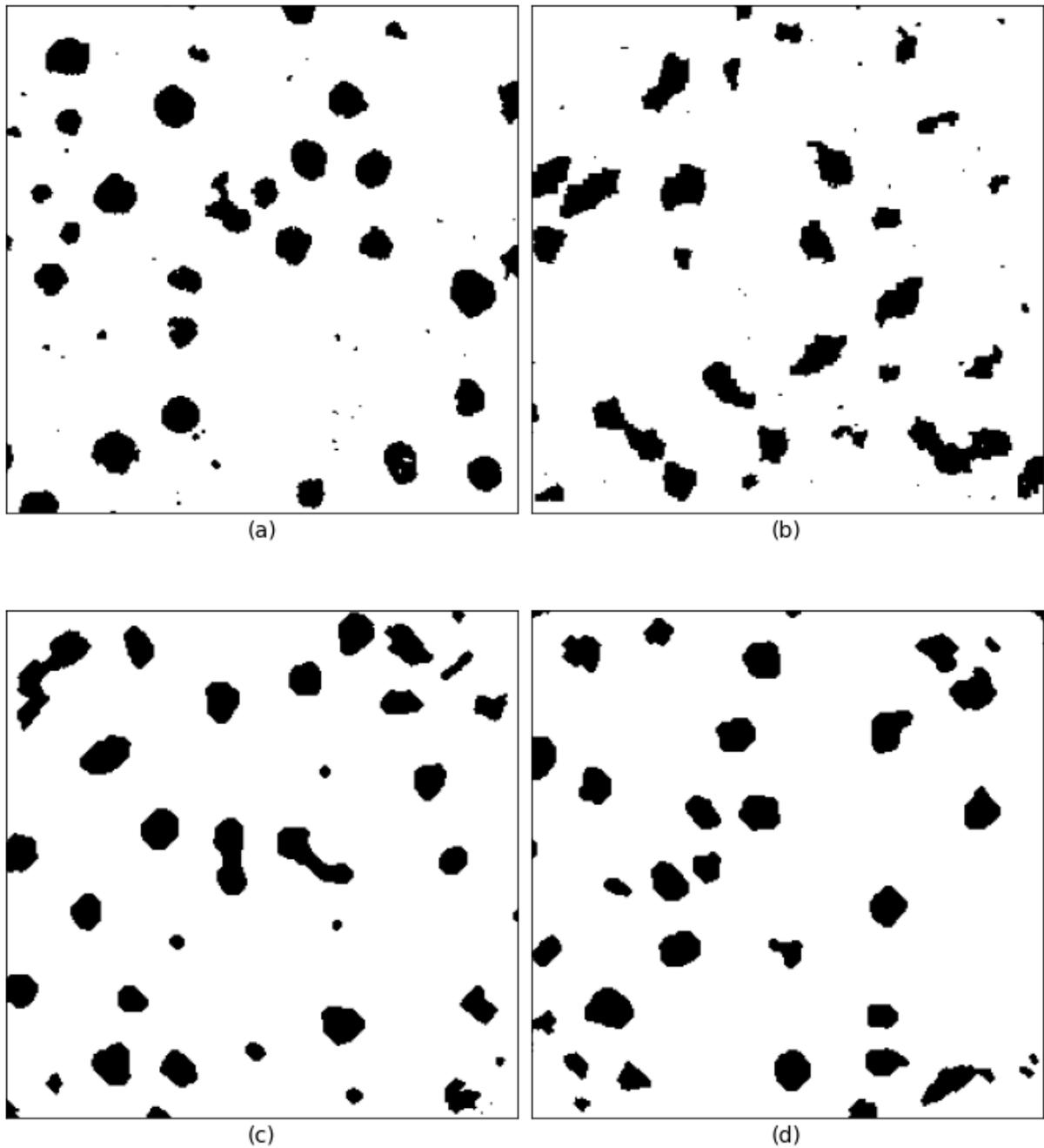


Figura 27 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção, microestruturas com bordas cortadas para tamanho final 270x270: (a) original, (b) reconstrução usando  $CCF$ , (c) reconstrução usando  $S_2$ , (d) reconstrução híbrida usando  $S_2 - C_2$

A microestrutura gerada pela combinação de  $S_2$  e  $C_2$  (Figura 26d) apresenta os melhores resultados em termos de morfologia. Visualmente, os nódulos possuem tamanhos e formas compatíveis com o que se espera da referência e as estruturas alongadas são muito mais raras e estão mais próximas das bordas, onde um efeito de borda também está presente, como no método anterior. A mesma distribuição incorreta de clusters menores ocorre neste caso, com as quinas concentrando um número desproporcional de clusters de pouca massa comparado ao resto da microestrutura.

Os métodos de  $S_2$  (Figura 26c) e  $S_2 - C_2$  (Figura 26d) claramente fornecem os melhores resultados do aspecto visual, excetuando-se o efeito de borda presente nas duas. A Figura 27 apresenta todas as microestruturas cortadas (5% em cada lado da microestrutura) com intuito de permitir a comparação minimizando o efeito de borda. O corte nas bordas da figura pode ser uma estratégia viável em reconstruções futuras. Para isso, é importante que a reconstrução seja feita sobre uma matriz maior que a desejada, permitindo o corte e que se mantenha um tamanho final apreciável para a microestrutura de saída.

### 5.1.2 ANÁLISE QUANTITATIVA DAS RECONSTRUÇÕES

As medidas estereológicas da referência e das reconstruções pelos três métodos podem ser vistas na Tabela 5. Considerando-se um corte nas bordas da figura de 5%, as medidas estereológicas após o tratamento são apresentadas na Tabela 6.

Tabela 5 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção: comparação das medidas estereológicas (sem corte)

Medida	Referência	Reconstruções		
		$CCF$	$S_2$	$S_2 - C_2$
$V_V$	0,0983	0,0983		
$N_A(\mu m^{-2})$	0,00111	0,00177	0,00202	0,00207
$S_V(\mu m^2 / \mu m^3)$	0,0482	0,0480	0,0490	0,0490
$\lambda(\mu m)$	8,16	8,12	8,01	8,03
$\bar{F}(\mu m)$	10,4	7,10	6,32	6,10

Tabela 6 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção: comparação das medidas estereológicas (com corte de 5%)

Medida	Referência	Reconstruções		
		$CCF$	$S_2$	$S_2 - C_2$
$V_V$	0,0983	0,0990	0,106	0,100
$N_A(\mu m^{-2})$	0,00111	0,00187	0,00115	0,00121
$S_V(\mu m^2 / \mu m^3)$	0,0482	0,0502	0,0501	0,0484
$\lambda(\mu m)$	8,16	7,89	8,49	8,30
$\bar{F}(\mu m)$	10,4	6,79	10,8	10,1

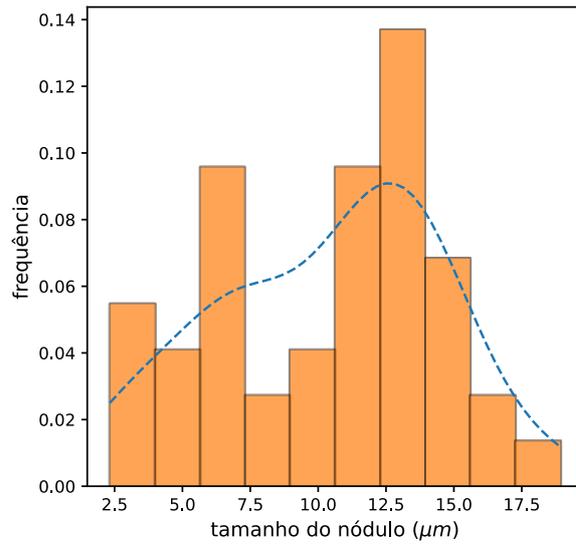
Note que, sem o corte nas bordas (Tabela 5), a fração volumétrica da referência e das três reconstruções é o mesmo – isso ocorre em razão do fato de que as matrizes são modificadas em cada passo por uma simples troca de pixels, o que mantém a fração volumétrica da matriz inicial idêntica à da matriz final. Sem um corte nas bordas (Tabela 5), as medidas metalográficas padrões das reconstruções geradas pelos métodos  $S_2$  e híbrido  $S_2 - C_2$  apresentam uma diferença considerável em relação à referência, principalmente o  $N_A$ , número de nódulos por unidade de área. Após o corte de 5%, as medidas estereológicas são mais próximas da referência, como mostra a Tabela 6. Para facilitar a comparação, a Tabela 7 apresenta as

diferenças (em %) entre as medidas estereológicas obtidas das reconstruções e as da referência, incluindo os casos sem e com o corte de 5% nas bordas da simulação.

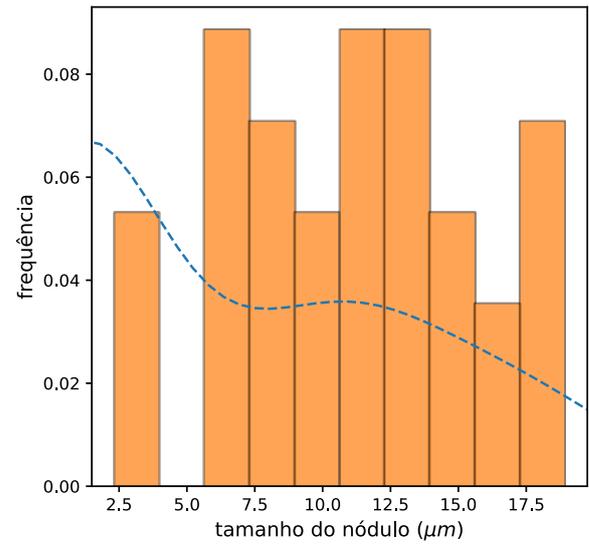
Tabela 7 – Reconstrução 2D a partir de uma única seção: desvios das medidas estereológicas com relação à referência para os casos sem corte e com corte de 5% (menores desvios estão destacados)

Medida	Sem corte			Com corte de 5%		
	$CCF$	$S_2$	$S_2 - C_2$	$CCF$	$S_2$	$S_2 - C_2$
$V_V$	-	-	-	<b>0,7%</b>	7,8%	1,7%
$N_A$	<b>59,5%</b>	82,0%	86,5%	68,5%	<b>3,6%</b>	9,0%
$S_V$	<b>-0,4%</b>	1,7%	1,7%	4,1%	3,9%	<b>0,4%</b>
$\lambda$	<b>-0,5%</b>	-1,8%	-1,6%	-3,3%	4,0%	<b>1,7%</b>
$\bar{F}$	<b>-31,7%</b>	-39,2%	-41,3%	-34,7%	3,8%	<b>-2,9%</b>

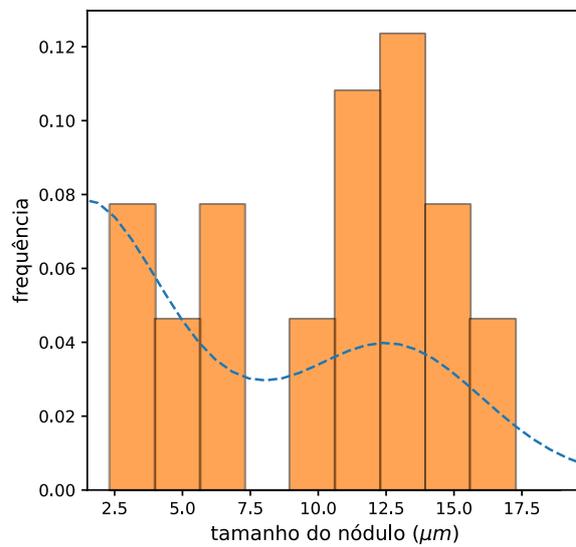
A razão mais provável para a diferença no valor de  $N_A$  é a concentração desproporcional de clusters pequenos nas bordas das microestruturas. Os concentrados não somente reúnem os clusters pequenos que idealmente estariam uniformemente distribuídos pela microestrutura, mas também distorcem o número por unidade de área para cima, o que indica que os clusters pequenos nas bordas ultrapassam em número os da referência. Os histogramas de distribuição de tamanho de nódulo para os casos sem corte e com corte de 5% estão apresentados na Figura 28 e na Figura 29, respectivamente.



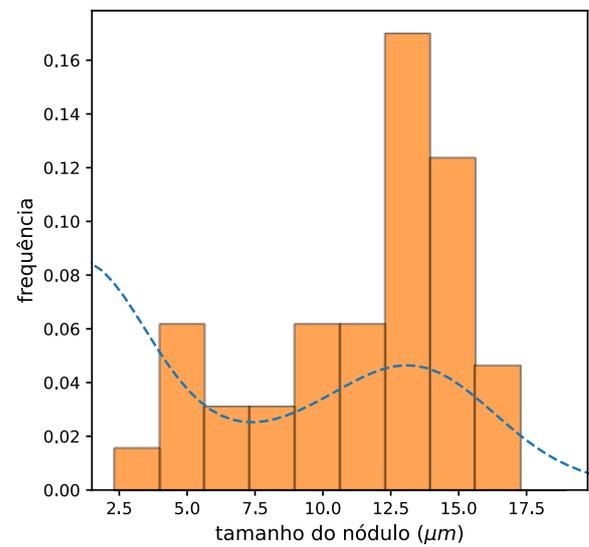
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 28 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção: histogramas de distribuição de tamanho de nódulo e curvas ajustadas pelo método KDE, sem corte: (a) referência, (b)  $CCF$ , (c)  $S_2$ , (d)  $S_2 - C_2$

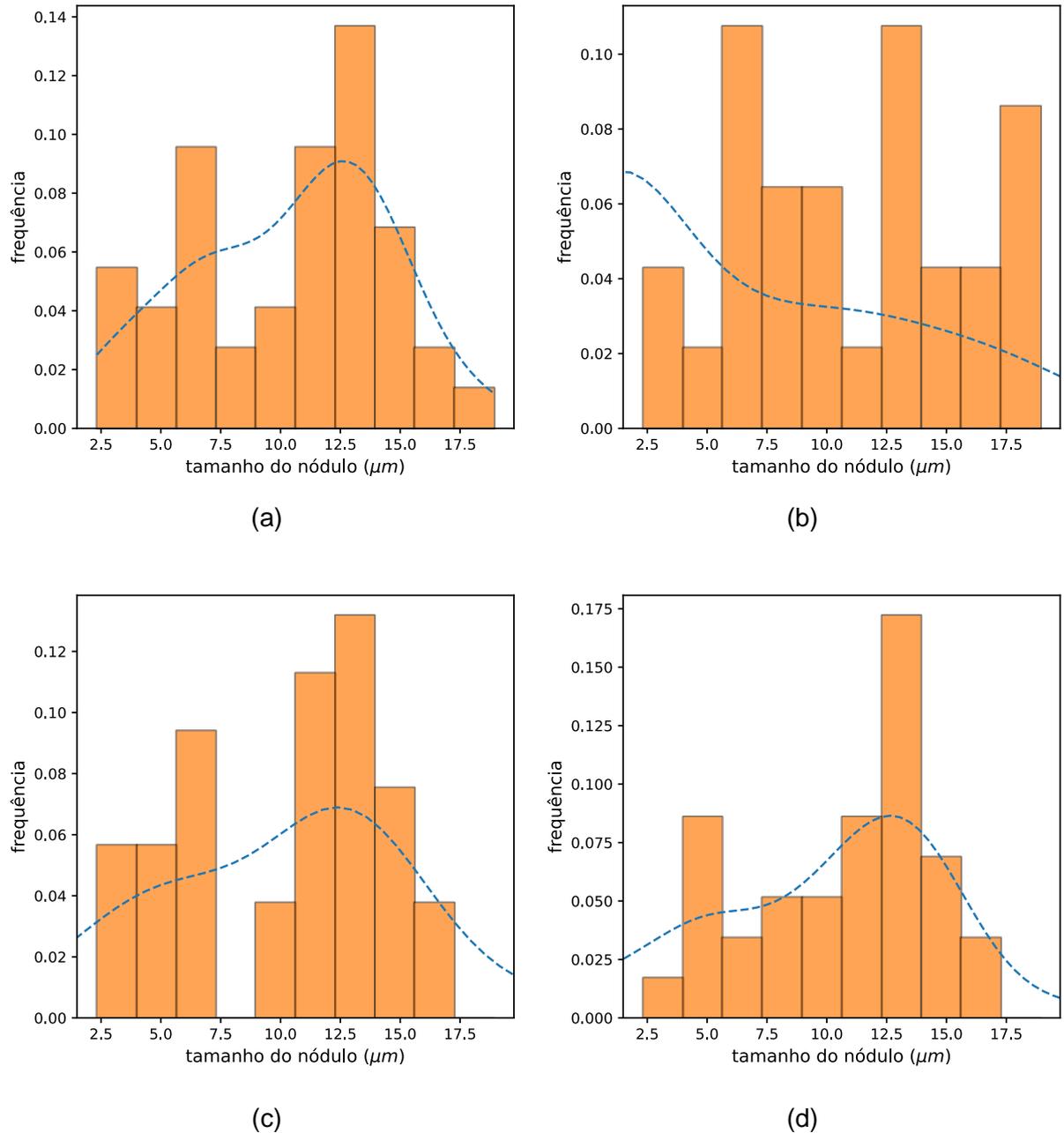
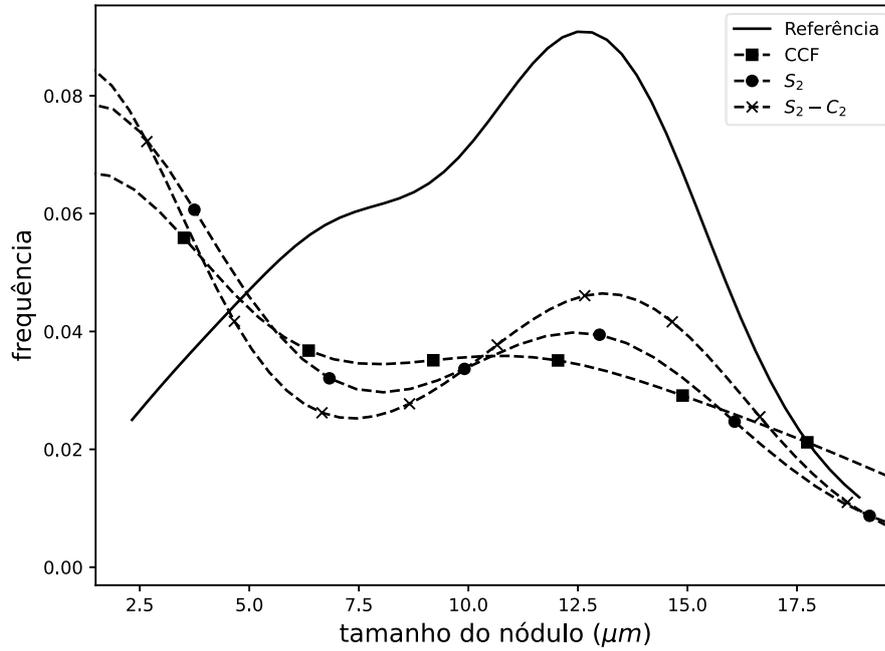


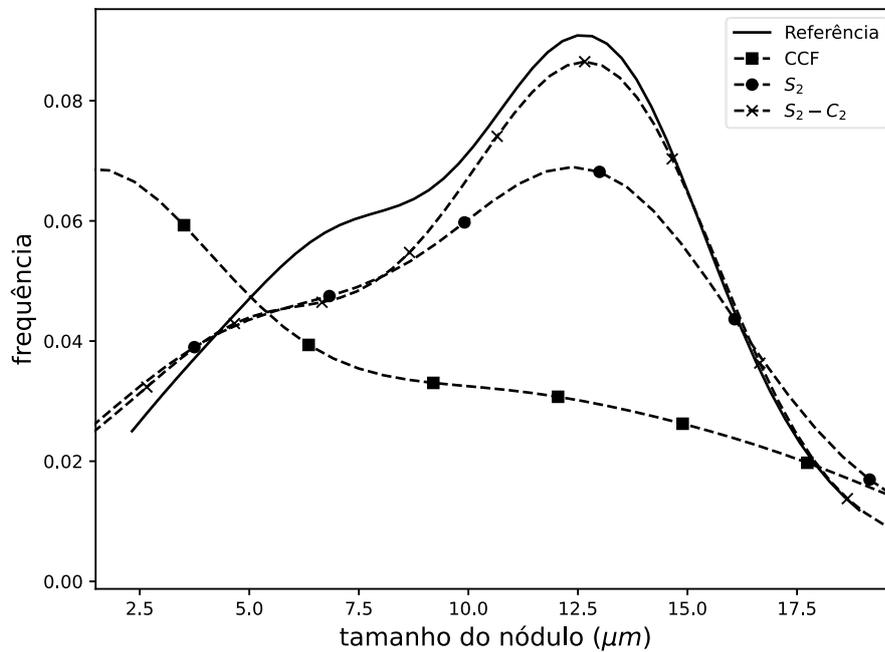
Figura 29 - Reconstrução 2D a partir de uma única seção: histogramas de distribuição de tamanho de nódulo e curvas ajustadas pelo método KDE, com corte de 5%: (a) referência, (b)  $CCF$ , (c)  $S_2$ , (d)  $S_2 - C_2$

A Figura 30 mostra somente as curvas ajustadas pelo método KDE nos casos sem corte (Figura 30a) e com corte (Figura 30b), de modo a evidenciar as proporções nas distribuições de tamanho de nódulo. É fácil ver que as reconstruções via  $S_2$  e híbrida  $S_2 - C_2$ , na versão sem corte, sobrestimam a parte inferior do espectro de

tamanhos. Na versão com corte de 5%, a reconstrução híbrida usando  $S_2 - C_2$  é a que melhor representa os picos da curva de referência.



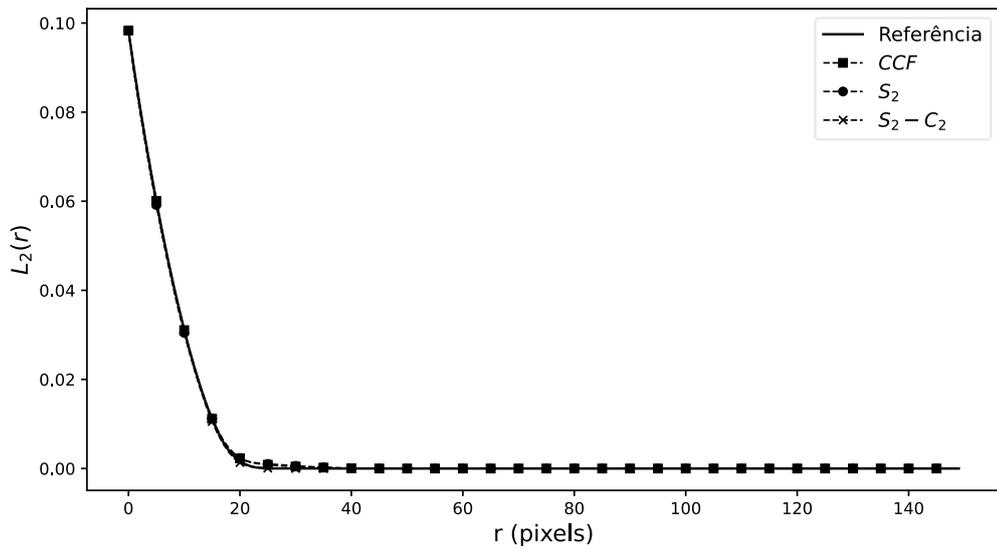
(a)



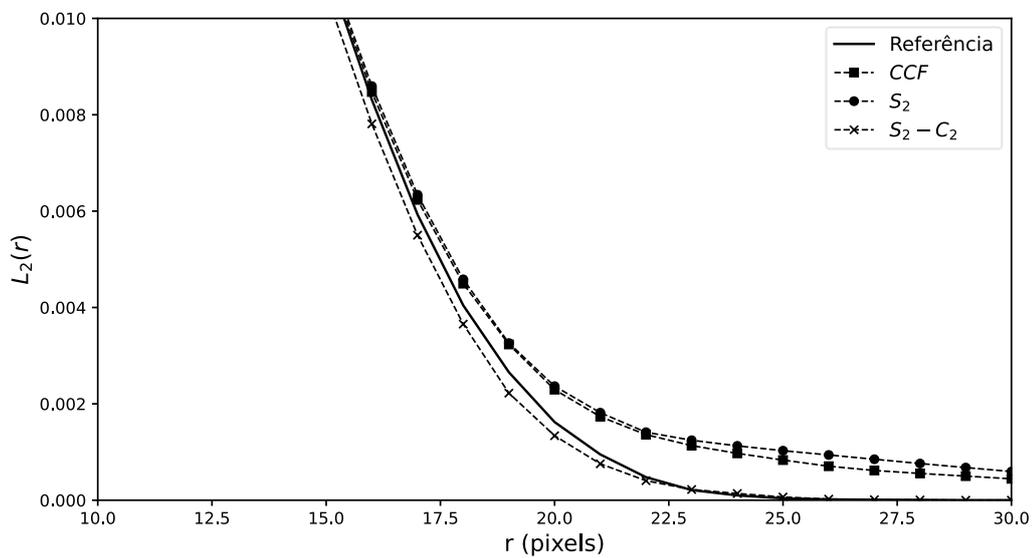
(b)

Figura 30 – Comparação das distribuições de tamanho de nódulo para reconstrução 2D a partir de uma única seção: (a) sem corte, (b) com corte de 5%

Em relação à conectividade, o gráfico das funções de correlação de caminho linear da referência e das reconstruções está representado na Figura 31. Novamente, a reconstrução usando  $S_2$  e  $C_2$  traz os melhores resultados.



(a)



(b)

Figura 31 – Comparação dos valores de  $L_2(r)$  para as reconstruções 2D a partir de uma única seção: (a) completa, (b) vista ampliada

## 5.2 Reconstrução 3D a partir de uma única seção

### 5.2.1 MICROESTRUTURAS GERADAS

A seguir, são apresentadas a seção de referência e as reconstruções 3D obtidas pelos três métodos. A Figura 32 mostra vistas opacas das reconstruções originais, e a Figura 33 mostra as reconstruções após um corte de 5% nas bordas.

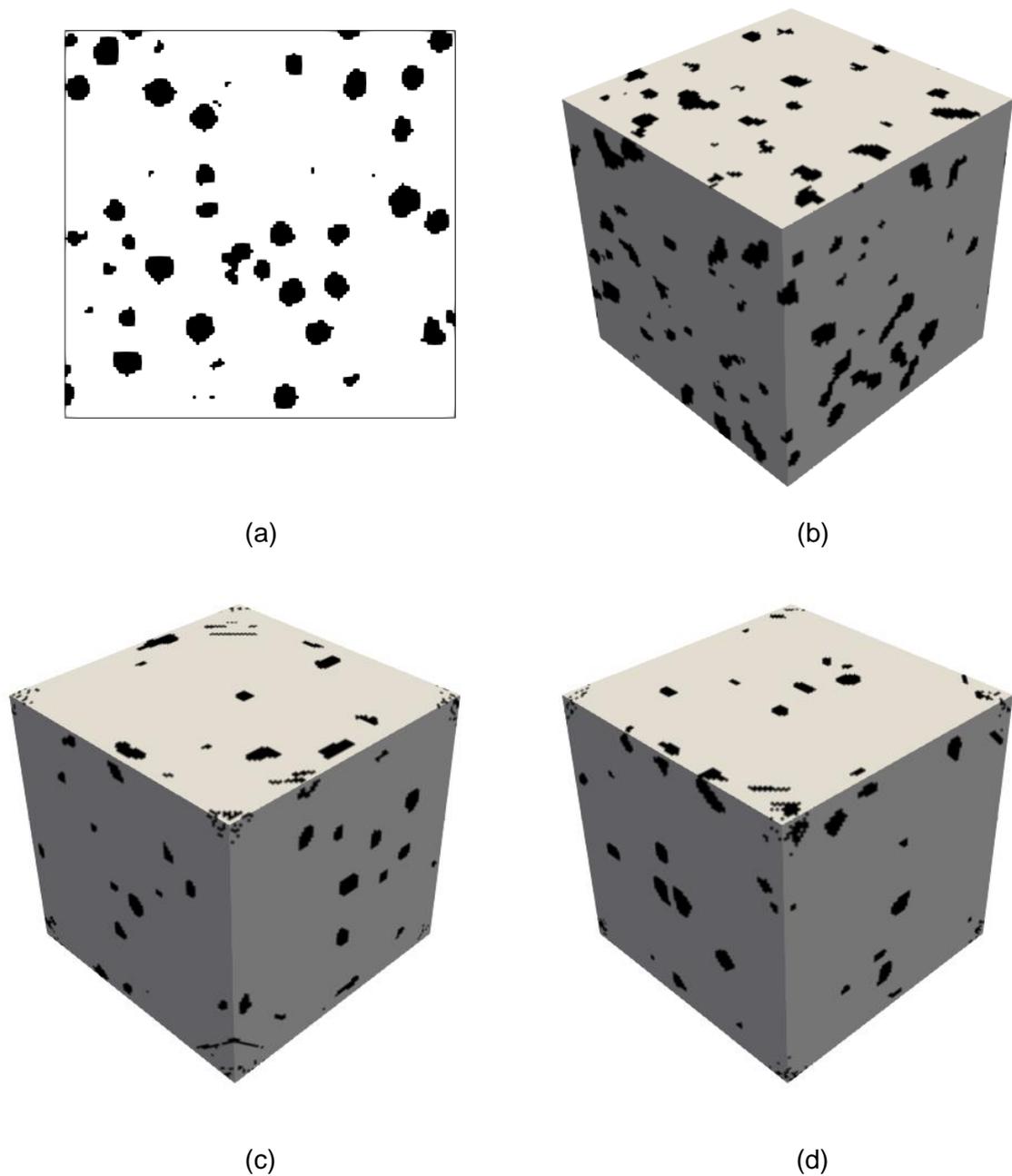
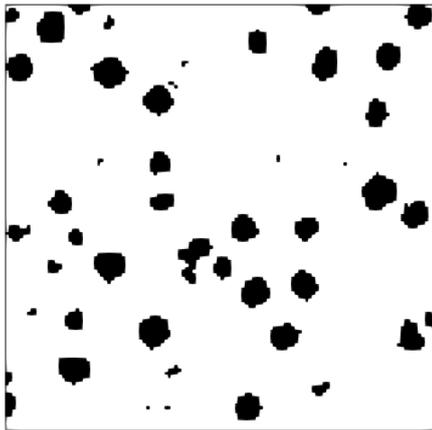
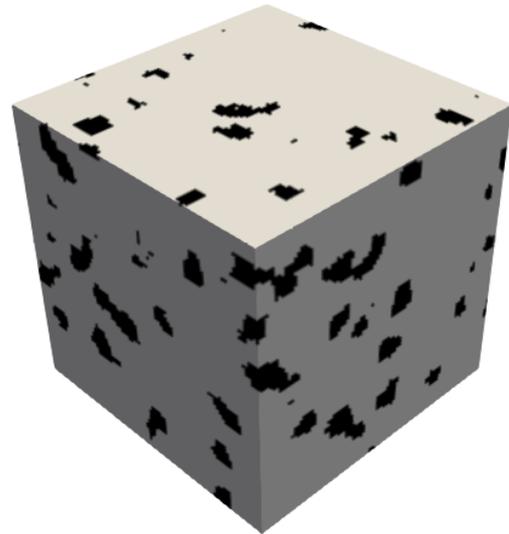


Figura 32 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas isométricas opacas, sem corte:  
(a) referência, (b)  $CCF$ , (c)  $S_2$ , (d)  $S_2 - C_2$



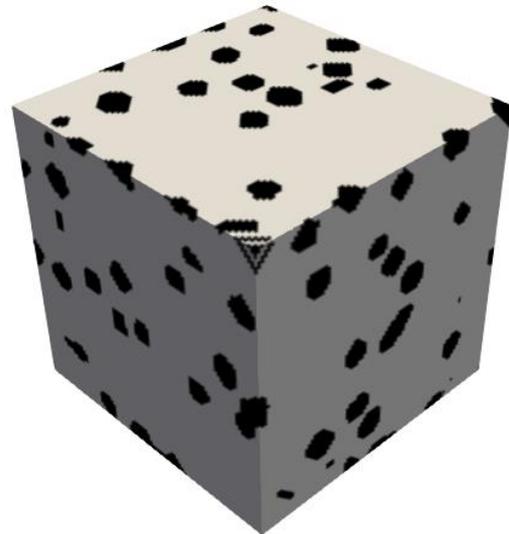
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 33 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas isométricas opacas, cortadas para 90x90x90: (a) referência, (b)  $CCF$ , (c)  $S_2$ , (d)  $S_2 - C_2$

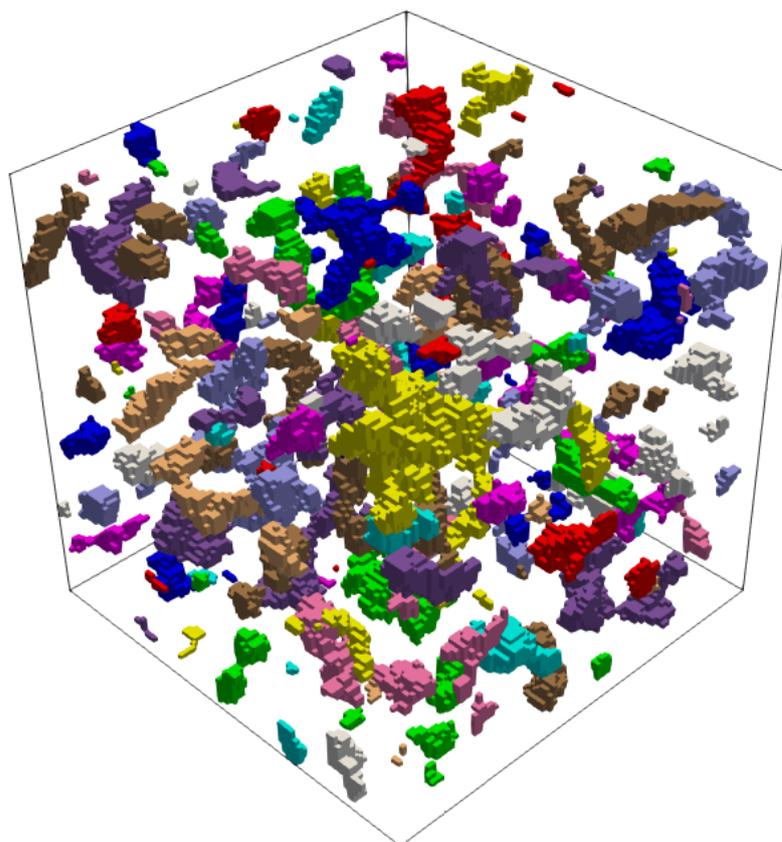
No caso 3D, o efeito de borda é ainda mais intenso que no caso bidimensional para as microestruturas geradas usando  $S_2$  pura (Figura 32c) e o método híbrido com  $S_2 - C_2$  (Figura 32d), o que é intensificado pelo não-uso da condição de contorno periódica dos métodos. Anteriormente à aplicação de um corte nas bordas, as faces das microestruturas geradas por estes dois métodos têm um número menor do que o esperado de nódulos. Após o corte, a distribuição espacial dos nódulos nas faces (Figura 33c,d) é mais compatível com o que se espera, dada a referência.

A reconstrução com CCF (Figura 33b), devido à natureza da amostragem ortogonal, não apresenta boa morfologia comparando-se com a referência (Figura 33a) – os nódulos não são arredondados como tipicamente ocorre com nódulos de grafita. A distribuição espacial é razoável, e clusters pequenos podem ser vistos espalhados pelas três faces da microestrutura na figura. O resultado não varia significativamente entre os casos com corte e sem corte em razão da condição de contorno periódica.

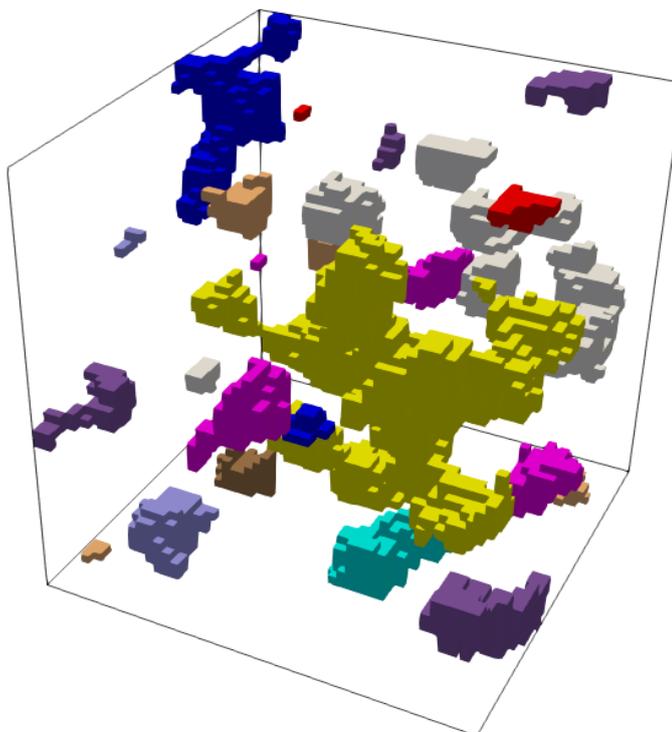
A reconstrução com  $S_2$  (Figura 33c), da mesma maneira que na reconstrução 2D, traz morfologia muito mais adequada. Após o corte de 5% nas bordas da microestrutura simulada, revela-se muitas estruturas alongadas, que à primeira vista parecem se concentrar nas quinas (arestas e vértices).

A reconstrução híbrida, usando  $S_2$  e  $C_2$  (Figura 33d), também apresenta efeito de borda; mas, após o corte, é o método que melhor consegue reproduzir a referência do aspecto visual. Os nódulos têm tamanho dentro do esperado e o número de estruturas alongadas é muito mais realista.

As vistas opacas não são capazes de detalhar se cada reconstrução foi capaz de representar as informações de conectividade da microestrutura 2D de referência. Para isso, as Figura 34, Figura 35 e Figura 36 apresentam vistas transparentes totais e ampliadas das reconstruções via CCF,  $S_2$  e  $S_2 - C_2$ , respectivamente.

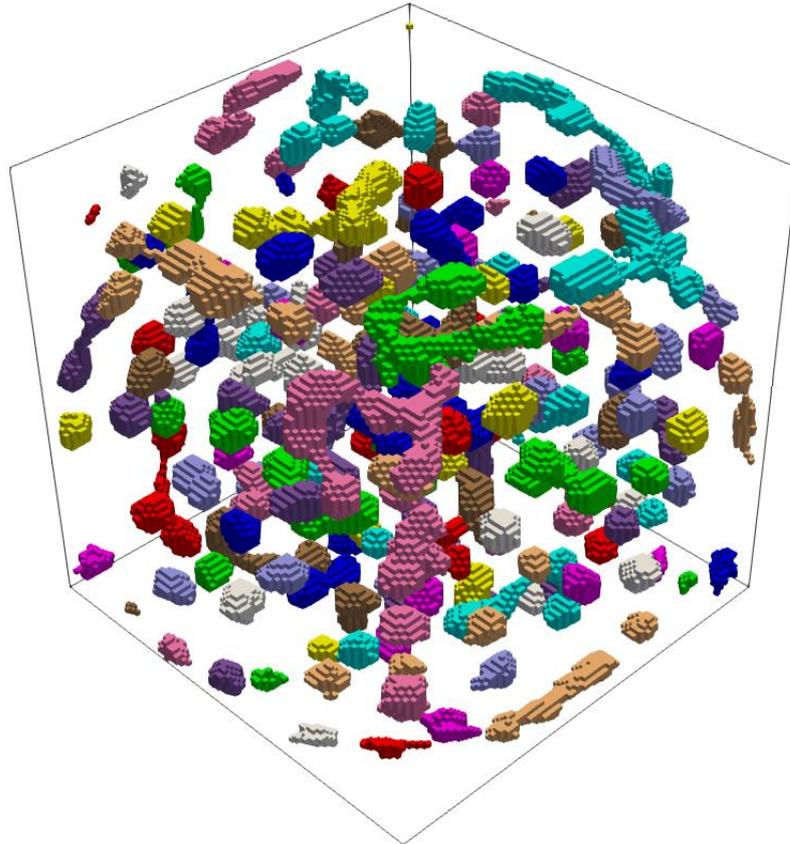


(a)

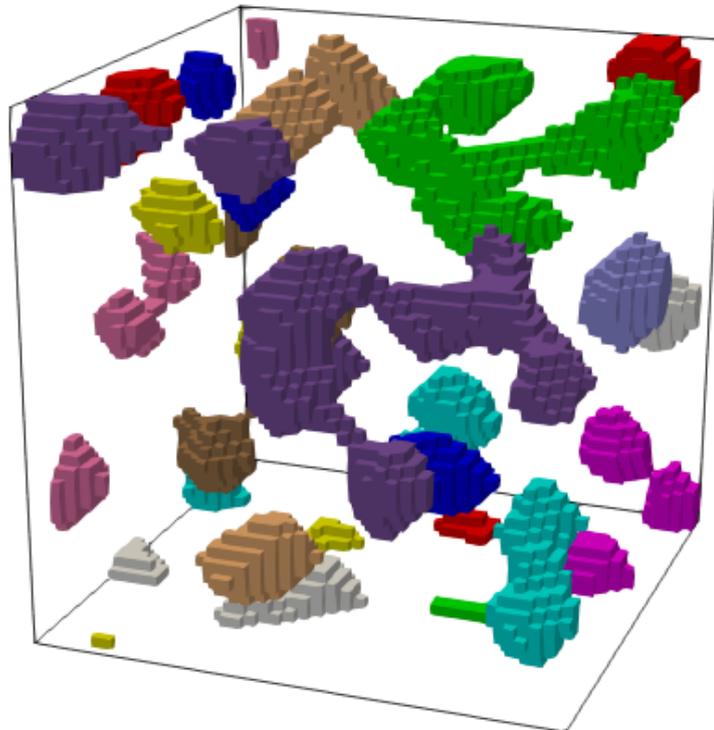


(b)

Figura 34 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas transparentes com clusters coloridos, método *CCF*: (a) reconstrução completa, (b) detalhe

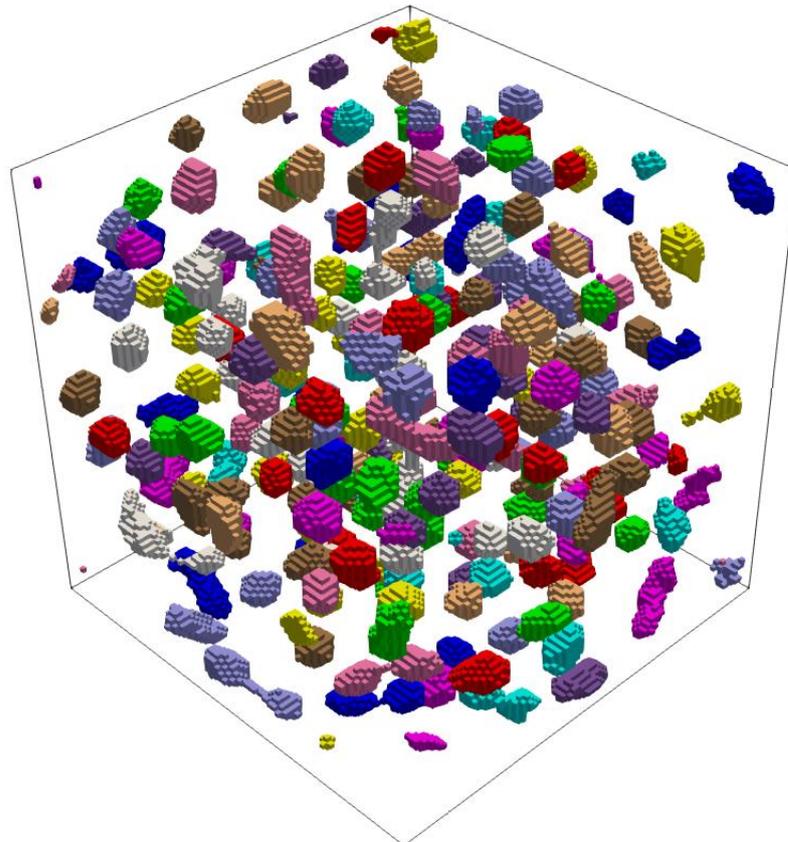


(a)

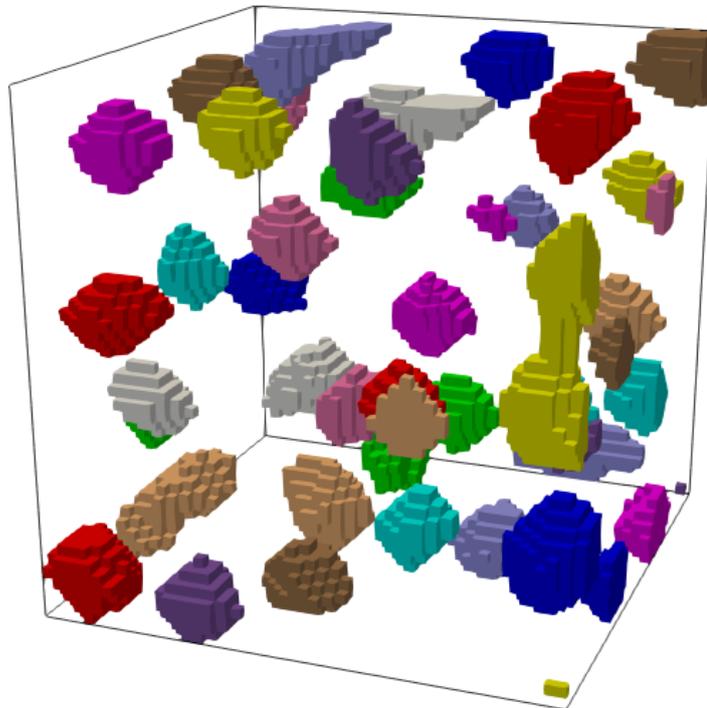


(b)

Figura 35 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas transparentes com clusters coloridos, método  $S_2$ : (a) reconstrução completa, (b) detalhe



(a)



(b)

Figura 36 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção – vistas transparentes com clusters coloridos, método  $S_2 - C_2$ : (a) reconstrução completa, (b) detalhe

Note que, na reconstrução via CCF (Figura 34a), os clusters de pequena massa estão presentes e tem distribuição adequada por toda a figura; mas, a amostragem ortogonal traz nódulos tendenciosos nas direções dos eixos cartesianos, em vez de lembrarem simetria radial, como num nódulo esférico típico. Na vista ampliada (Figura 34b), é possível ver um cluster (amarelo) com tamanho muito superior aos vizinhos.

Na reconstrução via  $S_2$  pura (Figura 35), as morfologias são arredondadas, o que é esperado para amostragem GLP, que tem viés radial. Entretanto, as informações de conectividade fornecidas por essa função de correlação também não são completas, similarmente à reconstrução por CCF. No detalhe, é possível ver alguns clusters maiores.

A reconstrução via  $S_2$  combinada com  $C_2$  (Figura 36) traz, novamente, os melhores resultados considerando o aspecto visual. Tanto na vista geral como no detalhe é possível observar que os nódulos têm tamanho dentro do esperado e o número de estruturas alongadas é menor, mas ainda presente. Isso sugere que, mesmo assumindo isotropia e usando uma função de correlação bastante sensível à conectividade ( $C_2$ ), uma seção 2D de base é incapaz de representar totalmente a conectividade em nível tridimensional.

A Figura 37 apresenta seções bidimensionais tiradas ao centro das reconstruções 3D, uma em cada direção cartesiana. Assim, é possível ver uma micrografia semelhante àquela feita no microscópio óptico. A reconstrução com CCF (Figura 37b) apresenta viés ortogonal e morfologia inadequada, o que não ocorre com as duas reconstruções feitas usando GLP,  $S_2$  e híbrida  $S_2 - C_2$  (Figuras 37c,d). Entre essas duas últimas, entretanto, existe uma diferença considerável na representação da conectividade – a adição da função de correlação por clusters  $C_2$  traz uma distribuição melhor de tamanho de nódulos, com menos estruturas alongadas na reconstrução híbrida.

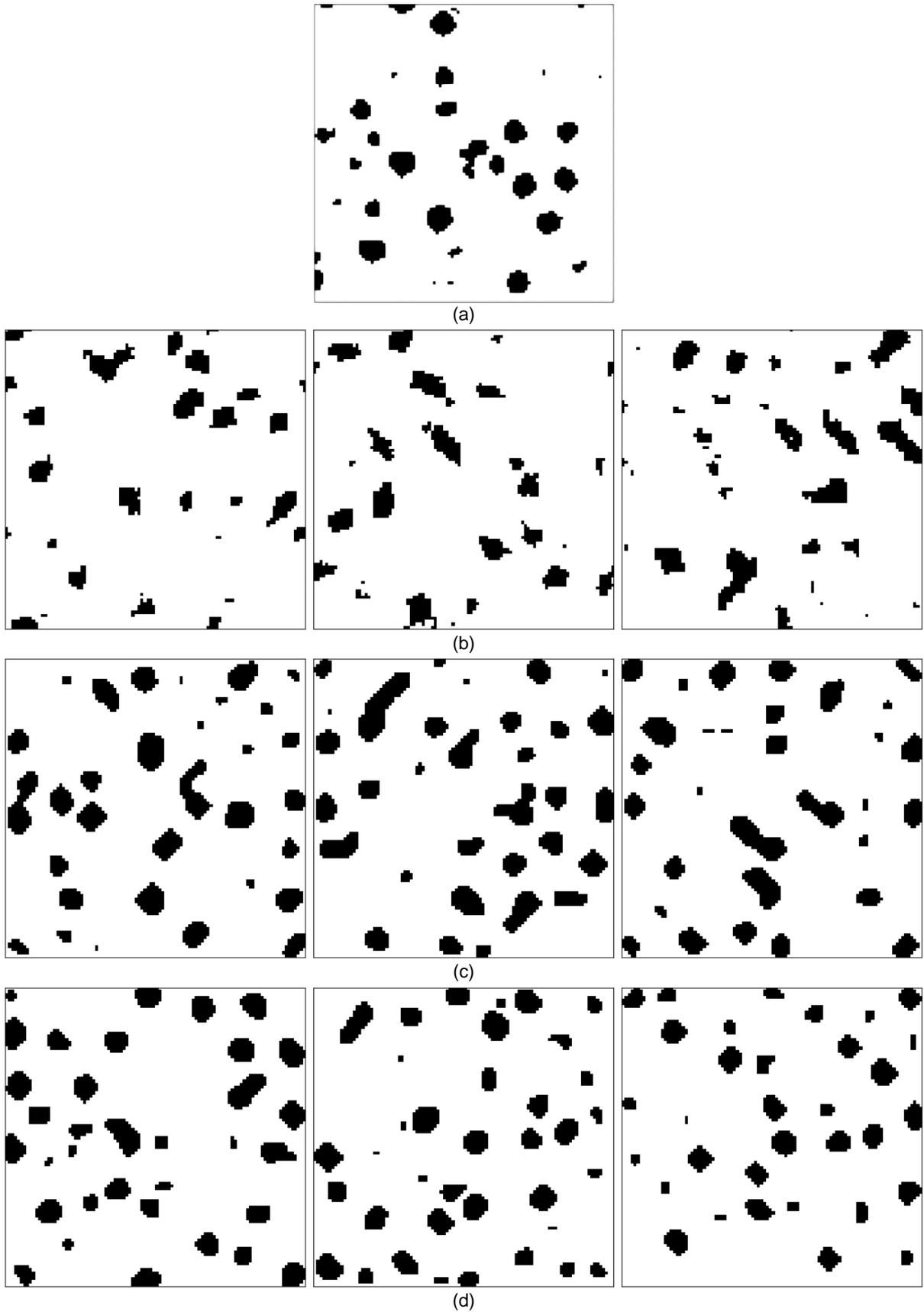


Figura 37 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção – seções transversais ao centro da reconstrução: (a) referência, (b)  $CCF$ , (c)  $S_2$ , (d)  $S_2 - C_2$

### 5.2.2 ANÁLISE QUANTITATIVA DAS RECONSTRUÇÕES

As medidas estereológicas para as reconstruções 3D usando uma única seção são apresentadas a seguir. A Tabela 8 apresenta as medidas no caso sem corte das bordas de 5%, e a Tabela 9 apresenta as medidas considerando o corte.

Tabela 8 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção – comparação das medidas estereológicas (sem corte)

Medida	Referência	Reconstruções		
		$CCF$	$S_2$	$S_2 - C_2$
$V_V$	0,0988	0,0988		
$N_A (\mu m^{-2})$	0,00116	0,00116	0,00101	0,00105
$S_V (\mu m^2 / \mu m^3)$	0,0424	0,0426	0,0429	0,0431
$\lambda (\mu m)$	9,30	9,28	9,21	9,18
$\bar{F} (\mu m)$	9,96	10,3	11,1	10,6

Tabela 9 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção: comparação das medidas estereológicas (com corte de 5%)

Medida	Referência	Reconstruções		
		$CCF$	$S_2$	$S_2 - C_2$
$V_V$	0,0988	0,103	0,0998	0,0994
$N_A (\mu m^{-2})$	0,00116	0,00118	0,00110	0,00117
$S_V (\mu m^2 / \mu m^3)$	0,0424	0,0444	0,0428	0,0436
$\lambda (\mu m)$	9,30	9,27	9,32	9,12
$\bar{F} (\mu m)$	9,96	10,5	10,5	9,98

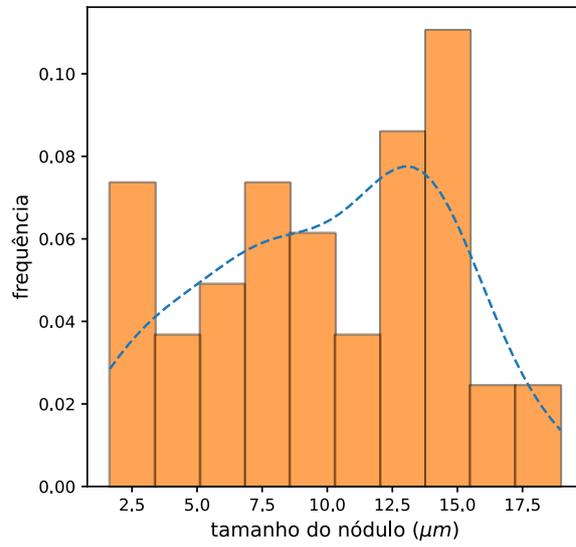
Em comparação com o caso das reconstruções 2D, as reconstruções tridimensionais não apresentaram medidas estereológicas tão distorcidas em relação à referência sem efetuar cortes nas bordas da microestrutura. Mesmo assim, este

procedimento trouxe melhora considerável nas diferenças, como mostra a Tabela 10. Da mesma maneira que na reconstrução 2D, as reconstruções usando amostragem GLP, isto é, as reconstruções via  $S_2$  e via  $S_2 - C_2$ , apresentam os resultados mais satisfatórios do ponto de vista da metalografia tradicional.

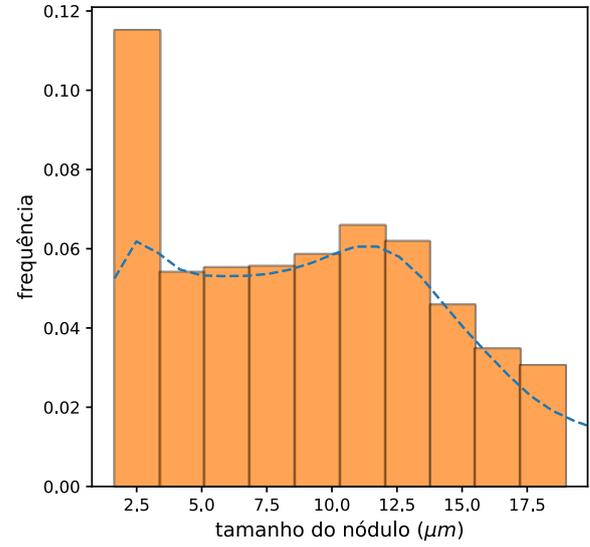
Tabela 10 – Reconstrução 3D a partir de uma única seção: desvios das medidas estereológicas com relação à referência para os casos sem corte e com corte de 5% (menores desvios estão destacados)

Medida	Sem corte			Com corte de 5%		
	$CCF$	$S_2$	$S_2 - C_2$	$CCF$	$S_2$	$S_2 - C_2$
$V_V$	-	-	-	4,3%	1,0%	<b>0,6%</b>
$N_A$	<b>0,0%</b>	-12,9%	-9,5%	1,7%	-5,2%	<b>0,9%</b>
$S_V$	<b>0,5%</b>	1,2%	1,7%	4,7%	<b>0,9%</b>	2,8%
$\lambda$	<b>-0,2%</b>	-1,0%	-1,3%	-0,3%	<b>0,2%</b>	-1,9%
$\bar{F}$	<b>3,4%</b>	11,4%	6,4%	5,4%	5,4%	<b>0,2%</b>

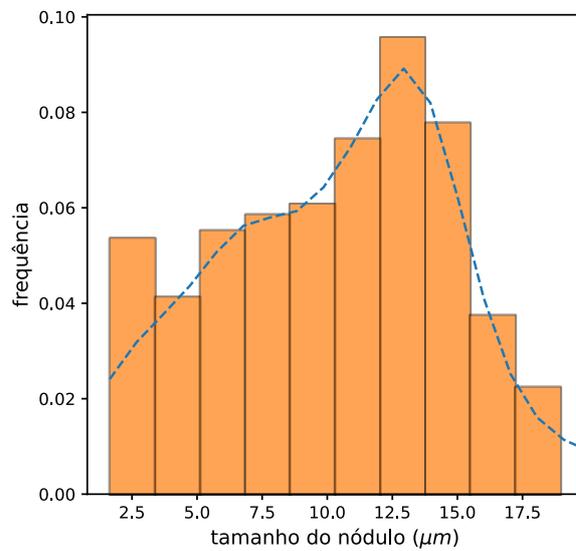
Em relação à distribuição de tamanho de nódulos, as reconstruções 3D não foram capazes de reproduzir detalhadamente as frequências da microestrutura 2D de referência, como ocorreu no caso anterior, embora as reconstruções por  $S_2$  e  $S_2 - C_2$  tenham sido capazes de reproduzir os picos principais. Os histogramas de tamanho de nódulos podem ser vistos na Figura 38 (antes do corte) e na Figura 39 (após o corte de 5% nas bordas da microestrutura).



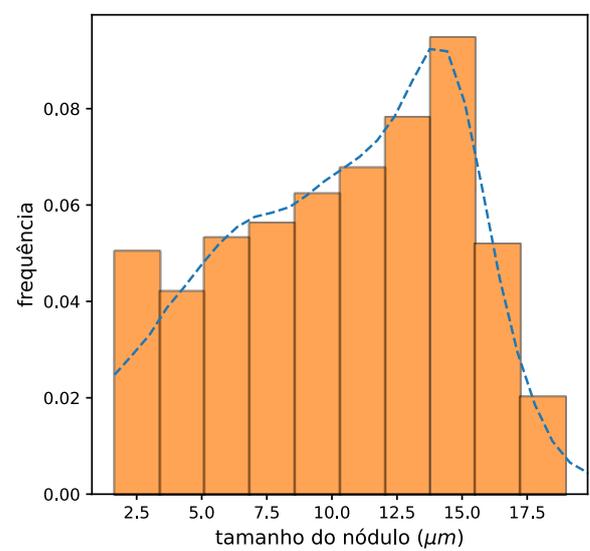
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 38 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção: histogramas de distribuição de tamanho de nódulo e curvas ajustadas pelo método KDE, sem corte: (a) referência, (b)  $CCF$ , (c)  $S_2$ , (d)  $S_2 - C_2$

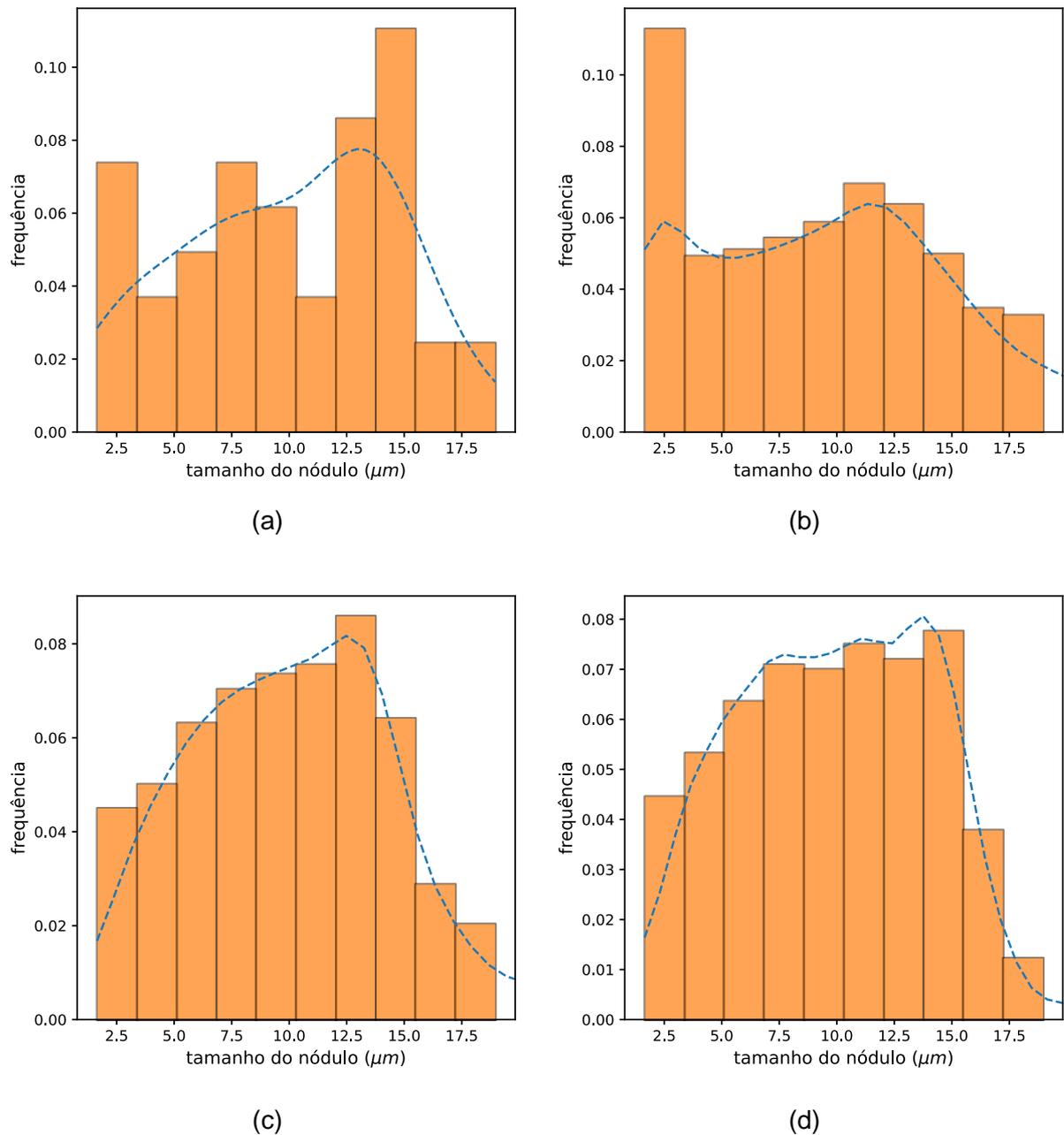
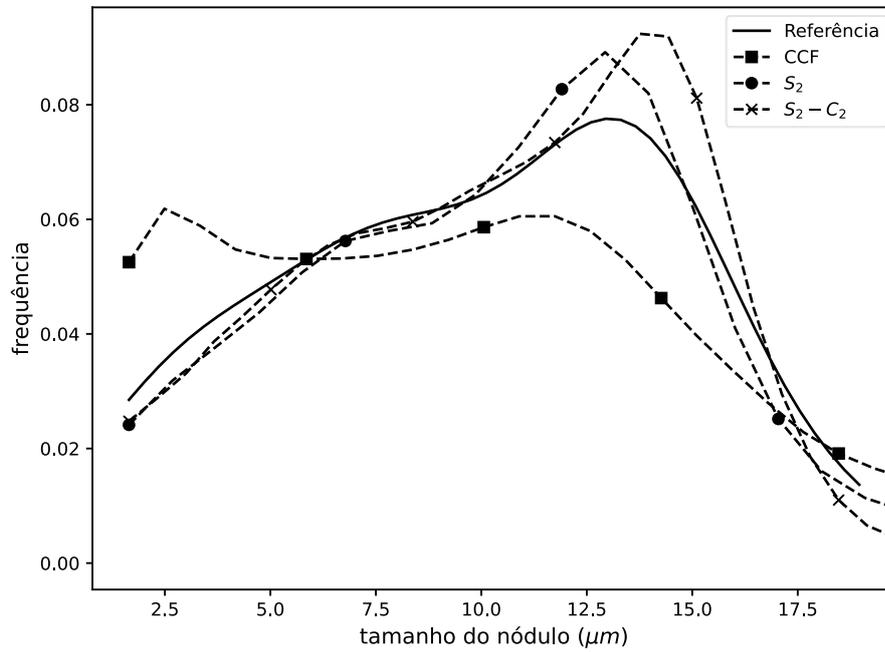


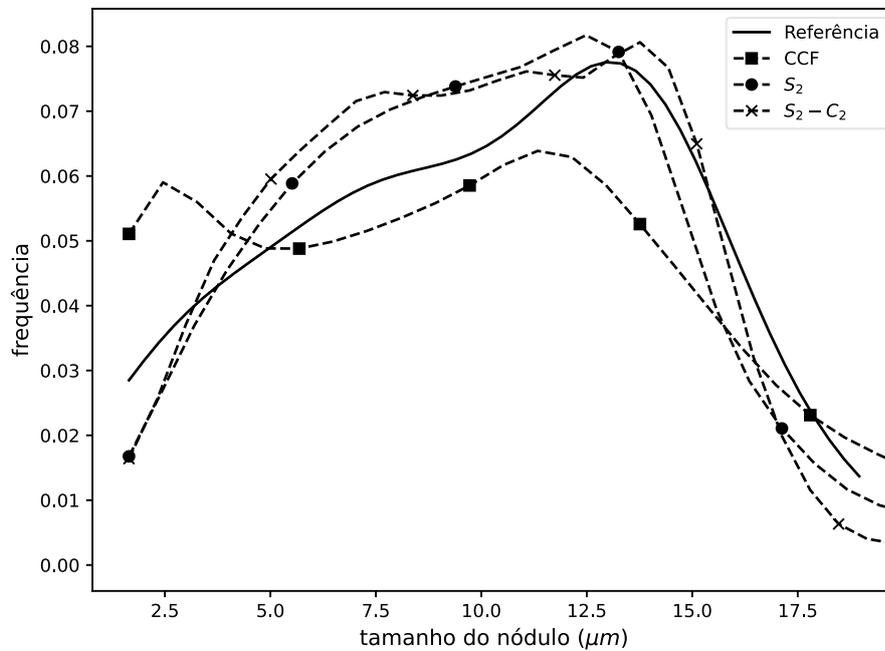
Figura 39 - Reconstrução 3D a partir de uma única seção: histogramas de distribuição de tamanho de nódulo e curvas ajustadas pelo método KDE, com corte de 5%: (a) referência, (b)  $CCF$ , (c)  $S_2$ , (d)  $S_2 - C_2$

Mais uma vez contrariando o caso anterior, as curvas ajustadas pelo método KDE tornam-se ainda mais distantes da referência após o corte – nos casos das reconstruções via  $S_2$  e  $S_2 - C_2$ , as distribuições passam a ser praticamente uniformes em torno da média com um pico menos pronunciado (principalmente na reconstrução híbrida), e não multimodais como na microestrutura de referência. A comparação das

curvas ajustadas pode ser vista na Figura 40, e é largamente inconclusiva tanto no caso sem corte como no caso em que as bordas são removidas.



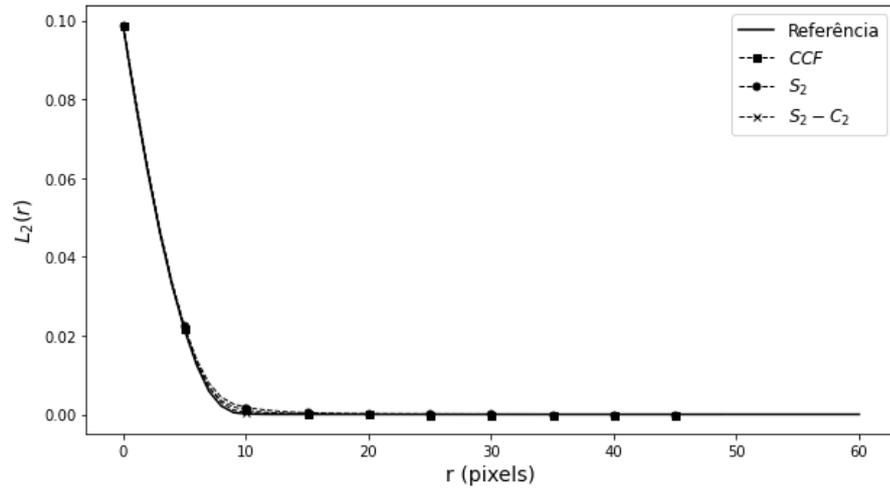
(a)



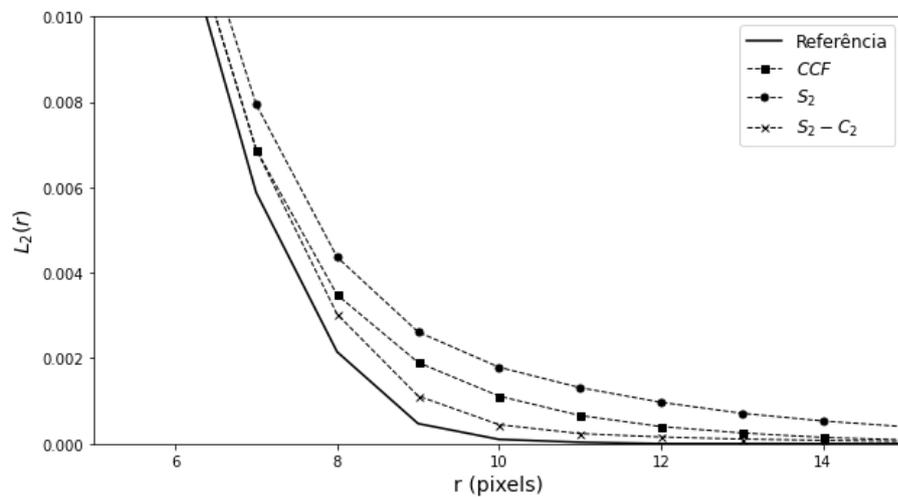
(b)

Figura 40 – Comparação das distribuições de tamanho de nóculo para reconstrução 3D a partir de uma única seção: (a) sem corte, (b) com corte de 5%

O gráfico de função de correlação de caminho linear é mostrado na Figura 41. Como esperado, a reconstrução híbrida apresenta os melhores resultados em comparação com a referência, o que é resultado da incorporação de uma função sensível à conectividade/percolação, que é a  $C_2$ .



(a)



(b)

Figura 41 - Comparação dos valores de  $L_2(r)$  para as reconstruções 3D a partir de uma única seção: (a) completa, (b) vista ampliada

## 6 CONCLUSÕES

O método de Yeong-Torquato aplicado à reconstrução microestrutural 2D e 3D de um ferro fundido nodular apresentou resultados promissores, que variam de qualidade de acordo com as funções de correlação utilizadas em cada caso.

As reconstruções 2D usando a função de correlação de co-ocorrência apresentaram pouco ou nenhum efeito de borda (devido à condição de contorno periódica), má distribuição de tamanho de nódulo, poucas informações de conectividade e viés ortogonal, o que é visível pelo grande número de estruturas alongadas. A morfologia nos casos com amostragem GLP é melhor, e as informações de conectividade estão presentes somente no caso com  $C_2$ . As medidas estereológicas típicas das reconstruções 2D usando  $S_2$  e  $S_2 - C_2$  foram muito compatíveis com a referência, mas somente após o corte nas bordas. Este resultado é confirmado pelos histogramas de tamanho de nódulo, que se tornam mais aceitáveis após efetuar um corte de 5% nas dimensões lineares da microestrutura gerada.

As reconstruções 3D usando as mesmas funções de correlação apresentam resultados análogos, ambos os casos com pouca semelhança à referência do ponto de vista da análise metalográfica e estereológica. As medidas estereológicas para este caso não apresentaram necessidade semelhante de corte, possivelmente pelo tamanho menor da reconstrução, mas ainda assim se beneficiam deste procedimento, que torna as medidas estereológicas típicas muito semelhantes às esperadas. Em relação à distribuição de tamanho de nódulo, não foi possível obter um resultado conclusivo sobre o efeito do corte na obtenção de uma melhor geometria simulada.

De uma maneira geral, a técnica de reconstrução proposta por Yeong e Torquato mostra ampla possibilidade de uso em Engenharia Metalúrgica e de Materiais, e seu uso associado a outras técnicas pode trazer resultados ainda melhores no futuro conforme novas funções de correlação e técnicas de amostragem são adicionadas à literatura.

## 7 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Em trabalhos futuros relacionados ao uso do método de Yeong-Torquato para reconstrução microestrutural, sugere-se:

- Uso de microestruturas mais complexas como referência, incluindo ferro fundido nodular com menor nodularidade e ferro fundido cinzento;
- Uso de novas funções de correlação de ordem 2 ou superior, bem como combinações destas;
- Incorporar mais de uma seção da microestrutura a ser reconstruída, em vez de usar apenas uma única micrografia da imagem;
- Avaliação mais elaborada do processo de corte, incluindo diferentes porcentagens e sua influência sobre as medidas estereológicas;
- Uso de método de Yeong-Torquato para gerar uma microestrutura inicial que sirva de entrada para outro método de reconstrução mais poderoso ou que seja capaz de introduzir novos recursos à microestrutura simulada (incluindo melhor conectividade e distribuição de tamanho de nódulo);
- Melhorias e avaliação da eficiência do algoritmo de reconstrução, incluindo na parte de *cluster labeling*, atualização das funções de correlação em cada passo e possibilidades de paralelização.

## 8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] B. Oberwinkler, "Modeling the fatigue crack growth behavior of Ti-6Al-4V by considering grain size and stress ratio," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 528, no. 18, pp. 5983–5992, Jul. 2011, doi: 10.1016/J.MSEA.2011.04.046.
- [2] A. Ghosh, S. Sivaprasad, A. Bhattacharjee, and S. K. Kar, "Microstructure–fracture toughness correlation in an aircraft structural component alloy Ti–5Al–5V–5Mo–3Cr," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 568, pp. 61–67, Apr. 2013, doi: 10.1016/J.MSEA.2013.01.017.
- [3] J. Xu, W. Zeng, Y. Zhao, and Z. Jia, "Effect of microstructure evolution of the lamellar alpha on impact toughness in a two-phase titanium alloy," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 676, pp. 434–440, Oct. 2016, doi: 10.1016/J.MSEA.2016.09.017.
- [4] H. Shao, Y. Zhao, P. Ge, and W. Zeng, "Crack initiation and mechanical properties of TC21 titanium alloy with equiaxed microstructure," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 586, pp. 215–222, Dec. 2013, doi: 10.1016/J.MSEA.2013.08.012.
- [5] J. A. Quiblier, "A New three-dimensional modeling technique for studying porous media," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 98, no. 1, pp. 84–102, 1984, doi: 10.1016/s0021-9797(84)80012-0.
- [6] P. M. Adler, C. G. Jacquin, and J. A. Quiblier, "Flow in simulated porous media," *Int. J. Multiph. Flow*, vol. 16, no. 4, pp. 691–712, 1990, doi: 10.1016/0301-9322(90)90025-E.
- [7] M. D. Rintoul and S. Torquato, "Reconstruction of the structure of dispersions," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 186, no. 2, pp. 467–476, 1997, doi: 10.1006/jcis.1996.4675.
- [8] C. L. Y. Yeong and S. Torquato, "Reconstructing Random Media," *Phys. Rev. E*, vol. 58, no. 1, pp. 224–233, 1998, [Online]. Available: <https://journals.aps.org/pre/pdf/10.1103/PhysRevE.57.495>.
- [9] D. Chen, Q. Teng, X. He, Z. Xu, and Z. Li, "Stable-phase method for hierarchical annealing in the reconstruction of porous media images," *Phys. Rev. E - Stat.*

- Nonlinear, Soft Matter Phys.*, vol. 89, no. 1, 2014, doi: 10.1103/PhysRevE.89.013305.
- [10] P. Tahmasebi and M. Sahimi, "Reconstruction of three-dimensional porous media using a single thin section," *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, vol. 85, no. 6, 2012, doi: 10.1103/PhysRevE.85.066709.
- [11] A. Hajizadeh, A. Safekordi, and F. A. Farhadpour, "A multiple-point statistics algorithm for 3D pore space reconstruction from 2D images," *Adv. Water Resour.*, vol. 34, no. 10, pp. 1256–1267, 2011, doi: 10.1016/j.adwatres.2011.06.003.
- [12] H. Okabe and M. J. Blunt, "Prediction of permeability for porous media reconstructed using multiple-point statistics," *Phys. Rev. E - Stat. Physics, Plasmas, Fluids, Relat. Interdiscip. Top.*, vol. 70, no. 6, p. 10, 2004, doi: 10.1103/PhysRevE.70.066135.
- [13] J. Feng, Q. Teng, B. Li, X. He, H. Chen, and Y. Li, "An end-to-end three-dimensional reconstruction framework of porous media from a single two-dimensional image based on deep learning," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 368, 2020, doi: 10.1016/j.cma.2020.113043.
- [14] L. Mosser, O. Dubrule, and M. J. Blunt, "Reconstruction of three-dimensional porous media using generative adversarial neural networks," *Phys. Rev. E*, vol. 96, no. 4, 2017, doi: 10.1103/PhysRevE.96.043309.
- [15] R. Bostanabad, A. T. Bui, W. Xie, D. W. Apley, and W. Chen, "Stochastic microstructure characterization and reconstruction via supervised learning," *Acta Mater.*, vol. 103, pp. 89–102, 2016, doi: 10.1016/j.actamat.2015.09.044.
- [16] F. Zhang, X. He, Q. Teng, X. Wu, and X. Dong, "3D-PMRNN: Reconstructing three-dimensional porous media from the two-dimensional image with recurrent neural network," *J. Pet. Sci. Eng.*, vol. 208, no. October 2021, p. 109652, 2022, doi: 10.1016/j.petrol.2021.109652.
- [17] T. Tang, Q. Teng, X. He, and D. Luo, "A pixel selection rule based on the number

- of different-phase neighbours for the simulated annealing reconstruction of sandstone microstructure,” *J. Microsc.*, vol. 234, no. 3, pp. 262–268, Jun. 2009, doi: 10.1111/J.1365-2818.2009.03173.X.
- [18] Y. Ju, Y. Huang, J. Zheng, X. Qian, H. Xie, and X. Zhao, “Multi-thread parallel algorithm for reconstructing 3D large-scale porous structures,” *Comput. Geosci.*, vol. 101, pp. 10–20, Apr. 2017, doi: 10.1016/J.CAGEO.2017.01.003.
- [19] J. Feng, Q. Teng, X. He, L. Qing, and Y. Li, “Reconstruction of three-dimensional heterogeneous media from a single two-dimensional section via co-occurrence correlation function,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 144, pp. 181–192, 2018, doi: 10.1016/j.commatsci.2017.11.030.
- [20] Y. Jiao, F. H. Stillinger, and S. Torquato, “A superior descriptor of random textures and its predictive capacity,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, vol. 106, no. 42, pp. 17634–17639, 2009, doi: 10.1073/pnas.0905919106.
- [21] S. Torquato, J. D. Beasley, and Y. C. Chiew, “Two-point cluster function for continuum percolation,” *J. Chem. Phys.*, vol. 88, no. 10, pp. 6540–6547, 1988, doi: 10.1063/1.454440.
- [22] A. G. Conceição dos Santos *et al.*, “Computational modeling of a 3D matrix of duplex stainless steel and its ultimate strength in function of the sigma phase evolution,” *J. Mater. Res. Technol.*, vol. 15, pp. 2625–2632, 2021, doi: 10.1016/j.jmrt.2021.09.051.
- [23] R. Chibante, A. Araujo, and A. Carvalho, “Parameter Identification of Power Semiconductor Device Models Using Metaheuristics,” in *Simulated Annealing, Theory with Applications*, 2010.
- [24] Y. Jiao, F. H. Stillinger, and S. Torquato, “Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions: Basic principles,” *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, vol. 76, no. 3, pp. 1–37, 2007, doi: 10.1103/PhysRevE.76.031110.
- [25] L. M. Pant, “Stochastic Characterization and Reconstruction of Porous Media,”

2016.

- [26] S. Torquato and G. Stell, "Microstructure of two-phase random media. I. The n-point probability functions," *J. Chem. Phys.*, vol. 77, no. 4, pp. 2071–2077, 1982, doi: 10.1063/1.444011.
- [27] Y. Jiao, F. H. Stillinger, and S. Torquato, "Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions. II. Algorithmic details and applications," *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, vol. 77, no. 3, pp. 1–35, 2008, doi: 10.1103/PhysRevE.77.031135.
- [28] R. M. Haralick, K. Shanmugam, and I. Dinstein, "Textural Features for Image Classification," *IEEE Trans. Syst. Man. Cybern.*, vol. 3, no. 6, pp. 610–621, 1973, doi: 10.1190/segam2015-5927230.1.
- [29] S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*, 1st ed. New York: Springer, 2002.
- [30] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, "Equation of state calculations by fast computing machines," *J. Chem. Phys.*, 1953, doi: 10.1063/1.1699114.
- [31] G. F. Vander Voort, *Metallography - Principles and Practice*. ASM International, 1999.
- [32] J. C. Russ and R. T. Dehoff, *Practical Stereology*, 2nd ed. Springer, 2000.
- [33] A. F. P. Freitas, "Metalografia Quantitativa Tridimensional dos Ferros Fundidos Nodular e Cinzento," Universidade Federal Fluminense, 2008.
- [34] M. R. Spiegel, *Estatística (Coleção Schaum)*, 1st ed. McGraw-Hill, 1977.
- [35] "Particle Shape." <https://www.sympatec.com/en/particle-measurement/glossary/particle-shape/> (accessed Nov. 02, 2021).
- [36] W. H. WALTON, "Ferret's Statistical Diameter as a Measure of Particle Size," *Nat.* 1948 1624113, vol. 162, no. 4113, pp. 329–330, 1948, doi:

10.1038/162329b0.

- [37] H. G. Merkus, *Particle Size Measurements: Fundamentals, Practice, Quality*, 1st ed. Springer Netherlands, 2009.
- [38] C. Costa, “GitHub - cafcaio/mic-reconstructor: A program to reconstruct random heterogeneous media from very limited information.” <https://github.com/cafcaio/mic-reconstructor> (accessed Nov. 10, 2021).
- [39] Y. Jiao, “Modeling and Reconstructing Complex Heterogeneous Materials From Lower-Order Spatial Correlation Functions Encoding Topological and Interface Statistics,” pp. 1–25, 2019, [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1909.13210>.
- [40] J. Schindelin *et al.*, “Fiji: An open-source platform for biological-image analysis,” *Nat. Methods*, vol. 9, no. 7, pp. 676–682, Jul. 2012, doi: 10.1038/NMETH.2019.
- [41] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2nd ed. Taylor & Francis, 2003.
- [42] J. Hoshen and R. Kopelman, “Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm,” *Phys. Rev. B*, vol. 14, no. 8, pp. 3438–3445, 1976, doi: 10.1103/PhysRevB.14.3438.
- [43] W. Zhang, L. Song, and J. Li, “Efficient 3D reconstruction of random heterogeneous media via random process theory and stochastic reconstruction procedure,” *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 354, pp. 1–15, 2019, doi: 10.1016/j.cma.2019.05.033.
- [44] N. Sheehan and S. Torquato, “Generating microstructures with specified correlation functions,” *J. Appl. Phys.*, vol. 89, no. 1, pp. 53–60, 2001, doi: 10.1063/1.1327609.
- [45] “VTK.” <https://vtk.org/>.
- [46] “Matplotlib.” <https://matplotlib.org/stable/index.html>.
- [47] “Project Jupyter.” <https://jupyter.org/>.

- [48] “ParaView.” <https://www.paraview.org/>.
- [49] “OpenCV.” <https://opencv.org/>.
- [50] “NumPy.” <https://numpy.org/>.
- [51] “OpenCV: Structural Analysis and Shape Descriptors.” [https://docs.opencv.org/4.5.3/d3/dc0/group\\_\\_imgproc\\_\\_shape.html](https://docs.opencv.org/4.5.3/d3/dc0/group__imgproc__shape.html) (accessed Nov. 03, 2021).
- [52] R. R. Wandresen, S. P. Netto, H. S. Koehler, C. R. Sanquetta, and A. Behling, “Nonparametric method: Kernel density estimation applied to forestry data,” *Floresta*, vol. 49, no. 3, pp. 561–570, 2019, doi: 10.5380/rf.v49i3.60285.
- [53] “SciPy.” <https://scipy.org/>.
- [54] “scipy.stats.gaussian\_kde — SciPy v1.7.1 Manual.” [https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.gaussian\\_kde.html](https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.gaussian_kde.html) (accessed Nov. 03, 2021).

## 9 APÊNDICE

### 9.1 Funções de correlação para todas as reconstruções

Abaixo seguem todas as funções de correlação relevantes para cada uma das 6 reconstruções (3 bidimensionais e 3 tridimensionais, nos métodos CCF,  $S_2$  e híbrido  $S_2 - C_2$ ).

#### 9.1.1 RECONSTRUÇÕES 2D

##### 9.1.1.1 Reconstrução via CCF (amostragem ortogonal)

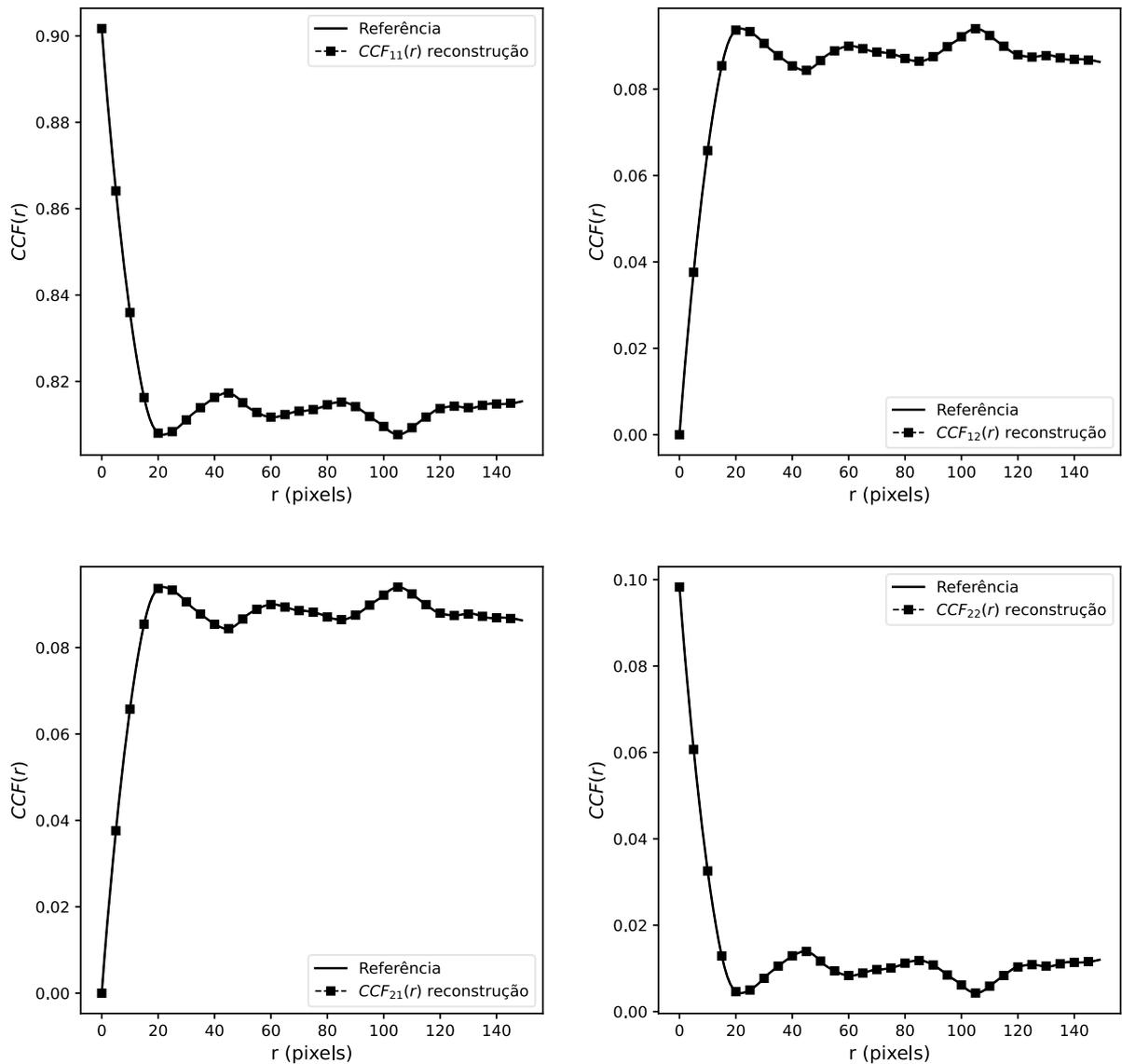


Figura 42 - Funções de correlação da reconstrução 2D via CCF

### 9.1.1.2 Reconstrução via $S_2$ (amostragem GLP)

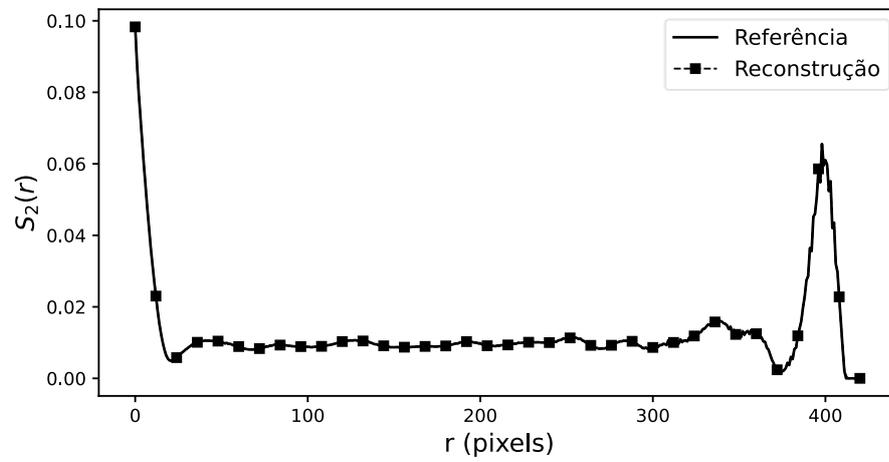


Figura 43 - Funções de correlação da reconstrução 2D via  $S_2$

### 9.1.1.3 Reconstrução híbrida via $S_2$ e $C_2$ (amostragem GLP)

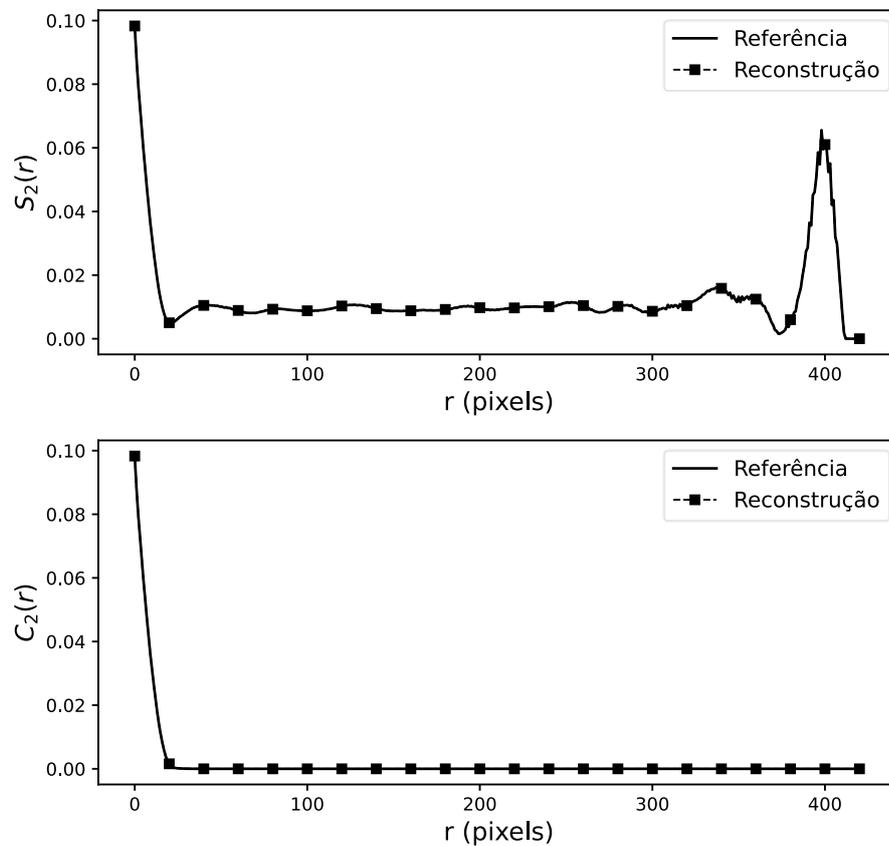


Figura 44 - Funções de correlação da reconstrução 2D via método híbrido  $S_2 - C_2$

### 9.1.2 RECONSTRUÇÕES 3D

#### 9.1.2.1 Reconstrução via CCF (amostragem ortogonal)

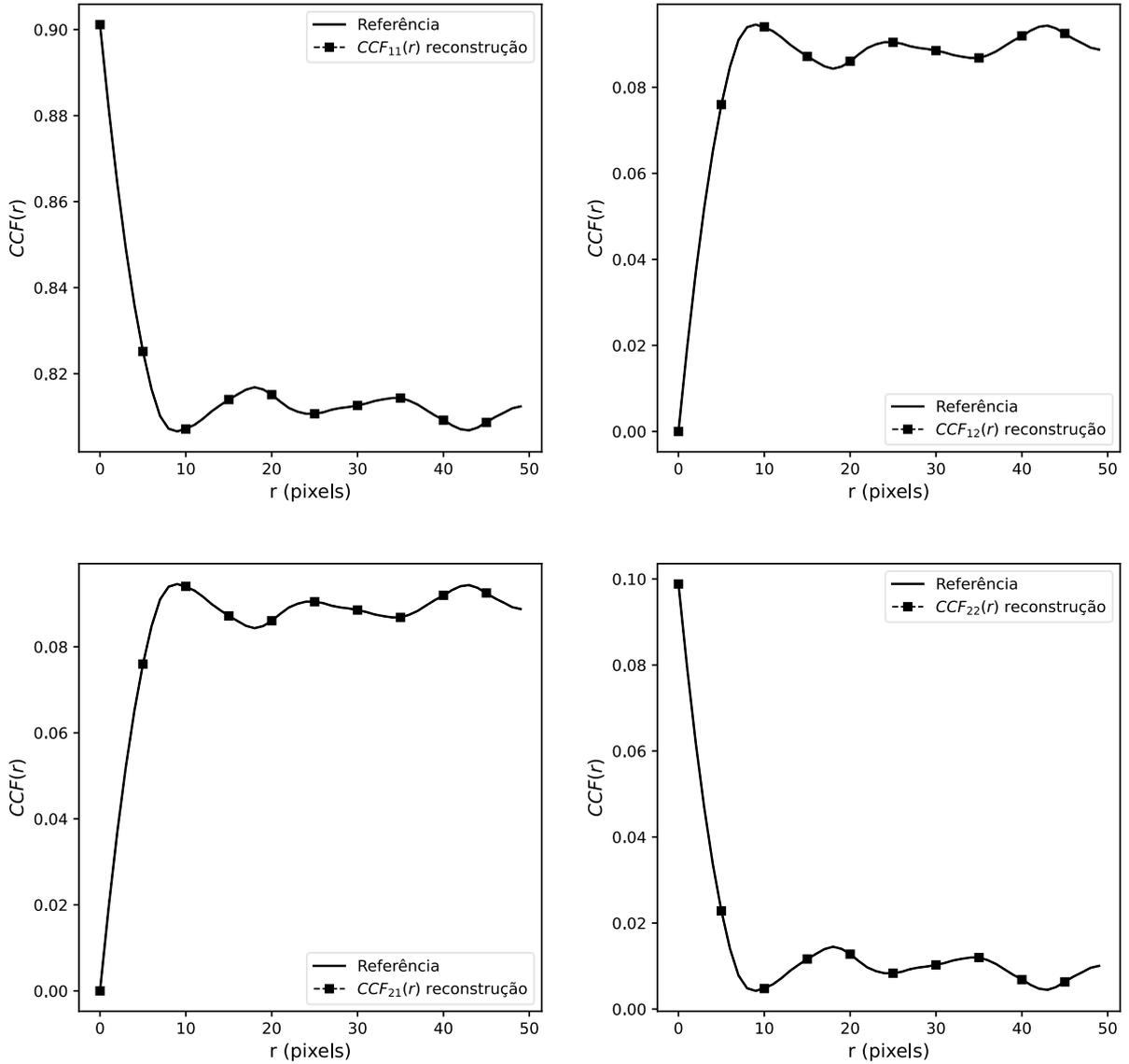


Figura 45 - Funções de correlação da reconstrução 3D via CCF

### 9.1.2.2 Reconstrução via $S_2$ (amostragem GLP)

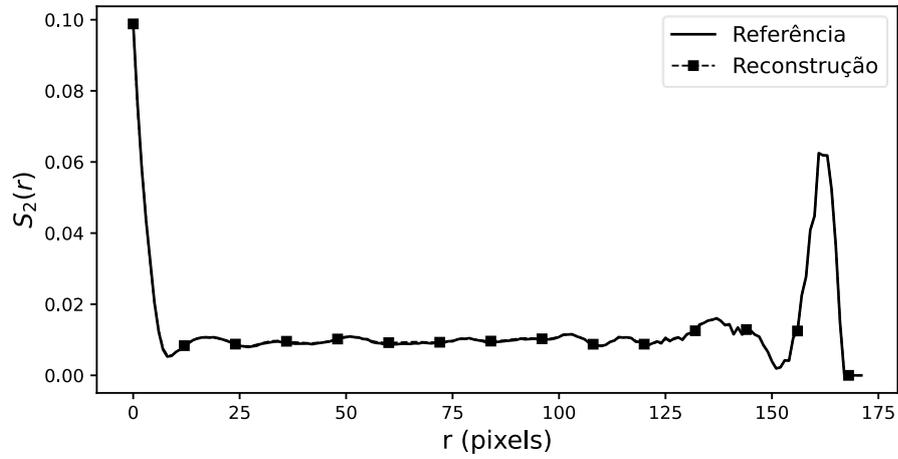


Figura 46 - Funções de correlação da reconstrução 3D via  $S_2$

### 9.1.2.3 Reconstrução híbrida via $S_2$ e $C_2$ (amostragem GLP)

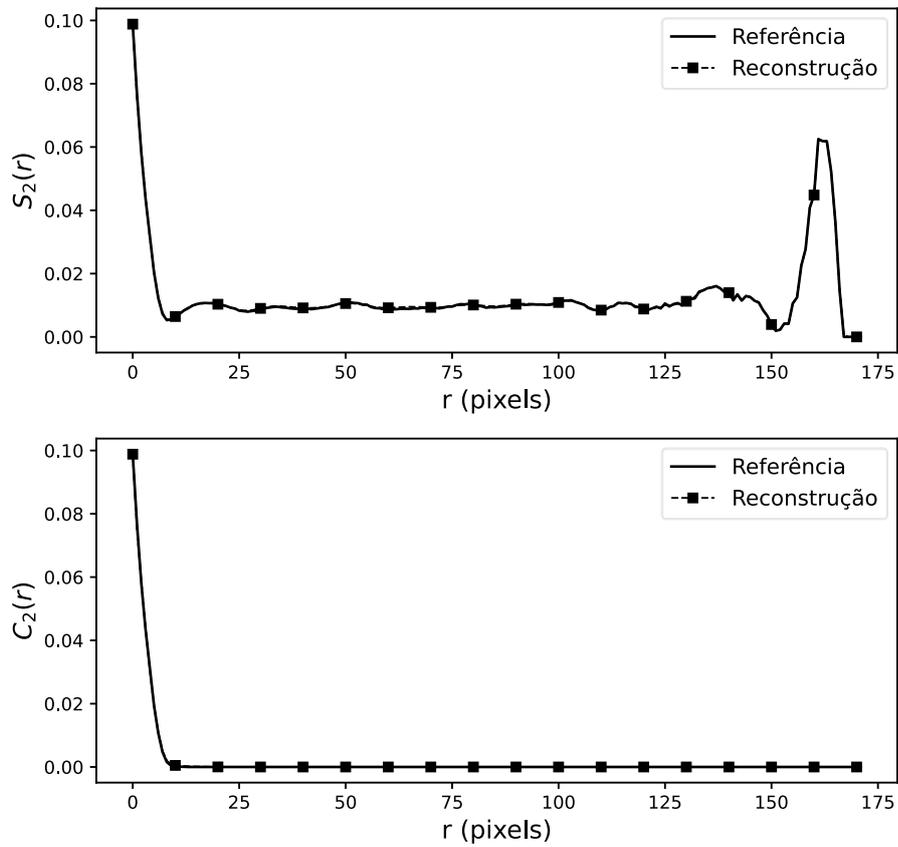


Figura 47 - Funções de correlação da reconstrução 3D via método híbrido  $S_2 - C_2$

## 9.2 Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal

De maneira complementar, também será utilizada uma simulação obtida pelo método do cone causal, usando como parâmetros as características estereológicas das seções de ferro fundido nodular usadas anteriormente neste trabalho, como visto na Figura 48. Esta última simulação, como já é tridimensional, tem como propósito apenas permitir apontar diferenças na reconstrução quando a entrada não é uma seção microscópica; é esperado que a seção 2D não contenha tantas informações e não forneça uma reconstrução com mesma acurácia em relação à conectividade das partículas.

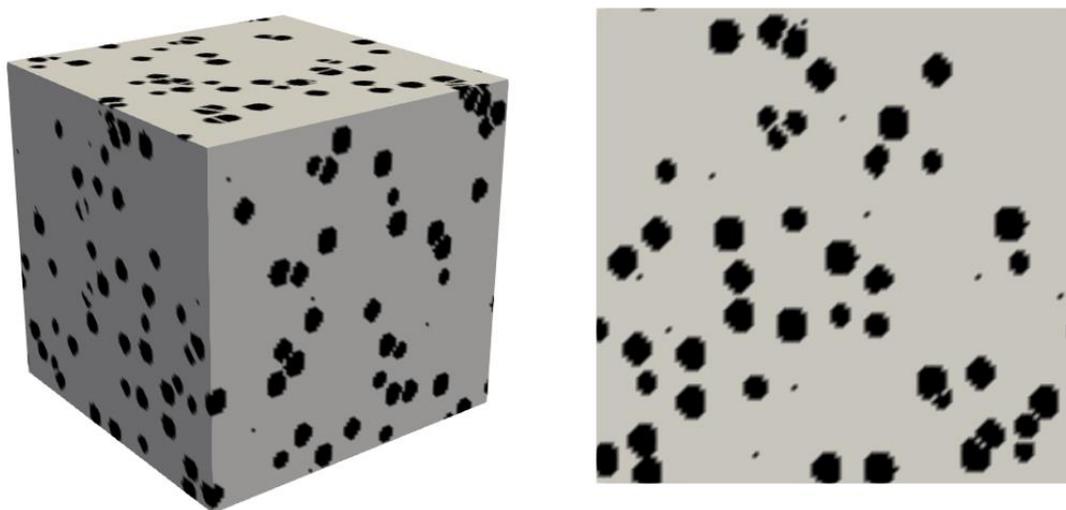


Figura 48 - Representação 3D (esquerda) e seção 2D (direita) de simulação pelo método do cone causal

Na Figura 49 é apresentado o resultado da reconstrução 3D de uma simulação obtida pelo método do cone causal, ou seja, uma reconstrução dimensional a partir de uma referência também tridimensional. Os parâmetros de reconstrução estão na Tabela 11. Espera-se melhor representação da função de correlação de cluster, que é uma medida intrinsecamente 3D; por conseguinte, espera-se melhor representação da informação de conectividade.

Tabela 11 – Parâmetros para reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal

Tamanho da matriz, $N \times N \times N$ (pixels)	100 x 100 x 100
Tamanho da matriz, $N \times N \times N$ (pixels)	100 x 100 x 100
Distância diagonal máxima	173
Tempo máximo de reconstrução, $t_{max}$	30.000.000
Tolerância de energia, $E_{tol}$	$10^{-11}$
Probabilidade de aceitação no início da reconstrução, $p_0$	0,4
Fator de resfriamento, $\lambda$	0,90
Passos iniciais, $t_{inicial}$	2500
Passos para cada resfriamento, $t_{resf}$	2500

A primeira característica da reconstrução que chama atenção é a diferente distribuição de nódulos nas faces, bem como o tamanho. Como comentado anteriormente, existe um efeito de borda associado ao fato de as funções de correlação não serem amostradas periodicamente. A Figura 50 mostra a referência e a reconstrução com as bordas removidas (5% da dimensão linear em cada uma das seis faces). Isso revela uma microestrutura mais compatível com a original.

Na vista transparente contida na Figura 51, é possível ver uma distribuição compatível de nódulos de grafita, embora as superfícies contenham uma quantidade razoável de imperfeições e ruídos. É possível ver também um sutil efeito de borda, com estruturas ora dispersas, ora alongadas nas quinas na matriz reconstruída. As seções tiradas ao centro, mostradas na Figura 52, mostram ótima compatibilidade morfológica e mostram mesmo alguns aglomerados de nódulos representados fielmente à microestrutura original. As informações de conectividade são muito bem representadas, com poucas estruturas fugindo em forma em tamanho do esperado.

A Tabela 12 mostra as medidas estereológicas padrões para uma análise tridimensional, obtidas de 30 seções (10 em cada direção ortogonal). O número de nódulos é compatível e as medidas com incerteza são iguais dentro de um intervalo de confiança de 95%.

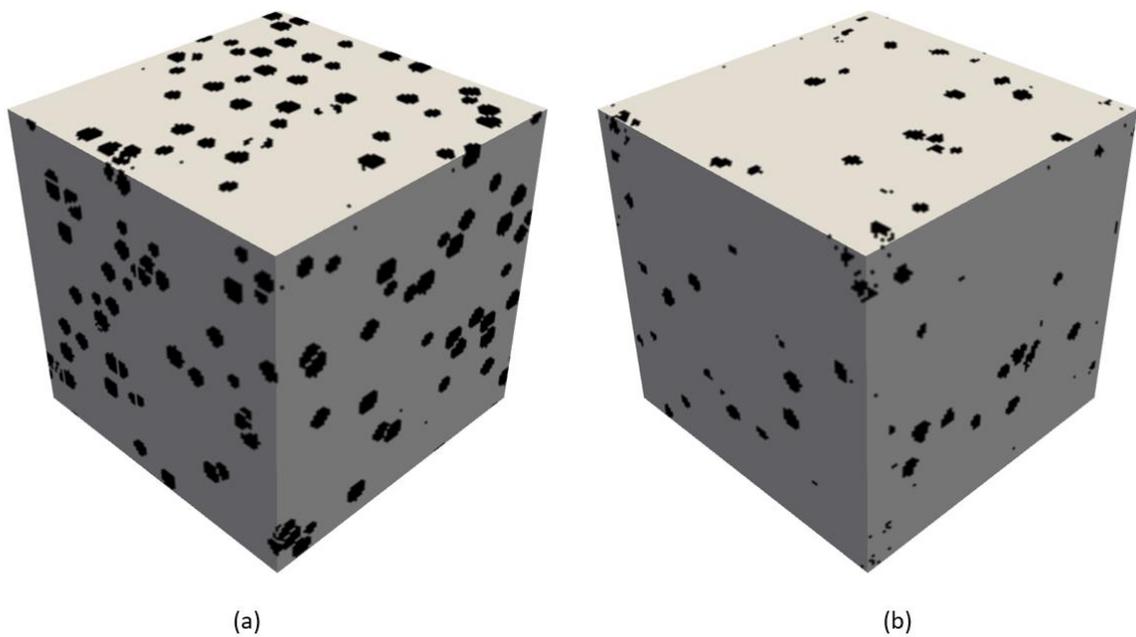


Figura 49 – Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal, vista isométrica sem alterações:  
(a) original, (b) reconstrução

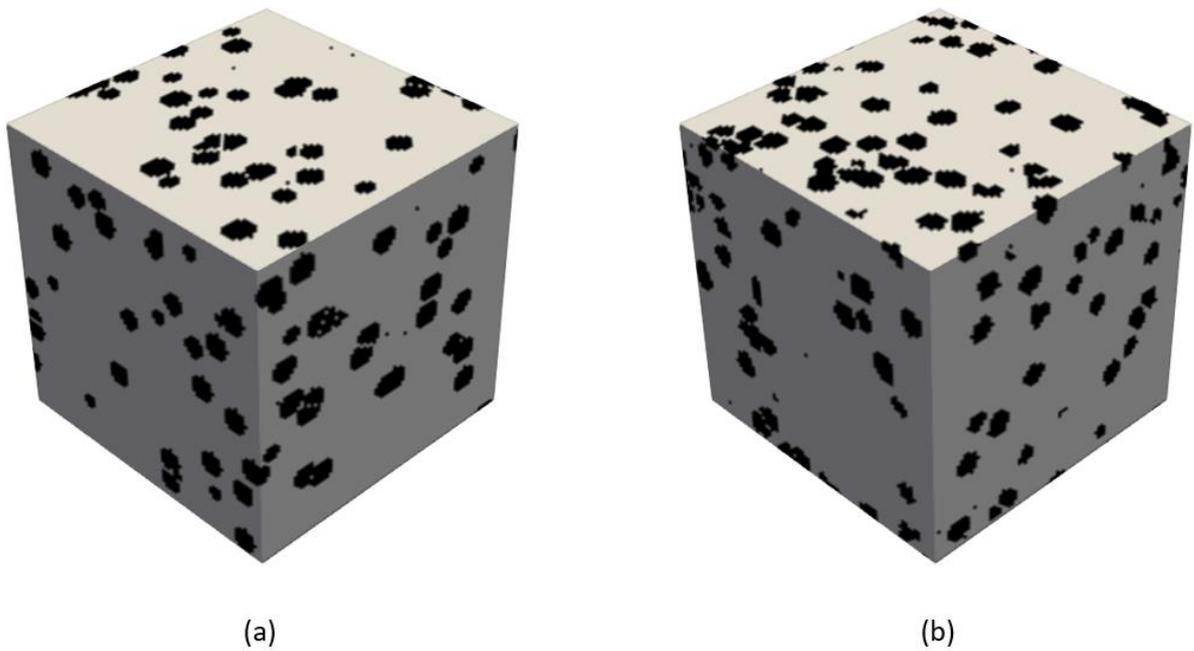


Figura 50 – Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal, vista isométrica com bordas removidas: (a) original, (b) reconstrução

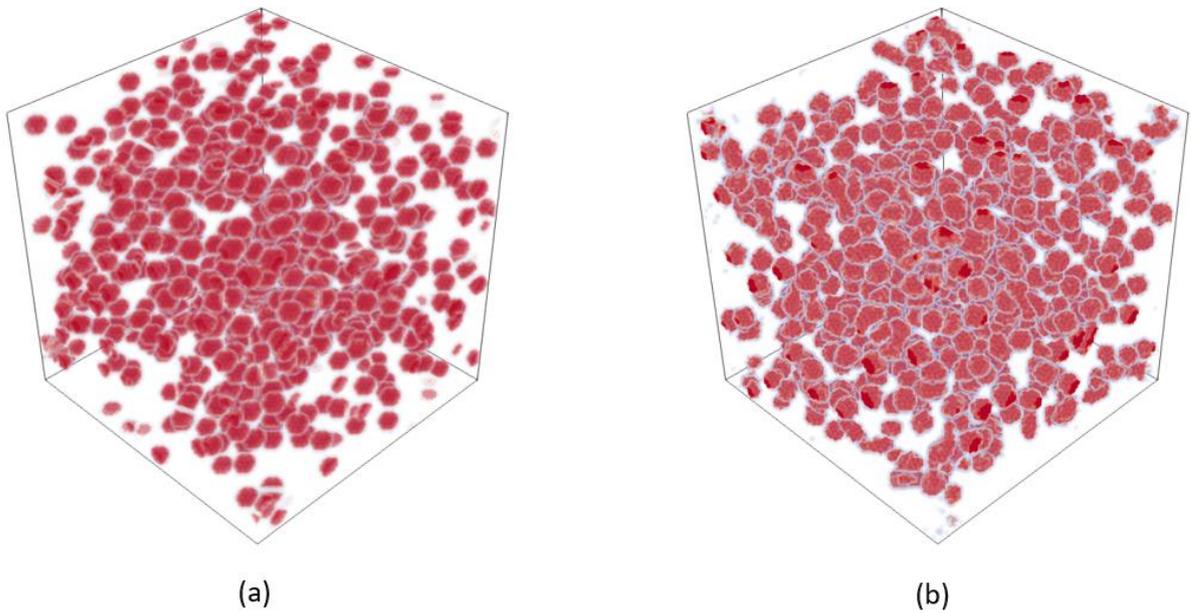


Figura 51 - Reconstrução 3D a partir da simulação via cone causal, vista transparente geral: (a) original, (b) reconstrução

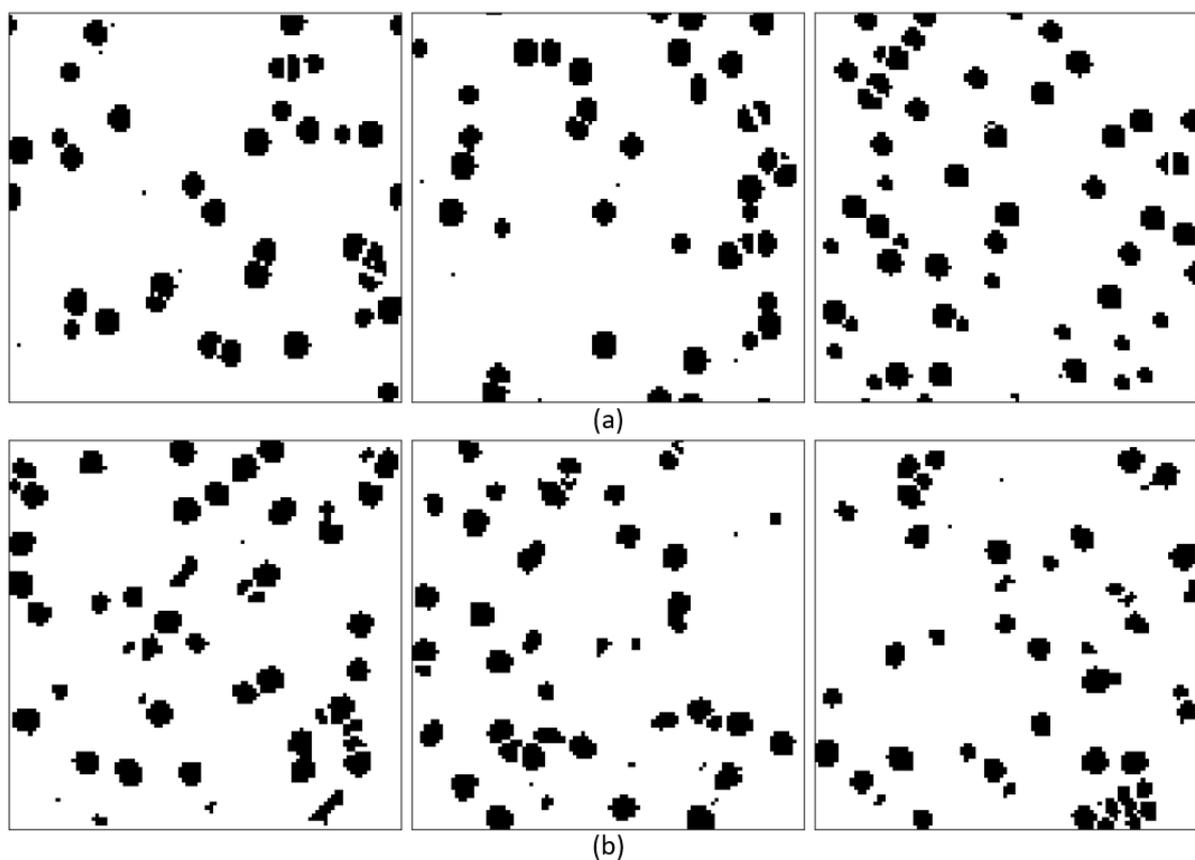


Figura 52 - Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal, seções transversais ao centro: (a) original, (b) reconstrução

Tabela 12 - Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal: medidas estereológicas não-normalizadas

<b>Grandeza</b>	<b>Original</b>	<b>Reconstrução</b>
Fração volumétrica	0,112384	
Número total por seção	$44,60 \pm 1,88$	$43,60 \pm 2,45$
Número total no volume	255	245
Calibre médio por unidade, $d$ (pixel)	$5,39 \pm 0,08$	$5,50 \pm 0,35$

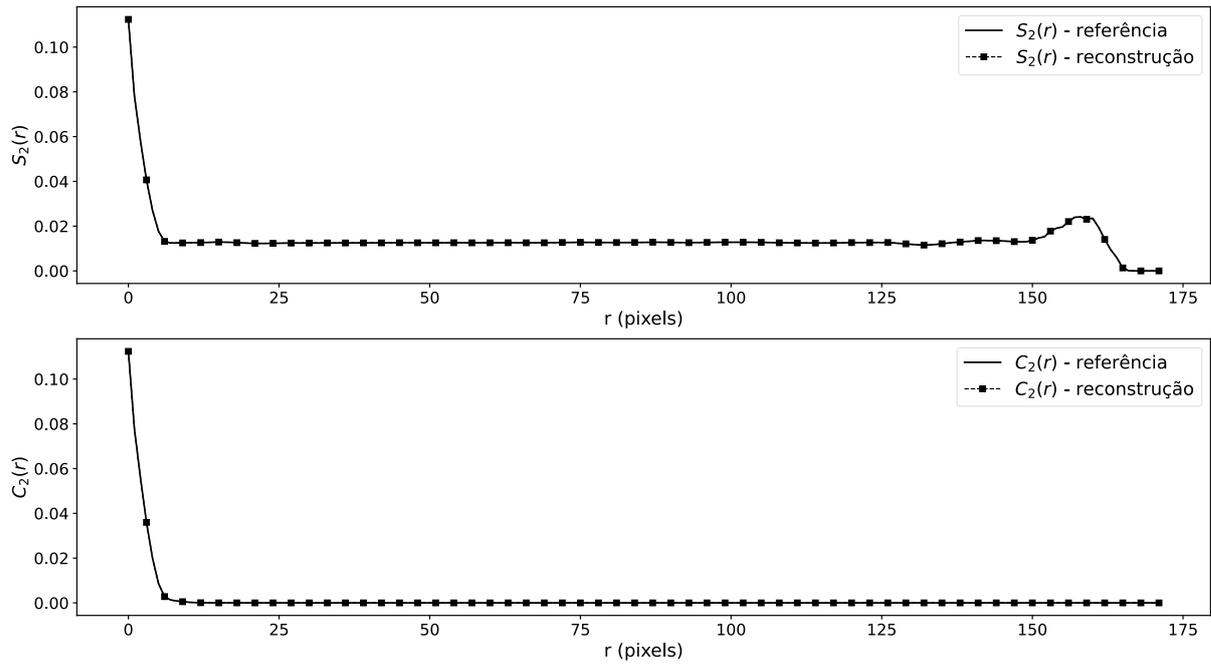


Figura 53 – Reconstrução 3D a partir de simulação via cone causal: funções de correlação de referência e da reconstrução,  $S_2(r)$  (acima) e  $C_2(r)$  (abaixo)