

**CONCEPÇÃO E VALIDAÇÃO DE UM MODELO  
MATEMÁTICO-DIGITAL PARA O MEIO POROSO POR  
MEIO DE MICROTOMOGRAFIA, AUTOMATOS  
CELULARES E IMPRESSÕES 3D**

**LUAN CARLOS DE SENA MONTEIRO OZELIM**

**ORIENTADOR: PROF. ANDRÉ LUÍS BRASIL CAVALCANTE, DSc**

**TESE DE DOUTORADO EM GEOTECNIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E  
AMBIENTAL**

**FACULDADE DE TECNOLOGIA  
UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA**

Julho 2014

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
FACULDADE DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL

**CONCEPÇÃO E VALIDAÇÃO DE UM MODELO  
MATEMÁTICO-DIGITAL PARA O MEIO POROSO POR  
MEIO DE MICROTOMOGRÁFIA, AUTOMATOS  
CELULARES E IMPRESSÕES 3D**

**LUAN CARLOS DE SENA MONTEIRO OZELIM**

ORIENTADOR: ANDRÉ LUÍS BRASIL CAVALCANTE, DSc

**TESE DE DOUTORADO EM GEOTECNIA**

**PUBLICAÇÃO: G.TD -096/2014**

**BRASÍLIA-DF: JULHO DE 2014**

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
FACULDADE DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E  
AMBIENTAL**

**CONCEPÇÃO E VALIDAÇÃO DE UM MODELO  
MATEMÁTICO-DIGITAL PARA O MEIO POROSO POR  
MEIO DE MICROTOMOGRAFIA, AUTOMATOS  
CELULARES E IMPRESSÕES 3D**

**LUAN CARLOS DE SENA MONTEIRO OZELIM**

TESE DE DOUTORADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E  
AMBIENTAL DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS REQUISITOS  
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR.

APROVADA POR:

---

**ANDRÉ LUÍS BRASIL CAVALCANTE, DSc (UnB)**  
(ORIENTADOR)

---

**ANDRÉ PACHECO DE ASSIS, PhD (UnB)**  
(EXAMINADOR INTERNO)

---

**MÁRCIO MUNIZ DE FARIAS, PhD (UnB)**  
(EXAMINADOR INTERNO)

---

**SÍLVIO CRESTANA, DSc (EMBRAPA E USP-SC)**  
(EXAMINADOR EXTERNO)

---

**CARLOS ALEXANDER RE CAREY MORFA, Dr. Ing. (UCLV)**  
(EXAMINADOR EXTERNO)

**DATA: BRASÍLIA/DF, 17 de JULHO de 2014.**

## FICHA CATALOGRÁFICA

OZELIM, LUAN CARLOS DE SENA MONTEIRO

Concepção e Validação de um Modelo Matemático-Digital para o Meio Poroso por meio de Microtomografia, Autômatos Celulares e Impressões 3D.

xx, 108 p., 297 mm (ENC/FT/UnB, Doutor, Geotecnia, 2014)

Tese de Doutorado- Universidade de Brasília.

Faculdade de Tecnologia. Departamento de Engenharia Civil e Ambiental.

1. Autômatos Celulares

2. Impressão 3D

3. Microtomografia

4. Meio Poroso Artificial

I. ENC/FT/UnB

II. Título (série)

## REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

OZELIM, L.C. de S.M. (2014). Concepção e Validação de um Modelo Matemático-Digital para o Meio Poroso por meio de Microtomografia, Autômatos Celulares e Impressões 3D. Tese de Doutorado, Publicação G.TD-096/2014, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 108 p.

## CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Luan Carlos de Sena Monteiro Ozelim

TÍTULO DA TESE DE DOUTORADO: Concepção e Validação de um Modelo Matemático-Digital para o Meio Poroso por meio de Microtomografia, Autômatos Celulares e Impressões 3D

GRAU / ANO: DOUTOR / 2014

É concedida à Universidade de Brasília a permissão para reproduzir cópias desta tese de doutorado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta tese de doutorado pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

---

Luan Carlos de Sena Monteiro Ozelim  
CCSW 5, Bloco B2, Apto 236, Sudoeste  
70680-550 – Brasília/DF - Brasil

*Àqueles sem os quais nada valeria a pena ainda que grande fosse a alma:  
Lenilza, Juvenal e Luana*

## AGRADECIMENTOS

Mais uma longa caminhada se encerra e com ela um ciclo de aprendizado. Não apenas acadêmicos, mas também pessoais são os ensinamentos que carregarei para sempre depois desses dois anos de doutorado. Digo sem dúvidas que esses anos valeram uma vida. Neles experimentei os mais diversos tipos de sentimentos e tenho absoluta certeza de que deles saio fortalecido e mais maduro.

Em longas e árduas caminhadas sempre devemos ter alguém para compartilhar os mais inusitados momentos. Agradeço imensamente ao meu orientador, Professor André Brasil por todo esse tempo em que me acompanhou na busca pelo conhecimento. Muito mais do que um orientador, digo com toda certeza que esse amigo levarei para a vida toda.

Por outro lado, gostaria de agradecer profundamente ao Professor Pushpa Rathie. Crédito a ele muito do que consegui, pois todo o apoio e conhecimento por ele a mim transmitidos foram e são essenciais para a construção do meu ímpeto de pesquisador.

Agradeço a Elizabeth Zubeldia e a Lucas Parreira por todas as discussões sobre os temas da tese. Aprendi muito com nossas discussões e por isso agradeço profundamente a vocês.

Agradeço à CAPES por fomentar a pesquisa nacional e especificamente pela minha bolsa. Agradeço ainda à EMBRAPA instrumentação e à fundação CERTI pela disponibilidade de ajudar nos ensaios tomográficos da presente tese. Em nome daquelas instituições, direciono meus agradecimentos ao Dr. Sílvio Crestana e ao Dr. João Naime (EMBRAPA) e ao MSc Mateus Dieckmann, ao Eng. Luiz Pinage e ao Eng. Thiago Fernandes (CERTI).

À minha família agradeço por todo o apoio e incentivo constantes. Inimaginável seria ter passado esses dois anos sem vocês, Lenilza, Juvenal e Luana. Parte grande desse doutorado é de vocês, tenham certeza disso! Como já havia dito anteriormente, é pela simplicidade de serem essenciais à minha vida que essas pessoas maravilhosas se caracterizam.

Não posso deixar de expressar meus agradecimentos aos amigos que sempre estiveram perto quando precisei. Para uma conversa, uma idéia, enfim, qualquer coisa que precisasse eu sabia que podia e posso contar com eles. Lembro aqui de grandes pessoas na minha vida: Igor, Auber, Isabella, Thaís, Marcelo e Bruno.

## CONCEPÇÃO E VALIDAÇÃO DE UM MODELO MATEMÁTICO-DIGITAL PARA O MEIO POROSO POR MEIO DE MICROTOMOGRAFIA, AUTOMATOS CELULARES E IMPRESSÕES 3D

O estudo da geometria da matriz porosa tem se mostrado de fundamental importância para a moderna engenharia geotécnica. Tal fato advém da crescente utilização de métodos numéricos, os quais necessitam de um domínio computacional que deve representar da melhor maneira possível o meio simulado.

É com esse intuito que a presente tese analisou e validou a utilização de microtomografias, autômatos celulares e impressões 3D como forma de geração de um modelo físico-computacional para os meios porosos.

Em um primeiro momento, estudou-se a possibilidade de obtenção de parâmetros de transporte a partir da simulação em escala de poros em domínios computacionais obtidos por meio de tomografias. Amostras de esferas de vidro, areia e areia argilosa foram analisadas por meio de tomografias em diferentes resoluções. Verificou-se que para o caso das areias e do vidro, quando a razão entre o lado do domínio cúbico simulado e o diâmetro efetivo da amostra é de cerca de 6 a 10, o coeficiente de variação da permeabilidade é de cerca de 10%. Por outro lado, para as amostras de argila, quando aquela razão é de cerca de 20 a 30, o coeficiente de variação é de cerca de 40%. Em ambos os casos, observou-se que o valor de permeabilidade aferido é correspondente àquele obtido nas escalas experimentais tradicionais.

Em relação ao estudo de resoluções das tomografias, observou-se que a diminuição da resolução pode ser um aliado na questão do aumento do domínio simulado quando recursos computacionais são escassos. Deve-se, no entanto, atentar para a preservação da representação dos macroporos.

Em relação aos autômatos celulares 3D, um estudo completo foi realizado, a fim de obter regras de interesse para a representação do meio poroso.

Por fim, as impressões 3D foram utilizadas para validar as rotinas do software Avizo Fire®, mostrando que o *upscale* do programa pode não ser adequado aos casos analisados. Ainda, a análise metrológica revelou que em todas as impressões analisadas, mais de 95% dos desvios entre impressão e modelo computacional são menores do que a precisão da impressora (0,3mm). Assim, as impressões 3D são válidas como forma de representação do meio poroso.

# **CONCEPTION AND VALIDATION OF A MATHEMATICAL-DIGITAL MODEL FOR THE POROUS MEDIUM BY MEANS OF MICROTOMOGRAPHY, CELLULAR AUTOMATA AND 3D PRINTING**

In modern geotechnical engineering, the study of the geometry of the porous matrix has been shown to be of fundamental importance. This emerges from the growing usage of numerical methods, which require a computational domain that best represents the simulated medium.

Based on those needs, the present thesis analyzed and validated the usage of microtomographies, cellular automata and 3D printing as a way to generate a physical-computational model for porous media.

At first, the possibility of obtaining transport parameters by means of pore-scale simulations in computational domains based on tomographies has been studied. Samples of glass beads, sand and clayey sand have been analyzed based on tomographies with different resolutions. In the cases of glass beads and sands, it has been verified that when the ratio between the length of the side of the cubic simulated domain and the characteristic diameter of the sample is of 6 to 10, the coefficient of variation of the permeability is of about 10%. For the clayey sand samples, when such ratio is of 20 to 30, the coefficient of variation is of about 40%. In both cases, the mean permeability obtained is similar to the one obtained from standard permeability tests.

Regarding the resolution effects, it has been observed that the decreasing in resolution can be an ally in the issue of increasing the real size of the simulated domain when computational resources are scarce. One must, on the other hand, pay close attention to preservation of the macropores.

With respect to the 3D cellular automata, a complete study has been performed in order to obtain rules which are of interest to represent the porous media.

Finally, 3D prints have been used to validate the software Avizo Fire ®, showing that the upscale used by such software may not be adequate in the cases studied. Besides, the metrological analysis revealed that for all the prints analyzed, more than 95% of the deviations between the print and the computational model are smaller than resolution of the printer (0,3mm). Thus, 3D printing has been validated as an effective way of representing artificial porous media.

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO .....	1
1.1	OBJETIVOS DA PESQUISA .....	2
1.2	ESCOPO DA TESE .....	2
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	4
2.1	A TOMOGRAFIA.....	4
2.1.1	A MICROTOMOGRAFIA .....	7
2.1.2	A MICROTOMOGRAFIA APLICADA ÀS CIÊNCIAS DOS SOLOS .....	8
2.1.2.1	A MICROTOMOGRAFIA COMO FONTE DE PARÂMETROS GEOMÉTRICOS DA AMOSTRA .....	9
2.1.2.2	A MICROTOMOGRAFIA COMO FONTE DE PARÂMETROS FÍSICOS DA AMOSTRA	10
2.2	A GERAÇÃO DE MEIOS POROSOS ARTIFICIAIS .....	13
2.2.1	O VOLUME ELEMENTAR REPRESENTATIVO (VER).....	16
2.3	MÉTODOS PROBABILÍSTICOS APLICADOS .....	17
2.3.1	MÉTODO BOOTSTRAP .....	18
2.3.1.1	CÁLCULO DO INTERVALO DE CONFIANÇA BCa BOOTSTRAP .....	20
2.3.1.2	TESTE DE HIPÓTESES COM O MÉTODO BOOTSTRAP .....	21
2.4	OS AUTÔMATOS CELULARES 3D .....	22
2.5	IMPRESSÕES 3D.....	27
2.5.1	SINTERIZAÇÃO POR LASER .....	29
2.6	PESQUISAS DESENVOLVIDAS NA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA.....	30
3	MATERIAS E MÉTODOS.....	32
3.1	MATERIAIS.....	32
3.1.1	MATERIAIS JÁ TOMOGRAFADOS.....	32
3.1.1.1	MEIO POROSO GERADO PELA DISPOSIÇÃO DE ESFERAS DE VIDRO.....	32
3.1.1.2	MEIO POROSO FORMADO POR AREIA .....	33
3.1.1.3	MEIO POROSO FORMADO POR AREIA ARGILOSA.....	33
3.1.2	MATERIAIS RESULTANTES DAS IMPRESSÕES 3D.....	33
3.2	MÉTODOS.....	34
3.2.1	DETERMINAÇÃO ESTATÍSTICA DO TAMANHO DO VER .....	35
3.2.1.1	RECONSTRUÇÃO DO VOLUME TOMOGRAFADO.....	36
3.2.1.2	AMOSTRAGEM DE SUB-VOLUMES PARA CÁLCULO DE PROPRIEDADES .....	36
3.2.1.3	DETERMINAÇÃO DO INTERVALO DE CONFIANÇA PARA A PROPRIEDADE MÉDIA E SEU COEFICIENTE DE VARIAÇÃO .....	36

3.2.1.4	RELACIONAR O COMPRIMENTO DO LADO DO SUB-VOLUME COM O DIÂMETRO CARACTERÍSTICO DO MATERIAL.....	37
3.2.1.5	COMPARAR AS AMOSTRAS AO AUMENTAR O TAMANHO DO SUB-VOLUME POR MEIO DE TESTE DE HIPÓTESES E OUTRAS ANÁLISES.....	37
3.2.2	AVALIAÇÃO DO EFEITO DA RESOLUÇÃO NOS PARÂMETROS.....	38
3.2.3	ESTUDO DAS PROPRIEDADES GEOMÉTRICAS DOS AUTOMATOS CELULARES 3D	38
3.2.3.1	AVALIAÇÃO DA EVOLUÇÃO DA POROSIDADE DE TODAS AS REGRAS CONSIDERADAS .....	38
3.2.3.2	A PARTIR DO CONHECIMENTO DAS POROSIDADES QUE SE MANTÊM CONSTANTES, OBTENIR AS REGRAS DE INTERESSE .....	39
3.2.4	ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DOS AUTOMATOS CELULARES 3D .....	39
3.2.4.1	AVALIAÇÃO DA CONDIÇÃO INICIAL RANDÔMICA NA PERMEABILIDADE PARA AS REGRAS DE INTERESSE .....	39
3.2.4.2	AVALIAÇÃO DA EVOLUÇÃO DA PERMEABILIDADE PARA AS REGRAS DE INTERESSE.....	40
3.2.4.3	AVALIAÇÃO DO EFEITO DE ESCALA DO DOMÍNIO NA PERMEABILIDADE PARA AS REGRAS DE INTERESSE .....	40
3.2.5	O USO DE IMPRESSÕES 3D NA REPRESENTAÇÃO DO MEIO POROSO.....	40
3.2.5.1	GERAÇÃO DO ARQUIVO COMPUTACIONAL PARA IMPRESSÃO .....	40
3.2.5.2	IMPRESSÃO DAS AMOSTRAS.....	41
3.2.5.3	AVALIAÇÃO NUMÉRICA DA PERMEABILIDADE DO AUTÔMATO ENVIADO PARA IMPRESSÃO.....	41
3.2.5.4	AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL DA PERMEABILIDADE DO AUTÔMATO IMPRESSO	42
3.2.5.5	VALIDAÇÃO DA TÉCNICA DE IMPRESSÃO 3D COMO METODOLOGIA DE ESTUDO DE MEIOS POROSOS.....	44
3.2.6	SOFTWARE AVIZO FIRE ® v. 8.0.1 .....	46
3.2.7	SOFTWARE MATHEMATICA ® v.9.....	47
3.2.8	SOFTWARE VGSTUDIO MAX ® v.2.2 .....	47
4	RESULTADOS .....	48
4.1	DETERMINAÇÃO ESTATÍSTICA DO TAMANHO DO VER .....	50
4.1.1	ANÁLISE DO VER PARA A AMOSTRA DE ESFERAS DE VIDRO DE 0,5 MM DE DIÂMETRO.....	51
4.1.2	ANÁLISE DO VER PARA A AMOSTRA DE ESFERAS DE VIDRO DE 1 MM DE DIÂMETRO.....	52

4.1.3	ANÁLISE DO VER PARA A AMOSTRA DE AREIA (CORPO DE PROVA 2, AMOSTRA AREIA 3)	52
4.1.4	ANÁLISE DO VER PARA A AMOSTRA DE AREIA ARGILOSA (CORPO DE PROVA 2, AMOSTRA A. ARGILOSA 2)	53
4.1.5	ANÁLISE DO VER POR MEIO DE TESTE DE HIPÓTESES PARA TODOS OS MATERIAIS	54
4.2	AVALIAÇÃO DO EFEITO DA RESOLUÇÃO NOS PARÂMETROS	56
4.2.1	ANÁLISE DO EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA AS AMOSTRAS DE AREIA	56
4.2.1.1	O EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA A AMOSTRA AREIA 1	57
4.2.1.2	O EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA A AMOSTRA AREIA 2	57
4.2.1.3	EFEITO DE RESOLUÇÃO GERAL PARA AS TRÊS AMOSTRAS DE AREIA	58
4.2.2	ANÁLISE DO EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA AS AMOSTRAS DE AREIA ARGILOSA	58
4.2.2.1	O EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA A AMOSTRA A. ARGILOSA 1	59
4.2.2.2	O EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA A AMOSTRA A. ARGILOSA 3	59
4.2.2.3	EFEITO DE RESOLUÇÃO GERAL PARA AS 3 AMOSTRAS DE AREIA ARGILOSA	60
4.3	ESTUDO DAS PROPRIEDADES GEOMÉTRICAS DOS AUTOMATOS CELULARES 3D	61
4.4	ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DOS AUTOMATOS CELULARES 3D	62
4.4.1	EFEITO DA CONDIÇÃO INICIAL RANDÔMICA NA PERMEABILIDADE	62
4.4.2	MUDANÇA NA PERMEABILIDADE COM A EVOLUÇÃO DO AUTOMATO CELULAR 3D	63
4.4.3	MUDANÇA NO TAMANHO DAS CÉLULAS DO DOMÍNIO AUTOMATO CELULAR 3D	64
4.5	O USO DE IMPRESSÕES 3D NA REPRESENTAÇÃO DO MEIO POROSO	65
4.5.1	ANÁLISE DE PERMEABILIDADE DAS AMOSTRAS GERADAS POR IMPRESSÃO 3D	68
4.5.1.1	MODELO FÍSICO PARA ANÁLISE DE PERMEABILIDADE DE AMOSTRAS COM ALTA PERMEABILIDADE	69
4.5.2	ANÁLISE METROLÓGICA DAS AMOSTRAS GERADAS POR IMPRESSÃO 3D	74
4.5.2.1	ANÁLISE DAS IMPRESSÕES 3D RELATIVA AO AUTÔMATO REGRA 5 (FAMÍLIA DE AMOSTRAS 1)	75
4.5.2.2	ANÁLISE DAS IMPRESSÕES 3D RELATIVA AO AUTÔMATO REGRA 3 (AMOSTRA 2)	82
4.5.2.3	ANÁLISE DAS IMPRESSÕES 3D RELATIVA AO AUTÔMATO REGRA 11 (AMOSTRA 3)	84
4.5.2.4	ANÁLISE DAS IMPRESSÕES 3D RELATIVA AO AUTÔMATO REGRA 23 (AMOSTRA 5)	85
5	CONCLUSÕES	88

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	91
A. CATÁLOGO DE AUTÔMATOS CELULARES E SUAS PROPRIEDADES.....	98

## LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 Dados gerais sobre os materiais tomografados.....	48
Tabela 4.2 Resultados dos testes de hipóteses realizados para encontrar o VER. ....	54
Tabela 4.3 Testes de hipóteses para comparação geral. ....	55
Tabela 4.4 Automatos celulares 3D: regras e propriedades. ....	61
Tabela 4.5 Valores de permeabilidade das amostras geradas por impressão 3D .....	69
Tabela 4.6 Dados de permeabilidade aferidos para os modelos 3D após correção.....	72

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Fotografia dos ossos dos dedos de uma mão humana viva, mostrando um anel no terceiro dedo (Röntgen, 1896). .....	5
Figura 2.2 Esquema de funcionamento básico de um tomógrafo (Naime, 2001). .....	6
Figura 2.3 Meios porosos artificiais 2D gerados: (a) Rappoldt & Crawford (1999); (b) Sukop & Or (2003); (c) Nabovati & Souza (2007); (d) Bandman (2011) e (e) Zubeldia (2013). .....	14
Figura 2.4 Meios porosos artificiais 3D gerados: (a) Blöcher & Zimmermann (2008); (b) Meng et al. (2012) e (c) Bertei et al. (2014). .....	15
Figura 2.5 Domínio de um autômato celular 3D. ....	23
Figura 2.6 Vizinhanças de uma célula: (a) vizinhança de Neumann e (b) vizinhança de Moore. ....	23
Figura 2.7 Condições de fronteira do tipo <i>wrap-around</i> : (a) vizinhança normal e (b) vizinhança com condição de fronteira do tipo <i>wrap-around</i> .....	25
Figura 2.8 Evolução da regra 200 com condição inicial randômica de 1s e 0s ( $p_1=0,5$ ).26	
Figura 2.9 Evolução da regra 23 com condição inicial randômica de 1s e 0s ( $p_1=0,2$ )..	26
Figura 2.10 Evolução da regra 23 com condição inicial randômica de 1s e 0s ( $p_1=0,5$ ).27	
Figura 2.11 Microcosmo para crescimento de fungos obtidos por impressão 3D (Otten et al., 2012) .....	28
Figura 2.12 Permeâmetro construído com o auxílio de impressões 3D: (a) configuração básica do permeâmetro a ser montado; (b) design computacional do topo e base do permeâmetro e (c) resultado da impressão 3D (Rangel et al., 2013).....	29
Figura 2.13 Processo de sinterização por laser (adaptado de Materialgeeza, 2014). ....	30
Figura 3.1 Impressão teste: (a) modelo computacional e (b) impressão 3D. ....	34
Figura 3.2 Metodologia de aquisição e processamento de dados: (a) reconstrução do volume tomografado; (b) amostragem de sub-volumes para cálculo de propriedades; (c) determinação do IC para a propriedade média e seu CV; (d) relacionar o tamanho do sub-volume com o diâmetro efetivo do material e (e) comparar os parâmetros das amostras por meio de testes de hipóteses. ....	35
Figura 3.3 Metodologia de validação da utilização de impressoras 3D: (a) geração do modelo computacional por meio do software Mathematica ®; (b) primeira verificação de permeabilidade entre modelo .stl e modelo original; (c) impressão dos modelos 3D; (d) realização da análise metrológica e (e) aferição experimental da permeabilidade dos modelos impressos.....	41
Figura 3.4 Procedimento de ensaio de permeabilidade para o arranjo 1. Os números correspondem às etapas descritas no texto.....	43
Figura 3.5 Procedimento de ensaio de permeabilidade para o arranjo 2. Os números correspondem às etapas descritas no texto.....	44
Figura 3.6. Tomógrafo Metrotom 1500 utilizado para os estudos de metrologia das impressões 3D. ....	45
Figura 3.7. Amostra posicionada dentro do tomógrafo Metrotom 1500 e sobre plataforma de isopor. ....	46
Figura 4.1 Procedimento de corte e binarização dos tomogramas .....	48

Figura 4.2 Distribuição granulométrica dos materiais tomografados.....	49
Figura 4.3 Volumes reconstruídos para análise do VER: (a) Esferas de vidro de 0.5mm de diâmetro; (b) esferas de vidro de 1mm de diâmetro; (c) amostra Areia 3 e (d) amostra A. Argilosa 2. ....	50
Figura 4.4 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de esferas de vidro de 0,5mm de diâmetro: (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias. ....	51
Figura 4.5 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de esferas de vidro de 1mm de diâmetro: (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias. ....	52
Figura 4.6 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 2, amostra Areia 3): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias. ....	53
Figura 4.7 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia argilosa (CP 2, amostra A. Argilosa 2): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias.....	53
Figura 4.8 Volumes reconstruídos para análise do efeito da resolução na permeabilidade do meio: (a) amostra Areia 1; (b) amostra Areia 2; (c) amostra A. Argilosa 1 e (d) amostra A. Argilosa 3. ....	56
Figura 4.9 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 1, amostra Areia 1): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias. ....	57
Figura 4.10 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 1, amostra Areia 2): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias. ....	57
Figura 4.11 Efeito da resolução tomográfica na permeabilidade das amostras de areias: (a) permeabilidade média e (b) coeficiente de variação da permeabilidade.....	58
Figura 4.12 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 1, amostra A. Argilosa 1): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias. ....	59
Figura 4.13 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 1, amostra A. Argilosa 3): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias. ....	59
Figura 4.14 Efeito da resolução tomográfica na permeabilidade das amostras de areia argilosa: (a) permeabilidade média e (b) coeficiente de variação da permeabilidade....	60
Figura 4.15 Influência da condição inicial randômica na permeabilidade do autômato celular regra 23. ....	62
Figura 4.16 Mudança de permeabilidade com a evolução do autômato celular regra 23. ....	63
Figura 4.17 Efeito da variação do tamanho $l$ das células cúbicas que compõem o domínio 3D.....	64
Figura 4.18 Impressões 3D e modelos computacionais para a amostra 1 em diferentes escalas (da esquerda para direita, com 6cm, 5cm, 4cm, 3cm e 2cm de lado). ....	66

Figura 4.19 Impressões 3D e seus modelos computacionais para as amostras 2, 3, 5, 6 e 9. ....	67
Figura 4.20 Impressões 3D e seus modelos computacionais para as amostras 11, 12, 15, 16 e 17. ....	68
Figura 4.21 Esquema teórico para análise de altas permeabilidades. ....	70
Figura 4.22 Razões entre valores de permeabilidade numérica (k3D) e permeabilidade experimental (k). ....	72
Figura 4.23 Análise de <i>upscale</i> para a amostra 1 (regra 5). ....	74
Figura 4.24 Exemplo de modelo computacional de sub-volume cilíndrico a ser tomografado. ....	75
Figura 4.25 Diagrama de desvios para a amostra 1_6cm. ....	76
Figura 4.26 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1_6cm. ....	76
Figura 4.27 Diagrama de desvios para a amostra 1_5cm. ....	77
Figura 4.28 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1_5cm. ....	78
Figura 4.29 Diagrama de desvios para a amostra 1_4cm. ....	78
Figura 4.30 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1_4cm. ....	79
Figura 4.31 Diagrama de desvios para a amostra 1_3cm. ....	80
Figura 4.32 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1_3cm. ....	80
Figura 4.33 Diagrama de desvios para a amostra 1_2cm. ....	81
Figura 4.34 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1_2cm. ....	82
Figura 4.35 Diagrama de desvios para a amostra 2. ....	83
Figura 4.36 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 2. ....	83
Figura 4.37 Diagrama de desvios para a amostra 3. ....	84
Figura 4.38 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 3. ....	85
Figura 4.39 Diagrama de desvios para a amostra 5. ....	86
Figura 4.40 Cortes para análise da amostra 5: (a) e (b) mostram o corte eixo z na semi-altura; (c) e (d) mostram o corte no eixo x na semi-largura e (e) e (f) mostram o corte no eixo y na semi-profundidade. ....	87
Figura A.1 Análises para a regra 5: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade; (c) Evolução temporal da permeabilidade e (d) efeito de escala sobre a permeabilidade. ....	98
Figura A.2 Análises para a regra 3: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade. ....	99

Figura A.3 Análises para a regra 11: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.....	100
Figura A.4 Análises para a regra 23: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.....	101
Figura A.5 Análises para a regra 7: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.....	102
Figura A.6 Análises para a regra 31: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.....	103
Figura A.7 Análises para a regra 47: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.....	104
Figura A.8 Análises para a regra 63: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.....	105
Figura A.9 Análises para a regra 94: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.....	106
Figura A.10 Análises para a regra 127: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.....	107
Figura A.11 Análises para a regra 125: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.....	108

## LISTA DE SÍMBOLOS

2D – Duas dimensões;

3D – Três dimensões;

$\hat{a}$  - Parâmetro;

$A_i$  – [ $L^2$ ] área da seção  $i$ ;

$B$  – Número natural;

$b$  – Número natural;

BCa – *Bias-corrected and Accelerated*;

CAESB – Companhia de Saneamento Ambiental do Distrito Federal;

CERTI - Centros de Referência em Tecnologias Inovadoras;

CP – Corpo de prova;

CV – Coeficiente de variação;

$D_{eff}$  – Diâmetro efetivo;

DF – Distrito Federal;

$D_i^{med}$  – Diâmetro médio da partícula entre duas peneiras;

$D_i^{menor}$  – Diâmetro de peneira;

$D_i^{maior}$  – Diâmetro de peneira;

ETE – Estação de Tratamento de Esgoto;

$f(.)$  – Função matemática;

$f_i$  – Fração de partículas entre duas peneiras;

FDM – Fused Deposition Modelling;

$g$  – [ $LT^{-2}$ ] aceleração da gravidade;

$h$  – [ $L$ ] carga hidráulica;

$I$  – [ $T^{-1}$ ] intensidade de feixes de radiação emergente;

$I_0$  – [ $T^{-1}$ ] intensidade de feixes de radiação incidente;

IC – Intervalo de Confiança;

$k$  – [LT<sup>-1</sup>] permeabilidade de engenharia;

$K$  – [L<sup>2</sup>] permeabilidade intrínseca do meio;

$K3D$  – [L<sup>2</sup>] Permeabilidade do modelo 3D gerado para impressão;

$l$  – [L] tamanho da célula do domínio autômato celular;

$L$  – [L] Tamanho do lado do sub-volume cúbico ou comprimento;

MCT – Miniatura compactada tropical;

Micro-CT – Microtomografia computadorizada;

$n$  – Número inteiro ou porosidade;

$p$  – [MT<sup>-2</sup>L<sup>-1</sup>] pressão ou probabilidade;

$p_1$  – Probabilidade de escolha do número 1;

$p_0$  – Probabilidade de escolha do número 0;

PI – Porosidade inicial;

PF – Porosidade final;

PCR – *Polymerase Chain Reaction*;

$R^2$  – Coeficiente de aderência;

RAM – Random Access Memory;

SC – Santa Catarina;

SR – Semente randômica;

SUCS – Sistema Unificado de Classificação de Solos;

$t$  – Passo de tempo;

$t(.)$  – Estatística;

$t_{obs}$  – Estatística;

TC – Tomografia computadorizada;

$u$  – [LT<sup>-1</sup>] velocidade;

$u_d$  – [LT<sup>-1</sup>] velocidade de Darcy;

UnB – Universidade de Brasília;

$v$  – [LT<sup>-1</sup>] velocidade;

$v_s$  – [LT<sup>-1</sup>] velocidade de saída;

VER – Volume elementar representativo;

$X$  – Variável aleatória;

$x$  – [L] comprimento;

$x_i$  – Amostra de uma variável aleatória  $X$ ;

$x_i^*$  – Amostra Bootstrap de uma variável aleatória  $X$ ;

$Y$  – Variável aleatória;

$y_i$  – Amostra de variável aleatória  $Y$ ;

$z^{(\alpha)}$  – 100 $\alpha$ -ésimo ponto percentual de uma distribuição normal padrão;

$\hat{z}_0$  - Parâmetro;

$\alpha_i$  – Parâmetro;

$\beta$  – Parâmetro;

$\Delta h$  – [L] perda de carga;

$\eta$  – Parâmetro;

$\theta$  – Parâmetro;

$\hat{\theta}$  – Parâmetro estimado;

$\hat{\theta}^*$  – Parâmetro bootstrap estimado;

$\hat{\theta}_{(.)}$  - Parâmetro;

$\hat{\theta}_{(i)}$  - Parâmetro;

$\mu_v$  – [MT<sup>-1</sup>L<sup>-1</sup>] viscosidade do fluido;

$\mu$  – [L<sup>-1</sup>] coeficiente de atenuação linear do material;

$\Phi(\cdot)$  – Função de probabilidade acumulada normal padrão;

# 1 INTRODUÇÃO

Em qualquer campo da atividade humana, os conhecimentos teóricos e práticos devem sempre ser aliados na busca por desenvolvimento. Tal desenvolvimento, entendido de forma geral, pode ter caráter tecnológico, acadêmico, político e até mesmo social. Mais especificamente, no campo acadêmico há que manter-se um fino balanço entre abordagens teóricas e experimentais, de forma a respeitar o rigor científico e produzir conhecimentos novos, realistas e aplicáveis.

Há que destacar-se que o conhecimento de uma área específica pode, a partir de um entendimento amplo do processo envolvido, ser aplicado a outra área radicalmente diferente. Na maioria dos casos, esse tipo de câmbio se verifica quando há a aplicação de novas tecnologias criadas para fins específicos de uma área em outra totalmente desvinculada da primeira. Um exemplo marcante desse tipo de transferência de conhecimento é a aplicação de tomografias em Engenharia Geotécnica.

A ideia de poder visualizar o interior de um volume sem a necessidade de violá-lo remonta ao início do século XX. Na realidade, esse tipo de pensamento não era apenas teórico, mas sim de grande apelo prático para a Medicina. É inegável que o processo de diagnóstico de uma dada doença cujo acometimento é de partes internas se beneficiaria enormemente da visualização que uma tomografia possibilita.

Nesse sentido, o processo de obtenção de tomogramas (imagens resultantes da tomografia) teve suas bases relacionadas a aplicações médicas. Por volta dos anos 1980, no entanto, houve a introdução da ideia de realizar tomografias em solos a fim de estudar sua estrutura e suas propriedades. Essa nova aplicação do conhecimento prévio de outra área que não a geotécnica mostra justamente a versatilidade do conhecimento científico. É importante ressaltar que houve modificações na tecnologia tomográfica para que essa se adequasse à resolução e ao tamanho de amostra requerida na análise de solos.

Por outro lado, a introdução de impressoras 3D no meio científico remonta, assim como a tomografia, a apelos médicos. Nesse caso, as possibilidades de criação de órgãos, próteses e órteses de acordo com as necessidades do paciente se mostram sobremaneira fortuitas. Por meio dessa tecnologia, modelos geométricos computacionais podem ser impressos e utilizados para os mais diversos fins, não só aqueles ligados à Medicina e à Engenharia Biomédica.

No presente trabalho, propõe-se a combinação das técnicas de tomografia computadorizada e impressão 3D para o estudo da estrutura geométrica do meio poroso. Para a modelagem computacional do meio poroso, serão utilizados os autômatos celulares 3D.

Conforme especificado, a impressão 3D é precedida por um modelo geométrico computacional. Tal modelo será gerado por meio de autômatos celulares 3D, que são entidades computacionais de fácil geração e entendimento.

Além de tratar da modelagem da matriz porosa como um autômato celular 3D, vai-se buscar validar a utilização de impressões 3D como ferramenta de pesquisa em Engenharia Geotécnica. Além disso, vai-se discutir o papel das impressões 3D como metodologia de validação experimental de rotinas numéricas.

## **1.1 OBJETIVOS DA PESQUISA**

A pesquisa tem como objetivo geral analisar e entender a representação geométrica da estrutura de um meio poroso por meio da aliança entre microtomografias, autômatos celulares e impressões 3D.

Com relação aos objetivos específicos propõe-se:

- Promover um estudo detalhado da utilização de microtomografias computadorizadas como fonte de obtenção de parâmetros de transporte de um dado meio poroso. Em um primeiro momento, buscar-se-á dimensionar o volume representativo que deve ser considerado para análise de propriedades de interesse a partir de simulações na escala de poros.
- Avaliar o efeito da resolução da imagem obtida por meio da tomografia na quantificação de propriedades de interesse.
- Elaborar um estudo completo dos autômatos celulares 3D, analisando suas propriedades físico-geométricas.
- Avaliar a possibilidade de representação do meio poroso como um autômato celular 3D.
- Avaliar a eficácia do processo de impressão 3D como gerador de meios porosos artificiais que emulam os meios porosos reais.

## **1.2 ESCOPO DA TESE**

A fim de desenvolver os objetivos descritos, a presente tese está estruturada em cinco capítulos. O primeiro capítulo trata da introdução e objetivos do trabalho. O

segundo capítulo mostra a revisão bibliográfica da literatura pertinente à presente tese de doutorado. Por outro lado, o terceiro capítulo contempla os materiais e métodos que foram utilizados a fim de alcançar os objetivos propostos para a pesquisa. Subsequentemente, o quarto capítulo contém os resultados e discussões a eles concernentes. Por fim, o quinto capítulo traz as conclusões dessa tese além sugestões de trabalhos futuros.

Além dos capítulos acima descritos, o Apêndice A trata de um catálogo de regras de autômatos celulares as quais foram consideradas de interesse para a presente tese. O catálogo contém informações sobre permeabilidade e porosidade dos autômatos 3D considerados.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 A TOMOGRAFIA

A capacidade de observar o interior de objetos opacos a luz sem a necessidade de abri-los ou violá-los é sem dúvidas intrigante. Em alguns casos, curiosidade pode ser o motivo que leva a questionamentos relacionados à capacidade citada, no entanto, em outras situações, há a necessidade real de observação e é impossível abrir os objetos sob análise. Surge então o questionamento: o que fazer nessas situações?

Por volta dos anos 1900, vários cientistas do mundo todo se fizeram essa mesma pergunta e, em alguns casos, conseguiram respostas promissoras. O primeiro problema a ser discutido era como atravessar o volume de interesse sem que o mesmo se modificasse. Para resolver essa questão, um tipo de radiação recentemente descoberta entra em cena: os raios X.

Em 8 de novembro de 1895, o físico Wilhelm Conrad Röntgen relata a descoberta de um novo tipo de radiação por ela denominada de raio X (Michette & Pfauntsch, 1996). Röntgen não o considerou uma mera descoberta, mas sim se dedicou integralmente ao estudo das propriedades físicas desse novo tipo de radiação (Hennig, 1995). Ao final de 1895, Röntgen publica o artigo “Über eine neue Art von Strahlen” (de tradução livre: Sobre um novo tipo de raios) no *Sitzungsberichte der Würzburger Physikalischen-Medicinischen Gesellschaft* (Glusker, 1995). Devido ao conteúdo ímpar, esse artigo foi rapidamente traduzido e publicado em revistas de grande circulação mundial (Röntgen, 1896 e 1898; Glusker, 1995).

No referido artigo, Röntgen mostra que grande parte dos materiais que estudou se mostraram permeáveis a esse novo tipo de raio, tendo incluído em seu artigo estudos detalhados e figuras que mostravam mãos humanas submetida aos raios X. Conforme mostra a Figura 2.1, é clara a estrutura óssea da mão (Röntgen, 1896 e 1898), indicando assim a possibilidade de visualização intra-volumétrica.

Estava, pois, sanado o questionamento de como visualizar o interior de um objeto sem violá-lo. Outra questão que surge é: seria possível representar tridimensionalmente o volume de interesse em vez de apenas mostrar seu interior por meio de planos?

A geometria analítica fornecia indícios de que tal reconstrução tridimensional seria possível a partir do princípio das projeções. É fato, no entanto, que a partir do

trabalho pioneiro do matemático austríaco Johann Radon, a reconstrução tomográfica se torna realidade. Radon (Radon, 1917 e 1986) mostra matematicamente que uma dada função poderia ser reconstruída a partir de um conjunto infinito de suas projeções por meio da transformada de Radon. Dessa forma, ao adaptar a teoria de Radon foi possível reconstruir tridimensionalmente um dado volume e seu interior sem violá-lo.



Figura 2.1 Fotografia dos ossos dos dedos de uma mão humana viva, mostrando um anel no terceiro dedo (Röntgen, 1896).

A partir do desenvolvimento dos processos acima descritos e dos trabalhos fundamentais de Cormack (1963 e 1964) e Hounsfield (1973) nasce a tomografia computadorizada de raios X. Mais informações sobre os processos históricos envolvidos podem ser consultadas em Herman (2009).

Nesse momento é de interesse definir, de forma geral, o processo de tomografia computadorizada. Assim, entende-se por tomografia computadorizada (TC) o processo de obtenção de múltiplas imagens de seções transversais de um dado volume por meio de um equipamento externo (tomógrafo). Todo o processo é controlado por computador e o consiste na transformação de espectros de transmissão/atenuação de certas radiações em representações geométricas das seções do volume estudado (Herman, 2009).

O princípio de funcionamento da TC é o de que ao passar um feixe de radiação por um dado material, parte dessa radiação é absorvida e parte é difratada. A quantificação desses efeitos é possível ao posicionar receptores de radiação em posição capaz de captar a parcela transmitida daquela (Herman, 2009 e Zubeldia, 2013).

Questões como densidade e tipo de material são importantes na análise da forma e frequência com que tal radiação modifica seu trajeto ao passar pelo corpo em questão. Há na literatura um grande número de documentos que trata da interação entre a radiação e a matéria. Sugere-se a leitura de Wang et al. (1975) e Knoll (2010). De maneira geral, considere a Figura 2.2.

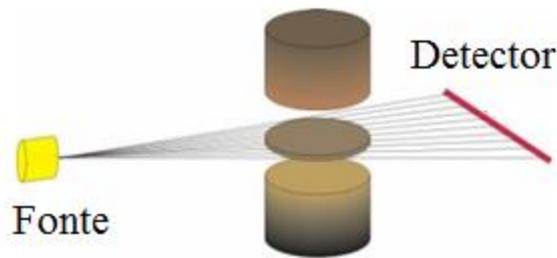


Figura 2.2 Esquema de funcionamento básico de um tomógrafo (Naime, 2001).

Considere que uma dada fonte, conforme mostrado na Figura 2. 1, irradia uma dada intensidade  $I_0$  de feixes de radiação. Após a passagem por uma amostra de comprimento  $x$ , detecta-se uma intensidade emergente de feixes  $I$ . Assim, o comportamento da radiação pode ser matematicamente descrito por meio da Lei de Lambert-Beer (Lambert, 1760 e Beer, 1852):

$$I = I_0 \exp(-\mu x) \quad (2.1)$$

em que  $\mu$  é o coeficiente de atenuação linear do material.

Para que se possam combinar diversas projeções do interior do volume de interesse e, conseqüentemente, gerar uma representação 3D desse, as projeções são obtidas em várias posições angulares em geral igualmente espaçadas até completar  $360^\circ$  de varredura. O processo de reconstrução contempla o cálculo dos valores do coeficiente de atenuação linear ( $\mu$ ) para cada ponto do plano tomográfico e uma imagem pode ser associada a estes valores distribuídos em uma escala de cinzas ou de cores (Naime, 2001 e Zubeldia, 2013).

Subseqüentemente, algoritmos de reconstrução são utilizados para obter uma série de imagens 2D das seções transversais ao longo do eixo axial da amostra as quais serão empregadas na reconstrução da estrutura interna do objeto em 3D. Para mais

detalhes do processo de reconstrução e algoritmos pertinentes, indica-se a leitura de Naime (2001), Herman (2009) e Matrecano (2011).

É interessante notar, no entanto, que no presente trabalho serão utilizados um tomógrafo e um microtomógrafo haja vista ser esse mais adequado à resolução necessária para aplicações em mecânica dos solos e aquele aos estudos de metrologia a serem desenvolvidos. Encontra-se na próxima seção uma breve descrição dos equipamentos microtomográficos.

### **2.1.1 A MICROTOMOGRÁFIA**

Por definição, microtomografia computadorizada (Micro-CT) é o processo de aquisição de imagens tomográficas com auxílio de computador cuja resolução é maior que 50 microns (Stock, 2008). Os trabalhos pioneiros no desenvolvimento de equipamentos capazes de produzir imagens com a referida resolução baseiam-se nos estudos de Jim Elliot (Elliot & Dover, 1982).

A maioria dos trabalhos iniciais em que técnicas tomográficas foram aplicadas às ciências dos solos contemplava a utilização de equipamentos médicos de TC (Vaz et al., 2011). Esses equipamentos, no entanto, se mostram limitados quando o material analisado é uma matriz porosa natural (por exemplo, solos, rochas e ossos), principalmente no que diz respeito à máxima resolução suportada, que é de cerca de 200 microns (Lontoc-Roy et al., 2006; Jassogne et al., 2007; Sander et al., 2008; Udawatta & Anderson, 2008). Além disso, a natureza policromática dos raios X utilizados nesse tipo de tomógrafo também gera problemas (Vaz et al., 2011).

A natureza nociva da radiação de raios X é um empecilho considerável quando a amostra a ser estudada é viva. No caso da Geotecnia, no entanto, como a princípio a amostra é não-viva, fatores como tempo de exposição da amostra à radiação não são problemas sérios. Além disso, a estacionariedade da amostra também é um fator positivo haja vista correções de posicionamento não se fazerem necessárias (Zubeldia, 2013).

Considerando todas as diferenças entre as amostras médicas e aquelas utilizadas nas ciências dos solos, equipamentos de tomografia foram modificados e deram origem aos microtomógrafos, com resoluções da ordem de 1 micron. Para casos mais específicos, em que resoluções maiores se fazem necessárias, já se encontram

disponíveis nanotomógrafos. É evidente, no entanto, que o aumento de resolução traz consigo uma diminuição do tamanho de amostra escaneado (Vaz et al., 2011).

A partir dessa breve introdução sobre as técnicas tomográficas, é interessante discutir em maior detalhe a aplicação dessas em ciências dos solos.

### **2.1.2 A MICROTOMOGRAFIA APLICADA ÀS CIÊNCIAS DOS SOLOS**

Os trabalhos pioneiros de TC aplicados à ciência do solo foram desenvolvidos por Petrovic et al. (1982), Hainsworth & Aylmore (1983) e Crestana et al. (1985). O estudo de Petrovic et al. (1982) descreveram a TC como metodologia de medição da massa específica global de um dado solo. Por outro lado, Hainsworth & Aylmore (1983) valeram-se das técnicas tomográficas para estudar a distribuição espacial da água dentro de uma amostra de solo. Crestana et al. (1985), por sua vez, demonstraram que é possível utilizar esta técnica para medir a umidade do solo e o movimento da água neste meio (em três dimensões) além de calibrarem o tomógrafo em termos de massa específica e umidade em função de unidades Hounsfield (Naime, 2001).

Ainda, cabe dar destaque ao trabalho de Macedo (1997) em que um microtomógrafo de primeira geração foi construído e utilizado em diversas análises em ciências do solo e do ambiente. Em relação às contribuições brasileiras na área de tomografias em ciências do solo, o trabalho de Pires et al. (2010) traz um breve panorama.

As aplicações em áreas correlatas à Engenharia Civil e à Engenharia Geotécnica têm aumentado e evoluído nos últimos anos. Há basicamente duas abordagens de análise dos tomogramas obtidos. A primeira contempla a obtenção de parâmetros geométricos do meio poroso a partir da análise das imagens obtidas. Nesse caso, formato e distribuição de tamanho de poros além de cálculos de densidade são feitos. A segunda abordagem é aquela em que as imagens são utilizadas no cálculo de parâmetros físicos que representam o comportamento da amostra quando submetida a algum fenômeno físico. Por exemplo, há a possibilidade de utilizar o volume reconstruído como domínio para simulação de fluxo de fluidos dentro da amostra. No presente trabalho ambas as abordagens serão consideradas. As próximas subseções tratam de parte da bibliografia relevante.

### **2.1.2.1 A MICROTOMOGRAFIA COMO FONTE DE PARÂMETROS GEOMÉTRICOS DA AMOSTRA**

Conforme discutido anteriormente, diversos estudos já foram feitos ao considerar a tomografia como fonte de parâmetros geométricos da amostra ensaiada. Em relação às aplicações em hidrologia, Wildenschild et al. (2002) discutem os avanços das técnicas tomográficas e da teoria matemática correspondente utilizadas na caracterização de fases do fluxo em meio poroso. Além disso, Wildenschild et al. (2002) também tratam da caracterização da geometria dos poros. Vários aspectos são levados em consideração por Wildenschild et al. (2002) ao considerarem tipos diferentes de tomógrafos, amostras de vários tamanhos além de resoluções e contrastes distintos.

Em relação às aplicações nas áreas geológico-geotécnicas, Ketcham & Iturrino (2005) discutem a aplicação de tomografias computadorizadas de raio X na quantificação do campo de porosidade efetiva de amostras mineralogicamente complexas. As resoluções reportadas por Ketcham & Iturrino (2005) variam de 5 a 100 microns. Como principais resultados dos estudos de Ketcham & Iturrino (2005) estão a possibilidade de determinar anisotropias do meio e conseqüentemente do fluxo que ali pode ocorrer, assim como determinar a relação da porosidade com a evolução mineralógica do maciço.

Kuang et al. (2011) estudam a aplicação de tomografias de raios X na obtenção de parâmetros de interesse no projeto de pavimentos. Por meio das imagens adquiridas, Kuang et al. (2011) obtêm parâmetros como porosidade total, porosidade efetiva, tortuosidade e distribuição de tamanho de poros. Posteriormente, a partir dos parâmetros medidos e por meio de fórmulas empíricas, Kuang et al. (2011) estudam a estimação da permeabilidade do pavimento em estudo.

Badrul Alam et al. (2014), por sua vez, aplicaram a técnica de tomografia computadorizada de raio X para o estudo do efeito da pressão confinante na permeabilidade de três tipos de rochas sob compressão. Nesse estudo, a tomografia foi aplicada para quantificar as mudanças estruturais sofridas pelas amostras durante os ciclos de compressão. Por outro lado, Cai et al. (2014) estudaram a evolução de permeabilidade em amostras de carvão fraturado. Por meio da combinação de confinamento triaxial, TC de raio X, emissão acústica e técnicas ultrassônicas, Cai et al. (2014) determinaram a rede de fraturas 3D durante a aplicação de cargas até que houvesse falha das amostras.

É interessante notar, no entanto, que nas aplicações acima descritas apenas parâmetros geométricos são obtidos de forma direta dos tomogramas obtidos. Ou seja, os produtos da aplicação da TC são analisados para cálculo de porosidades, distribuição de poros, tortuosidades etc; parâmetros esses de natureza estritamente geométrica. É fato que em alguns casos fórmulas empíricas são utilizadas para relacionar tais parâmetros a outros que governam o transporte de fluidos na matriz porosa, no entanto, nenhuma aferição direta dos últimos é realizada. A próxima subseção trata do cálculo direto de parâmetros físicos a partir das tomografias.

### **2.1.2.2 A MICROTOMOGRÁFIA COMO FONTE DE PARÂMETROS FÍSICOS DA AMOSTRA**

A partir dos avanços dos métodos numéricos, domínios cada vez mais complexos podem ser usados na solução de equações que governam os mais diversos fenômenos. No caso em estudo, as equações de Navier-Stokes são aquelas que formulam o comportamento de fluidos quando em movimento pela rede porosa de um dado material.

A natureza não-linear da forma mais geral das equações de Navier-Stokes impossibilita, na grande maioria dos casos, a obtenção de soluções exatas para as mesmas. É necessário então que algumas simplificações sejam feitas, de forma a tornar o processo de solução mais acessível. Deve-se notar, no entanto, que para as equações de Navier-Stokes descritas em sua forma mais geral, não há ainda prova da existência e suavidade de soluções. Configura-se esse como um dos problemas do milênio, segundo o Instituto Clay.

Para o caso do fluxo em meio poroso, algumas simplificações são interessantes do ponto de vista de solução além de serem fisicamente justificáveis. Em especial, considere as seguintes suposições: o fluido que percola o meio poroso é tido como incompressível, ou seja, tem densidade constante; o fluido percolante é também newtoniano, ou seja, tem viscosidade dinâmica constante; o fluxo considerado é desenvolvido e permanente, portanto as grandezas que o caracterizam não variam com o tempo; o escoamento é do tipo laminar (número de Reynolds baixo), ou seja, as velocidades de interesse são baixas não havendo turbulência.

Ao considerar o conjunto de suposições acima descritas, as equações gerais de Navier-Stokes simplificam para as equações de Stokes. Considerando a inexistência de

forças de corpo aplicadas, as equações de Stokes podem ser matematicamente descritas por (Kim & Karrila, 2005):

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = 0 \\ \mu_v \nabla^2 u - \nabla p = 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

em que  $p$  é a pressão,  $\mu_v$  é a viscosidade do fluido simulado e  $u$  é a sua velocidade.

Quando um domínio simples se apresenta, há na literatura soluções analíticas para a Eq. 2.2. Por outro lado, quando se considera um domínio complexo como o solo, soluções numéricas se fazem necessárias.

Atualmente, uma grande variedade de métodos numéricos foi utilizada para resolver não apenas as equações de Stokes, mas também as equações mais gerais de Navier-Stokes. Dentre os métodos mais utilizados estão o método dos elementos finitos (Shang, 2013 e Wen & He, 2014), o método das diferenças finitas (Svärd et al., 2008 e Luo et al., 2013), o método dos volumes finitos (He et al., 2008 e Zhang & Yang, 2014), o método de lattice-Boltzmann (Zhu & Ma, 2013 e Gao et al., 2014) e o método de lattice-gas automata (Chen et al., 1991 e McCarthy, 1994).

Ainda que os métodos de solução acima citados já tenham tido sua aplicação verificada por diversos pesquisadores, tais métodos pertencem a classes distintas. Elementos finitos, diferenças finitas e volumes finitos pertencem à classe denominada *top-down*, em que a partir da equação que rege o fenômeno (Navier-Stokes), aproximações numéricas são derivadas e geram as soluções. Por outro lado, lattice Boltzmann e lattice-gas automata são métodos do tipo *bottom-up* em que um universo de micropartículas fictícias fisicamente consistentes são estudadas e mostram comportamentos macroscópicos semelhantes àqueles regidos pelas equações de Navier-Stokes (Succi, 2001 e Wolf-Gladrow, 2000).

A partir das soluções encontradas pelos métodos numéricos citados, o campo de velocidades do fluido percolante pode ser encontrado. Por meio de outras equações, campos auxiliares como de pressão podem ser encontrados. É comum, então, que leis constitutivas sejam utilizadas a fim de obter parâmetros que caracterizam o meio poroso.

No caso do fluxo, a lei constitutiva que matematiza a perda de carga do fluido ao passar por uma dada porção de um meio é a Lei de Darcy. Essa pode ser matematicamente expressa por (Darcy, 1856):

$$u_d = \frac{K}{\mu_v} \nabla p \quad (2.3)$$

em que  $u_d$  é a velocidade de Darcy e  $K$  é a permeabilidade intrínseca do meio.

A velocidade de Darcy tem relação com a velocidade real do fluido. Na verdade, essa leva em conta a porosidade haja vista não estar todo o volume percolado disponível para fluxo. É interessante notar que a equação de Darcy foi originalmente proposta de maneira empírica, no entanto, posteriormente reconheceu-se sua derivação analítica a partir de fundamentos teóricos consistentes.

Assim, por meio da solução da Eq. 2.2, obtêm-se os campos de velocidades e pressões no meio poroso. Por outro lado, a partir de tais campos e da Eq. 2.3 pode-se obter o valor da permeabilidade intrínseca do meio poroso em questão. Essa será a abordagem utilizada na presente tese. Logo, por meio de um algoritmo de volumes finitos, a extensão XLab do Software Avizo Fire ® permite calcular a permeabilidade intrínseca de um meio poroso representado por uma imagem (ou conjunto de imagens).

Esse tipo de abordagem já foi utilizado largamente nas ciências que lidam com meios porosos. Petrasch et al. (2008) realizam tomografias de um meio poroso cerâmico e a partir dos tomogramas gerados, calculam propriedades como porosidade, superfície interfacial específica, distribuição de poros dentre outros parâmetros geométricos. Além disso, Petrasch et al. (2008) utilizam a representação tridimensional do meio poroso gerada pela tomografia para calcular a permeabilidade desse. Os cálculos são feitos por meio da rotina de volumes finitos ANSYS-CFX (Ansys, 2006) a partir do uso da tomografia como domínio computacional.

Papafotiou et al. (2008), por outro lado, realizam experimentos laboratoriais e simulações 3D a fim de comparar a eficácia de rotinas numéricas na previsão de propriedades do meio poroso. Para a simulação em escala de poros dentro do domínio obtido por meio de tomografia, os autores se valem do método lattice-Boltzmann. Usando uma abordagem semelhante, a partir de tomografias e do método de lattice-Boltzmann, Menon et al. (2011) avaliam a permeabilidade de crostas biológicas de solo. Menon et al. (2011) ressaltam que essa combinação de técnicas é fundamental para a avaliação das propriedades hidráulicas desse tipo de material, cuja fragilidade representa uma grande barreira a métodos laboratoriais convencionais de determinação de permeabilidade.

Yang et al. (2012) estudaram as propriedades de minérios por meio da aliança entre tomografia de raios X e simulações de fluxo dentro volume gerado por aquela. Nesse caso, os autores se valeram da rotina de elementos finitos do software COMSOL Multiphysics para o cálculo do campo de velocidades e pressões dentro do meio poroso tomografado. Por outro lado, Peng et al. (2012 e 2014) estudaram os efeitos da resolução da tomografia no cômputo de permeabilidade e parâmetros geométricos de amostras de arenito Berea.

É importante ressaltar que, salvo dito contrário, quando a palavra permeabilidade for utilizada, estará sendo dada a conotação de permeabilidade intrínseca e não permeabilidade de engenharia. Optou-se por tratar de permeabilidade intrínseca pois essa depende apenas do meio poroso, enquanto aquela depende também do fluido percolante.

Como mostrado, a aliança entre tomografias e simulações na escala de poros já se mostra uma alternativa altamente discutida no meio científico, principalmente no que diz respeito à obtenção de parâmetros de transporte do meio poroso analisado. É interessante notar, no entanto, que cada meio poroso deve ser tomografado a fim de que se obtenham suas propriedades. Seria, pois, interessante vislumbrar modelos computacionais de meio poroso para os quais já se saberia de antemão os valores de parâmetros de interesse. É com esse pensamento que surge a ideia de utilização de meios porosos artificiais como domínio de simulação.

## **2.2 A GERAÇÃO DE MEIOS POROSOS ARTIFICIAIS**

Conforme discutido anteriormente, em qualquer simulação numérica deve-se utilizar um domínio. Esse é, em outras palavras, o espaço dentro do meio poroso no qual será permitido o fluxo de um dado fluido a ser considerado. Em especial, para simulações em que se pretende simular o fluxo em escala de poros, a escolha do domínio é de fundamental importância.

O domínio que mais se aproxima do meio poroso real é, sem dúvidas, aquele oriundo de tomografias computadorizadas. É fato, no entanto, que esse processo de aquisição de imagens pode não ser de simples execução. Por exemplo, no caso de solos, para que se possa representar fielmente o meio poroso, amostras indeformadas têm de ser extraídas. Dependendo da profundidade estudada e características do solo da região,

essa extração é sobremaneira custosa e potencialmente pouco eficiente (Zubeldia, 2013).

Outro fator que impossibilita o uso de tomografias em simulações de larga escala é o *trade off* entre resolução e tamanho de amostra. Sabe-se que ao aumentar a resolução de aquisição de imagens, em geral incorrer-se-á em uma diminuição do volume total escaneado (a depender do fluxo de energia). Ao considerar, por outro lado, meios porosos artificiais cuja estrutura se assemelhe à do solo, simulações em domínios maiores podem ser alcançadas sem maiores problemas.

Várias técnicas foram utilizadas na geração de meios porosos artificiais. A mais comum é a distribuição de figuras geométricas (ou sólidos geométricos) em uma dada área até que certa porosidade alvo seja atingida. Dentre as figuras mais utilizadas estão círculos e quadriláteros (para geração de meios 2D) e as esferas e cilindros (no caso 3D).

Em relação à geração de meios porosos bidimensionais, Rappoldt & Crawford (1999) se valeram da teoria dos fractais para a geração de meios porosos. Por outro lado, Sukop & Or (2003) utilizaram quadrados e círculos de tamanhos diversos para geração de meios porosos. Nabovati & Souza (2007) utilizaram um arranjo de retângulos para a construção de um meio poroso artificial. Ainda, Bandman (2011) e Zubeldia (2013) utilizaram os autômatos celulares bidimensionais na geração de um meio poroso artificial. A Figura 2.3 ilustra os meios porosos gerados pelos autores citados acima.

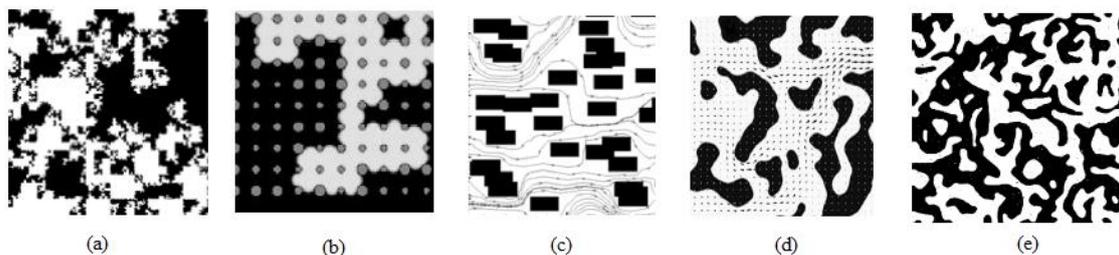


Figura 2.3 Meios porosos artificiais 2D gerados: (a) Rappoldt & Crawford (1999); (b) Sukop & Or (2003); (c) Nabovati & Souza (2007); (d) Bandman (2011) e (e) Zubeldia (2013).

Há que destacar-se também o trabalho de Posadas e Crestana (1993), Posadas (1994) e Onody et al. (1995) em que geometria fractal e a teoria de percolação por invasão foram utilizadas no estudo de meios porosos artificiais.

Em relação a meios porosos tridimensionais, Blöcher & Zimmermann (2008) utilizam o algoritmo Settle3D (desenvolvido pelos autores referidos) para gerar meios porosos por meio da distribuição de esferas, esferóides e prismóides em um dado volume 3D. Por outro lado, Meng et al. (2012) utilizam um algoritmo próprio para distribuir esfero-cilindros e gerar um meio poroso. Bertei et al. (2014) geram um meio poroso artificial por meio da disposição de cilindros. A Figura 2.4 mostra os meios porosos gerados pelos autores citados.

Os trabalhos de Bandman (2011) e Zubeldia (2013) mostram que a utilização de autômatos celulares é eficaz na representação do meio poroso. Além das motivações de caráter funcional (facilidade de geração do meio poroso autômato celular, por exemplo), os autômatos celulares têm sido largamente empregados no estudo de sistemas naturalmente caóticos. As capacidades de auto-organização, propagação e estruturação que esse tipo de sistema computacional apresenta o torna de interesse para a modelagem do meio poroso. Evidente, pois, que a escolha dos autômatos celulares passa não apenas por termos de ordem prática, mas também de fundamentação física, conforme discute Wolfram (2002).

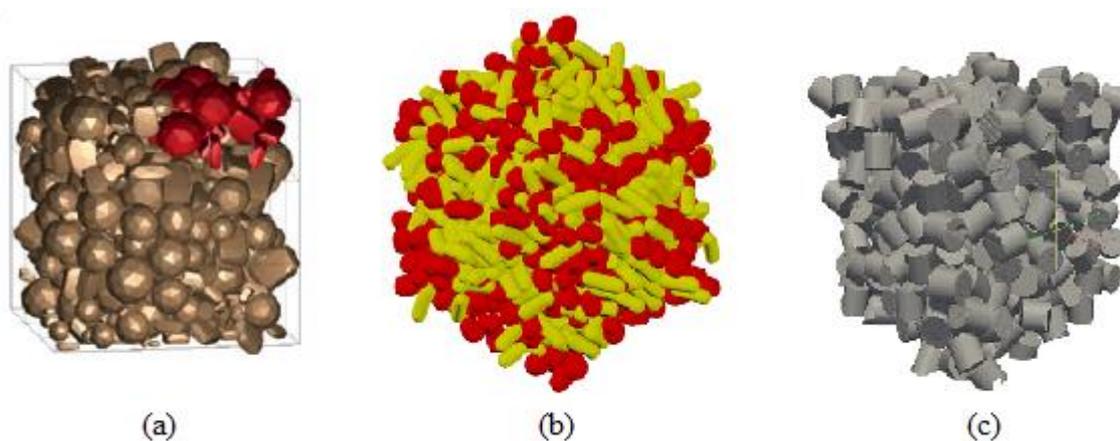


Figura 2.4 Meios porosos artificiais 3D gerados: (a) Blöcher & Zimmermann (2008); (b) Meng et al. (2012) e (c) Bertei et al. (2014).

Assim, considera-se nessa tese a utilização de autômatos celulares 3D para a representação matemática do meio poroso.

O ponto chave na correlação entre meios porosos reais e artificiais é a caracterização de suas propriedades de maneira representativa, ou seja, ainda que se

considere apenas uma pequena parcela dos meios comparados, essa parcela deve ter propriedades semelhantes ao todo. Esse tópico é tratado na subseção seguinte.

### **2.2.1 O VOLUME ELEMENTAR REPRESENTATIVO (VER)**

Nessa discussão surge o conceito de volume elementar representativo (VER), definido como o mínimo volume para o qual a ideia do meio poroso contínuo é ainda válida (Bear, 1988). Visto sob outro prisma, o VER pode ser considerado como o menor volume para o qual uma dada propriedade macroscópica (permeabilidade, por exemplo) é relativamente insensível a pequenas variações de volume ou locação (Corbett et al., 1999).

A determinação experimental do VER tem sido discutida por vários pesquisadores na área de Geologia e Geotecnia. Esse estudo é de fundamental importância para que os modelos matemáticos criados a partir de dados experimentais se mostrem confiáveis na representação do meio poroso.

Em relação aos estudos que tratam da determinação do VER para a porosidade do meio, Clausnitzer & Hopmans (1999) determinaram que o comprimento do VER de um empacotamento de esferas de vidro de diâmetro de 0.5 mm é de cerca de 5.15 vezes esse valor. Em um primeiro momento os autores se valeram de microtomografia para a geração da representação 3D do meio poroso. Subsequentemente, ao considerar subvolumes cúbicos de lado crescentes, a porosidade foi avaliada.

Razavi et al. (2006), por outro lado, analisaram não apenas empacotamento de esferas de vidro, mas também amostras de areais de sílica e de Ottawa. O comprimento do VER para as esferas de vidro é de 2 a 3 vezes o diâmetro médio. No caso das areias de sílica e de Ottawa, o comprimento do VER é de 5-11 e de 9-16 vezes o  $d_{50}$  (mediana de diâmetro), respectivamente. Esses autores relatam que há 3 regiões principais de variação de porosidade com o aumento do VER, quais sejam: (1) região inicial com flutuações de porosidades; (2) região em que a porosidade é constante e (3) região em que há um aumento/diminuição monotônica da porosidade. Razavi et al. (2006) ressaltam que para as amostras de vidro a região (3) descrita não se verifica.

No que tange à determinação do VER para permeabilidade, Haussener et al. (2010) e Zermatten et al. (2011) mostram que não é suficiente considerar o comprimento do VER para porosidade quando a propriedade analisada é a permeabilidade. Em geral, tais autores mostram que o comprimento do VER é maior no

caso de permeabilidades. Para mais detalhes sobre trabalhos progressos na caracterização do VER, consulte Zermatten et al. (2014).

Há duas formas principais utilizadas na determinação do VER, quais sejam: (a) calcular a propriedade de interesse em sub-volumes de tamanho crescente até a mesma se torne constante dada uma tolerância; (b) considerar um tratamento estatístico a partir do qual a variância ou outra medida de dispersão é levada em conta, definindo-se para a última um nível tolerável. É interessante notar que ambas metodologias se adequam à definição do VER, no entanto, como bem argumentam Lake & Srinivasan (2004), a segunda abordagem se mostra mais acertada.

Lake & Srinivasan (2004) argumentam que muito se pensa na análise de escala de uma dada propriedade, no entanto, pouco se fala sobre análise de escala de suas heterogeneidades. Nesse sentido, os autores discutem que a análise de escala deve levar em conta ambos os fatores citados, de forma que só seria possível encontrar valores constantes para um dado parâmetro quando o tamanho do sub-volume considerado excedesse o tamanho correspondente à maior heterogeneidade do meio. Isso se revelaria quase impossível e quando possível, o VER seria desproporcionalmente grande. Lake & Srinivasan (2004) defendem, então, que se deve considerar uma análise estatística dos valores da propriedade, em vez de se buscar uma assíntota.

As ideias expressas em Lake & Srinivasan (2004) suscitam outro questionamento importante: a existência de apenas um VER. Sabe-se que a heterogeneidade do meio não varia de forma suave com a escala, assim, é possível que para um dado nível de heterogeneidade exista um VER e, ao aumentar a escala, esse VER não seja mais suficiente para determinar a propriedade de interesse dada a heterogeneidade adicionada. Esse tópico será discutido posteriormente, figurando como um dos pontos de análise da presente tese. Como discutido, a análise probabilística será utilizada no cômputo dos VER, de forma que uma breve revisão sobre os métodos a serem utilizados se faz necessária.

### **2.3 MÉTODOS PROBABILÍSTICOS APLICADOS**

Conforme discutido na seção anterior, a determinação do VER pode ser feita de forma probabilística. Dessa forma, é pertinente que se discutam alguns métodos a serem utilizados.

Em um primeiro momento, será de interesse no cálculo do VER o estudo das medidas de dispersão. Serão estudadas não apenas estimativas pontuais, mas sim intervalos de confiança para as medidas de interesse.

Há na literatura uma grande variedade de metodologias de determinação do intervalo de confiança de uma medida. Em especial, destacam-se os testes  $z$  e  $t$  para o cálculo do intervalo de confiança da média de uma população. Ambos os testes citados têm em seu arcabouço teórico considerações de normalidade da distribuição ou estatísticas envolvidas. Na grande maioria dos casos, além de considerações relativas ao teorema do limite central, a normalidade é também considerada para as variáveis aleatórias envolvidas.

Para casos mais gerais, a determinação da distribuição da estatística que caracteriza o teste de hipóteses gerador do intervalo de confiança é sobremaneira complexa, sendo em muitos casos analiticamente inviável. Surgem então métodos que não têm a normalidade como pré-requisito essencial. Além disso, novos métodos abordam o problema de maneira distinta, tal que virtualmente qualquer medida pode ter seu intervalo de confiança calculado.

Ainda que a determinação do intervalo de confiança tenha íntima relação com teste de hipóteses, outro teste será considerado na presente tese. O teste cuja hipótese nula é a igualdade de distribuição de duas amostras também será utilizado na determinação do VER.

Para o cálculo do intervalo de confiança, um método de difundida aplicação é o método Bootstrap, a ser tratado na subseção seguinte. Em relação ao teste de igualdade de distribuições de duas amostras, o método Bootstrap também se mostra eficaz, conforme será discutido posteriormente.

### **2.3.1 MÉTODO BOOTSTRAP**

Efron (1979 e 1982) introduziu um método de estimação não paramétrico denominado Bootstrap que permite a estimação do intervalo de confiança de estatísticas de interesse. Em resumo, o método Bootstrap é um método de inferência estatística baseado somente nos dados disponíveis. Conforme discutido, a maior vantagem desse método é que o mesmo não depende de considerações sobre a distribuição das variáveis aleatórias envolvidas.

Ao considerar que a amostra colhida é representativa da população a partir da qual foi retirada e que as observações são independentes e identicamente distribuídas, o método Bootstrap é capaz de estimar a distribuição amostral de uma dada estatística (por exemplo, a média ou variância populacionais).

Considere, pois, uma amostra de tamanho  $n$ ,  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ , retirada de uma dada população. Uma amostra Bootstrap, denotada por  $\{x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*\}$ , é uma amostra de também tamanho  $n$  retirada com reposição da amostra original. Posto de outra forma, a amostragem Bootstrap é equivalente à amostragem com reposição a partir da função de distribuição de probabilidade empírica. Na prática, do total de  $n^n$  possíveis amostras, apenas uma parte é considerada nos cálculos. O procedimento então é simples: para cada amostra Bootstrap calcula-se o valor da estatística de interesse e, ao repetir esse processo um número satisfatório de vezes, obtém-se a distribuição de tal estatística. A essa distribuição empírica dá-se o nome de distribuição Bootstrap da estatística. O número de repetições Bootstrap necessária varia de acordo com a estatística estudada, podendo variar de 500 (no caso de médias) a 1000 (no caso de variâncias) (Efron & Tibshirani, 1993). É comum, no entanto, que se considere cerca de 10000 repetições, haja vista a rapidez e facilidade de implementação desse processo nos computadores atuais. Comparações entre os métodos convencionais e o método Bootstrap podem ser encontradas em Efron & Tibshirani (1993).

Posto de outra forma, considere que para uma dada variável aleatória  $X$ , deseje-se calcular um parâmetro  $\theta$ . O valor estimado desse parâmetro, denominado de  $\hat{\theta}$ , pode ser calculado a partir de uma amostra  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ , de tamanho  $n$ , como:

$$\hat{\theta} = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (2.4)$$

em que  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  é uma função qualquer dos valores obtidos na amostragem inicial. No caso em que  $\hat{\theta}$  é a média,

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n x_i / n \quad (2.5)$$

Por outro lado, quando  $\hat{\theta}$  é o coeficiente de variação, tem-se:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{n \sqrt{\sum_{i=1}^n \left( x_i - \sum_{j=1}^n x_j / n \right)^2}}{\sqrt{n-1} \sum_{j=1}^n x_j} \quad (2.6)$$

Como não apenas a estimativa pontual é de interesse, mas sim seu intervalo de confiança, considere a amostra Bootstrap  $\{x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*\}$ , de tamanho  $n$  retirada com reposição da amostra original. Assim, pode-se calcular o valor  $\hat{\theta}^*$  ao computar  $f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ . A repetição desse processo  $B$  vezes gera uma amostra Bootstrap da forma  $\{\hat{\theta}_1^*, \hat{\theta}_2^*, \dots, \hat{\theta}_B^*\}$ . Por fim, a partir dessa amostra, pode-se calcular o intervalo de confiança para o parâmetro  $\theta$ .

Há várias formas de, a partir da amostra Bootstrap  $\{\hat{\theta}_1^*, \hat{\theta}_2^*, \dots, \hat{\theta}_B^*\}$ , calcular o intervalo de confiança desejado. Para mais informações, consultar Efron & Tibshirani (1993). No caso da presente tese, o método com correção de tendência e aceleração (BCa, que em inglês significa Bias-corrected and Accelerated) será considerado.

### 2.3.1.1 CÁLCULO DO INTERVALO DE CONFIANÇA BCa BOOTSTRAP

Assim, para o método BCa, o intervalo de confiança com cobertura de  $1-2\alpha$  de probabilidade será dado por  $(\hat{\theta}^{*(\alpha_1)}, \hat{\theta}^{*(\alpha_2)})$ , em que (Efron & Tibshirani, 1993):

$$\alpha_1 = \Phi \left( \hat{z}_0 + \frac{\hat{z}_0 + z^{(\alpha)}}{1 - \hat{a}(\hat{z}_0 + z^{(\alpha)})} \right), \quad (2.7)$$

$$\alpha_2 = \Phi \left( \hat{z}_0 + \frac{\hat{z}_0 + z^{(1-\alpha)}}{1 - \hat{a}(\hat{z}_0 + z^{(1-\alpha)})} \right), \quad (2.8)$$

Nas Eqs. 2.7 e 2.8,  $\Phi(\cdot)$  é a função de probabilidade acumulada normal padrão e  $z^{(\alpha)}$  é o  $100\alpha$ -ésimo ponto percentual de uma distribuição normal padrão. Por exemplo,  $z^{(95)} = 1,645$ , enquanto  $\Phi(1,645) = 0,95$ . No caso da definição do intervalo de confiança,  $\hat{\theta}^{*(\alpha_1)}$  denota o  $100\alpha_1$ -ésimo ponto percentual obtido da distribuição empírica Bootstrap gerada (Efron & Tibshirani, 1993).

Os valores de  $\hat{z}_0$  podem ser calculados facilmente a partir das fórmulas abaixo:

$$\hat{z}_0 = \Phi^{-1} \left( \frac{\#\{\hat{\theta}^*(b) < \hat{\theta}\}}{B} \right) \quad (2.9)$$

em que  $\Phi^{-1}(\cdot) = z^{(\cdot)}$  e a representação  $\#\{\hat{\theta}^*(b) < \hat{\theta}\}$  indica o número de medidas dentro da amostra Bootstrap que são menores do que a estimativa pontual inicial (Efron & Tibshirani, 1993).

Por outro lado, há várias formas de calcular o valor de  $\hat{a}$ . A mais comum é por meio dos valores *jackknife* da estatística. Assim, seja  $x_{(i)}$  o conjunto de observações iniciais com a  $i$ -ésima parcela  $x_i$  desconsiderada. Por outro lado, seja  $\hat{\theta}_{(i)} = f(x_{(i)})$ . Define-se então  $\hat{\theta}_{(.)}$  como:

$$\hat{\theta}_{(.)} = \sum_{i=1}^n \hat{\theta}_{(i)} / n \quad (2.10)$$

Dessa forma, o parâmetro  $\hat{a}$  pode ser calculado como (Efron & Tibshirani, 1993):

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{\theta}_{(.)} - \hat{\theta}_{(i)})^3}{6 \left\{ \sum_{i=1}^n (\hat{\theta}_{(.)} - \hat{\theta}_{(i)})^2 \right\}^{3/2}} \quad (2.11)$$

Definido o procedimento de cálculo do intervalo de confiança por meio da metodologia Bootstrap, pode-se considerar a avaliação do teste de hipótese da igualdade de distribuição de duas amostras distintas.

### 2.3.1.2 TESTE DE HIPÓTESES COM O MÉTODO BOOTSTRAP

Quando dois conjuntos de permeabilidades medidas em diferentes escalas são considerados, a grande questão que surge na definição do VER é se ambos os conjuntos podem ser considerados iguais ou diferentes. Considere então o seguinte teste de hipóteses: Seja  $X$  uma população de permeabilidades medidas na escala  $s_1$ , da qual se conhecem  $n$  observações  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ . Por outro lado, seja  $Y$  outra população de permeabilidades medidas na escala  $s_2$ , da qual se conhecem  $n$  observações  $\{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ .

- Hipótese nula: Ambos  $X$  e  $Y$  são iguais, ou seja, têm a mesma distribuição;
- Hipótese alternativa:  $X$  e  $Y$  têm distribuições distintas.

O método Bootstrap fornece uma abordagem interessante à esse problema. Para resolve-lo, Efron & Tibshirani (1993) indicam o seguinte procedimento:

- Como em qualquer teste de hipóteses, deve-se considerar uma estatística a ser testada. Considere então que seja  $t(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n)$  a estatística e denote  $t_{obs} = t(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n)$ ;

- A partir dos dados  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  e  $\{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ , gera-se uma amostra conjunta  $\{x_1, x_2, \dots, x_n, y_1, y_2, \dots, y_n\}$ ;
- A partir da amostra conjunta, deve-se sortear aleatoriamente uma amostra de tamanho  $2n$ . Os primeiros  $n$  valores constituirão a amostra  $\{x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*\}$ , enquanto os  $n$  valores restantes constituirão a amostra  $\{y_1^*, y_2^*, \dots, y_n^*\}$ ;
- Calculam-se então os valores  $t(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*; y_1^*, y_2^*, \dots, y_n^*)$ . Repete-se o processo  $B$  vezes, obtendo-se  $\{t^*_{(1)}, t^*_{(2)}, \dots, t^*_{(B)}\}$ ;
- Como nesse caso deseja-se saber se há a igualdade de distribuições, um teste bilateral pode ser calculado ao assumir, por exemplo, que  $t(\cdot)$  seja a diferença entre as médias (tanto faz diferenças negativas ou positivas). Assim, o valor  $p$  desse teste é dado por:

$$p = \frac{\#\{|t^*_{(b)}| \geq |t_{obs}|\}}{B} \quad (2.12)$$

A partir do valor  $p$  calculado e de um dado nível de confiança estabelecido, pode-se aceitar a hipótese nula ou não.

Definidos os procedimentos de cálculo estatístico de interesse para a presente tese, é interessante tratar dos autômatos celulares 3D, modelos computacionais a serem utilizados na geração do meio poroso artificial.

## 2.4 OS AUTÔMATOS CELULARES 3D

Autômatos celulares, como o próprio nome sugere, são sistemas computacionais baseados na evolução dos estados de entidades denominadas células por meio de regras pré-estabelecidas. Essa evolução se dá de forma uniforme (todas as células são regidas pelas mesmas regras), síncrona (a evolução de um estado para outro se dá pela aplicação de uma dada regra a todas as células ao mesmo tempo) e local (apenas certa vizinhança influencia na evolução de cada célula) (Schiff, 2008).

Para os casos unidimensionais e bidimensionais, recomenda-se a leitura de Wolfram (2002), Schiff (2008), Ozelim et al. (2013a), Ozelim et al. (2013b), Zubeldia (2013) e Ozelim & Cavalcante (2014) a fim de uma explicação mais detalhada. De forma mais direta, no caso 3D, o conjunto de células forma um domínio cuja configuração espacial é na maioria das vezes um espaço cúbico subdividido em cubos menores de mesmo tamanho. A Figura 2.5 ilustra esse conceito.

Estando claro o conceito de domínio celular, é interessante estudar o conceito de vizinhança. Note que, de maneira geral, há dois tipos de vizinhança a serem considerados, quais sejam: vizinhança de Neumann e vizinhança de Moore. Enquanto que na primeira consideram-se vizinhas da célula de referência aquelas que compartilhem arestas com essa, na segunda, todas as células que compartilham arestas e vértices são consideradas vizinhas de uma célula de referência.

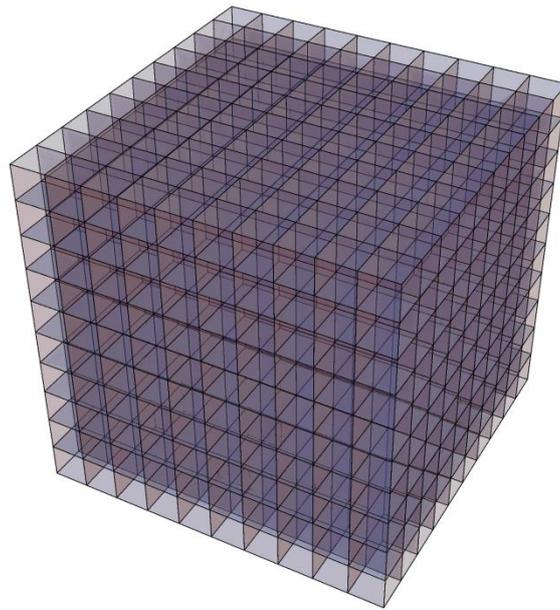


Figura 2.5 Domínio de um autômato celular 3D.

Considere, pois, a Figura 2.6 em que a célula de referência está marcada em vermelho e suas vizinhas estão em destaque.

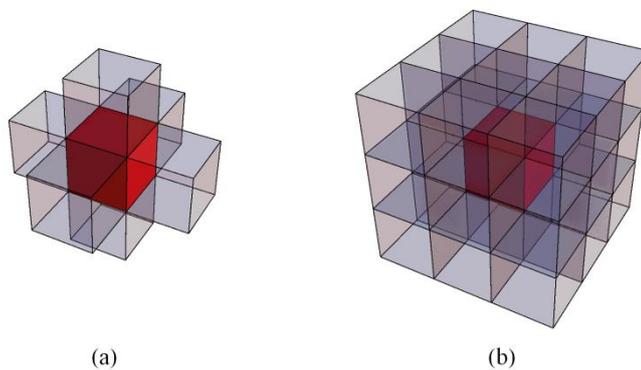


Figura 2.6 Vizinhanças de uma célula: (a) vizinhança de Neumann e (b) vizinhança de Moore.

É pertinente que se defina o conceito de regra de atualização. Para tal, o conceito de estado se faz importante. Cada célula pode ter um conjunto finito de estados, enumeráveis, por exemplo, por números inteiro não negativos. No caso mais simples, considere o caso em que cada célula pode estar ligada ou desligada (1 ou 0).

Cada estado é, então, atualizado de acordo com um conjunto de regras pré-estabelecidas. Por exemplo, considere a seguinte regra de atualização para um célula em um vizinhança de Neumann: se a soma dos valores dos estados das células da vizinhança e da célula de referência for 0 ou ímpar, a célula de referência se torna desligada (valor 0); caso contrário, a célula se torna ligada (valor 1).

Por meio do conjunto de regras acima é possível evoluir um domínio completo. Às regras que são definidas a partir dos valores das somas dos valores das células da vizinhança e da célula de referência dá-se o nome de regras totalísticas (Wolfram, 2002 e Schiff, 2008). Esse tipo de caracterização específica visa limitar o número de regras a serem estudadas.

Por exemplo, para uma vizinhança de Neumann em que há seis vizinhos, um total de  $2^6$  regras são possíveis de serem enunciadas. No caso da vizinhança de Moore, por outro lado, os 26 vizinhos permitem um total de  $2^{26}$  a serem exploradas. Ao considerar apenas as regras totalísticas, os número de regras caem para  $2^8$  e  $2^{28}$ , respectivamente.

O estudo de sistemas como os automatos celulares é experimental, ou seja, é quase impossível saber de antemão como encontrar comportamentos interessantes. Dessa forma, resta avaliar individualmente cada regra na busca de alguma característica que a torne interessante. É de grande valia nessa busca a utilização de um esquema eficaz de numeração de regras. Para tal, considere a abordagem sugerida por Wolfram (2002): o número da regra é dado a partir dos valores de saída da regra. No caso da regra descrita anteriormente, os valores de saída são (00101010). Por meio do correspondente binário dos valores de saída, obtém-se o número da regra. Nesse caso, 00101010 em binário corresponde a 84 em decimal. A regra descrita é, então, a regra 84.

Na presente tese vão ser estudadas as regras totalísticas com vizinhança de Neumann. Assim, toda e qualquer referência a autômatos celulares a partir desse ponto deverão ser entendidas como relativas a esse tipo de autômato.

Um questionamento surgente a essa altura é: o que acontece com as células do canto, para as quais as vizinhanças não estão dentro do domínio. Nesse caso, há que se fixar as condições de fronteira. A mais comum é a condição de *wrap-around*, ou seja, busca-se na fronteira oposta o valor faltante. A Figura 2.7 ilustra esse princípio.

Ainda que a Figura 2.7 mostre apenas um dos casos de *wrap-around*, para os outros pontos em que há “falta” de células no domínio o pensamento é similar.

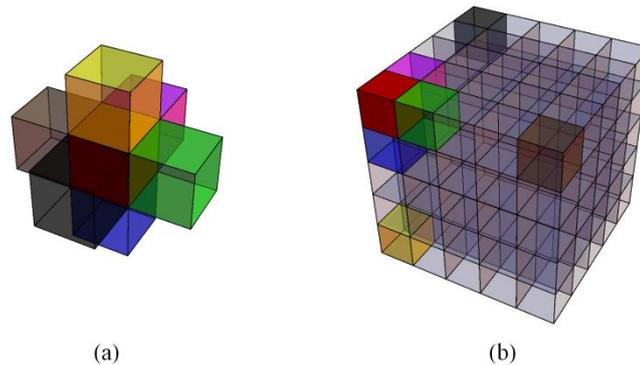


Figura 2.7 Condições de fronteira do tipo *wrap-around*: (a) vizinhança normal e (b) vizinhança com condição de fronteira do tipo *wrap-around*.

Deve-se então indagar-se em que estado se encontram as células antes da primeira atualização, ou seja, qual a configuração inicial de um autômato 3D. Essa configuração é escolhida pelo usuário, podendo ser uma simples célula ligada e todo o domínio desligado ou até mesmo uma condição inicial randômica com uma certa taxa de ocupação (quantidades de 1s/tamanho do domínio).

Conforme discutido anteriormente, há regras em que comportamentos pouco interessantes se desenvolvem. Esse é o caso, por exemplo da regra 200. Para uma condição inicial randômica de 0s e 1s, com probabilidade de 0.5 de escolha de cada um ( $p_1 = p_0 = 0,5$ ), a Figura 2.8 mostra a evolução da regra 200. É notável que essa regra tende a aniquilar a grande maioria dos 1s presentes no domínio, restando apenas uma configuração de equilíbrio. Não há grande interesse na análise dessa regra.

Considere, por outro lado a regra 23 com um configuração inicial randômica de 1s e 0s com probabilidade 0.2 de escolher 1s. A Figura 2.9 mostra essa situação.

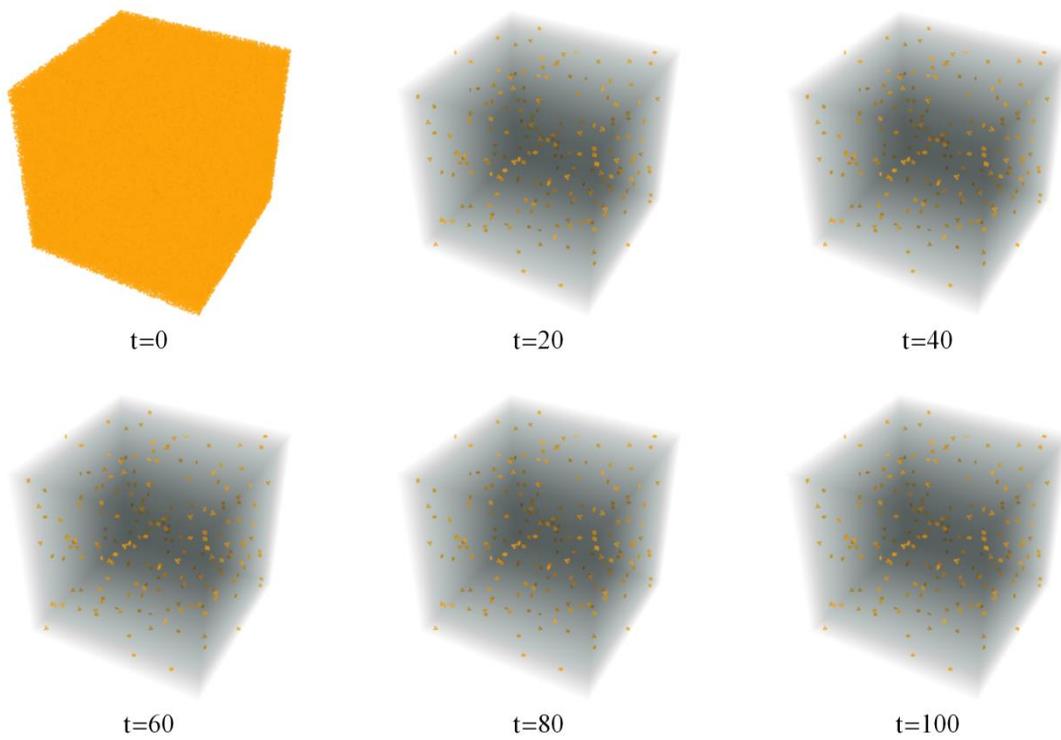


Figura 2.8 Evolução da regra 200 com condição inicial randômica de 1s e 0s ( $p_1=0,5$ ).

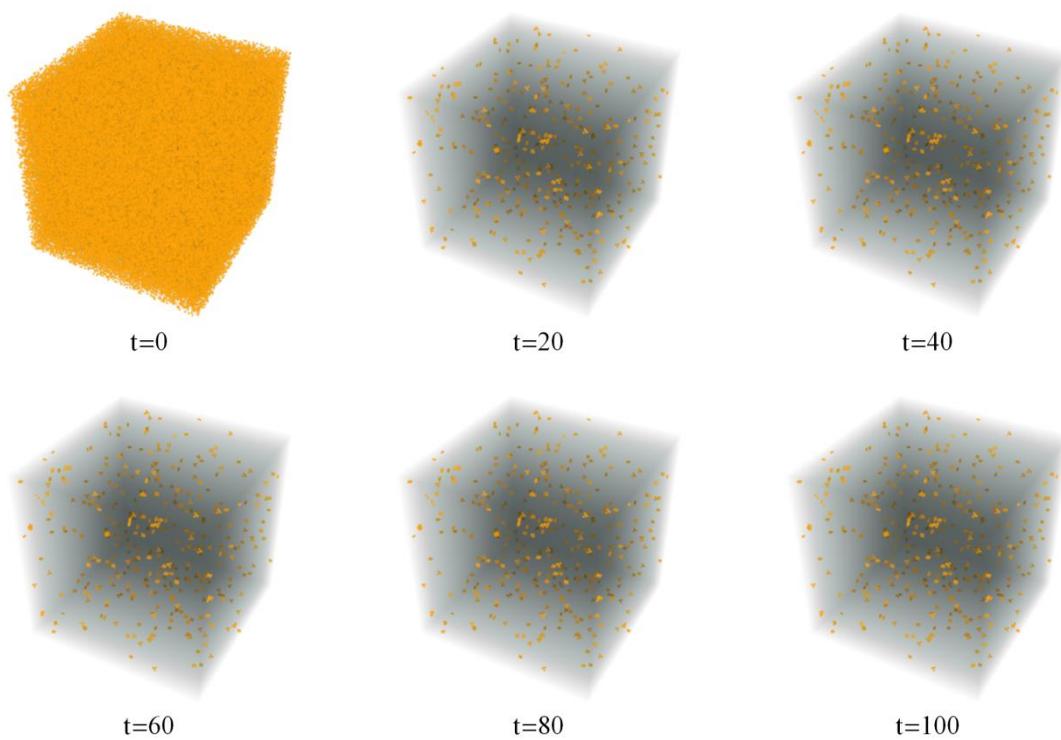


Figura 2.9 Evolução da regra 23 com condição inicial randômica de 1s e 0s ( $p_1=0,2$ ).

Assim como no caso da regra 200 com  $p_1=0,5$  mostrada, com  $p_1=0,2$  a regra 23 não mostra nenhum comportamento de interesse. Considere, por outro lado, a Figura 2.10. Nesse caso, quando ainda com a regra 23 se considera uma condição inicial com  $p_1=0.5$ , um comportamento muito interessante emerge.

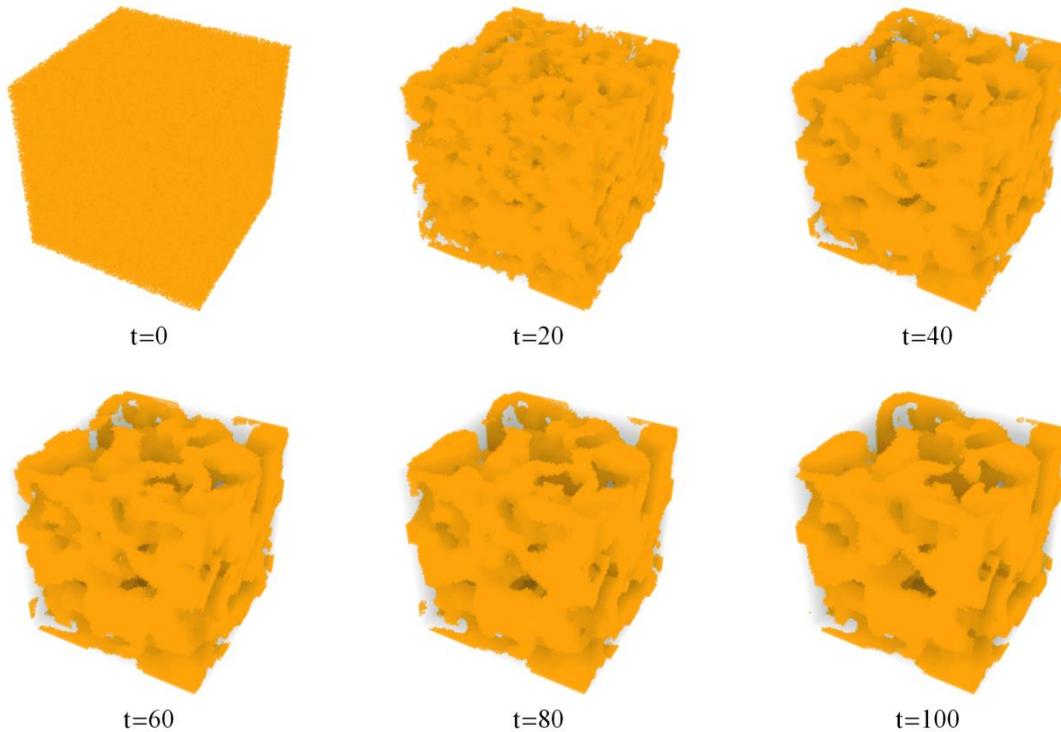


Figura 2.10 Evolução da regra 23 com condição inicial randômica de 1s e 0s ( $p_1=0,5$ ).

Além de, na média, manter o mesmo número de 1s e 0s, a evolução da regra 23 mostra que as células com valores 1 se organizam segundo uma formação sobremaneira similar a meios porosos naturais. Esse tipo de regra será considerado na modelagem artificial do meio poroso no presente estudo

A partir dessa breve introdução sobre os autômatos celulares 3D é interessante que se discuta os processos de impressão 3D, cuja importância para essa tese é singular.

## 2.5 IMPRESSÕES 3D

Conforme discutido na introdução, os processos e técnicas de impressão 3D têm origem nos trabalhos médicos. Por outro lado, a aplicação de conhecimentos de outras áreas da ciência em Geotecnia já se mostrou altamente eficaz, como no caso da tomografia.

Por definição, impressão 3D é o processo pelo qual certo modelo computacional é transformado em um sólido real por meio de uma grande variedade de técnicas. Dentre as mais comuns estão a deposição de filamento plástico derretido (em inglês fused deposition modelling, FDM) e a utilização de sinterização por laser (laser sintering em Inglês) (Otten et al., 2012 e Rangel et al., 2013).

Em relação às aplicações em mecânica dos solos, Otten et al. (2012) utilizam as técnicas de impressão 3D para a geração de meios porosos que servem de substrato para o crescimento de fungos. Os autores usam tomografias para gerar o meio poroso semelhante ao solo, conforme ilustra a Figura 2.11.



Figura 2.11 Microcosmo para crescimento de fungos obtidos por impressão 3D (Otten et al., 2012)

Por outro lado, Rangel et al. (2013) utilizam a impressão 3D para a criação de equipamentos de uso geotécnico. Os autores criaram um permeâmetro a partir da impressão de um modelo computacional por eles concebido. Além da impressão 3D, os autores utilizam peças plásticas e metálicas na constituição do equipamento. A Figura 2.12 mostra o permeâmetro construído.

No caso da presente tese a técnica de sinterização por laser será utilizada, logo, mais ênfase será dada a mesma. Dessa forma, os principais conceitos concernentes a esse tipo de técnica de impressão são mostrados na próxima subseção.

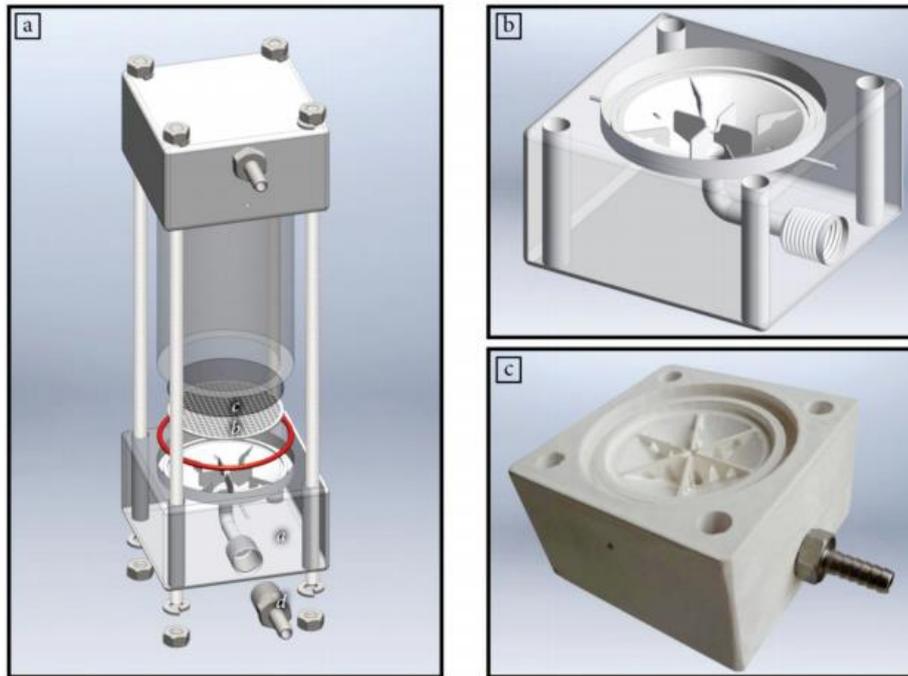


Figura 2.12 Permeâmetro construído com o auxílio de impressões 3D: (a) configuração básica do permeâmetro a ser montado; (b) design computacional do topo e base do permeâmetro e (c) resultado da impressão 3D (Rangel et al., 2013).

### 2.5.1 SINTERIZAÇÃO POR LASER

O processo de sinterização por laser é usado para construir o modelo 3D a partir de um dado material de impressão. Esse material pode ser de variada composição química, no entanto, para a presente tese, o material poliamida foi escolhido como material de construção.

O processo de impressão é feito camada a camada ao desenhar sobre uma camada de pó de poliamida o formato correspondente à fatia do modelo. Ao entrar em contato com o pó, o laser derrete aquele e o aglutina, de forma a formar uma pequena camada do modelo. Após a impressão de uma fatia do sólido, uma nova camada de pó é colocada sobre a superfície e espalhada por um pequeno rolo. No caso desse processo de impressão, a impressora tem uma câmara cuja temperatura está um pouco abaixo do ponto de fusão do pó, de forma que o laser adiciona a energia necessária para que haja o derretimento e conseqüente formação do modelo sólido. Ao final do processo de impressão, o resultado é uma grande porção de pó de poliamida aquecido com o modelo sólido em seu interior (i.materialise, 2014). A Figura 2.13 ilustra esse processo.

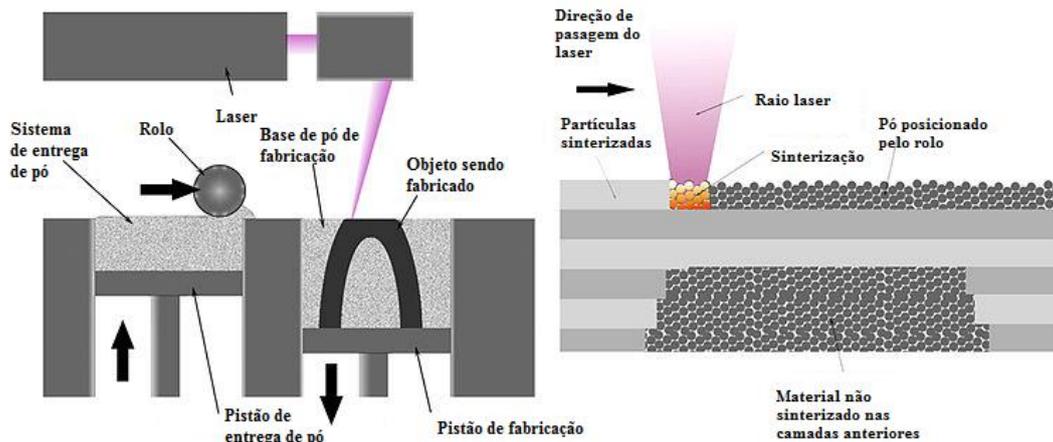


Figura 2.13 Processo de sinterização por laser (adaptado de Materialgeeza, 2014).

As principais limitações de impressões 3D são a largura mínima de parede, detalhe mínimo passível de construção e as dimensões máximas do modelo a ser construído. No caso da impressora utilizada na presente tese, a largura mínima de parede é de 0,8 a 1 mm, enquanto o menor detalhe deve ter cerca de 0,3 mm. Ainda para a impressora utilizada, a máxima dimensão do modelo impresso é de 650 x 330 x 560 mm (i.materialise, 2014).

Outro ponto que deve ser levado em conta na impressão por meio da técnica de sinterização por laser é a retirada do pó não sinterizado que fica retido no interior da impressão. Como argumenta Otten et al. (2012), quando a rede de poros do meio impressões não é suficientemente aberta, pode haver entupimento dos poros.

Dado um panorama mundial do tema em estudo, é importante que se ressalte qual a contribuição dos pesquisadores da Universidade de Brasília para o avanço da linha de pesquisa da presente tese.

## 2.6 PESQUISAS DESENVOLVIDAS NA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

Dentro do escopo da presente tese, três temas são de fundamental importância: uso de tomografias em engenharia geotécnica, a aplicação de autômatos celulares para o estudo de sistemas físicos e a utilização de impressões 3D para tornar reais modelos computacionais de engenharia.

A aplicação de tomografias para o estudo do solo teve seu início no trabalho de Zubeldia (2013). Nesse trabalho, tomografias de três meios porosos distintos foram realizadas a fim de caracterizar a geometria da matriz porosa. Por outro lado, o estudo

de autômatos celulares para a modelagem de fenômenos físicos teve início na pesquisa de Cavalcante (2009), em que os autômatos foram utilizados para o estudo de fluxo de materiais granulares. Subsequentemente, Ozelim (2012) utilizou os autômatos celulares para modelar fenômenos difusivos em meio poroso. Ainda, Zubeldia (2013) se vale dos autômatos para gerar meios porosos artificiais. Finalmente, Borges (2014) alia autômatos celulares a fractais pro estudo da difusão em meios porosos.

Em relação a impressões 3D, a presente tese é pioneira nessa linha de pesquisa na UnB. Estando a revisão bibliográfica completa, procede-se para a descrição da metodologia adotada na presente tese.

### **3 MATERIAS E MÉTODOS**

#### **3.1 MATERIAIS**

Em relação aos materiais a serem utilizados nas análises da presente tese, há dois grupos principais, quais sejam:

- Materiais já tomografados em trabalhos anteriores, cujas tomografias serão utilizadas na análise do VER e do efeito da resolução da tomografia no cômputo de parâmetros de interesse;
- Impressões 3D de poliamida a serem ensaiadas para avaliação da permeabilidade e posteriormente tomografadas para conferência da manutenção da estrutura computacional.

##### **3.1.1 MATERIAIS JÁ TOMOGRAFADOS**

Nesse caso, as tomografias realizadas por Zubeldia (2013) foram gentilmente cedidas para as análises do presente trabalho. Os materiais tomografados por Zubeldia (2013) são: meios porosos gerados pela disposição de esferas de vidro de diâmetro 0.5mm e 1mm, além de uma areia e uma areia argilosa. A areia é de uso comum na construção civil do DF e a areia argilosa foi retirada em uma estação de tratamento de esgoto também no DF. Mais detalhes de cada material se encontram abaixo. É importante ressaltar que as curvas granulométricas serão todas mostradas na seção de resultados, de forma a facilitar a comparação entre os materiais com distribuição de grãos já medidas por Zubeldia (2013) e aqueles cuja distribuição será obtida durante a presente tese.

##### **3.1.1.1 MEIO POROSO GERADO PELA DISPOSIÇÃO DE ESFERAS DE VIDRO**

Conforme indica Zubeldia (2013), as esferas de vidro foram fornecidas pela Embrapa Instrumentação Agropecuária - Unidade de São Carlos (SP). Em seu estudo, a autora utilizou esferas de diâmetro de 0,5 mm e 1 mm de diâmetro. Os corpos de prova a serem tomografados foram moldados por meio da inserção de uma pequena parcela de esferas dentro de um tubo de *Polymerase Chain Reaction* (PCR) de polipropileno de 1,5 mL. Para o caso da amostra com esferas de 0.5mm de diâmetro, a densidade do corpo de prova era de 1,51 g/cm<sup>3</sup>, enquanto que para o caso com esferas de 1 mm de diâmetro, a densidade era de 1,45g/cm<sup>3</sup> (Zubeldia, 2013). As tomografias realizadas para os corpos de prova desses materiais têm resolução de aproximadamente 5,94 µm por pixel.

### **3.1.1.2 MEIO POROSO FORMADO POR AREIA**

Segundo Zubeldia (2013), a areia empregada foi fornecida pelo Laboratório de Geotecnia da UnB e essa é de uso comum na construção civil no Distrito Federal. A partir das análises de índices físicos e classificação tradicionais, a autora indica que a área é classificada como pura e mal graduada segundo o Sistema Unificado de Classificação de Solos (SUCS). Para esse material, dois corpos de prova foram moldados em tubos de PCR. Para o corpo de prova 1, a densidade medida é de 1,69 g/cm<sup>3</sup>, enquanto que para o corpo de prova 2, a densidade era de 1,68 g/cm<sup>3</sup> (Zubeldia, 2013). Para o corpo de prova 1, realizaram-se tomografias com resolução de 14,93 µm por pixel e de 5,94 µm por pixel. Para o corpo de prova 2, por outro lado, a tomografia realizada tem resolução de 5,94 µm por pixel.

### **3.1.1.3 MEIO POROSO FORMADO POR AREIA ARGILOSA**

Zubeldia (2013) indica que a areia argilosa foi coletada na Estação de Tratamento de Esgoto (ETE) Melchior, dependência da Companhia de Saneamento Ambiental do Distrito Federal (CAESB), localizado em Samambaia, DF. Após os ensaios de caracterização, determinou-se que o solo é do tipo *LA'* segundo a metodologia MCT. Para mais detalhes a respeito do material, indica-se a consulta a Zubeldia (2013). Um parâmetro de interesse obtido pela autora é a permeabilidade desse solo, que é de 0,002 cm/s. Ainda, foram moldados dois corpos de prova para esse material. Para o corpo de prova 1, realizaram-se tomografias com resolução de 2,29 µm por pixel e de 9,84 µm por pixel. Para o corpo de prova 2, por outro lado, a tomografia realizada tem resolução de 4,92 µm por pixel.

### **3.1.2 MATERIAIS RESULTANTES DAS IMPRESSÕES 3D**

Os materiais resultantes das impressões 3D serão estruturas sólidas de poliamida. Alguns corpos de prova foram tomografados na Fundação CERTI em Florianópolis, SC.

A título de exemplificação, uma impressão foi realizada. Considere, pois, a Figura 3.1. Na última pode-se ver o modelo computacional do autômato celular 3D regra 23, com um domínio de 200x200x200 células, evoluído 100 passos de tempo a partir de uma condição inicial randômica com  $p_1=0,5$ . Na mesma figura há uma foto do modelo impresso pelo processo de sinterização a laser.

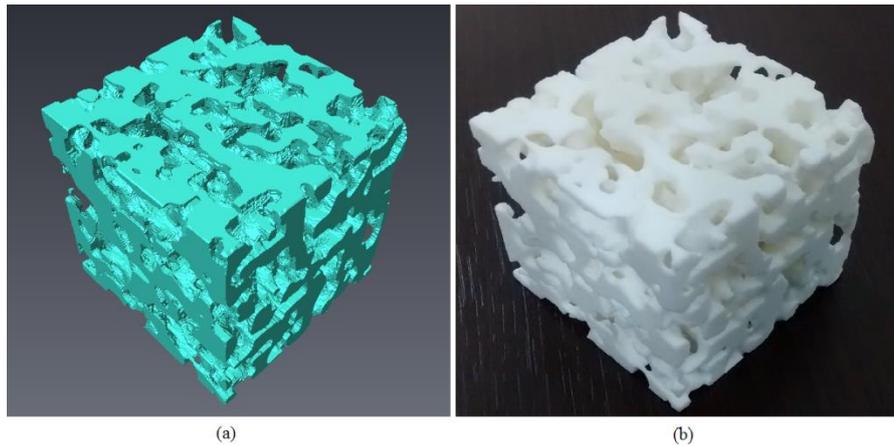


Figura 3.1 Impressão teste: (a) modelo computacional e (b) impressão 3D.

Nota-se na Figura 3.1 a correlação entre os modelos computacional e real. Essa fidelidade de representação será discutida e quantificada na presente tese.

Estando apresentados os materiais a serem utilizados, a metodologia de trabalho pode ser detalhada.

### 3.2 MÉTODOS

Com o intuito de tornar o desenvolvimento da tese mais organizado, todo o processo de alcance dos objetivos específicos está dividido em cinco etapas discriminadas abaixo:

- Estudar o tamanho mínimo do VER para vários tipos de materiais a partir de simulações em escala de poros, utilizando a tomografia como domínio computacional;
- Estudar a influência da resolução da tomografia realizada no cálculo da permeabilidade intrínseca de diversos meios porosos. Novamente, o domínio computacional será a tomografia obtida;
- Estudar os autômatos celulares 3D e suas propriedades geométricas (porosidade);
- Estudar os autômatos celulares 3D e suas propriedades físicas (permeabilidade);
- Estudar a utilização da técnica de impressão 3D como forma de tornar reais modelos artificiais do meio poroso. Em especial, será tratada a representação artificial por meio de autômatos celulares 3D e uma validação numérico-experimental será buscada.

As próximas subseções tratam cada item de maneira específica e individualizada. Essa subdivisão é feita para acompanhar a apresentação dos resultados, que também é individualizada.

### 3.2.1 DETERMINAÇÃO ESTATÍSTICA DO TAMANHO DO VER

Para esta etapa foram considerados os dados provenientes dos corpos de prova de vidro, do corpo de prova 2 de areia e do corpo de prova 2 de areia argilosa. Isso se deve ao fato de que a resolução das tomografias realizadas por Zubeldia (2013) são aproximadamente as mesmas para esses corpos de prova. Assim, a rotina de aquisição de dados e processamento de dados mostrada na Figura 3.2 é realizada e detalhada nos tópicos seguintes.

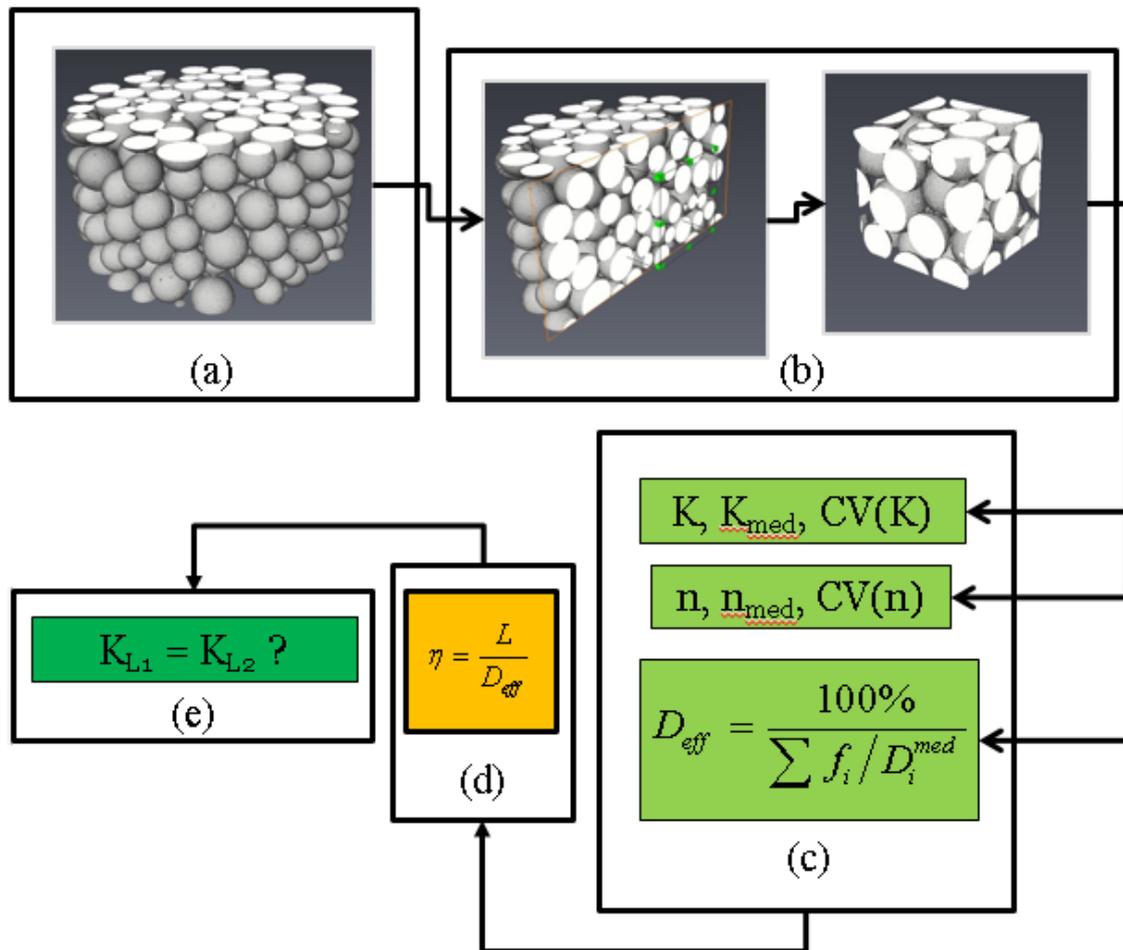


Figura 3.2 Metodologia de aquisição e processamento de dados: (a) reconstrução do volume tomografado; (b) amostragem de sub-volumes para cálculo de propriedades; (c) determinação do IC para a propriedade média e seu CV; (d) relacionar o tamanho do sub-volume com o diâmetro efetivo do material e (e) comparar os parâmetros das amostras por meio de testes de hipóteses.

### **3.2.1.1 RECONSTRUÇÃO DO VOLUME TOMOGRAFADO**

A partir dos tomogramas obtidos, reconstrói-se o modelo 3D da amostra tomografada. Essa reconstrução é feita por meio do software Avizo Fire ®, descrito posteriormente.

É interessante ressaltar que a reconstrução do volume tomografado é precedida pelo tratamento dos espectros de transmissão/atenuação. Nesse caso, há a reconstrução de fatias do objeto tomografado. Essas fatias são posteriormente utilizadas como base para a reconstrução da matriz porosa tridimensional.

### **3.2.1.2 AMOSTRAGEM DE SUB-VOLUMES PARA CÁLCULO DE PROPRIEDADES**

A partir do volume reconstruído, sub-volumes cúbicos são considerados para análise de porosidade e permeabilidade. A localização de cada sub-volume é determinada de maneira randômica por um código no software Mathematica ®, sempre atendendo às fronteiras do volume tomografado.

Para cada tamanho de sub-volume, dez localizações são sorteadas. Por outro lado, para cada sub-volume, permeabilidade e porosidade são medidas. As permeabilidades são medidas por meio da extensão XLab do Software Avizo Fire ®, enquanto as porosidades são medidas por uma rotina no software Mathematica ®.

Assim, para cada tamanho de sub-volume pode-se avaliar as propriedades de interesse de maneira estatística, buscando representar tais propriedades como variáveis aleatórias. Esse processo de aquisição é repetido para vários tamanhos de sub-volume, de forma a ser possível a análise do comportamento das propriedades com o aumento do sub-volume considerado.

### **3.2.1.3 DETERMINAÇÃO DO INTERVALO DE CONFIANÇA PARA A PROPRIEDADE MÉDIA E SEU COEFICIENTE DE VARIAÇÃO**

A partir do procedimento descrito acima, para cada tamanho de sub-volume é gerado um conjunto de dez dados de permeabilidade e dez dados de porosidade. Para cada um desses conjuntos de dados pode-se calcular os parâmetros médios, seus coeficientes de variação assim como os intervalos de confiança para cada uma das medidas estatísticas citadas. Todos esses cálculos são realizados no Software Mathematica ® por meio de funções implementadas e de uma rotina para o método Bootstrap, já descrito.

Esse processo de caracterização dos parâmetros de interesse como variáveis aleatórias é imprescindível para a análise desenvolvida na presente tese, conforme será discutido posteriormente.

#### **3.2.1.4 RELACIONAR O COMPRIMENTO DO LADO DO SUB-VOLUME COM O DIÂMETRO CARACTERÍSTICO DO MATERIAL**

Para tornar o comprimento do lado do sub-volume independente da granulometria do material ensaiado, todos os comprimentos são divididos pelo diâmetro característico do material.

O diâmetro característico de um material composto por esferas de tamanhos distintos é dado por Carrier (2003) em função da distribuição granulométrica do material como:

$$D_{eff} = \frac{100\%}{\sum f_i / D_i^{med}} \quad (3.1)$$

em que  $f_i$  é a fração de partículas entre duas peneiras (%) e  $D_i^{med}$  é o diâmetro médio da partícula entre duas peneiras, dado pela média geométrica dos diâmetros do par de peneiras consideradas,  $D_i^{med} = (D_i^{menor} D_i^{maior})^{0,5}$ . Para os casos em que não se tem a distribuição granulométrica do material em estudo (esferas de vidro), utiliza-se o software Avizo Fire ® para a aquisição dessa informação. É por meio de uma rotina no software Mathematica ® que os diâmetros efetivos são calculados.

#### **3.2.1.5 COMPARAR AS AMOSTRAS AO AUMENTAR O TAMANHO DO SUB-VOLUME POR MEIO DE TESTE DE HIPÓTESES E OUTRAS ANÁLISES**

A ideia dessa etapa é saber se, estatisticamente, o aumento do sub-volume trouxe mudança efetiva no valor da propriedade analisada. Isso pode ser feito ao comparar duas amostras, uma com sub-volume imediatamente maior que a outra. Caso o teste de hipóteses indique que ambas as amostras pertencem à mesma população, isso indica que o aumento de sub-volume não modificou o VER. Serão também realizadas análises suplementares tais como analisar a variação dos parâmetros médios e de seus coeficientes de variação, além do comprimento do intervalo de confiança de cada um.

Outro teste de hipóteses a ser feito é, para um dado tamanho de sub-volume de referência, comparar estatisticamente esse com todas as outras populações aferidas. Isso dá a ideia de crescimento do volume amostrado em torno de um mesmo ponto.

### **3.2.2 AVALIAÇÃO DO EFEITO DA RESOLUÇÃO NOS PARÂMETROS**

Para essa etapa, por outro lado, os dados dos corpos de prova 1 tanto de areia quanto de areia argilosa são utilizados, haja vista os mesmos terem sido tomografados em resoluções distintas, conforme descrito na seção de materiais.

Todas as etapas de aquisição e processamento de dados consideradas para a determinação do VER são também utilizadas no estudo do efeito da resolução dos parâmetros.

### **3.2.3 ESTUDO DAS PROPRIEDADES GEOMÉTRICAS DOS AUTOMATOS CELULARES 3D**

Não há na literatura um estudo detalhado dos autômatos celulares 3D. Por esse motivo, um estudo completo dessa classe de sistema dinâmico se faz necessária. É interessante ressaltar que apenas os 256 autômatos celulares 3D totalísticos com vizinhança de Neumann serão estudados na presente tese.

O estudo dos autômatos será feito nas etapas descritas abaixo:

#### **3.2.3.1 AVALIAÇÃO DA EVOLUÇÃO DA POROSIDADE DE TODAS AS REGRAS CONSIDERADAS**

Conforme discutido anteriormente, os autômatos partem de uma configuração inicial e são evoluídos por tantos intervalos de tempo quanto se queira. Para que haja reprodutibilidade dos estudos, vai-se analisar quais autômatos tendem a uma porosidade limite após um grande número de evoluções temporais.

Esse estudo será feito para passos de tempo unitários de 0 a 500, variando a porosidade inicial de 0 a 100%, de 1 em 1%. Dessa forma, 101 gráficos de porosidade VS tempo serão gerados para cada regra, contemplando a variação temporal da porosidade.

Como o estudo de autômatos se dá de forma experimental, com o intuito de aperfeiçoar a procura de regras de interesse, o seguinte critério será utilizado: para cada um dos 101 gráficos gerados para cada regra, o desvio padrão dos valores de porosidade encontrados será calculado para a amostra de 501 valores. Dentre as 101 possíveis, será escolhida como concentração inicial de interesse aquela que tiver o menor desvio padrão dos valores obtidos da evolução temporal.

Esse critério indica para qual das porosidades iniciais as porosidades advindas da evolução são mais próximas umas das outras.

### **3.2.3.2 A PARTIR DO CONHECIMENTO DAS POROSIDADES QUE SE MANTÊM CONSTANTES, OBTER AS REGRAS DE INTERESSE**

A partir do conhecimento de qual a porosidade inicial que gera uma porosidade estável ao longo das evoluções, procede-se para a análise visual da matriz porosa formada. Caso haja semelhanças com os meios porosos naturais, essa regra será considerada de interesse para o presente estudo.

Deve-se ressaltar que o processo acima é visual, estando pois influenciado pelo julgamento do autor. No entanto, o critério utilizado é o de que os autômatos de interesse são aqueles em que há uma organização da matriz porosa. Por exemplo, como a condição inicial utilizada para todos os autômatos é randômica, regras em que há a estabilização de porosidade mas manutenção da estrutura randômica de células que representam os sólidos não serão consideradas. Quando houver, por outro lado, uma organização das células sólidas, aí sim estará configurada a regra de interesse.

### **3.2.4 ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DOS AUTOMATOS CELULARES 3D**

A partir do conhecimento das regras de interesse, estudar como a permeabilidade das mesmas varia de acordo com o passar dos estágios de evolução. Esse estudo se faz necessário haja vista possibilitar o usuário escolher um certo passo de evolução que melhor represente a permeabilidade almejada.

Além disso, vai-se estudar o efeito da condição inicial randômica do autômato no valor da permeabilidade, além da escala considerada. As seguintes etapas serão seguidas:

#### **3.2.4.1 AVALIAÇÃO DA CONDIÇÃO INICIAL RANDÔMICA NA PERMEABILIDADE PARA AS REGRAS DE INTERESSE**

Sabe-se que há várias formas de gerar uma condição inicial randômica com certa porosidade. Nesse sentido, vai-se analisar a sensibilidade da permeabilidade de cada regra ao mudar a condição inicial randômica, mas mantendo, na média, sua porosidade.

As diferentes condições iniciais e os autômatos serão gerados por rotinas no software Mathematica ® e o cálculo de permeabilidades será feito por meio da extensão XLab do software Avizo Fire ®.

No caso em análise, serão considerados seis condições iniciais distintas para cada regra.

#### **3.2.4.2 AVALIAÇÃO DA EVOLUÇÃO DA PERMEABILIDADE PARA AS REGRAS DE INTERESSE**

Para as regras de interesse, será calculado o valor de permeabilidade em cada passo de tempo de suas evoluções a partir das porosidades iniciais encontradas na etapa anterior. O cálculo de permeabilidades será feito por meio da extensão XLab do software Avizo Fire ®.

Serão considerados pontos de 25 em 25 passos de tempo, até o passo 200. Quando necessário, pontos intermediários serão considerados.

#### **3.2.4.3 AVALIAÇÃO DO EFEITO DE ESCALA DO DOMÍNIO NA PERMEABILIDADE PARA AS REGRAS DE INTERESSE**

Nesse caso, o número de células é mantido constante, no entanto o tamanho real de cada célula é alterado. Esse estudo renderá a análise dos efeitos de escala de meios porosos artificiais gerados por meio de autômatos celulares 3D.

O cálculo de permeabilidades será feito por meio da extensão XLab do software Avizo Fire ® para 5 valores distintos de escala de domínio, para cada regra considerada.

#### **3.2.5 O USO DE IMPRESSÕES 3D NA REPRESENTAÇÃO DO MEIO POROSO**

Nessa etapa, as técnicas de impressão 3D serão utilizadas para tornar reais os modelos computacionais artificiais gerados por meio dos autômatos celulares. Para desenvolver essa etapa, os passos contemplados na Figura 3.3 e detalhados subsequentemente serão seguidos.

##### **3.2.5.1 GERAÇÃO DO ARQUIVO COMPUTACIONAL PARA IMPRESSÃO**

Os autômatos celulares 3D serão gerados no software Mathematica ® por meio de rotina própria. O esquema de geração permite que se obtenham imagens de cada camada do autômato, de forma semelhante à tomografia. Para etapas futuras, bordas serão adicionadas ao autômato em questão, de forma a torná-lo permeável em apenas uma direção. Esse artifício será discutido posteriormente.

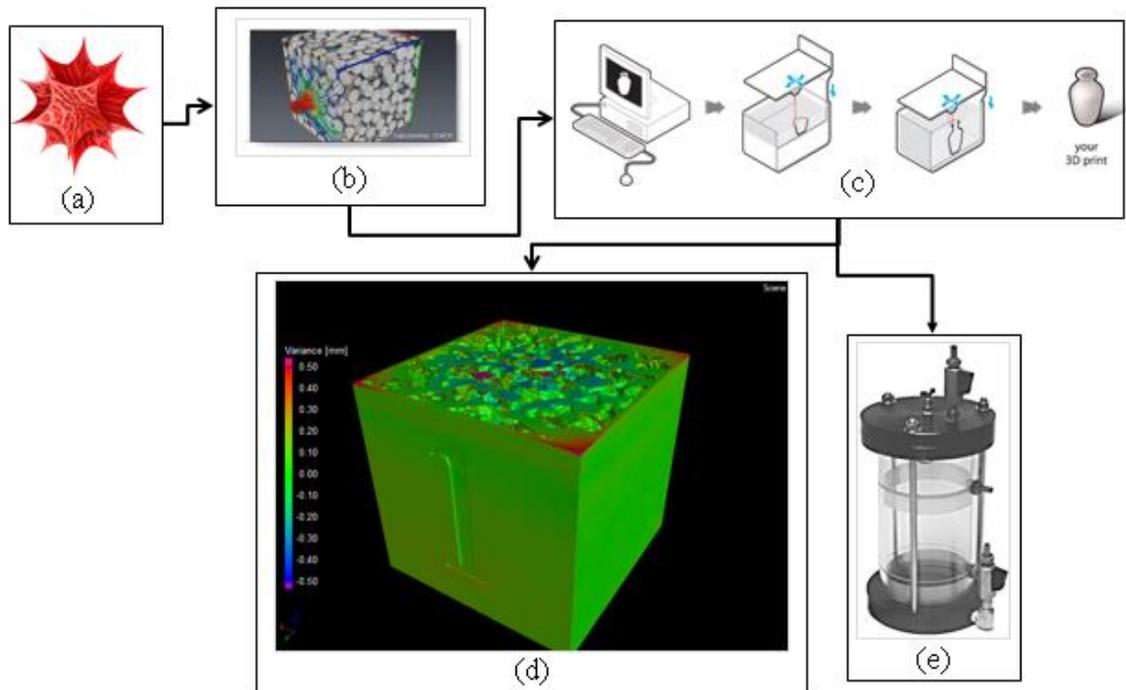


Figura 3.3 Metodologia de validação da utilização de impressoras 3D: (a) geração do modelo computacional por meio do software Mathematica ®; (b) primeira verificação de permeabilidade entre modelo .stl e modelo original; (c) impressão dos modelos 3D; (d) realização da análise metrológica e (e) aferição experimental da permeabilidade dos modelos impressos.

Por meio do software Avizo Fire ®, o volume 3D do autômato celular poderá ser gerado e sua superfície poderá ser obtida. Essa última é exportada em formato .stl para que seja compatível com a impressora 3D utilizada.

### 3.2.5.2 IMPRESSÃO DAS AMOSTRAS

Os arquivos .stl são enviados à empresa i.materialise para que sejam impressos com a tecnologia de sinterização a laser.

Optou-se por realizar a aquisição das impressões prontas haja vista a grande *expertise* da empresa com impressões 3D de alto grau de dificuldade.

### 3.2.5.3 AVALIAÇÃO NUMÉRICA DA PERMEABILIDADE DO AUTÔMATO ENVIADO PARA IMPRESSÃO

A partir do volume 3D gerado para cada autômato de interesse, o cálculo de sua permeabilidade será realizado por meio da extensão XLab do software Avizo Fire ®.

Essa primeira verificação é feita para garantir que o processo de geração de superfície foi eficaz. Caso os valores da permeabilidade antes e depois da geração da superfície difiram consideravelmente, pode-se optar por aumentar o número de triângulos utilizados na geração do arquivo .stl.

#### **3.2.5.4 AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL DA PERMEABILIDADE DO AUTÔMATO IMPRESSO**

Para validar os valores de permeabilidade obtidos tanto para os autômatos estudados quanto para as tomografias analisadas, a permeabilidade dos modelos gerados por impressão 3D será avaliada por meio de um permeâmetro real. Esse permeâmetro será montado, de forma a adequar à geometria e à escala de variação das permeabilidades dos modelos impressos.

Como não será necessário impermeabilizar a amostra (pois seus lados já estarão fechados pelo próprio material de impressão), a única preocupação é a possibilidade de oclusão dos poros pelo pó de poliamida remanescente do processo de impressão, conforme discute Otten et al. (2012).

Nesse caso, os autores utilizaram acetona para retirar o pó que permanece nos poros conectados da amostra impressa. O pó que fica em poros não-conectados não afeta a avaliação de permeabilidade.

Em relação à obtenção experimental da permeabilidade, duas configurações de permeômetros foram utilizadas. Os motivos de utilização de cada configuração serão melhor explorados na seção de resultados.

Considere então o arranjo 1. Nesse arranjo a célula utilizada no ensaio de compactação é tomada como base para o permeâmetro. Para o ensaio da presente tese, no entanto, utiliza-se um cilindro de acrílico de 7 cm de altura em vez do cilindro metálico próprio do equipamento. Isso se deve às amostras a serem ensaiadas não necessitarem de um cilindro tão alto.

O processo de montagem dos experimentos é o que segue:

- i. Corte de uma borracha de câmara de pneu em formato de anel circular para colocação na base do permeâmetro e impermeabilização do espaço entre a borracha e a lateral da base do permeâmetro com betonita;
- ii. Posicionamento do cilindro de acrílico e impermeabilização dos espaços entre esse e a base do permeâmetro com betonita;

- iii. Colocação de um geotêxtil para que haja a transição entre a amostra e a base do permeâmetro;
- iv. Posicionamento da amostra sobre o geotêxtil e posterior impermeabilização do espaço entre a amostra e as paredes do cilindro;
- v. Fechamento do permeâmetro com a parte superior da célula de compactação. Para fins de vedação, outro anel de borracha é posicionado. Aperta-se bem para que não haja fuga de água e
- vi. Realiza-se a saturação por fluxo ascendente e, por fim, utilizam-se os medidores de nível d'água do laboratório de Geotecnia da UnB para realizar as leituras da carga de água e os tempos correspondentes às variações daquelas.

O processo acima descrito está mostrado graficamente na Figura 3.4.

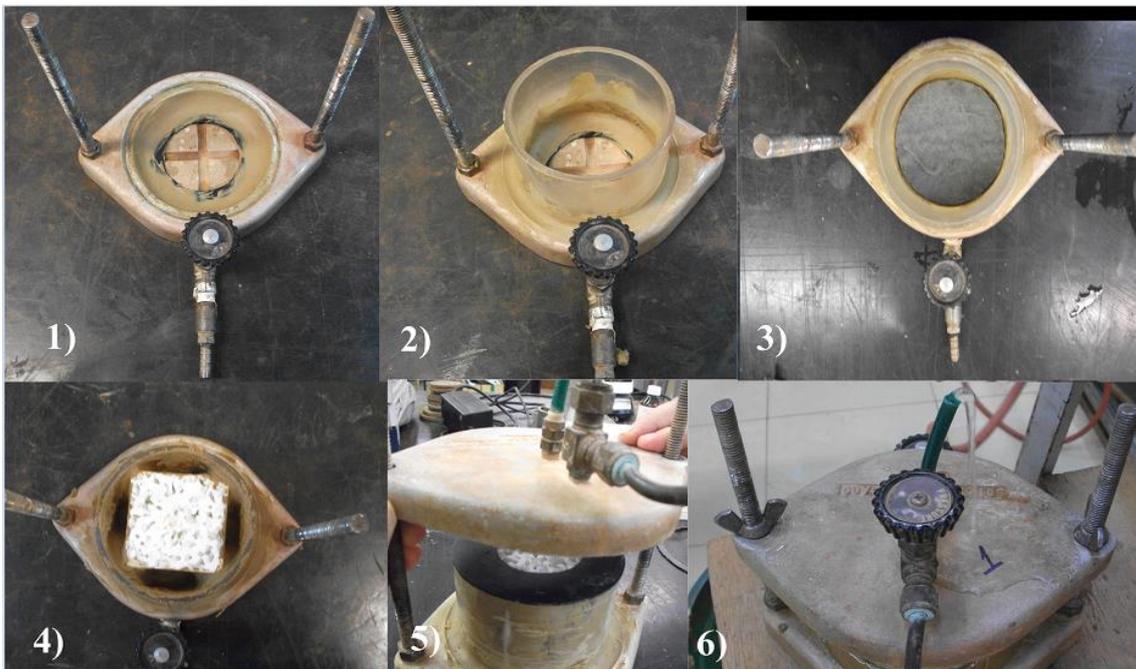


Figura 3.4 Procedimento de ensaio de permeabilidade para o arranjo 1. Os números correspondem às etapas descritas no texto.

Por outro lado, para o arranjo 2, o procedimento é ligeiramente diferente. Nesse caso, considere a seguinte sequência:

- i. Preparação do permeâmetro geralmente utilizado para ensaios de carga constante do laboratório de Geotecnia da UnB;
- ii. Colocação da grade metálica na base do permeâmetro;

- iii. Corte de borracha de câmara de pneu com em formato de disco vazado. O vazado tem o formato quadrado correspondente à base da amostra a ser ensaiada;
- iv. Posicionamento da borracha e da amostra na base do permeâmetro;
- v. Impermeabilização dos espaços entre a parede do permeâmetro e a borracha e entre a parede da amostra e a borracha;
- vi. Saturação por fluxo ascendente até a altura de carga hidráulica de ensaio. Posterior liberação da saída do permeâmetro e aferição do tempo que leva para que uma dada variação de carga seja percebida no sistema.

Para o caso do arranjo 2, a Figura 3.5 mostra graficamente o procedimento descrito anteriormente.

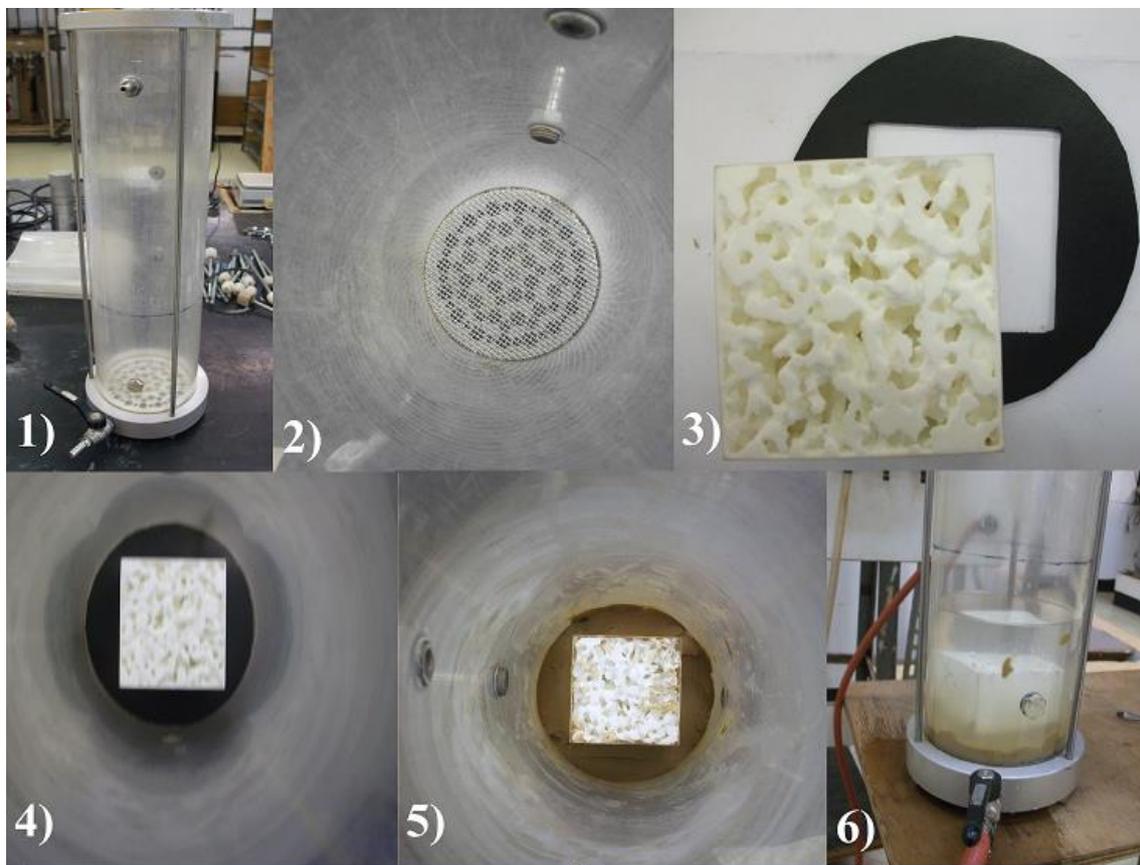


Figura 3.5 Procedimento de ensaio de permeabilidade para o arranjo 2. Os números correspondem às etapas descrita no texto

### 3.2.5.5 VALIDAÇÃO DA TÉCNICA DE IMPRESSÃO 3D COMO METODOLOGIA DE ESTUDO DE MEIOS POROSOS

Nos casos acima, amostras cúbicas são geradas para que haja adequação entre simulação numérica e aferição experimental. Por outro lado, ainda que a obtenção de

valores de permeabilidade semelhantes para o modelo computacional e para o modelo impresso represente que o último é boa representação do primeiro, uma segunda verificação será realizada.

Para tal, as amostras impressas foram tomografadas e um estudo de metrologia foi realizado. Esse estudo foi realizado juntamente com o corpo técnico da Fundação CERTI, em Florianópolis, SC.

As tomografias foram realizadas no tomógrafo de raio-X Metrotom 1500 presente naquela instituição de pesquisa, mostrado na Figura 3.6.

Devido à simplicidade das amostras a serem tomografadas para a análise metrológica, o processo de preparação das mesmas para inserção no tomógrafo Metrotom 1500 é sobremaneira facilitado.



Figura 3.6. Tomógrafo Metrotom 1500 utilizado para os estudos de metrologia das impressões 3D.

Em um primeiro momento, a amostra deve ser posicionada inclinada em uma plataforma de isopor para que haja uma maior superfície de incidência para os raios X.

Esse posicionamento facilita o processo de visualização do meio tomografado e pode ser apreciado na Figura 3.7.

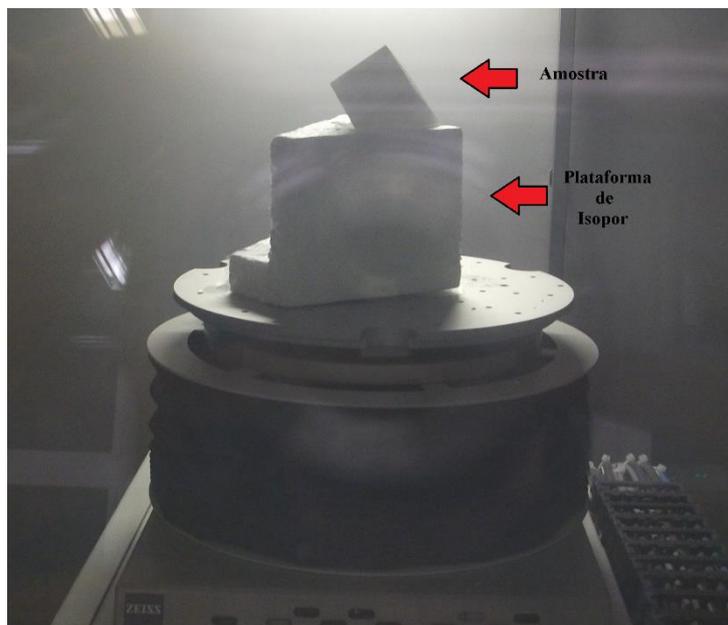


Figura 3.7. Amostra posicionada dentro do tomógrafo Metrotom 1500 e sobre plataforma de isopor.

Estando a amostra posicionada dentro da câmara, alguns testes são realizados para garantir que haja o total enquadramento da amostra. Além disso, parâmetros como voltagem e corrente são ajustados para que as propriedades dos raios X emitidos sejam condizentes com o meio poroso a ser tomografado.

A partir das tomografias das impressões 3D será possível analisar se a rede de poros fica mantida ou não após a impressão. Esse processo será feito por meio da comparação do arquivo digital da impressão e da tomografia da mesma. O software VGStudio Max ® foi utilizado com esse fim.

De maneira simplificada, o software VGStudio Max permite o cálculo de diagramas de cores e histogramas de desvios, mostrando assim qual a variação entre o objeto real (obtido por meio da tomografia) e o objeto virtual (obtido por meio do modelo gerado computacionalmente).

### 3.2.6 SOFTWARE AVIZO FIRE ® v. 8.0.1

Conforme discutido anteriormente, os cálculos de permeabilidade serão realizados por meio do software Avizo Fire ®, desenvolvido pela FEI Visualization

Science Group. Gentilmente uma licença do software e de sua extensão XLab, utilizada no cálculo de permeabilidades, foi cedida pelo Dr. Dan Gostovic (engenheiro da FEI).

A utilização desse software já foi feita por outros pesquisadores em pesquisas semelhantes (Miller et al., 2014 e Peng et al., 2014), sendo pois justificável.

A simulação de permeabilidade é feita por meio da resolução das equações de Stokes para um fluido fictício que percola o meio poroso considerado. A partir dos campos de pressão e velocidade, o software é capaz de determinar a permeabilidade por meio da Lei de Darcy. É importante lembrar que o software Avizo Fire ® considera uma rotina de volumes finitos para solucionar as equações de Stokes.

### **3.2.7 SOFTWARE MATHEMATICA ® v.9**

O software Mathematica ® é desenvolvido pela Wolfram Research e se mostra como ferramenta computacional robusta para os estudos aqui desenvolvidos.

Por apresentar uma linguagem simples, a sua programação fornece códigos limpos e altamente eficazes. Sua linguagem é denominada Wolfram language e guarda como principal característica o grande número de rotinas altamente otimizadas que podem ser facilmente lançadas a partir de comandos simples.

Esse software possui ferramentas implementadas para o estudo dos autômatos celulares, de forma a se mostrar como mais indicado para os estudos desenvolvidos na presente tese.

### **3.2.8 SOFTWARE VGSTUDIO MAX ® v.2.2**

Conforme discutido anteriormente, o software VGStudio Max foi utilizado na análise metrológica das impressões 3D. Tal escolha se deu devido à disponibilidade desse software na Fundação CERTI e pela facilidade de trabalho com o mesmo.

A partir dos métodos discutidos, os seguintes resultados foram alcançados.

## 4 RESULTADOS

Assim como na seção de metodologia, os resultados obtidos serão descritos de acordo com as etapas definidas naquela seção. É importante definir a nomenclatura a ser utilizada no presente trabalho para caracterização das amostras. A Tabela 4.1 mostra essa nomenclatura.

Tabela 4.1 Dados gerais sobre os materiais tomografados

Material	Tamanho da imagem(pixel <sup>2</sup> )	µm/pixel	Nº de fatias	Altura total (µm)	CP
Areia 1	601	13,31	811	10795,34	A-1
Areia 2	1516	5,28	851	4490,76	A-1
Areia 3	1511	5,29	801	4240,90	A-2
A. Argilosa 1	3571	2,24	700	1568,19	Arg-1
A. Argilosa 2	1651	4,85	771	3735,92	Arg-2
A. Argilosa 3	826	9,69	401	3883,78	Arg-1
Vidro 0.5 mm	1551	5,16	771	3976,79	V-1
Vidro 1 mm	1561	5,13	771	3951,31	V-2

É interessante notar que na Tabela 4.1 as resoluções reportadas (µm/pixel) são ligeiramente diferentes daquelas mostradas em Zubeldia (2013). Isso se deve ao fato de que os valores da referida tabela foram obtidos ao fazer a relação direta de que o diâmetro do material tomografado é de 8 mm (diâmetro do tubo de PCR utilizado). A Figura 4.1 ilustra o processo para um tomograma obtido para a amostra Areia 1.

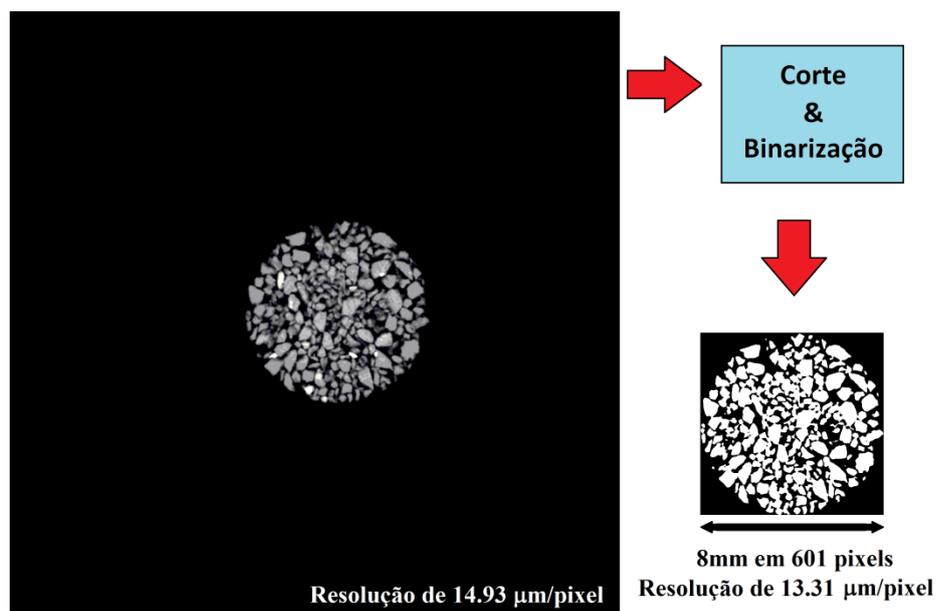


Figura 4.1 Procedimento de corte e binarização dos tomogramas

Essa modificação é realizada pois as imagens tomográficas foram cortadas, de forma a preservar apenas a região de interesse dos tomogramas. Como o tamanho de corte preciso de acordo com a imagem inicial é difícil de ser feito, as resoluções foram recalculadas. Nota-se no entanto, que a variação é muito pequena, não influenciando nos resultados. Além disso, todas as imagens são também binarizadas, de forma a mostrar os espaços brancos (sólidos) e pretos (vazios) apenas. Uma rotina do software Mathematica ® realiza essas operações.

Outro ponto a ser discutido é a resolução adotada nas tomografias de Zubeldia (2013). No caso das argilas, poder-se-ia argumentar que a resolução de cerca de  $2\mu\text{m}/\text{pixel}$  não seria suficiente para capturar todos os poros desse material. De fato, não há a total contemplação desses poros, no entanto, sabe-se que apenas a parcela de macroporosidades contribui efetivamente para a permeabilidade. Haja vista ser essa última a propriedade analisada na presente tese, os macroporos já estarão contemplados até mesmo com a resolução utilizada. O mesmo pensamento se aplica aos outros materiais analisados, estão, pois, justificado o espectro de resoluções utilizadas.

Por outro lado, devem-se mostrar as distribuições granulométricas de todos os materiais considerados. Esses dados estão mostrados na Figura 4.2.

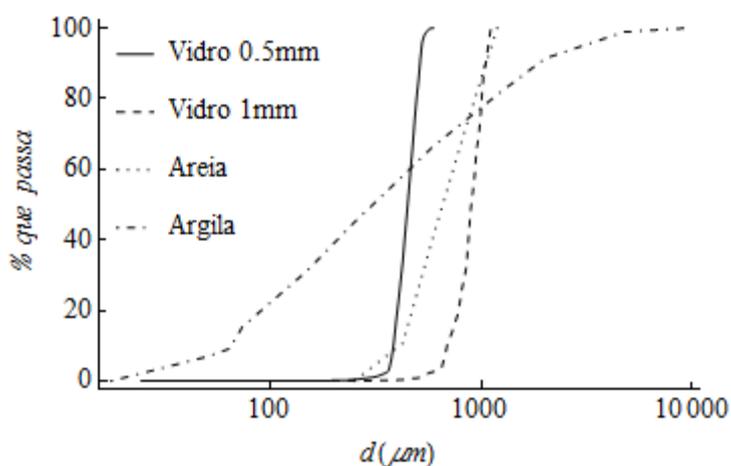


Figura 4.2 Distribuição granulométrica dos materiais tomografados.

As distribuições granulométricas das amostras de esferas de vidro foram obtidas no presente trabalho por meio do software Avizo Fire ®. De maneira simplificada, o software em questão conta com alguns módulos que permitem realizar a detecção e separação de grãos, procedendo subsequentemente a aferições geométricas

de raio médio e esfericidade. Dessa forma, a distribuição dos diâmetros médios dos grãos do material pode ser obtida. É interessante notar que os valores de distribuição de grãos fornecidos pelo software são da forma de frequência de volumes, os quais devem ser convertidos em frequência de massa para comparação com as granulometrias tradicionais.

Conforme descrito na metodologia, um diâmetro efetivo foi calculado para cada amostra. Os diâmetros são de 439,89  $\mu\text{m}$  para as esferas de vidro de 0,5mm de diâmetro; 860,36  $\mu\text{m}$  para as esferas de vidro de 1mm de diâmetro; 606,57  $\mu\text{m}$  para a amostra de areia e de 148,08  $\mu\text{m}$  para a amostra de areia argilosa. É interessante notar que, ainda que as esferas devessem ter o mesmo diâmetro, a distribuição granulométrica e o diâmetro efetivo revelam um distanciamento dessa situação.

#### 4.1 DETERMINAÇÃO ESTATÍSTICA DO TAMANHO DO VER

A reconstrução do volume 3D a partir dos tomogramas para todas as amostras consideradas pode ser vista na Figura 4.3.

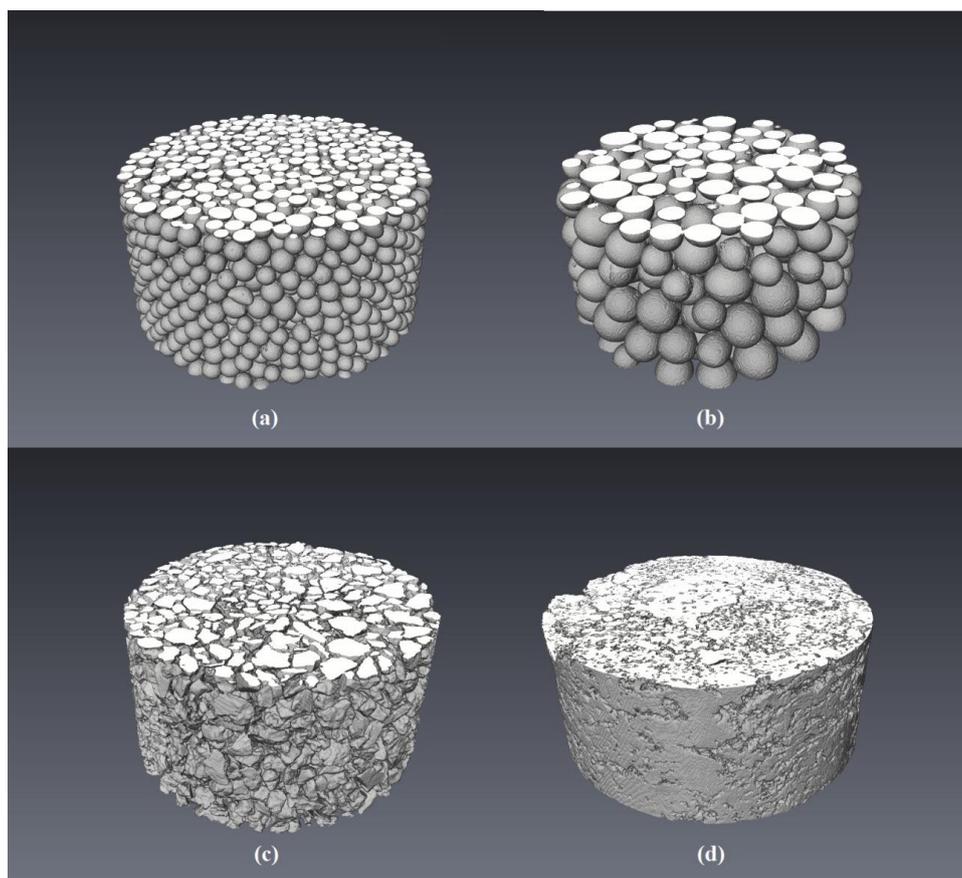


Figura 4.3 Volumes reconstruídos para análise do VER: (a) Esferas de vidro de 0.5mm de diâmetro; (b) esferas de vidro de 1mm de diâmetro; (c) amostra Areia 3 e (d) amostra A. Argilosa 2.

Cada material terá seus dados analisados em subseções distintas. Em todos os casos, considere  $\eta = L/D_{eff}$ , em que  $L$  é o tamanho do lado do sub-volume cúbico.

#### 4.1.1 ANÁLISE DO VER PARA A AMOSTRA DE ESFERAS DE VIDRO DE 0,5 MM DE DIÂMETRO.

Por meio da metodologia descrita para essa etapa, os valores de permeabilidade e porosidade são mostrados na Figura 4.4 para a amostra de esferas de vidro com 0,5 mm de diâmetro.

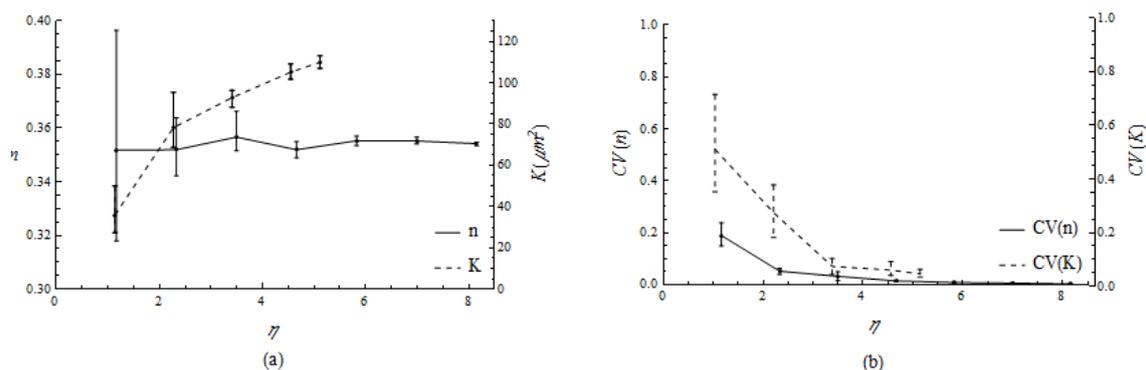


Figura 4.4 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de esferas de vidro de 0,5mm de diâmetro: (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias.

É interessante notar que o cálculo do intervalo de confiança com o método Bootstrap fornece valores assimétricos em relação à média. Além disso, esse método sempre mantém o significado físico das variáveis (ambas positivas definidas), haja vista os valores das estatísticas serem sempre calculados a partir dos dados amostrados. É importante lembrar que o intervalo de confiança mostrado nessa e em outras análises é o de 95%.

A análise da Figura 4.4 revela que com o aumento do tamanho do sub-volume amostrado, o intervalo de confiança tende a ficar menor, representando uma menor variabilidade da propriedade estudada. Não foram realizadas medidas de permeabilidade em sub-volume maiores devido à insuficiência do hardware utilizado (computador com processador Intel i7 2630QM, com quatro núcleos e oito threads e memória RAM de 16GB). Em todos os casos, ainda que o aumento do sub-volume causasse um aumento no tempo de simulação (de minutos a horas), o fator limitante é a memória RAM.

A título de comparação, por meio da equação de Kozeny-Carman e da metodologia descrita por Carrier (2003) é possível estimar o valor de permeabilidade

desse meio. Para o caso em análise, a permeabilidade estimada é de  $122,45 \mu\text{m}^2$ , bem próxima do valor encontrado, conforme mostra a Figura 4.4 (a).

#### 4.1.2 ANÁLISE DO VER PARA A AMOSTRA DE ESFERAS DE VIDRO DE 1 MM DE DIÂMETRO

Para o caso da amostra de esferas de vidro com 1mm de diâmetro, os resultados encontrados para a variação da permeabilidade e da porosidade são apresentados na Figura 4.5.

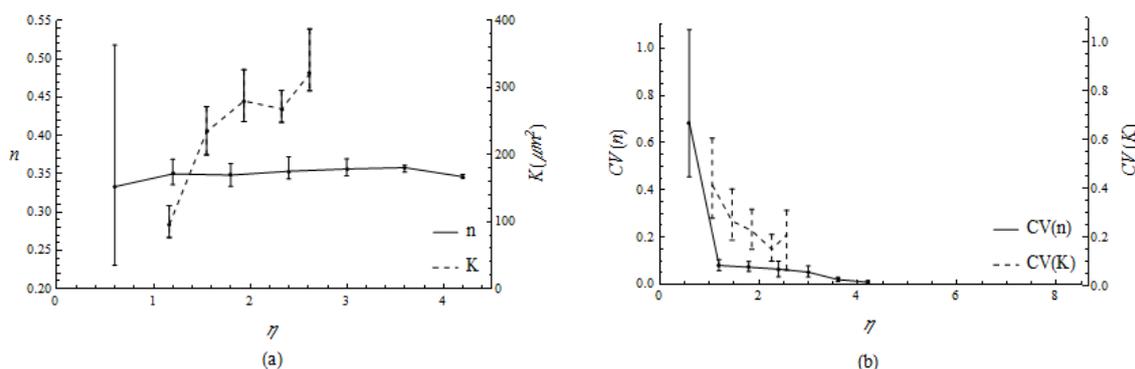


Figura 4.5 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de esferas de vidro de 1mm de diâmetro: (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias.

Assim como no caso das esferas de diâmetro 0,5mm, observa-se uma tendência à diminuição do valor médio do coeficiente de variação. No caso das permeabilidades, devido ao sub-volume ser ainda pequeno em relação ao necessário para que haja estabilização do valor médio, não se observa para os valores colhidos a diminuição do intervalo de confiança. Isso se verifica pela utilização da equação de Kozeny-Carman para o cálculo da permeabilidade. Nesse caso, a permeabilidade empírica é de  $524,82 \mu\text{m}^2$ , valor um pouco maior do que o encontrado para o maior sub-volume considerado, como mostra a Figura 4.5 (a).

#### 4.1.3 ANÁLISE DO VER PARA A AMOSTRA DE AREIA (CORPO DE PROVA 2, AMOSTRA AREIA 3)

Para a amostra de areia considerada no estudo do VER, a Figura 4.6 mostra os resultados obtidos.

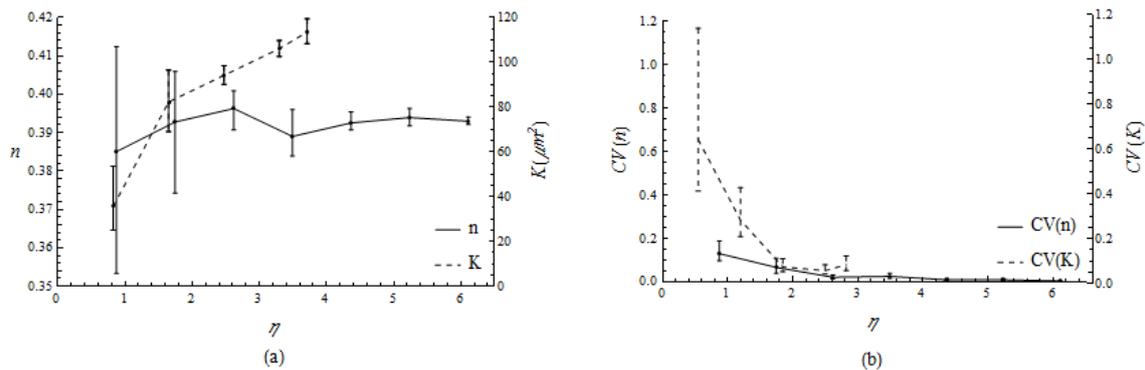


Figura 4.6 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 2, amostra Areia 3): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias.

Novamente, observa-se uma clara tendência de diminuição do valor do coeficiente de variação das propriedades consideradas. De forma geral, observa-se também a diminuição do comprimento do intervalo de confiança, como era esperado.

#### 4.1.4 ANÁLISE DO VER PARA A AMOSTRA DE AREIA ARGILOSA (CORPO DE PROVA 2, AMOSTRA A. ARGILOSA 2)

Para a amostra de areia argilosa, os resultados estão mostrados na Figura 4.7.

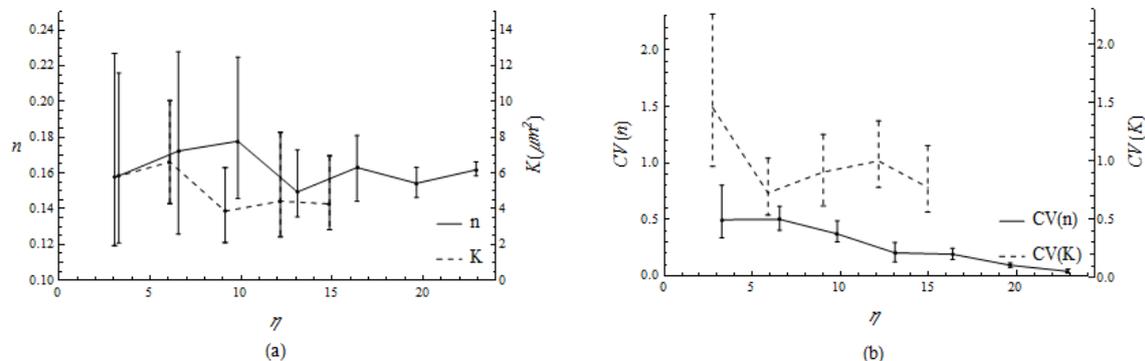


Figura 4.7 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia argilosa (CP 2, amostra A. Argilosa 2): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias

Assim como em todos os casos anteriores, a tendência geral é a de que, ao aumentar o tamanho do sub-volume, o coeficiente de variação diminua. Ainda, observa-se uma discreta tendência de diminuição do intervalo de confiança. É interessante notar, no entanto, que para as avaliações do CV de permeabilidade da areia argilosa, seus valores, ainda que diminuam, tendem a patamares muito altos (por volta de 0,8). Isso

mostra que, diferentemente dos outros materiais estudados, o nível de heterogeneidade das argilas é grande mesmo para razões da ordem de 15 vezes o diâmetro efetivo.

#### 4.1.5 ANÁLISE DO VER POR MEIO DE TESTE DE HIPÓTESES PARA TODOS OS MATERIAIS

A Tabela 4.2 congrega os valores  $p$  dos testes de hipóteses realizados. Relembrando, a hipótese nula é a de que cada par de amostras com tamanhos de subvolumes imediatamente crescentes advêm da mesma distribuição, portanto podem ser consideradas estatisticamente iguais. Células verdes indicam que a hipótese nula é aceita; por outro lado, células vermelhas indicam a rejeição da hipótese nula com 5% de tolerância.

Tabela 4.2 Resultados dos testes de hipóteses realizados para encontrar o VER.

<b>Material</b>	<b>Intervalos de <math>\eta</math> considerados</b>			
<b>Areia 3</b>	{0,82; 1,65}	{1,65; 2,47}	{2,47; 3,30}	{3,30; 3,71}
Valor $p$	0,0007	0,1272	0,0014	0,0507
<b>A. Argilosa 2</b>	{3,04; 6,08}	{6,08; 9,12}	{9,12; 12,16}	{12,16; 14,86}
Valor $p$	0,7771	0,1442	0,7345	0,9251
<b>Vidro 0.5 mm</b>	{1,14; 2,27}	{2,27; 3,41}	{3,41; 4,55}	{4,55; 5,11}
Valor $p$	0,0009	0,0525	0,0018	0,0714
<b>Vidro 1 mm</b>	{1,16; 1,55}	{1,55; 1,94}	{1,94; 2,32}	{2,32; 2,62}
Valor $p$	0,0003	0,1064	0,5987	0,0446

Por meio da análise da Tabela 4.2 é possível observar que há vários patamares em que se pode considerar que as aferições são estatisticamente equivalentes. Vale ressaltar que as análises foram feitas apenas em relação à permeabilidade. A existência de mais de um patamar indica que, como bem descrevem Lake & Srinivasan (2004), as heterogeneidades existem em escalas distintas. Isso mostra que existem vários VERs e que os mesmos dependem da escala estudada. Apenas em materiais idealizados em que há apenas um nível de heterogeneidades é que existe um VER único.

Ainda da análise da Tabela 4.2, pode-se observar que no caso das amostras de areia argilosa, devido à alta variabilidade (em comparação com as outras amostras), todos os testes de hipóteses são estatisticamente aceitos para uma tolerância de 5%. É possível atribuir essa variabilidade à própria mistura entre areia e argila na constituição dessas amostras.

Outra forma de abordar a questão do VER é por meio do seguinte teste de hipóteses: para cada valor de  $\eta$ , comparar individualmente a amostra relativa a esse com cada uma das outras, não apenas a subsequente. Isso tem por objetivo dar a ideia de fixar um ponto e ao redor dele aumentar a região coberta, observando as propriedades de interesse. A Tabela 4.3 congrega os resultados desse teste de hipóteses.

A leitura da Tabela 4.3 é sobremaneira simples: basta entrar na coluna  $\eta$  e ver com qual valor desse parâmetro está aquele sendo comparado. Por exemplo, para a comparação do domínio com  $\eta$  igual a 2,27 com o domínio em que  $\eta = 3,41$ , basta entrar na terceira linha e segunda coluna da sub-tabela Areia 3 na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 Testes de hipóteses para comparação geral.

<b>Material</b>	<b>Valores de <math>\eta</math> comparados</b>				
<b>Areia 3</b>	$\eta$	2,27	3,41	4,55	5,11
	1,14	0,0009	0,0002	0	0
	2,27		0,1278	0,0076	0,0021
	3,41			0,0021	0,0004
	4,55				0,0527
<b>A. Argilosa 2</b>	$\eta$	1,55	1,94	2,32	2,62
	1,16	0,7746	0,4823	0,623	0,5747
	1,55		0,1391	0,2873	0,2045
	1,94			0,7343	0,7765
	2,32				0,9277
<b>Vidro 0.5 mm</b>	$\eta$	1,65	2,47	3,3	3,71
	0,82	0,0007	0	0	0
	1,65		0,054	0,003	0,0008
	2,47			0,002	0,0002
	3,3				0,0694
<b>Vidro 1 mm</b>	H	6,08	9,12	12,16	14,86
	3,04	0,0003	0	0,0001	0
	6,08		0,1075	0,1418	0,0097
	9,12			0,5964	0,1625
	12,16				0,0482

## 4.2 AVALIAÇÃO DO EFEITO DA RESOLUÇÃO NOS PARÂMETROS

Assim como na seção anterior, a análise do efeito da resolução será feita separadamente para cada material analisado em subseções distintas. A Figura 4.8 mostra a reconstrução do volume a partir dos tomogramas para os materiais analisados.

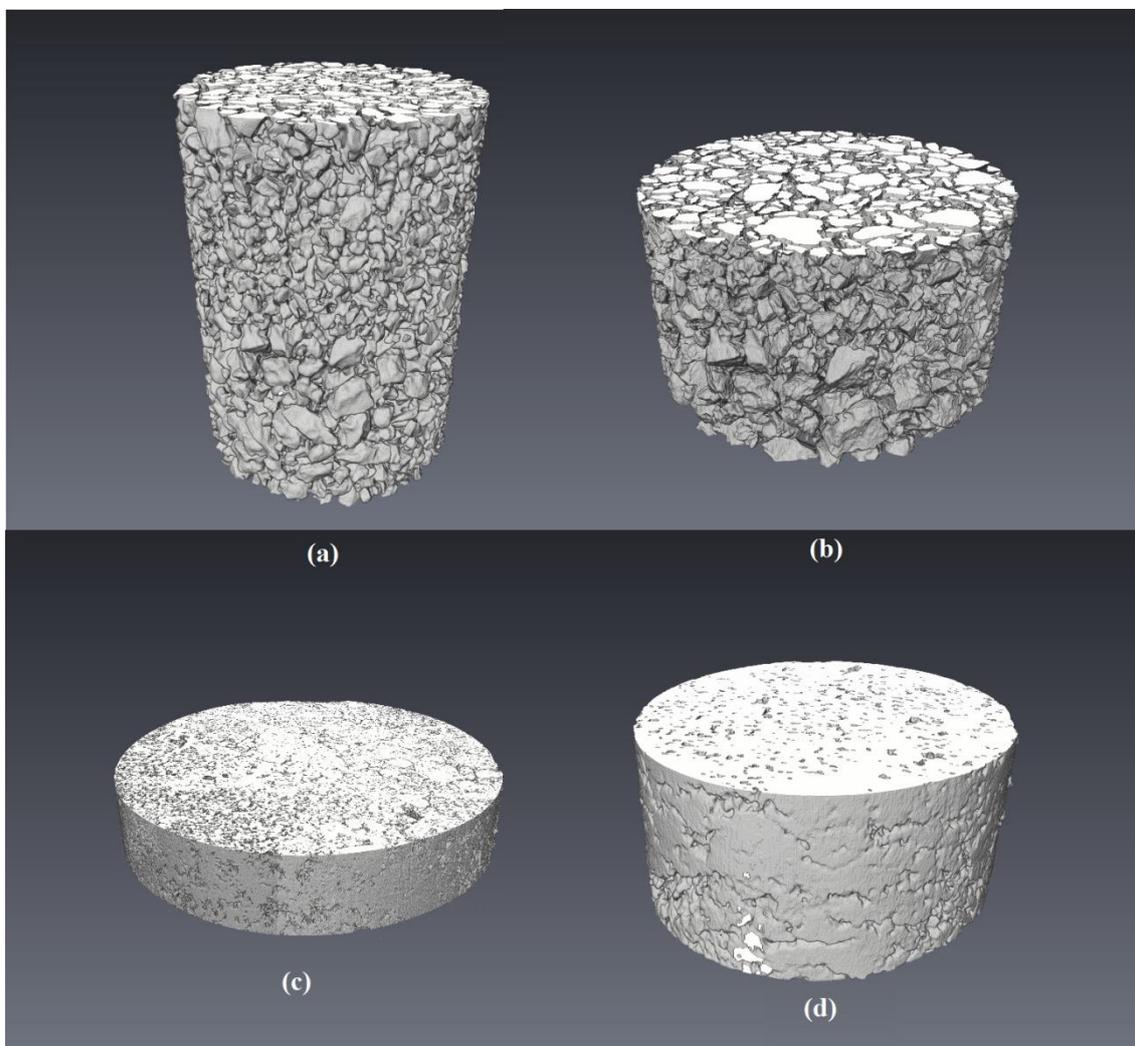


Figura 4.8 Volumes reconstruídos para análise do efeito da resolução na permeabilidade do meio: (a) amostra Areia 1; (b) amostra Areia 2; (c) amostra A. Argilosa 1 e (d) amostra A. Argilosa 3.

### 4.2.1 ANÁLISE DO EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA AS AMOSTRAS DE AREIA

Conforme discutido na etapa de metodologia, o corpo de prova 1 de areia foi tomografado com duas resoluções distintas. Tais tomografias geraram as amostras Areia 1 e Areia 2, conforme mostra a Tabela 4.1. Cada amostra será analisada separadamente.

#### 4.2.1.1 O EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA A AMOSTRA AREIA 1

A Figura 4.9 mostra os resultados dos experimentos numéricos de permeabilidade e porosidade para a amostra Areia 1. Assim como nos casos em que o VER estava sendo analisado, percebe-se uma diminuição do valor do coeficiente de variação com o aumento do tamanho do sub-volume considerado. Há também uma redução no comprimento do intervalo de confiança, conforme esperado.

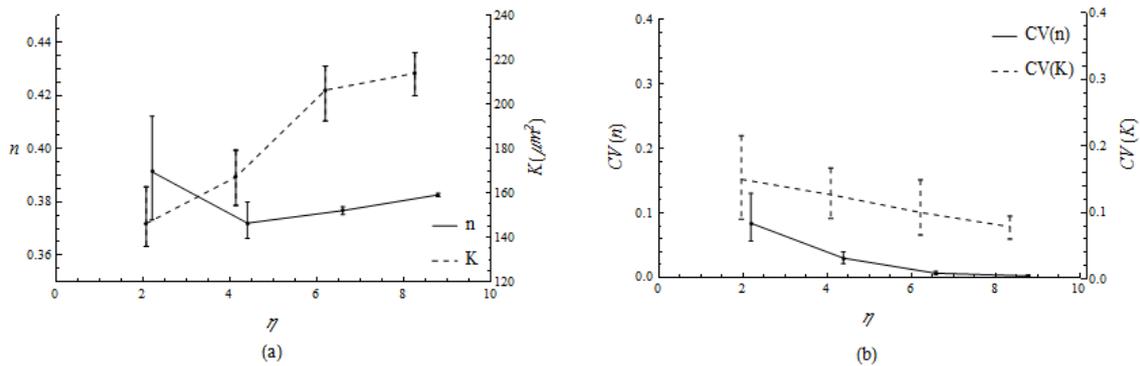


Figura 4.9 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 1, amostra Areia 1): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias.

#### 4.2.1.2 O EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA A AMOSTRA AREIA 2

A Figura 4.10 mostra os resultados dos experimentos numéricos de permeabilidade e porosidade para a amostra Areia 2.

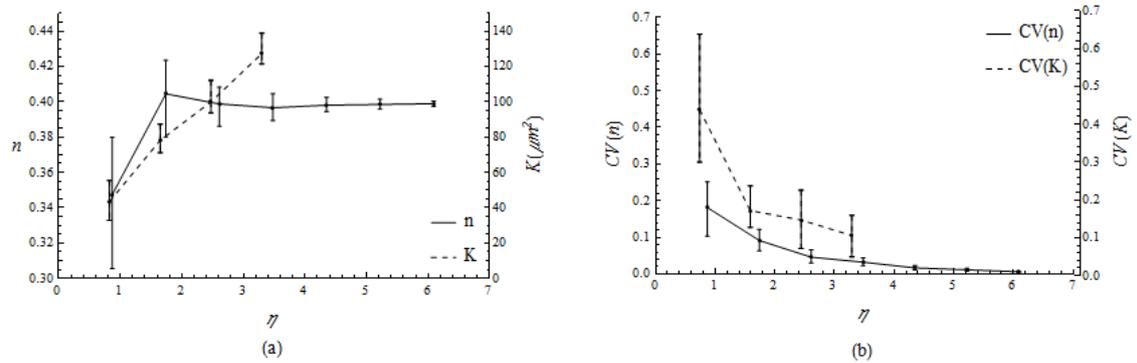


Figura 4.10 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 1, amostra Areia 2): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias.

Assim como no caso da amostra Areia 1, há a diminuição do CV e do comprimento do intervalo de confiança com o aumento do sub-volume.

### 4.2.1.3 EFEITO DE RESOLUÇÃO GERAL PARA AS TRÊS AMOSTRAS DE AREIA

É interessante mostrar qual a tendência geral observada para todas as três amostras de areia, a qual está indicada na Figura 4.11.

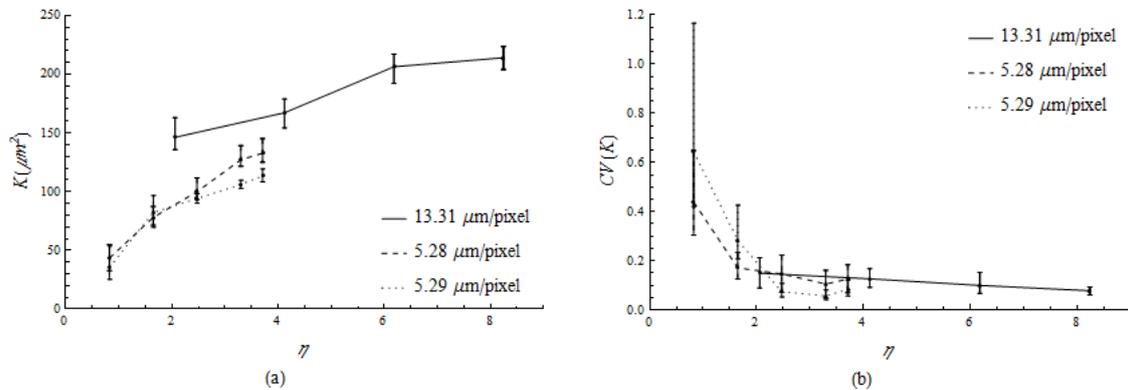


Figura 4.11 Efeito da resolução tomográfica na permeabilidade das amostras de areias: (a) permeabilidade média e (b) coeficiente de variação da permeabilidade.

É notável na Figura 4.11 uma mesma tendência de crescimento dos valores médios de permeabilidade, ainda que a resolução seja variada. É interessante notar também que dois corpos de prova distintos têm valores de permeabilidades semelhantes para uma mesma resolução. A tendência de diminuição do valor do CV é também comum a todas as amostras.

No caso de materiais granulares em que a maior escala de heterogeneidade é relativamente pequena, a realização de tomografia em diferentes resoluções pode ser uma alternativa razoável para driblar possíveis limitações computacionais. Isso acontece porque os poros perdidos com resoluções menores não afetam de forma significativa o valor da permeabilidade (essa propriedade é governada pelo fluxo em macroporos, pela lei do menor esforço). Dessa forma, domínios maiores em escala real podem ser simulados sem riscos de haver perda de informação.

### 4.2.2 ANÁLISE DO EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA AS AMOSTRAS DE AREIA ARGILOSA

No caso do corpo de prova 1 de areia argilosa, duas resoluções diferentes foram empregadas na aquisição de imagens, gerando então as amostras A. Argilosa 1 e A. Argilosa 3, conforme indicado na Tabela 4.1. Cada amostra será analisada separadamente.

#### 4.2.2.1 O EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA A AMOSTRA A. ARGILOSA 1

A Figura 4.12 mostra os resultados dos experimentos numéricos de permeabilidade e porosidade para a amostra A. Argilosa 1.

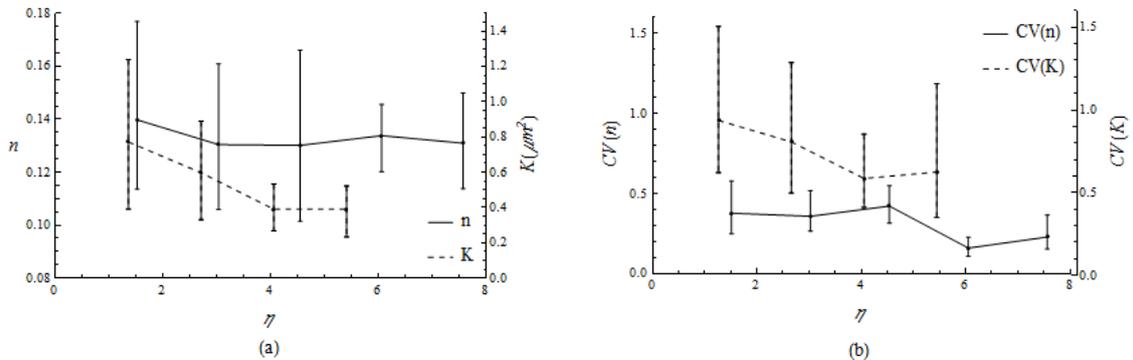


Figura 4.12 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 1, amostra A. Argilosa 1): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias.

Assim como no caso do estudo do VER, para as amostras de areia argilosa os valores de  $CV$  também mostram uma ligeira diminuição com o aumento do sub-volume, no entanto, seus valores ainda são altos. Isso se deve também ao fato do valor médio de permeabilidades ser relativamente baixo.

#### 4.2.2.2 O EFEITO DE RESOLUÇÃO PARA A AMOSTRA A. ARGILOSA 3

Por outro lado, a Figura 4.13 mostra os resultados dos experimentos numéricos de permeabilidade e porosidade para a amostra A. Argilosa 3.

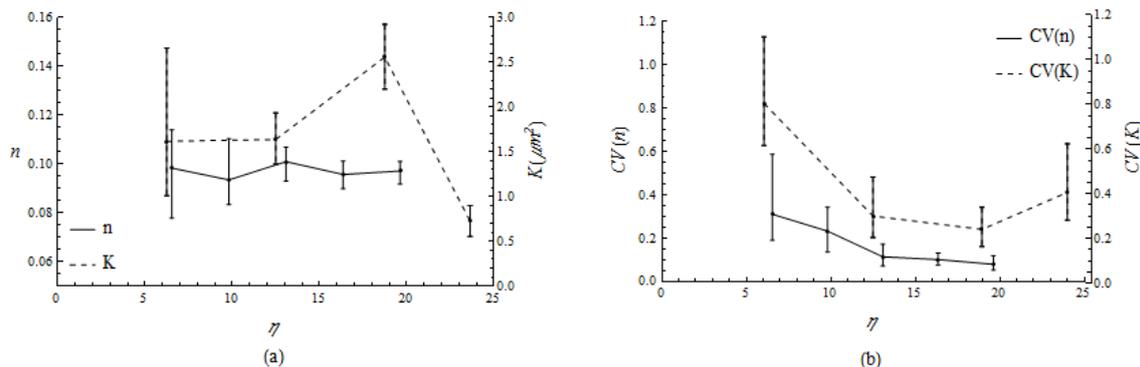


Figura 4.13 Variação da permeabilidade e da porosidade com o tamanho do sub-volume para a amostra de areia (CP 1, amostra A. Argilosa 3): (a) propriedades médias e (b) coeficiente de variação das propriedades médias.

Assim como no caso das outras amostras de areia argilosa, o valor do CV tende a diminuir, mas ainda tem um valor alto. Por outro lado, os valores médios de permeabilidade não mostram uma tendência clara de crescimento/diminuição.

#### 4.2.2.3 EFEITO DE RESOLUÇÃO GERAL PARA AS 3 AMOSTRAS DE AREIA ARGILOSA

É interessante mostrar todos os dados das amostras de areia argilosa em um mesmo gráfico para que se possa avaliar de maneira direta o efeito da resolução no valor da permeabilidade calculada numericamente. A Figura 4.14 mostra esses resultados.

Como era esperado, o valor de CV decresce com o aumento do sub-volume considerado. Por outro lado, observa-se uma tendência à estabilização dos valores médios de permeabilidade com o aumento do tamanho do sub-volume.

É interessante notar que os valores com maior e menor resoluções são mais próximos do que aqueles com resolução intermediária. Observe que a resolução intermediária advém de um corpo de prova diferente (CP 2), mostrando assim a heterogeneidade da argila. No caso da areia, ainda que provenientes de corpos de prova diferentes, os valores de permeabilidade são aproximadamente iguais.

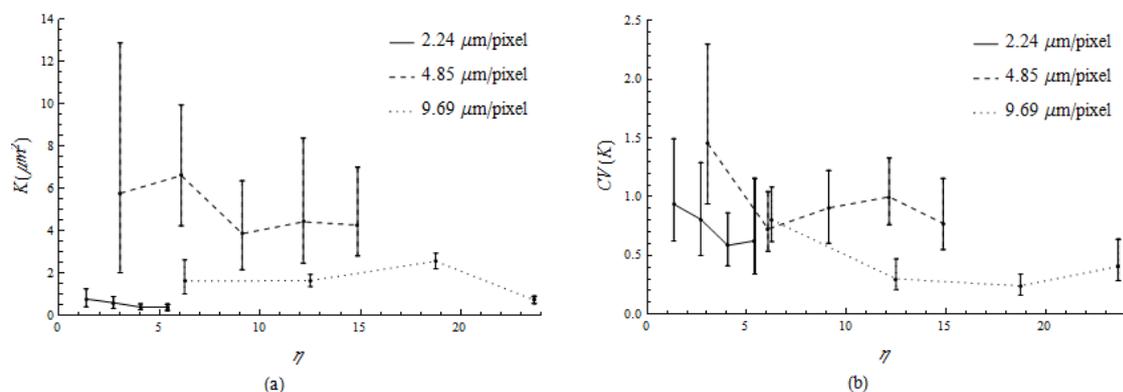


Figura 4.14 Efeito da resolução tomográfica na permeabilidade das amostras de areia argilosa: (a) permeabilidade média e (b) coeficiente de variação da permeabilidade.

Para o CP1, como era esperado, maiores resoluções tendem a apresentar valores menores de permeabilidade, haja vista os poros menores serem representados de maneira mais consistente, não havendo, pois, criação de poros maiores fictícios. A permeabilidade real desse material foi medida experimentalmente por Zubeldia (2013) e é de cerca de 2 μm<sup>2</sup>, valor esse bem próximo do aferido e mostrado na Figura 4.14.

### 4.3 ESTUDO DAS PROPRIEDADES GEOMÉTRICAS DOS AUTOMATOS CELULARES 3D

A partir de rotinas numéricas no Mathematica ® e da metodologia descrita, as regras constantes na Tabela 4.4 foram selecionadas como regras de interesse para a presente pesquisa. As porosidades iniciais e finais (estabilizadas) estão também mostradas na Tabela 4.4.

Tabela 4.4 Automatos celulares 3D: regras e propriedades.

Amostra	Regra	PI	PF	K ( $\mu\text{m}^2$ )	K3D ( $\mu\text{m}^2$ )
1 (2 cm)	5	65	61,51	17303,88	24829,40
1 (3 cm)	5	65	61,51	38933,72	55936,55
1 (4 cm)	5	65	61,51	69215,50	99147,64
1 (6 cm)	5	65	61,51	155734,90	223132,60
1 (5 cm)	5	65	61,51	108149,20	154973,70
2	3	71	61,91	21874,64	39492,90
3	11	58	62,80	155291,80	178200,00
5	23	50	49,91	71521,63	78876,62
6	7	60	50,46	17848,74	20788,87
9	31	40	49,54	18204,38	20120,75
11	47	42	36,38	25549,07	31045,90
12	63	29	38,03	5928,26	5978,48
15	94	35	34,57	1923,68	1169,48
16	127	17	25,95	1047,49	823,42
17	125	18	24,12	640,99	800,04

Na Tabela 4.4, PI e PF correspondem às porosidades iniciais e finais, em porcentagem. Além disso, K3D é a permeabilidade do modelo 3D gerado para impressão, enquanto K é a permeabilidade do modelo computacional antes de considerar apenas a extração de sua superfície. A necessidade das duas aferições é discutida subsequentemente.

É interessante lembrar que os dados da tabela correspondem a autômatos celulares 3D com domínio de 200x200x200 células, cada uma com tamanho real de 250  $\mu\text{m}$ . Apenas nos casos indicados para a regra 5 é que um estudo de escala é feito. Assim, os tamanhos reais das células variam para que o comprimento de lado apresentado entre parênteses seja alcançado. Por exemplo, na amostra 1(2cm), cada célula cúbica tem 100  $\mu\text{m}$  de lado.

#### 4.4 ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DOS AUTOMATOS CELULARES 3D

A Tabela 4.4 já mostra os resultados das permeabilidades medidas para as regras escolhidas. Conforme descrito na metodologia, três fatores devem ser analisados em relação ao quesito permeabilidade, quais sejam: interferência da condição inicial randômica na permeabilidade final; comportamento da permeabilidade nos diversos passos de tempo de evolução do autômato celular considerado e o efeito de escala (tamanho real da célula do domínio 3D). Cada um desses tópicos será analisado separadamente nas subseções vindouras.

##### 4.4.1 EFEITO DA CONDIÇÃO INICIAL RANDÔMICA NA PERMEABILIDADE

A título de simplicidade, apenas o resultado concernente à regra 23 será mostrado no corpo do texto. Para as simulações aqui mostradas, considerou-se um domínio de 100x100x100 células, cada célula com tamanho real de 1  $\mu\text{m}$  e uma porosidade inicial de 50%. Para as outras regras e outro conjunto de simulações para a regra 23, consulte o Apêndice A.

Variou-se a condição inicial do autômato considerado por meio da escolha da semente randômica (*SR*) do algoritmo. Nesse caso, como o gerador de números aleatórios do software Mathematica ® resulta em números pseudo-randômicos, é possível controlar todo o processo de geração por meio da chamada semente randômica. Assim, amostras diferentes foram geradas com aproximadamente a mesma porosidade. A Figura 4.15 mostra esses resultados.

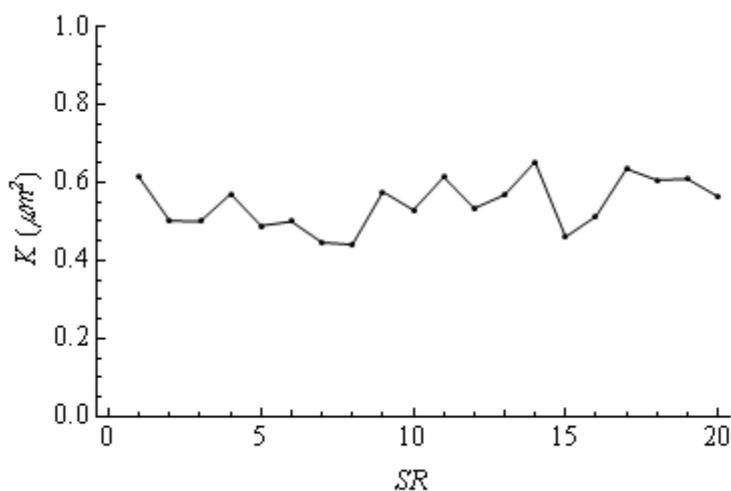


Figura 4.15 Influência da condição inicial randômica na permeabilidade do autômato celular regra 23.

Como se pode observar da Figura 4.15, a variação da condição inicial não gera grandes variações na permeabilidade do meio poroso, indicando que esse não é um problema a ser considerado. O mesmo comportamento é observado para as outras regras consideradas de interesse para a presente tese. Dessa forma, a escolha de uma condição inicial randômica, qualquer que seja, não influencia de maneira relevante as análises aqui desenvolvidas.

#### 4.4.2 MUDANÇA NA PERMEABILIDADE COM A EVOLUÇÃO DO AUTOMATO CELULAR 3D

Nesse caso, mostra-se também apenas a regra 23 com um domínio de  $100 \times 100 \times 100$  células, cada célula com tamanho real de  $1 \mu\text{m}$  e uma porosidade inicial de 50%. A Figura 4.16 mostra como a permeabilidade muda com a evolução do autômato. Para outras regras e outros conjuntos de simulações para a regra 23, consulte o Apêndice A.

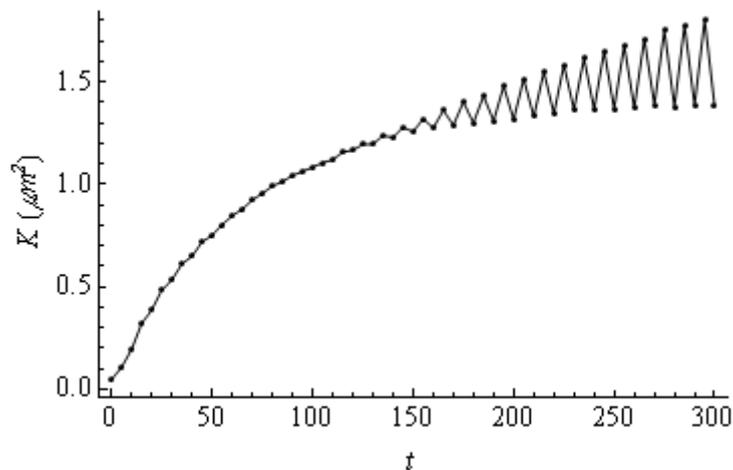


Figura 4.16 Mudança de permeabilidade com a evolução do autômato celular regra 23.

A análise da Figura 4.16 revela que, a partir de um certo tempo, pode haver uma leve divergência da tendência de crescimento da permeabilidade. Isso decorre do fato de que a porosidade de estabilização descrita anteriormente é dada quando exatamente uma porosidade inicial é considerada. Assim, com o menor desvio dessa porosidade inicial ideal, ao passar de vários estágios de evolução, essa diferença voltará e fará com que a porosidade divirja.

No caso em análise, não há divergência, mas sim a troca entre duas porosidades, uma em estágios de evolução par e outra em estágios ímpares. A oscilação

se dará até que a porosidade (e conseqüentemente a permeabilidade) fique limitada a dois valores, variando entre intervalos pares e ímpares. Pode-se então considerar o problema de duas formas: conhecer o ponto em que há divergência (passo 130, aproximadamente na Figura 4.16) e realizar os estudos até esse ponto, ou conhecer todo o espectro de variação das propriedades.

Da análise da evolução das outras regras consideradas, pode-se ver que em alguns casos a variação entre intervalos pares e ímpares não é significativa. De uma forma ou de outra, a análise de permeabilidade é de fácil entendimento, dando-se apenas por inspeção dos gráficos mostrados no Apêndice A.

#### 4.4.3 MUDANÇA NO TAMANHO DAS CÉLULAS DO DOMÍNIO AUTOMATO CELULAR 3D

A partir da mudança do tamanho real da célula do domínio considerado, pode-se utilizar uma mesma regra, mas em escalas distintas, para alcançar permeabilidades diferentes. A Figura 4.17 ilustra esse comportamento. O eixo das abscissas mostra o tamanho  $l$  ( $\mu\text{m}$ ) do lado das células cúbicas que formam o domínio 3D.

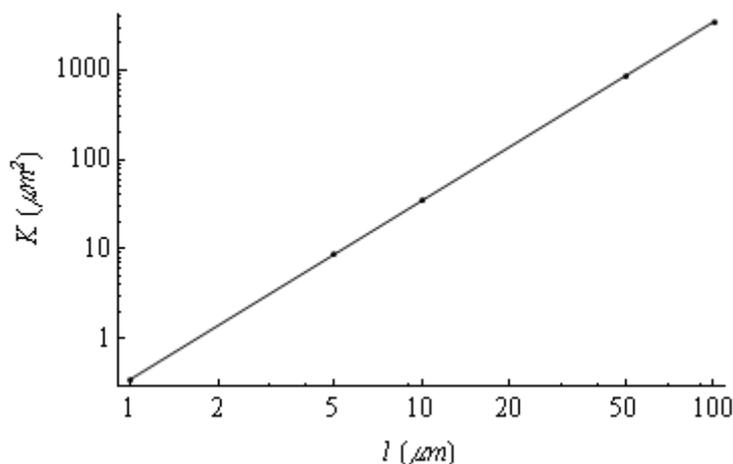


Figura 4.17 Efeito da variação do tamanho  $l$  das células cúbicas que compõem o domínio 3D.

A Figura 4.17 mostra um gráfico log-log dos valores. Para o gráfico em questão, o coeficiente da reta formada é 2, com um  $R^2$  de 0,99. Isso indica que os autômatos celulares 3D seguem a equação de Kozeny-Carman, em que a permeabilidade varia com o quadrado do diâmetro das partículas que constituem o meio poroso.

Na realidade, dos estudos de todas as outras regras, mostrou-se que todas elas seguem a mesma tendência de Kozeny-Carman. Acredita-se, no entanto, que isso seja um artifício interno do software Avizo Fire ®, utilizado no cálculo de permeabilidades. Como nesse software a análise é feita pela simulação em escala de poros, é grande a probabilidade que a técnica de *upscale* utilizada seja exatamente uma equação do tipo Kozeny-Carman. Dessa forma, considera-se o valor de permeabilidade correspondente ao lado  $l$  de 1  $\mu\text{m}$  ( $K_{1\mu\text{m}}$ ) como valor de referência e todas as outras permeabilidades podem ser calculadas por meio da seguinte equação (Carrier, 2003):

$$K = K_{1\mu\text{m}} l^2 \quad (4.1)$$

Nota-se das simulações realizadas utilizando a tomografia como domínio computacional que quando a resolução da tomografia foi de aproximadamente 2  $\mu\text{m}/\text{pixel}$ , o valor real de permeabilidade foi consideravelmente próximo do valor real. Por esse motivo, justifica-se a escolha da permeabilidade  $K_{1\mu\text{m}}$  como sendo de referência. É fato, no entanto, que a Eq. 4.1 poderá ter um expoente diferente de dois em casos reais. Esse tema será discutido posteriormente quando da análise das permeabilidades reais aferidas experimentalmente.

#### **4.5 O USO DE IMPRESSÕES 3D NA REPRESENTAÇÃO DO MEIO POROSO**

Conforme mostra Tabela 4.4, várias regras de diversas porosidades finais, morfologia e permeabilidade foram escolhidas para análise na presente tese. Para todas as regras mostradas na referida tabela foram feitas impressões 3D.

O valor da permeabilidade  $K_{3D}$  mostrada na Tabela 4.4 corresponde à permeabilidade do sólido 3D que é enviado para impressão. É importante notar que esse sólido pode ser diferente daquele gerado anteriormente, haja vista o processo de extração de superfície poder descaracterizar o meio poroso quando o mesmo é muito complexo.

O modelo enviado para impressão é um arquivo de formato *.stl*, formato esse que congrega uma malha triangular correspondente à superfície da amostra a ser impressa. Fatores como número de triângulos empregados e o próprio algoritmo de triangulação podem gerar as diferenças de permeabilidade entre o modelo automático 3D e a superfície real impressa. Por isso, é importante verificar se não houve erros na geração do arquivo *.stl*. Para medir a permeabilidade a partir do arquivo *.stl* gerado, o

mesmo é importado no programa Avizo Fire ® e a partir de um algoritmo, converte-se a superfície em sólido novamente.

As figuras vindouras mostrarão as amostras impressas e suas correspondentes computacionais. É possível ver na Figura 4.18 que cada amostra foi devidamente identificada com o número presente na Tabela 4.4. Isso foi feito ao adicionar camadas impermeabilizantes nas laterais da amostra e sobre essas camadas marcou-se o número. O modelo enviado para impressão já estava com as vedações. Todo o processo de geração, vedação e numeração foi feito por meio de rotinas no software Mathematica ®.

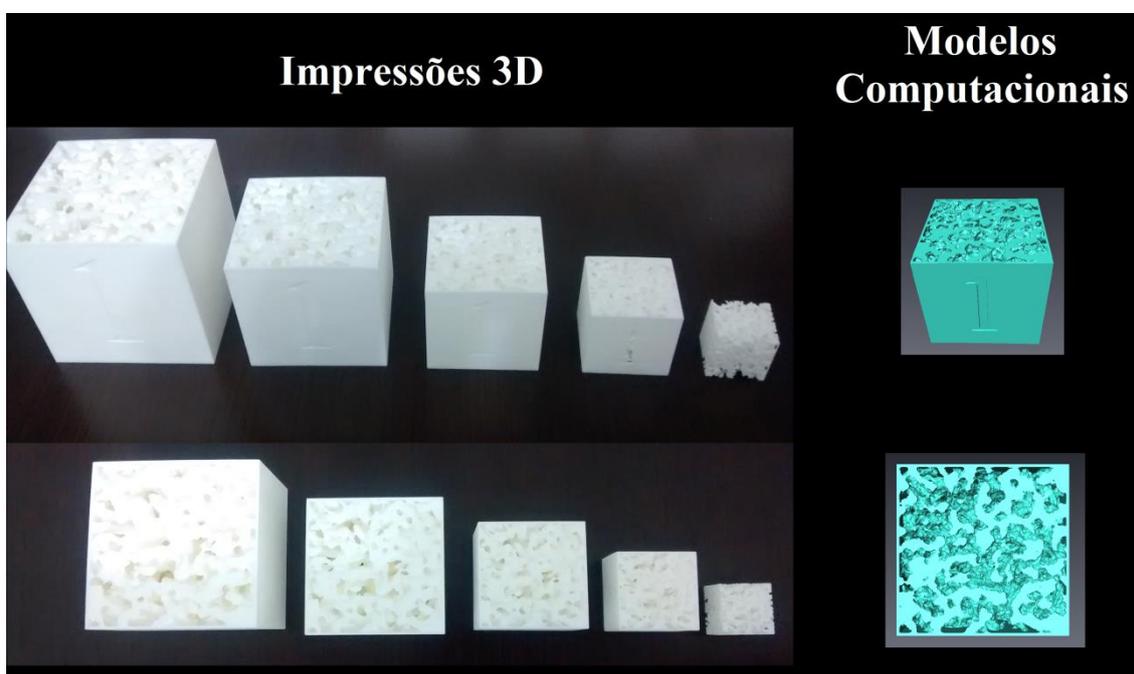


Figura 4.18 Impressões 3D e modelos computacionais para a amostra 1 em diferentes escalas (da esquerda para direita, com 6cm, 5cm, 4cm, 3cm e 2cm de lado).

Ainda da análise da Figura 4.18, é possível ver que para as amostras menores houve falhas na impressão da camada impermeabilizante. Tal fato decorrer da espessura diminuta que a mesma tinha nesse caso. Outros métodos impermeabilizantes podem ser estudados a fim de aproveitar essas amostras nos ensaios experimentais a serem realizados. Por exemplo, a colocação de uma fita impermeável pode ser apontada como solução nesse caso para vedar a lateral das amostras.

Considere também a Figura 4.19, em que mais amostras impressas são mostradas ao lado de seus respectivos modelos computacionais.

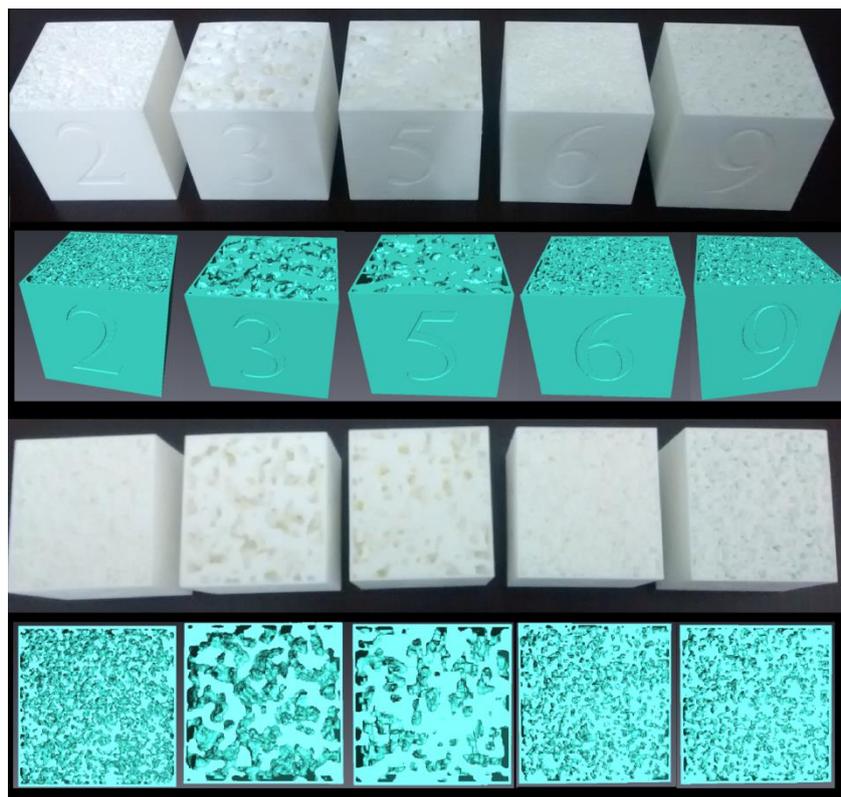


Figura 4.19 Impressões 3D e seus modelos computacionais para as amostras 2, 3, 5, 6 e 9.

É notável da análise da Figura 4.19 a precisão na impressão 3D das amostras computacionais.

Por fim, considere a Figura 4.20 com as últimas amostras consideradas na presente tese. É interesse notar que na Figura 4.20, a amostra 12 está verde. Tal coloração decorre do corante contido na acetona utilizada para desobstrução de seus poros. Nota-se também que no caso das amostras 15, 16 e 17 o entupimento dos poros é notável. Esses casos são os de menores porosidades consideradas (aproximadamente 35% a 24%), mostrando assim que para essas amostras a imersão em acetona é crucial. Ainda que imersas em acetona comercial, essas amostras não se mostraram desobstruídas. Tentou-se, então, a submersão em acetona 99% e acetato de etila 99%. Novamente, não foi observada a desobstrução dos poros, ficando habilitadas para realização do ensaio de permeabilidade real apenas as amostras 1\_6cm, 1\_5cm, 1\_4cm, 1\_3cm, 1\_2cm, 2 e 3.

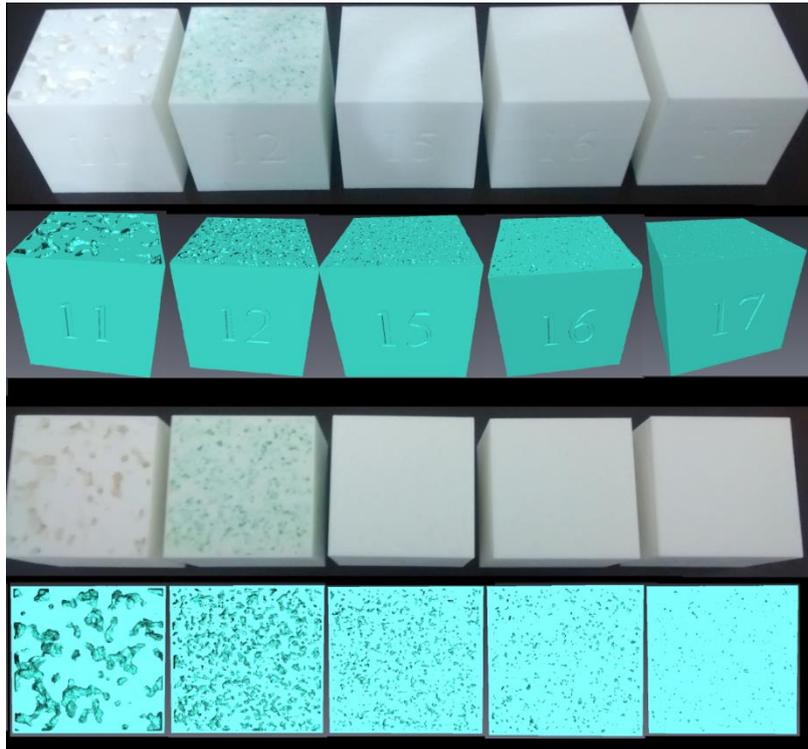


Figura 4.20 Impressões 3D e seus modelos computacionais para as amostras 11, 12, 15, 16 e 17.

A próxima etapa a ser realizada é ensaiar todos os corpos de prova impressos para verificação de suas permeabilidades. O permeâmetro a ser usado foi montado pelo autor com partes de permeômetros já existentes no Laboratório de Geotecnia da Universidade de Brasília, conforme descrito na metodologia.

A análise de permeabilidade real dos corpos de prova impressos segue abaixo.

#### **4.5.1 ANÁLISE DE PERMEABILIDADE DAS AMOSTRAS GERADAS POR IMPRESSÃO 3D.**

A partir da metodologia padrão de cálculo de permeabilidade por meio de carga variável, os valores de permeabilidade encontrados para a primeira configuração de permeâmetro utilizada estão mostrados na Tabela 4.5.

Nota-se claramente na Tabela 4.5 que os valores de permeabilidade encontrados são sobremaneira menores do que aqueles previstos teoricamente por meio da simulação numérica. Nesse caso, no entanto, essa diferença não é real, haja vista a premissa de analisar esse ensaio como um ensaio de permeabilidade por carga variável comum não ser válida.

Tabela 4.5 Valores de permeabilidade das amostras geradas por impressão 3D

Amostra	Tempo (s)	Carga Inicial (m)	Carga Final (m)	Permeabilidade (m/s)
1_6cm	7,325	1,3	0,4	$2,11 \times 10^{-4}$
1_5cm	7,090	1,3	0,4	$2,61 \times 10^{-4}$
1_4cm	6,855	1,3	0,4	$3,38 \times 10^{-4}$
1_3cm	8,460	1,3	0,4	$3,65 \times 10^{-4}$
1_2cm	-	-	-	-
2	7,800	1,3	0,4	$2,37 \times 10^{-4}$
3	6,945	1,3	0,4	$2,67 \times 10^{-4}$

Para casos em que a permeabilidade do meio poroso sob análise é muito alta, as perdas de carga internas do sistema constituem uma parcela muito significativa da perda de carga global. Em um ensaio de permeabilidade comum, considera-se que a perda de carga do sistema advém exclusivamente da passagem de água pelo solo. No caso em análise, no entanto, a perda de carga gerada pelo solo é sobremaneira diminuta quando comparada à perda de carga do restante do sistema, o que acaba mascarando os resultados obtidos.

Um ponto de crucial importância no entendimento desses ensaios de permeabilidade é o tempo de ensaio, que é de cerca de sete segundos para o arranjo de permeômetro utilizado. Esse tempo não deve ser tão pequeno pois ao se retirar do cômputo de perda de carga aquela advinda do sistema, uma pequena variação do tempo gera uma grande variação de permeabilidade aferida, conforme o modelo físico a ser desenvolvido abaixo prevê.

#### 4.5.1.1 MODELO FÍSICO PARA ANÁLISE DE PERMEABILIDADE DE AMOSTRAS COM ALTA PERMEABILIDADE.

Para os casos em que a permeabilidade da amostra,  $k$ , seja muito grande (de ordens acima de  $10^{-2}$  m/s), o permeômetro se comporta aproximadamente como um reservatório de água sendo esvaziado por um orifício em sua base. Aqui se refere à permeabilidade de engenharia e não permeabilidade intrínseca. Dessa forma, considere o esquema presente na Figura 4.21.

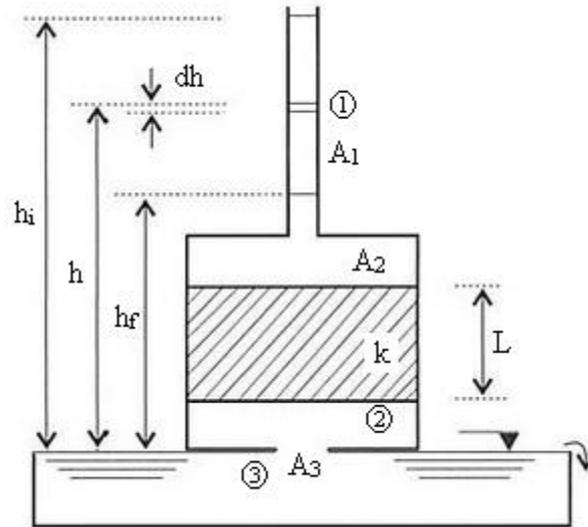


Figura 4.21 Esquema teórico para análise de altas permeabilidades.

Por meio da continuidade, considere a relação entre as vazões das seções 2 e 3 indicadas na Figura 4.21. A velocidade  $v$  da água que sai da amostra de comprimento  $L$  pode ser relacionada à velocidade de saída da água na seção 3,  $v_s$ , por meio da seguinte relação:

$$v = v_s \frac{A_3}{A_2} \quad (4.2)$$

em que  $A_i$ ,  $i = 1, 2$  e  $3$ ; é a área da seção  $i$  mostrada na Figura 4.21.

Ainda, por meio da equação da continuidade, a comparação das seções 1 e 3 mostradas na Figura 4.21 resulta em:

$$v_s = \frac{A_1}{A_3} \frac{dh}{dt} \quad (4.3)$$

Por outro lado, a perda de carga  $\Delta h$  gerada pela amostra é dada por:

$$\Delta h = \frac{vL}{k} = \frac{v_s LA_3}{kA_2} \quad (4.4)$$

Por meio da equação de Bernoulli, a comparação das seções 1 e 3 resulta:

$$gh = \frac{v_s^2}{2} + g\Delta h = \frac{v_s^2}{2} + v_s \frac{gLA_3}{kA_2} \quad (4.5)$$

Da solução da Eq. 4.5 para  $v_s$ , tem-se:

$$v_s = -\frac{\beta}{2} + \sqrt{\left(\frac{\beta}{2}\right)^2 + 2gh}, \quad \beta = \frac{2gLA_3}{kA_2} \quad (4.6)$$

Ao combinar as Eqs. 4.3 e 4.6, tem-se a seguinte equação diferencial ordinária:

$$dh \left( -\frac{\beta}{2} + \sqrt{\left(\frac{\beta}{2}\right)^2 + 2gh} \right)^{-1} = \frac{A_3}{A_1} dt \quad (4.7)$$

Por meio da integração direta entre os limites físicos da Figura 4.21, resulta:

$$\sqrt{2gh_i + \left(\frac{\beta}{2}\right)^2} - \sqrt{2gh_f + \left(\frac{\beta}{2}\right)^2} + \frac{\beta}{2} \ln \left( \frac{-\beta + \sqrt{8gh_i + \beta^2}}{-\beta + \sqrt{8gh_f + \beta^2}} \right) = \frac{gA_3}{A_1} t \quad (4.8)$$

A utilização da Eq. 4.8 é sobremaneira simples. Basta inserir os dados do ensaio de permeabilidade de carga variável, resolver para  $\beta$  e, por meio desse valor e da Eq. 4.6, calcular o valor da permeabilidade  $k$ . Na presente tese, esse processo foi realizado por meio de uma rotina no software Mathematica ®.

A partir da análise do esquema na Figura 4.21 e da Eq. 4.8, há duas formas simples de aumentar o tempo do ensaio. A primeira é aumentando o valor da área na seção 1. O outro é aumento a área na seção 3. Por esse motivo, o segundo arranjo de permeâmetro descrito na metodologia foi utilizado.

É interessante notar que o valor da área na seção 3 é de certa forma complicado de medir. Além disso, como o modelo acima descrito é teórico, considera que não há outras perdas de carga se não aquela gerada pela amostra. Para corrigir isso, basta realizar um ajuste a partir dos dados experimentais. Para tal, calcula-se uma área  $A_{3,eq}$  equivalente. Essa área corresponderá àquela necessária para que o tempo de saída da água sem nenhuma amostra dentro do permeâmetro,  $t_{eq}$ , seja igual ao tempo teórico de saída. Matematicamente, ao realizar um ensaio de permeabilidade sem nenhuma amostra dentro do permeâmetro,  $k \rightarrow \infty$  e  $\beta \rightarrow 0$ , logo da Eq. 4.8:

$$A_{3,eq} = \frac{A_1}{gt_{eq}} \left( \sqrt{2gh_i} - \sqrt{2gh_f} \right) \quad (4.9)$$

Ao utilizar o valor de  $A_{3,eq}$  como  $A_3$  na Eq.4.8 e seguir os procedimentos de solução, obtém-se o valor corrigido de permeabilidade.

Assim, ao utilizar o segundo permeâmetro descrito na metodologia, os resultados do ensaio de permeabilidade são mostrados na Tabela 4.6. É interessante notar que a amostra 1\_2cm não pode ser ensaiada por dificuldades experimentais.

Tabela 4.6 Dados de permeabilidade aferidos para os modelos 3D após correção.

Amostra	Tempo (s)	Carga inicial (m)	Carga final (m)	$k$ (m/s)	$k$ corrigido (m/s)
1_6cm	21,390	0,16	0,085	$5,12 \times 10^{-3}$	$4,58 \times 10^{-1}$
1_5cm	22,110	0,16	0,085	$5,94 \times 10^{-3}$	$7,97 \times 10^{-2}$
1_4cm	22,365	0,16	0,085	$7,34 \times 10^{-3}$	$7,69 \times 10^{-2}$
1_3cm	24,465	0,16	0,085	$8,95 \times 10^{-3}$	$3,67 \times 10^{-2}$
1_2cm	-	-	-	-	-
2	25,340	0,16	0,085	$5,19 \times 10^{-3}$	$1,76 \times 10^{-2}$
3	21,525	0,16	0,085	$6,11 \times 10^{-3}$	$2,59 \times 10^{-1}$

Ao comparar os valores da Tabela 4.6 com aqueles da Tabela 4.4, é possível ver que, em geral, os valores calculados teoricamente diferem por 1 ordem de grandeza a mais do que aqueles calculados experimentalmente. A Figura 4.22 mostra a razão entre os valores em detalhes.

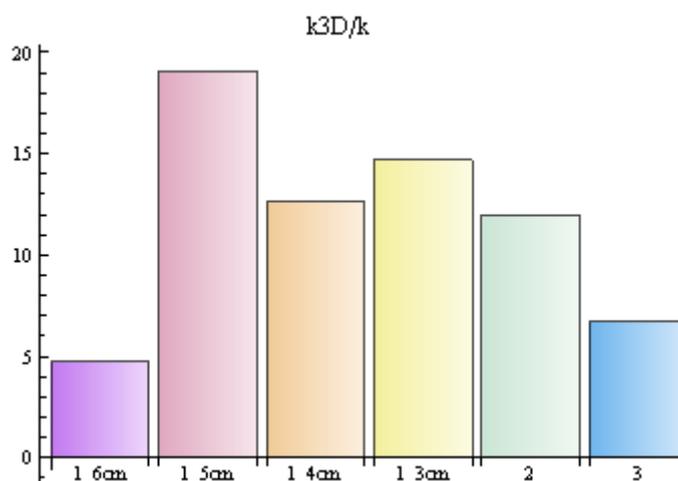


Figura 4.22 Razões entre valores de permeabilidade numérica ( $k_{3D}$ ) e permeabilidade experimental ( $k$ ).

Do ponto de vista puramente de valores, a variação de permeabilidade pode ser considerada pouco satisfatória. No entanto, alguns fatores devem ser levados em consideração. O primeiro deles é a eficácia do software Avizo Fire ® em calcular os valores de permeabilidade.

Sabe-se que o *upscale* de valores é uma das mais delicadas questões quando se considera a simulação em escala de poros. Nesse sentido, quanto mais distante a escala simulada está da real, maiores as chances de incorrer em inconsistências.

No caso das amostras tomografadas, em que também foi estimada a permeabilidade por meio do software Avizo Fire ®, os valores de permeabilidade estimados são razoavelmente próximos dos valores reais. Por exemplo, no caso da areia argilosa, a permeabilidade estimada gira em torno de  $3 \times 10^{-3}$  cm/s, valor extremamente próximo do valor aferido experimentalmente,  $2 \times 10^{-3}$  cm/s.

Além da questão do *upscale*, outro ponto a ser discutido é a metodologia experimental empregada. É fato que devido ao processo de aferição de permeabilidade ter sido indireto, as falhas do modelo teórico utilizado na análise automaticamente são refletidas nos valores de permeabilidade estimados. Para que esse ponto fosse melhor avaliado, outro aparato experimental deveria ser construído exclusivamente para esse fim, podendo-se controlar as perdas de carga do sistema de maneira mais eficaz. Como a concepção do aparelho por si só constituiria um estudo totalmente a parte daquele por hora desenvolvido e, por isso, estaria fora do escopo da presente tese, essa montagem foi deixada para pesquisas futuras.

A partir dos dados aferidos e das considerações feitas, nota-se que as dificuldades encontradas não decorrem da utilização das impressões 3D para o estudo da permeabilidade, mas sim da eficácia dos próprios software e equipamento utilizados. Assim, no âmbito da presente tese, pode-se concluir que no âmbito da comparação entre permeabilidades, a utilização de impressões 3D para estudo de permeabilidade em meios porosos artificiais é eficaz e válida. No âmbito de representação geométrica da matriz porosa, a eficácia se verificará por meio da análise metrológica subsequente.

Caso se considere como aferições válidas aquelas obtidas experimentalmente e o valor de permeabilidade  $K_{1\mu m}$ , que corresponde à simulação numérica com tamanho de célula de 1  $\mu m$ , a Figura 4.23 mostra o gráfico e a equação de ajuste para o *upscale*.

Nota-se da Figura 4.23 que caso se considere uma equação de ajuste da forma da Eq. 4.1, o expoente do ajuste se torna 1,7064 (curva vermelha), ou seja, menor do que o 2 previsto teoricamente pelo software (curva preta). Caso não seja fixado que a constante que multiplica o quadrado do tamanho da célula seja  $K_{1\mu m}$ , o ajuste muda ligeiramente, resultado numa constante de 1,71014 e um expoente de 1,6201 (curva azul). Em ambos os casos, os expoentes são menores do que 2, contrariando a previsão teórica. A Figura 4.23 está mostrada em escala log-log pois teoriza-se que a variação de permeabilidade com escala é exponencial.

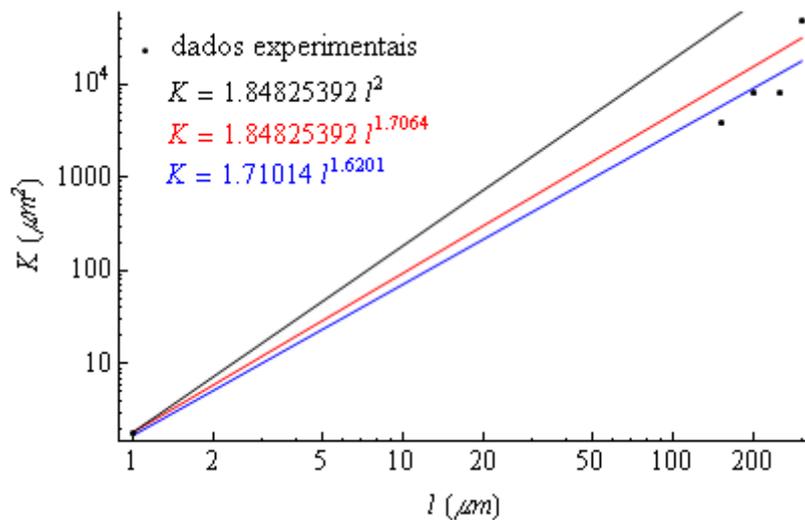


Figura 4.23 Análise de *upscale* para a amostra 1 (regra 5).

Estando discutida a possibilidade de avaliar a permeabilidade de amostras geradas por impressão 3D e da correspondência entre os experimentos numéricos e reais, deve-se então prosseguir para a análise metrológica dos modelos impressos.

#### 4.5.2 ANÁLISE METROLÓGICA DAS AMOSTRAS GERADAS POR IMPRESSÃO 3D.

Uma grande questão que surge para a correta utilização das impressões 3D como forma de representação de geometrias complexas é se de fato o processo de impressão reproduz a geometria complexa de poros do meio poroso considerado.

Para tal, uma análise tomográfica foi realizada em amostras impressas. Para melhor adequação ao equipamento, amostras cilíndricas podem ser consideradas. O processo de extração de um sub-volume cilíndrico do domínio autômato celular (que é cúbico) pode ser feito por meio de uma rotina do Mathematica. Um exemplo é mostrado na Figura 4.24.

Pode-se observar que, assim como nas impressões cúbicas, as impressões cilíndricas podem também ser numeradas e vedadas lateralmente. Na presente tese, no entanto, as amostras cúbicas já impressas serão utilizadas, haja vista o tomógrafo Metrotom 1500 ser capaz de realizar o ensaio sem problemas.

Conforme discutido anteriormente, as tomografias foram realizadas em uma visita à Fundação CERTI, Florianópolis.

A análise metrológica advinda da tomografia das amostras é detalhada nos subitens seguintes.

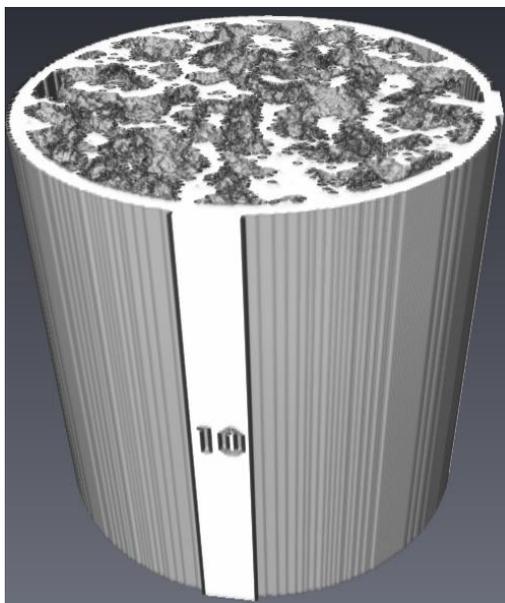


Figura 4.24 Exemplo de modelo computacional de sub-volume cilíndrico a ser tomografado.

#### **4.5.2.1 ANÁLISE DAS IMPRESSÕES 3D RELATIVA AO AUTÔMATO REGRA 5 (FAMÍLIA DE AMOSTRAS 1).**

O processo de análise metrológica já está descrito na metodologia da presente tese. Assim, para a amostra 1\_6cm, a Figura 4.25 mostra um diagrama de desvios. Esse diagrama advém de cálculos realizados pelo software VGStudio Max®, em que a superfície do modelo computacional é comparada à superfície da tomografia gerada. Para que haja a comparação, a tomografia tem sua superfície extraída e as distâncias entre superfícies são aferidas por meio de algoritmos próprios.

O diagrama de cores mostrado na Figura 4.25 busca fornecer um panorama geral das diferenças entre o modelo computacional e o meio tomografado. É interessante notar, no entanto, que a comparação pode ser feita por planos.

Outra forma de analisar a diferença entre o meio computacional e aquele gerado por meio de impressão 3D é por meio do histograma de desvios. Tanto o histograma de frequência relativa quanto o de frequência acumulada são mostradas na Figura 4.26 para a amostra 1\_6cm.

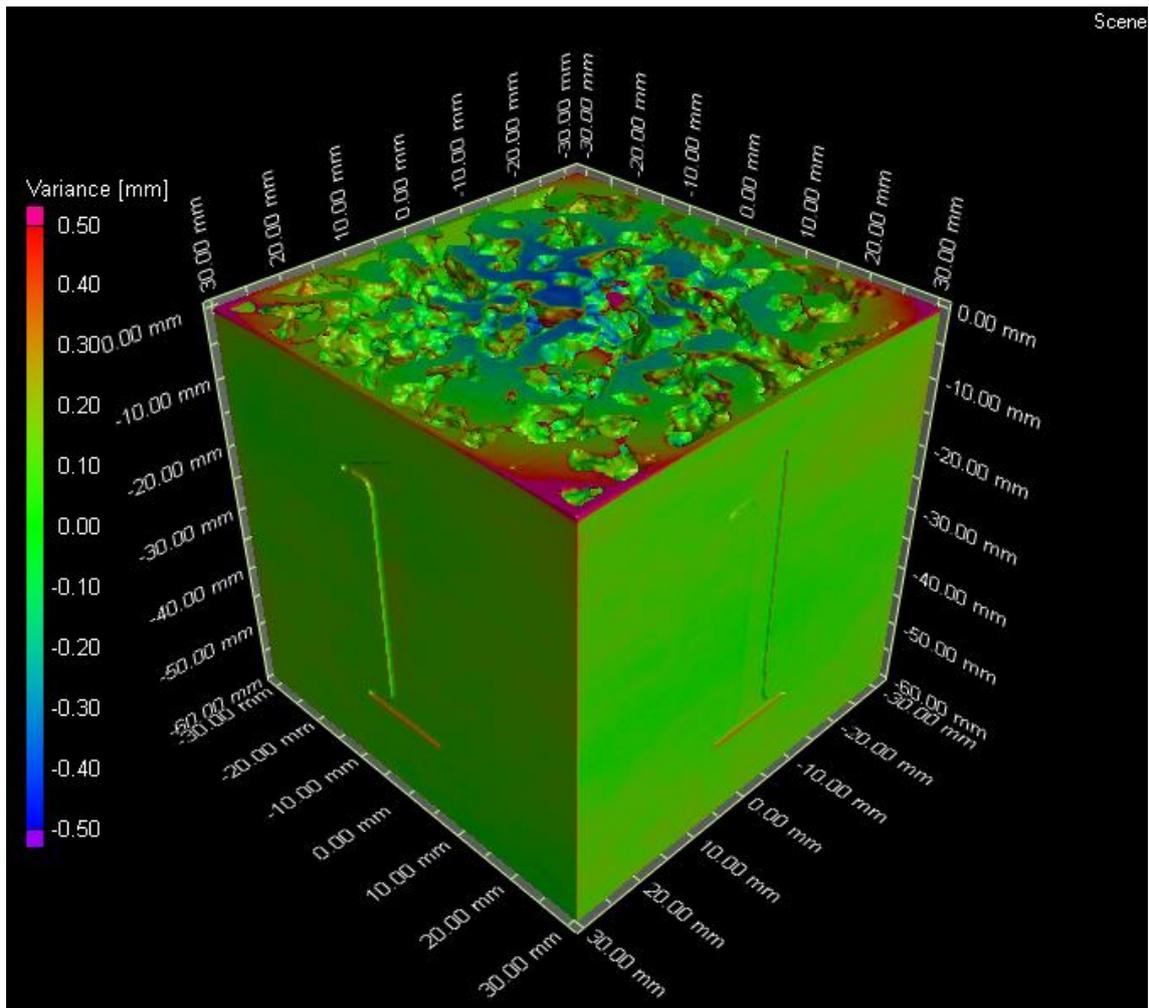


Figura 4.25 Diagrama de desvios para a amostra 1\_6cm.

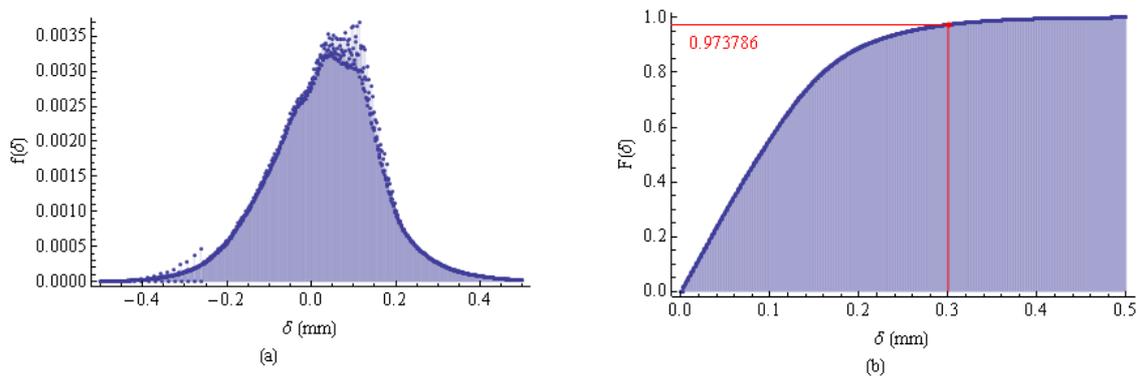


Figura 4.26 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1\_6cm.

Da análise da Figura 4.26 é possível ver que 97,38% dos desvios são menores do que 0,3 mm, que é a precisão da impressora utilizada. Isso revela, pois, a grande fidelidade entre o modelo computacional e o modelo impresso.

Para a amostra 1\_5cm, por outro lado, o diagrama de desvios pode ser mostrado na Figura 4.27.

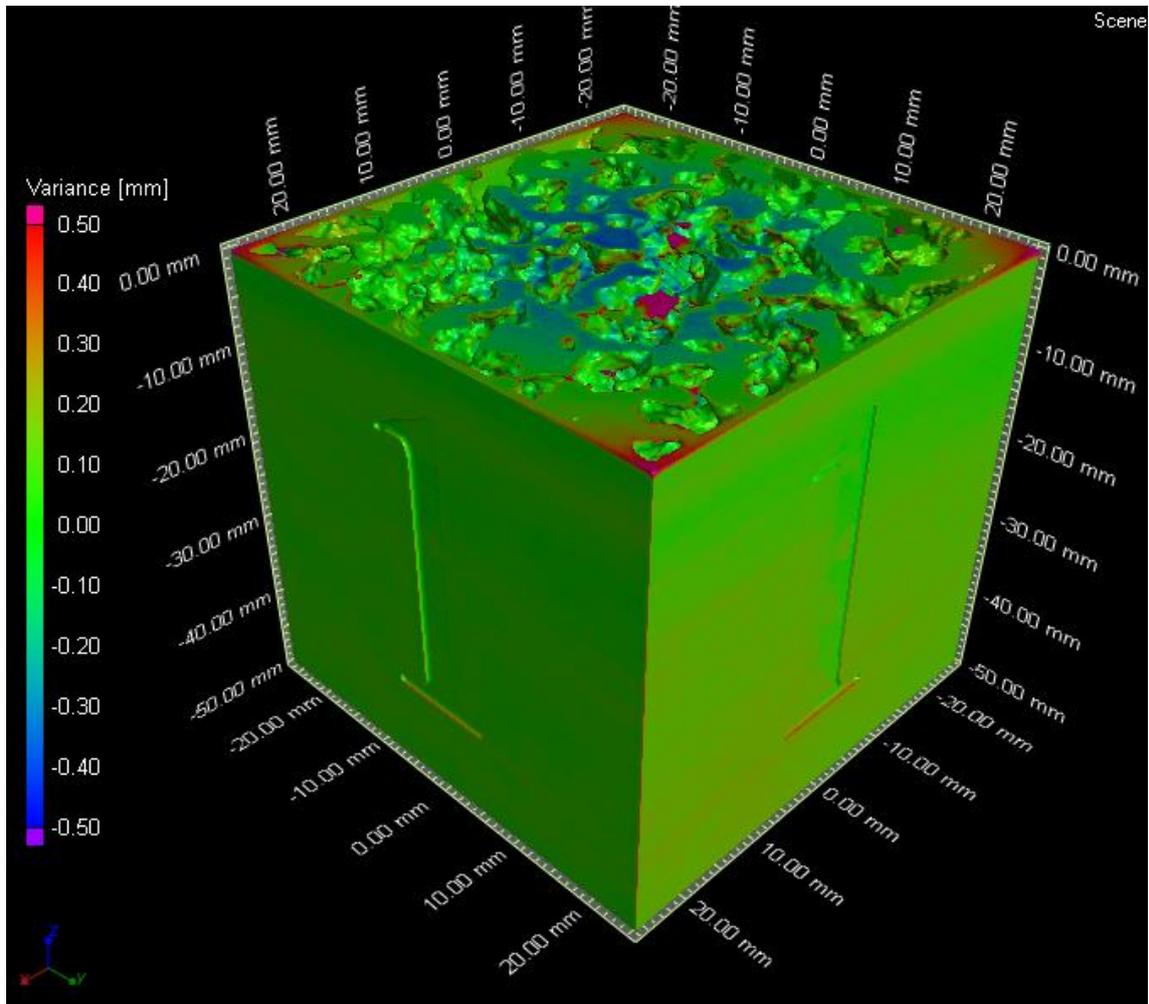


Figura 4.27 Diagrama de desvios para a amostra 1\_5cm.

Tanto o histograma de frequência relativa quanto o de frequência acumulada são mostradas na Figura 4.28 para a amostra 1\_5cm.

Da análise da Figura 4.27 e da Figura 4.28 é possível ver que 98,49% dos desvios são menores do que 0,3 mm, que é a precisão da impressora utilizada. Novamente, a grande fidelidade entre o modelo computacional e o modelo impresso é verificada.

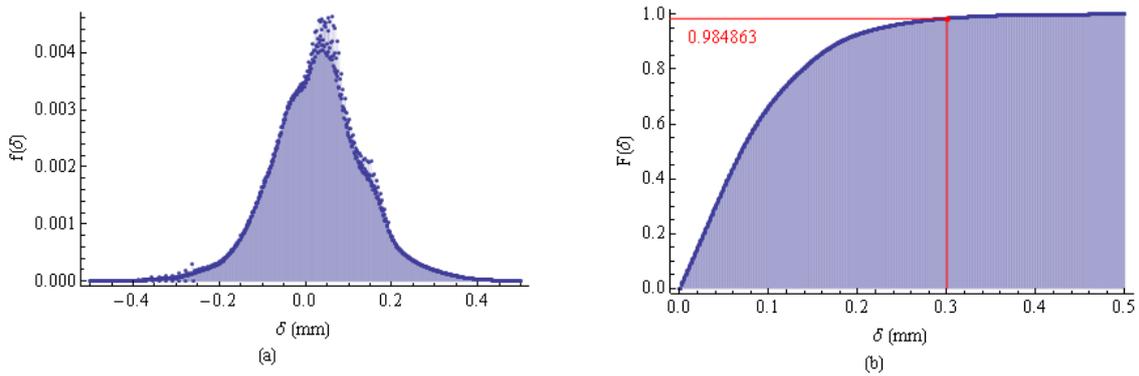


Figura 4.28 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1\_5cm.

Para a amostra 1\_4cm o diagrama de desvios pode ser mostrado na Figura 4.29.

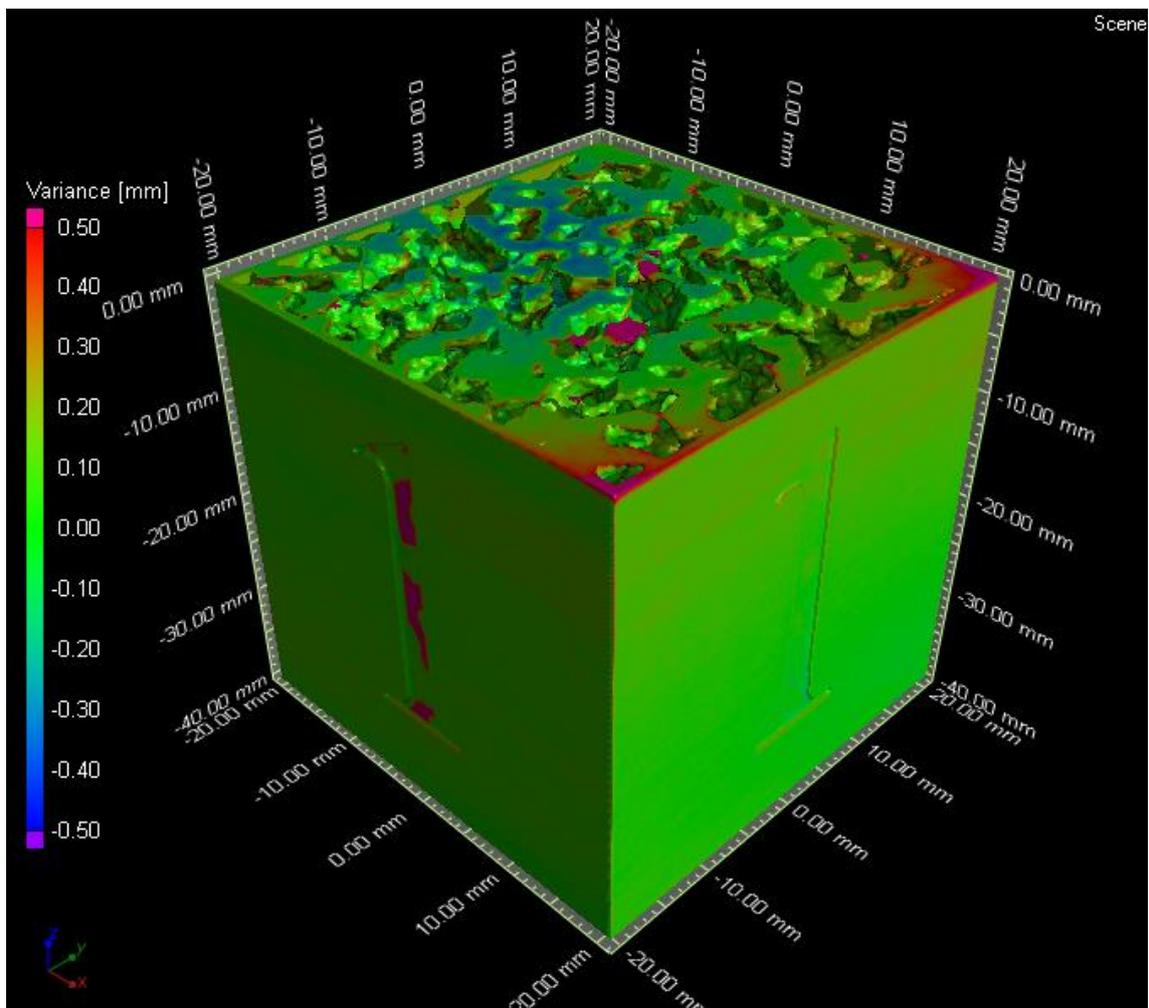


Figura 4.29 Diagrama de desvios para a amostra 1\_4cm.

É possível notar na Figura 4.29 que na numeração da amostra, há a falta de material, conforme comentado anteriormente. Nesse caso, já é possível se fazer sentir a impossibilidade da impressora em representar essa parede. Nota-se no entanto, que isso já era previsto devido à precisão do equipamento.

Tanto o histograma de frequência relativa quanto o de frequência acumulada são mostradas na Figura 4.30 para a amostra 1\_4cm.

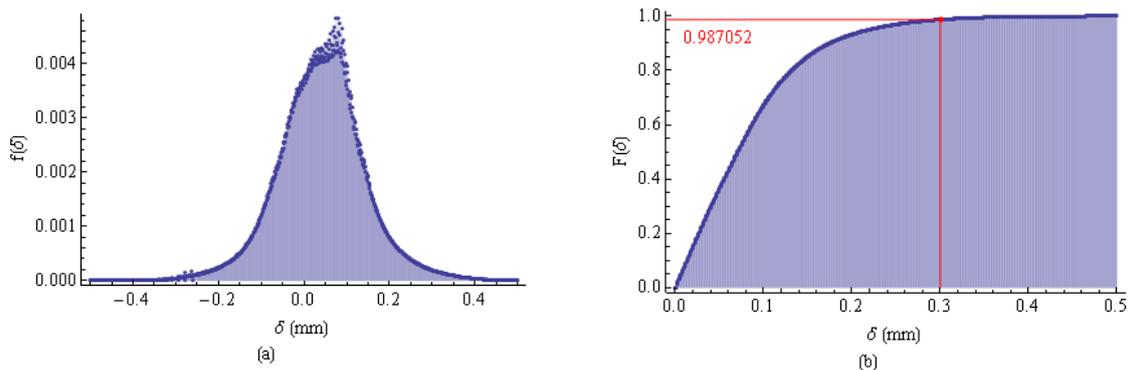


Figura 4.30 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1\_4cm.

Da análise da Figura 4.29 e da Figura 4.30 é possível ver que 98,70% dos desvios são menores do que 0,3 mm, que é a precisão da impressora utilizada. Mais uma vez, a grande fidelidade entre o modelo computacional e o modelo impresso é verificada.

Continuando, para a amostra 1\_3cm o diagrama de cores que representa globalmente os desvios pode ser visualizado na Figura 4.31.

Assim como no caso da amostra 1\_4cm em que a numeração já se mostrou sem material de impressão, para a amostra 1\_3cm ambas as numerações já não foram impressas, conforme mostra a Figura 4.31.

Os histogramas de frequências relativa e acumulada são, por outro lado, mostrados na Figura 4.32.

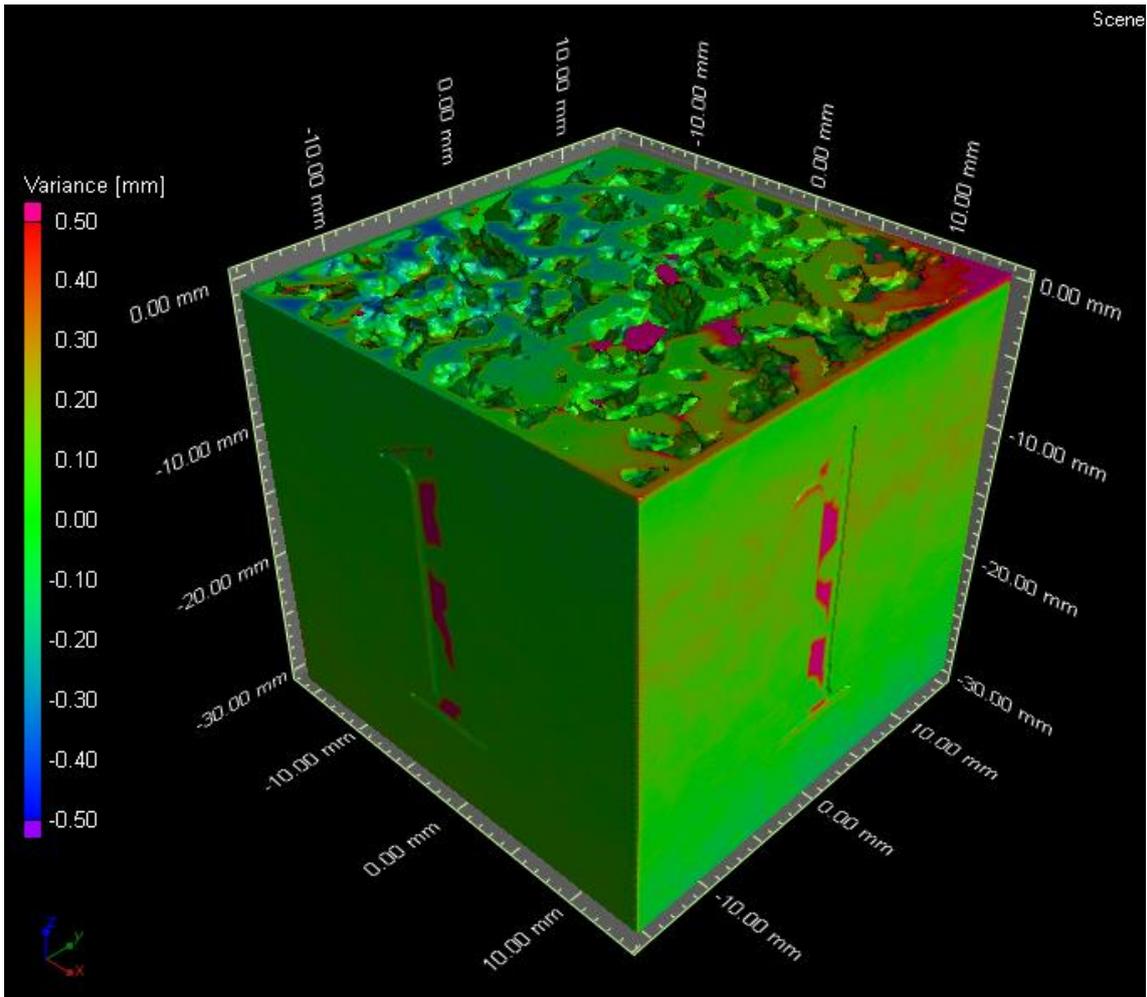


Figura 4.31 Diagrama de desvios para a amostra 1\_3cm

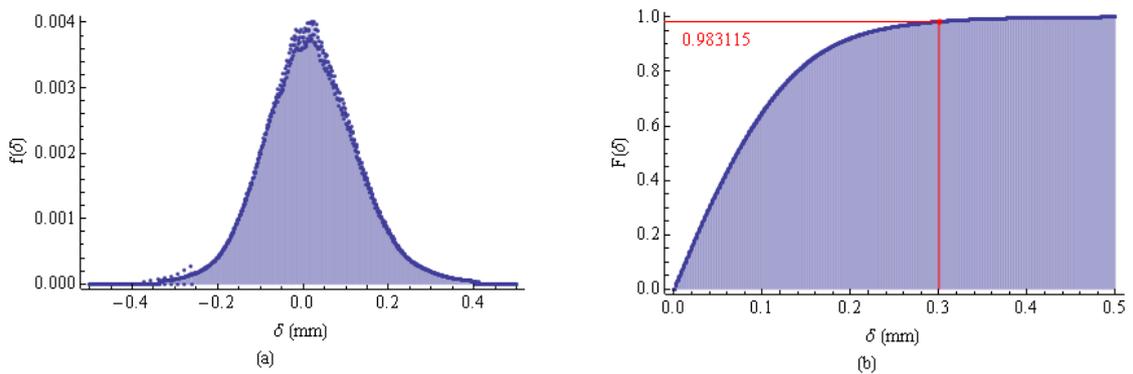


Figura 4.32 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1\_3cm

A partir dos dados de metrologia, a amostra 1\_3cm também foi considerada fiel em relação ao seu modelo computacional. Nota-se que nesse caso, 98,31% dos desvios são menores do que a precisão da impressora, que é de 0,3 mm.

Para a amostra 1\_2cm o diagrama de desvios pode ser mostrado na Figura 4.33.

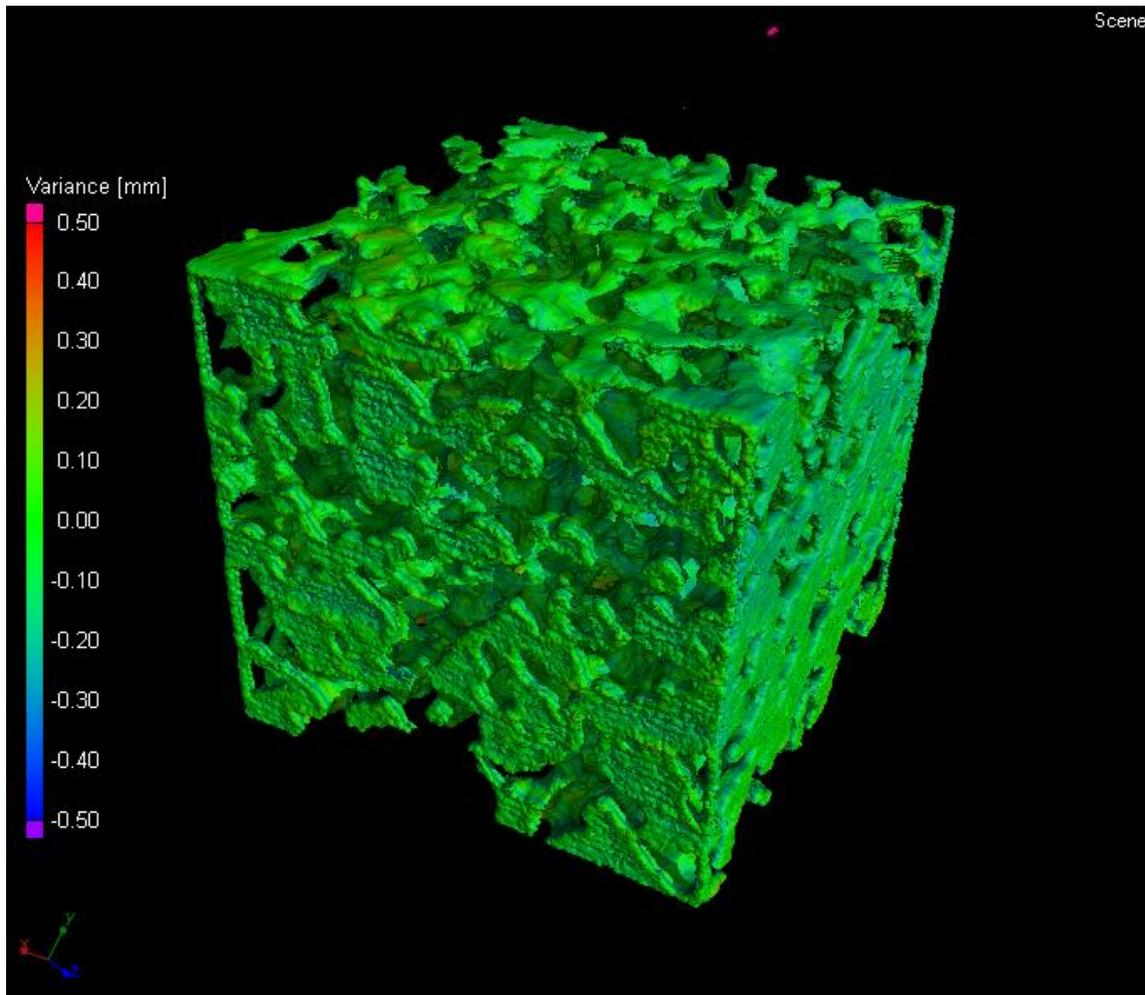


Figura 4.33 Diagrama de desvios para a amostra 1\_2cm.

É possível notar na Figura 4.33 que no caso da amostra 1\_2cm, todas as paredes laterais foram perdidas no processo de impressão. Novamente, isso já era previsto devido à precisão do equipamento de impressão.

Tanto o histograma de frequência relativa quanto o de frequência acumulada são mostradas na Figura 4.34 para a amostra 1\_2cm.

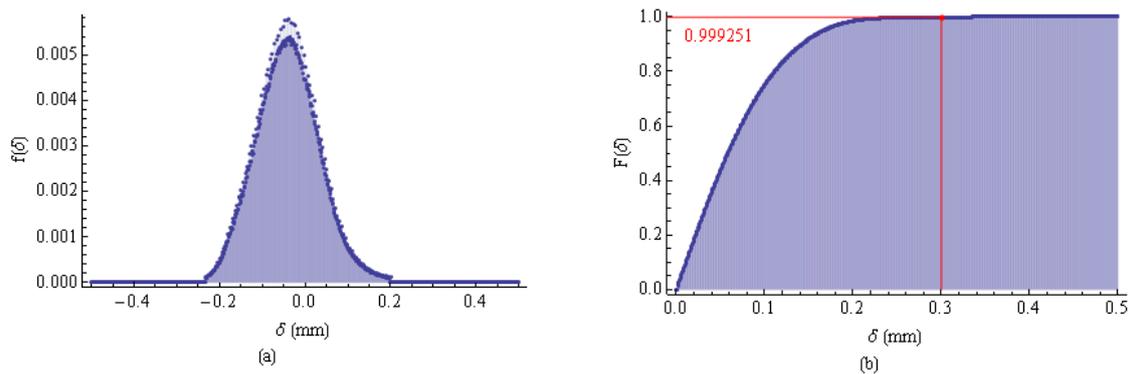


Figura 4.34 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 1\_2cm.

Da análise da Figura 4.33 e da Figura 4.34 é possível ver que 99,92% dos desvios são menores do que 0,3 mm, que é a precisão da impressora utilizada. Novamente, a fidelidade entre o modelo computacional e o modelo impresso é verificada.

Feitas as análises metrológicas para a família de amostras 1, deve-se prosseguir para a amostra 2 e subsequentemente para a amostra 3.

#### 4.5.2.2 ANÁLISE DAS IMPRESSÕES 3D RELATIVA AO AUTÔMATO REGRA 3 (AMOSTRA 2).

O mesmo tipo de análise feita para a família de amostras 1 será feito para a amostra 2. Assim, para essa amostra, o diagrama de desvios pode ser mostrado na Figura 4.35.

Da análise da Figura 4.35 pode-se notar que no caso da amostra 2, o espectro de variações é maior (de -0,7 mm a 0,7 mm). Ainda assim, a localização dessas regiões de maior erro são sobremaneira pequenas, não influenciando pois na fidelidade geral entre amostra impressa e computacional.

O histograma de frequência relativa e o de frequência acumulada são mostradas na Figura 4.36 para a amostra 2.

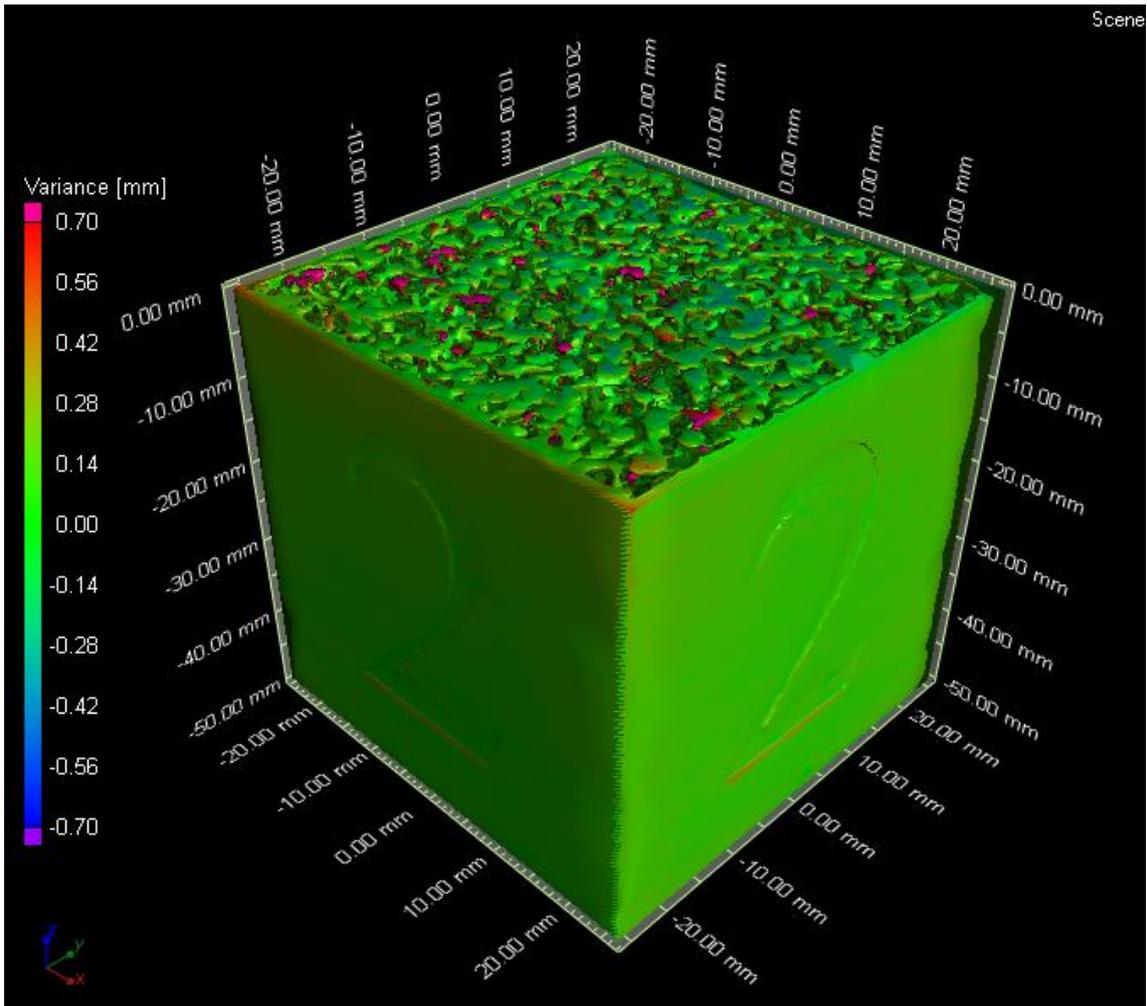


Figura 4.35 Diagrama de desvios para a amostra 2.

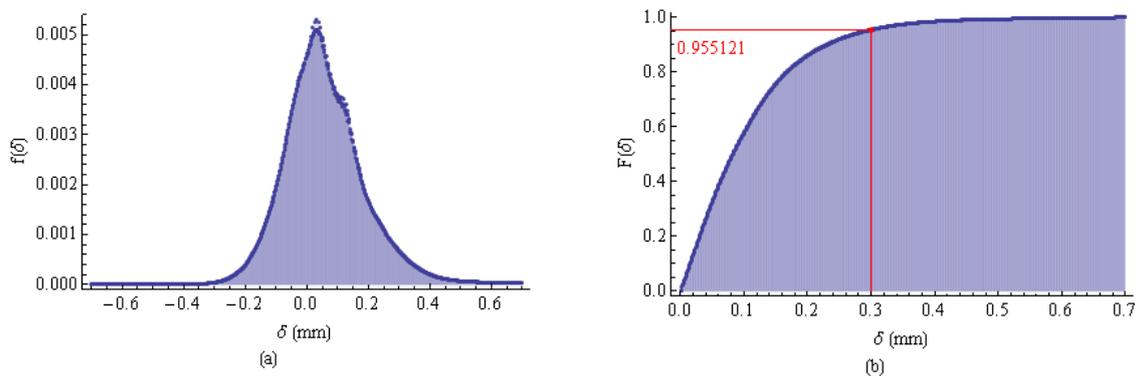


Figura 4.36 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 2.

Da análise da Figura 4.35 e da Figura 4.36 é possível ver que 95,51% dos desvios são menores do que 0,3 mm, que é a precisão da impressora utilizada. Ainda que o percentual seja menor do que nos casos da família de amostras 1, a fidelidade entre o modelo computacional e o modelo impresso é verificada.

#### 4.5.2.3 ANÁLISE DAS IMPRESSÕES 3D RELATIVA AO AUTÔMATO REGRA 11 (AMOSTRA 3).

Para a amostra 3, o diagrama de desvios pode ser mostrado na Figura 4.37.

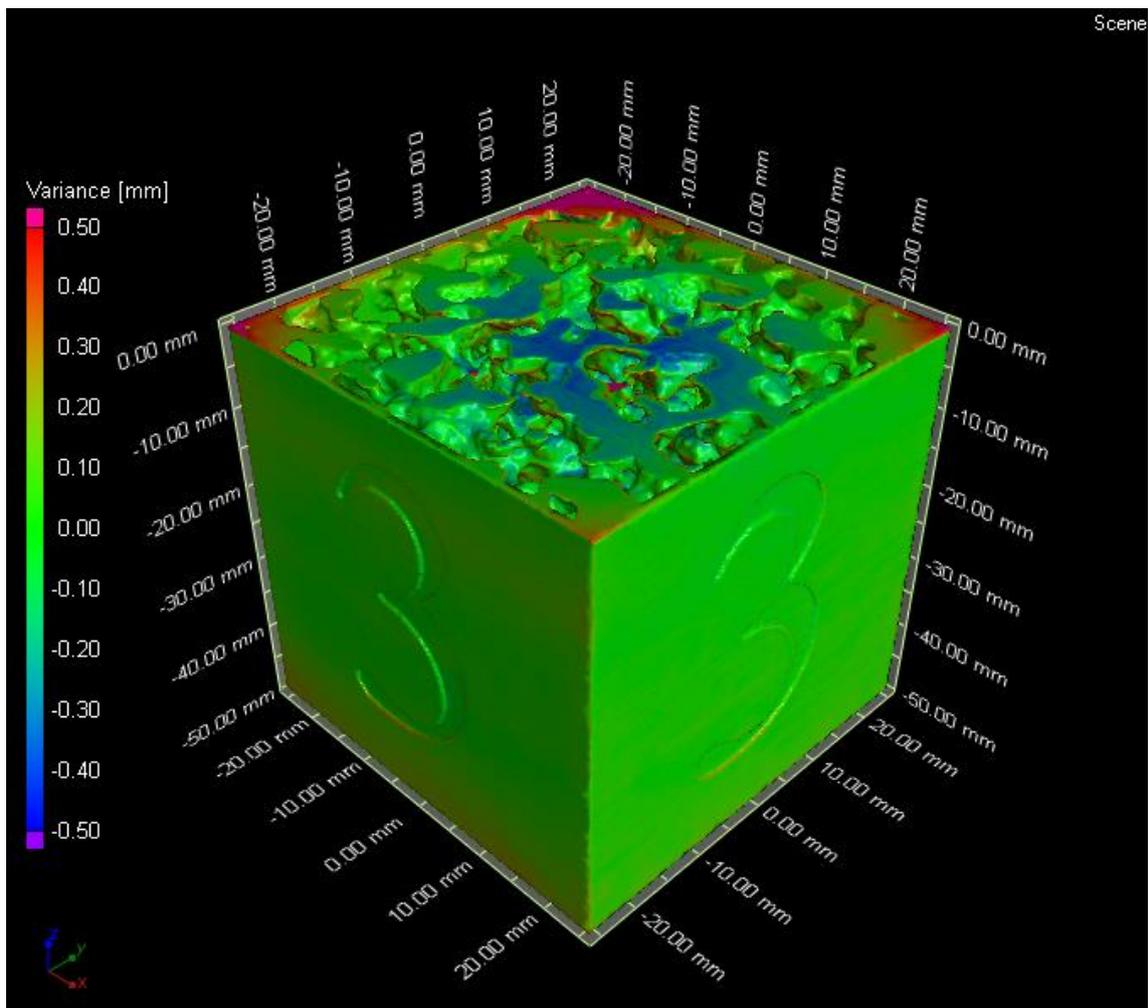


Figura 4.37 Diagrama de desvios para a amostra 3.

A Figura 4.37 revela que para a amostra 3, assim como nos outros casos, há a fidelidade geral entre amostra impressa e computacional.

O histograma de frequência relativa e o de frequência acumulada são mostradas na Figura 4.38 para a amostra 3.

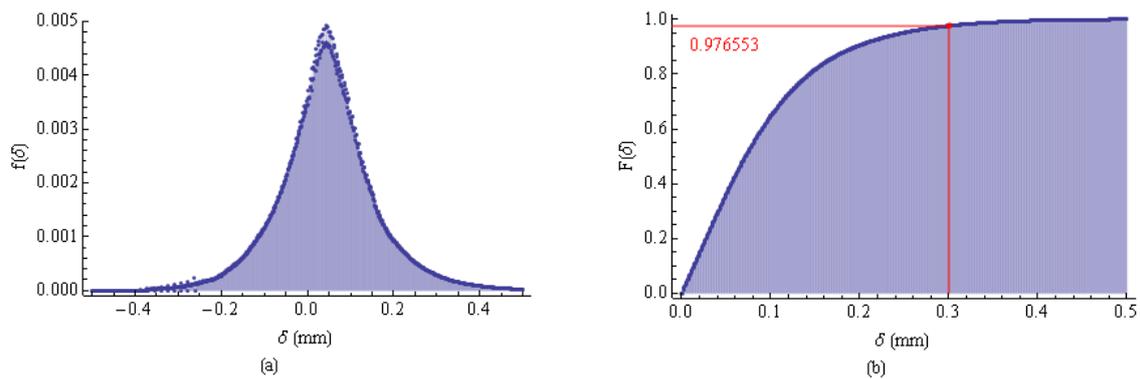


Figura 4.38 Histograma de frequências relativa (a) e acumulada (b) dos desvios para a amostra 3.

Da análise da Figura 4.37 e da Figura 4.38 é possível ver que 97,66% dos desvios são menores do que 0,3 mm, que é a precisão da impressora utilizada. Novamente os valores observados são satisfatórios.

As análises metrológicas foram realizadas para todas as amostras desobstruídas. É de interesse, no entanto, que se possa estudar o que ocorreu nas amostras ocluídas. A princípio, houve a obstrução dos poros da matriz porosa pelo pó de poliamida utilizado na impressão. A próxima subseção discute os resultados tomográficos da amostra 5, que ficou ocluída.

#### 4.5.2.4 ANÁLISE DAS IMPRESSÕES 3D RELATIVA AO AUTÔMATO REGRA 23 (AMOSTRA 5).

Para a amostra 5, o diagrama de desvios pode ser mostrado na Figura 4.39.

A Figura 4.39 revela que para a amostra 5, pelo menos na parte externa, houve boa representação do meio poroso computacional por meio da impressão. Por outro lado, considere alguns planos intermediários a fim de verificar o que ocorre internamente. A Figura 4.40 mostra esses planos intermediários.

É possível ver na Figura 4.40 (a) vários pontos dentro da região que compõe os espaços de poros do material. Esses pontos representam um ruído tomográfico advindo da diferença de densidade entre o pó de poliamida e a poliamida já queimada pelo laser. Nota-se que essa região central está de fato distinta do restante do material até mesmo nos cortes (c) e (e) da referida figura.

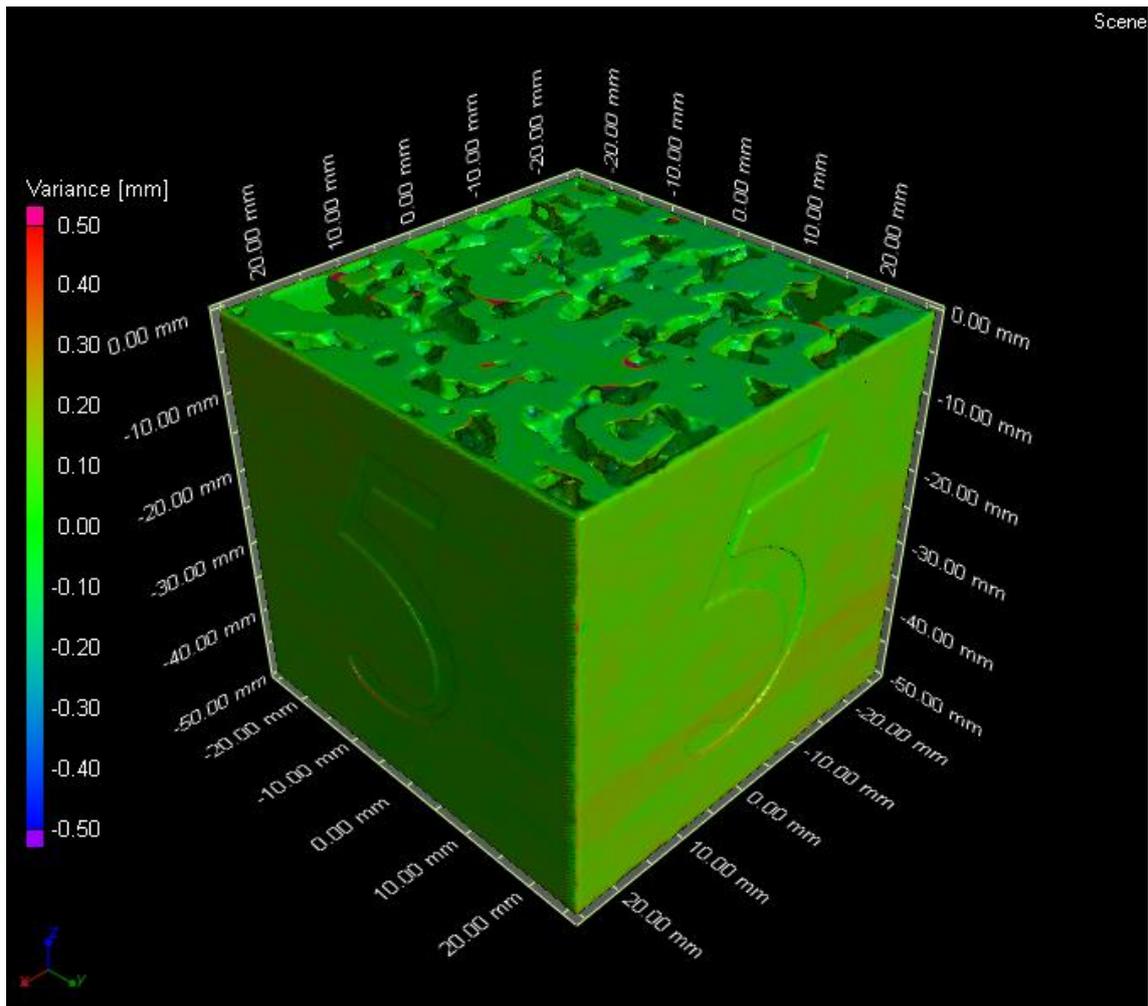


Figura 4.39 Diagrama de desvios para a amostra 5.

É importante observar que a Figura 3.1 é exatamente a regra 23. No entanto, no caso dessa última, não foram impressas paredes impermeabilizantes. Dessa forma, para que não haja entupimento da impressão, pode-se optar por realizar a impermeabilização *a posteriori* da amostra. Por exemplo, poder-se-ia dar uma leve submersão da face a ser impermeabilizada em parafina, tomando cuidado para não submergir uma grande parte da amostra. Ao realizar esse procedimento em todas as faces laterais, a amostra estaria também vedada.

Estando feita a análise metrológica das impressões 3D, pode-se seguir para a consideração das conclusões da presente tese.

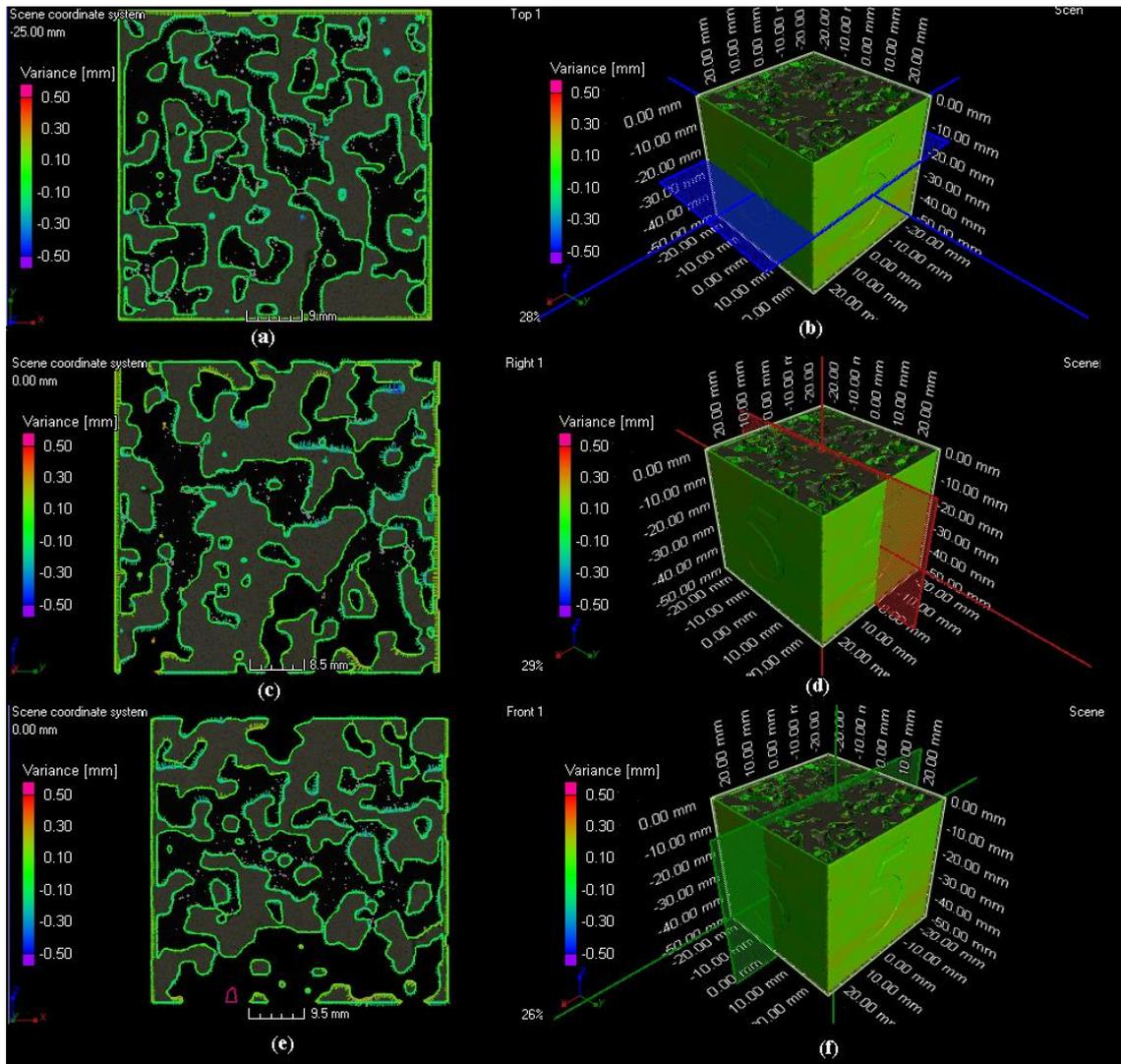


Figura 4.40 Cortes para análise da amostra 5: (a) e (b) mostram o corte eixo z na semi-altura; (c) e (d) mostram o corte no eixo x na semi-largura e (e) e (f) mostram o corte no eixo y na semi-profundidade.

## 5 CONCLUSÕES

A aliança entre microtomografia, autômatos celulares e impressões 3D é, sem dúvidas, uma nova abordagem para o estudo a estrutura geométricas dos meios porosos. Buscou-se por meio da presente tese, estabelecer de maneira clara e cientificamente justificável, uma metodologia de criação de meios porosos artificiais tanto computacionais quanto reais.

Em um primeiro momento, o estudo da utilização de tomogramas como domínios computacionais para simulações 3D de permeabilidade de meios porosos reais foi realizado. Por meio de uma análise estatística, estudou-se a determinação do volume elementar representativo.

Conclui-se pois que para as amostras de areia e vidro, em domínios de tamanho cerca de 6 a 10 vezes o tamanho do diâmetro efetivo do meio poroso estudado, os valores do coeficiente de variação para a permeabilidade ficam menores do que 10%, valores esses obtidos por extrapolação dos resultados encontrados. Nesse caso, ao comparar com resultados advindos de fórmulas empíricas, pode-se considerar que o valor de permeabilidade obtidos nessas condições corresponde ao valor obtido na escala experimental usual.

No caso dos meios argilosos, domínios de cerca de 20 a 30 vezes o tamanho do diâmetro efetivos podem ser considerados satisfatórios, ainda que o coeficiente de variação se mantenha em cerca de 40%. Essa grande diferença advém de dois fatos: da grande heterogeneidade das amostras de argila advindas de um mesmo maciço e da mistura de areia e argila na composição das amostras consideradas.

Em relação aos estudos realizados com o intuito de investigar o efeito da resolução tomográfica no cálculo de permeabilidades, pode-se dizer que tanto no caso das amostras de areia quanto no caso das amostras de argila, a diferença de resolução é bem vinda quando considerado o efeito de aumento da razão tamanho do domínio sobre diâmetro efetivo para um mesmo tamanho de domínio computacional (pixels simulados). É mister que se ressalte, no entanto, que essa variação de resolução deve sempre respeitar a predominância de macroporos: ao se diminuir muito a resolução, os macroporos podem começar a se mesclar/aniquilar, o que altera a permeabilidade; por outro lado, quando os macroporos são preservados, não há problemas em mudar a resolução. Esse comportamento foi muito claro no caso das amostras de areia, em que

uma mesma tendência de variação de permeabilidade com o tamanho do domínio foi seguida por amostras tomografadas em resoluções distintas.

Os autômatos celulares 3D foram estudados a fundo. Os aspectos de evolução de porosidade e permeabilidade foram descritos e regras de interesse foram determinadas. Para a presente tese, as regras totalísticas com vizinhança de Neumann números 5, 3, 11, 23, 7, 31, 47, 63, 94, 127 e 125 foram consideradas de interesse a partir dos critérios estabelecidos.

Em relação ao processo de impressões 3D, houve a validação numérico-experimental da sua utilização como fonte geradora de meios porosos para estudos geotécnicos. Para tal, as impressões foram ensaiadas experimentalmente para obtenção de suas permeabilidades. Ainda, aquelas foram submetidas a um estudo metrológico a fim de conferir se houve a correta representação do meio poroso computacional.

No tocante ao ensaio de permeabilidade realizado com as amostras impressas, houve diferença de cerca de uma ordem de grandeza entre o valor teorizado (obtido por meio do software Avizo Fire ®) e o valor real (advindo do ensaio propriamente dito). Essa diferença pode ser explicada pelo método de *upscale* utilizado pelo software, assim como por questões relativas à montagem experimental e forma de entendimento dessa. Assim, pode-se dizer que houve a validação de aferições numéricas como fonte de medida de permeabilidades.

Para o estudo metrológico, pode-se observar que em todos os casos, mais de 95% dos desvios entre a superfície real (obtida das tomografias das impressões) e a computacional (obtida do modelo .stl) são menores do que a precisão da impressora utilizada. Portanto, valida-se o uso de impressões 3D como meio de geração de meios porosos artificiais para fins de engenharia geotécnica.

Considera-se, pois, que os objetivos estabelecidos para a presente tese foram todos alcançados de maneira positiva, ou seja, validando a utilização de microtomografias, autômatos celulares e impressões 3D como meios de representação físico-computacional da matriz porosa.

Há vários pontos que podem ser estudados de maneira mais aprofundada, constituindo assim pontos a serem explorados em pesquisas futuras. Abaixo encontra-se uma pequena listagem:

- Aumento do domínio de simulação em imagens tomográficas. Para tal, um computador de maior potência deve ser utilizado;
- Realização de tomografias em outras resoluções distintas;
- Estudos autômatos celulares com outro esquema de vizinhança (Moore, por exemplo);
- Estudar autômatos celulares não necessariamente totalísticos;
- Estudar se os meios porosos gerados por meio de autômatos celulares 3D podem ser utilizados em simulações com o método dos elementos discretos;
- Utilizar outras técnicas de impressões 3D a fim de verificar sua validade e
- Montar um permeâmetro específico para análise de amostras com grandes permeabilidades, de forma a estudar melhor o valor dessa propriedade para as impressões 3D já realizadas.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ansys Inc. (2006). ANSYS-CFX.
- Badrul Alam, A. K. M.; Niioka, M.; Fujii, Y.; Fukuda, D. e Kodama, J. (2014) Effects of confining pressure on the permeability of three rock types under compression. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*. vol. 65, 49–61.
- Bandman, O. (2011). Using cellular automata for porous media simulation. *The Journal of Supercomputing*, vol. 57 (2), 121-131.
- Bear, J. (1988). *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover, Estados Unidos, 764p.
- Beer (1852). Bestimmung der Absorption des rothen Lichts in farbigen Flüssigkeiten. *Annalen der Physik und Chemie*, vol. 86, pp. 78–88.
- Blöcher, G & Zimmermann, G. (2008). Settle3D-A numerical generator for artificial porous media. *Computers & Geosciences*, vol. 34, 1827– 1842.
- Borges, L. P. F. (2014). *Difusão de Contaminantes em Meios Porosos e Fractais*. Monografia de Projeto Final II, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 79 p.
- Cai, Y.; Liu, D.; Mathews, J. P.; Pan, Z.; Elsworth, D.; Yao, Y.; Li, J. e Guo, X. (2014). Permeability evolution in fractured coal - Combining triaxial confinement with X-ray computed tomography, acoustic emission and ultrasonic techniques. *International Journal of Coal Geology*. vol. 122, pp. 91–104.
- Carrier, W. D. (2003). Goodbye, Hazen; Hello, Kozeny-Carman. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, vol. 129(11), 1054–1056.
- Cavalcante, A. L. B. (2009). *Métodos Discretos e Discretizados para a Análise Numérica de Fluxo Granular*. Relatório de Estágio de Pós-Doutoramento, Programa de Pós-Graduação em Geotecnia, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF.
- Chen, S.; Diemer, K.; Doolen, G. D.; Eggert, K.; Fu, C.; Gutman, S. e Travis, B. J. (1991). Lattice gas automata for flow through porous media. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 47(1-2), 72–84.
- Clausnitzer, V. & Hopmans, J. W. (1999). Determination of phase-volume fractions from tomographic measurements in two-phase systems. *Advances in Water Resources*, vol. 22(6), 577-584.

- Corbett, P. W. M.; Anggraeni, S. e Bowden, D. (1999). The use of the probe permeameter in carbonates-addressing the problems of permeability support and stationarity. *Log. Anal*, vol. 40(5), 316-326.
- Cormack, A. M. (1963). Representation of a Function by Its Line Integrals, with Some Radiological Applications. *J. Appl. Phys.* 34, 2722.
- Cormack, A. M. (1964). Representation of a Function by Its Line Integrals, with Some Radiological Applications II. *J. Appl. Phys.* 35, 2908.
- Crestana, S., Mascarenhas, S. e Pozzi-Mucelli, R. S. (1985). Static and dynamic three dimensional studies of water in soil using computed tomographic scanning. *Soil Sci.* 140:326–332.
- Darcy, H. (1856). *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*, Dalmont, França. 647p.
- Efron, B. (1979). Bootstrap method: another look at the Jackknife. *The Analysis of Statistics* 7 (1), 1-26.
- Efron, B. (1982). *The Jackknife, The Bootstrap and Other Resampling Plans*. Society for Industrial and Applied Mathematics CBMS-NSF Monographs 38, Estados Unidos, 135p.
- Efron, B. & Tibshirani, R. (1993). *An Introduction to the Bootstrap*. Champman & Hall, Reino Unido, 436p.
- Elliott, J. C., Dover, S. D. (1982). X-ray microtomography. *Journal of Microscopy*, 126 (2): 211-213.
- Gao, J.; Xing, H.; Tian, Z. e Muhlhaus, H. (2014). Lattice Boltzmann modeling and evaluation of fluid flow in heterogeneous porous media involving multiple matrix constituents. *Computers & Geosciences*, vol. 62, 198–207.
- Glusker, J. P. (1995). To W.C. Röntgen 100 years later. *The Rigaku Journal*, v.12(2), p. 4-9.
- Hainsworth, J. M. & Aylmore, L. A. G. (1983). The use of computer assisted tomography to determine spatial distribution of soil water content. *Aust. J. Soil Res.* 21:435–440.
- Haussener, S.; Coray, P.; Lipinski, W.; Wyss, P. e Steinfeld, A. (2010). Tomography-Based Heat and Mass Transfer Characterization of Reticulate Porous Ceramics for High-Temperature Processing. *J. Heat Transf.*, vol.132, 023305.
- He, G.; He, Y. e Chen, Z. (2008). A penalty finite volume method for the transient Navier–Stokes equations. *Applied Numerical Mathematics*, vol. 58(11), 1583–1613.
- Hennig, U. (1995). 100 Years of X-rays. *The Rigaku Journal*, v.12(2), p. 1-3.

- Herman, G. T. (2009). *Fundamentals of computerized tomography: Image reconstruction from projection*. Springer. Estados Unidos. 300 p.
- Hounsfield, G. N. (1973). Computerized transverse axial scanning (tomography): part I – description of system. *British Journal of Radiology*, London, v. 46, p. 1016-1022.
- i.materialise (2014). <http://i.materialise.com/materials/polyamide>, visitado em 18/03/2014.
- Jassogne, L.; McNeill, A. e Chittleborough, D. (2007). 3D-visualization and analysis of macro-and meso-porosity of the upper horizons of a sodic, texture-contrast soil. *Eur. J. Soil Sci.* 58:589–598.
- Ketcham, R. A. & Iturrino, G. J. (2005) Nondestructive high-resolution visualization and measurement of anisotropic effective porosity in complex lithologies using high-resolution X-ray computed tomography. *Journal of Hydrology*, 302, 92-106.
- Kim, S. & Karrila, S. J. (2005). *Microhydrodynamics: Principles and Selected Applications*, Dover, Estados Unidos. 544p.
- Knoll, G. F. (2010). *Radiation detection and measurement*. New York, John Wiley. Estados Unidos. 860p.
- Kuang X.; Sansalone, J.; Ying, G. e Ranieri, V. (2011). Pore-structure models of hydraulic conductivity for permeable pavements. *Journal of Hydrology*, 399(3-4), 148-157.
- Lake, L. W. & Srinivasan, S. (2004). Statistical scale-up of reservoir properties: concepts and applications. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, vol. 44, 27-39.
- Lambert, J. H. (1760) *Photometria sive de mensura et gradibus luminis, colorum et umbrae*, Germany: Eberhardt Klett.
- Lontoc-Roy, M.; Dutilleul, P.; Prasher, S. O.; Han, L.; Brouillet, T. e Smith, D. L. (2006). Advances in the acquisition and analysis of CT scan data to isolate a crop root system from the soil medium and quantify root system complexity in 3-D space. *Geoderma* 137:231–241.
- Luo, Z.; Li, H.; Sun, P. e Gao, J. (2013). A reduced-order finite difference extrapolation algorithm based on POD technique for the non-stationary Navier–Stokes equations. *Applied Mathematical Modelling*, vol. 37(7), 5464–5473.
- Macedo, A. (1997). *Construção e uso de um tomógrafo com resolução micrométrica para aplicações em ciências do solo e do ambiente*. São Carlos: USP-EESC, 129p. Tese Doutorado.

- Materialgeeza (2014). [http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/33/Selective\\_laser\\_melting\\_system\\_schematic.jpg](http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/33/Selective_laser_melting_system_schematic.jpg), visitado em 18/03/2014.
- Matrecano, M. (2011). Porous media characterization by micro-tomographic image processing. Tese de doutorado, Università degli studi di Napoli “Federico II”, Napoles, Italia, 126 p.
- McCarthy, J. F. (1994). Lattice gas cellular automata method for flow in the interdendritic region. *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 42(5), 1573–1581.
- Meng, L.; Lu, P.; Li, S.; Zhao, J. e Li, T. (2012). Shape and size effects on the packing density of binary spherocylinders. *Powder Technology*, vol. 228, 284–294.
- Menon, M.; Yuan, Q.; Jia, X.; Dougill, A. J.; Hoon, S. R.; Thomas, A. D. e Williams, R. A. (2011). Assessment of physical and hydrological properties of biological soil crusts using X-ray microtomography and modeling. *Journal of Hydrology*, vol. 397, 47-54.
- Michette, A. G. & Pfauntsch, S. (1996). *X-rays: the first hundred years*, John Wiley & Sons. Estados Unidos. 262 p.
- Miller, K. J.; Zhu, W.; Montési, L. G. J. e Gaetani, G. A. (2014). Experimental quantification of permeability of partially monten mantle rock. *Earth and Planetary Science Letters*, vol. 388, 273-282.
- Nabovati, A. & Sousa, A. C. M. (2007). Fluid flow simulation in random porous media at pore level using the lattice Boltzmann method. *Journal of Engineering Science and Technology*. vol. 2 (3), 226-237.
- Naime, J. M. (2001). Um novo método para estudos dinâmicos, in situ, da infiltração da água na região não saturada do solo Tese de doutorado, Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 146 p.
- Onody, R.N., Posadas, D.A.N. e Crestana, S. (1995). Experimental studies of fingering phenomena in two dimensions and simulation using a modified invasion percolation. *J. of Appl. Phys.* 78(5): p.2970-2976.
- Otten, W.; Pajor, R.; Schmidt, S.; Baveye, P.C; Hague, R. e Falconer, R.E. (2012). Combining X-ray CT and 3-D printing technology to produce microcosms with replicable, complex pore geometries. *Soil Biol. Biochem.*, vol. 51, 53–55.
- Ozelim, L. C. de S. M. (2012). Autômatos Celulares e Geometria Fractal: Novos Paradigmas Aplicados ao Fluxo de Solutos em Meios Porosos. Monografia de Projeto Final II, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 63 p.

- Ozelim, L. C. de S. M. & Cavalcante, A. L. B. (2014). On the Iota-Delta Function: Mathematical Representation of Two-Dimensional Cellular Automata. *Complex Systems*, vol. 22, 405-422.
- Ozelim, L. C. de S. M.; Cavalcante, A. L. B. e Borges, L. P de F. (2013a). On the Iota-Delta Function: Universality in Cellular Automata's Representation. *Complex Systems*, vol. 21(4), 269-282.
- Ozelim, L. C. de S. M.; Cavalcante, A. L. B. e Borges, L. P de F. (2013b). Continuum versus Discrete: A Physically Interpretable General Rule For Cellular Automata By Means of Modular Arithmetic. *Complex Systems*, vol. 22(1), 75-99.
- Papafotiou, A.; Helmig, R.; Schaap, J.; Lehmann, P.; Kaestner, A.; Flühler, H.; Neuweiler, I.; Hassanein, R.; Ahrenholz, B.; Tölke, J.; Peters, A. e Durner, W. (2008). From the pore scale to the lab scale: 3-D lab experiment and numerical simulation of drainage in heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, vol. 31(9), 1253–1268.
- Peng, S.; Hu, Q.; Dultz, S. e Zhang, M. (2012). Using X-ray computed tomography in pore structure characterization for a Berea sandstone: Resolution effect. *Journal of Hydrology*, vol. 472-473, 254-261.
- Peng, S.; Marone, F. e Dultz, S. (2014). Resolution effect in X-ray microcomputed tomography imaging and small pores's contribution to permeability for Berea sandstone. *Journal of Hydrology*, vol. 510, 403-411.
- Petrasch, J.; Meier, F.; Friess, H. e Steinfeld, A. (2008). Tomography based determination of permeability, Dupuit-Forchheimer coefficient, and interfacial heat transfer coefficient in reticulate porous ceramics. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 29, 315-326.
- Petrovic, A. M., Siebert, J. E. e Rieke, P. E. (1982). Soil bulk density analysis in three dimensions by computed tomographic scanning. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 46:445–450.
- Pires, L. F., Borges, J. A. R., Bacchi, O. O. S. e Reichardt, K. (2010). Twenty-five years of computed tomography in soil physics: A literature review of the Brazilian contribution. *Soil Tillage Research*, v. 110(2), p. 197-210.
- Posadas, D. A. N. e Crestana, S. (1993). Aplicação da teoria fractal na caracterização do fenômeno "fingering" em solos. *Rev. Bras. Ci. Solo.* 17(1): p.1-8.
- Posadas, D. A. N. (1994). Estudo do fenômeno "fingering" em um meio poroso através de imagens e teoria da percolação por invasão. Tese de Doutorado. IFSC/USP. São Carlos- SP-Brasil.

- Radon J. (1917). Über die Bestimmung von Funktionen durch ihre Integralwerte Langs Gewisser Mannigfaltigkeiten. *Ber. Saechsische Akad. Wiss.* 29: 262-277.
- Radon, J. (1986). On the determination of functions from their integral values along certain manifolds. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 5 (4): 170–176.
- Rangel, D. P.; Superak, C.; Bielschowsky, M.; Farris, K.; Falconer, R. E. e Baveye, P. C. (2013). Rapid Prototyping and 3-D Printing of Experimental Equipment in Soil Science Research. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, vol. 77, 54–59.
- Rappoldt, C. & Crawford, J. W. (1999). The distribution of anoxic volume in a fractal model of soil. *Geoderma*, vol. 88, 329-347.
- Razavi, M. R.; Balasingam, M. e Hattamleh, O. A. (2006). Representative elementary volume analysis of sands using X-ray computed tomography. *ASTM geotechnical testing journal*, vol. 30(3), 212-219.
- Röntgen, W. C. (1896). On a new kind of rays. *Nature*, v. 53, no. 1369, p. 274-277.
- Röntgen, W. C. (1898), Ueber eine neue Art von Strahlen. *Ann. Phys.*, 300: 12–17.
- Sander, T.; Gerke, H. H. e Rogasik, H. (2008). Assessment of Chinese paddlysoil structure using x-ray computed tomography. *Geoderma* 145:303–314.
- Schiff, J. L. (2008). *Automata a discrete view of the world*. John Wiley & Sons. Hoboken, New Jersey. 252 p.
- Shang, Y. (2013). Parallel defect-correction algorithms based on finite element discretization for the Navier–Stokes equations. *Computers & Fluids*, vol. 79, 200–212.
- Stock, S. R. (2008). Recent advances in x-ray microtomography applied to materials. *Int. Mater. Rev.* 53:129–181.
- Succi, S. (2001). *The Lattice-Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford University Press, Estados Unidos, 304p.
- Sukop, M. C. & Or, D. (2003). Invasion percolation of single component , multiphase fluids with lattice Boltzmann models. *Physica B*, vol. 338, 298-303.
- Svärd, M.; Carpenter, M. H. e Nordström, J. (2008). A stable high-order finite difference scheme for the compressible Navier–Stokes equations, far-field boundary conditions. *Journal of Computational Physics*, vol. 225(1), 1020–1038.
- Udawatta, R. P. & Anderson, S. H. (2008). CT-measured pore characteristics of surface and subsurface soils in&uenced by agroforestry and grass buffers. *Geoderma* 145:381–389.

- Vaz, C. M. P., de Maria, I. C., Lasso, P. O. e Tuller, M. (2011). Evaluation of an Advanced Benchtop Micro-Computed Tomography System for Quantifying Porosities and Pore-Size Distributions of Two Brazilian Oxisols. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 75 (3): 832-841.
- Wang, C. H.; Willis, D. L. e Loveland, W. D. (1975). Radiotracer methodology in the biological environmental, and physical sciences. Prentice Hall. Estados Unidos. 496p.
- Wen, J. & He, Y. (2014). Convergence analysis of a new multiscale finite element method for the stationary Navier–Stokes problem. *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 67 (1), 1–25.
- Wildenschild, D.; Hopmans, J. W.; Vaz, C. M. P.; Rivers, M. L. e Rikard, D. (2002). Using x-ray computed tomography in hydrology: Systems, resolutions, and limitations. *Journal of Hydrology*, 267(3-4), 285-297.
- Wolf-Gladrow, D. A. (2000). *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice-Boltzmann Models*. Springer-Verlag, Alemanha, 314p.
- Wolfram, S. (2002). *A New Kind of Science*. Wolfram Media.Inc. Estados Unidos. 1197 p.
- Yang, B.; Wu, A.; Wang, C.; Niu, W. e Liu, J. (2012). Three-dimensional simulation of pore scale fluid flow in granular ore media with realistic geometry. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, vol. 22(12), 3081–3086.
- Zermatten, E.; Haussener, S.; Schneebeli, M. e Steinfeld, A. (2011). Tomography-based determination of permeability and Dupuit–Forchheimer coefficient of characteristic snow samples. *Journal of Glaciology*, vol. 57, 811-816.
- Zermatten, E.; Schneebeli, M.; Arakawa, H. e Steinfeld, A. (2014). Tomography-based determination of porosity, specific area and permeability of snow and comparison with measurements. *Cold Regions Science and Technology*, vol. 97, 33–40.
- Zhang, T. & Yang, J. (2014). A two-level finite volume method for the unsteady Navier–Stokes equations based on two local Gauss integrations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 263, 377–391.
- Zhu, J. & Ma, J. (2013). An improved gray lattice Boltzmann model for simulating fluid flow in multi-scale porous media. *Advances in Water Resources*, vol. 56, 61–76.
- Zubeldia, E. H. (2013). *Uso dos autômatos celulares bidimensionais e imagens tomográficas na geração de meios porosos artificiais*. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-231/2013, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 93 p.

## A. CATÁLOGO DE AUTÔMATOS CELULARES E SUAS PROPRIEDADES

Apresenta-se nessa seção os resultados advindos da análise das regras de interesse dos autômatos celulares. Todos os cálculos foram realizados para um domínio de 200x200x200 células. No caso dos cálculos de permeabilidades, utilizou-se SR 12.

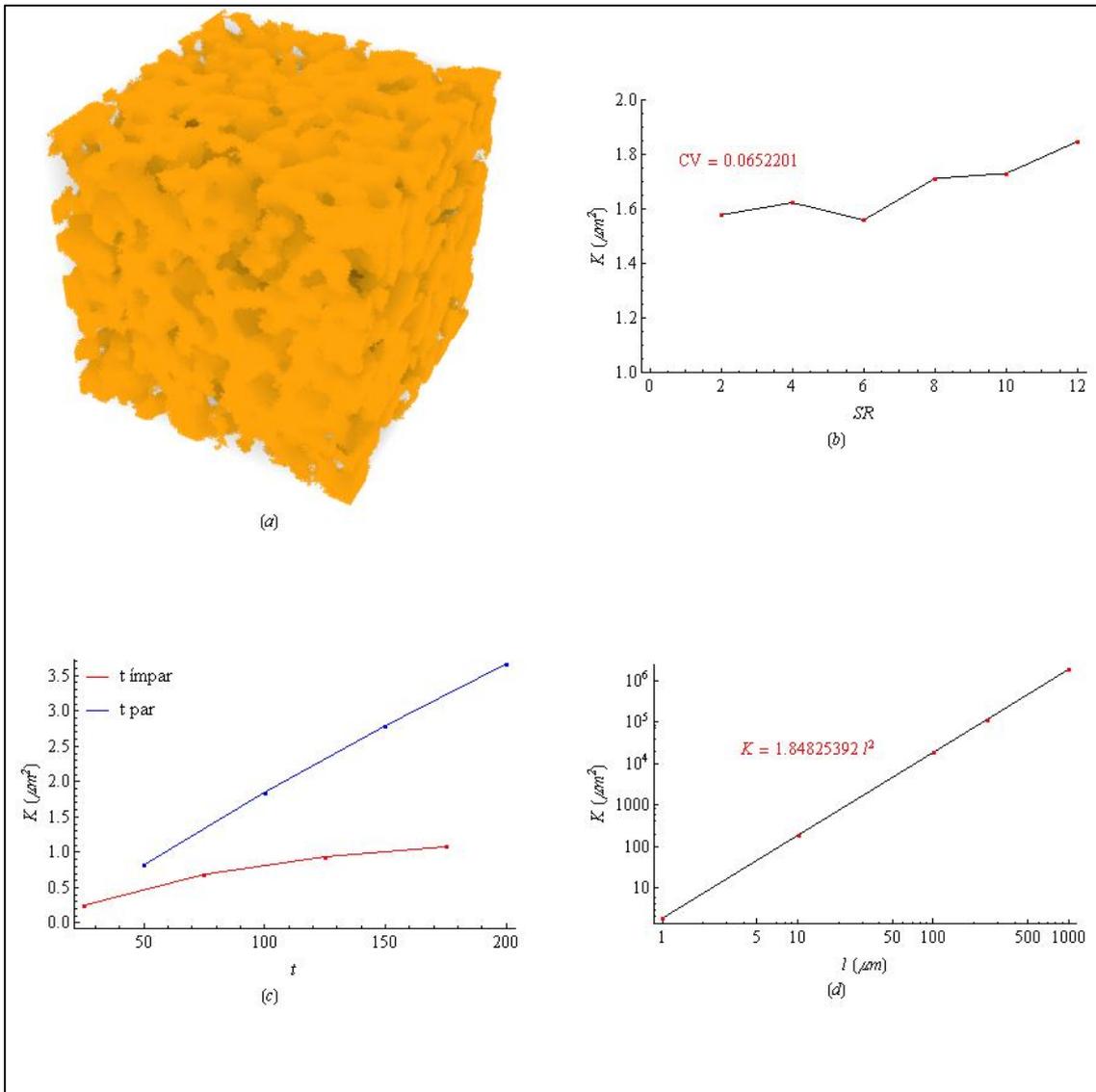


Figura A.1 Análises para a regra 5: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade; (c) Evolução temporal da permeabilidade e (d) efeito de escala sobre a permeabilidade.

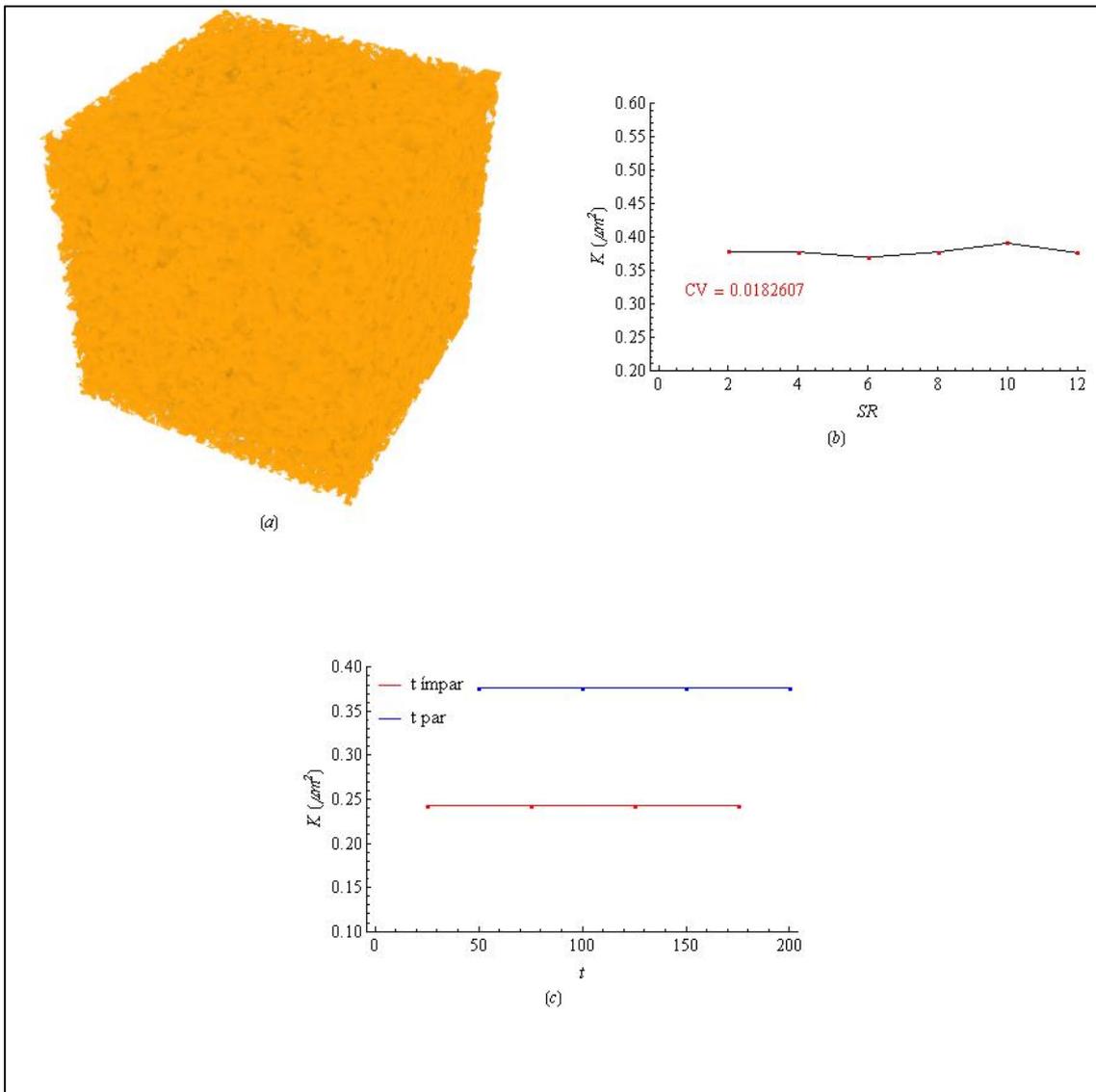


Figura A.2 Análises para a regra 3: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.

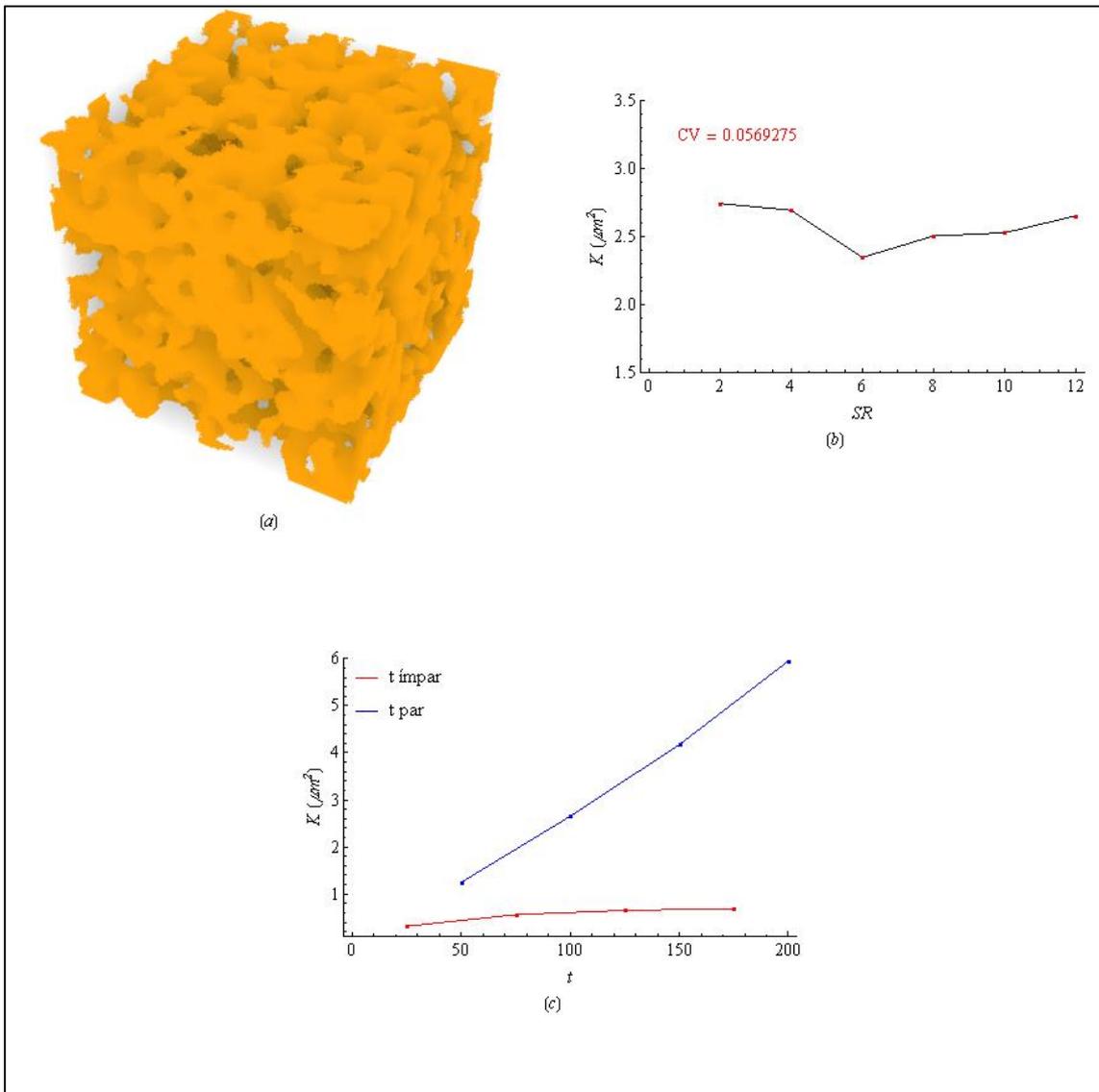


Figura A.3 Análises para a regra 11: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.

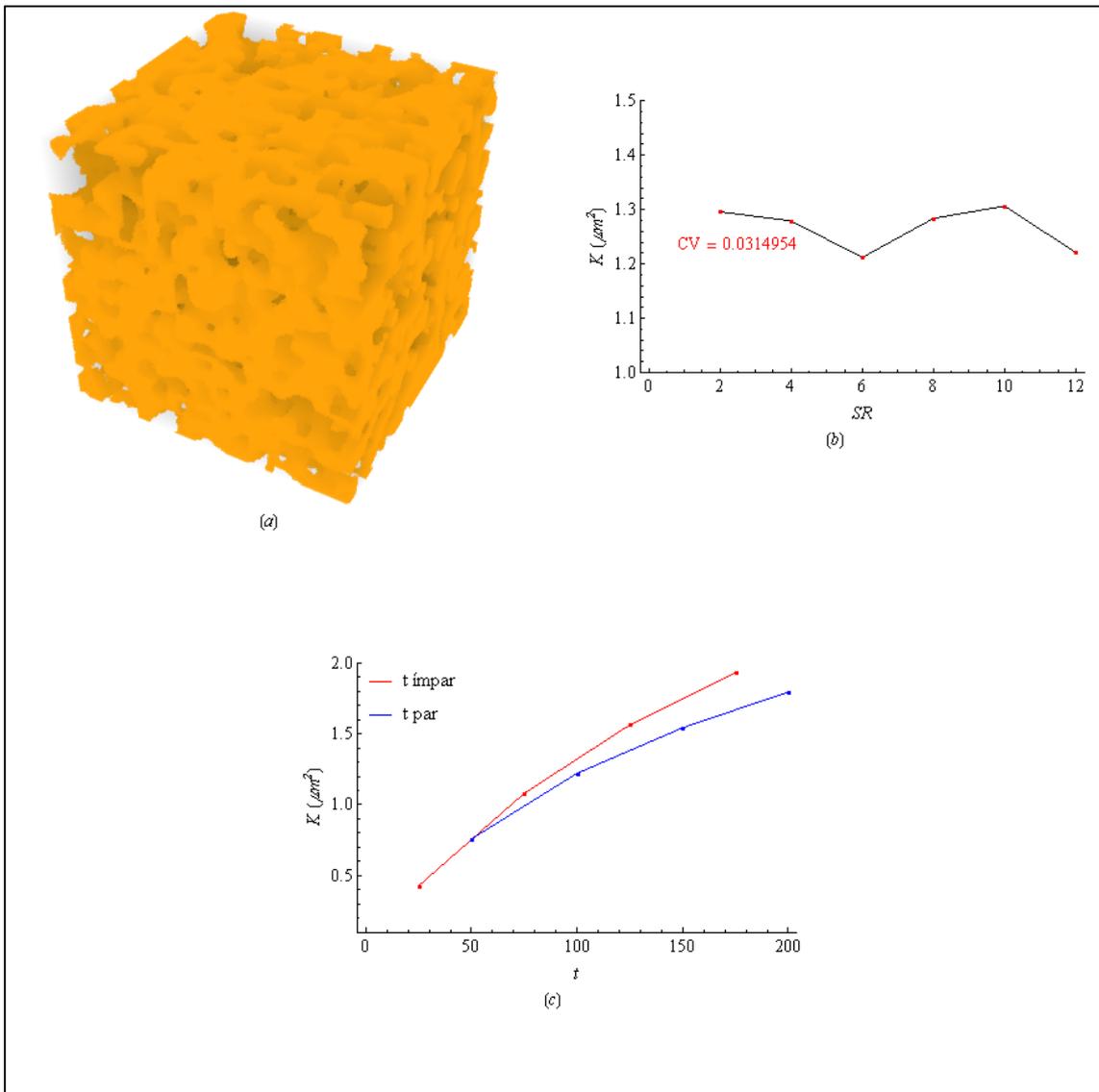


Figura A.4 Análises para a regra 23: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.

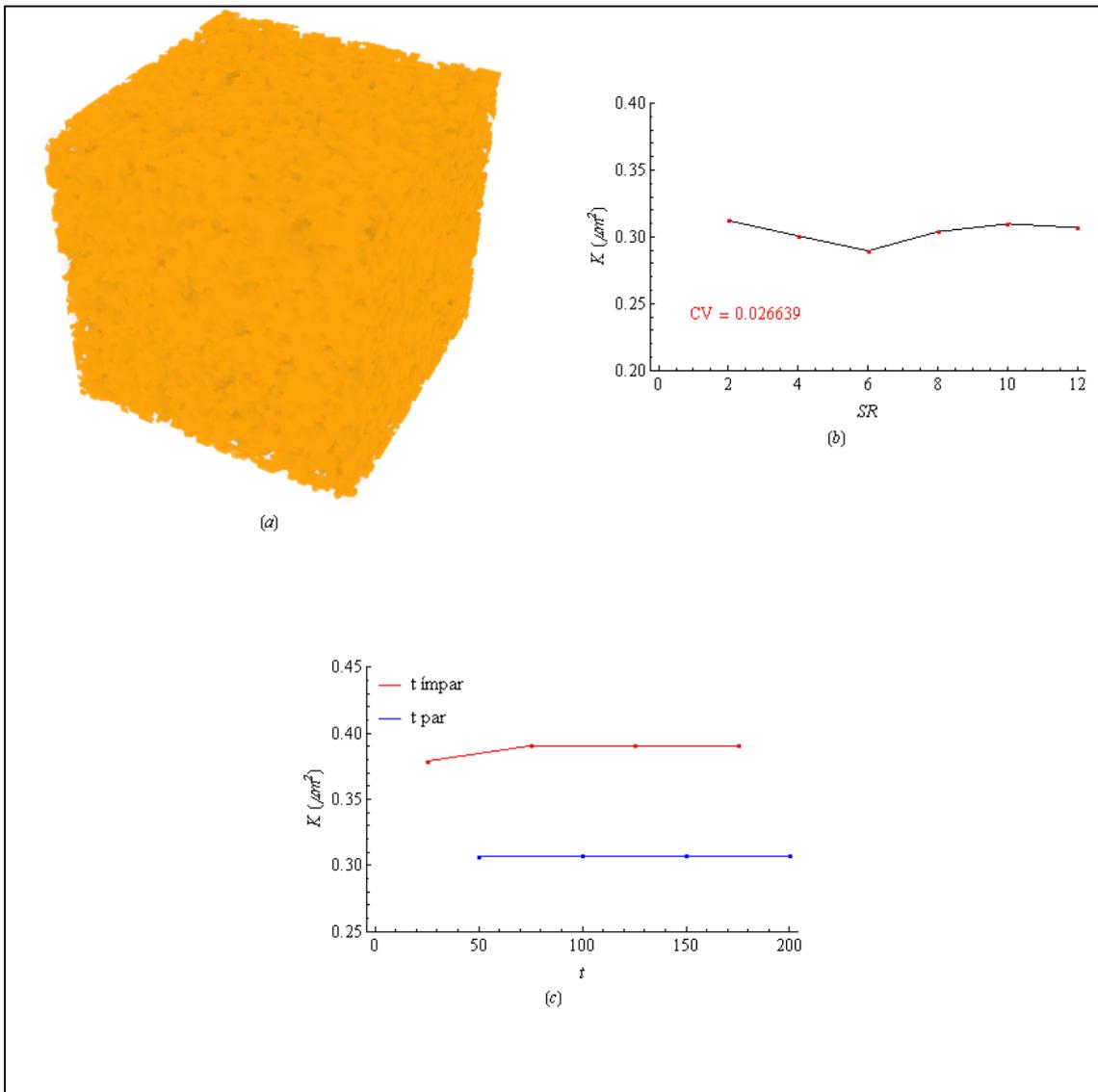


Figura A.5 Análises para a regra 7: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.

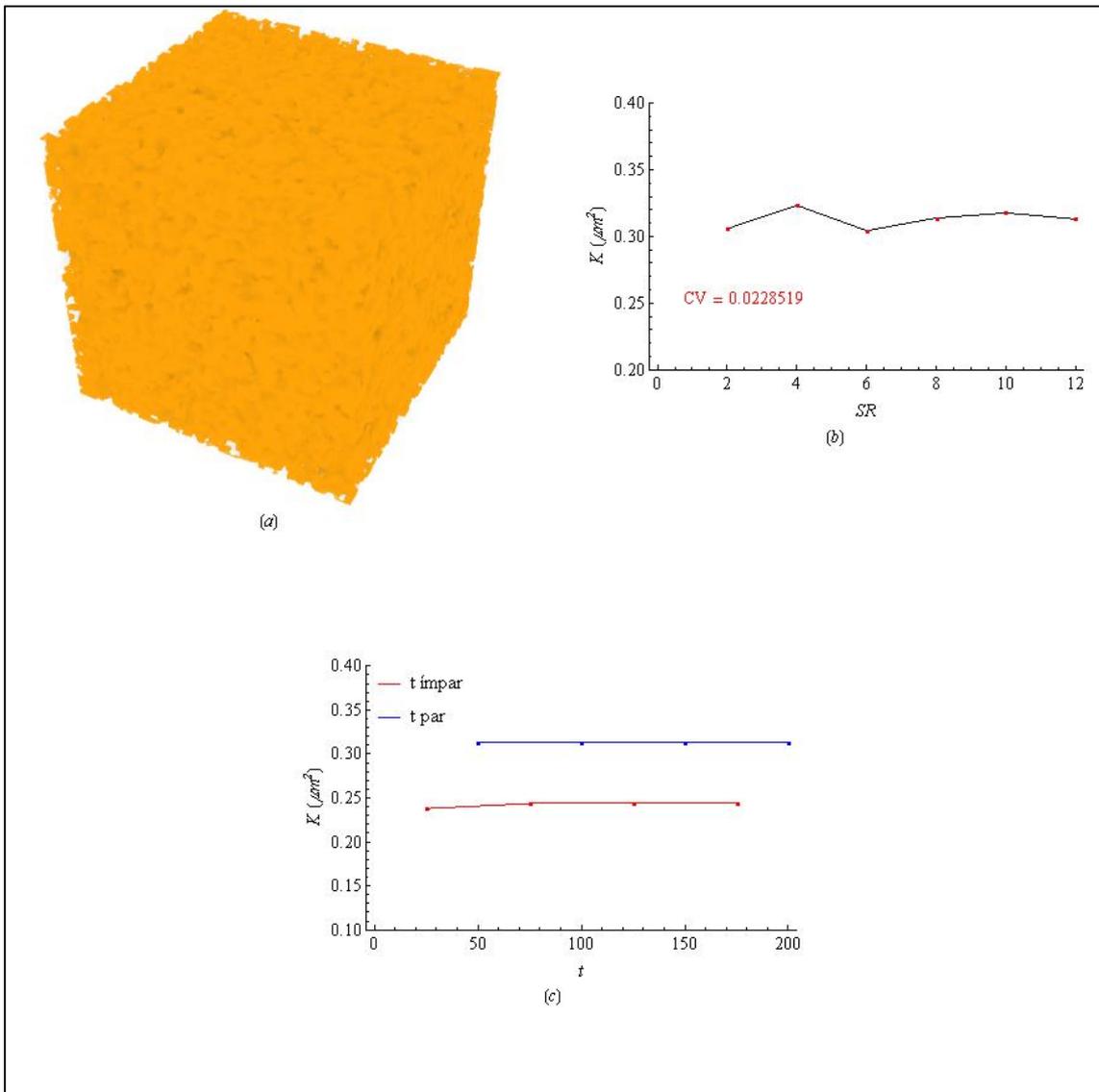


Figura A.6 Análises para a regra 31: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio  $200 \times 200 \times 200$  com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.

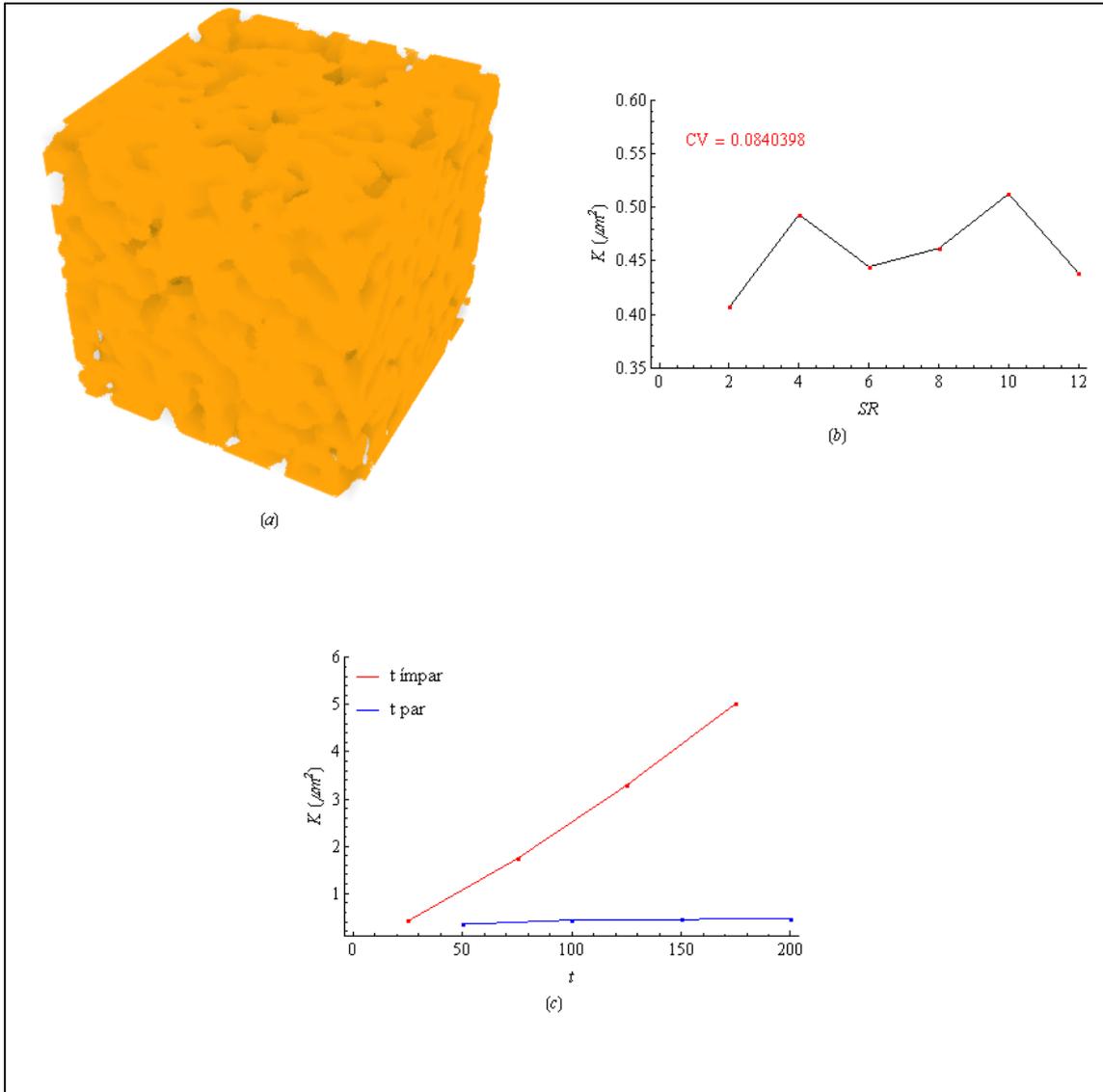


Figura A.7 Análises para a regra 47: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.

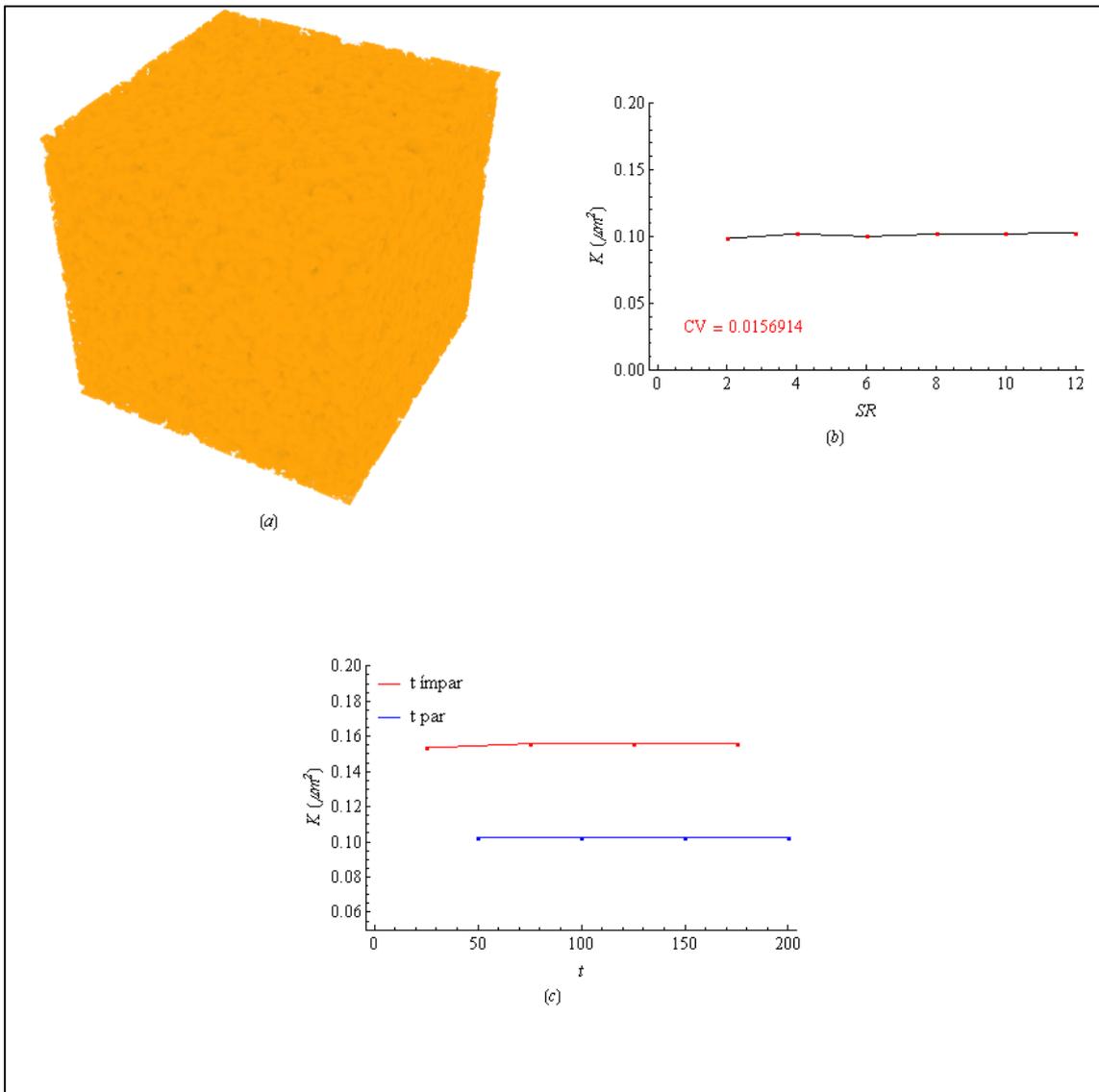


Figura A.8 Análises para a regra 63: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.

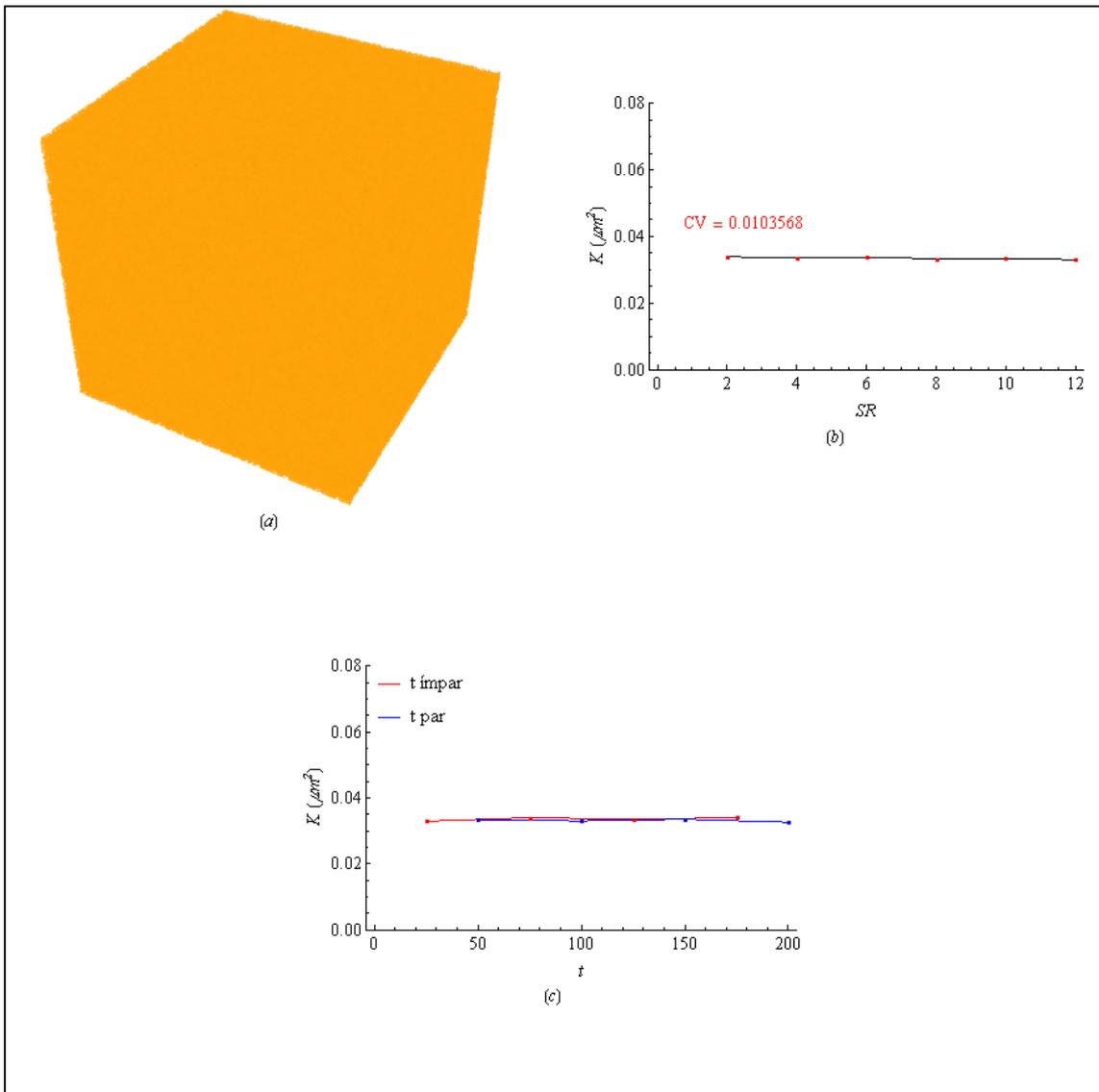


Figura A.9 Análises para a regra 94: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.

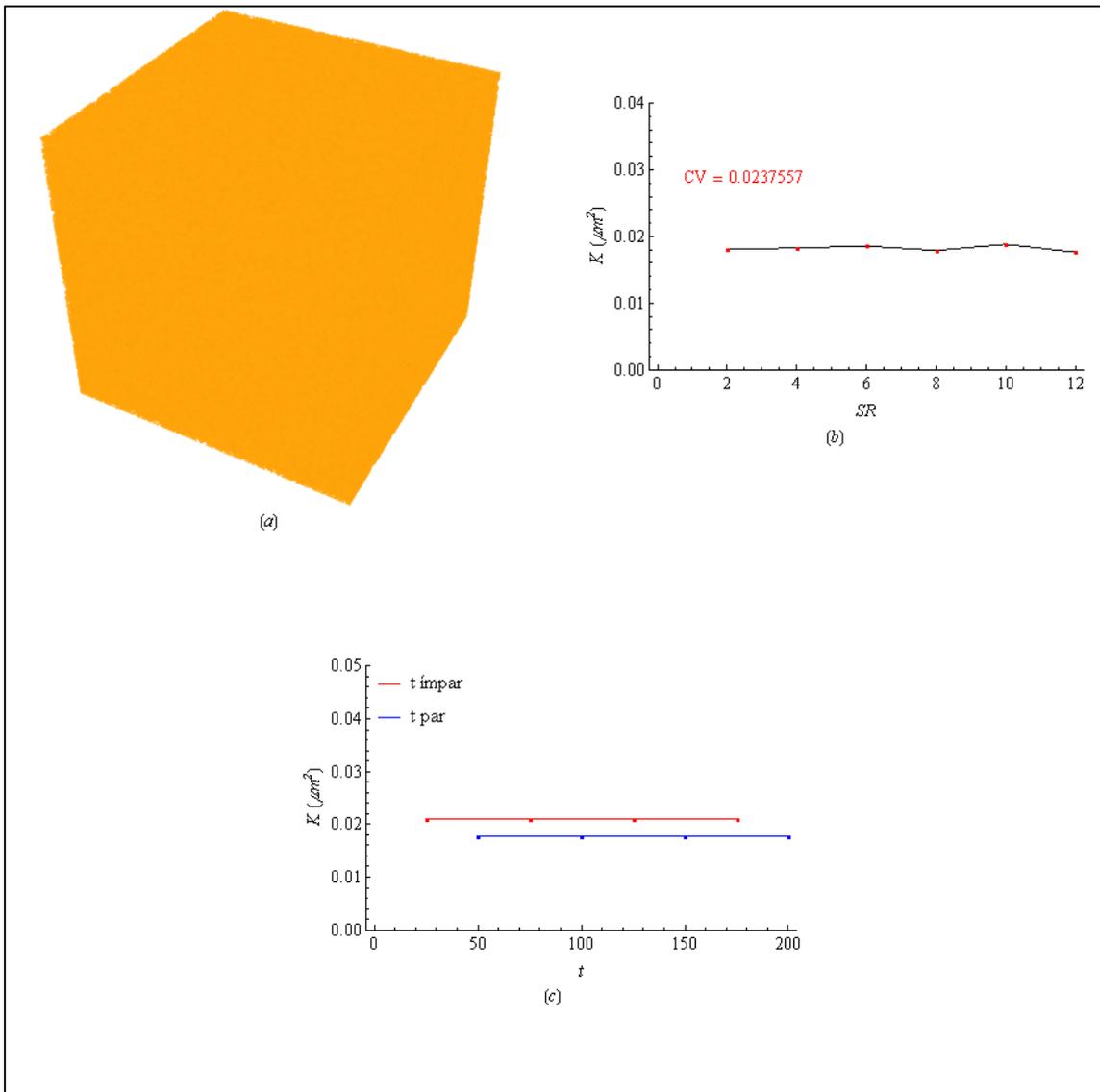


Figura A.10 Análises para a regra 127: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.

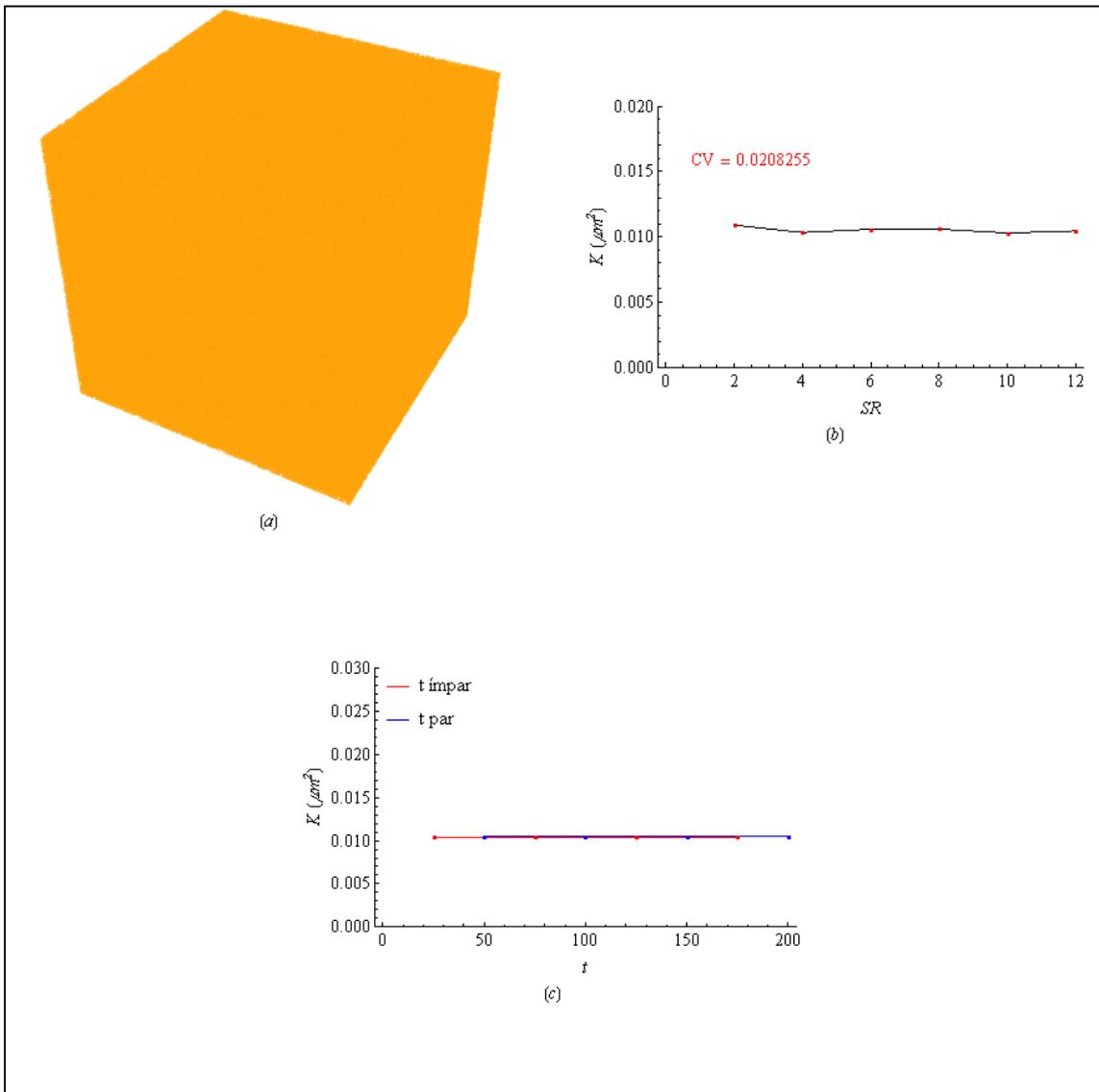


Figura A.11 Análises para a regra 125: (a) configuração após 100 passos de tempo, para um domínio 200x200x200 com a SR 12; (b) Influência da semente randômica na permeabilidade e (c) Evolução temporal da permeabilidade.