

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
ENGENHARIA MECÂNICA

RECONSTRUÇÃO TRIDIMENSIONAL DE MEIOS POROSOS  
UTILIZANDO TÉCNICAS DE *Simulated Annealing*

Tese submetida à

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

para a obtenção do título de

DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA

ALYSSON NUNES DIÓGENES

Florianópolis, Junho de 2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
ENGENHARIA MECÂNICA

RECONSTRUÇÃO TRIDIMENSIONAL DE MEIOS POROSOS  
UTILIZANDO TÉCNICAS DE *Simulated Annealing*

ALYSSON NUNES DIÓGENES

Esta tese foi julgada adequada para a obtenção do título de

DOUTOR EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA

sendo aprovada em sua forma final.

---

Celso Peres Fernandes, Dr. Eng.- Orientador

---

Luis Orlando Emerich do Santos, Dr. Eng. - Co-orientador

---

Eduardo Alberto Fancello, D.Sc.- Coordenador do Curso

Banca Examinadora

---

Celso Peres Fernandes, Dr. Eng.- Presidente

---

Sidnei Paciornik, Dr. - Relator

---

Carlos Roberto Appoloni, Dr.

---

Jader Riso Barbosa Junior, PhD.

---

Paulo César Philippi, Dr. Ing.

*“ Porque Deus amou o mundo de tal maneira que deu o seu Filho unigênito, para que todo aquele que nele crê não pereça, mas tenha a vida eterna. Porque Deus enviou o seu Filho ao mundo, não para que julgasse o mundo, mas para que o mundo fosse salvo por ele. Quem crê nele não é julgado; mas quem não crê, já está julgado; porquanto não crê no nome do unigênito Filho de Deus.”*

**Evangelho de João 3:16-18**

**Ao meu Senhor Jesus Cristo**

# *Agradecimentos*

Não teria como começar esta seção sem dedicar esta tese ao meu Senhor Jesus, meu Deus Criador, Espírito Santo que me acompanha. Ao Senhor pela salvação e pela capacidade para seguir dia a dia.

À minha esposa Carla, pelo amor, companhia, apoio, por me dar o nosso filho, Miguel.

Aos meus pais por possibilitarem minha formação. Sem vocês não estaria aqui hoje.

À minha família em Florianópolis. Seu Elio, Dona Liette, Teddy, Lucia, Neto, Carol, Mateus. Todos vocês são uma parte essencial da minha vida.

Aos meus orientadores Celso e Emerich. Pelo tempo precioso gasto com discussões, conversas, correções, sugestões e tudo o mais.

Aos amigos de laboratório pelas tantas conversas, segundas-feiras desportivas, cafés, discussões genéricas que foram desde física quântica a política internacional passando por tudo no mundo. Foram quatro anos de companheirismo e diversão, mesmo nos momentos em que nada parecia dar certo.

Aos meus irmãos e irmãs das Igrejas Batista de Palhoça, Aliança de Amigos, Saint Andrew, Burkburnett e Pantanal. Cada um de vocês foi instrumento de Deus na minha formação como Cristão. Com vocês entendi que realmente há amigos que são mais chegados que irmãos de sangue. Todos vocês são meus amigos.

Um agradecimento especial aos meus irmãos Geraldo, Clyde, Jovane, Marcelo, Mike e Lucas. Pelos anos de convivência e edificação.

# *Sumário*

<b>Resumo</b>	p. vi
<b>Abstract</b>	p. vii
<b>Lista de Figuras</b>	p. viii
<b>Lista de Símbolos</b>	p. xiv
<b>Lista de Tabelas</b>	p. xviii
<b>1 Introdução</b>	p. 1
<b>2 Microestrutura porosa: propriedades geométricas e físicas</b>	p. 5
2.1 Caracterização Bidimensional . . . . .	p. 5
2.1.1 Análise de imagens digitais . . . . .	p. 6
2.1.1.1 Preparação das Lâminas e Aquisição das Imagens . . . . .	p. 6
2.1.1.2 Segmentação . . . . .	p. 8
2.2 Caracterização Tridimensional . . . . .	p. 10
2.2.1 Microtomografia de raios-X: uma breve fundamentação teórica . . . . .	p. 11
2.2.1.1 Coeficiente de Atenuação Linear e de Massa . . . . .	p. 11
2.2.2 Microtomografia de Raios-X ( $\mu$ -CT) . . . . .	p. 11
2.2.3 Microtomógrafo utilizado neste trabalho . . . . .	p. 13
2.3 Propriedades Físicas . . . . .	p. 13
2.3.1 Porosidade . . . . .	p. 14
2.3.2 Permeabilidade Intrínseca . . . . .	p. 16
2.3.3 Pressão Capilar por intrusão de mercúrio . . . . .	p. 17

2.4	Parâmetros Geométricos . . . . .	p. 18
2.4.1	Função Correlação . . . . .	p. 18
2.4.2	Distribuição de Tamanho de Poros 2D . . . . .	p. 20
2.4.2.1	Distribuição de imagem de distância ao fundo (IDF) . . . . .	p. 23
2.4.3	Distribuição de tamanho de poros 3D . . . . .	p. 24
2.4.4	Distribuição de tamanho de cordas ou Distribuição de corda linear . . . . .	p. 25
2.4.5	Fração de Células Percolantes . . . . .	p. 26
<b>3</b>	<b>Métodos de Reconstrução</b> . . . . .	<b>p. 27</b>
3.1	Gaussiana Truncada (GT) . . . . .	p. 27
3.2	Esferas Sobrepostas (ES) . . . . .	p. 30
<b>4</b>	<b>Métodos de Reconstrução utilizando SA</b> . . . . .	<b>p. 33</b>
4.1	<i>Simulated Annealing</i> (SA) . . . . .	p. 33
4.1.1	Analogia física . . . . .	p. 33
4.1.2	Algoritmo de <i>Simulated Annealing</i> . . . . .	p. 34
4.1.3	Modelo matemático . . . . .	p. 36
4.1.3.1	Algoritmo Homogêneo . . . . .	p. 38
4.1.3.2	Algoritmo Não-Homogêneo . . . . .	p. 39
4.1.4	Temperatura Inicial . . . . .	p. 40
4.1.5	Agendas de Resfriamento . . . . .	p. 41
4.1.6	Agendas de Reaquecimento . . . . .	p. 43
4.2	Métodos de Reconstrução utilizando <i>Simulated Annealing</i> . . . . .	p. 43
4.3	<i>Pixel-Based Simulated Annealing</i> (PSA) . . . . .	p. 44
4.4	<i>Object-Based Simulated Annealing</i> (OSA) . . . . .	p. 51
4.4.1	Correção da Distribuição de Tamanho de Grãos . . . . .	p. 53
<b>5</b>	<b>Resultados e Discussão</b> . . . . .	<b>p. 59</b>
5.1	Comparação Geométrica . . . . .	p. 59

5.1.1	Resultados 2D . . . . .	p. 59
5.1.1.1	Função correlação . . . . .	p. 59
5.1.1.2	Distribuição de tamanho de poro 2D . . . . .	p. 63
5.1.2	Resultados 3D . . . . .	p. 66
5.1.2.1	Função correlação . . . . .	p. 69
5.1.2.2	Considerações sobre a correção de distribuição de tamanho de grãos . . . . .	p. 70
5.1.2.3	Reprodutibilidade do método OSA . . . . .	p. 74
5.1.2.4	Fração de fase poro conectada . . . . .	p. 74
5.1.2.5	Distribuição de tamanho de poros . . . . .	p. 75
5.1.2.6	Fração percolante . . . . .	p. 77
5.1.3	Tempo computacional . . . . .	p. 81
5.1.4	Uma proposta de um parâmetro mais efetivo para o método OSA . . . . .	p. 82
5.2	Determinação de propriedades físicas . . . . .	p. 86
5.2.1	Determinação de Permeabilidade Intrínseca . . . . .	p. 87
5.2.2	Determinação de Pressão Capilar por Intrusão de mercúrio . . . . .	p. 89
<b>6</b>	<b>Conclusão</b> . . . . .	p. 93
6.1	Trabalhos Futuros . . . . .	p. 94
	<b>Referências</b> . . . . .	p. 96
	<b>Lista de Publicações</b> . . . . .	p. 101
	<b>Apêndice A – Nocões de geometria discreta e morfologia matemática</b> . . . . .	p. 103
A.1	Conceitos de Geometria Discreta . . . . .	p. 103
A.1.1	Métricas $d_4$ e $d_8$ . . . . .	p. 103
A.1.2	Aproximação discreta da distância euclidiana - métricas de chanfrop. . . . .	104
A.1.3	Imagem de distância ao fundo (IDF) e bolas de chanfro . . . . .	p. 107
A.2	Noções de Morfologia Matemática . . . . .	p. 109

A.2.1	Operação de Erosão . . . . .	p. 109
A.2.2	Operação de Dilatação . . . . .	p. 110
A.2.3	Operação de Abertura . . . . .	p. 110

**Apêndice B – Demonstração da Convergência do Algoritmo Homogêneo do SA** . . . . . p. 113

B.1	Demonstração . . . . .	p. 113
-----	------------------------	--------

**Apêndice C – Método para o cálculo de permeabilidade utilizando *Lattice Boltzmann*** . . . . . p. 118

C.1	O método de <i>Lattice Boltzmann</i> . . . . .	p. 118
C.1.1	Dinâmica microscópica . . . . .	p. 118
C.1.2	O termo de colisão BGK . . . . .	p. 119
C.1.3	Distribuições de equilíbrio . . . . .	p. 120
C.1.4	Indo para a escala das variáveis físicas . . . . .	p. 120
C.1.5	Equações LBM de hidrodinâmica . . . . .	p. 121
C.1.6	Condições de contorno . . . . .	p. 121
C.2	Simulações . . . . .	p. 122

**Apêndice D – Método para o cálculo de interfaces de dois fluidos em meios porosos** . . . . . p. 123

D.1	Método de [MAGNANI et al., 2000] . . . . .	p. 123
-----	--	--------

# Resumo

A caracterização de materiais porosos se constitui em um problema de grande interesse científico e tecnológico. Para caracterizar estes materiais, mede-se várias propriedades geométricas ou físicas, com o objetivo de determinar propriedades macroscópicas de transporte destes materiais. A determinação destas propriedades tem aplicação em várias áreas, como a de solos, a de exploração de petróleo e a de construção civil.

Estas propriedades, tratando-se das rochas reservatório, são normalmente obtidas em laboratório por experimentos que frequentemente são caros e demorados. Em contraparte, a técnica de análise de imagens é um método que se mostra rápido e de baixo custo para determinação dessas propriedades, sendo necessário apenas, conhecer parâmetros geométricos medidos de seções finas da microestrutura das rochas. Outra área que vem ganhando destaque na comunidade científica é a microtomografia computadorizada de raios-X ( $\mu$ -CT). Os equipamentos de microtomografia têm alcançado resoluções cada vez maiores, chegando à ordem do nanometro ( $nm$ ), permitindo a aquisição de imagens de alta qualidade, preservando a estrutura da rocha, sem a necessidade de uma reconstrução através de um modelo matemático ou estocástico. Uma vez que esta técnica ainda é de alto custo, justifica-se a pesquisa na área de reconstrução, dada a baixa disponibilidade de equipamentos deste tipo.

A partir de parâmetros geométricos e topológicos medidos em imagens bidimensionais (2D) de seções da microestrutura da rocha, torna-se possível gerar um modelo 3D desta microestrutura. O presente trabalho propõe o desenvolvimento de dois métodos para a reconstrução de meios porosos em três dimensões (3D) utilizando o método de otimização denominado *simulated annealing* (SA). Os métodos usam diferentes estratégias de otimização do SA: um baseado em movimentação de *pixels* (para o caso bidimensional) ou *voxels* (para o caso tridimensional) (PSA) e outro de objetos: círculos (2D) ou esferas (3D) (OSA). Ambos os modelos conservam a função correlação espacial e o método PSA conserva adicionalmente os parâmetros distribuição de corda linear e distribuição de distância ao fundo.

Para validar os métodos, efetuou-se comparações de parâmetros geométricos (função correlação, distribuição de tamanho de poros e fração de células percolantes) e propriedades físicas determinadas através de métodos computacionais (permeabilidade intrínseca e pressão capilar por intrusão de mercúrio) com reconstruções utilizando os métodos gaussianas truncada e esferas sobrepostas, além de imagens microtomográficas de rochas reservatório.

Palavras chave: Meios porosos, Rochas reservatório, *Simulated annealing*, Reconstrução.

# *Abstract*

The porous media materials characterization is a very interesting issue for the scientific community. To characterize these materials, someone can measure several geometrical parameters or physical properties, aiming the macroscopic transport properties determination. This determination has application in many areas, as the soils, the oil production and civil construction.

Specifically dealing with reservoir rocks, these properties are usually obtained through standard experiments which are often very expensive and time-consuming. Moreover, the image analysis technique is a method which is low-cost and fast for these properties determination. It only requires some geometrical parameters measurements, obtained from the rocks microstructure's thin-sections. Another area which is developing very fast is the X-ray computer microtomography ( $\mu$ -CT). The microtomographic equipments are achieving higher resolutions, as the nanometer order ( $nm$ ), allowing high quality images acquisition, preserving the rock microstructure, without the need for a reconstruction through mathematical or stochastic models. Since this technique still is very expensive, it explains the need for the reconstruction research area, also due to the equipment's low availability.

This research presents two porous media reconstruction methods using the optimization method named simulated annealing (SA) in three-dimension (3D). Measuring geometrical and topological parameters in two-dimension (2D), it is possible to generate a 3D microstructure model. The methods use different SA movements: one is based at pixels (for 2D) or voxels movements (for 3D) (PSA) and the other moves objects: circles (2D) or spheres (3D) (OSA). Both of them preserve the spatial correlation function and the PSA method also preserves the linear chord distribution and complementary distance distribution parameters.

For the methods validations, we used geometrical parameters (functions spatial auto-correlation, pore-size distribution and fraction of percolating cells) and physical properties determined through computational methods (permeability and capillary pressure by mercury intrusion) comparisons with microstructure reconstructed by the truncated gaussian and superposed spheres methods and the reservoir rocks' microtomographic images.

keywords: Porous media, Reservoir rocks, Simulated annealing, Reconstruction.

## *Lista de Figuras*

1	Imagem de Testemunhos. . . . .	p. 7
2	Plugue retirado de um testemunho de rocha consolidada. . . . .	p. 8
3	Sequência da preparação de uma lâmina. . . . .	p. 8
4	Imagem colorida de uma seção plana de uma rocha reservatório obtida por microscopia óptica com resolução de $7,84\mu\text{m}$ . . . . .	p. 9
5	Imagem binária correspondente à imagem colorida da Figura 4 com fase poro em branco. . . . .	p. 9
6	Mapeamento através da matriz do coeficiente de atenuação linear. . . . .	p. 12
7	Foto do equipamento Skyscan 1172 utilizado neste trabalho. . . . .	p. 13
8	Esquema de um fluido escoando em uma amostra porosa . . . . .	p. 16
9	Curva típica de pressão capilar por intrusão de mercúrio medida em uma amostra de rocha reservatório. . . . .	p. 18
10	Exemplo de gráfico de correlação . . . . .	p. 20
11	Imagem original de uma rocha . . . . .	p. 21
12	Imagem de uma rocha após operação de abertura . . . . .	p. 22
13	Comparação entre a distribuição de tamanho de poros (a) acumulada e (b) diferencial. . . . .	p. 22
14	Aspecto das bolas para as métricas $d_8$ , $d_{3-4}$ e $d_{5-7-11}$ . . . . .	p. 23
15	Uma imagem binária e sua codificação em IDF com métrica $d_{3-4}$ : (a) imagem original, (b) imagem resultante da transformação . . . . .	p. 24
16	Distâncias da métrica $d_{3-4-5}$ em uma seção da máscara cúbica. . . . .	p. 24
17	Ilustração do procedimento para calcular a distribuição de tamanho de cordas . . . . .	p. 25
18	Gráfico do parâmetro fração de células percolantes . . . . .	p. 26

19	Microestrutura de um arenito Botucatu reconstruída em 3D com o método da Gaussiana Truncada de [LIANG et al., 2000] (fase poro em azul) . . . . .	p. 29
20	Microestrutura de um arenito Botucatu reconstruída em 3D com o método das Esferas Sobrepostas [SANTOS et al., 2002] (fase poro em azul) . . . . .	p. 32
21	Pseudo-código do algoritmo do SA . . . . .	p. 36
22	Imagem original de um agregado de esferas de vidro com espaço poroso em preto. . . . .	p. 45
23	Imagem reconstruída através de SA otimizando as funções derivada da correlação e corda linear com erro $E = 10^{-4}$ . . . . .	p. 46
24	Reconstrução utilizando o método PSA de imagem utilizada por TALUKDAR; TORSÆTER [2002] com erro $E = 10^{-4}$ . . . . .	p. 47
25	Comparação entre a função correlação de uma imagem reconstruída extraída de [TALUKDAR; TORSÆTER, 2002] antes e após passagem de filtro da mediana de tamanho 1, bem como a correlação da imagem original. . . . .	p. 48
26	Imagem original de quadrados. . . . .	p. 48
27	Imagem inicial do processamento da Figura 28. . . . .	p. 49
28	Imagem de quadrados reconstruída através do método PSA utilizando os parâmetros função correlação, distribuição de tamanho de corda e distribuição de IDF com erro $E = 10^{-5}$ . . . . .	p. 49
29	Reconstrução 3D com $80^3$ <i>voxels</i> da Figura 26 através do método PSA. . . . .	p. 51
30	Imagem inicial de uma reconstrução de uma amostra de rocha reservatório (porosidade=41,19%). . . . .	p. 52
31	Imagem final de uma reconstrução de uma amostra de rocha reservatório (porosidade=15,82%). . . . .	p. 53
32	Correlação das Figuras 30 e 31. . . . .	p. 53
33	Ilustração do processo de seccionamento de um grão esférico e do raio $r$ resultante. . . . .	p. 54
34	Gráfico da curva Log-Logística variando o parâmetro $\beta$ para $\alpha = 1$ . . . . .	p. 55
35	Correção de Distribuição de tamanho de grãos de 2D para 3D. . . . .	p. 56
36	Reconstrução 3D com $100^3$ <i>voxels</i> de uma rocha reservatório de petróleo utilizando o método OSA. . . . .	p. 58

37	Imagem de seção plana da Amostra 01 com $7,84\mu\text{m}$ de resolução, bem como sua respectiva imagem segmentada com 13,24% de porosidade. . .	p. 61
38	Reconstrução da Amostra 01 utilizando o método PSA com $400\times 400$ <i>pixels</i> e 13,24% de porosidade. . . . .	p. 62
39	Reconstrução da Amostra 01 utilizando o método OSA com $400\times 400$ <i>pixels</i> e 13,24% de porosidade. . . . .	p. 62
40	Reconstrução da Amostra 01 utilizando o método GT(2) com $400\times 400$ <i>pixels</i> e 13,24% de porosidade. . . . .	p. 63
41	Comparação entre os gráficos das distribuições de tamanho de poros $d_{3-4}$ medidas na Amostra 5 e sua reconstrução utilizando o método GT. . .	p. 65
42	Comparação entre os gráficos das distribuições de tamanho de poros $d_{3-4}$ medidas na Amostra 5 e em suas reconstruções. . . . .	p. 65
43	Um exemplo de perfil de porosidade de uma amostra utilizada neste trabalho, com destaque para a porosidade medida através de análise de imagens. . . . .	p. 67
44	Imagem microtomográfica de um arenito Botucatu apresentada por AP- POLONI; RODRIGUES; FERNANDES [2005] (Amostra 15). . . . .	p. 68
45	Seção bidimensional microtomográfica de uma rocha reservatório de petróleo (Amostra 15) apresentada por APPOLONI; RODRIGUES; FERNANDES [2005] e seu respectivo recorte utilizado neste trabalho. . . . .	p. 68
46	Comparação entre as funções correlação da Amostra 13 e de uma reconstrução utilizando o método OSA*. . . . .	p. 70
47	Comparação entre as distribuições de tamanho de grão 2D e 3D medidas em uma imagem microtomográfica através de morfologia matemática e sua respectiva distribuição corrigida. . . . .	p. 71
48	Geometria 3D de duas esferas sobrepostas de raios 35 e 33, centradas nos pontos (50,50,60) e (50,40,60), respectivamente. . . . .	p. 72
49	Distribuições de Tamanho de Grãos 2D (azul) e 3D (vermelho) da geometria da Figura 48. . . . .	p. 73
50	Comparação entre a fração percolante medida na imagem microtomográfica da Amostra 13 e as reconstruções utilizando o método OSA e OSA*. . .	p. 73

51	Comparação entre a fração percolante de cinco reconstruções da Amostra 15 utilizando o método OSA. . . . .	p. 74
52	Fração de fase poro conectada para cada imagem microtomográfica e suas respectivas reconstruções. . . . .	p. 75
53	Comparação entre as distribuições de tamanho de poro medidas nas reconstruções utilizando os métodos GT(1), OSA, ES e na microtomografia da amostra 15. . . . .	p. 76
54	Comparação entre as distribuições de tamanho de poro medidas nas reconstruções utilizando os métodos GT(1), OSA, ES e na microtomografia da amostra 13. . . . .	p. 77
55	Comparação entre as distribuições de tamanho de poro medidas nas reconstruções utilizando os métodos GT(1), OSA, ES e na microtomografia da amostra 11. . . . .	p. 78
56	Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 11. . . . .	p. 78
57	Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 12. . . . .	p. 79
58	Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 13. . . . .	p. 79
59	Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 14. . . . .	p. 80
60	Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 15. . . . .	p. 80
61	Comparação entre as correlações medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 14. . . . .	p. 81
62	Comparação entre a correlação e duas seções do momento de terceira ordem medidas na imagem microtomográfica da Amostra 15. . . . .	p. 83
63	Comparação entre as correlações medidas na imagem microtomográfica da Amostra 15 e das reconstruções utilizando os deslocamentos OSA-1 e OSA-5. . . . .	p. 84
64	Comparação entre as distribuições de tamanho de poros medidas na imagem microtomográfica da Amostra 15 e das reconstruções OSA e utilizando os deslocamentos OSA-1 e OSA-5. . . . .	p. 85

65	Comparação entre as distribuições de tamanho de poros medidas na imagem microtomográfica da Amostra 11 e das reconstruções OSA e utilizando o deslocamento OSA-5. . . . .	p. 85
66	Comparação entre as frações percolantes medidas na imagem microtomográfica da Amostra 15 e das reconstruções OSA e utilizando os deslocamentos OSA-1 e OSA-5. . . . .	p. 86
67	Reconstrução da Amostra 12 utilizando o método GT(1), ilustrando os <i>pixels</i> isolados que inviabilizam a determinação da permeabilidade utilizando o método apresentado por [SANTOS et al., 2002]. . . . .	p. 87
68	Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 11. . . . .	p. 89
69	Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 12. . . . .	p. 90
70	Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 13. . . . .	p. 90
71	Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 14. . . . .	p. 91
72	Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 15. . . . .	p. 91
73	Representação das vizinhanças: (a) vizinhos diretos de P (em cinza) e (b) vizinhos indiretos de P (em cinza). . . . .	p. 104
74	Ponderações para deslocamentos associados às métricas $d_4$ (a) e $d_8$ (b) .	p. 105
75	Um exemplo de cálculo de distância entre dois <i>pixels</i> . . . . .	p. 105
76	Ponderações locais para a métrica $d_{3-4}$ . . . . .	p. 106
77	A máscara base para a métrica $d_{5-7-11}$ . . . . .	p. 106
78	As semi-máscaras para a métrica $d_{3-4}$ : (a) $m_{d_{3-4-ant}}$ , (b) $m_{d_{3-4-pos}}$ . . . . .	p. 107
79	Uma imagem binária e sua codificação em IDF com métrica $d_{3-4}$ : (a) imagem original, (b) imagem resultante da transformação . . . . .	p. 108
80	Bolas de raio $r$ igual a 2 para as métricas $d_4$ , $d_8$ e $d_{3-4}$ . . . . .	p. 108
81	Aspecto das bolas para as métricas $d_4$ , $d_8$ e $d_{3-4}$ . . . . .	p. 109
82	Elemento Estruturante $3 \times 3$ . . . . .	p. 110

83	Operação de Erosão na imagem (a) pelo elemento estruturante da Fig. 82 resultando na imagem (b). . . . .	p. 110
84	Operação de Dilatação na imagem (a) pelo elemento estruturante da Fig. 82 resultando na imagem (b). . . . .	p. 111
85	Processo de Abertura. (a) Imagem Inicial, (b) Imagem erodida, (c) Imagem dilatada após erosão . . . . .	p. 111
86	Rede 3D com 19 velocidades . . . . .	p. 119
87	Regiões do sistema $U$ definido por MAGNANI et al. [2000] . . . . .	p. 124

## *Lista de Símbolos*

- $\alpha$  Constante da agenda de resfriamento geométrica, página 41
- $\beta$  Constante da agenda de resfriamento linear, página 42
- $\Delta E_{ij}$  Diferença de energia entre o estado  $j$  e o estado  $i$ , página 34
- $\Delta P$  Diferença de pressão na interface dos fluidos, página 17
- $\Delta p$  Gradiente de pressão, página 16
- $\eta$  Fator de Amplificação, página 28
- $\lambda$  Alcance de correlação, página 19
- $\Lambda_3$  Indicador de percolação, página 26
- $\langle \rangle$  Média estatística, página 19
- $\mathcal{F}$  Transformada de Fourier, página 20
- $\mu$  Viscosidade do fluido que escoa no meio poroso, página 16
- $\mu_{linear}$  Coeficiente de atenuação linear, página 11
- $\mu_{massa}$  Coeficiente de atenuação de massa, página 11
- $\phi$  Porosidade, página 14
- $\Psi_{k-1}$  Função de estatísticas da cadeia de Markov anterior, página 42
- $\rho$  Densidade do material que a radiação atravessa, página 11
- $\sigma$  Desvio padrão, página 42
- $\sigma$  Tensão interfacial entre os fluidos presentes na amostra, página 17
- $\sigma^2$  Variância, página 42
- $\sigma_\infty$  Espaço inicial de solução, página 41
- $\theta$  Ângulo de contato entre os fluidos e a matriz rochosa, página 17

- $v$  Constante de reauecimento, página 43
- $\vec{x}$  Um vetor em relação a uma origem arbitrária, página 19
- $a(u)$  Conjunto de operadores lineares, página 28
- $A_t$  Área transversal da amostra, página 16
- $A_{ij}(t_k)$  Probabilidade de que uma solução  $j$  seja aceita uma vez que ela foi gerada (probabilidade de aceitação), página 37
- $C_p(\vec{u})$  Função de correlação para a fase porosa, página 19
- $D$  Diâmetro de poros, página 22
- $E$  Estado de energia do *Simulated Annealing*, página 34
- $E_\infty$  Custo inicial do SA, página 41
- $F(D)$  Fração diferencial de tamanho de poros, página 22
- $F_a(D)$  Fração de tamanho de poros menores ou iguais a  $D$ , página 22
- $f_b$  Fator de borda, página 30
- $f_s$  Fator de sobreposição, página 30
- $F_V(D)$  Proporção em volume da imagem reconstruída que corresponde a esferas de diâmetro  $D$ , página 30
- $G_{ij}(t_k)$  Probabilidade de que uma solução  $j$  seja gerada a partir de uma solução  $i$  em uma temperatura  $t_k$  (probabilidade de geração), página 37
- $I$  Intensidade do feixe emergente da amostra, página 11
- $I_0$  Intensidade do feixe incidente na amostra, página 11
- $k$  Permabilidade absoluta, página 16
- $k_b$  Constante de Boltzmann, página 34
- $L_c$  Aresta de um cubo, página 26
- $L_M$  Comprimento da cadeia homogênea de Markov, página 39
- $M$  Espaço da matriz em uma imagem, página 19
- $m$  Número de medidas efetuadas para o cálculo da fração de células percolantes, página 26

- $N$  Tamanho da imagem, página 28
- $n_e$  Número de esferas de diâmetro  $D$ , página 30
- $P$  Espaço poroso em uma imagem, página 19
- $P(t_k)$  Matriz de transição, página 37
- $P(y)$  Campo gaussiano correlacionado, página 28
- $p_3(L_c)$  Fração de células percolantes, página 26
- $p_i(z)$  Distribuição de tamanho de cordas, página 25
- $P_r$  Distribuição de Boltzmann, página 34
- $P_r$  Probabilidade da sequência continuar em um estado de perturbação, página 34
- $P_{ij}(k)$  probabilidade que o resultado do  $k$ -ésimo evento seja  $j$ , dado que o resultado do  $(k - 1)$ -ésimo evento foi  $i$ , página 37
- $Q$  Vazão do escoamento, página 16
- $r^i$  Diâmetro do poro, página 17
- $R_i$  Vizinhança  $R$  do estado  $i$ , página 37
- $R_p(u)$  Função de correlação normalizada da fase poro, página 19
- $S$  Conjunto de soluções resultantes de uma otimização, página 37
- $T$  Parâmetro do *Simulated Annealing* chamado Temperatura, página 34
- $t_k$  Temperatura do estado  $k$ , página 37
- $u$  Módulo de um deslocamento arbitrário, página 19
- $V$  Volume da imagem, página 30
- $V_c$  Volume total das esferas para corrigir o efeito da sobreposição, página 32
- $V_p$  Volume poroso da amostra, página 14
- $V_s(D)$  Volume sobreposto associado a um diâmetro de esfera, página 31
- $V_t$  Volume total da amostra, página 14
- $V_{resid}(D)$  Diferença entre o volume sobreposto e o volume gerado para corrigir a sobreposição, página 32

$Y(\vec{x})$  Campo gaussiano normal, página 28

$Z(\vec{x})$  Campo binário, página 28

$Z(T)$  Fator de normalização dependente da temperatura  $T$ , página 34

$Z_p$  Função de fase associada à fase poro, página 19

## *Lista de Tabelas*

1	Porosidade aparente e resolução medida em uma imagem de carbonato	p. 15
2	Porosidade e resolução espacial para 10 lâminas delgadas de amostras de rochas reservatório de petróleo . . . . .	p. 60
3	Erro quadrático da comparação da função Correlação entre a reconstrução de 10 lâminas delgadas de amostras de rochas reservatório de petróleo utilizando os métodos PSA, OSA, GT . . . . .	p. 60
4	Comparação da Distribuição de Tamanho de poros entre a reconstrução de 10 amostras de rochas reservatório de petróleo utilizando os métodos PSA, OSA, GT e ES . . . . .	p. 64
5	Número de seções adquiridas, resolução espacial e parâmetros de aquisição para 5 imagens microtomográficas de rochas reservatório . . . . .	p. 67
6	Porosidade, volume utilizado e alcance de correlação para cada amostra	p. 69
7	Comparação da correlação entre a reconstrução de 5 amostras de rochas reservatório de petróleo utilizando os métodos PSA, OSA e GT . . . . .	p. 69
8	Comparação da Distribuição de Tamanho de poros 3D entre a reconstrução de 5 amostras de rochas reservatório de petróleo utilizando os métodos PSA, OSA, GT e ES . . . . .	p. 76
9	Tempo computacional para a reconstrução de uma microestrutura com $80^3$ <i>voxels</i> . . . . .	p. 82
10	Resultados das simulações de permeabilidade absoluta nas reconstruções de 5 amostras de rocha reservatório e suas imagens microtomográficas utilizando o método LBM apresentado por [SANTOS et al., 2002]. . . . .	p. 88

# 1 *Introdução*

A caracterização de materiais porosos se constitui em um problema de grande interesse científico e tecnológico. Para caracterizar estes materiais, mede-se várias propriedades geométricas ou físicas, com o objetivo de determinar propriedades macroscópicas de transporte destes materiais. A determinação destas propriedades tem aplicação em várias áreas, como a de solos, a de exploração de petróleo e a de construção civil.

Os desenvolvimentos do presente trabalho são aplicados à caracterização de rochas reservatório de petróleo. A geometria das microestruturas porosas, incluindo as rochas reservatório, pode apresentar um alto grau de complexidade. Por isso, são várias as propriedades, geométricas ou físicas, que caracterizam estes materiais. Entre estas propriedades, pode-se citar: a porosidade, a distribuição de tamanho de poros, a permeabilidade intrínseca, as curvas de permeabilidade relativa e os parâmetros elétricos (fator de formação e índice de resistividade). Estas propriedades são, usualmente, obtidas em laboratório de petrofísica através de experimentos laboratoriais, em geral de alto custo, destrutivos e demorados, em amostras de testemunhos retirados do reservatório.

Por outro lado, o avanço de técnicas de análise de imagens digitais, aplicadas em seções planas de rochas, vem se mostrando uma metodologia rápida e de baixo custo para a determinação computacional destas propriedades, unicamente conhecendo a microestrutura da rocha. A partir de parâmetros geométricos medidos em imagens adquiridas através de um microscópio óptico em seções planas polidas, torna-se possível gerar um modelo tridimensional (3D) desta microestrutura.

Este campo tem grande interesse científico e vários métodos de reconstrução têm sido estudados. Pode-se citar os métodos baseados no truncamento de campos gaussianos [ADLER; JACQUIN; QUIBLIER, 1990; LIANG et al., 2000], o método de movimentação de esferas chamado esferas sobrepostas apresentado por [SANTOS et al., 2002, 2005], a família de métodos conhecidos como diagenéticos, que se baseiam na tentativa de reproduzir o histórico geológico da rocha [ØREN; BAKKE, 2002, 2003] e mais recentemente, os métodos baseados em estatística multi-ponto, que reproduzem modelos ou *templates* de várias escalas de imagens padrão [STREBELLE, 2002; STREBELLE; PAYRAZKYAN; CAERS, 2003;

OKABE; BLUNT, 2003, 2004; WU et al., 2007]. Também se tem estudado métodos híbridos de um ou mais métodos, como o híbrido diagenético-*simulated annealing* proposto por [POLITIS et al., 2008].

O método baseado no truncamento de campos Gaussianos [QUIBLIER, 1984; ADLER; JACQUIN; QUIBLIER, 1990; LIANG, 1997; LIANG et al., 2000; LIANG; IOANNIDIS; CHATZIS, 2000; BEKRI et al., 2000, 2003] é atualmente o mais utilizado para a reconstrução 3D de microestruturas porosas. Contudo, este método apresenta problemas no tocante à conservação da conectividade em longa distância para meios com forte organização espacial, o que pode acontecer, por exemplo, em rochas com baixa porosidade e alta permeabilidade intrínseca. De fato, este método conserva apenas estatísticas de, no máximo, segunda ordem (porosidade e correlação a dois pontos) o que é insuficiente para representar de forma adequada a microestrutura de rochas deste tipo.

Outra área que vem ganhando destaque na comunidade científica é a microtomografia computadorizada de raios-X ( $\mu$ -CT). Os equipamentos de microtomografia têm alcançado resoluções cada vez maiores, chegando a ordem do nanometro ( $nm$ ), permitindo a aquisição de imagens de alta qualidade, que preservam a estrutura da rocha. Uma vez que esta técnica ainda é de alto custo, justifica-se a pesquisa na área de reconstrução, dada a baixa disponibilidade de equipamentos deste tipo.

Neste trabalho, as medidas com a técnica  $\mu$ -CT apresentadas foram realizadas no Centro de Pesquisa e Desenvolvimento Leopoldo Américo M. de Mello (Cenpes/Petrobras) pela equipe do Laboratório de Física Nuclear Aplicada (LFNA) da Universidade Estadual de Londrina, utilizando um microtomógrafo modelo SkyScan 1172. Esta técnica apresenta a vantagem de medir a microestrutura em 3D, não sendo necessária, uma reconstrução estocástica, sendo limitada, porém, à resolução espacial do equipamento. ARNS et al. [2005] trataram do problema de se encontrar uma resolução espacial adequada para a determinação de propriedades físicas, e mostraram a necessidade de resoluções próximas ao micrometro para medidas de porosidade de uma amostra.

O presente trabalho propõe o desenvolvimento de dois métodos para a reconstrução de meios porosos em 3D utilizando o método de otimização denominado *simulated annealing* (SA). A partir de parâmetros geométricos e topológicos medidos em imagens bidimensionais 2D de seções da microestrutura da rocha, torna-se possível gerar um modelo 3D desta microestrutura. Os métodos usam diferentes movimentações do SA: um baseado em movimentação de *pixels* (para o caso bidimensional) ou *voxels* (para o caso tridimensional) (PSA) e outro de objetos: círculos (2D) ou esferas (3D) (OSA). Ambos os modelos conservam a função correlação espacial e o método PSA conserva adicionalmente os parâmetros distribuição de corda linear e distribuição de distância ao fundo.

Para validar os métodos, efetuou-se comparações de parâmetros geométricos (função correlação, distribuição de tamanho de poros e fração de células percolantes) e propriedades físicas determinadas através de métodos computacionais (permeabilidade intrínseca e pressão capilar por intrusão de mercúrio) com reconstruções utilizando os métodos gaussianas truncada e esferas sobrepostas, além de imagens microtomográficas de rochas reservatório.

Este documento está estruturado da seguinte forma:

No capítulo dois aborda-se a microestrutura, explicando como caracterizá-la em duas e três dimensões, assim como os conceitos básicos sobre as propriedades que se deseja determinar e os parâmetros geométricos:

- função correlação,
- distribuição de tamanho de poros,
- distribuição de imagem de distância ao fundo (IDF),
- distribuição de tamanho de corda,
- fração de células percolantes ou fração percolante.

Da mesma forma, os parâmetros físicos que se deseja determinar: permeabilidade intrínseca e pressão capilar por intrusão de mercúrio.

O capítulo três descreve os métodos de reconstrução utilizados atualmente. Apresenta-se os métodos baseados em campos gaussianos e esferas sobrepostas, analisando individualmente seus pontos positivos e negativos.

No capítulo quatro apresenta-se o método de otimização *Simulated Annealing*, seu modelo matemático e suas aplicações para os métodos de reconstrução propostos nesta tese. Esses métodos utilizam diferentes movimentações, o PSA de *pixels* ou *voxels*, e o OSA de círculos ou esferas. Ambos os métodos visam suprir deficiências dos métodos atuais em preservar a conectividade em longa distância para meios com forte organização espacial.

O capítulo cinco apresenta os resultados obtidos das reconstruções 2D e 3D de rochas reservatório, bem como uma discussão sobre os mesmos. Para validar as reconstruções, efetuou-se comparações de parâmetros geométricos (correlação, distribuição de tamanho de poros e fração percolante) com outros métodos de reconstrução e respectivas imagens microtomográficas. Também comparou-se o resultado da determinação das propriedades físicas permeabilidade intrínseca e pressão capilar por intrusão de mercúrio..

O capítulo seis mostra as conclusões deste trabalho e as sugestões de trabalhos futuros.

## ***2 Microestrutura porosa: propriedades geométricas e físicas***

Um grande número de propriedades pode ser utilizado para se caracterizar um material poroso. Dentre elas, a porosidade e a permeabilidade estão entre as mais conhecidas. A primeira refere-se ao volume que pode ser ocupado por um fluido em uma estrutura porosa, e, a segunda, refere-se à capacidade do meio poroso permitir o fluxo desse fluido armazenado.

De mesma forma, quando se deseja caracterizar a microestrutura porosa a partir de seções planas do material, mede-se parâmetros geométricos, como a função correlação, a distribuição de tamanho de poros, ou a distribuição de cordas lineares.

Este capítulo é dividido em três seções, descrevendo a caracterização microestrutural em duas e três dimensões e descrição dos parâmetros geométricos: função correlação, distribuição de tamanho de poros, distribuição de IDF, distribuição de tamanho de corda, fração de células percolante ou fração percolante; bem como os parâmetros físicos que se deseja determinar: permeabilidade intrínseca e pressão capilar por intrusão de mercúrio.

### **2.1 Caracterização Bidimensional**

Uma forma de se caracterizar microestruturas é a partir de imagens digitais de seções planas do material. A partir destas imagens, coloridas ou em níveis de cinza, são feitas segmentações, sendo definidas duas fases, a sólida e a porosa.

As imagens das seções das amostras podem ser obtidas utilizando-se microscópios ópticos ou microtomógrafos de raios-X. No primeiro há a necessidade de se preparar as amostras para que elas sejam visualizadas no microscópio.

## 2.1.1 Análise de imagens digitais

Nas imagens segmentadas, comumente a fase sólida é pintada de preto e a porosa de branco. Nestas, conta-se o número de *pixels* brancos (fase porosa) e divide-se este valor pelo número de *pixels* da imagem. Este método foi o utilizado neste trabalho para determinar a porosidade de rochas reservatório.

### 2.1.1.1 Preparação das Lâminas e Aquisição das Imagens

Antes da captura das imagens, é necessário preparar as amostras para serem analisadas nos microscópios. Neste procedimento, são utilizadas amostras de rochas reservatório, e as imagens são obtidas a partir de lâminas petrográficas que, em sua origem, eram utilizadas para a determinação das várias proporções dos minerais presentes na rocha. A análise destas lâminas mostra-se uma ferramenta alternativa de baixo custo para a estimativa das propriedades petrofísicas das rochas reservatório. Além de utilizar as lâminas confeccionadas a partir dos testemunhos, este método pode ser aplicado aos pequenos fragmentos de rocha, resultantes do próprio processo de perfuração (amostras de calha), bem como nas chamadas amostras laterais, respeitando-se a representatividade de cada amostra em relação ao todo da rocha.

A preparação das lâminas petrográficas inicia-se com a retirada de amostras do poço de petróleo. Das amostras retiradas, dentre os diversos tipos, os chamados testemunhos são as mais nobres. Alguns exemplos de testemunhos são apresentados na Figura 1. Este tipo de amostra recupera um volume cilíndrico de rocha que mantém os constituintes em sua estrutura original, como encontrados em profundidade, permitindo estudar os meios porosos onde estão armazenados os hidrocarbonetos.



**Figura 1:** Imagem de Testemunhos.

Os testemunhos são serrados longitudinalmente, permitindo uma melhor análise das formações geológicas presentes no reservatório. Destes corpos cilíndricos, de aproximadamente 0,15m de diâmetro e 1m de comprimento, são retirados corpos cilíndricos menores, tanto transversalmente quanto longitudinalmente, denominados plugues. Na Figura 2, é apresentado um plugue extraído de um testemunho de rocha consolidada. Deste plugue, é serrada uma parte do seu comprimento para ser utilizada na confecção das lâminas petrográficas. Estas seções são submetidas a um processo de limpeza com solventes orgânicos, para remoção dos hidrocarbonetos. As amostras limpas são impregnadas com uma resina epóxi contendo um corante azul que, além de prevenir a desagregação dos grãos, facilita a visualização do espaço poroso. A lâmina pode ser, então, confeccionada com a colagem da seção de rocha sobre uma lâmina de vidro, com posterior desgaste e polimento até a espessura padrão de  $30\mu\text{m}$ , recomendada para a observação em microscópio óptico de luz transmitida. A sequência de preparação de uma lâmina petrográfica é ilustrada na Figura 3.

De posse das lâminas delgadas, inicia-se a aquisição das imagens. As imagens são capturadas procurando sempre a melhor representação da superfície analisada. O número de imagens obtido de cada lâmina depende do tipo de rocha, e o aumento utilizado depende principalmente do tamanho dos objetos a serem analisados.

Para a captura das imagens utilizadas, neste trabalho, foram utilizados microscópios



**Figura 2:** Plugue retirado de um testemunho de rocha consolidada.



**Figura 3:** Sequência da preparação de uma lâmina.

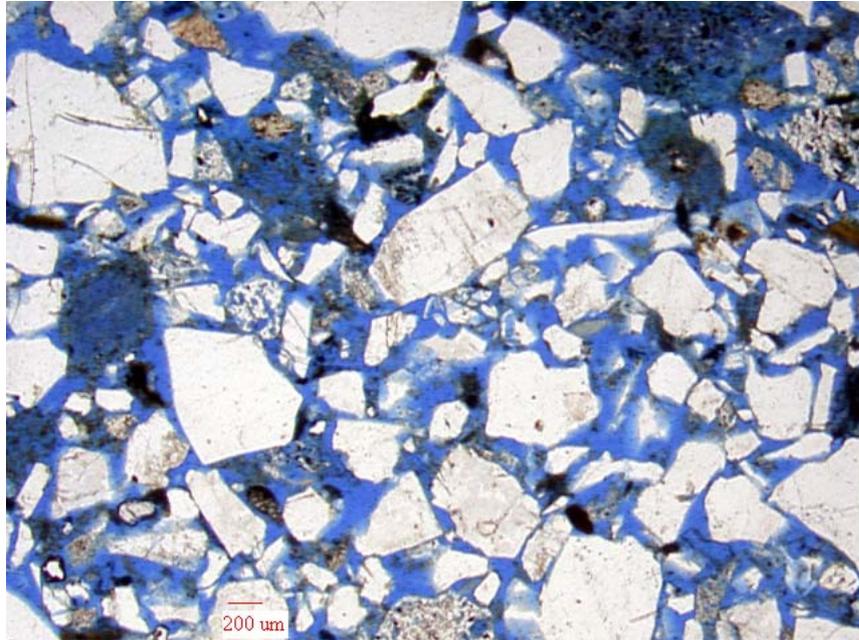
ópticos de luz transmitida. Desta forma, são observadas as características das rochas e dos minerais quando estes são atravessados pela luz. Os microscópios de luz transmitida são os mais utilizados na observação deste tipo de amostras de rochas.

As imagens digitais coloridas são adquiridas e armazenadas em arquivos de imagens de 24 bits, em modelo *RGB*, no qual cada cor é resultado de uma combinação dos componentes vermelho (*Red*), verde (*Green*) e azul (*Blue*). O espaço poroso, quando visualizado ao microscópio óptico, apresenta cor azul intensa, característica do corante presente na resina utilizada, o que facilita a identificação do mesmo, frente aos diferentes minerais que constituem a rocha. Embora as imagens coloridas demandem uma maior memória computacional, a cor se constitui em um descritor adequado, auxiliando, em análises assistidas, na identificação e na extração dos objetos de uma imagem. Em análises com intervenção do usuário, deve ser ressaltado que o olho humano consegue discernir milhares de matizes e intensidades de cores, contudo, é capaz de discernir poucas dezenas de níveis de cinza [GONZALEZ; WOODS, 2002].

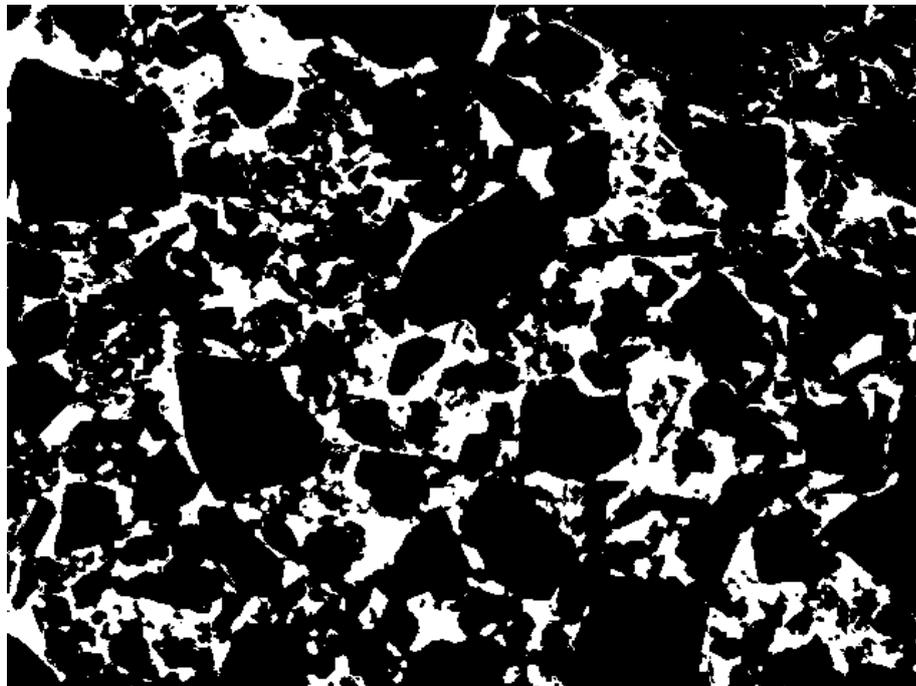
#### 2.1.1.2 Segmentação

O processo de segmentação para imagens de meios porosos consiste na separação das fases poro e sólido. No presente caso, a fase poro é pintada de branco e a fase sólido pintada

de preto. Nas imagens coloridas, a partir do histograma da imagem, é estabelecido um limiar (*threshold*) para cada componente de cor. Na Figura 4, é apresentada uma imagem colorida de uma seção plana de uma rocha reservatório com resolução de  $7,84\mu\text{m}$ . Na Figura 5, é apresentada a imagem binária correspondente a imagem anterior.



**Figura 4:** Imagem colorida de uma seção plana de uma rocha reservatório obtida por microscopia óptica com resolução de  $7,84\mu\text{m}$ .



**Figura 5:** Imagem binária correspondente à imagem colorida da Figura 4 com fase poro em branco.

A segmentação é uma etapa fundamental do processamento de imagens, uma vez que toda a quantificação de parâmetros geométricos dependerá da correta definição das fases. Desta forma, a imagem binária obtida deve representar adequadamente a imagem original. [FERNANDES, 2002]. Neste trabalho, esta etapa foi realizada utilizando o software de processamento e análise de imagens Imago, que foi desenvolvido pelo Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas (LMPT) da Universidade Federal de Santa Catarina, em parceria com o CENPES/Petrobras, e com a ESSS (*Engineering Simulation and Scientific Software*). O Imago apresenta dois modos de segmentação para imagens coloridas: o que trabalha com o modelo *RGB* (*Red, Green e Blue*) e o que trabalha com o modelo *HSI* (*Hue, Saturation e Intensity*). Neste segundo, a matiz da cor é armazenada no componente *H*, enquanto os componentes *S* e *I* guardam informações sobre a saturação e a intensidade, respectivamente.

Ou seja, para a binarização das imagens utilizadas neste trabalho, adotou-se um limiar *HSI*. Como, para cada lâmina petrográfica, são capturados mais de um conjunto de imagens, cujo número de imagens de cada conjunto varia de acordo com o aumento utilizado, a binarização foi feita, inicialmente, adotando-se limites iguais para todas as imagens do conjunto. As imagens, capturadas de uma mesma lâmina, podem apresentar irregularidades referentes à má diluição do corante azul da resina epóxi e a problemas de iluminação, quando a intensidade da luz não é a mesma em todas as partes da lâmina. Devido a isto, foi feita uma verificação para conferir se alguma imagem binarizada do conjunto apresentava alguma inconsistência. Caso isto ocorresse, a binarização desta imagem era refeita.

Após a segmentação pode-se medir vários parâmetros através da imagem. Estes parâmetros visam descrever a geometria e a topologia da imagem de modo a ser possível reconstruir o meio em três dimensões. Dentre eles, pode-se citar a porosidade, função correlação, a função corda linear e a distribuição de tamanho de poros. Estes parâmetros serão melhor descritos nos Tópicos 2.3 e 2.4.

## 2.2 Caracterização Tridimensional

Neste tópico descreve-se o método utilizados neste trabalho para adquirir imagens 3D das amostras utilizando a técnica de microtomografia de raios-X. Neste método, não é necessária a etapa de preparação.

## 2.2.1 Microtomografia de raios-X: uma breve fundamentação teórica

No que se segue, são expostos, de forma sucinta, conceitos fundamentais concernentes à interação da radiação com a matéria visando uma introdução à técnica de microtomografia com raios-X. Os raios-X podem interagir através de vários processos, cujos principais são: efeito fotoelétrico, espalhamento Compton, produção de pares, efeito Rayleigh, Thomson e absorção fotonuclear. Desses, os mais influentes para a probabilidade de choque de partículas de raios-X e matéria, são o efeito fotoelétrico, Compton e produção de pares [APPOLONI; MELQUIADES, 1997].

### 2.2.1.1 Coeficiente de Atenuação Linear e de Massa

O processo de interação entre os Raios-X e a matéria é descrito por uma absorção exponencial e sua equação é conhecida como a Lei de Lambert-Beer dada por:

$$I = I_0 e^{-\mu_{linear} x} \quad (2.1)$$

onde  $x$  representa a espessura do material usado como amostra ( $cm$ ),  $I_0$  é a intensidade do feixe incidente na amostra,  $I$  é a intensidade do feixe emergente da amostra e  $\mu_{linear}$  é o coeficiente de atenuação linear ( $cm^{-1}$ ). Este coeficiente é resultante da soma dos efeitos previamente citados [APPOLONI; MELQUIADES, 1997].

Pode-se ainda calcular a probabilidade de interação da radiação por unidade de comprimento, que se chama coeficiente de atenuação linear. Ainda é possível definir o coeficiente de atenuação de massa  $\mu_{massa}$  ( $cm^2/g$ ) como:

$$\mu_{massa} = \frac{\mu_{linear}}{\rho} \quad (2.2)$$

onde  $\rho$  é a densidade do material que a radiação atravessa.

## 2.2.2 Microtomografia de Raios-X ( $\mu$ -CT)

Este método de caracterização de meios porosos em 3D tem ganhado grande destaque na comunidade científica. O sistema é formado de um emissor de raios-X e de um coletor, que mapeia os coeficientes de atenuação linear de cada parte da amostra. Na Figura 6 é apresentado um exemplo ilustrativo. Um objeto cilíndrico visto de cima com 8mm de diâmetro é bombardeado por um feixe de radiação com diâmetro de 4mm. Ao varrer o objeto verticalmente da esquerda para a direita, chega-se a duas equações. O coeficiente

de atenuação linear das medidas verticais deve ser a soma dos coeficientes X1 e X3 e X2 e X4:

$$\mu_a = \mu_{X1} + \mu_{X3} \quad (2.3)$$

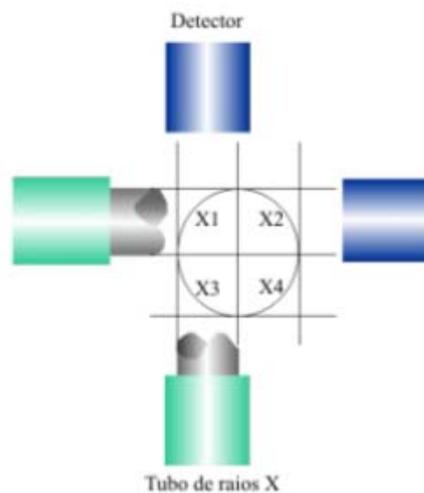
$$\mu_b = \mu_{X2} + \mu_{X4} \quad (2.4)$$

Deve-se ainda obter outras duas equações para calcular todas as incógnitas, então rotaciona-se o emissor e o detector em 90°, chegando-se a duas outras equações:

$$\mu_c = \mu_{X1} + \mu_{X2} \quad (2.5)$$

$$\mu_d = \mu_{X3} + \mu_{X4} \quad (2.6)$$

Desta forma é possível fazer um mapeamento através de uma matriz 2x2, determinando-se as incógnitas  $\mu_{X1}$ ,  $\mu_{X2}$ ,  $\mu_{X3}$  e  $\mu_{X4}$  através de um sistema linear com o mesmo número de equações e incógnitas.



**Figura 6:** Mapeamento através da matriz do coeficiente de atenuação linear.

Para casos reais, onde o diâmetro do feixe de radiação é da ordem de micrometros, diminui-se o tamanho das células X e aumenta-se o tamanho da matriz, sendo necessário, também, um maior número de rotações do conjunto fonte-detector para obterem-se tantas equações quantas forem as incógnitas [ROCHA, 2005; NOGUEIRA, 2006].

Outros parâmetros importantes são a resolução espacial da imagem e a resolução de contraste. A primeira depende da geometria do feixe de radiação, bem como do detector,

e representa a menor região que é possível investigar na microestrutura. Se algum objeto for menor do que a resolução espacial do sistema, não poderá ser discriminado e será desprezado. A segunda diz respeito ao contraste mínimo que deve haver entre os valores do coeficiente de atenuação linear entre *pixels* adjacentes.

### 2.2.3 Microtomógrafo utilizado neste trabalho

As imagens microtomográficas adquiridas neste trabalho foram obtidas utilizando um equipamento Skyscan 1172, exposto na Figura 7, com tubo de raios-X de microfoco selado resfriado a ar, usando anodo de tungstênio. As amostras de análise 3D foram adquiridas utilizando um filtro de alumínio de 1mm e uma câmera *CCD* de 8 *bits* com modo de integração *on-chip* e lentes acopladas a um cintilador (campo de visão de 28 a 65mm). A detectabilidade do equipamento varia de 1 a 11  $\mu\text{m}$  dependendo da amostra e da resolução de contraste. O ângulo de rotação total foi de  $360^\circ$ , com passo de rotação de  $0,45^\circ$ . As imagens foram geradas utilizando algoritmo de reconstrução *cone-beam* (*Feldkamp*). A câmera *CCD* do equipamento utilizado fornece imagens com até  $2048 \times 2048$  *pixels*.



**Figura 7:** Foto do equipamento Skyscan 1172 utilizado neste trabalho.

## 2.3 Propriedades Físicas

As propriedades citadas neste tópico são as medidas experimentais que se deseja determinar através de métodos computacionais.

### 2.3.1 Porosidade

A porosidade é a propriedade associada ao espaço disponível para o armazenamento de fluidos em um meio poroso. Considerando-se uma amostra porosa com um volume total  $V_t$  e um volume de poro  $V_p$ , a porosidade  $\phi$  é definida como:

$$\phi = \frac{V_p}{V_t} \quad (2.7)$$

Observa-se dois tipos de porosidade:

- total: que é a razão entre o volume de todo o espaço vazio da amostra e o volume total ocupado pela amostra;
- efetiva: que é a razão entre o espaço vazio interconectado da amostra pelo volume total ocupado pela amostra.

A diferença entre as porosidades total e efetiva revela a quantidade de poros isolados, obtendo-se a porosidade não-efetiva. Para as rochas reservatório, material analisado neste trabalho, pode-se classificar a porosidade de acordo com a sua origem como: primária, secundária e de fratura [SCHMIDT; MCDONALD; PLATT, 1977]. A porosidade primária é aquela formada devido à deposição dos grãos e a porosidade secundária é aquela formada por processos geológicos subseqüentes à formação das rochas (diagênese). Os processos pós-deposicionais incluem também os processos tectônicos responsáveis pela geração de fraturas e porosidade de fratura.

Vários são os métodos utilizados para se determinar a porosidade de um material. Dentre estes, os métodos mais utilizados são: intrusão de mercúrio, expansão a gás, análise de imagens digitais (adquiridas através de seções planas ou de microtomografia de raios-X) e transmissão de raios gama [GASPARI, 2006]. Este trabalho tratará apenas das medidas efetuadas por análise de imagens digitais.

Observa-se que, em geral, a porosidade total medida por análise de imagens é inferior àquela determinada através de experimentos físicos, como a expansão a gás. Isto ocorre devido à presença de poros menores do que a resolução adotada, que não são observados durante a análise visual de uma seção da amostra. Um exemplo deste efeito é a presença de argila na amostra, que forma poros de escalas muito pequenas. Quanto às resoluções espaciais das imagens, estas dependem do equipamento e do aumento utilizados. No equipamento utilizando nesta pesquisa, aumentos maiores tornam possível observar melhor os detalhes da microestrutura porosa, mas isso faz com que a área capturada da amostra seja menor e menos representativa.

O trabalho de ARNS et al. [2005] trata do problema de se encontrar uma resolução espacial adequada para a determinação de propriedades físicas. A simulação de propriedades físicas requer uma representação adequada dos poros do meio, que possuem escala micrométrica. Uma medida da porosidade do meio original e do digitalizado indica a porosidade que não está sendo medida pelo  $\mu$ -CT. O autor apresenta este dado para diferentes resoluções de acordo com a Tabela 1;

**Tabela 1:** Porosidade aparente e resolução medida em uma imagem de carbonato

Resolução espacial ( $\mu m$ )	2,5	5	10	20
$\phi$ (%)	11,2	9,76	6,73	3,21

Mesmo com uma resolução espacial de  $2,5\mu m$  (plugue de 5mm, imagem de  $2048^3$  *voxels*), o meio reconstruído por  $\mu$ -CT ainda permanece distante do meio original, que possuía porosidade de 21,7% (porosidade medida por intrusão de hélio). O melhor resultado que ARNS et al. [2005] obtiveram foi com uma resolução de  $1,1\mu m$  (plugue de 2mm, imagem de  $2048^3$  *voxels*), medindo uma porosidade de 15,6%. Ainda assim, o autor coloca que 10% da porosidade volumétrica medida (1,56% do total) corresponde a porosidade não conectada, o que deixa o resultado um pouco pior. Este problema não pôde ser resolvido com o equipamento que o autor utilizou.

ARNs et al. [2005] demonstraram o potencial da técnica de  $\mu$ -CT para se trabalhar na medição de meios porosos tridimensionais para simulação de propriedades físicas, mas problemas como a falta de resolução para descrever poros em escalas menores que a medida pelo equipamento são um fator limitante. O autor também coloca dificuldades computacionais em simular meios com alta resolução. A maior simulação utilizada, foi de  $320 \times 320 \times 640$  *voxels*, para o meio reconstruído com resolução de  $1,1\mu m$ , o que diminuiu a representatividade dessa simulação em relação ao meio original. Convém salientar, ainda, que ARNS et al. [2005] utilizaram rochas carbonáticas, com poros de escalas menores que a resolução espacial do microtomógrafo em questão. As rochas utilizadas no presente trabalho serão arenitos sem fase argilosa, que possuem apenas poros dentro da escala que será trabalhada.

As resoluções espaciais e os tamanhos das imagens utilizadas neste trabalho serão expostas no Capítulo 5.

### 2.3.2 Permeabilidade Intrínseca

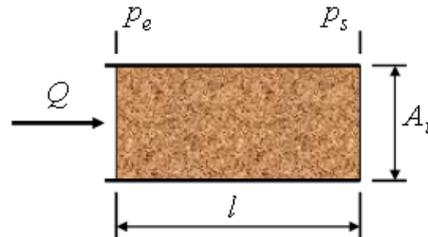
Além da quantificação do volume poroso, é importante saber a vazão com a qual o fluido armazenado no meio poroso pode ser extraído. A permeabilidade é a propriedade que se refere à medida da capacidade de um meio poroso permitir o fluxo de fluidos. Quando apenas um fluido preenche totalmente o espaço poroso, tem-se a permeabilidade intrínseca, ou permeabilidade absoluta, como é mais conhecida na indústria do petróleo.

O engenheiro francês Henry Darcy, em 1856, desenvolveu uma relação empírica para a permeabilidade onde a vazão volumétrica é proporcional à área transversal da amostra e ao potencial hidráulico, e inversamente proporcional ao comprimento da amostra. O potencial hidráulico corresponde à soma da energia potencial e da energia de pressão.

Considerando uma amostra na horizontal, como a apresentada na Figura 8, com comprimento  $l$ , área transversal  $A_t$ , submetida a uma diferença de pressão  $\Delta p$  e escoamento unidirecional a baixas velocidades, a lei de Darcy assume a seguinte forma:

$$Q = \frac{k \cdot A_t}{\mu} \cdot \left( \frac{\Delta p}{l} \right) \quad (2.8)$$

onde  $Q$  é a vazão do escoamento,  $\mu$  é a viscosidade do fluido que escoar no meio poroso e  $k$  é a permeabilidade absoluta.



**Figura 8:** Esquema de um fluido escoando em uma amostra porosa

A permeabilidade é uma propriedade que independe do fluido que preenche o espaço poroso. Ela está relacionada apenas com a estrutura porosa. No Sistema Internacional de Unidades (SI), a permeabilidade é expressa em metros quadrados. Mas, normalmente, a permeabilidade recebe a unidade de darcy (D), sendo 1D igual a  $0,987 \cdot 10^{-12} m^2$ .

Experimentalmente, no CENPES/Petrobras, as medidas de permeabilidade de rochas reservatório são feitas em amostras cilíndricas (plugges). Estas amostras passam por uma etapa de limpeza para a retirada dos hidrocarbonetos e dos sais presentes nos poros. Durante a realização do experimento, é colocado, normalmente, um gás para escoar no espaço poroso. Como a amostra tem um formato cilíndrico, a área transversal e o comprimento

são medidos facilmente. Aplicando-se uma diferença de pressão e medindo-se a vazão do gás, cuja viscosidade é conhecida, a permeabilidade é determinada com a Equação 2.8 para uma amostra na horizontal.

O método computacional adotado para o cálculo da permeabilidade é apresentado por [SANTOS et al., 2002]. Este método, baseado na discretização da equação de Boltzmann (*Lattice-Boltzmann* - LBM), é explicado com mais detalhes no Anexo C.

### 2.3.3 Pressão Capilar por intrusão de mercúrio

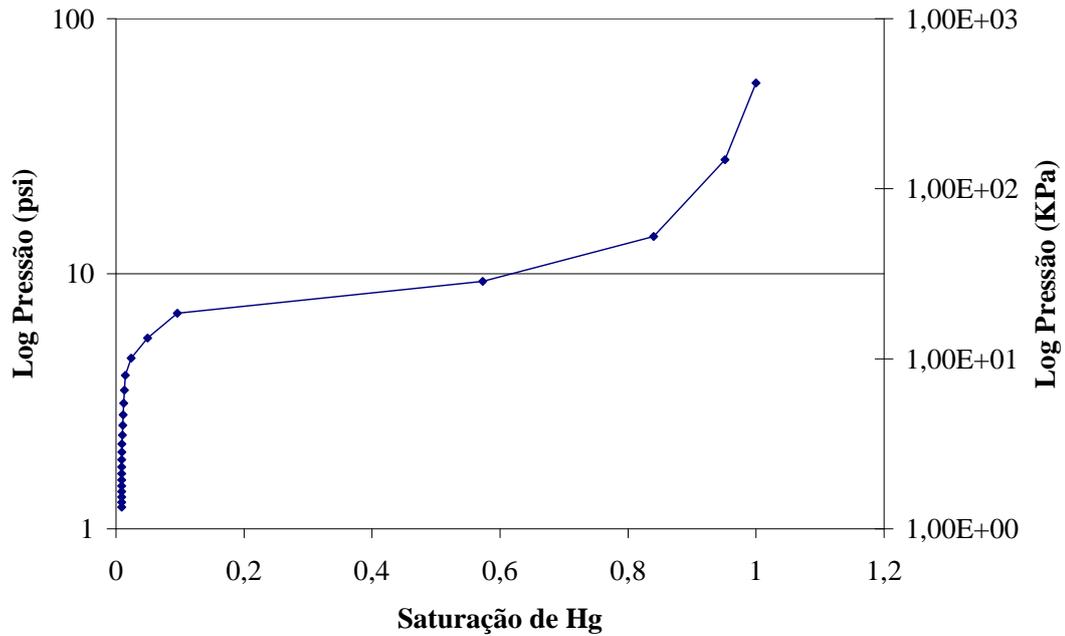
A porosimetria por injeção de mercúrio tem sido extensivamente utilizada como uma técnica experimental para caracterizar vários aspectos dos materiais porosos. Este parâmetro foi proposto por WASHBURN [1921], que sugeriu ser possível se obter a distribuição de diâmetros de poros a partir dos dados pressão-volume durante a penetração de um material poroso pelo mercúrio, foi efetivamente aplicada no desenvolvimento de um equipamento por RITTER; DRAKE [1945]. A técnica se baseia no fato de que o mercúrio se comporta como um fluido não-molhante em relação à maior parte das substâncias. Por consequência, não penetra espontaneamente em pequenos furos ou fissuras destes materiais a menos que se aplique uma pressão sobre ele. Se uma amostra de um sólido poroso é encerrada num recipiente dotado de um capilar, sendo feito o vácuo sobre a mesma e sendo preenchido o recipiente e o capilar com mercúrio, ao se aumentar a pressão sobre o líquido este penetrará nos poros da amostra reduzindo seu nível no capilar. Registrando-se a redução do nível de mercúrio no capilar, juntamente com a pressão aplicada, uma curva porosimétrica é obtida informando que volume de poros do material foi penetrado pelo mercúrio a uma dada pressão.

A propriedade pressão capilar é mais uma das utilizadas para caracterizar uma formação. Pode-se ver uma curva de pressão x volume de mercúrio presente no volume poroso (saturação) para uma amostra na Figura 9.

Pode-se, também, estimar a distribuição de tamanho de poros utilizando esta propriedade através da equação de *Young-Laplace*. Considerando-se que os meniscos (gargantas) são esféricos, pode-se escrever:

$$r = \left| \frac{2\sigma \cos(\theta)}{\Delta P} \right| \quad (2.9)$$

onde  $r$  é o diâmetro do capilar,  $\sigma$  é a tensão interfacial entre os fluidos presentes na amostra,  $\theta$  é o ângulo de contato entre os fluidos e a matriz rochosa e  $\Delta P$  é a diferença de pressão na interface dos fluidos.



**Figura 9:** Curva típica de pressão capilar por intrusão de mercúrio medida em uma amostra de rocha reservatório.

A simulação deste experimento é de grande interesse científico. Neste trabalho, adotou-se o método proposto por [MAGNANI et al., 2000] para simular este parâmetro. Esta metodologia trata de determinar a interface de dois fluidos imiscíveis em um espaço poroso tridimensional em um dado estado de equilíbrio, desconsiderando transferência de massa entre as fases. Este método é exposto no Anexo D.

MAGNANI et al. [2000] tiveram bons resultados para determinações de pressão capilar por intrusão de mercúrio em meios reconstruídos em três dimensões. Os autores também determinaram processos de embebição e drenagem de mercúrio com bons resultados em comparação a dados experimentais.

## 2.4 Parâmetros Geométricos

Os parâmetros expostos neste item referem-se a medições efetuadas em imagens digitais relativas à geometria ou topologia do espaço poroso (fase branca).

### 2.4.1 Função Correlação

Em uma imagem binária, define-se uma função de fase  $Z_p(\vec{x})$  associada à fase poro da seguinte forma:

$$Z_p(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{para } \vec{x} \in M \\ 1 & \text{para } \vec{x} \in P \end{cases} \quad (2.10)$$

onde  $\vec{x} = (i, j)$  denota um vetor posição em relação a uma origem arbitrária,  $M$  é a matriz sólida e  $P$  o espaço poroso. Definida a função de fase, e adotando-se a hipótese de meio estatisticamente homogêneo (suas propriedades mantêm-se em toda a sua extensão), a porosidade será dada por:

$$\phi = \langle Z_p(\vec{x}) \rangle \quad (2.11)$$

onde  $\langle \rangle$  denota a média estatística para o domínio da imagem em consideração.

Define-se a função correlação para a fase porosa como:

$$C_p(\vec{u}) = \langle Z_p(\vec{x}) \cdot Z_p(\vec{x} + \vec{u}) \rangle \quad (2.12)$$

para cada deslocamento arbitrário  $\vec{u}$  no plano da imagem. Além disso, com a hipótese de meio isotrópico (sem direção preferencial), a correlação dependerá apenas de  $u = |\vec{u}|$ , e, dessa forma:

$$C_p(u) = \langle Z_p(i, j) \cdot Z_p(i + u, j) \rangle \quad (2.13)$$

Pode-se determinar a função de correlação deslocando-se a imagem sobre ela mesma, na direção vertical ou horizontal em múltiplos *pixels*, calculando-se a frequência de resultados associados à intersecção de dois *pixels* pertencentes à mesma fase.

A correlação fornece a probabilidade de que dois *pixels* separados por uma distância  $u$  pertençam à mesma fase. Os valores estatísticos da correlação variam de  $\phi$ , para  $u = 0$ , até  $\phi^2$ , para deslocamentos grandes.

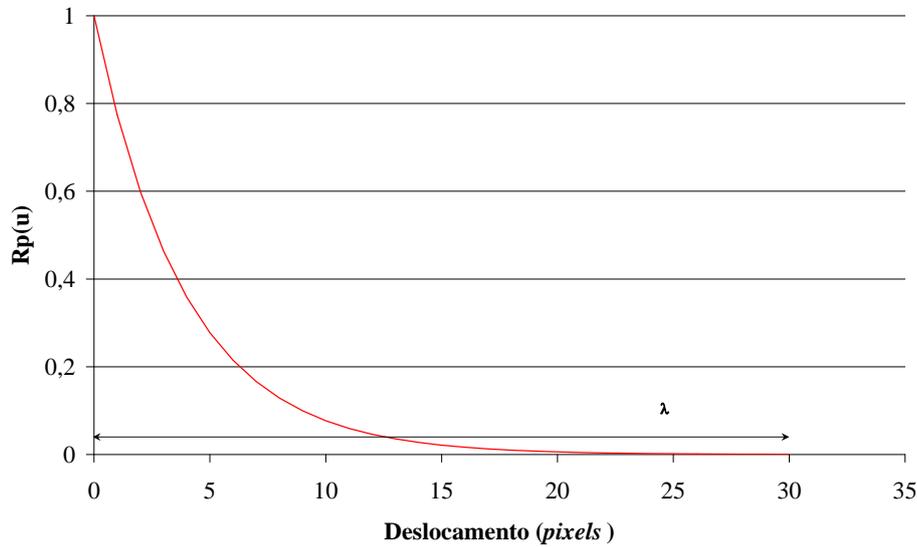
Define-se, ainda, a correlação normalizada, que assume o valor 1 para deslocamento nulo e valor 0 para deslocamentos grandes. Pode-se ver um exemplo de correlação normalizada na Figura 10.

$$R_p(u) = \frac{\langle [Z_p(i, j) - \phi] \cdot [Z_p(i + u, j) - \phi] \rangle}{\langle [Z_p(i, j) - \phi]^2 \rangle} \quad (2.14)$$

O comprimento ou alcance de correlação  $\lambda$ , parâmetro que mede o quão correlacionados os pixels da imagem são, é definido por:

$$\lambda = \int_0^{\infty} R_p(u) du \quad (2.15)$$

sendo que esse valor está associado à estabilidade da curva de correlação em  $\phi^2$ , como pode-se observar na Figura 10.



**Figura 10:** Exemplo de gráfico de correlação

Além da determinação no domínio espacial da imagem, a correlação pode ser obtida fazendo-se a transformada de Fourier da imagem (campo)  $f$ . Esta determinação é baseada no Teorema de *Wiener-Khinchin*.

$$\begin{aligned} \hat{R}_f(p) &= \mathcal{F}(R_f(u)) = |\mathcal{F}(f)|^2 = |\hat{f}| \\ R_f(u) &= \mathcal{F}^{-1}(\hat{R}_f(p)) \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde  $\hat{R}_f(p)$  é a correlação do campo  $f$  no domínio da frequência, ou seja, pelo teorema de *Wiener-Khinchin*, o quadrado da transformada de Fourier da imagem no domínio espacial [COUCH, 2001].

Este método é preferível ao domínio espacial, uma vez que aumenta o número de realizações no cálculo das probabilidades de dois pixels pertencerem à mesma fase.

## 2.4.2 Distribuição de Tamanho de Poros 2D

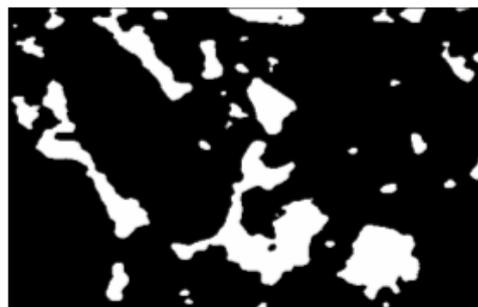
A morfologia matemática permite extrair informações morfológicas e topológicas dos objetos que compõem uma imagem, baseando-se em um elemento de análise denominado

elemento estruturante. O elemento estruturante é um objeto discretizado, com forma e tamanho definidos, para a comparação com os objetos que compõem a imagem. O resultado da aplicação das operações da morfologia matemática depende, fundamentalmente, do elemento estruturante, ou seja, da forma geométrica do elemento estruturante.

As operações elementares da morfologia matemática são a erosão e a dilatação. Estas são descritas no Anexo A, sendo calculadas através de transformadas de distâncias, explicadas no mesmo anexo. A combinação destas operações resulta na operação de abertura, quando se faz uma erosão seguida de dilatação, ou na operação de fechamento, quando se faz uma dilatação seguida de erosão. Utilizando-se operações de abertura sucessivas, com tamanho do elemento estruturante crescente, obtém-se a distribuição acumulada de tamanhos de poros, ou de sólidos, em uma imagem.

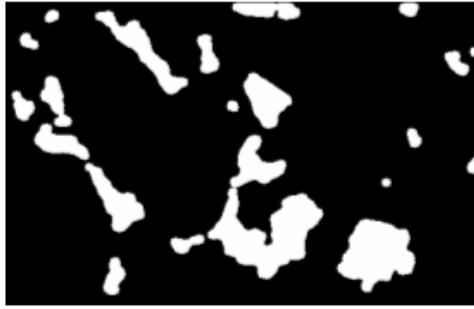
O estudo da distribuição de tamanhos de objetos é comumente chamado de granulometria. O termo é oriundo da técnica de determinação da distribuição de tamanho de grãos de materiais como a areia, utilizando-se peneiras de malhas diferentes.

A operação de abertura, detalhada no Anexo A, pode ser vista como a união das bolas, implantadas em todos os pixels dos objetos, e que não se interceptam com a fase complementar. A abertura com uma bola de raio  $r$  apresenta analogia com a técnica com peneira de malha física de tamanho  $r$ . No caso da técnica com peneiras, a entidade de medida é a massa dos objetos, e, no caso de imagens submetidas à abertura, é a área superficial ou o volume dos objetos. Na Figura 11, mostra-se uma imagem cuja fase branca é submetida a uma operação de abertura com uma bola de um dado tamanho  $r$ , resultando na imagem da Figura 12. A operação de abertura tem como efeitos a “eliminação” de objetos menores que a bola utilizada, e também a “eliminação” da rugosidade de objetos e de estreitamentos (gargantas). Na analogia com a técnica com peneiras físicas, pode-se dizer que os objetos “eliminados” passaram pela peneira de malha  $r$ .



**Figura 11:** Imagem original de uma rocha

Determina-se a função distribuição de tamanhos de poros realizando-se uma seqüência de operações de abertura, sobre uma imagem binária, com um elemento estruturante de tamanho crescente. Para a determinação da distribuição de poros, em imagens binárias



**Figura 12:** Imagem de uma rocha após operação de abertura

2D, a unidade de medida consiste na área superficial dos poros. Desta forma, a distribuição acumulada de poros será dada por:

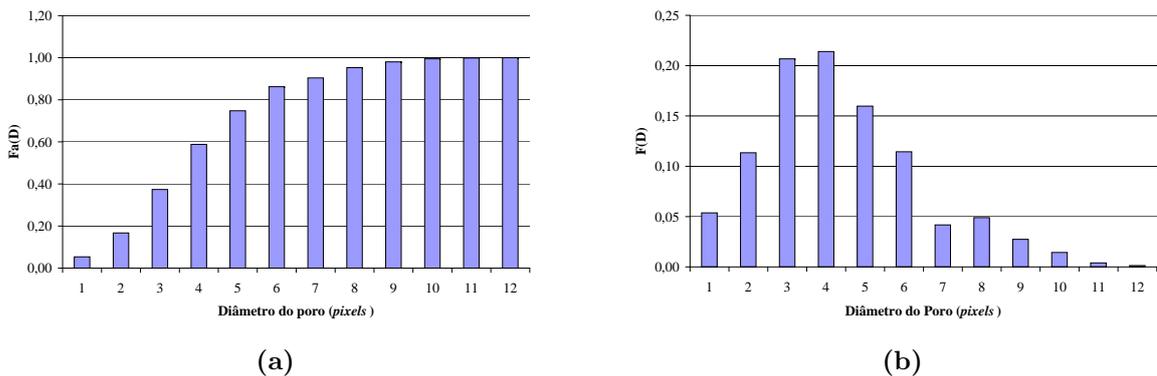
$$F_a(D) = \frac{\phi - \phi(D)}{\phi} \quad (2.17)$$

onde  $F_a(D)$  é a fração de tamanhos de poros menores ou iguais a  $D$ ,  $\phi$  é a porosidade da imagem de original e  $\phi(D)$  é a porosidade da imagem após a abertura com um elemento estruturante de diâmetro  $D$ .

Pode-se ainda calcular a distribuição de poros de forma diferencial da seguinte forma:

$$F(D) = \frac{dF_a(D)}{dD} \quad (2.18)$$

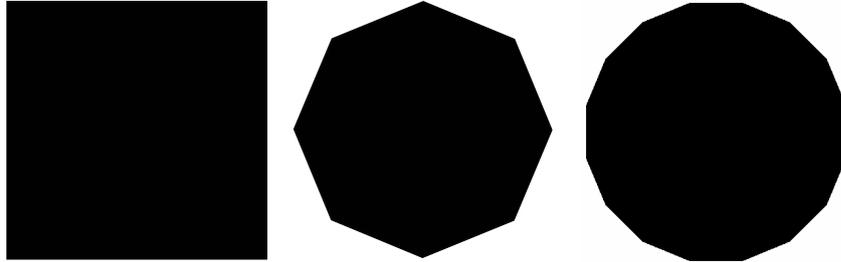
A Figura 13 mostra as curvas de distribuição de tamanho de poros acumulada e seu equivalente diferencial.



**Figura 13:** Comparação entre a distribuição de tamanho de poros (a) acumulada e (b) diferencial.

Neste trabalho, utilizou-se elementos estruturantes de métrica  $d_{3-4}$  para obter as distribuições de tamanho de poros. Estes, para a métrica  $d_{3-4}$ , como pode ser visto na

Figura 14, assume o formato de um octógono, diferente do elemento da métrica  $d_8$ , que forma um quadrado. Este foi escolhido, pois fornece bons resultados e tem um menor custo computacional se comparada com elementos estruturantes que mais se aproximam da forma de um círculo, por exemplo, o  $d_{5-7-11}$  que assume o formato de um hexadecágono (polígono com 16 lados), ou  $d_8$ , que assume o formato de um quadrado [FERNANDES, 2002].



**Figura 14:** Aspecto das bolas para as métricas  $d_8$ ,  $d_{3-4}$  e  $d_{5-7-11}$

#### 2.4.2.1 Distribuição de imagem de distância ao fundo (IDF)

Utilizando-se da transformada de distância para uma determinada métrica, conforme definido no Anexo A, pode-se observar a Figura 15, notando-se uma imagem binária e a imagem resultante da transformação  $d_{3-4}$ . Vê-se que a imagem da Figura 15b possui vários valores de distância ao fundo. Medindo-se a frequência de cada um desses valores, e normalizando pela maior frequência, pode-se gerar uma distribuição de IDF para uma determinada métrica. Este parâmetro significa que se duas imagens possuem distribuições semelhantes, elas possuem objetos de distribuições de tamanho de poros equivalentes. Este parâmetro difere da distribuição de tamanho de poros da seguinte forma:

Quando calcula-se uma distribuição de tamanho de poros através de morfologia matemática, considera-se raios de bolas maiores ou iguais a  $n$ , onde  $n$  é a menor distância da métrica utilizada, por causa das operações morfológicas de erosão e dilatação. Por exemplo, para a métrica  $d_{3-4}$ , o diâmetro 1 compreenderá o valor de IDF 3, enquanto que o diâmetro 2, os valores 3, 4, e 6.

Deste modo, a distribuição de tamanho de poros acaba por não diferenciar os *pixels* de valor 4 dos de valor 6, por exemplo. Este efeito aumenta à medida que o diâmetro da bola também aumenta.

0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	1	1	1	1	0	0
0	1	1	1	1	1	1	0
0	1	1	1	1	1	1	0
0	1	1	1	1	1	1	0
0	0	1	1	1	1	0	0
0	0	1	1	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0

(a)

0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	3	3	3	3	0	0
0	3	4	6	6	4	3	0
0	3	6	8	8	6	3	0
0	3	4	7	6	4	3	0
0	0	3	4	3	3	0	0
0	0	3	3	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0

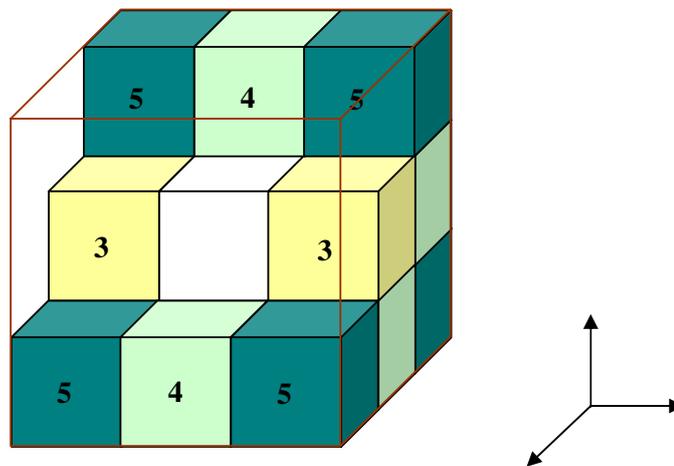
(b)

**Figura 15:** Uma imagem binária e sua codificação em IDF com métrica  $d_{3-4}$ :  
 (a) imagem original, (b) imagem resultante da transformação

Este parâmetro visa conservar o formato esférico ou rombóide dos grãos, sendo que, neste trabalho, sua medida deve ser efetuada nos grãos da imagem que se deseja reconstruir devido ao formato aproximadamente esférico dos grãos dos arenitos em questão.

### 2.4.3 Distribuição de tamanho de poros 3D

O procedimento para o cálculo da distribuição de tamanho de poros 3D é semelhante ao 2D, alterando-se apenas a métrica de  $d_{3-4}$  para  $d_{3-4-5}$ . Esta máscara é tridimensional, de acordo com a Figura 16. Os vizinhos de vértice são contados como distância 5, os de aresta como distância 4 e os de face como distância 3.



**Figura 16:** Distâncias da métrica  $d_{3-4-5}$  em uma seção da máscara cúbica.

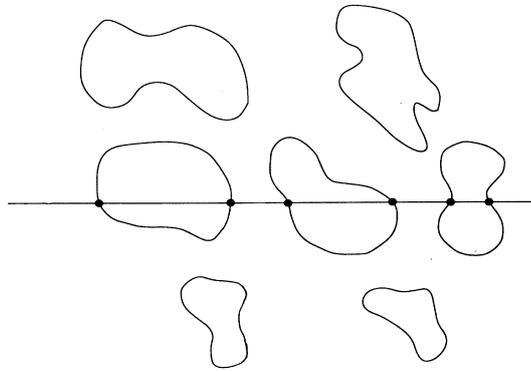
Esta máscara pode ser usada da mesma forma para calcular uma distribuição de IDF 3D.

#### 2.4.4 Distribuição de tamanho de cordas ou Distribuição de corda linear

Para uma determinada imagem binária 2D, há uma distribuição de cordas associada com cada fase  $p_i(z)$ , ( $i = 1, 2$ ). A quantidade  $p_i(z)dz$  é definida como a probabilidade que uma corda (um segmento de linha com fim nas interfaces da fase) escolhida aleatoriamente na fase  $i$  tenha comprimento no intervalo  $[z, z + dz]$  [TORQUATO; LU, 1993].

Calcula-se este parâmetro ao “atirar” aleatoriamente um número grande de cordas de tamanho “infinito” (maior que a dimensão da imagem) na imagem em que se deseja medir este parâmetro. A Figura 17 ilustra este procedimento. Para cada corda atirada, conta-se quantas seções de cordas se localizaram inteiramente na fase 1 com comprimento no intervalo  $[z, z + dz]$ . Se  $N$  é o número total de seções de cordas da fase 1, então:

$$p_1(z) = \frac{N_1(z)}{N} \quad (2.19)$$



**Figura 17:** Ilustração do procedimento para calcular a distribuição de tamanho de cordas

A quantidade  $p_2(z)$  é definida de maneira análoga, e assim sucessivamente para os demais tamanhos de corda.

Este parâmetro é um caracterizador para a conectividade da fase em questão.

## 2.4.5 Fração de Células Percolantes

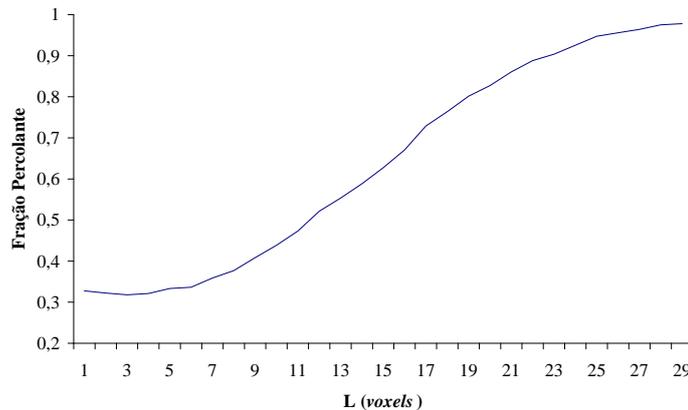
Uma outra medida para caracterizar a conectividade do meio poroso foi proposta por HILFER [2002]. O transporte e a propagação de fluidos em meios porosos é controlada pela conectividade do espaço poroso. As probabilidades de percolação local caracterizam a conectividade destes. Para quantificar essas probabilidades de percolação local, HILFER [2002] propôs um parâmetro chamado Fração percolante, que é definido de acordo com a Equação 2.20.

$$p_3(L_c) = \frac{1}{m} \sum_r \Lambda_3(r, L_c) \quad (2.20)$$

onde  $m$  é o número de medidas efetuadas e  $\Lambda_3(r, L_c)$  é um indicador de percolação definido por:

$$\Lambda_3(r, L_c) = \begin{cases} 1 & \text{se } M(r, L_c) \text{ percola nas 3 direções} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.21)$$

Este parâmetro é medido de forma que um cubo  $M(r, L_c)$  de aresta  $L_c$ , centrado no *voxel*  $r$  é utilizado para calcular a conectividade contínua de uma face a outra da amostra (percolação da fase poro). Caso a fase poro presente no interior do cubo percole nas três direções, o operador  $\Lambda_3(r, L_c)$  tem valor 1. Caso não, valor 0. Ao se fazer a média do operador para todos os cubos centrados em todos os *voxels*  $r$  e todas as arestas  $L_c$  possíveis (1 a  $N$ ) da imagem 3D, chega-se ao gráfico deste parâmetro, que pode ser visto na Figura 18.



**Figura 18:** Gráfico do parâmetro fração de células percolantes

Este parâmetro indica a conectividade da microestrutura que está sendo analisada ao longo de várias sub-seções da mesma, sendo que só pode ser efetuado em imagens 3D.

## 3 *Métodos de Reconstrução*

A partir de informações representativas medidas em imagens bidimensionais, pode-se reconstruir imagens da microestrutura original em três dimensões. Dados o alto custo de equipamentos de microtomografia e sua baixa disponibilidade, o ramo da reconstrução possui grande interesse na comunidade científica. O objetivo dos métodos de reconstrução é a geração de estruturas 3D que preservem algumas das características das imagens bidimensionais que servem como dados de entrada. Estas imagens reconstruídas são utilizadas na simulação de processos físicos para a estimativa de propriedades do meio poroso. Este capítulo apresenta os métodos de reconstrução mais utilizados atualmente e que foram utilizados como comparação neste trabalho, Gaussiana Truncada e Esferas Sobrepostas.

### 3.1 **Gaussiana Truncada (GT)**

Os modelos de reconstrução baseados em campos gaussianos são amplamente utilizados [QUIBLIER, 1984; ADLER; JACQUIN; QUIBLIER, 1990; LIANG, 1997; LIANG et al., 2000; LIANG; IOANNIDIS; CHATZIS, 2000; BEKRI et al., 2000, 2003]. Neste trabalho é utilizado um modelo de Gaussiana truncada (Liang et al., 1998) para a reconstrução de imagens 3D. A idéia básica do método reside na consideração de que uma imagem binária tem sua fase poro representada pela sua função de fase. Uma hipótese fundamental, utilizada nos trabalhos de [QUIBLIER, 1984; ADLER; JACQUIN; QUIBLIER, 1990; FERNANDES, 1994], supõe que a estrutura porosa possa ser descrita pelos dois primeiros momentos de sua função de fase.

Considerando-se os dois primeiros momentos (porosidade e função correlação), uma estrutura porosa pode ser gerada a partir de um Campo Gaussiano normal (média igual a 0 e variância igual a 1) não correlacionado  $X(\vec{x})$ . Um operador linear transforma o campo inicial em um campo  $Y(\vec{x})$ , que será ainda Gaussiano normal, porém correlacionado. Este campo  $Y(\vec{x})$ , porém, assume valores reais e sua correlação ainda não é a desejada. Utiliza-se, então, um filtro não-linear que transforma o campo  $Y(\vec{x})$  no campo binário  $Z(\vec{x})$  com

as características de porosidade e correlação desejadas.

Define-se  $Y(\vec{x})$  como um conjunto de operadores lineares  $a(\vec{u})$  tais que:

$$Y(\vec{x}) = \sum_{u \in [0, N]^3} a(\vec{u}) \cdot X(\vec{x}) \quad (3.1)$$

O método, no domínio espacial, é computacionalmente lento e, além disso, implica na resolução de um sistema de equações não-lineares que se torna difícil para imagens com grande alcance de correlação. Desta forma, em [LIANG, 1997] e [LIANG et al., 2000], é proposto um método alternativo eficiente trabalhando no domínio da frequência. Neste modelo três parâmetros devem ser ajustados:

- O Alcance de correlação  $\lambda$
- O fator de amplificação  $\eta$
- O Tamanho da imagem  $N \times N \times N$

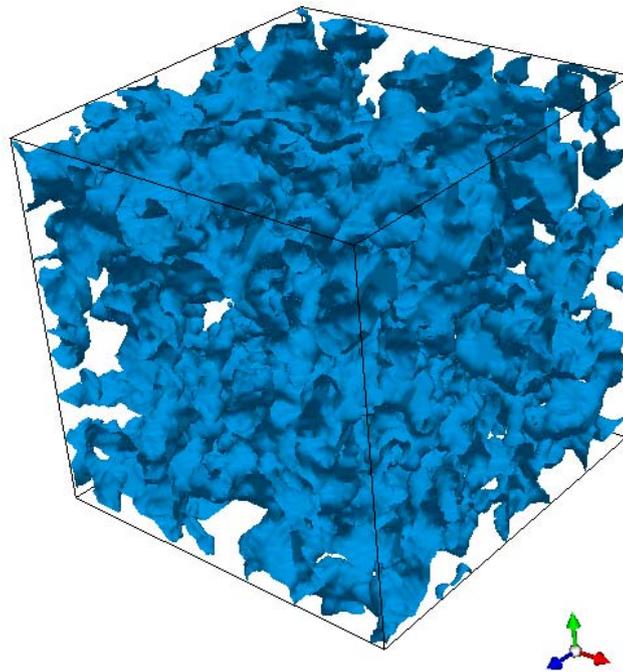
onde o fator de amplificação é a discretização adotada na descrição da função de correlação. Este fator é utilizado para melhorar a conservação da função correlação. Por exemplo, se a função não foi conservada com fator 1, aumenta-se para dois. O resultado, porém, é uma redução da resolução da reconstrução. Uma imagem que tenha resolução de  $1 \mu m/pixel$ , ao ser reconstruída com fator de amplificação 2, terá resolução de  $2 \mu m/pixel$ , e assim sucessivamente. Quando se efetua uma reconstrução com o objetivo de preservar a função correlação, esta deve ter aresta mínima de  $2\eta$  [LIANG, 1997].

O método segue uma seqüência de oito passos para gerar um modelo 3D:

1. Medição da função correlação normalizada  $R_z(u)$  e da porosidade  $\phi$  através de análise de imagens.
2. Cálculo de  $R_y(u)$  através de  $R_z(u)$  [ADLER; JACQUIN; QUIBLIER, 1990]
3. Calcula-se a transformada de Fourier de  $R_y(i, j, k)$  para obter o espectro de potência.
4. Calcula-se a raiz quadrada do espectro de potência para obter o espectro de Fourier.
5. Gera-se a fase através de uma função aleatória uniforme entre 0 e  $2\pi$ .
6. A transformada de Fourier de uma função real é uma função hermitiana. [LIANG et al., 2000] utilizaram o método de [PARDO-IGÚZQUIZA; CHICA-OLMO, 1993] para gerar a função  $Y(\vec{x})$  em 3D.

7. Calcula-se a transformada de Fourier inversa  $\mathcal{F}^{-1}(Y(\vec{x}))$ , obtendo o campo gaussiano  $P(y)$  desejado.
8. Utiliza-se o mesmo filtro não linear de [ADLER; JACQUIN; QUIBLIER, 1990] e obtém-se  $Z(\vec{x})$  através do limiar:  $z = 1$  se  $P(y) \leq \phi$ , onde 1 é a fase poro e 0 a fase sólido.

Na Figura 19, é apresentado um exemplo de uma imagem reconstruída a partir das informações de imagens 2D de um arenito Botucatu.



**Figura 19:** Microestrutura de um arenito Botucatu reconstruída em 3D com o método da Gaussiana Truncada de [LIANG et al., 2000] (fase poro em azul)

Após a reconstrução do meio 3D, é comum utilizar um filtro de conexão, já que o modelo de reconstrução utilizado preserva o valor da porosidade, mas tipicamente alguma parte do volume poroso fica isolada. Aplicando-se um filtro de conexão, a imagem do meio poroso resultante apresenta apenas a porosidade conectada, ou seja, a porosidade efetiva. Esse valor de porosidade isolada é mais significativo em amostras de baixa porosidade. O filtro de conexão, utilizado neste trabalho, foi o de vizinhança-26. Neste filtro, é verificada a ligação entre os *voxels* da fase poro nas direções correspondentes às suas faces, arestas e vértices.

Uma limitação do método, consta na consideração de QUIBLIER [1984] e ADLER; JACQUIN; QUIBLIER [1990] de que a estrutura porosa possa ser completamente descrita

pelos dois primeiros momentos de sua função de fase. Quando este fato não se verifica, o método GT não é adequado para reconstruir a microestrutura das rochas em questão. Esta condição pode acontecer, por exemplo, em rochas de baixa porosidade e alta permeabilidade. OKABE; BLUNT [2004] apresentam casos de rochas que não foram adequadamente reconstruídas pelo método GT.

## 3.2 Esferas Sobrepostas (ES)

No caso do método das esferas sobrepostas procura-se obter estruturas 3D que, quando seccionadas, suas seções 2D tenham distribuição de tamanho de grãos que sejam semelhantes à distribuição de tamanho de grãos da imagem original (2D). Sendo assim, considera-se como dado de entrada a distribuição de tamanho de grãos das imagens originais. Também é considerado como dado de entrada, a porosidade da imagem, denotada por  $\phi$ . Para representar a distribuição de tamanho de grãos utiliza-se a função  $F_A(D) \in [0, \phi]$ , que indica qual a proporção da área da imagem que é devida a grãos de diâmetro  $D$ .

O primeiro passo no processo de reconstrução é a determinação do número de esferas de cada diâmetro que deverão ser geradas. Para isso, apresenta-se a função  $F_V(D) \in [0, \phi]$  que indica a proporção em volume da imagem reconstruída que corresponde a esferas de diâmetro  $D$ . Pode-se escrever essa distribuição como:

$$F_V(D) = \frac{n_e \pi D^3}{3N^3} \quad (3.2)$$

onde  $n_e = n_e(D)$  indica o número de esferas de diâmetro  $D$  que devem ser geradas,  $N$  é a dimensão linear da imagem e  $N^3$  é o volume  $V$  da imagem a ser reconstruída.

Impondo que a distribuição obtida em 2D possa ser reproduzida em 3D, iguala-se a distribuição  $F_V(D)$  à distribuição  $F_A(D)$ . Desta forma,  $n_e(D)$  é obtido:

$$n_e(D) = \frac{6N^3 F_A(D)}{\pi D^3} \quad (3.3)$$

Obtido o número de esferas de cada diâmetro, inicia-se um processo iterativo onde são geradas todas as esferas para cada diâmetro. Antes da descrição deste método, é necessário definir os parâmetros fator de borda ( $f_b$ ) e fator de sobreposição ( $f_s$ ).

O fator de borda é um parâmetro que visa corrigir o erro gerado pela discretização das esferas. No meio contínuo, considerar ou não a fronteira de um sólido como parte deste não influencia no cálculo do volume do mesmo. Entretanto, no espaço discreto, isto se torna determinante. Mais especificamente, considerar os *voxels* da fronteira como fazendo

parte do sólido leva a um valor de volume maior do que não considerar estes *voxels* e em alguns casos estes valores são consideravelmente diferentes. Para contornar este problema durante o processo de geração das esferas, foi introduzido o fator de borda que permite que se escolha entre considerar os *voxels* do contorno como fazendo parte do sólido ( $f_b = 1$ ), e não fazendo parte do sólido ( $f_b = 0$ ), ou ainda, para um valor intermediário de  $f_b$ , uma fração igual ao valor do  $f_b$  escolhido é considerada como parte do sólido. Isto é feito durante a geração das esferas sorteando-se uma variável aleatória entre zero e um para cada *voxel* pertencente a fronteira e, caso esta variável seja menor do que  $f_b$  considera-se este *voxel* como parte da esfera, caso contrário, este *voxel* é considerado como não fazendo parte da esfera.

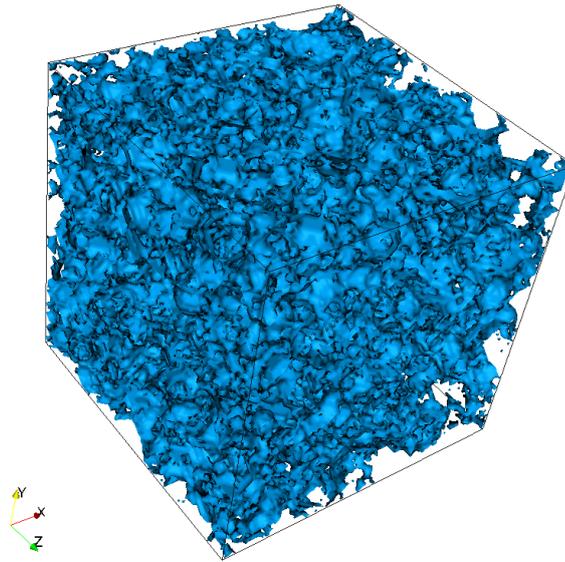
O outro fator introduzido foi o fator de sobreposição ( $f_s \in [1, N]$ ). Este fator permite que se controle a interseção ou sobreposição das esferas geradas, fazendo com que seja possível uma atuação sobre a conectividade da imagem gerada, como isso é feito será indicado logo a seguir.

Tem início então o *looping* no qual serão geradas as esferas. Cada passo do *looping* corresponde a um diâmetro de esfera, começando com a geração das esferas de maior diâmetro indo na direção das de menor diâmetro. A primeira esfera é gerada em uma posição aleatória, da mesma forma que as outras esferas de diâmetro  $D \geq f_s$ . Para as demais esferas, em que  $D \leq f_s$ , impõe-se que, pelo menos, parte de cada esfera se sobreponha a qualquer das outras esferas geradas. Deste modo, um fator de sobreposição alto implica na geração de esferas conectadas (sobrepondo-se em parte) umas com as outras, por outro lado um fator de sobreposição baixo implica na geração de uma imagem onde a disposição dos objetos que compõe a imagem é aleatória, podendo estes objetos estar ou não conectados.

Observa-se que uma esfera pode ter parte de seu volume compartilhado (sobreposto) com outra esfera. Este fato não foi levado em consideração no cálculo inicial de  $n_e(D)$ , sendo, portanto, necessária uma correção do volume de sólidos gerados, gerando mais esferas, a fim de conservar a porosidade da imagem original. Na exposição do procedimento adotado para esta correção será utilizada a definição de volume sobreposto associado a um diâmetro de esfera  $D$ , denotado por  $V_s(D)$ , que é a parte do volume das esferas de diâmetro  $D$  que, quando estas são geradas, intercepta outras esferas anteriormente geradas.

Ao fim de um passo no *looping* de geração das esferas, ou seja, tendo sido geradas  $n_e(D)$  esferas de diâmetro  $D$ , se ocorrer que  $V_s(D) > 0$  (houve sobreposição), então deve-se corrigir o volume gerando-se mais esferas. Denotando por  $V_c(D)$  o volume total das esferas que serão geradas para corrigir o efeito da sobreposição, e  $V_{resid}(D) = V_c(D) - V_s(D)$

a diferença entre o volume sobreposto e o volume gerado para corrigir a sobreposição, são geradas tantas esferas de diâmetro  $D$ , quanto for necessário para que a condição  $V_{resid}(D) \leq 0$  seja satisfeita. Se a condição obtida for  $V_{resid}(D) = 0$  retorna-se ao *looping* para a geração das esferas de diâmetro  $D-1$ . Se, por outro lado, ocorrer que  $V_{resid}(D) \leq 0$ , significando que foi gerado um volume maior do que o necessário para a correção, então armazena-se a diferença ou volume residual, retorna-se ao *looping* para a geração das esferas de diâmetro  $D-1$  e ao término da geração destas esferas, soma-se esta diferença ao valor de  $V_{resid}(D-1)$ . Ou seja, faz-se  $V_{resid}(D-1) = V_c(D-1) - V_s(D-1) + V_{resid}(D)$ , sendo  $V_{resid}(D-1)$  o volume residual após a geração das esferas de diâmetro  $D-1$ . As esferas de diâmetro menor do que  $D-1$  são geradas de forma análoga. Neste ponto é importante notar que a medida que os diâmetros das esferas são menores os volumes residuais  $V_{resid}(D)$  (que representam erro em relação à porosidade desejada) também o são. Isso faz com que, no fim do *looping* de geração das esferas, os erros remanescentes sejam bastante pequenos. Um exemplo de imagem tridimensional reconstruída com o método das esferas sobrepostas é apresentado na Figura 20, com fase poro em azul.



**Figura 20:** Microestrutura de um arenito Botucatu reconstruída em 3D com o método das Esferas Sobrepostas [SANTOS et al., 2002] (fase poro em azul)

## 4 *Métodos de Reconstrução utilizando SA*

Este capítulo descreve o método de otimização *Simulated Annealing*, seu modelo matemático e os métodos de reconstrução propostos nesta tese. Esses métodos utilizam diferentes movimentações, o PSA de *pixels* ou *voxels*, e o OSA de círculos ou esferas. Ambos os métodos visam suprir deficiências dos métodos atuais em preservar a conectividade em longa distância para meios com forte organização espacial, o que pode acontecer, por exemplo, em rochas com baixa porosidade e alta permeabilidade intrínseca.

### 4.1 *Simulated Annealing (SA)*

#### 4.1.1 Analogia física

O algoritmo do SA deriva da observação de que a solução de problemas combinatórios de larga escala é análoga ao recozimento de sólidos no campo da física da matéria condensada [METROPOLIS et al., 1953; KIRKPATRICK; GELATT; VECCHI, 1983]. O objetivo deste processo é reduzir a temperatura de um sistema, levando-o ao estado de mínima energia. Tal energia pode ser vista como uma função custo a ser otimizada. O processo se inicia com um material fundido que gradualmente tem sua temperatura reduzida, análogo a um processo que tem sua energia diminuída. Se sua temperatura é reduzida muito rapidamente, o processo “congela” em um estado sub-ótimo. Uma redução gradual da temperatura leva o sistema a estados melhores em termos de decréscimo de energia.

A temperatura inicial do processo de recozimento é o ponto em que todas as partículas do sólido estão arranjadas de forma aleatória. À medida que o resfriamento se inicia, o sólido deve atingir o que é conhecido como equilíbrio térmico antes do resfriamento continuar [METROPOLIS et al., 1953]. Se a temperatura é reduzida antes disto, aparecerão defeitos na estrutura do material e o cristal resultante não corresponderá a um estado mínimo de energia (o que é conhecido como congelamento em um mínimo local). Uma definição formal do equilíbrio térmico é dada a seguir:

**Definição 4.1.1.** O Equilíbrio Térmico é alcançado durante o processo de recozimento físico quando o sólido tem a probabilidade de estar em um estado de energia  $E$  de acordo com a equação:

$$P_r \{ \mathbf{E} = E \} = \frac{1}{Z(T)} \cdot e^{\frac{-E}{k_B T}} \quad (4.1)$$

onde  $Z(T)$  é um fator de normalização dependente da temperatura chamado função de partição e  $k_B$  é a constante de Boltzmann [METROPOLIS et al., 1953]. A distribuição de probabilidades exposta na Equação 4.1 também é chamada distribuição de Boltzmann. Os autores observam que apenas estados de mínima energia têm probabilidade não zero quando a temperatura tende a zero.

A simulação de Metropolis Monte Carlo [METROPOLIS et al., 1953] pode ser utilizada para simular o processo de recozimento em uma temperatura fixa  $T$ . O método de Metropolis gera aleatoriamente uma seqüência de estados para o sólido em uma dada temperatura. O estado de um sólido é caracterizado pelo posicionamento de suas partículas. Um novo estado ou estado de perturbação é gerado ao mover aleatoriamente uma partícula por uma pequena distância. A aceitação ou rejeição deste novo estado é determinado pelo critério de aceitação de Metropolis, como descrito a seguir:

**Definição 4.1.2.** Define-se o critério de Metrópolis de forma que se o estado de perturbação  $j$  tem energia inferior ao estado atual  $i$ , o processo de Metropolis segue a partir do estado de perturbação. Se a energia do estado de perturbação é maior que a do estado atual, a probabilidade da seqüência mudar para o estado de perturbação é dada por

$$P_r \{ X_k = j | X_{k-1} = i \} = e^{\frac{-\Delta E_{ij}}{k_B T}} \quad (4.2)$$

onde  $\Delta E_{ij}$  é a diferença de energia entre o estado  $j$  e o estado  $i$ . Esta regra é comumente conhecida como critério de Metropolis.

Após um grande número de estados gerados e sujeitos ao critério de Metropolis, a distribuição dos estados se aproximará da distribuição de Boltzmann [METROPOLIS et al., 1953].

#### 4.1.2 Algoritmo de *Simulated Annealing*

[KIRKPATRICK; GELATT; VECCHI, 1983; CERNY, 1985] propuseram de forma independente que se pode simular o processo de recozimento ao generalizar a simulação de

Metropolis para gerar uma seqüência de soluções com propósito de resolver problemas de otimização combinatorial. As soluções para estes problemas são análogas ao do estado sólido durante o processo de recozimento com o correspondente custo da solução como sendo análogo à energia do estado sólido. Como a temperatura não tem um equivalente conceitual na maioria dos sistemas combinatoriais a serem otimizados, é modelada como um parâmetro de controle para o uso do algoritmo do SA. Este algoritmo pode ser descrito como uma seqüência de simulações de Metropolis executadas em valores de temperatura decrescentes.

Nesta forma tradicional, o SA se inicia com uma temperatura inicial alta  $T_0$  com uma solução gerada aleatoriamente ao problema de otimização a ser considerado. Isto corresponde a um estado de alta energia análogo ao estado de quase-fusão sólido, onde as partículas estão espalhadas. A temperatura inicial do SA é geralmente determinada durante alguma fase de inicialização, tal que quase todas as transições de solução serão aceitas. O problema se define em gerar um conjunto de estados soluções vizinhos a  $i$  e escolher aleatoriamente um estado  $j$  entre estes. O processo é aceito de acordo com o critério de Metropolis.

Este processo continua até que o equilíbrio seja encontrado para a temperatura atual. A temperatura então é diminuída de acordo com uma regra decremental pré-definida. Espera-se que o sistema atinja o equilíbrio novamente e o processo se repete. Isto continua até que a temperatura atinja um valor pequeno onde nenhuma nova solução seja aceita. Nesse ponto o sistema é considerado congelado e o algoritmo encerra.

Tipicamente o algoritmo retorna soluções do tipo “Melhor até o momento” (BSF - *Best So Far*), como a solução final do algoritmo. Esta solução é o estado de menor energia por onde o sistema tenha passado. Pode-se retornar outro tipo de solução, a “onde você está” (WYA - *Where You Are*), mas isto é incomum, dado que estes dois valores só são seguramente iguais para tempo infinito. Apresenta-se um pseudo-código do algoritmo do SA a seguir:

```

Simulated_Annealing()
{
  // Faça a solução inicial  $i = i_o$  e a temperatura inicial  $T = T_o$ 
  // Faça a solução BSF  $i_{BSF} = i_o$ .
  inicializar( $i, t$ );
   $i_{BSF} = i_o$ .
  faça {
    faça {
      // Crie uma nova solução J por uma
      // pequena perturbação na solução I.
      // Então calcule a nova energia  $\Delta E_{IJ}$ 
       $j = \text{perturb}(i)$ ;
       $\Delta E_{ij} = E(j) - E(i)$ 
      // Use o critério de Metropolis para
      // determinar a aceitação do estado J
      se( (  $\Delta E_{ij} \leq 0$  ) ou ( aleatório(0,1) ) ) <  $e^{-\Delta E_{ij}/t}$  ) {
         $i = j$ ;
        // se a energia do estado I for menor que a do BSF
        // então  $BSF = i_{BSF}$ 
        se (  $E(i) < E(i_{BSF})$  )  $i_{BSF} = i$ 
      }
    } enquanto (não atingir o equilíbrio)
    decmente( $t$ )
  } enquanto(o critério de parada não for atingido )
  retorne( $i_{BSF}$ );
}

```

**Figura 21:** Pseudo-código do algoritmo do SA

### 4.1.3 Modelo matemático

O algoritmo do SA pode ser modelado por Cadeias de Markov [GEMAN; GEMAN, 1984; HAJEK, 1985; LUNDY; MEES, 1986; OTTEN; GINNEKEN, 1989]. A definição formal de uma cadeia de Markov é exposta na Definição 4.1.3.

**Definição 4.1.3.** Uma cadeia de Markov é uma seqüência de eventos probabilísticos tal que o resultado do evento atual depende única e exclusivamente do resultado do evento anterior [PAPOULIS, 1991]. Cadeias de Markov são caracterizadas pelo seguinte conjunto

de probabilidades:

$$P_r \{X_k = j | X_{k-1} = i\} = P_{ij}(k) \quad (4.3)$$

onde  $P_{ij}(k)$  é a probabilidade que o resultado do  $k$ -ésimo evento seja o evento  $j$ , dado que o resultado do  $(k - 1)$ -ésimo evento foi  $i$ .

Estendendo esses conceitos para o SA, pode-se dizer que  $P_{ij}(t_k)$  é a probabilidade que o resultado do  $k$ -ésimo evento de Metropolis seja uma transição da solução  $i$  para a solução  $j$  em uma temperatura  $t_k$ . Este termo é comumente conhecido como probabilidade de transição. As probabilidades de transição sobre um conjunto de soluções  $S$  em uma temperatura  $t_k$  formam uma matriz  $|S| \times |S|$ ,  $P(t_k)$  chamada de Matriz de Transição. Há dois fatores para determinar a probabilidade de transição  $P_{ij}(t_k)$ :

- A probabilidade  $G_{ij}(t_k)$  de que uma solução  $j$  seja gerada a partir de uma solução  $i$  em uma temperatura  $t_k$  (probabilidade de geração)
- A probabilidade  $A_{ij}(t_k)$  de que uma solução  $j$  seja aceita uma vez que ela foi gerada (probabilidade de aceitação)

As matrizes que definem as probabilidades de geração e aceitação são chamadas matriz de geração  $G(t_k)$  e matriz de aceitação  $A(t_k)$ , respectivamente. Deste modo, a probabilidade de transição  $P_{ij}(t_k)$  para cada solução  $i \in S$  em cada temperatura  $t_k$  pode ser definida como:

$$P_{ij}(t_k) = \begin{cases} G_{ij}(t_k) \cdot A_{ij}(t_k) & \text{para todo } j \in R_i \\ 0 & \text{nos demais casos} \end{cases} \quad (4.4)$$

onde  $R_i$  é o conjunto de soluções vizinhas ao estado  $i$ . Explicitamente,

$$\sum_{j \in R_i} G_{ij}(t_k) = 1 \quad (4.5)$$

As probabilidades de aceitação são definidas pelo critério de Metropolis:

$$A_{ij}(t_k) = \min [1, e^{-\Delta E_{ij}/t_k}] \quad (4.6)$$

Também há a possibilidade de que o sistema permaneça na solução  $i$ , onde ele está. Deste modo é comum explicitar uma probabilidade de que o modelo não permita uma mudança na solução:

$$P_{ii}(t_k) = 1 - \sum_{j \in R_i} P_{ij}(t_k) \quad (4.7)$$

Substituindo as Eqs. 4.5-4.7, a Equação 4.4 pode ser reescrita como:

$$P_{ij}(t_k) = \begin{cases} G(t_k)A(t_k) & \forall i \neq j \\ 1 - \sum_{l \in R_i} G_{il}(t_k)A_{il}(t_k), & i = j \end{cases} \quad (4.8)$$

Como resultado dessa definição, pode-se escrever:

$$\forall i : \sum_{j \in R_i} P_{ij}(t_k) = 1 \quad (4.9)$$

Se as probabilidades condicionais não dependem do valor de  $k$ , a cadeia de Markov é homogênea; caso contrário, ela é não homogênea [BAIN; ENGLEHARDT, 1992]. Foram propostos na literatura algoritmos baseados em ambos os modelos. O algoritmo homogêneo pode ser descrito como uma seqüência de cadeias de Markov homogêneas, cada uma executada em um valor de temperatura fixo. A temperatura decresce entre cadeias subsequentes depois que a cadeia atual atinge o equilíbrio. O algoritmo não homogêneo pode ser descrito como uma única cadeia de Markov não homogênea. Um número finito de eventos de Metropolis é executado a cada possibilidade de temperatura, sendo que atingir o equilíbrio para uma dada temperatura não é mais um critério de convergência. VARANELLI (1996 cita que os algoritmos apresentados como mais promissores são os homogêneos, dado sua analogia física mais direta do que os não homogêneos.

Nas duas próximas seções, observa-se como os dois algoritmos são utilizados por diferentes autores para verificar que ambos convergem assintoticamente para um conjunto de soluções ótimas  $S_*$  com probabilidade igual a 1. Desses dois modelos também se tirará a base para as agendas de resfriamento.

#### 4.1.3.1 Algoritmo Homogêneo

Como exposto acima, os artigos mais citados utilizam os algoritmos para o SA com o modelo homogêneo de cadeias de Markov. A análise teórica dos modelos homogêneos de cadeias de Markov é apresentada por [AARTS; LAARHOVEN, 1985], que mostra que o algoritmo converge assintoticamente para o conjunto de soluções ótimas com probabilidade igual a 1. O Apêndice B expõe a demonstração desta propriedade.

Infelizmente, a convergência assintótica apenas pode ser aproximada em implementações do algoritmo SA homogêneo. Isto decorre do fato de que qualquer implementação pode

gerar apenas um número finito de transições para um número finito de temperaturas. Por causa disso, o verdadeiro equilíbrio pode ser apenas aproximado pelas cadeias de Markov. De fato, nenhuma implementação pode garantir com probabilidade 1 a chegada em um mínimo global e toda implementação chega a um resultado aproximado.

Desta forma, há quatro parâmetros para ajustar em qualquer implementação do SA homogêneo como discutido na seção 4.1.1. Esses quatro parâmetros definem a implementação da agenda de resfriamento do SA:

**Definição 4.1.4.** A agenda de resfriamento define a exata maneira na qual a temperatura do sistema é reduzida no curso do algoritmo homogêneo do SA. Há quatro parâmetros a serem especificados para qualquer agenda de resfriamento:

- a temperatura inicial  $t_0$ ;
- uma regra decremental para atualizar a temperatura  $t_k$ ;
- uma regra para determinar o comprimento  $L_M$  da cadeia homogênea de Markov em cada temperatura  $t_k$ ;
- um critério de parada, especificando as condições para término da execução do algoritmo.

A agenda de resfriamento é uma tentativa de aproximar o algoritmo teórico em um tempo computacional finito. É a escolha da agenda de resfriamento que diferencia uma implementação do algoritmo de SA de outra. A seção 4.1.5 expõe algumas considerações gerais para cada parâmetro da agenda de resfriamento, bem como para a agenda de resfriamento utilizada neste trabalho.

#### 4.1.3.2 Algoritmo Não-Homogêneo

O algoritmo não-homogêneo diverge da analogia física no sentido que a condição de equilíbrio antes de que a temperatura seja reduzida não é adotada. Adicionalmente, o algoritmo não-homogêneo provou ter custo computacional proibitivo [VARANELLI, 1996]. Por causa dessas razões, este algoritmo não é considerado nesta proposta de tese.

Como resultado das observações acima, apenas as condições para a convergência do algoritmo SA não-homogêneo são expostas. GEMAN; GEMAN [1984], HAJEK [1985] e ROMEO; SANGIOVANNI-VINCENTELLI [1991] provaram de forma independente que esse algoritmo converge assintoticamente para o conjunto de soluções ótimas com probabilidade 1 sob as seguintes condições:

- Convergência da temperatura  $t_k$  mais lenta do que  $O(\log(k)^{-1})$ ;
- Os valores de temperatura se aproximam de zero no limite, ou

$$\lim_{k \rightarrow \infty} t_k = 0 \quad (4.10)$$

- As matrizes  $A(t_k)$  e  $G(t_k)$  definem uma cadeia de Markov não homogênea e fortemente ergódica (para diferentes gerações, as cadeias geradas terão propriedades semelhantes).

O algoritmo não-homogêneo do SA é raramente utilizado em aplicações práticas. Isto ocorre devido ao fato do algoritmo homogêneo ter se mostrado muito mais veloz do que o não-homogêneo. Deste modo, apenas o algoritmo homogêneo foi utilizado nesta proposta de tese.

#### 4.1.4 Temperatura Inicial

Como descrito na definição 4.1.4, há quatro parâmetros a especificar na definição da agenda de resfriamento para cada implementação do algoritmo homogêneo do SA. O maior interesse na concepção de uma agenda de resfriamento é chegar ao equilíbrio térmico para as cadeias de Markov geradas a cada temperatura  $t_k$ . Como o verdadeiro equilíbrio não pode ser alcançado nas implementações atuais do algoritmo homogêneo do SA, uma forma de fazer o sistema se aproximar do equilíbrio (estado chamado de quasi-equilíbrio), é necessária.

O quasi-equilíbrio para uma dada cadeia de Markov em um algoritmo homogêneo do SA é relacionado à sua distribuição de probabilidades estacionária, como definido pelas equações B.9 e B.10. Após um número infinito de transições, a distribuição estacionária é a distribuição temporal ao longo do espaço de soluções. No equilíbrio verdadeiro, esta seria a distribuição de Boltzmann. No quasi-equilíbrio, a distribuição estacionária deveria ser tão próxima à distribuição de Boltzmann quanto possível. Esta medida de proximidade é essencial para a escolha de uma agenda de resfriamento aceitável.

A primeira escolha a ser feita é a temperatura inicial  $t_0$ . À medida que a temperatura se aproxima de infinito, a distribuição estacionária se aproxima da distribuição uniforme sobre o espaço de soluções  $S$  [AARTS; LAARHOVEN, 1985; LUNDY; MEES, 1986; OTTEN; GINNEKEN, 1989; ROMEO; SANGIOVANNI-VINCENTELLI, 1991]. Como o algoritmo de SA inicia em uma temperatura alta, o quasi-equilíbrio pode ser rapidamente atingido se quase todas as transições iniciais forem aceitas. Isto se aproximaria rapidamente da distribuição uniforme sobre o conjunto de soluções. Logo, um bom ponto de partida para a tempe-

ratura inicial é aquele que quase todas as transições sejam aceitas. OTTEN; GINNEKEN [1989] e ABRAMSON; DANG; KRISNAMOORTHY [1999] trabalharam na obtenção de uma temperatura inicial. Ambos os autores consideram gerar um grande número de soluções aceitas, medindo a média e desvio padrão dos custos a serem otimizados. Estes valores servem como estimativa do custo inicial  $E_\infty$  sobre o espaço de solução inicial  $\sigma_\infty$ .

Como um exemplo, ABRAMSON; DANG; KRISNAMOORTHY [1999] indicam que a temperatura inicial para o problema de determinação de calendário letivo, seja tal que:

$$t_0 = \frac{\sigma_\infty}{T} \quad (4.11)$$

onde  $T$  é uma temperatura arbitrária e alta. A obtenção desta temperatura  $T$  é feita por [AARTS; LAARHOVEN, 1985]. Este método foi adotado nesta proposta de tese.

### 4.1.5 Agendas de Resfriamento

O próximo passo na construção da agenda de resfriamento é a escolha da regra para reduzir a temperatura, ou regra de decremento. Quando se considera a regra de decremento, deve-se notar que decrementos grandes farão que o sistema necessite de mais tentativas de Metropolis para restabelecer o quasi-equilíbrio na próxima cadeia de Markov [AARTS; LAARHOVEN, 1985; LUNDY; MEES, 1986; HAJEK, 1988; OTTEN; GINNEKEN, 1989; ROMEO; SANGIOVANNI-VINCENTELLI, 1991]. Como resultado, há uma negociação entre cadeias mais longas e decrementos mais curtos. Esses autores recomendam decrementos mais curtos para evitar congelamentos e cadeias muito longas.

Há essencialmente dois tipos de regras de decremento: fixas ou adaptativas. Regras de decremento fixas são independentes da evolução do algoritmo em termos de estatísticas agregadas, como média e desvio padrão do custo, geralmente na forma:

$$t_k = t_0 \cdot \alpha^k \quad (4.12)$$

onde  $\alpha$  é uma constante tal que  $0 < \alpha < 1$ , comumente na faixa de 0,90 a 0,99. Como o tamanho do decremento da temperatura é mantido proporcionalmente constante ao longo do curso do algoritmo, regras de decremento fixo são freqüentemente chamadas de regras de decremento constante. Essas agendas são chamadas também de clássicas. Segue-se exemplos de regras clássicas comumente citadas.

#### Linear

A agenda de resfriamento linear se baseia na subtração fixa de um fator  $\beta$ , normal-

mente proporcional à temperatura inicial.

$$t_k = t_{k-1} - \beta \quad (4.13)$$

$$\beta = t_0 \cdot 0,01 \quad (4.14)$$

### Geométrica

Esta agenda é formada pela multiplicação de um fator  $\alpha$ , geralmente entre 0,90–0,99 [ABRAMSON; DANG; KRISNAMOORTHY, 1999].

$$t_k = t_{k-1} \cdot \alpha \quad (4.15)$$

As agendas adaptativas, por outro lado, variam dinamicamente o decremento de temperatura ao longo do tempo e são comumente da forma:

$$t_k \approx t_{k-1} \cdot (\ln(\Psi_{k-1})) \quad (4.16)$$

onde  $\Psi_{k-1}$  é uma função de estatísticas da cadeia de Markov anterior. Por esta razão, as regras de decremento adaptativas são chamadas de regras variáveis. Segue-se a agenda de resfriamento adaptativa:

### Geométrica Adaptativa

A agenda de resfriamento adaptativa adota uma média móvel em relação à função custo para calcular o decremento da temperatura.

$$t_k = t_{k-1} \cdot \alpha^{k/\sigma_{k-1}} \quad (4.17)$$

onde  $\sigma_k - 1$  é o desvio padrão calculado na cadeia de Markov  $k - 1$  para  $n$  tentativas, geralmente todas as da cadeia.

O terceiro passo para escolher uma agenda de resfriamento é especificar o critério de parada. A escolha deste critério é baseada na observação de que se a expectativa de melhoria causada pela redução da temperatura for pequena, o algoritmo deve ser encerrado. Novamente ABRAMSON; DANG; KRISNAMOORTHY [1999] e OTTEN; GINNEKEN [1989] apresentam métodos para o cálculo deste parâmetro, sendo que ambos sugerem o uso de um fator  $\theta$  baseado no desvio padrão da função custo da seguinte forma:

$$\theta = \frac{\sigma_k^2}{t_f \cdot (\mu_0 - \mu_f)} \quad (4.18)$$

onde  $\sigma_k^2$  é a variância da função custo para a  $k$ -ésima cadeia de Markov e  $\mu_f$  é a média da função custo para todas as tentativas desta mesma cadeia.

O último passo para determinar a agenda de resfriamento é especificar o comprimento da cadeia de Markov  $L_M$ . Este parâmetro é fortemente relacionado com o tamanho do decremento da temperatura por causa do conceito de quasi-equilíbrio. Especificamente, quanto maior o decremento, maior a próxima cadeia de Markov precisará ser para restabelecer o quasi-equilíbrio. Como o quasi-equilíbrio é difícil de quantificar na prática, muitas abordagens para determinar este comprimento têm sido propostas. [KIRKPATRICK; GELATT; VECCHI, 1983] propõe que as cadeias de Markov sejam encerradas após um número de transições ser aceito.

#### 4.1.6 Agendas de Reaquecimento

Com o objetivo de evitar que o sistema congele em mínimos locais, ainda é possível ter uma agenda de reaquecimento sem afetar a propriedade de convergência. ABRAMSON; DANG; KRISNAMOORTHY [1999] expõe uma agenda de reaquecimento geométrica da seguinte forma:

$$t_k = \frac{t_{k-1}}{v} \quad (4.19)$$

onde  $v$  é um fator tal que  $0 < v < 1$ .

## 4.2 Métodos de Reconstrução utilizando *Simulated Annealing*

O problema de reconstrução de meios porosos em duas e três dimensões é estocástico e combinatorial por definição. Uma imagem binária de uma microestrutura porosa, nada mais é do que um conjunto de *pixels* brancos e pretos arranjados de forma organizada. Dada a natureza deste, o método SA pode ser utilizado para reconstruir meios porosos 3D conservando determinadas propriedades de imagens 2D. Vários autores ( OUNES; BHAGAVAN [1994] RINTOUL; TORQUATO [1997], TORQUATO; KIM [1999], BISWAL; MANWART; HILFER [1998], CULE; TORQUATO [1999], MANWART; TORQUATO; HILFER [2000], HILFER [2000], SHEENAN; TORQUATO [2001], TORQUATO [2002], TALUKDAR; TORSATER [2002]) têm proposto parâmetros para utilizar como função custo, modelos de vizinhanças (além

da Euclidiana) e otimizações no método para viabilizar o uso de SA para o problema de reconstrução. Estes autores obtiveram sucesso em reproduzir parâmetros como a função correlação e a distribuição de tamanho de cordas em 2D, mas OKABE; BLUNT [2004] expõe problemas de conectividade e tamanho de poros quando se tenta reconstruir microestruturas em 3D.

De uma forma geral, os algoritmos de reconstrução utilizando SA têm sido baseados dois tipos de movimentação de elementos:

- Troca de coordenadas dos *pixels* brancos e pretos, partindo de uma imagem cuja porosidade original é a mesma da microestrutura que deseja-se reconstruir;
- Troca de valores dos *pixels* brancos por pretos e vice-versa, partindo de uma imagem aleatória e permitindo que o sistema organize a porosidade de acordo com a função custo.

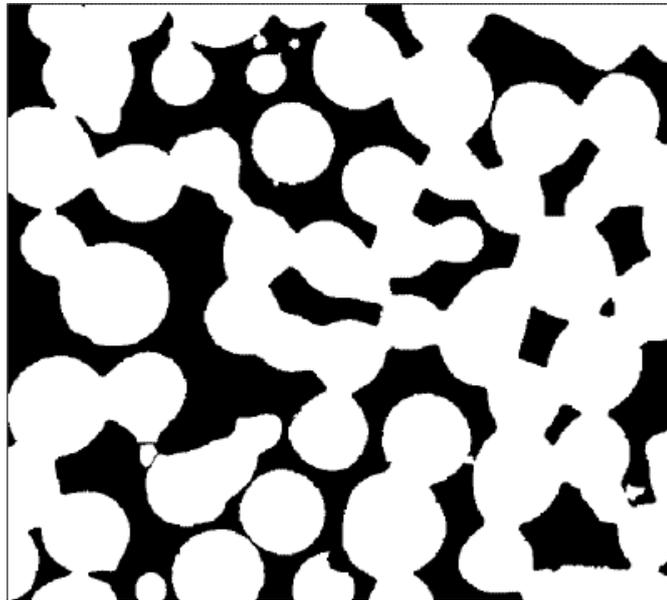
Os dois métodos são baseados em movimentação de *pixels*. Há, ainda, uma outra classe de movimentação chamada “movimentação de objetos”. Esta se baseia em mover conjuntos de *pixels* em vez de *pixels* isolados. RINTOUL; TORQUATO [1997] utilizaram este método ao mover círculos de um dado raio em uma imagem 2D com o objetivo de reproduzir uma função de segunda ordem chamada função distribuição radial. STOICAA; GREGORIB; MATEU [2005] utilizaram SA com movimentação de esferas como uma ferramenta para análise de padrões.

Observando o potencial do método SA, neste trabalho apresenta-se dois métodos para reconstrução de meios 3D a partir de dados 2D: Um método baseado em movimentação de *pixels* conservando as funções correlação, distribuição de IDF e distribuição de comprimento de cordas (*Pixel-Based Simulated Annealing* - PSA) e outro baseado em movimentação de objetos (*Object-Based Simulated Annealing* - OSA). Em ambos os casos, a qualidade de uma reconstrução é determinada pela energia (erro quadrático) do sistema para os parâmetros otimizados.

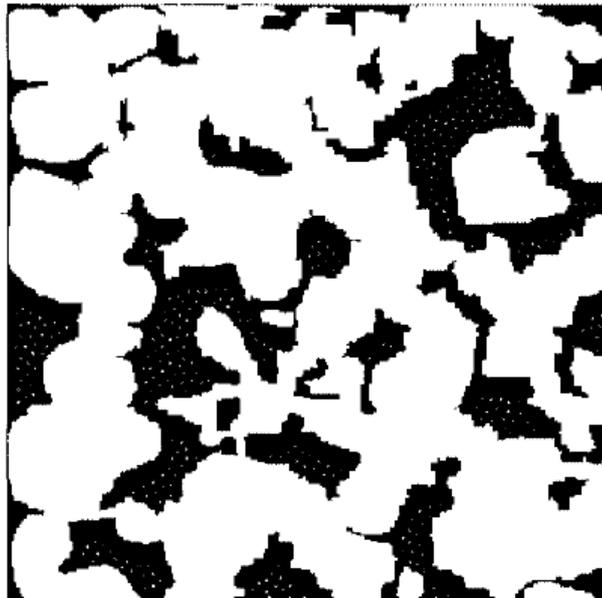
### 4.3 *Pixel-Based Simulated Annealing (PSA)*

Este método baseia-se na movimentação isolada de *pixels* com o objetivo de conservar uma ou mais funções obtidas a partir de imagens 2D. A maioria dos autores que trabalharam com SA para a reconstrução de meios porosos utilizou este método conservando a função correlação ou funções da mesma família, como a correlação poro-sólido [MANWART; TORQUATO; HILFER, 2000]. SHEENAN; TORQUATO [2001] também utilizaram

vizinhança de *pixels* hexagonal para tentar melhor representar o meio poroso. Sabe-se, porém, que apenas a função correlação não é suficiente para conservar conectividade em uma imagem [OKABE; BLUNT, 2004]. Deste modo, surgiu a necessidade de incluir outros parâmetros na função custo do SA. TALUKDAR; TORSÆTER [2002] obtiveram relativo sucesso em reproduzir imagens 2D de esferas de vidro utilizando as funções: derivada da correlação e corda linear (esta com o objetivo de aumentar a conectividade), definida por TORQUATO [2002]. Pode-se observar, porém, a presença de *pixels* isolados na fase poro nas reconstruções resultantes de sua metodologia. Observa-se isto na comparação entre a Figura 22 (original) e a Figura 23 (reconstrução), extraídas de [TALUKDAR; TORSÆTER, 2002].



**Figura 22:** Imagem original de um agregado de esferas de vidro com espaço poroso em preto.



**Figura 23:** Imagem reconstruída através de SA otimizando as funções derivada da correlação e corda linear com erro  $E = 10^{-4}$ .

Dados os parâmetros utilizados pelos autores citados, optou-se por incluir um terceiro parâmetro a ser otimizado pelo PSA: a distribuição de IDF. Este parâmetro tem por objetivo eliminar *pixels* brancos que permaneciam isolados na fase poro mesmo após a otimização das funções utilizadas até então. Deste modo, o PSA tem como função custo a soma de três parâmetros: a função correlação, a distribuição de tamanho de corda (normalização de todos os tamanhos de corda linear) e distribuição de IDF.

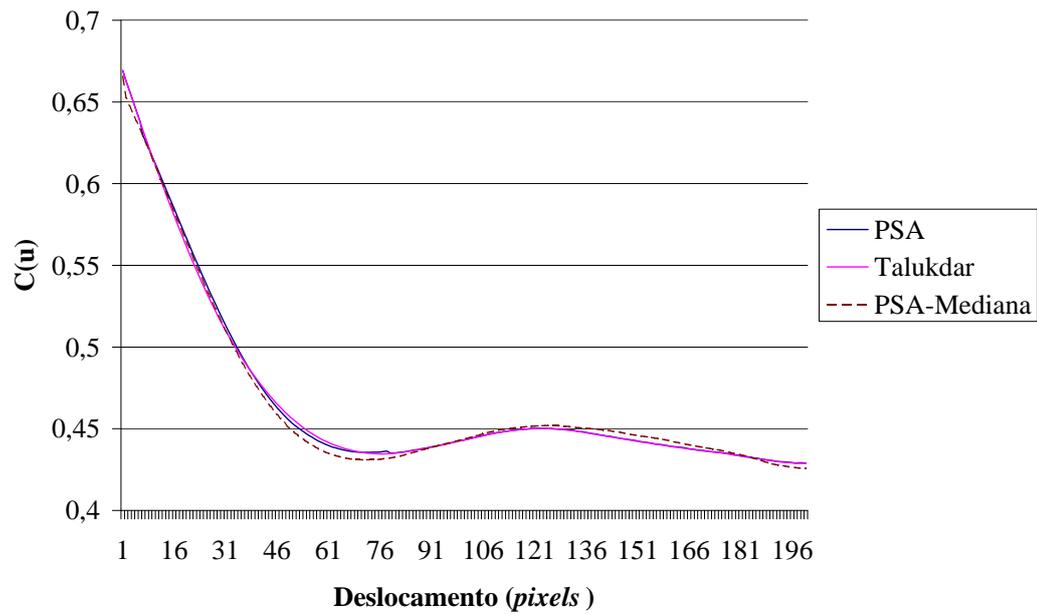
Para todas as simulações utilizando este método adotou-se a agenda de resfriamento geométrica com  $\alpha = 0,999$ . Escolheu-se esta configuração dado seu decréscimo lento e constante ao longo das interações. A temperatura foi reduzida a cada 500 iterações sem melhoria no valor da energia, ou seja, adotou-se o modelo homogêneo. O algoritmo retorna soluções do tipo BSF. Não utilizou-se agendas de reaquecimento, pois devido ao grande espaço de soluções, à pequena influência da movimentação de um *pixel* ou *voxel* em relação ao todo, o sistema dificilmente fica preso em mínimos locais.

Inicia-se o processamento com uma imagem aleatória de mesma porosidade, como ilustrado na Figura 27 e movimenta-se os *pixels* até chegar ao resultado desejado, ou seja, o erro quadrático das funções otimizadas ser menor que  $1 * 10^{-4}$ . O tempo médio para uma reconstrução 2D de uma imagem 400x400 *pixels* foi de 24h utilizando um processador Pentium 1GHz.



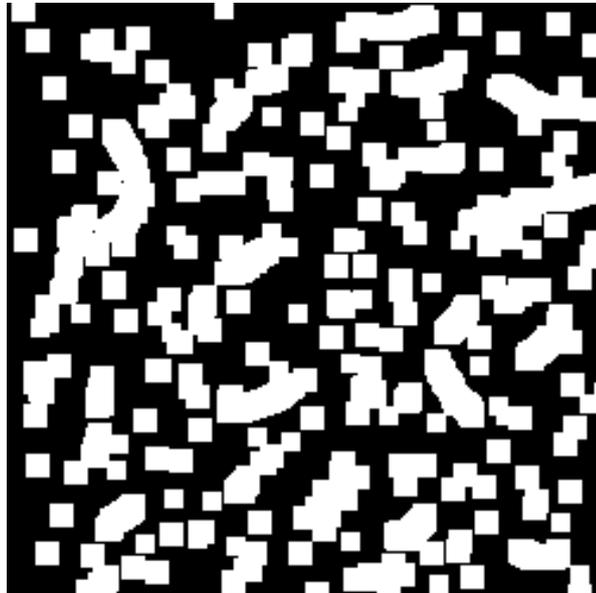
**Figura 24:** Reconstrução utilizando o método PSA de imagem utilizada por TALUKDAR; TORSÆTER [2002] com erro  $E = 10^{-4}$ .

A utilização do parâmetro distribuição de IDF não conseguiu eliminar completamente os *pixels* isolados em relação ao método apresentado por TALUKDAR; TORSÆTER [2002]. Utilizou-se, então, um filtro mediana de tamanho 1 na Figura 24, e os *pixels* isolados foram eliminados e pode-se observar na Figura 25 que a eliminação dos mesmos não influencia significativamente na função correlação. Nota-se que os poros de formato circular também não foram bem reproduzidos, mas o método conseguiu reproduzir alguns poros de tamanho grande e alguns estreitamentos. Como será apresentado no Capítulo 5, este método apresentará dificuldades em reproduzir a distribuição de tamanho de poros de forma adequada.

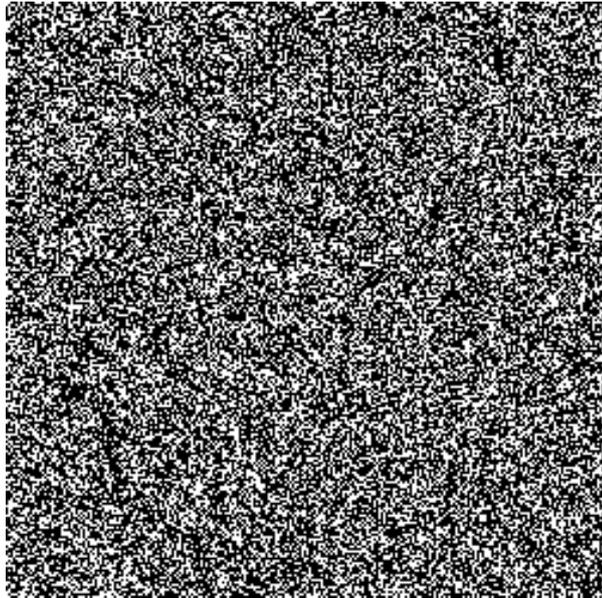


**Figura 25:** Comparação entre a função correlação de uma imagem reconstruída extraída de [TALUKDAR; TORSÆTER, 2002] antes e após passagem de filtro da mediana de tamanho 1, bem como a correlação da imagem original.

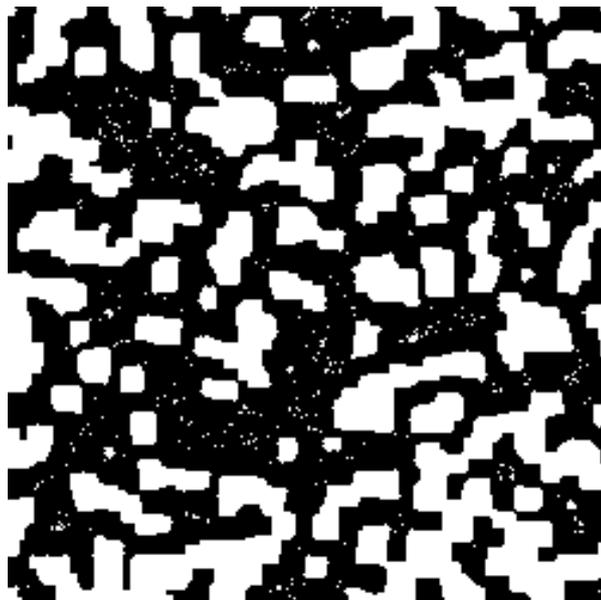
As Figuras 26 a 28 mostram, ainda, um resultado de reconstrução do PSA para uma amostra sintética de quadrados.



**Figura 26:** Imagem original de quadrados.



**Figura 27:** Imagem inicial do processamento da Figura 28.



**Figura 28:** Imagem de quadrados reconstruída através do método PSA utilizando os parâmetros função correlação, distribuição de tamanho de corda e distribuição de IDF com erro  $E = 10^{-5}$ .

Para o caso 3D, a reconstrução utiliza a mesma metodologia, iniciando de uma imagem completamente aleatória de mesma porosidade da amostra desejada (média das porosidades das imagens 2D). Movimenta-se os *voxels* (*pixels* 3D) da imagem 3D conservando as seguintes funções:

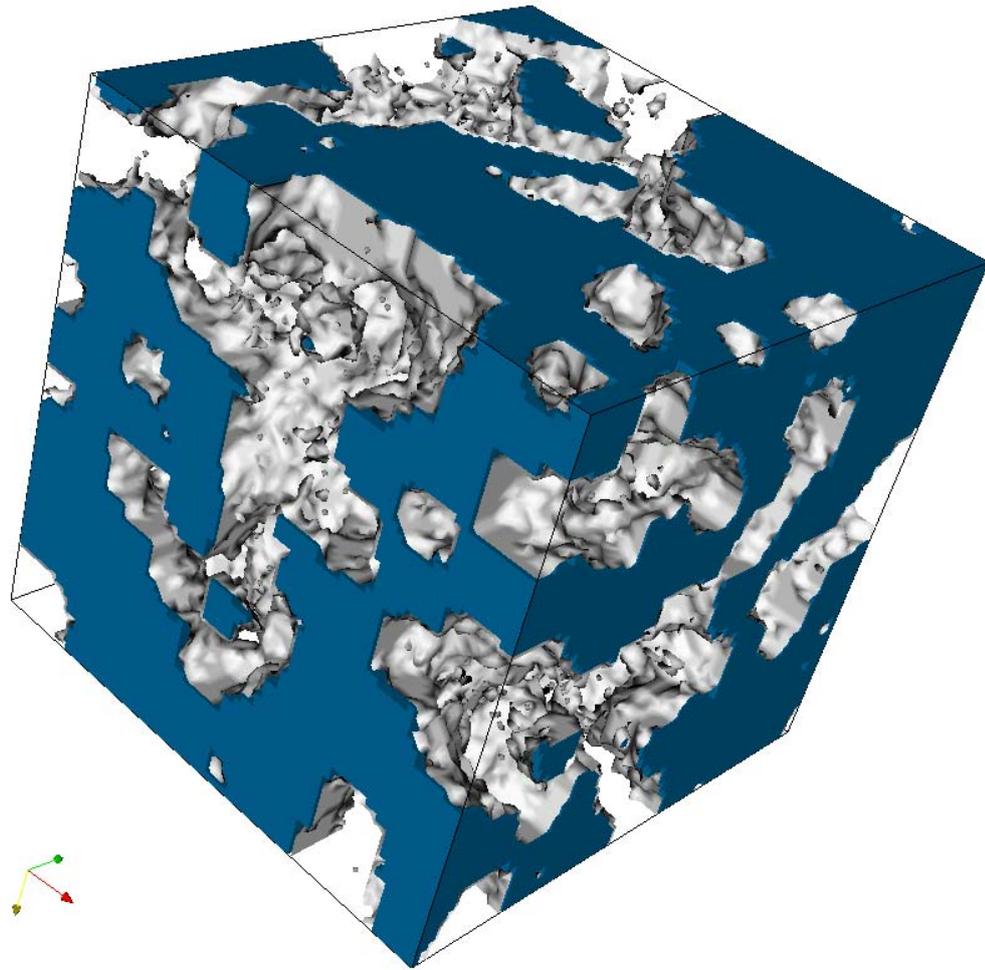
- Correlação por seção - Todas as seções da imagem 3D nas 3 orientações (vertical, horizontal e sagital) devem possuir a mesma correlação.

- Distribuição de tamanho de cordas por seção - Todas as seções da imagem 3D nas 3 orientações devem possuir a mesma distribuição de tamanho de cordas.
- Distribuição de IDF por seção - Todas as seções da imagem 3D nas 3 orientações devem possuir a mesma distribuição de IDF.

Estes parâmetros devem garantir uma imagem completamente homogênea e isotrópica. Observa-se a utilização de três funções para otimizar, considerando-se isotropia e homogeneidade das imagens originais. Esta consideração pode ser revista e pode-se utilizar as mesmas funções com independência em relação às orientações, totalizando até 9 funções e gerando não homogeneidades e/ou anisotropia.

Para todas as simulações 3D utilizando este método adotou-se a agenda de resfriamento geométrica com  $\alpha = 0,98$ . A temperatura foi reduzida a cada 5.000 iterações sem melhoria no valor da energia. Note que apesar da temperatura decrescer mais rapidamente, são necessárias mais interações para que cada cadeia de Markov atinja a convergência e a temperatura possa ser reduzida. O algoritmo também retorna soluções do tipo BSF. O programa se encerra quando o critério de erro desejado é atingido ( $E \leq 10^{-6}$ ) ou a temperatura já foi reduzida o suficiente para não encontrar-se reduções de energia por 10.000 interações. O tempo médio de processamento foi de 173h para uma imagem de  $80^3$  *voxels*.

Pode-se ver o resultado de uma reconstrução 3D da Figura 26 na Figura 29, com a fase sólido em azul e cinza. Deve-se observar os objetos com cantos pontiagudos, indicando a representação adequada dos quadrados. Esta imagem possuiu erro quadrático de  $2,3 \cdot 10^{-5}$  em relação à correlação de todas as seções.



**Figura 29:** Reconstrução 3D com  $80^3$  *voxels* da Figura 26 através do método PSA.

#### 4.4 Object-Based Simulated Annealing (OSA)

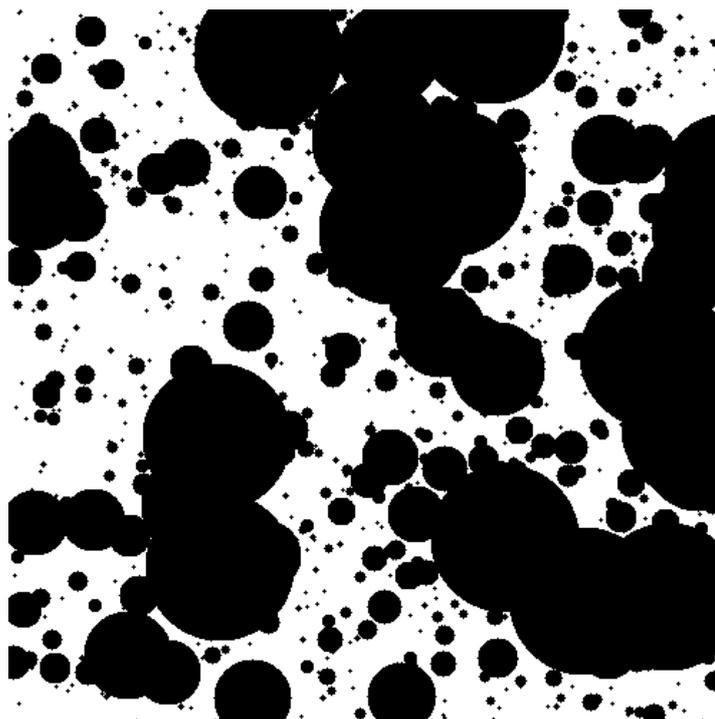
Este método foi idealizado para suprir algumas carências encontradas no método PSA. Como será apresentado no Capítulo 5, os parâmetros utilizados no método foram insuficientes para conservar a conectividade do volume em 3D. Tomando como base os métodos de [ØREN; BAKKE, 2002], porém sem a necessidade de conhecer o histórico geológico da rocha, e [SANTOS et al., 2005], que apresentam resultados onde objetos são movimentados e, mesmo para amostras com porosidade inferior a 30%, a conectividade é preservada, desenvolveu-se um método com a movimentação de objetos, em vez de *pixels* isolados.

A diferença básica deste método para o PSA está na movimentação de sua vizinhança de soluções. Em vez de mover-se *pixels* ou *voxels*, movimenta-se círculos (para o 2D) ou esferas (para o 3D). Utilizou-se esferas, considerando os grãos das rochas reservatórios aproximadamente esféricos (aplicável preferencialmente a arenitos). A geração das esferas

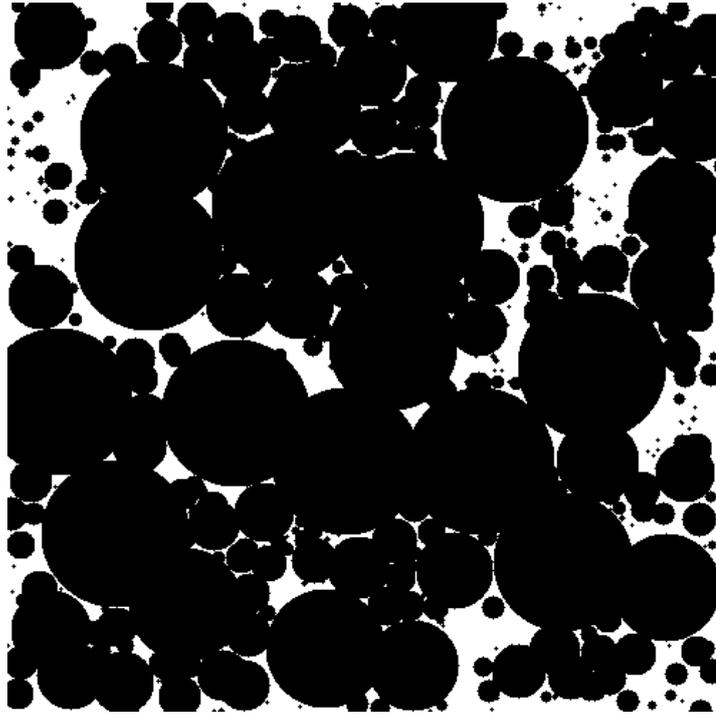
é feita através da medição da distribuição de tamanho de grãos das imagens 2D da amostra que se deseja reconstruir.

Para as reconstruções 2D adotou-se a mesma agenda de resfriamento do método PSA, porém as reduções de temperatura foram efetuadas a cada 50 interações sem redução de energia. Optou-se por isso dada a diferença na etapa de movimentação de vizinhança. O método OSA converge mais rapidamente para um mínimo desejado. Como esperado, o tempo de processamento foi menor para este método, em relação ao PSA. Para uma imagem 400x400 *pixels*, a média de tempo para uma reconstrução é de 20 minutos.

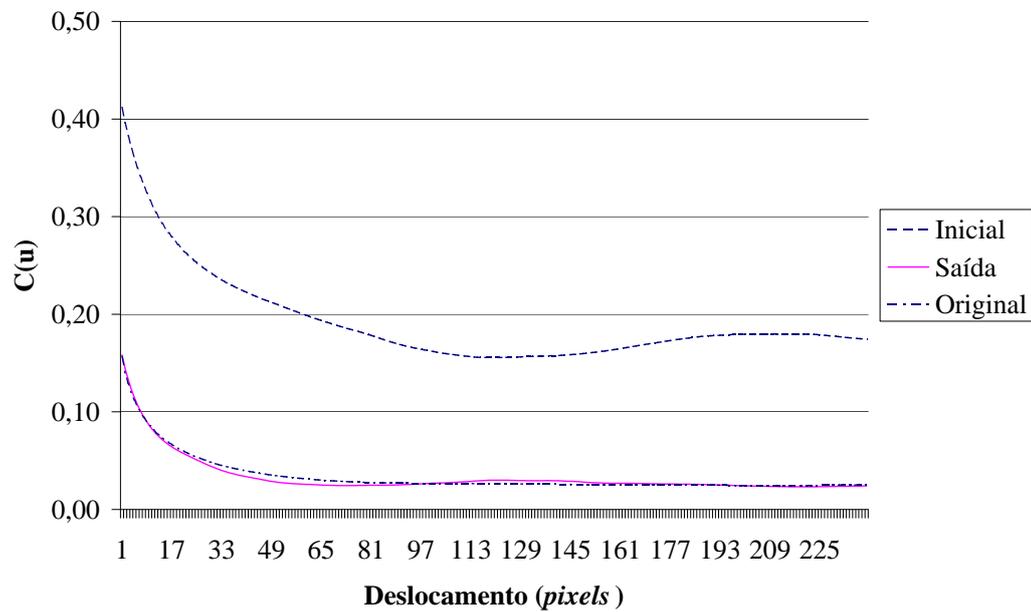
Pode-se observar, respectivamente, nas Figuras 30 e 31 os estados inicial e final de uma reconstrução de uma amostra de rocha reservatório. Nota-se outra diferença em relação ao método PSA. A imagem inicial não possui a mesma porosidade da imagem final, uma vez que os círculos podem se sobrepor e alterar este parâmetro, porém, com a otimização da função correlação, a imagem final terá a porosidade desejada. A Figura 32 mostra a evolução da função correlação para as imagens anteriores.



**Figura 30:** Imagem inicial de uma reconstrução de uma amostra de rocha reservatório (porosidade=41,19%).



**Figura 31:** Imagem final de uma reconstrução de uma amostra de rocha reservatório (porosidade=15,82%).

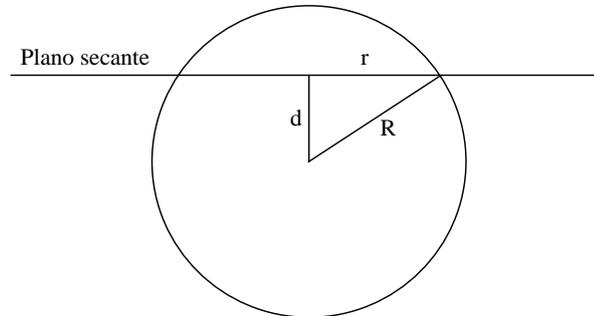


**Figura 32:** Correlação das Figuras 30 e 31.

#### 4.4.1 Correção da Distribuição de Tamanho de Grãos

Para a reconstrução 3D há um outro tópico a tratar. A distribuição de tamanho de grãos 2D utilizada para gerar os círculos nas reconstruções 2D não deve ser a mesma para

gerar as esferas 3D. Isto ocorre devido ao processo de seccionamento da amostra afetar a distribuição de tamanho de grãos 3D conforme ilustrado na Figura 33. A distribuição 2D sempre tenderá a sobrestimar os grãos de diâmetros menores e subestimar os grãos de maior diâmetro. Nesta Figura, o diâmetro do grão é  $R$ , enquanto que o medido após o seccionamento será  $r$ .



**Figura 33:** Ilustração do processo de seccionamento de um grão esférico e do raio  $r$  resultante.

Deve-se considerar, portanto, que a distribuição de tamanho de grãos 3D não é semelhante à média de várias seções 2D. A determinação da distribuição de tamanho de grãos no espaço 3D a partir de seções planas tem sido tópico de extensas pesquisas [DEHOFF; RHINES, 1968; EDWARDS; WILKINSON, 1980; SAHAGIAN; PROUSSEVITCH, 1998; SIMMONS; LANGSTON; BURBIDGE, 1999; HASHIMOTO et al., 2000; FREDLUND; FREDLUND; WILSON, 2000], porém sem bons resultados para amostras com vários tamanhos de esferas e em que as esferas possam se sobrepor.

Neste trabalho, propõe-se uma metodologia para correção da distribuição de tamanhos de grão 2D para 3D, mantendo a consideração de esferas não sobrepostas, mas adotando vários tamanhos.

Considerou-se que:

- A distribuição de tamanho de grãos 3D obedece a uma curva aproximadamente unimodal e não simétrica;
- Todos os tamanhos de grão 3D estão representados na distribuição 2D, ou seja, a distribuição 2D é representativa e pelo menos um plano secante seccionou o grão de maior tamanho exatamente em seu maior diâmetro.

A partir destas considerações, escolheu-se algumas curvas com essas características para modelar o parâmetro:

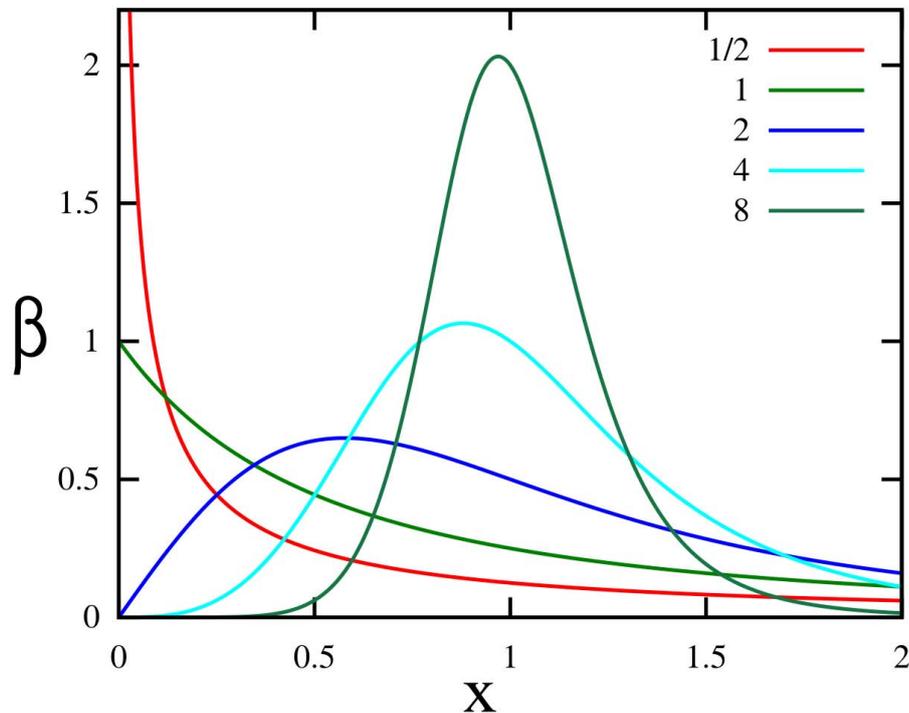
$$\text{Log-Normal} \quad f(x, \mu, \sigma) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\ln(x)-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (4.20)$$

$$\text{Fischer-Tippett} \quad f(x, \mu, \beta) = \frac{e^{-\frac{x-\mu}{\beta}} \cdot e^{-e^{-\frac{x-\mu}{\beta}}}}{\beta} \quad (4.21)$$

$$\text{Shifted-Gomperz} \quad f(x, \beta, \eta, \delta) = \beta e^{-\beta(x+\delta)} e^{-\eta e^{-\beta(x+\delta)}} \{1 + \eta [1 - e^{-\beta(x+\delta)}]\} \quad (4.22)$$

$$\text{Log-Logística} \quad f(x, \alpha, \beta) = \frac{\left(\frac{\beta}{\alpha}\right) \left(\frac{x}{\alpha}\right)^{-\beta-1}}{\left[1 + \left(\frac{x}{\alpha}\right)^{-\beta}\right]} \quad (4.23)$$

Estas curvas foram escolhidas por sua flexibilidade no que tange forma e assimetria ao variar seus parâmetros. Pode-se observar a variação do parâmetro  $\beta$  mantendo  $\alpha = 1$  e seus respectivos efeitos na curva Log-Logística na Figura 34.



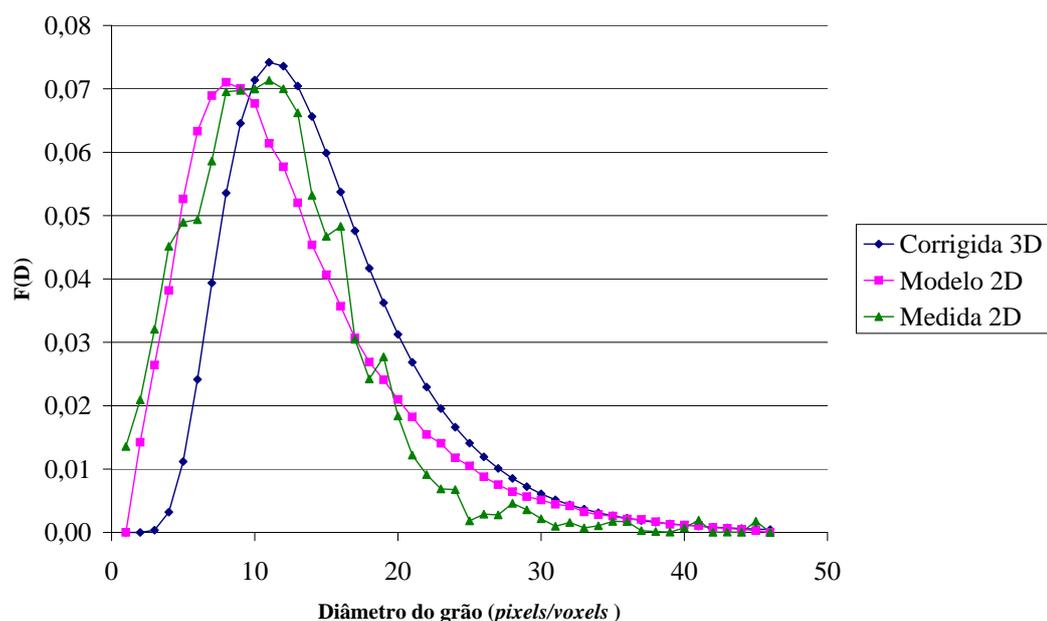
**Figura 34:** Gráfico da curva Log-Logística variando o parâmetro  $\beta$  para  $\alpha = 1$ .

As curvas foram analisadas e seus parâmetros otimizados através de um algoritmo SA de acordo com a sequência de passos a seguir.

1. Ler a distribuição de tamanho de grãos 2D;
2. Escolher a equação para representar a distribuição;
3. Gerar parâmetros aleatórios para a equação escolhida;

4. Gerar um número grande (10.000) de esferas com diâmetros de acordo com a equação escolhida;
5. Realizar um corte virtual em todas as esferas e gerar uma distribuição de tamanho de grãos 2D;
6. Medir o erro quadrático entre as distribuições 2D original e gerada;
7. Modificar um parâmetro da equação através de um algoritmo de SA;
8. Alterar o parâmetro a ser modificado pelo SA;
9. Repetir os passos 4 a 8 até que o erro desejado seja atingido ou a energia congele;
10. Salvar os parâmetros da equação, reduzir a resolução dos parâmetros e voltar ao passo 4;
11. Encerrar o programa obtendo a saída a distribuição de tamanho de grãos 3D.

O erro quadrático adotado como satisfatório foi de  $E \leq 10^{-3}$ . Utilizou-se a agenda de resfriamento geométrica com  $\alpha = 0,95$ . As alterações de parâmetro foram efetuadas baseadas no seu efeito na equação utilizada, mas a redução sempre foi efetuada para 10% da resolução anterior: por exemplo, caso o parâmetro  $\alpha$  fosse reduzido ou aumentado de 0,5, na segunda repetição, a alteração seria de 0,05 e a terceira de 0,005. Pode-se ver o resultado de um processamento na Figura 35 para um erro quadrático de  $7,69 \cdot 10^{-4}$ . O tempo de processamento médio para este modelo é de aproximadamente 60 segundos em um processador 1GHz.



**Figura 35:** Correção de Distribuição de tamanho de grãos de 2D para 3D.

Esta metodologia é extensiva para outros tipos de distribuições de tamanho de grãos, como distribuições bimodais, alterando-se apenas a equação que modela a distribuição desejada.

Após gerada uma distribuição 3D, utiliza-se a equação 4.24 para calcular o número de esferas para cada diâmetro da distribuição de tamanho de grãos.

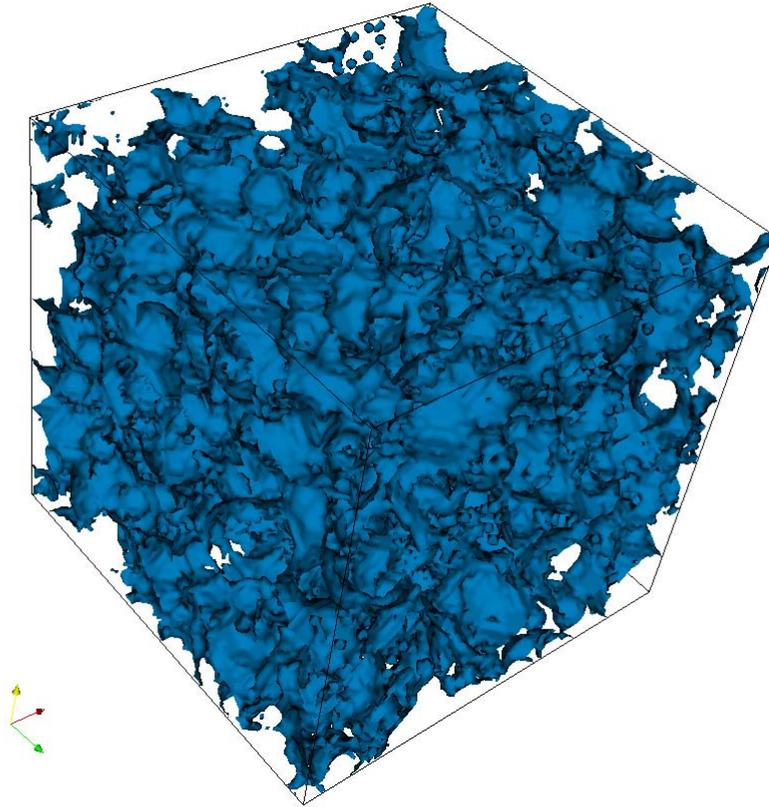
$$n(D) = \left(\frac{3}{4}\right)^{d-2} \cdot \frac{N^d}{\pi D^d} \quad (4.24)$$

onde  $d$  é a dimensão Euclidiana (2 ou 3),  $N$  é o tamanho linear da imagem reconstruída e  $D$  é o diâmetro de cada elemento da distribuição de tamanho de grão.

A função escolhida para representar a distribuição de tamanho de grãos 3D neste trabalho foi a Log-Logística.

Sobre os demais parâmetros do OSA, adotou-se a mesma agenda de resfriamento do método PSA, porém as reduções de temperatura foram efetuadas a cada 100 interações sem redução de energia. Da mesma forma que o algoritmo 2D, o sistema converge mais rapidamente do que o método PSA. O tempo médio de processamento foi de 1h para uma imagem de  $80^3$  *voxels*.

Pode-se ver na Figura 36 o resultado de uma reconstrução de uma rocha reservatório com a fase sólido em azul. Como o caso 2D, a porosidade da amostra varia ao longo do processamento, mas a porosidade final é igual à desejada. Esta imagem possuiu erro quadrático de  $8,7 \cdot 10^{-5}$  em relação à correlação de todas as seções.



**Figura 36:** Reconstrução 3D com  $100^3$  *voxels* de uma rocha reservatório de petróleo utilizando o método OSA.

## 5 *Resultados e Discussão*

Este capítulo apresenta os resultados obtidos das reconstruções 2D e 3D de rochas reservatório. Para validar as reconstruções, efetuou-se comparações de parâmetros geométricos (correlação, distribuição de tamanho de poros e fração percolante) com outros métodos de reconstrução e respectivas imagens microtomográficas. Também comparou-se o resultado da determinação computacional das propriedades físicas permeabilidade intrínseca e pressão capilar por intrusão de mercúrio. O capítulo também apresenta uma discussão sobre os resultados obtidos.

### 5.1 *Comparação Geométrica*

Nesta seção visa-se comparar as geometrias das reconstruções, através dos parâmetros correlação e distribuição de tamanho de poros.

#### 5.1.1 *Resultados 2D*

Neste tópico são analisados os parâmetros geométricos 2D medidos em seções de lâminas delgadas, bem como nas estocásticas das mesmas amostras utilizando os métodos *Pixel-based Simulated Annealing* (PSA) e *Object-based Simulated Annealing* (OSA). Foram reconstruídas 10 amostras de rocha reservatório de petróleo com os métodos PSA, OSA, Gaussian Truncada (GT) e Esferas Sobrepostas (ES) e suas reconstruções foram comparadas medindo o erro quadrático em relação à correlação e à distribuição de tamanho de poros da imagem original.

##### 5.1.1.1 *Função correlação*

A Tabela 2 apresenta as porosidades e resoluções espaciais para cada amostra, enquanto a Tabela 3 mostra os resultados para o erro quadrático em relação à função correlação. Para o método GT, foram reconstruídos quatro fatores de amplificação com o objetivo de verificar qual deles reproduziu melhor a microestrutura. O número apresen-

tado entre parênteses indica o fator de amplificação que apresentou menor erro. Esta metodologia foi adotada para todos os resultados apresentados neste capítulo. Todas as imagens tiveram dimensões de  $400 \times 400$  pixels.

**Tabela 2:** Porosidade e resolução espacial para 10 lâminas delgadas de amostras de rochas reservatório de petróleo

Amostra	Porosidade	Resolução espacial
01	13,24%	7,84 $\mu$ m
02	13,80%	7,84 $\mu$ m
03	15,66%	7,84 $\mu$ m
04	18,84%	7,84 $\mu$ m
05	19,50%	3,12 $\mu$ m
06	20,84%	7,84 $\mu$ m
07	23,93%	7,84 $\mu$ m
08	26,81%	3,12 $\mu$ m
09	30,37%	3,87 $\mu$ m
10	30,78%	2,03 $\mu$ m

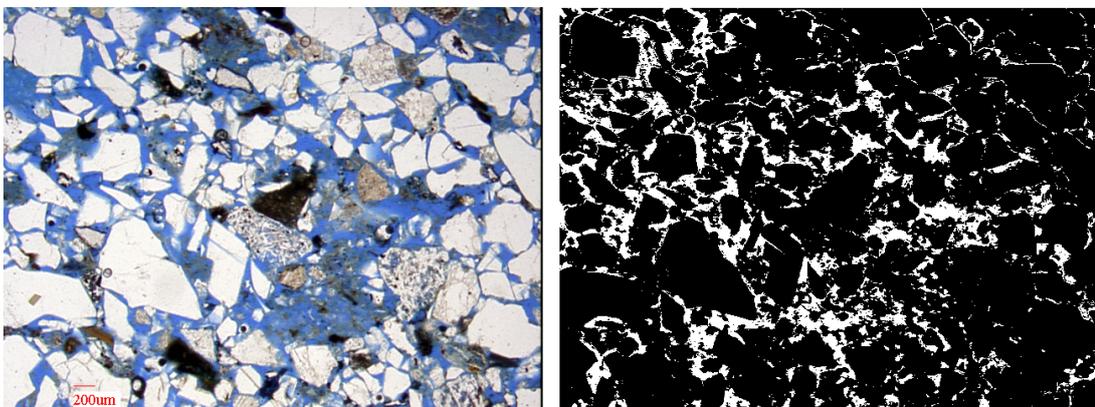
**Tabela 3:** Erro quadrático da comparação da função Correlação entre a reconstrução de 10 lâminas delgadas de amostras de rochas reservatório de petróleo utilizando os métodos PSA, OSA, GT

Amostra	Erro em relação à correlação			
	PSA	OSA	GT-Melhor	Mínimo
01	$1,85 \cdot 10^{-3}$	$4,75 \cdot 10^{-3}$	$1,80 \cdot 10^{-3}$ (2)	GT-F2
02	$7,74 \cdot 10^{-4}$	$6,08 \cdot 10^{-6}$	$4,10 \cdot 10^{-5}$ (3)	OSA
03	$1,89 \cdot 10^{-3}$	$6,56 \cdot 10^{-5}$	$1,16 \cdot 10^{-4}$ (4)	OSA
04	$5,98 \cdot 10^{-4}$	$1,84 \cdot 10^{-5}$	$1,74 \cdot 10^{-4}$ (4)	OSA
05	$1,53 \cdot 10^{-3}$	$2,12 \cdot 10^{-5}$	$1,67 \cdot 10^{-3}$ (4)	OSA
06	$1,28 \cdot 10^{-3}$	$7,85 \cdot 10^{-5}$	$4,11 \cdot 10^{-4}$ (4)	OSA
07	$2,93 \cdot 10^{-3}$	$2,45 \cdot 10^{-5}$	$3,57 \cdot 10^{-4}$ (2)	OSA
08	$2,99 \cdot 10^{-2}$	$2,82 \cdot 10^{-5}$	$4,27 \cdot 10^{-4}$ (3)	OSA
09	$4,03 \cdot 10^{-4}$	$6,08 \cdot 10^{-5}$	$1,72 \cdot 10^{-3}$ (3)	OSA
10	$7,75 \cdot 10^{-4}$	$4,54 \cdot 10^{-4}$	$7,35 \cdot 10^{-4}$ (1)	OSA

Observa-se que o método OSA obteve melhores resultados para 9 das 10 amostras,

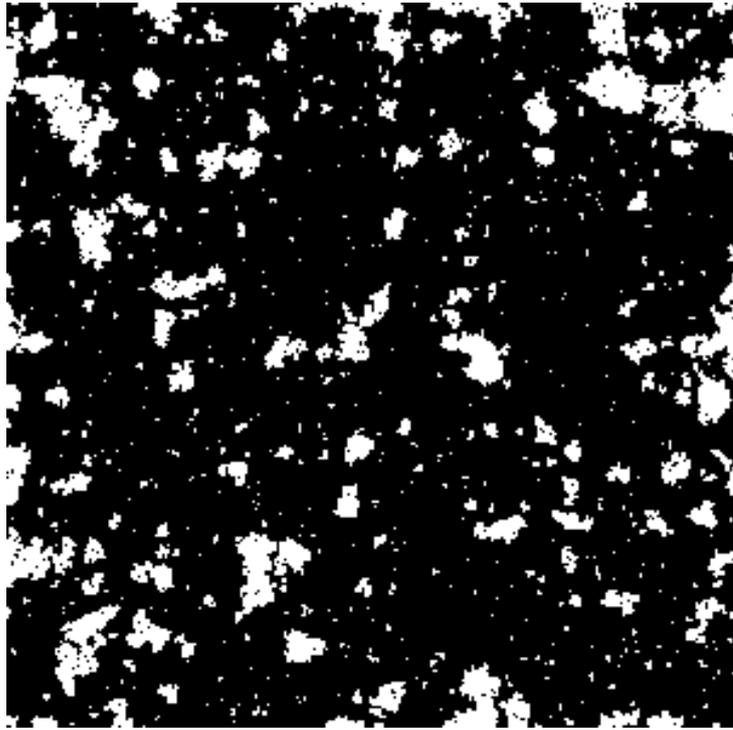
cuja porosidade variou de 13,80% a 30,37%. O método PSA não obteve bons resultados em reproduzir a correlação para as amostras 2D. Isto pode ocorrer devido a tempo de processamento insuficiente. Seria necessário, deste modo, aumentar o tempo de processamento através de uma redução mais lenta do parâmetro temperatura. O tempo médio de reconstrução utilizando o método PSA foi de 16h, enquanto o OSA foi de 20min.

Na Figura 37 observa-se a imagem binária original da Amostra 01, obtida através de lâminas delgadas. Para cada amostra, utilizou-se 10 imagens semelhantes para medir os parâmetros desejados para utilizar na reconstrução: correlação e distribuições de tamanho de cordas e IDF. Utilizou-se a média das medidas dos parâmetros de todas as imagens como referência.

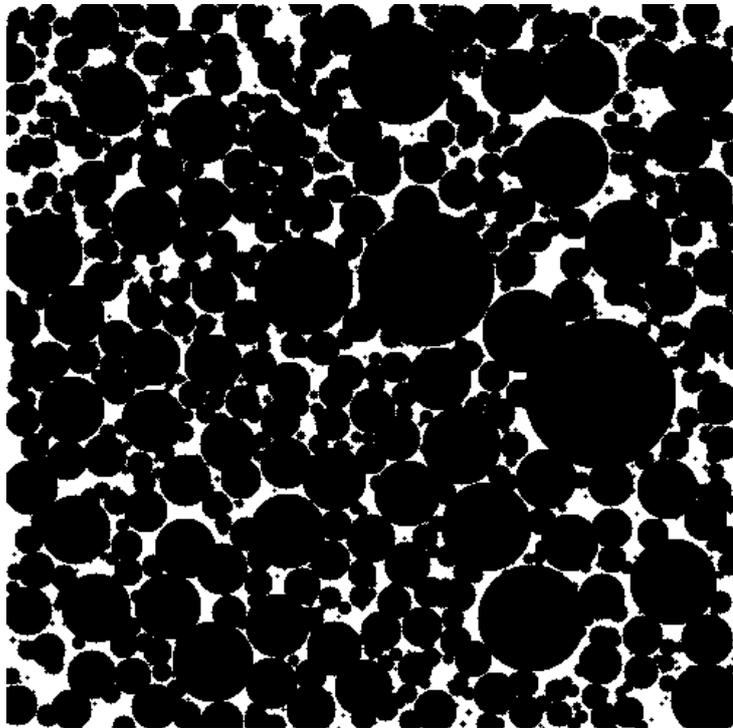


**Figura 37:** Imagem de seção plana da Amostra 01 com  $7,84\mu\text{m}$  de resolução, bem como sua respectiva imagem segmentada com 13,24% de porosidade.

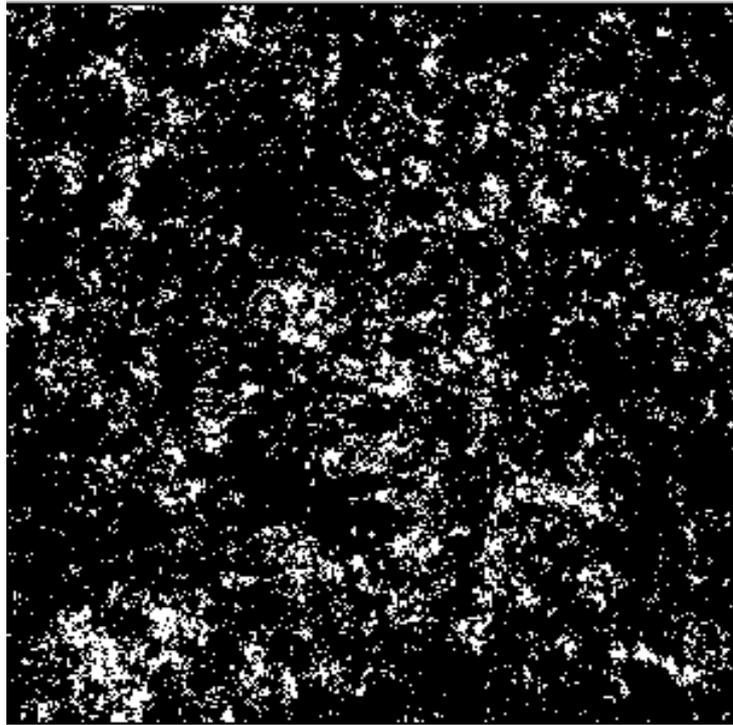
Nas Figuras 38 e 39 mostram-se os resultados das reconstruções 2D para a Amostra 01. Observa-se que a reconstrução da Figura 38 apresentou *pixels* isolados, apesar dos parâmetros utilizados para evitar que isso acontecesse. Observa-se a presença dos mesmos em menor quantidade na imagem original. Estes foram medidos, em especial nas funções distribuição de corda linear e distribuição de IDF, e este ruído foi reproduzido nas reconstruções. Isto não ocorreu com o método OSA, uma vez que este método não leva em consideração esses parâmetros, mas a informação de conectividade é reproduzida através da movimentação dos objetos. A Figura 40 apresenta o resultado da reconstrução para o método GT, que obteve o melhor resultado para este caso. Nota-se que apesar da função correlação ter sido a de menor erro quadrático, os poros formados são de diâmetros pequenos, boa parte dos mesmos, *pixels* isolados.



**Figura 38:** Reconstrução da Amostra 01 utilizando o método PSA com 400x400 *pixels* e 13,24% de porosidade.



**Figura 39:** Reconstrução da Amostra 01 utilizando o método OSA com 400x400 *pixels* e 13,24% de porosidade.



**Figura 40:** Reconstrução da Amostra 01 utilizando o método GT(2) com 400x400 *pixels* e 13,24% de porosidade.

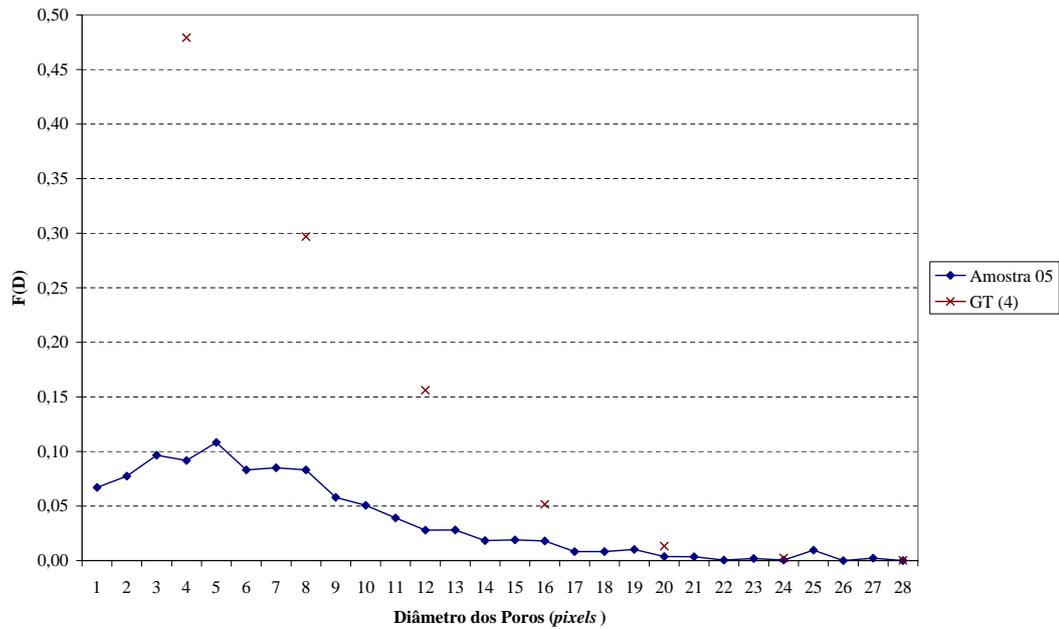
#### 5.1.1.2 Distribuição de tamanho de poro 2D

A Tabela 4 mostra os resultados das mesmas reconstruções para a distribuição de tamanho de poros com a métrica  $d_{3-4}$ . Compara-se também os resultados com o método ES.

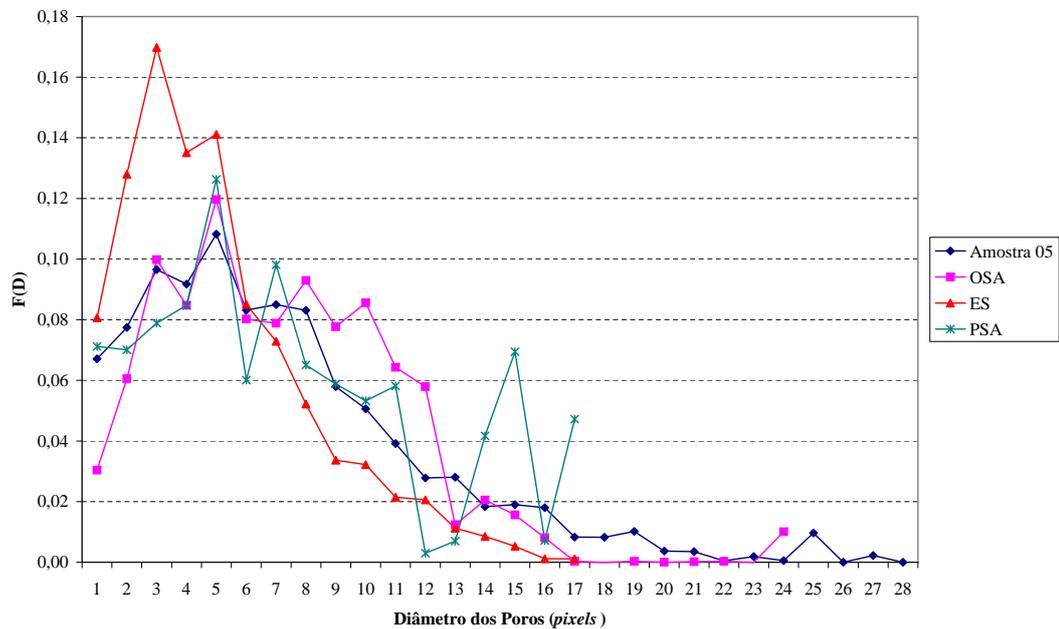
**Tabela 4:** Comparação da Distribuição de Tamanho de poros entre a reconstrução de 10 amostras de rochas reservatório de petróleo utilizando os métodos PSA, OSA, GT e ES

Amostra	Erro em relação à distr. de tamanho de poros $d_{3-4}$				
	PSA	OSA	GT-Melhor	ES	Mínimo
01	$1,34 \cdot 10^{-3}$	$3,19 \cdot 10^{-2}$	$2,38 \cdot 10^{-1}$ (3)	$6,82 \cdot 10^{-3}$	PSA
02	$1,97 \cdot 10^{-3}$	$5,73 \cdot 10^{-3}$	$1,57 \cdot 10^{-1}$ (2)	$4,42 \cdot 10^{-3}$	PSA
03	$1,28 \cdot 10^{-2}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$ (4)	$2,83 \cdot 10^{-2}$	OSA
04	$1,95 \cdot 10^{-3}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$1,23 \cdot 10^{-1}$ (3)	$5,80 \cdot 10^{-3}$	PSA
05	$8,24 \cdot 10^{-3}$	$5,92 \cdot 10^{-3}$	$2,13 \cdot 10^{-1}$ (4)	$1,47 \cdot 10^{-2}$	OSA
06	$2,68 \cdot 10^{-1}$	$5,07 \cdot 10^{-3}$	$2,05 \cdot 10^{-1}$ (3)	$4,91 \cdot 10^{-3}$	ES
07	$2,05 \cdot 10^{-3}$	$1,51 \cdot 10^{-3}$	$5,60 \cdot 10^{-2}$ (2)	$1,25 \cdot 10^{-2}$	OSA
08	$1,53 \cdot 10^{-2}$	$6,79 \cdot 10^{-3}$	$6,39 \cdot 10^{-2}$ (3)	$7,01 \cdot 10^{-3}$	OSA
09	$7,42 \cdot 10^{-3}$	$2,99 \cdot 10^{-3}$	$8,63 \cdot 10^{-3}$ (1)	$5,67 \cdot 10^{-3}$	OSA
10	$3,26 \cdot 10^{-3}$	$2,43 \cdot 10^{-3}$	$4,03 \cdot 10^{-3}$ (1)	$7,73 \cdot 10^{-3}$	OSA

Observa-se também, nas Figuras 41 e 42 o gráfico da distribuição de tamanho de poros para a Amostra 05. O método GT formou excessivos poros pequenos, de modo que foi colocado em separado dos demais métodos para melhor visualização destes em comparação com a distribuição original. Os métodos PSA e o ES formaram poros de tamanho menor que os do OSA e os da imagem original. O OSA, apesar de não conseguir poros com todos os tamanhos, foi o método com o melhor desempenho. Conclui-se, então, que para estas amostras, o método de reconstrução que melhor reproduziu este parâmetro foi o OSA.



**Figura 41:** Comparação entre os gráficos das distribuições de tamanho de poros  $d_{3-4}$  medidas na Amostra 5 e sua reconstrução utilizando o método GT.



**Figura 42:** Comparação entre os gráficos das distribuições de tamanho de poros  $d_{3-4}$  medidas na Amostra 5 e em suas reconstruções.

As demais amostras apresentam resultados semelhantes, diferindo apenas na amostra 01, 02 e 04, onde o método PSA teve um melhor desempenho. A distribuição de tamanho de grãos da Amostra 01 requereria um tempo maior de processamento para o método OSA, efetuada através de uma redução mais lenta do parâmetro temperatura. Considera-

se, deste modo, que o sistema “congelou” em um mínimo local. Optou-se, porém, em não alterar os parâmetros e aceitar esta simulação como sendo mal-sucedida em relação aos métodos PSA e GT.

Observa-se que os métodos OSA e PSA obtiveram melhores resultados do que os métodos GT e ES para 9 casos dos 10 e o OSA foi o melhor método para 6 amostras. Este resultado foi, de certa forma, surpreendente, uma vez que o método PSA conserva a distribuição de IDF, então seria provável que o mesmo obtivesse resultados melhores do que o método OSA. Este resultado indica que o fato do método OSA conservar apenas a função correlação não influencia significativamente na conservação da distribuição de tamanho de poros.

O método PSA, apesar de conservar a função distribuição de IDF, não apresentou-se melhor que o método OSA. Atribuiu-se isto ao tempo de processamento insuficiente, mas dado o melhor desempenho do método OSA com um tempo de processamento muito menor, decidiu-se não alterar os parâmetros utilizados.

Concluiu-se, deste modo, que o método OSA apresentou-se como o mais adequado para reconstruir as amostras utilizadas neste trabalho em 2D.

### 5.1.2 Resultados 3D

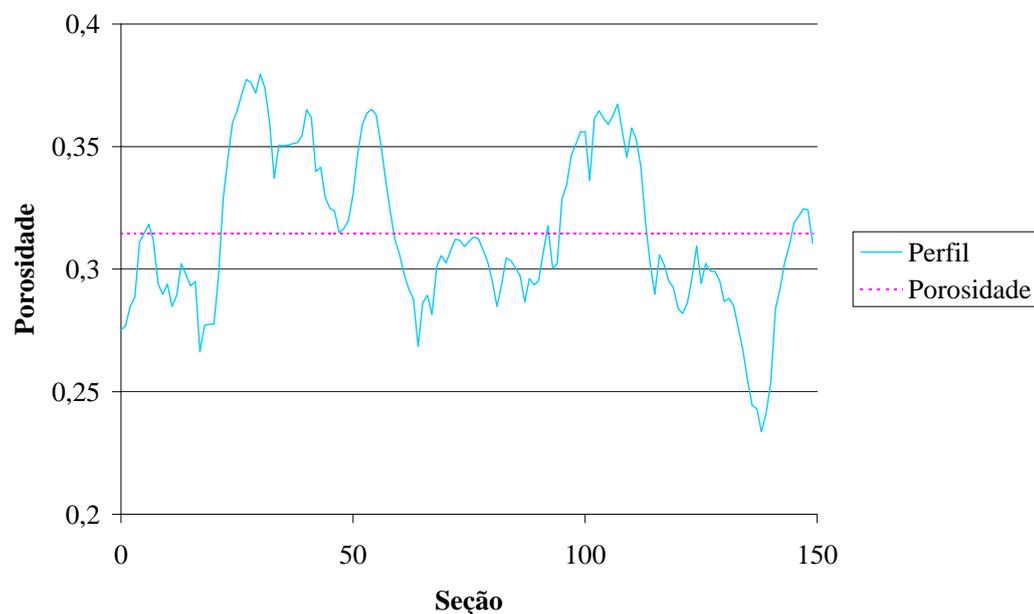
Para o caso 3D, analisou-se os mesmos parâmetros. A referência, porém, foi alterada de imagens 2D para imagens microtomográficas. Neste trabalho, as imagens microtomográficas foram utilizadas para efetuar medidas de parâmetros geométricos e propriedades físicas, de modo a validar os métodos de reconstrução, que são utilizados quando não se tem posse destas. Assim, foi possível analisar a distribuição de tamanho de poros 3D calculada através da métrica  $d_{3-4-5}$ . Analisou-se, também, os parâmetros geométricos para as seções 2D das imagens reconstruídas e das microtomografias, comparando-se o erro quadrático médio em relação à função correlação.

A equipe do Laboratório de Física Nuclear Aplicada (LFNA) da Universidade Estadual de Londrina, nas pessoas dos pesquisadores Jaquiel Salvi Fernandes, M.Sc., Anderson Camargo Nogueira, M.Sc e professor Carlos Roberto Appoloni, Dr., adquiriu 5 imagens 3D de amostras de rocha reservatório de petróleo cujo número de seções adquiridas para cada amostra, resoluções espaciais e tensões e correntes aplicadas no tubo para aquisição das imagens estão expostas na Tabela 5.

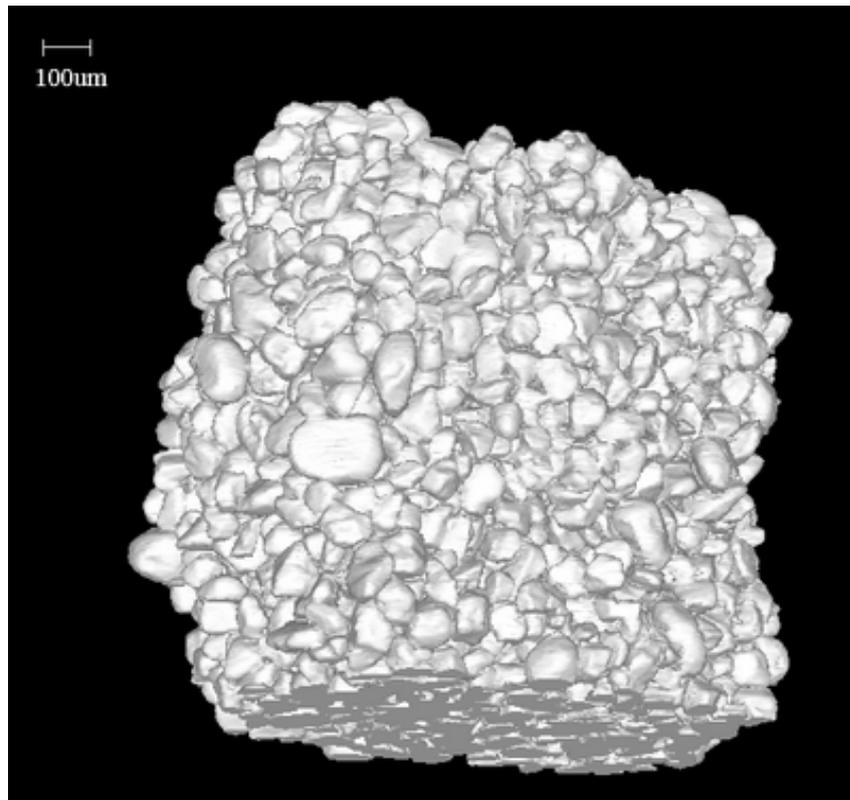
**Tabela 5:** Número de seções adquiridas, resolução espacial e parâmetros de aquisição para 5 imagens microtomográficas de rochas reservatório

Amostra	Nº de seções	Resolução espacial	Tensão/Corrente aplicadas no tubo
11	804	5 $\mu\text{m}$	80kV / 124 $\mu\text{A}$
12	831	2 $\mu\text{m}$	50kV / 200 $\mu\text{A}$
13	979	5 $\mu\text{m}$	80kV / 124 $\mu\text{A}$
14	804	5 $\mu\text{m}$	80kV / 124 $\mu\text{A}$
15	956	3,81 $\mu\text{m}$	60kV / 165 $\mu\text{A}$

As amostras foram aproximadamente cilíndricas, de 2mm de diâmetro e 4mm de altura. Um perfil típico da porosidade ao longo das seções para a Amostra 15 pode ser visto na Figura 43, enquanto que a imagem microtomográfica para a mesma amostra pode ser vista na Figura 44. A Amostra 15 foi adquirida em um equipamento Skyscan 1072 e apresentada por APPOLONI; RODRIGUES; FERNANDES [2005]. Este equipamento é semelhante ao modelo 1172 utilizado para a aquisição das demais amostras.

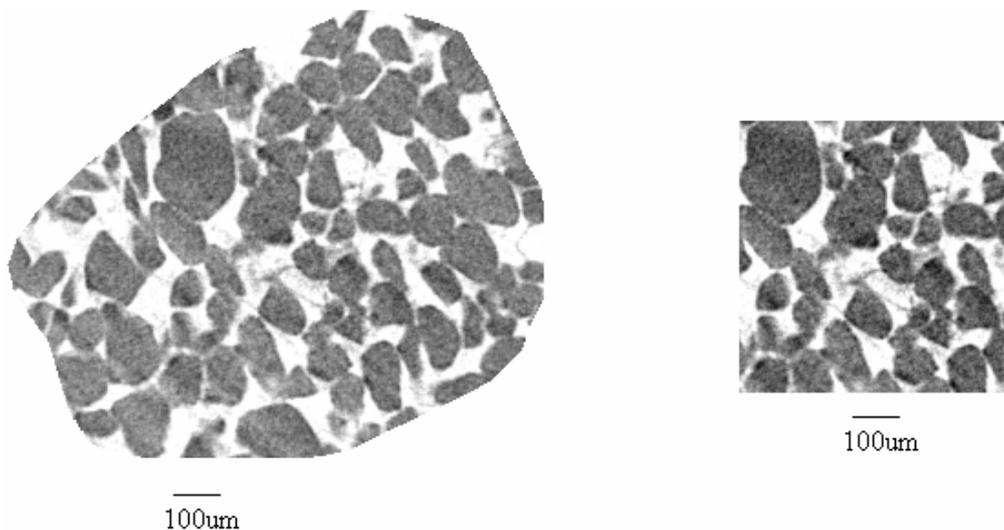


**Figura 43:** Um exemplo de perfil de porosidade de uma amostra utilizada neste trabalho, com destaque para a porosidade medida através de análise de imagens.



**Figura 44:** Imagem microtomográfica de um arenito Botucatu apresentada por APPOLONI; RODRIGUES; FERNANDES [2005] (Amostra 15).

Uma seção bidimensional dessa amostra e o recorte utilizado para o estudo deste trabalho são apresentados na Figura 45.



**Figura 45:** Seção bidimensional microtomográfica de uma rocha reservatório de petróleo (Amostra 15) apresentada por APPOLONI; RODRIGUES; FERNANDES [2005] e seu respectivo recorte utilizado neste trabalho.

Para efetuar as análises foi necessário binarizar as imagens através de limiar de níveis de cinza. A Tabela 6 apresenta a porosidade medida para cada amostra e o volume cúbico em *voxels* utilizado para a análise neste trabalho. Para cada amostra, selecionou-se um volume cúbico representativo (maior que o dobro do alcance de correlação). Para a Amostra 15, teve-se acesso a apenas um volume 150 imagens, apesar da aquisição ter sido de 956 imagens, mas como seu alcance de correlação mediu 40, o volume pôde ser considerado representativo, e por consequência, utilizado no presente trabalho.

**Tabela 6:** Porosidade, volume utilizado e alcance de correlação para cada amostra

Amostra	Porosidade	Volume utilizado ( <i>voxels</i> )	Alcance de correlação ( <i>voxels</i> )
11	9,30%	250 <sup>3</sup>	60
12	14,64%	250 <sup>3</sup>	60
13	14,68%	450 <sup>3</sup>	70
14	28,14%	200 <sup>3</sup>	40
15	33,04%	150 <sup>3</sup>	40

### 5.1.2.1 Função correlação

Para a reconstrução das mesmas amostras, utilizou-se os métodos PSA, OSA, OSA com correção de distribuição de tamanho de grãos (OSA\*), GT e ES e suas reconstruções foram comparadas medindo o erro quadrático em relação à correlação e à distribuição de tamanho de poros. A Tabela 7 mostra os resultados para o erro calculado. As reconstruções tiveram 200<sup>3</sup> *voxels*, com exceção da Amostra 15, cujas reconstruções tiveram 150<sup>3</sup> *voxels*.

**Tabela 7:** Comparação da correlação entre a reconstrução de 5 amostras de rochas reservatório de petróleo utilizando os métodos PSA, OSA e GT

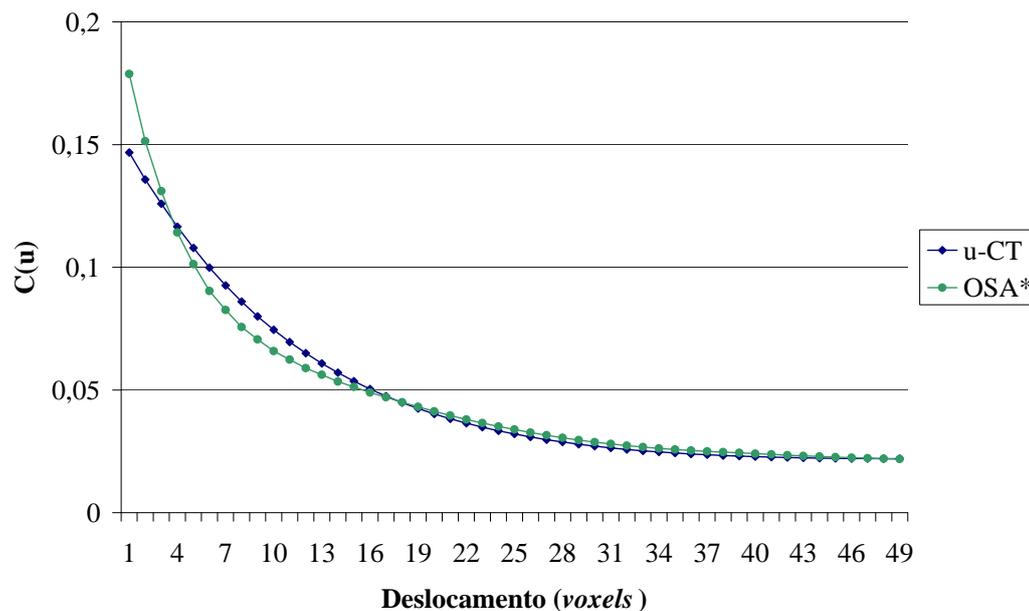
Amostra	Erros em relação à correlação				
	PSA	OSA	OSA*	GT-Melhor	Mínimo
11	-	1,78·10 <sup>-4</sup>	1,11·10 <sup>-2</sup>	7,54·10 <sup>-5</sup> (1)	GT-FA1
12	-	1,90·10 <sup>-5</sup>	8,35·10 <sup>-3</sup>	1,10·10 <sup>-3</sup> (4)	OSA
13	-	7,00·10 <sup>-4</sup>	2,57·10 <sup>-2</sup>	3,52·10 <sup>-5</sup> (3)	GT-FA3
14	1,51·10 <sup>-3</sup>	6,7·10 <sup>-5</sup>	1,07·10 <sup>-1</sup>	6,01·10 <sup>-4</sup> (1)	OSA
15	1,2·10 <sup>-4</sup>	1,39·10 <sup>-5</sup>	3,28·10 <sup>-3</sup>	6,41·10 <sup>-4</sup> (1)	OSA

Nota-se que não foi possível reconstruir as amostras microtomográficas utilizando o método PSA para 3 das 5 amostras. Isto ocorreu devido à ausência de conectividade na reconstrução final. Este resultado indica que os parâmetros correlação, distribuição de IDF e de tamanho de cordas não foram suficientes para conservar a conectividade do meio em 3D para as amostras com porosidades entre 9% e 15%. Comparando-se, também, os métodos OSA\* e OSA, nota-se que o primeiro não apresentou bons resultados. A razão disto será analisada no tópico a seguir.

### 5.1.2.2 Considerações sobre a correção de distribuição de tamanho de grãos

Neste tópico, apresenta-se discussões e considerações sobre a metodologia de correção da distribuição de tamanho de grãos 2D para 3D.

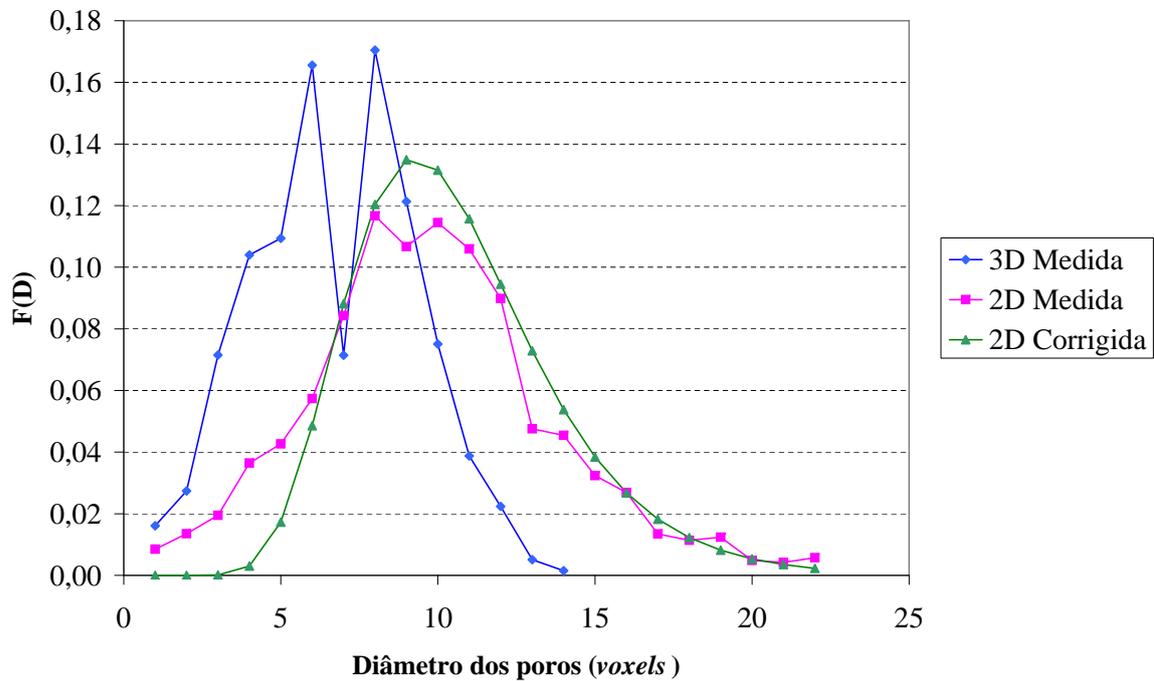
Observa-se na Figura 46 que a curva de correlação medida na reconstrução da amostra 13 através do método OSA\* não foi reproduzida de maneira adequada na reconstrução realizada. Este resultado foi semelhante para as demais amostras.



**Figura 46:** Comparação entre as funções correlação da Amostra 13 e de uma reconstrução utilizando o método OSA\*.

Esta curva apresentou um erro quadrático da ordem de  $10^{-3}$ , enquanto os demais métodos apresentam erros quadráticos da ordem de  $10^{-5}$ . O baixo desempenho do método indicaria uma má configuração dos parâmetros do *Simulated Annealing*, causando um congelamento em um mínimo local. Porém, ao repetir a simulação alterando os parâmetros de temperatura, os resultados foram semelhantes.

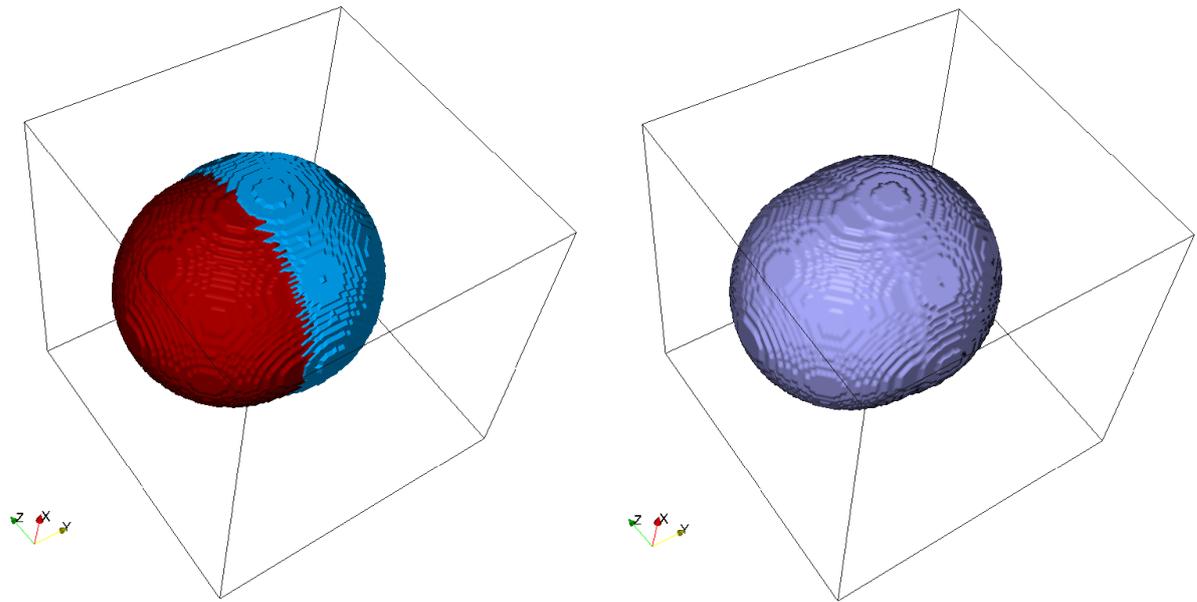
Observou-se, então, a distribuição de tamanho de grãos que foi utilizada como entrada para o processo de reconstrução em comparação com a distribuição de tamanho de grãos medida na imagem microtomográfica. Essa comparação pode ser vista na Figura 47.



**Figura 47:** Comparação entre as distribuições de tamanho de grão 2D e 3D medidas em uma imagem microtomográfica através de morfologia matemática e sua respectiva distribuição corrigida.

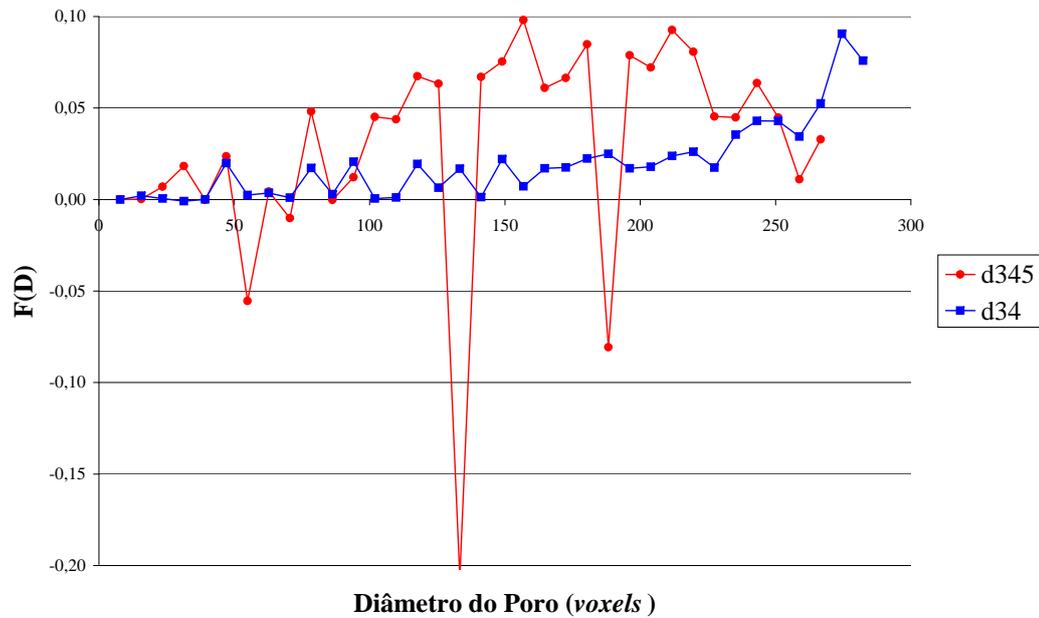
Nesta Figura, pode-se notar que a distribuição 2D medida possui um maior tamanho de grão do que os grãos medidos pela distribuição 3D. Este fato invalida as correções efetuadas, uma vez que o princípio de que todos os tamanhos de grãos 3D devem estar representados em uma distribuição 2D não é mais válido, e a consequência disto é que a distribuição corrigida apresenta o mesmo comportamento da distribuição 2D e gera uma distribuição com grãos maiores do que de fato deveriam ser.

Esta distorção na distribuição de tamanho de grãos 2D ocorre devido à máscara adotada para efetuar a operação morfológica de abertura (processo utilizado para medir a distribuição de tamanho de grãos) considerar os grãos como esféricos, o que não ocorre na prática. Para exemplificar este efeito, tomou-se a geometria da Figura 48, onde duas esferas de raios 35 e 33 foram centradas nos pontos  $(50,50,60)$  e  $(50,40,60)$ , respectivamente, sendo que isso causou uma sobreposição parcial de ambas.



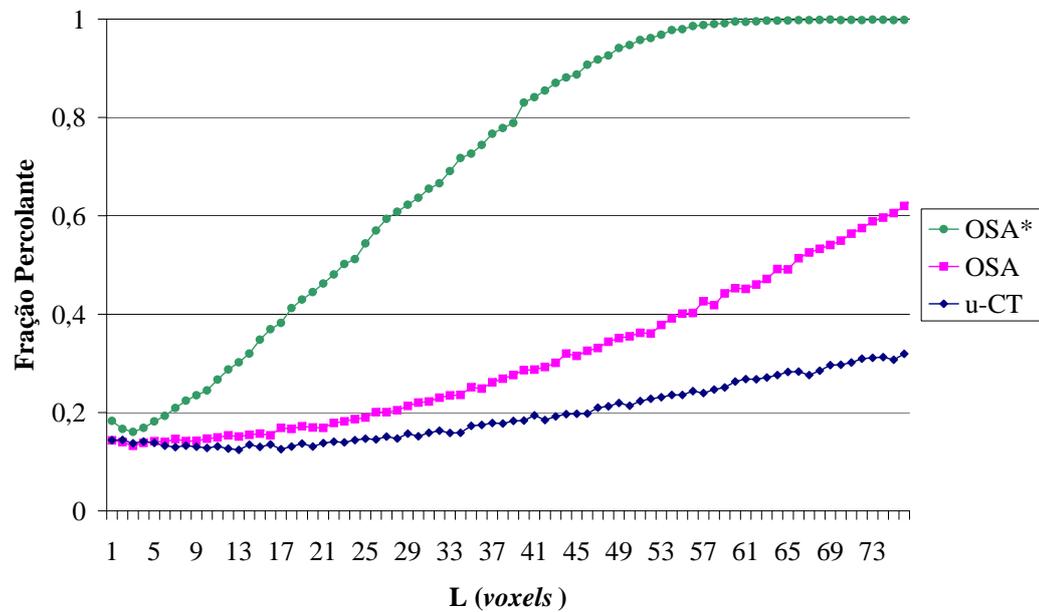
**Figura 48:** Geometria 3D de duas esferas sobrepostas de raios 35 e 33, centradas nos pontos  $(50,50,60)$  e  $(50,40,60)$ , respectivamente.

Ao medir a distribuição de tamanho de grãos (fase colorida) através de morfologia matemática, obteve-se os dados expostos na Figura 49. Nota-se o problema já citado, de que o maior grão medido na seção da geometria é maior que o grão 3D medido na geometria inteira. Além disso, observa-se que alguns valores da distribuição 3D foram negativos. Este efeito também é consequência da medida por morfologia matemática e deve ser desconsiderado.



**Figura 49:** Distribuições de Tamanho de Grãos 2D (azul) e 3D (vermelho) da geometria da Figura 48.

Observa-se também, a curva de fração percolante de uma reconstrução efetuada utilizando o método OSA\*. Nota-se que apesar da porosidade ter sido menor do que a medida na imagem original, a curva exibida na Figura 50 indica uma conectividade maior do que a medida na imagem microtomográfica.

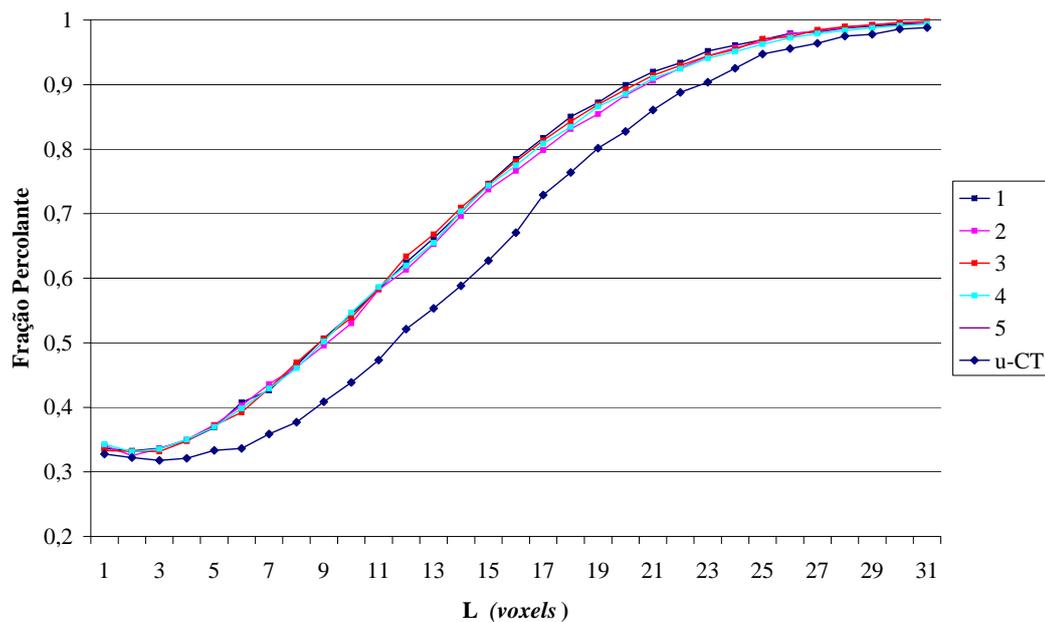


**Figura 50:** Comparação entre a fração percolante medida na imagem microtomográfica da Amostra 13 e as reconstruções utilizando o método OSA e OSA\*.

Estes resultados inviabilizaram o uso da correção da distribuição de tamanho de grãos no caso desta pesquisa. Os resultados seguintes tratarão apenas do método OSA, ou seja, sem correção da distribuição de tamanho de grãos - utilizando como entrada a distribuição de tamanho de grãos 2D.

### 5.1.2.3 Reprodutibilidade do método OSA

Deve-se observar, ainda, a reprodutibilidade do algoritmo OSA. Foram efetuadas 5 reconstruções da amostra 15 e observou-se a curva de fração percolante das mesmas, uma vez que este parâmetro possui mais informações do que a função correlação. Este teste foi feito para verificar se os parâmetros do *Simulated Annealing* estão bem ajustados, de modo que o sistema não caia em diferentes mínimos locais a cada simulação. O resultado pode ser visto na Figura 51, onde observa-se que as curvas são muito semelhantes, o que indica a convergência para o mesmo ponto mínimo, e, conseqüentemente, garantindo a reprodutibilidade do método.

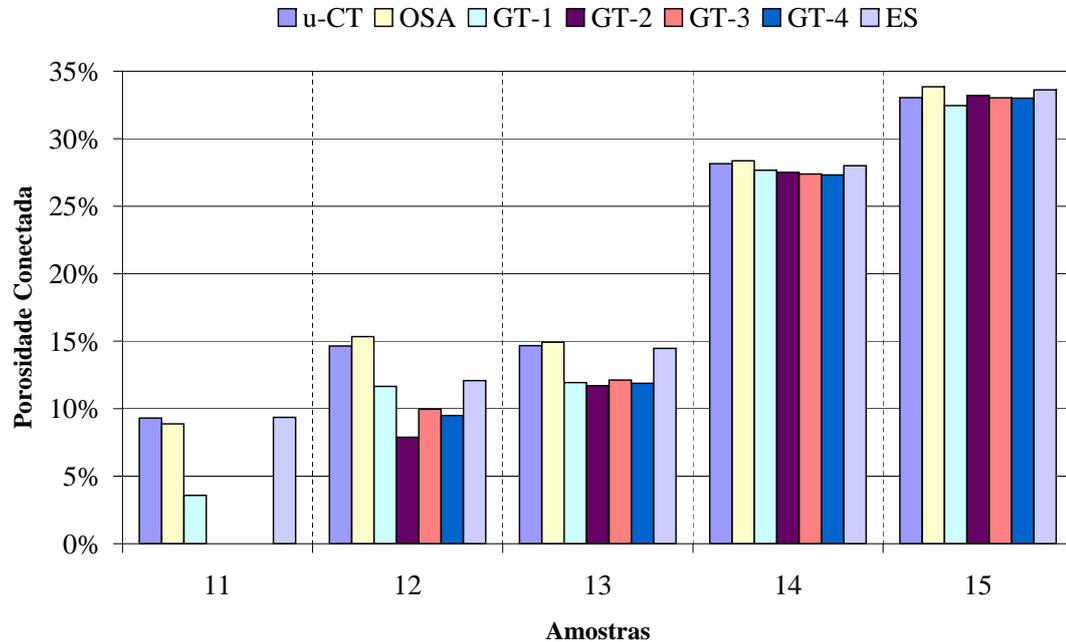


**Figura 51:** Comparação entre a fração percolante de cinco reconstruções da Amostra 15 utilizando o método OSA.

### 5.1.2.4 Fração de fase poro conectada

A Figura 52 apresenta a fração de fase poro conectada para cada reconstrução, analisando cada fator de amplificação do método GT. Nesta tabela, também analisou-se a porosidade conectada para os métodos PSA, OSA e ES. Observa-se que o método GT possui limitações em conservar a porosidade conectada para baixas porosidades (abaixo

de 15%), enquanto o PSA nem mesmo conseguiu percolar para as amostras com esta faixa de porosidade. Os métodos ES e OSA obtiveram bons resultados, sendo que o ES conservou a porosidade conectada mais satisfatoriamente do que o OSA, mesmo notando que o segundo método preserva a função correlação melhor que o primeiro.



**Figura 52:** Fração de fase poro conectada para cada imagem microtomográfica e suas respectivas reconstruções.

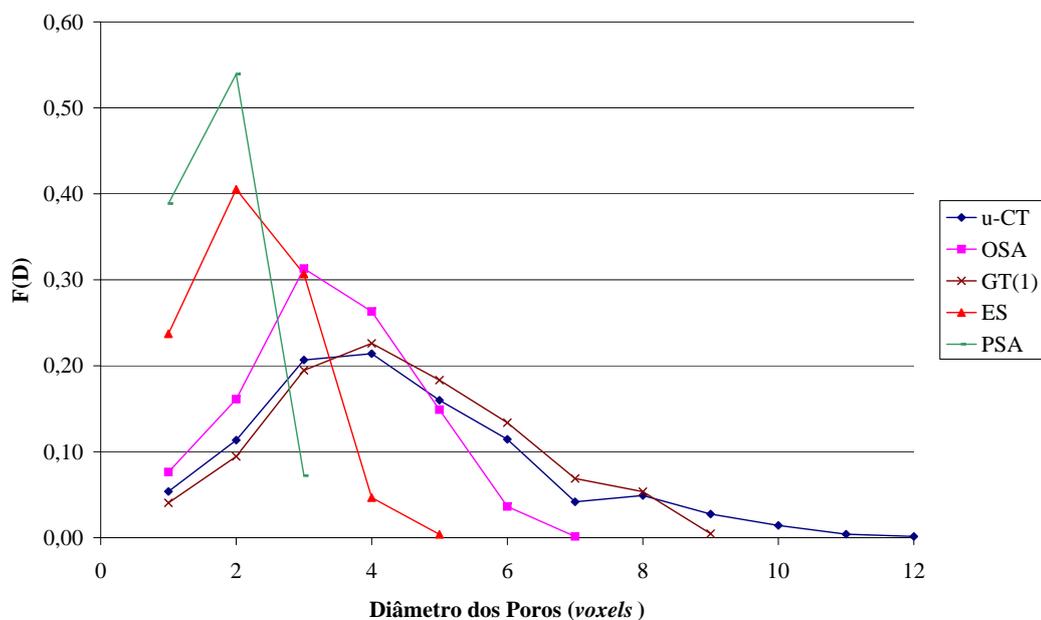
### 5.1.2.5 Distribuição de tamanho de poros

Outro resultado a ser analisado é a distribuição de tamanho de poros 3D utilizando a métrica  $d_{3-4-5}$ . Esta medida foi efetuada nas imagens 3D, enquanto as medidas 2D são efetuadas nas seções das imagens 3D. A Tabela 8 mostra os resultados dos erros para as amostras analisadas. Estes resultados foram medidos em todo o espaço poroso, e não apenas na porosidade conectada. Optou-se por esta metodologia para que o método GT não estivesse em desvantagem em relação aos demais nas amostras de menor porosidade, em que o método apresentou baixa conectividade.

**Tabela 8:** Comparação da Distribuição de Tamanho de poros 3D entre a reconstrução de 5 amostras de rochas reservatório de petróleo utilizando os métodos PSA, OSA, GT e ES

Amostra	Erro em relação à distr. de tamanho de poros $d_{3-4-5}$				
	PSA	OSA	GT-Melhor	ES	Mínimo
11	-	$1,66 \cdot 10^{-2}$	$4,84 \cdot 10^{-3}$ (1)	$2,21 \cdot 10^{-1}$	GT-1
12	-	$3,71 \cdot 10^{-2}$	$6,81 \cdot 10^{-2}$ (2)	$1,71 \cdot 10^{-1}$	OSA
13	-	$1,86 \cdot 10^{-2}$	$1,11 \cdot 10^{-1}$ (3)	$3,11 \cdot 10^{-2}$	OSA
14	$1,75 \cdot 10^{-1}$	$5,92 \cdot 10^{-2}$	$4,11 \cdot 10^{-2}$ (1)	$4,69 \cdot 10^{-2}$	GT-1
15	$3,30 \cdot 10^{-1}$	$2,37 \cdot 10^{-2}$	$3,24 \cdot 10^{-3}$ (1)	$5,70 \cdot 10^{-2}$	GT-1

O método PSA novamente apresentou baixo desempenho (apenas para as amostras 14 e 15, que foram reconstruídas com porosidade conectada), reafirmando que além da conectividade, os parâmetros adotados não foram suficientes para preservar a distribuição de tamanho de poros 3D. Observa-se que o método OSA teve resultados inferiores ao método GT, e ambos superiores ao ES, em sua maioria. Observando a Figura 53, da distribuição de tamanho de poros da Amostra 15, observa-se que o método OSA apresentou uma curva que indica poros menores que os outros métodos, com exceção do ES. O mesmo ocorreu com a amostra 14, também de maior porosidade.

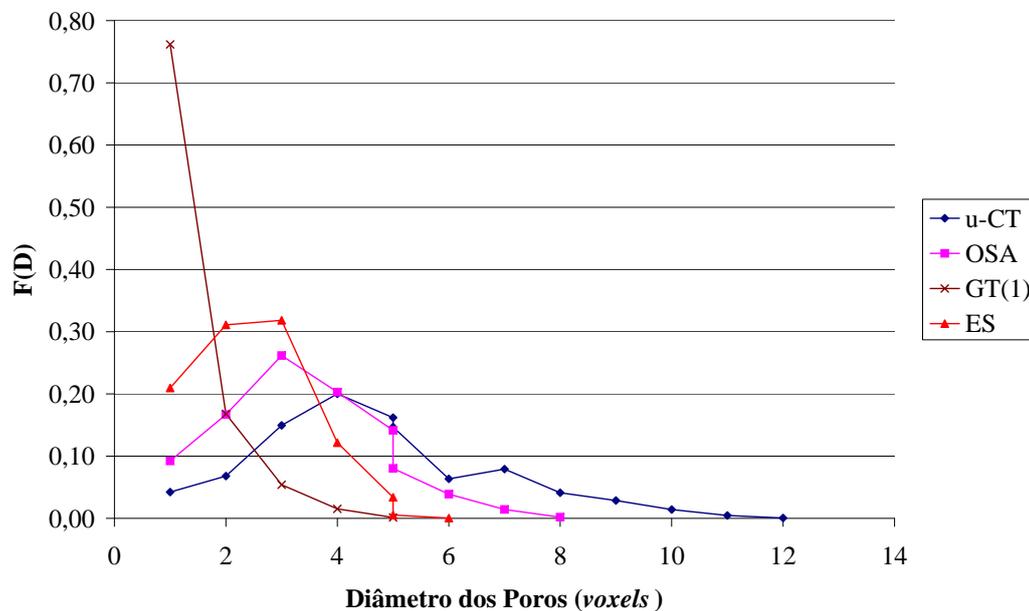


**Figura 53:** Comparação entre as distribuições de tamanho de poro medidas nas reconstruções utilizando os métodos GT(1), OSA, ES e a microtomografia da amostra 15.

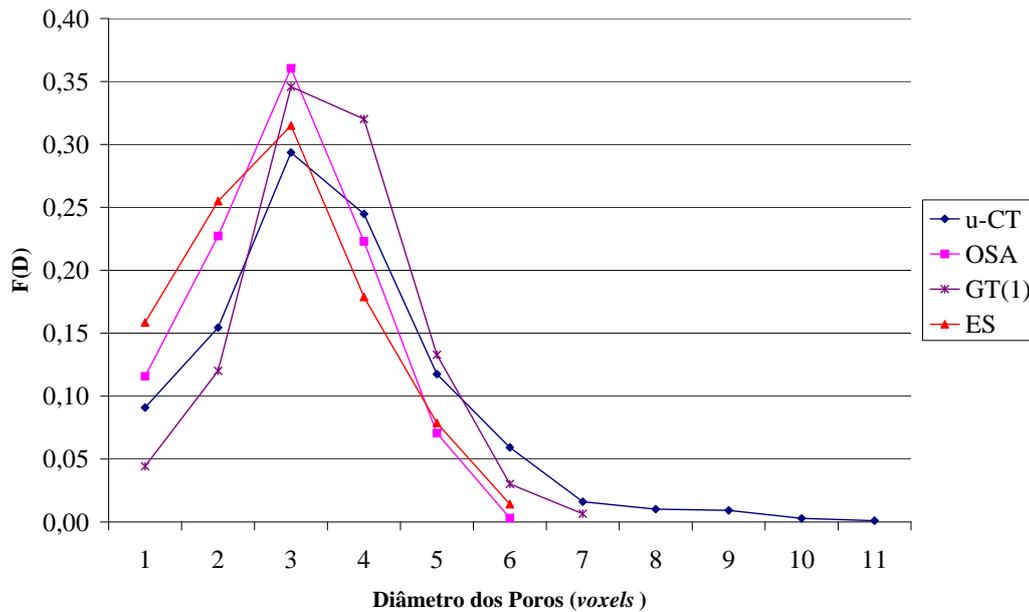
Por outro lado, as amostras 12 e 13, consideradas de baixa porosidade, foram melhor reconstruídas pelo método OSA, inclusive quando compara-se a distribuição de tamanho de poros. Pode-se ver a distribuição de tamanho de poros medida na microtomografia da amostra 13 e suas respectivas reconstruções na Figura 54.

### 5.1.2.6 Fração percolante

Deve-se considerar, ainda, que para a amostra 11 o método GT não obteve uma percolação satisfatória, como foi apresentado na Figura 52, reduzindo a representatividade desta medida e inviabilizando o uso desta reconstrução para outros fins, que não comparações. Apresenta-se o gráfico das distribuições de tamanho de poros 3D da Amostra 11 na Figura 55.

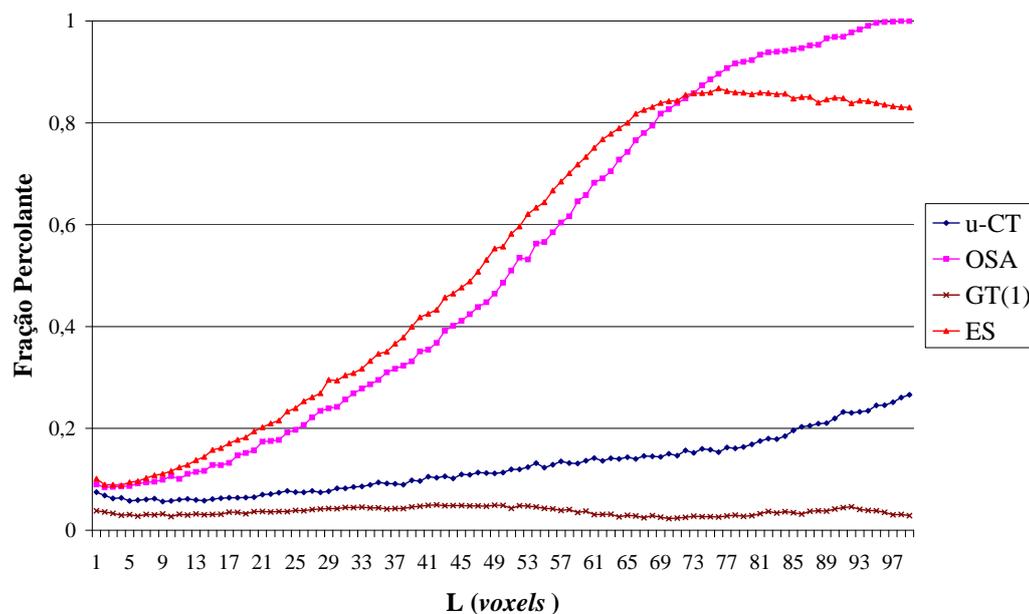


**Figura 54:** Comparação entre as distribuições de tamanho de poro medidas nas reconstruções utilizando os métodos GT(1), OSA, ES e na microtomografia da amostra 13.

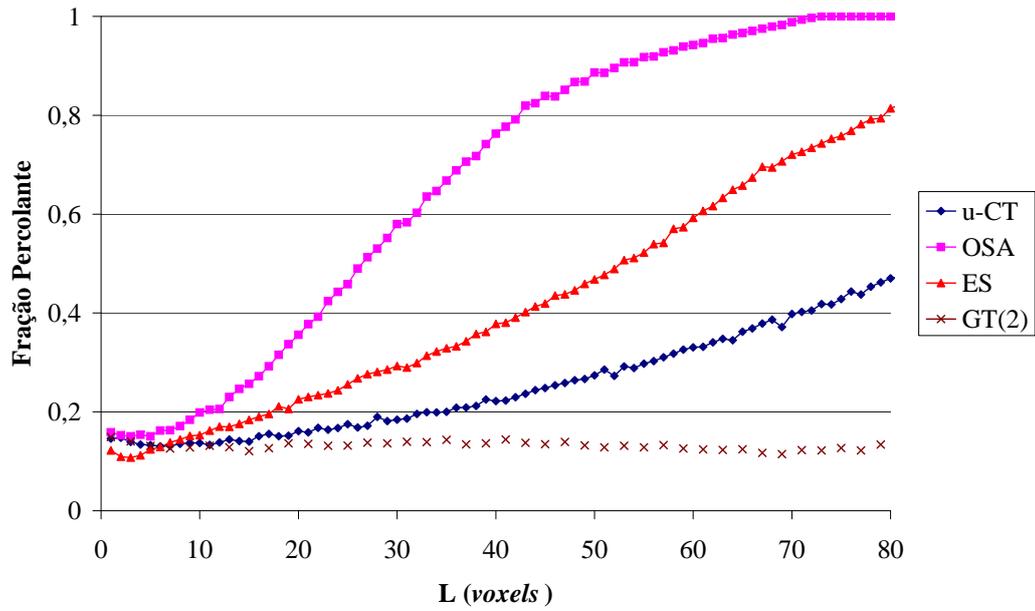


**Figura 55:** Comparação entre as distribuições de tamanho de poro medidas nas reconstruções utilizando os métodos GT(1), OSA, ES e na microtomografia da amostra 11.

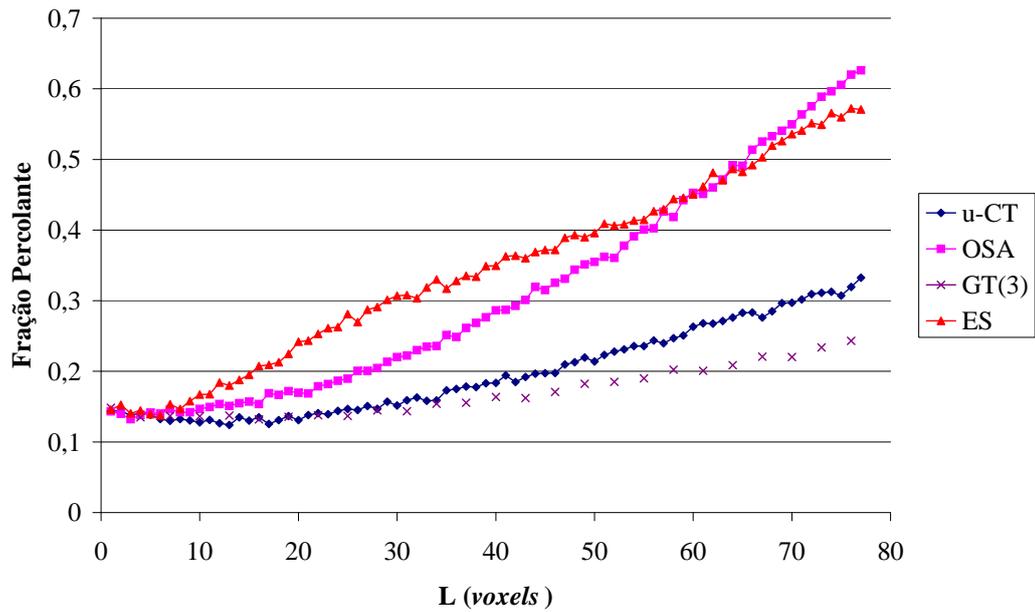
Deve-se analisar, ainda as curvas de fração percolante. Este parâmetro é muito importante, pois está associado à conectividade da microestrutura reconstruída. Dada a relevância deste parâmetro, as cinco amostras serão analisadas individualmente, nas Figuras 56 a 60.



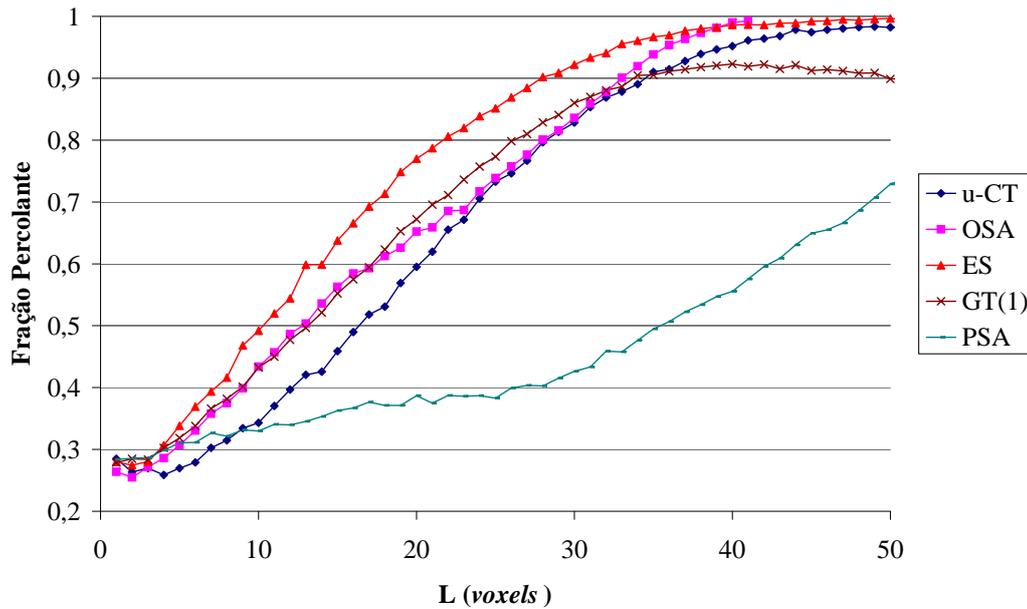
**Figura 56:** Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 11.



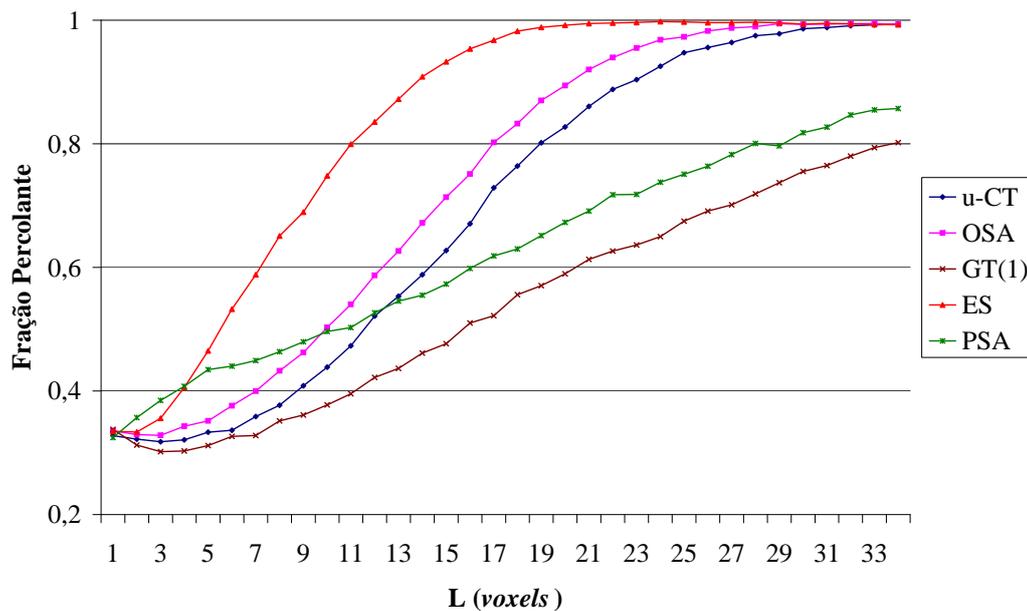
**Figura 57:** Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 12.



**Figura 58:** Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 13.



**Figura 59:** Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 14.

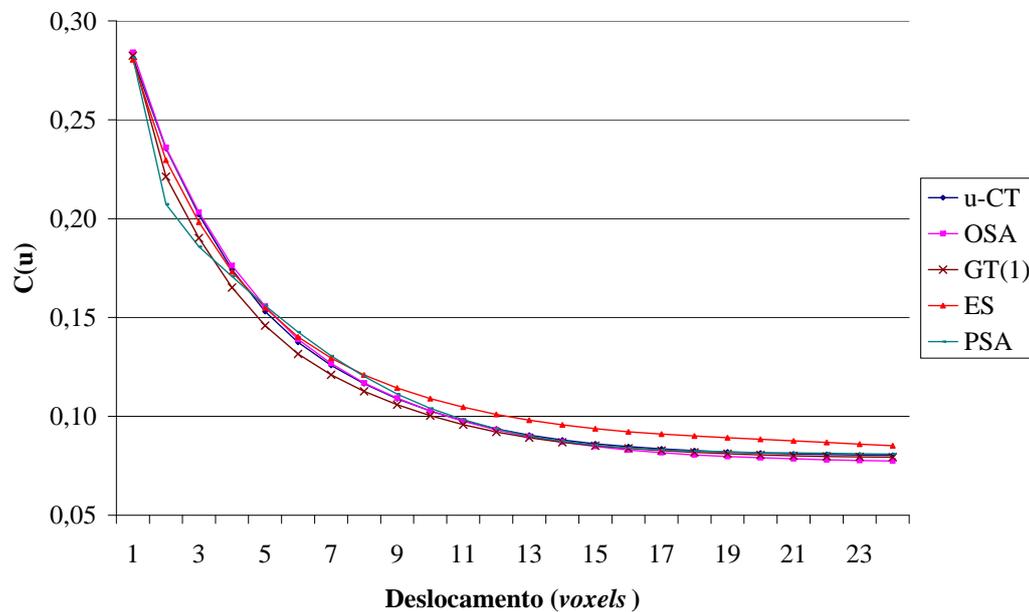


**Figura 60:** Comparação entre as frações percolantes medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 15.

Para todas as amostras, observa-se que os métodos OSA e ES geraram conectividades acima das medidas nas imagens microtomográficas. Da mesma forma, o método GT sempre gerou conectividades menores, com exceção da Amostra 14. O método PSA foi utilizado apenas nas amostras 14 e 15, uma vez que conseguiu conectar apenas estas, mas mesmo assim, o resultado de sua fração percolante não foi satisfatório.

O resultado geral era esperado dada a natureza da movimentação de objetos dos métodos OSA e ES. A escolha da função correlação como sendo o parâmetro a ser otimizado pelo método OSA apresentou a vantagem da facilidade de cálculo, porém esta não fornece informações suficientes de conectividade de forma a reproduzir funções mais complexas, como a distribuição de tamanho de poros, ou a fração de células percolantes.

Isto pode ser verificado observando a Figura 61. Nota-se que todas as reconstruções possuem funções correlação semelhantes, porém ao comparar suas curvas de frações percolantes, exposta na Figura 59, observa-se que os resultados são bastante diferentes. Apresentou-se a Amostra 14 por possuir reconstruções com todos os métodos e uma melhor visualização deste efeito em relação à Amostra 15, mas este resultado é semelhante para as demais amostras.



**Figura 61:** Comparação entre as correlações medidas nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 14.

Ainda assim, pode-se considerar que houve uma melhoria em relação à presença de conectividade, principalmente em rochas de baixa porosidade e à reprodução da distribuição de tamanho de poros, uma vez que as reconstruções utilizando o método OSA apresentaram poros maiores do que as utilizando os demais métodos.

### 5.1.3 Tempo computacional

O método OSA pode obter melhores resultados com a otimização de outros parâmetros complementares, como foi feito com o método PSA, porém, deve-se considerar o tempo computacional para a reconstrução de uma microestrutura. A Tabela 9 expõe os tempos

computacionais para reconstruir uma microestrutura com  $80^3$  *voxels* em um computador com um processador de frequência de processamento 1GHz.

**Tabela 9:** Tempo computacional para a reconstrução de uma microestrutura com  $80^3$  *voxels*.

Método	Tempo de processamento (s)
PSA	604.800
OSA	3.600
GT	0,2
ES	8

O método OSA é mais rápido apenas que o método PSA, mas deve-se considerar que o segundo otimiza três parâmetros, enquanto que o primeiro apenas um. Para melhorar o desempenho do OSA, se adicionaria parâmetros, o que prejudicaria ainda mais o tempo computacional.

#### 5.1.4 Uma proposta de um parâmetro mais efetivo para o método OSA

Conforme analisado neste trabalho, o método de otimização *Simulated Annealing* mostra-se capaz de otimizar parâmetros geométricos, reconstruindo microestruturas de acordo com a informação fornecida.

Em busca de melhorar o desempenho do método OSA, iniciou-se uma busca por um novo parâmetro, dada a complexidade das microestruturas das rochas em questão. Por outro lado, a inclusão de mais parâmetros a otimizar, ou mesmo de momentos de ordem superior, aumenta ainda mais um tempo computacional de processamento já excessivamente alto.

Desta forma, sugere-se a inclusão de uma seção de um momento de terceira ordem. O momento de terceira ordem é definido de acordo com a Equação 5.1.

$$C_{3p}(\vec{u}_1, \vec{u}_2) = \langle Z_p(\vec{x}) \cdot Z_p(\vec{x} + \vec{u}_1) \cdot Z_p(\vec{x} + \vec{u}_2) \rangle \quad (5.1)$$

Fazendo a hipótese de meio isotrópico, e realizando a operação para todos os deslocamentos  $u_1$  e  $u_2$  na mesma linha de  $i$ , chega-se à um momento simplificado:

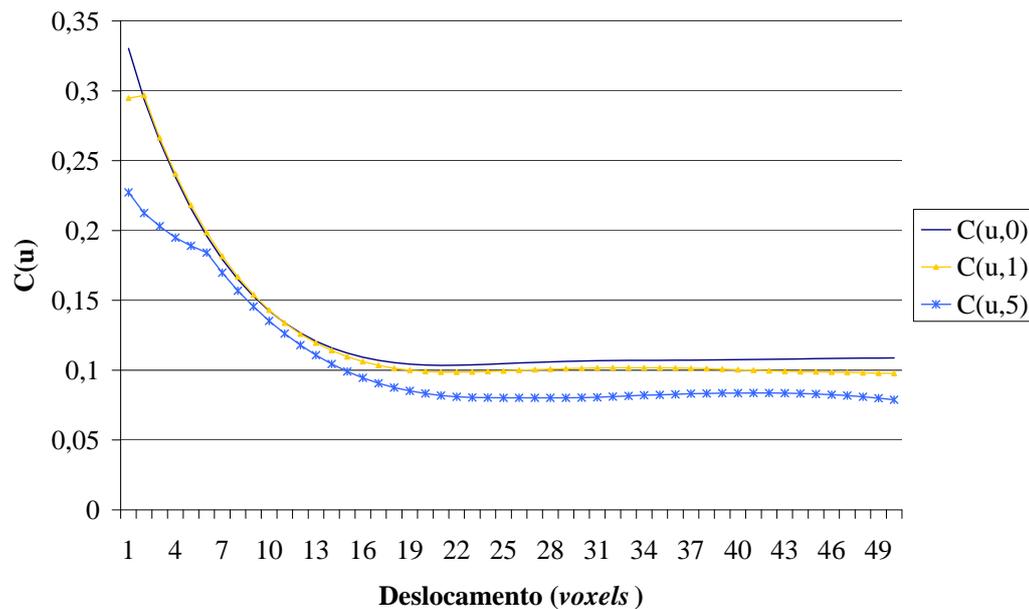
$$C_{3p}(u_1, u_2) = \langle Z_p(i, j) \cdot Z_p(i + u_1, j) \cdot Z_p(i + u_2, j) \rangle \quad (5.2)$$

A curva do momento de terceira ordem é uma curva de 3 dimensões: o próprio valor de  $C_{3p}(u_1, u_2)$ ,  $u_1$  e  $u_2$ . Porém, caso um destes deslocamentos assuma um valor fixo, toma-se apenas uma seção do momento e esta será 2D em essência. O próprio momento de segunda ordem pode ser considerado como um momento de ordem superior onde os demais pontos coincidem com o primeiro:

$$C_{3p}(u_1, 0) = C_p(u_1) \quad (5.3)$$

Desta forma, pode-se medir uma seção do momento de terceira ordem e colocar o cálculo deste no mesmo *looping* utilizado para o cálculo da função correlação, não interferindo significativamente no tempo computacional. O tempo médio para uma reconstrução com  $80^3$  *voxels* foi de 3.800s.

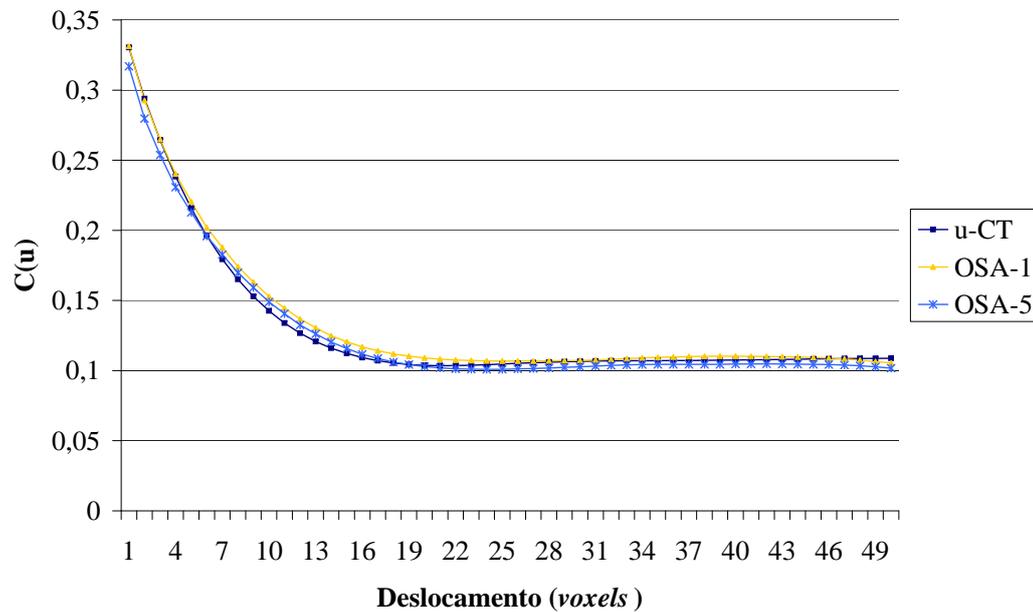
O resultado de duas medidas desta seção do momento com o terceiro ponto distando a 1 e 5 *voxels* do primeiro pode ser visto na Figura 62 em comparação à função correlação medida na imagem microtomográfica da Amostra 15.



**Figura 62:** Comparação entre a correlação e duas seções do momento de terceira ordem medidas na imagem microtomográfica da Amostra 15.

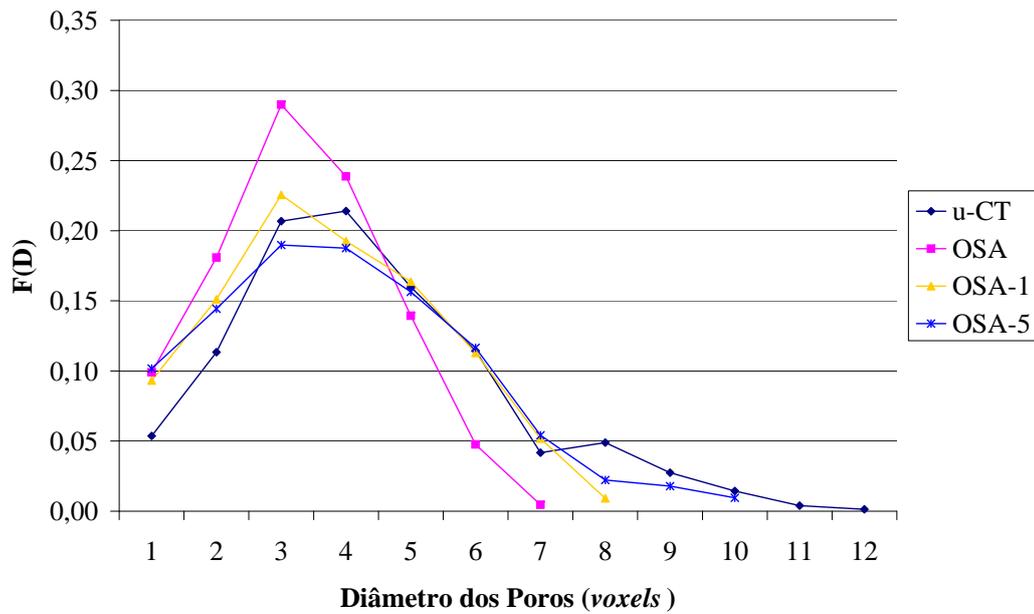
Nota-se que à medida que o terceiro ponto distancia-se mais do primeiro, a curva tende a se diferenciar da função correlação. Para os resultados seguintes, será utilizado a sigla OSA- $u$ , onde  $u$  é a distância fixa do terceiro ponto ao primeiro. Foram efetuadas duas reconstruções utilizando o método OSA com a adição desses dois parâmetros para a Amostra 15, no caso, OSA-1 e OSA-5. O resultado para a função correlação pode ser

visto na Figura 63. Os erros quadráticos em relação à correlação foram de  $1,25 \cdot 10^{-3}$  e  $1,31 \cdot 10^{-3}$ , respectivamente.



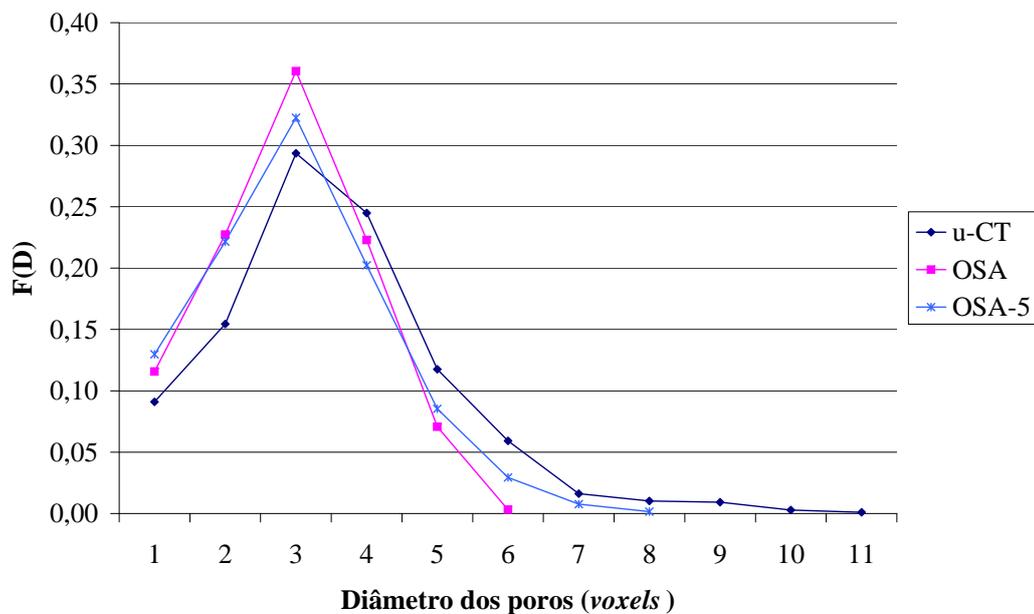
**Figura 63:** Comparação entre as correlações medidas na imagem microtomográfica da Amostra 15 e das reconstruções utilizando os deslocamentos OSA-1 e OSA-5.

Observa-se que o erro quadrático não teve desempenho superior aos demais métodos. Ainda deve-se, porém, considerar a distribuição de tamanho de poros. Pode-se ver na Figura 64 o resultado para a medida deste parâmetro.



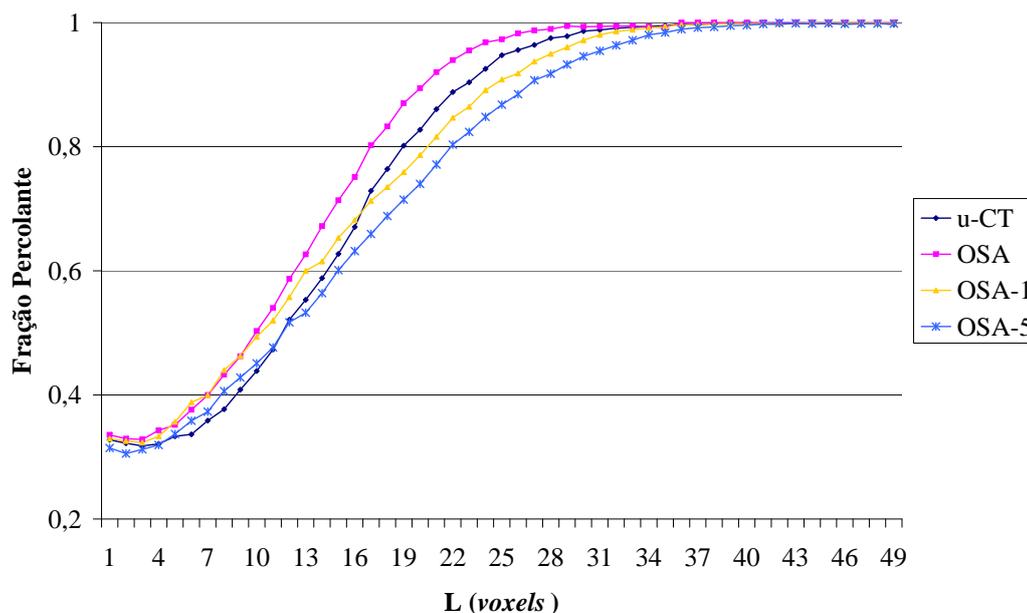
**Figura 64:** Comparação entre as distribuições de tamanho de poros medidas na imagem microtomográfica da Amostra 15 e das reconstruções OSA e utilizando os deslocamentos OSA-1 e OSA-5.

Nota-se a expressiva melhora na reprodução da distribuição de tamanho de poros em relação ao método OSA. Observa-se, em especial, a presença de diâmetros maiores à medida que se aumentou a distância entre o terceiro e primeiro pontos. Este fato se repetiu com outras reconstruções realizadas, como a apresentada na Figura 65, da Amostra 11.



**Figura 65:** Comparação entre as distribuições de tamanho de poros medidas na imagem microtomográfica da Amostra 11 e das reconstruções OSA e utilizando o deslocamento OSA-5.

Também foi analisado o parâmetro fração percolante  $e$ , da mesma forma que a distribuição de tamanho de poros, este apresentou uma melhoria em relação ao método OSA convencional. Nota-se na Figura 66 que as curvas de fração percolante utilizando o terceiro ponto se aproximaram mais da curva original do que a medida na reconstrução utilizando apenas o OSA. As curvas, porém, ainda não se apresentaram perfeitamente ajustadas, e este assunto deve ser tema de pesquisas futuras para definir, por exemplo, qual a melhor localização do terceiro ponto em relação ao primeiro.



**Figura 66:** Comparação entre as frações percolantes medidas na imagem microtomográfica da Amostra 15 e das reconstruções OSA e utilizando os deslocamentos OSA-1 e OSA-5.

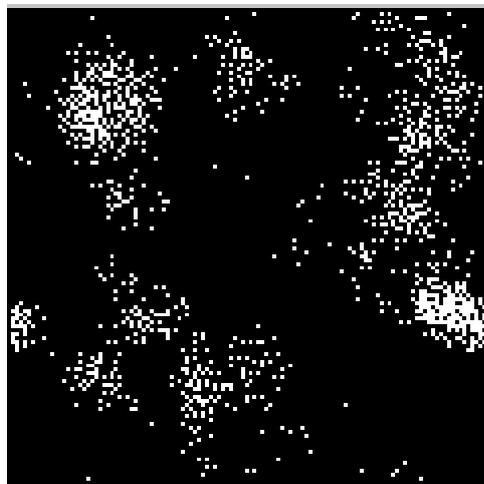
Estes resultados foram semelhantes para as demais amostras e indicam que a adição do novo parâmetro oferece melhoria de qualidade à microestrutura e deve ser tema de pesquisas futuras.

## 5.2 Determinação de propriedades físicas

Também se analisou a determinação das propriedades físicas permeabilidade intrínseca e pressão capilar por intrusão de mercúrio. Estes resultados foram obtidos nas imagens microtomográficas e suas respectivas reconstruções 3D.

### 5.2.1 Determinação de Permeabilidade Intrínseca

Foram efetuadas simulações de permeabilidade nas microestruturas reconstruídas e nas suas respectivas imagens microtomográficas utilizando o método *Lattice-Boltzmann* (LBM) apresentado por [SANTOS et al., 2002]. Os resultados são apresentados na Tabela 10. Utilizou-se o Fator de Amplificação do método GT que possuiu melhor distribuição de tamanho de poros, uma vez que mesmo mantendo a função correlação, é possível ocorrer resultados como o apresentado na Figura 67, para a Amostra 12, que apresentam porosidade conectada na vizinhança 26, mas são inviáveis para a simulação de permeabilidade utilizando o método adotado. O método PSA não foi analisado, dado o seu baixo desempenho em relação à distribuição de tamanho de poros.



**Figura 67:** Reconstrução da Amostra 12 utilizando o método GT(1), ilustrando os *pixels* isolados que inviabilizam a determinação da permeabilidade utilizando o método apresentado por [SANTOS et al., 2002].

**Tabela 10:** Resultados das simulações de permeabilidade absoluta nas reconstruções de 5 amostras de rocha reservatório e suas imagens microtomográficas utilizando o método LBM apresentado por [SANTOS et al., 2002].

Amostra	Permeabilidade (mD)			
	OSA	GT-Melhor	ES	$\mu$ -CT
11	222	1 (1)	120	8
12	577	93 (2)	165	226
13	825	1 (3)	34	1.022
14	1.215	565 (1)	970	1.347
15	1.779	1.829 (1)	384	4.223

O parâmetro permeabilidade deve ser analisado com um cuidado particular. As determinações computacionais desta propriedade apresentam uma grande variação no seu resultado. Desta forma, é de maior importância a ordem de grandeza do resultado final do que seu valor propriamente dito.

Pode-se observar o fraco desempenho do método GT em relação aos demais. Isto é justificado pela baixa capacidade deste método em conservar a distribuição de tamanho de poros. Os poros gerados pelo método GT, em sua maioria, são de diâmetros menores do que os gerados pelos demais métodos de reconstrução ou do que os medidos na imagem microtomográfica das amostras. Nota-se, também, que para a Amostra 11, o método GT apresentou um bom resultado, mas deve-se considerar que a reconstrução apresentou baixa porosidade conectada, o que diminui sua representatividade e invalidou o resultado.

Os métodos OSA e ES obtiveram melhor desempenho do que o GT, gerando uma maior conectividade e, excetuando a amostra 15, resultando em permeabilidades mais próximas dos resultados da imagem microtomográfica.

Estes resultados indicam que a qualidade de uma reconstrução e, conseqüentemente, a determinação da permeabilidade dependem não apenas de um, mas de um conjunto de parâmetros, dentre os quais estão a correlação (parâmetro de organização espacial dos elementos da microestrutura), a distribuição de tamanho de poros (define os diâmetros dos elementos da microestrutura) e a fração percolante (indicador de conectividade entre os elementos).

Todos os métodos conseguiram, com pouca margem de erro, reproduzir a função correlação, então deve-se analisar os demais parâmetros. Em especial, pode-se observar

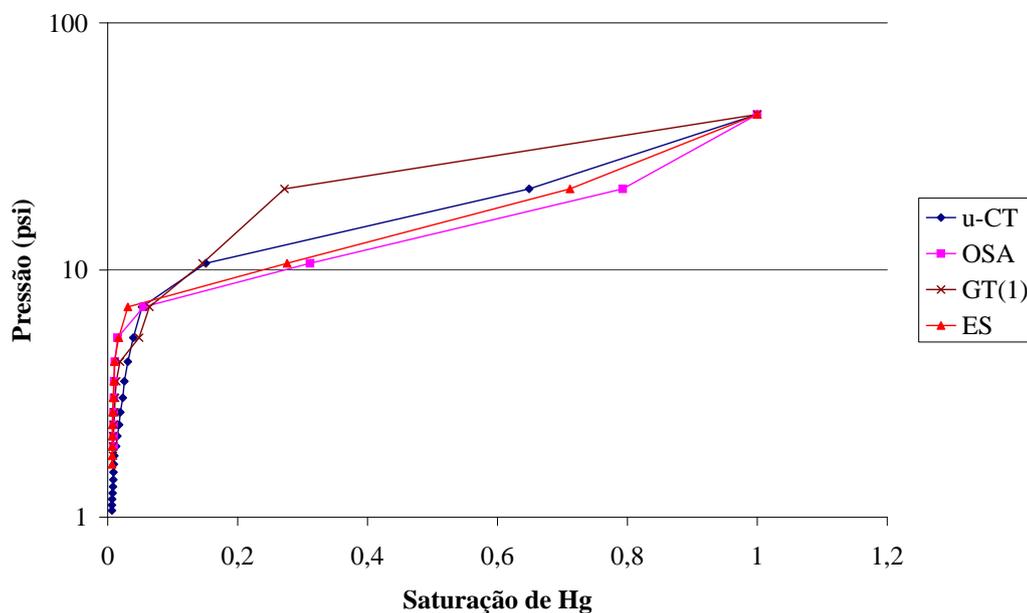
na amostra 15, que o método GT conseguiu reproduzir a curva de fração percolante com menor exatidão que o OSA, mas ao se determinar a permeabilidade absoluta, o resultado foi mais próximo da imagem microtomográfica do que o OSA. Neste caso, a distribuição de tamanho de poros, melhor reproduzida pelo método GT, foi mais determinante.

Os métodos ES e OSA, por sua vez, sempre geraram mais conectividade do que o método GT, e que as próprias imagens microtomográficas, mas não conseguiram gerar poros de diâmetros tão grandes quanto os presentes nas imagens microtomográficas. Este parâmetro mostrou-se determinante para as amostras de porosidades média a alta, enquanto que para as amostras de baixa porosidade, foi mais importante a forma em que os poros estavam conectados.

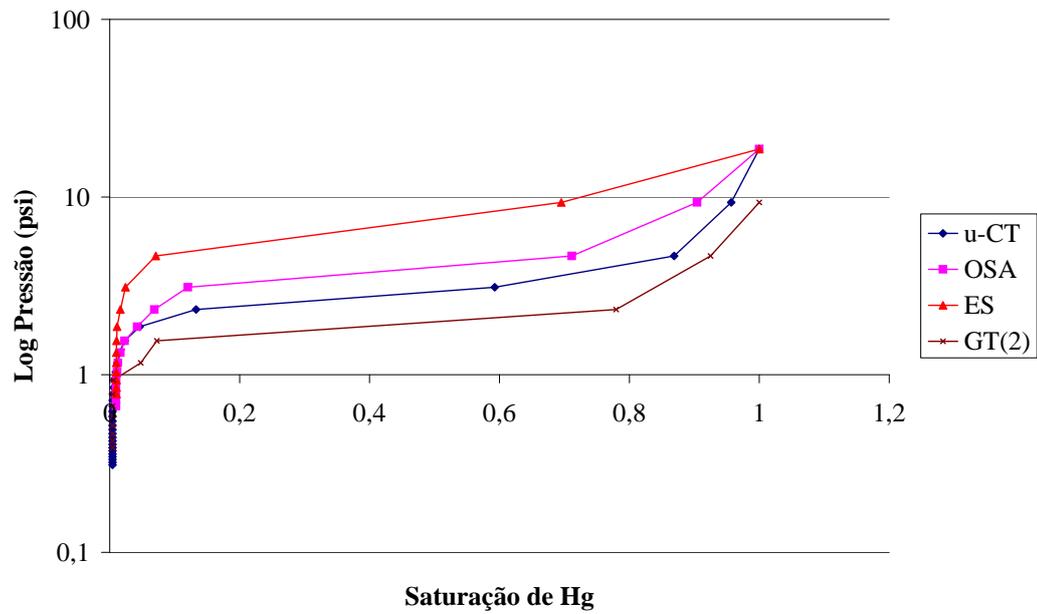
### 5.2.2 Determinação de Pressão Capilar por Intrusão de mercúrio

O método utilizado para simular a pressão capilar por intrusão de mercúrio foi o apresentado por [MAGNANI et al., 2000], baseado em técnicas de morfologia matemática.

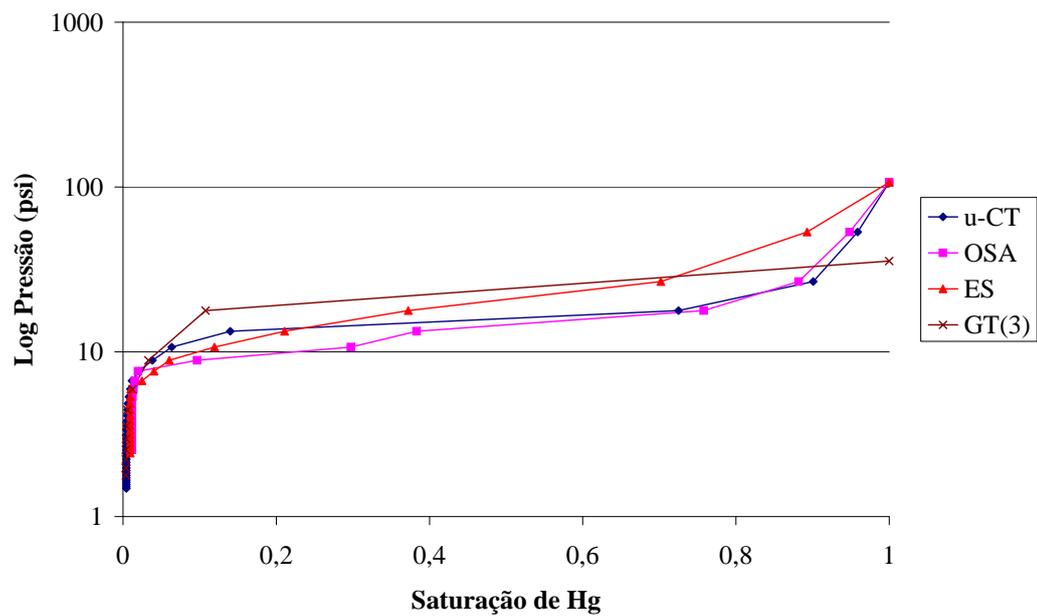
Os resultados das simulações de intrusão de mercúrio para as cinco amostras analisadas neste trabalho encontram-se expostos nas Figuras 68 a 72.



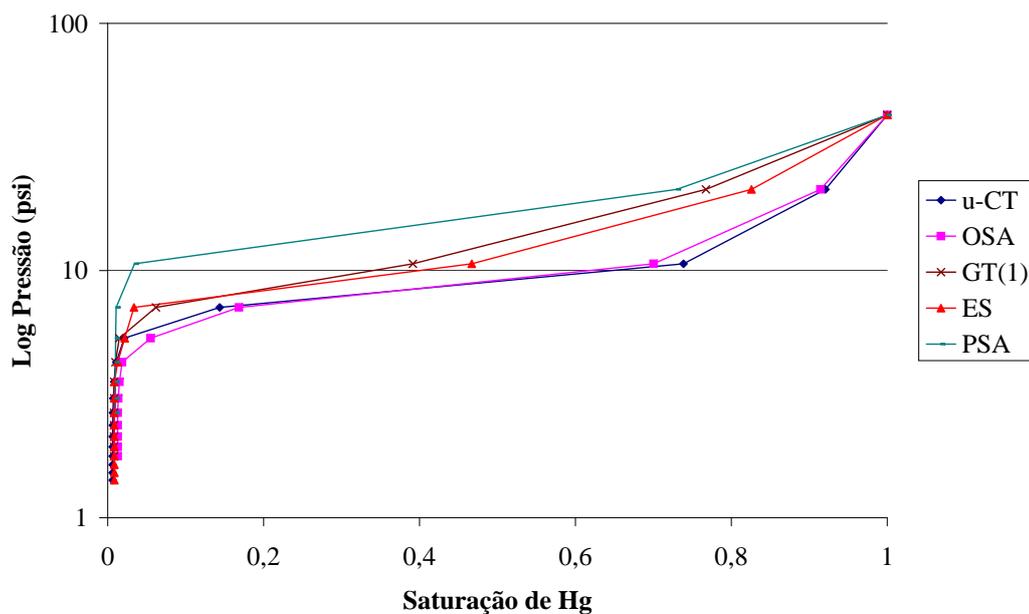
**Figura 68:** Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 11.



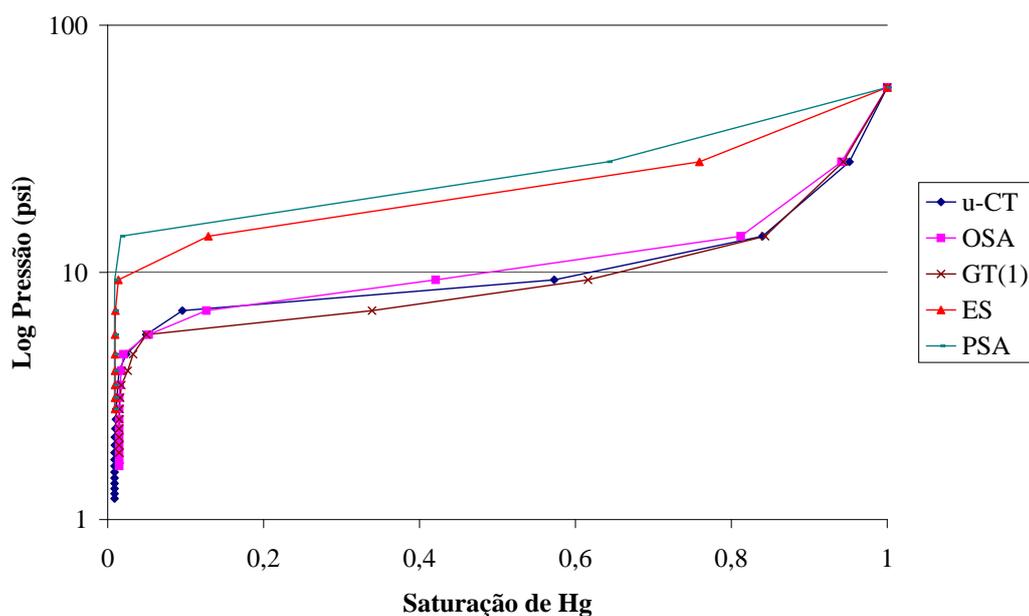
**Figura 69:** Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 12.



**Figura 70:** Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 13.



**Figura 71:** Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 14.



**Figura 72:** Simulação de intrusão de mercúrio nas reconstruções e na imagem microtomográfica da amostra 15.

Pode-se observar que as reconstruções que conseguiram reproduzir os poros de maior tamanho para cada amostra foram as que melhor representaram a curva de intrusão de mercúrio simulada nas imagens microtomográficas. Com exceção da amostra 11, cujas reconstruções utilizando os métodos ES e OSA apresentaram uma conectividade medida pela fração percolante muito maior do que a medida na imagem microtomográfica e o

método GT não conseguiu reproduzir adequadamente a microestrutura, todas as outras medidas seguiram este padrão.

Justifica-se esse fato, dada a proximidade do erro quadrático em relação à função correlação para a maioria das reconstruções, que estão entre  $10^{-3}$  e  $10^{-5}$ . Este erro mostra que as reconstruções estão organizadas espacialmente de forma muito semelhante, diferindo entre si apenas através de medidas que possuam outras informações além da função correlação, por exemplo, a distribuição de tamanho de poros, e a própria fração percolante. Considerando que as reconstruções possuem organização espacial semelhante, o fator determinante para uma simulação adequada de intrusão de mercúrio pelo método de [MAGNANI et al., 2000] passa a ser a distribuição de tamanho de poros. Em nenhuma reconstrução foi possível conservar a distribuição de tamanho de poros completamente, mas observa-se que as reconstruções que apresentaram curvas de intrusão de mercúrio mais adequadas, foram as que melhor reproduziram este parâmetro.

Para três casos (Amostras 12-14) dos cinco, o método OSA melhor representou a curva de intrusão de mercúrio. O método GT representou melhor a amostra 15, apesar da proximidade entre os dois, enquanto o ES a amostra 11.

## 6 Conclusão

Conforme os resultados e as análises apresentados neste documento, conclui-se que:

Dada a complexidade das microestruturas das rochas reservatório de petróleo, a função correlação por si só não apresenta uma quantidade de informação suficiente para reconstruir uma microestrutura de maneira satisfatória, principalmente para as rochas de baixa porosidade. Estes resultados confirmam os expostos por OKABE; BLUNT [2004]. É necessário conservar momentos de ordem superior ou outros parâmetros auxiliares, como a distribuição de corda linear e a fração de células percolantes para obter-se uma reconstrução que represente a rocha original.

Apresentou-se uma proposta de correção de distribuição de tamanho de grãos de 2D para 3D. Esta correção modelou a distribuição através de uma equação com ajuste de suas variáveis pela técnica de otimização de *Simulated Annealing*. A correção não pôde ser utilizada neste trabalho, devido a problemas na distribuição 2D através de análise de imagens. Como a máscara utilizada para a operação de abertura considera o grão esférico, o que não ocorre na prática, os grãos medidos em 2D apresentaram-se maiores que os medidos em 3D, o que inviabilizou o uso da correção proposta.

Foram analisados dois parâmetros geométricos para complementar a correlação: a distribuição de corda linear, com o objetivo de manter a conectividade a curtas distâncias, e a distribuição de IDF, com o propósito de conservar a distribuição de tamanho de poros da microestrutura, porém ambos os parâmetros não apresentaram resultados satisfatórios em conservar a conectividade da fase poro na reconstrução resultante.

Apresentou-se dois métodos de reconstrução baseados no método de otimização *Simulated Annealing*: o PSA, baseado na movimentação de *pixels*, e o OSA, que movimenta esferas. Ambos os métodos visaram suprir deficiências dos métodos atuais em preservar a conectividade em longa distância para meios com forte organização espacial, o que pode acontecer, por exemplo, em rochas com baixa porosidade e alta permeabilidade intrínseca.

O método PSA foi capaz de reconstruir estruturas sintéticas com formas altamente organizadas, como quadrados ou cubos, através dos parâmetros correlação, distribuição de corda linear e distribuição de IDF, porém não se mostrou eficaz para a reconstrução

de rochas reservatório, visto que a reconstrução não preservou a conectividade, além do fraco desempenho em reproduzir a distribuição de tamanho de poros, apesar de conservar a distribuição de IDF. Além disso, o tempo computacional deste método foi muito superior ao do método OSA, inviabilizando sua aplicação para a reconstrução de rochas reservatório.

O método OSA apresentou melhorias em relação aos demais métodos para reconstruir rochas reservatório, principalmente no parâmetro distribuição de tamanho de poros, no qual melhor reproduziu os poros de maior diâmetro do que os demais métodos, e para a reconstrução com boa conectividade de amostras de porosidade inferior a 15%. As medidas de fração percolante foram mais próximas às medidas nas microtomografias para 3 das 5 amostras utilizadas neste trabalho. Além disso, este método teve um bom resultado para a determinação da propriedade física Pressão capilar por intrusão de mercúrio, se aproximando da mesma propriedade medida na imagem microtomográfica das amostras.

Foi realizada uma extensa análise de parâmetros geométricos para validar as reconstruções efetuadas usando ambos os métodos em relação aos métodos de reconstrução Gaussiana Truncada (GT) e Esferas Sobrepostas (ES). Os parâmetros geométricos comparados foram a função correlação, distribuição de tamanho de poros e fração percolante.

Observou-se que o conjunto dos três parâmetros geométricos previamente citados deve ser analisado para verificar qual é o melhor método de reconstrução a utilizar de forma a representar adequadamente a microestrutura da rocha reservatório na qual se deseja determinar as propriedades físicas. A distribuição de tamanho de poros foi um parâmetro importante na determinação destas propriedades, como pôde-se ver nos resultados apresentados, uma vez que as reconstruções que, mesmo reproduzindo a função correlação, apresentaram poros demasiadamente pequenos, não apresentaram bons resultados nas determinações de propriedades físicas. Para as amostras utilizadas neste trabalho, o método OSA também mostrou ser o mais adequado, pela combinação dos três parâmetros, principalmente para amostras de baixas porosidades.

## 6.1 **Trabalhos Futuros**

Como trabalhos futuros, sugere-se:

- A aplicação do método PSA para a reconstrução de estruturas mais organizadas, como fibras. O método apresentou bons resultados para reconstruir estruturas com grande organização, como os quadrados apresentados na Figura 26.
- Para o método OSA, sugere-se a busca por um novo parâmetro além da função

correlação. Este parâmetro pode ser uma parte de um momento de ordem superior, por exemplo, adicionar um terceiro ponto fixo, em vez de com deslocamento variável. Esse terceiro ponto pode ser adicionado no mesmo *looping* utilizado para o cálculo da função correlação sem um aumento considerável no tempo de processamento. Foram feitos estudos preliminares que indicam que a adição deste ponto melhora a reprodução da fração percolante e da distribuição de tamanho de poros. Deve-se também, pesquisar qual a melhor distância para esse terceiro ponto em relação ao primeiro.

- Em relação à correção da distribuição de tamanho de grãos, pode-se verificar como alterações na métrica da morfologia matemática, ou na forma da máscara utilizada na métrica, influenciam a medida da distribuição de tamanho de grãos 2D e 3D. Pode-se também utilizar operadores condicionais de morfologia matemática, como os propostas por [REES; JONES, 1995] ou morfologia matemática *fuzzy*, apresentada por [BLOCH; MAITRE, 1994]. Além disso, foram consideradas apenas equações de curvas unimodais e não simétricas, mas a metodologia pode ser aplicada também a distribuições bimodais.

# *Referências*

- AARTS, E.; LAARHOVEN, P. van. A new polynomial-time cooling schedule. In: *Proceedings of IEEE ICCAD-85*. Santa Clara-CA: [s.n.], 1985. p. 206–208.
- ABRAMSON, D.; DANG, H.; KRISNAMOORTHY, M. Simulated annealing cooling schedules for the school timetabling problem. *Asia-Pacific Journal of Operational Research*, v. 16, p. 1–22, 1999.
- ADLER, P. M.; JACQUIN, C. G.; QUIBLIER, J. A. Flow in simulated porous media. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 16, n. 4, p. 691–712, July-August 1990. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6V45-47YSC2D-B3/1/821275a60198f9d30787df95d8314c80>>.
- APPOLONI, C.; RODRIGUES, C.; FERNANDES, C. Porous microstructure characterization of a sandstone reservoir using high-resolution x-ray microtomography. In: *2005 International Symposium of the Society of Core Analysts*. [S.l.: s.n.], 2005.
- APPOLONI, C. R.; MELQUIADES, F. L. Interação da radiação eletromagnética com a matéria. Texto Experimental para a Disciplina de Física Nuclear Universidade Estadual de Londrina-PR. 1997.
- ARNS, C. et al. Pore-scale characterization of carbonates using x-ray microtomography. *SPE Journal*, -, p. –, September 2005.
- BAIN, L.; ENGLEHARDT, M. *Introduction to Probability and Mathematical Statistics*. Belmont, CA: Duxbury Press, 1992.
- BEKRI, S. et al. Electrical resistivity index in multiphase flow through porous media. *Transport in Porous Media*, v. 51, p. 41–65, 2003.
- BEKRI, S. et al. Pore geometry and transport properties in north sea chalk. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 25, n. 3-4, p. 107–134, March 2000.
- BISWAL, B.; MANWART, C.; HILFER, R. Threedimwnsional local porosity analysis of porous media. *Physica A*, v. 266, p. 307–311, 1998.
- BLOCH, I.; MAITRE, H. Fuzzy mathematical morphology. *Annals of Mathematics and Artificial Intelligence*, v. 10, p. 55–84, 1994.
- CERNY, V. Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm. *Journal of Optimization Theory and Application*, v. 45, p. 41–51, 1985.
- CHASSERY, J.; MONTANVERT, A. *Géométrie Discrete en Analyse d Images*. [S.l.]: Hermes, 1991.
- COSTER, M.; CHERMANT, J. *Precis Danalyse Dimages*. [S.l.]: Presses du CNRS, 1989.

- COUCH, L. W. *Digital and Analog Communications Systems*. [S.l.]: Prentice Hall, 2001.
- CULE, D.; TORQUATO, S. Generating random media from limited microstructural information via stochastic optimization. *Journal of Applied Physics*, v. 86, n. 6, p. 3428–3437, 1999.
- DEHOFF, R. T.; RHINES, F. N. *Quantitative Microscopy*. [S.l.]: McGraw-Hill Book Company, 1968.
- EDWARDS, S. F.; WILKINSON, D. R. The deduction of the probability distribution of sphere sizes in a random assembly from measurements on a cross-section through the assembly. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 13, p. 209–211, 1980.
- FERNANDES, C. Monografia para o concurso de professor adjunto do departamento de engenharia mecânica da ufsc na Área de caracterização de microestruturas com técnicas de análise de imagens. Florianópolis-SC. 2002.
- FERNANDES, C. P. *Caracterização Morfológica de Espaços Porosos: Reconstrução Multiescala e Simulação de Processos de Invasão de Fluidos Não-Molhantes*. Tese (Tese de Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis-SC, 1994.
- FREDLUND, M. D.; FREDLUND, D.; WILSON, G. W. An equation to represent grain-size distribution. *Canadian Geotechnical Journal*, v. 37, p. 817–827, 2000.
- GASPARI, H. de. *Caracterização de microestruturas porosas através de modelos computacionais: permeabilidade intrínseca e fator de formação*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2006.
- GEMAN, S.; GEMAN, D. Stochastic relaxation, gibbs distributions, and the bayesian restoration of images. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, v. 6, p. 721–741, 1984.
- GONZALEZ, R. C.; WOODS, R. E. *Digital Image Processing, 2nd Edition*. [S.l.]: Prentice Hall, 2002.
- HAJEK, B. A tutorial survey of theory and applications of simulated annealing. In: *Proceedings of 24th IEEE Conference Decision and Control*. Ft. Lauderdale, FL: [s.n.], 1985. p. 755–760.
- HAJEK, B. Cooling schedules for optimal annealing. *Mathematics of Operations Research*, v. 13, n. 2, p. 311–329, 1988.
- HASHIMOTO, A. et al. Estimation of particle size distribution in materials in the case of spheroidal particles using quantitative microscopy. *Journal of Testing and Evaluation*, v. 28, n. 5, p. 367–377, 2000.
- HILFER, R. Local porosity theory and stochastic reconstruction for porous media. *Statistical Physics and Spatial Statistics*, Springer-Verlag, v. 554, p. 203241, 2000.
- HILFER, R. Review on scale dependent characterization of microstructure of porous media. *Transport in Porous Media*, v. 46, p. 373, 2002.
- KIRKPATRICK, S.; GELATT, C.; VECCHI, M. Optimization by simulated annealing. *Science*, v. 220, p. 45–54, 1983.

- LIANG, Z. *Computer Generation and Application of 3-D Reconstructed Porous Structure: From 2-D Images to the Prediction of Permeability*. Tese (Tese de Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis-SC, 1997.
- LIANG, Z. et al. A reconstruction technique for three-dimensional porous media using image analysis and fourier transform. *Journal of Petroleum Science*, v. 21, p. 273–283, 2000.
- LIANG, Z.; IOANNIDIS, M.; CHATZIS, I. Permeability and electrical conductivity of porous media from 3d stochastic replicas of the microstructure. *Chemical Engineering Science*, v. 55, p. 5247–5262, 2000.
- LUNDY, M.; MEES, A. Convergence of an annealing algorithm. *Mathematical Programming*, v. 34, p. 111–124, 1986.
- MAGNANI, F. et al. Modelling two-phase equilibrium in three-dimensional porous microstructures. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 26, p. 99–123, 2000.
- MANWART, C.; TORQUATO, S.; HILFER, R. Stochastic reconstruction of sandstones. *Physical Review E*, v. 62, n. 1, p. 893–899, July 2000.
- METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics*, v. 21, p. 1087–1092, 1953.
- MOSCHETTO, C. *Caractérisation de la structure poreuse des matériaux par analyse d'images: apport des distances discrètes à la morphologie mathématique*. [S.l.], 1991.
- NOGUEIRA, A. C. *CARACTERIZAÇÃO DA MICROESTRUTURA DE MATERIAIS POROSOS POR MICROTOMOGRÁFIA DE RAIOS X E TRANSMISSÃO DE RAIOS GAMA*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Londrina, 2006.
- OKABE, H.; BLUNT, M. Multiple-point statistics to generate geologically realistic pore-space representations. In: *paper presented at the International Symposium of the Society of Core Analysts held in Pau, France*. [S.l.: s.n.], 2003.
- OKABE, H.; BLUNT, M. Prediction of permeability for porous media reconstructed using multiple-point statistics. *Physical Review E*, v. 70, p. 1–10, 2004.
- OTTEN, R.; GINNEKEN, L. *The Annealing Algorithm*. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, 1989.
- OUENES, A.; BHAGAVAN, S. Application of simulated annealing and other global optimization methods to reservoir description: Myths and realities. In: *Proceedings of the SPE 69th Annual Technical Conference and Exhibition hold*. [S.l.: s.n.], 1994. p. 547–561.
- PAPOULIS, A. *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes, 3rd Edition*. [S.l.]: Polytechnic Institute of New York, 1991.
- PARDO-IGÚZQUIZA, E.; CHICA-OLMO, M. The fourier integral method: an efficient spectral method for simulation of random fields. *Mathematical Geology*, v. 25, n. 2, p. 177–217, 1993.
- POLITIS, M. et al. A hybrid process-based and stochastic reconstruction method of porous media. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 110, p. 92–99, 2008.

- QIAN, Y. H.; D. dHumieres; P., L. Lattice bgk models for navier- stokes equation. *Europhysics Letters*, v. 17, p. 479–484, 1992.
- QUIBLIER, J. A new three-dimensional modeling technique for studying porous media. *Journal of Colloid Interface Science*, v. 98, p. 84–102, 1984.
- REES, S. J.; JONES, B. F. Conditional morphological operators for direct feature extraction and enhancement. In: IEEE 1995. *Proceedings of the Image Processing and its Applications, 4-6 July, 1995, Conference Publication*. [S.l.], 1995.
- ØREN, P.; BAKKE, S. Process based reconstruction of sandstones and predictions of transport properties. *Transport in Porous Media*, v. 46, p. 311–343, 2002.
- ØREN, P.-E.; BAKKE, S. Reconstruction of berea sandstone and pore-scale modelling of wettability effects. *Journal of Petroleum Science & Engineering*, v. 39, p. 177–199, 2003.
- RINTOUL, M. D.; TORQUATO, S. Reconstruction of the structure of dispersions. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 186, p. 467476, 1997.
- RITTER, H.; DRAKE, L. Pore-size distribution in porous materials. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 17, p. 782, 1945.
- ROCHA, W. da. *Determinação de Parâmetros Geométricos Estruturais de Espumas Cerâmicas Industriais por Transmissão de Raios Gama e Microtomografia de Raios-X*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Londrina, 2005.
- ROMEO, F.; SANGIOVANNI-VINCENTELLI, A. A theoretical framework for simulated annealing. *Algorithmica*, v. 6, p. 302–345, 1991.
- SAHAGIAN, D. L.; PROUSSEVITCH, A. A. 3d particle size distributions from 2d observations: stereology 3d particle size distributions from 2d observations: stereology. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, v. 84, p. 176–193, 1998.
- SANTOS, L. O. E. dos et al. Prediction of intrinsic permeabilities with lattice boltzmann method. In: *Proceedings of the XVIII Brazilian Congress of Mechanical Engineering*. [S.l.: s.n.], 2005.
- SANTOS, L. O. E. dos et al. Reconstrução tridimensional de microestruturas porosas com o método de esferas sobrepostas. In: *Proceedings of the ENCIT 2002, Caxambu - MG, Brazil - Paper CIT02-0449*. [S.l.: s.n.], 2002.
- SCHMIDT, V.; MCDONALD, D.; PLATT, R. Pore geometry and reservoir aspects of secondary porosity in sandstones. *Bull. Can. Pet. Geol.*, v. 25, n. 2, p. 271–290, 1977.
- SHEENAN, N.; TORQUATO, S. Generating microstructures with specified correlation functions. *Journal of Applied Physics*, v. 9, n. 1, p. 53–60, 2001.
- SIMMONS, M.; LANGSTON, P.; BURBIDGE, A. Particle and droplet size analysis from chord distributions. *Powder Technology*, v. 102, p. 7583, 1999.
- STOICAA, R. S.; GREGORIB, P.; MATEU, J. Simulated annealing and object point processes: Tools for analysis of spatial patterns. *Stochastic Processes and their Applications*, v. 115, p. 18601882, 2005.
- STREBELLE, S. Conditional simulation of complex geological structures using multiple-point statistics. *Mathematical Geology*, v. 31, p. 1–21, 2002.

- STREBELLE, S.; PAYRAZIAN, K.; CAERS, J. Modeling of a deepwater turbidite reservoir conditional to seismic data using principal component analysis and multiple-point geostatistics. *SPE Journal*, v. 8, p. 227–235, 2003.
- SUCCI, S. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. [S.l.]: Oxford University Press, 2001.
- TALUKDAR, M.; TORSÆTER, O. Reconstruction of chalk pore networks from 2d backscatter electron micrographs using a simulated annealing technique. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 33, p. 265–282, 2002.
- THIEL, E. Amélioration des distances du chanfrein. construction de la ligne médiane et décomposition des formes. Mémoire de DEA, Grenoble, Institut de Mécanique de Grenoble. 1991.
- TORQUATO, S. *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2002.
- TORQUATO, S.; KIM, I. Effective conductivity, dielectric constant, and diffusion coefficient of digitized composite media via first-passage-time equations. *Journal of Applied Physics*, v. 85, p. 1560, 1999.
- TORQUATO, S.; LU, B. Chord-length distribution for a two-phase random media. *Physical Review E*, v. 4, n. 4, p. 2950–2953, April 1993.
- VARANELLI, J. *On the Acceleration of Simulated Annealing*. Tese (Doutorado) — University of Virginia, 1996.
- WASHBURN, E. The dynamics of capillary flow. *Physical Review*, v. 17, p. 273–283, 1921.
- WU, K. et al. Reconstruction of multi-scale heterogeneous porous media and their flow prediction. In: *paper presented at the International Symposium of the Society of Core Analysts held in Calgary, Canada*. [S.l.: s.n.], 2007.

# *Lista de Publicações*

## **Trabalhos publicados em anais de eventos**

Diógenes, A.N.; Nalin, D.; Fernandes, C.P.; dos Santos, L.O.E.; Philippi, P.C.; Pico, C.E. 2007. Determination Of The Intrinsic Permeability Of Microtomographic Images By The Lattice Boltzmann Method. In: 19th International Congress of Mechanical Engineering, 2007, Brasília. Proceedings of COBEM 2007, 2007.

Diógenes, A.N.; dos Santos, L.O.E.; Fernandes, C.P. 2007. Porous Media Microstructure Reconstruction Using Pixel-Based And Object-Based Simulated Annealing Comparison With Other Reconstruction Methods. In: X Encontro de Modelagem Computacional, 2007, Nova Friburgo. Proceedings do X Encontro de Modelagem Computacional, 2007.

Diógenes, A.N.; Appoloni, C.R.; dos Santos, L.O.E.; Fernandes, C.P. 2008. Porous Media Microstructure Reconstruction Using Pixel-Based And Object-Based Simulated Annealing Comparison With Other Reconstruction Methods. In: 33th International Geological Congress, 2008, Oslo, Norway. Proceedings of the 33th IGC, 2008.

Diógenes, A.N.; Appoloni, C.R.; dos Santos, L.O.E.; Fernandes, C.P. 2008. Porous Media Microstructure Reconstruction Using Pixel-Based And Object-Based Simulated Annealing Comparison With Other Reconstruction Methods. In: Rio Oil & Gas Expo and Conference 2008, 2008, Rio de Janeiro. Proceedings of the Rio Oil & Gas Expo and Conference 2008, 2008.

Golinski, L.; Correa, A.C.; Diógenes, A.N.; dos Santos, L.O.E.; Fernandes, C.P. 2008. Método De Correção De Distribuição De Tamanho De Grão Utilizando Simulated Annealing. In: Congresso Brasileiro de Ciência dos Materiais, 2008, Porto de Galinhas. Proceedings of 18<sup>o</sup> CBECIMAT, 2008.

Diógenes, A.N.; Appoloni, C.R.; dos Santos, L.O.E.; Fernandes, C.P. 2008. Método De Reconstrução De Meios Porosos Através De Simulated Annealing. Reunião Anual de Avaliação - RAA. Encontro de PRHs da Região Sul. Gramado - RS.

## **Trabalhos publicados em periódicos**

Diógenes, A.N.; dos Santos, L.O.E.; Fernandes, C.P.; Nogueira, A.C.; Appoloni, C.R.

Porous Media Microstructure Reconstruction Using Pixel-Based And Object-Based Simulated Annealing Comparison With Other Reconstruction Methods. *Journal of Porous Media*, 2009.(Em processo de revisão)

# *APÊNDICE A – Nocões de geometria discreta e morfologia matemática*

## A.1 Conceitos de Geometria Discreta

Para a manipulação de imagens digitais, devemos definir vários conceitos no espaço discreto, como métricas e relações de vizinhança entre os *pixels*. A seguir são expostos conceitos fundamentais para o trabalho com imagens digitais.

### A.1.1 Métricas $d_4$ e $d_8$

Define-se uma métrica (relação definida positiva, simétrica e respeitando a desigualdade triangular) chamada  $d_4$  (*City Block Distance*, métrica do quarteirão), cuja distância para dois *pixels*  $P(i_P, j_P)$  e  $Q(i_Q, j_Q)$  é dada por:

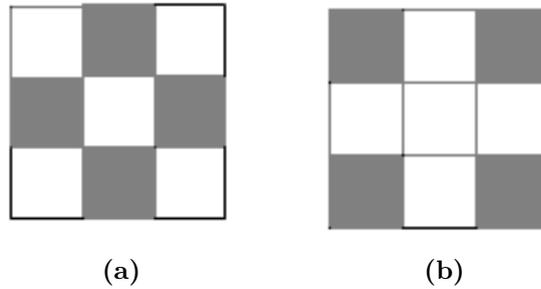
$$d_4(P, Q) = |i_p - i_q| + |j_p - j_q| \quad (\text{A.1})$$

Os quatro *pixels*  $Q$ , distintos de  $P$  que verificam  $d_4(P, Q) \leq 1$  são os chamados vizinhos diretos de  $P$ , ou a 4-vizinhança de  $P$ , veja-se Fig. 73a.

Define-se uma outra métrica designada  $d_8$  (*Chessboard Distance*, métrica do tabuleiro de xadrez), dada por:

$$d_8(P, Q) = \max(|i_p - i_q|, |j_p - j_q|) \quad (\text{A.2})$$

Os oito *pixels*  $Q$  distintos de  $P$ , que verificam  $d_8(P, Q) \leq 1$  constituem a 8-vizinhança de  $P$ : quatro são os vizinhos diretos como na métrica  $d_4$  e os outros quatro são vizinhos indiretos (com adjacência pela diagonal), veja-se Fig. 73b.



**Figura 73:** Representação das vizinhanças: (a) vizinhos diretos de P (em cinza) e (b) vizinhos indiretos de P (em cinza).

As propriedades que devem ser respeitadas pelas métricas são:

- definida positiva:  $d(P, Q) \geq 0, d(P, Q) = 0 \Leftrightarrow P = Q$
- simetria:  $d(P, Q) = d(Q, P) \forall (P, Q)$
- desigualdade triangular:  $d(P, R) \leq d(P, Q) + d(Q, R), \forall (P, Q, R)$

Estas definições de *pixels* adjacentes no espaço discreto conduzem às noções de caminhos conexos, componentes conexos, arcos e curvas. Para a introdução dessas noções, considera-se uma imagem em um suporte discreto, representada por uma matriz  $Im(i, j)$  que assume apenas os valores 0 e 1. Trata-se portanto da representação de uma imagem binária em uma malha quadrada.

### A.1.2 Aproximação discreta da distância euclidiana - métricas de chanfro

Na seção A.1 as métricas  $d_4$  e a  $d_8$  foram definidas, que são as métricas de base para o espaço discreto  $Z^2$ . Estas métricas fornecem as noções de *pixels* adjacentes, implicando em uma noção de conexão. As distâncias entre dois *pixels*  $P$  e  $Q$  associadas  $d_4$  e a  $d_8$  apresentam a característica de poderem ser calculadas a partir do número de deslocamentos elementares necessários para ir de  $P$  até  $Q$ , através de um dos mais curtos caminhos ligando estes *pixels*. Estes deslocamentos elementares e os caminhos conexos estão ligados à noção de pontos adjacentes e são dependentes da métrica utilizada. Para  $d_4$  os deslocamentos se fazem pela 4-vizinhança e para  $d_8$  na 8-vizinhança. Deve ser observado que um caminho conexo entre dois *pixels*, correspondendo à distância entre os dois *pixels* sempre existe, contudo ele não é único.

Para a construção de algoritmos envolvendo cálculos de distância, torna-se útil a definição de máscaras, representando as métricas. Na Fig. 74 mostram-se as máscaras

de base para as métricas  $d_4$  e  $d_8$ , observando-se que o valor de distância para os vizinhos diretos (em  $d_4$ ) e diretos e indiretos (em  $d_8$ ), que serão chamados de ponderações locais são todos iguais a 1.

	1	
1	0	1
	1	

(a)

1	1	1
1	0	1
1	1	1

(b)

**Figura 74:** Ponderações para deslocamentos associados às métricas  $d_4$  (a) e  $d_8$  (b)

O cálculo da distância entre dois *pixels*  $P$  e  $Q$  quaisquer no espaço discreto  $Z^2$  é feito, gerando-se os valores intermediários de distância entre  $P$  e  $Q$ . A máscara é centrada em  $P$  e os *pixels* da sua vizinhança são modificados de acordo com as ponderações da métrica. O mesmo é feito para os *pixels* intermediários ainda não afetados pela máscara, indo de  $P$  a  $Q$ : o valor retido para cada *pixel* é o mínimo entre os valores da vizinhança mais a ponderação local.

Na Fig. 75 ilustra-se com um exemplo o cálculo da distância entre dois *pixels* com a métrica  $d_8$ . Se soma a máscara de deslocamento da métrica centrada no *pixel*  $q$ , se desejando calcular o valor de  $R$ .

$p$	1	2
1	1	2
2	2	$q$

(a)

c	b
a	R

(b)

**Figura 75:** Um exemplo de cálculo de distância entre dois *pixels*

Neste exemplo, calcula-se  $R$  através de:

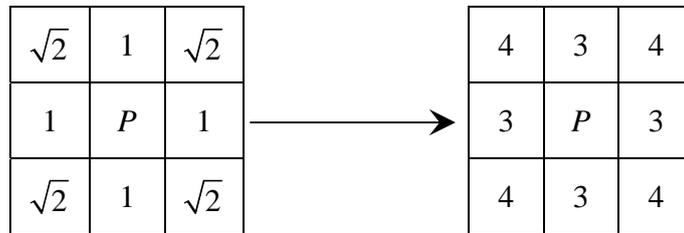
$$R = \min(a + 1, b + 1, c + 1); \quad (\text{A.3})$$

O problema associado às métricas  $d_4$  e  $d_8$  reside no fato de que os valores de distância por elas fornecidos se afastam bastante daqueles fornecidos pela distância euclidiana  $d_E$ , dada por:

$$d_E(P, Q) = ||i_p - i_q| + |j_p - j_q||^{1/2} \tag{A.4}$$

Desta forma, parece natural definir ponderações locais inteiras com valor aproximado da distância euclidiana. Para máscaras de chanfro com dois parâmetros  $a$  e  $b$ , respectivamente a ponderação para os vizinhos diretos e indiretos, procura-se aproximar  $\sqrt{2}$  por frações  $b/a$ , [THIEL, 1991; CHASSERY; MONTANVERT, 1991; MOSCHETTO, 1991].

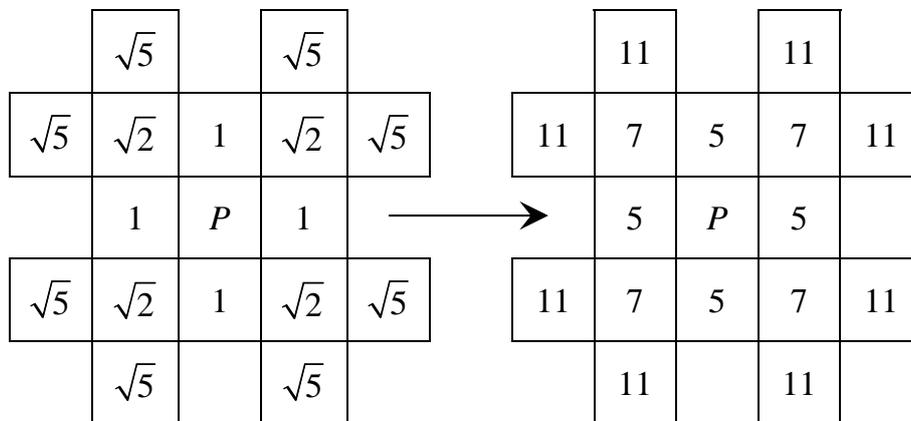
Uma ponderação bastante utilizada é  $a = 3$  e  $b = 4$ , donde vem a aproximação:  $(1, \sqrt{2}) \rightarrow (1, 4/3)$ . Esta aproximação dá origem à métrica de chanfro  $d_{3-4}$  e sua máscara de base comparada à distância Euclidiana é mostrada na Fig. 76.



**Figura 76:** Ponderações locais para a métrica  $d_{3-4}$

Chanfros envolvendo vizinhanças maiores (com parâmetros  $a$ ,  $b$  e  $c$ ) foram também propostos, como o  $d_{5-7-11}$  obtida a partir da aproximação  $(1, \sqrt{2}, \sqrt{5}) \rightarrow (1, 7/5, 11/5)$ .

Na Fig. 77 mostra-se a máscara de base para esta métrica. Um estudo bastante completo acerca de métricas de chanfro é feito em [THIEL, 1991].



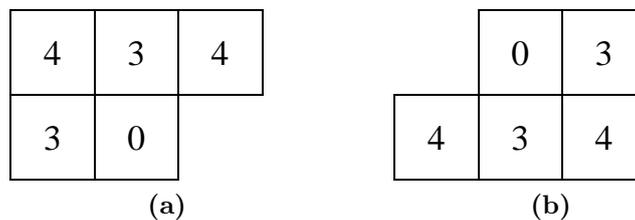
**Figura 77:** A máscara base para a métrica  $d_{5-7-11}$

### A.1.3 Imagem de distância ao fundo (IDF) e bolas de chanfro

Os conceitos de imagem de distância ao fundo e de bolas de chanfro são bastante úteis em aplicações de morfologia matemática.

Para a definição da IDF considere-se uma imagem binária. Define-se uma imagem transformada da binária onde para cada *pixel* da fase de interesse  $f$  se faz corresponder a sua distância mínima à fase complementar de acordo com a métrica utilizada. Assim, nessa codificação de imagem tem-se a informação para cada *pixel* da fase a que pertence e adicionalmente sua distância mínima à fase complementar (fundo).

A partir dos deslocamentos elementares, pode-se definir um algoritmo seqüencial para o cálculo de distâncias, que necessita de apenas duas passagens na imagem. Para tanto, as máscaras de base são decompostas em duas semi-máscaras, uma dita anterior para uma percurso na imagem “de alto a baixo e da esquerda para a direita”; a outra dita posterior servindo a um percurso “de baixo para o alto e da direita para a esquerda”. Na Fig. 78 mostram-se as duas semi-máscaras para a métrica  $d_{3-4}$ , a anterior ( $m_{d_{3-4-ant}}$ ) e a posterior ( $m_{d_{3-4-pos}}$ ). O *pixel* de posicionamento de uma semi-máscara sobre o *pixel* corrente da imagem é o de valor igual a 0.



**Figura 78:** As semi-máscaras para a métrica  $d_{3-4}$ : (a)  $m_{d_{3-4-ant}}$ , (b)

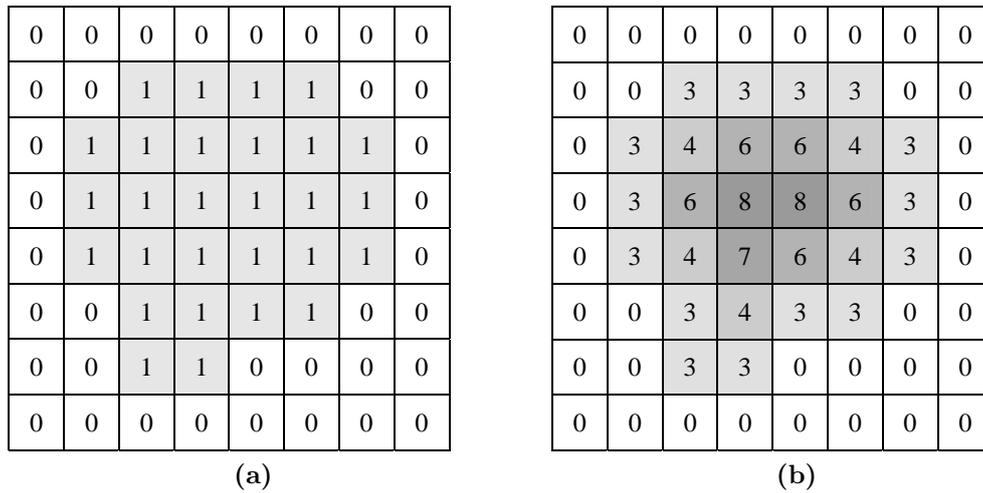
$m_{d_{3-4-pos}}$

O algoritmo seqüencial para a obtenção de IDF em uma imagem  $Im(i, j)$  de tamanho  $M \times N$  é dado por [CHASSERY; MONTANVERT, 1991].

Na Fig. 79 é mostrado um exemplo de imagem binária e sua correspondente codificada em distância ao fundo.

Para a construção de uma bola de raio  $R$  associada a uma dada métrica, pode-se utilizar o conceito de imagem de distância ao fundo. Para tanto, considera-se uma imagem de tamanho infinito onde a cada *pixel* é atribuído o valor 1, com exceção do centro a qual é dado o valor 0, correspondendo ao fundo. Calcula-se assim, a distância de cada *pixel* ao centro.

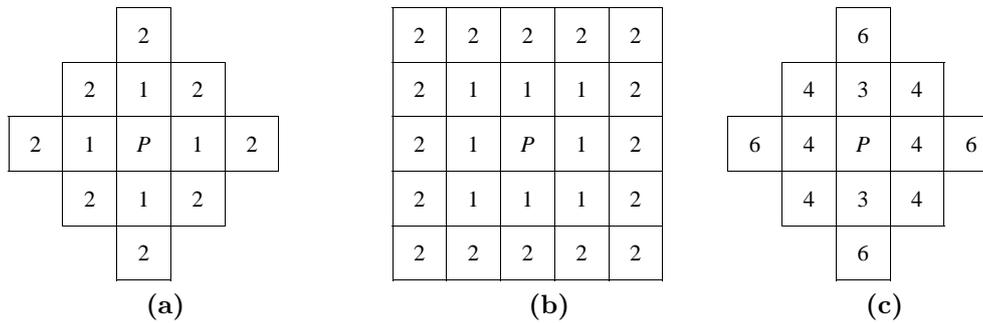
Um algoritmo para a geração das bolas é facilmente construído, sendo possível ar-



**Figura 79:** Uma imagem binária e sua codificação em IDF com métrica  $d_{3-4}$ :  
 (a) imagem original, (b) imagem resultante da transformação

mazenar as informações de *pixels* pertencentes à bola em um vetor unidimensional de tamanho  $2r + 1$ , sendo  $r$  o raio da bola [MOSCHETTO, 1991].

Na Fig. 80 mostram-se bolas de raio  $r$  igual a 2 para as métricas  $d_4$ ,  $d_8$  e  $d_{3-4}$ .



**Figura 80:** Bolas de raio  $r$  igual a 2 para as métricas  $d_4$ ,  $d_8$  e  $d_{3-4}$

Na Fig. 81 mostra-se o comportamento das bolas geradas para as métricas  $d_4$ ,  $d_8$  e  $d_{3-4}$ , que são respectivamente um paralelogramo, um quadrado e um octógono. Com a métrica  $d_{5-7-11}$  obtém-se um hexadecágono e à medida que se utilizam métricas envolvendo vizinhanças maiores, o número de lados do polígono gerado cresce, tendendo ao círculo.

Estas bolas, chamadas de elementos estruturantes na terminologia da morfologia matemática, são utilizadas como padrões para a realização de operações morfológicas como a operação de abertura, utilizada no Capítulo 2 para a determinação do tamanho de objetos em uma imagem.



**Figura 81:** Aspecto das bolas para as métricas  $d_4$ ,  $d_8$  e  $d_{3-4}$

## A.2 Noções de Morfologia Matemática

A morfologia matemática, que é fundamentada na teoria dos conjuntos, permite uma descrição da forma dos objetos de uma imagem. A idéia de base consiste em comparar os objetos da imagem com um objeto de forma conhecida chamado elemento estruturante [COSTER; CHERMANT, 1989].

A morfologia matemática tem sido utilizada para diversos processamentos de imagens tais como: segmentação de formas, detecção de contornos de objetos, obtenção de esqueletos dos objetos, etc.

Neste trabalho, o objetivo é a utilização da operação de abertura para a determinação da distribuição de tamanhos de objetos, poros e sólidos, em imagens binárias. A seguir, são definidas as operações básicas de erosão e de dilatação e a operação combinada de abertura.

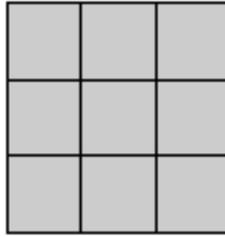
### A.2.1 Operação de Erosão

Considere-se um objeto  $X$  contido no espaço  $R^2$  e um elemento estruturante  $B$ , que sem perda de generalidade para a definição seja, por exemplo, um círculo. Define-se o erodido de  $X$  por  $B$ ,  $E^B(X)$ , como:

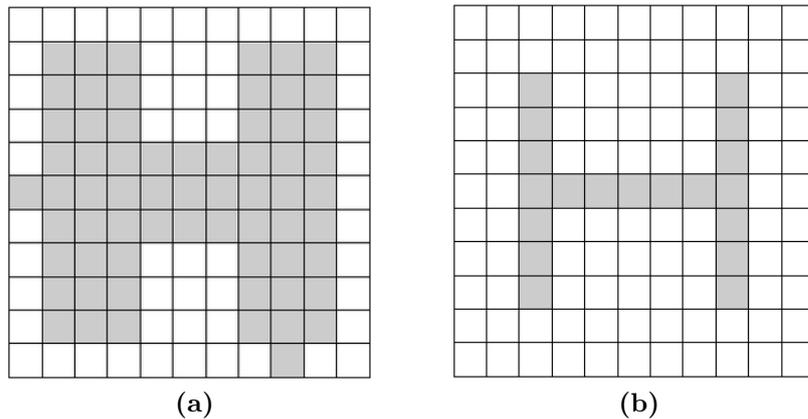
$$E^B(X) = \{x \in R^2 : B_x \subset X\} \quad (\text{A.5})$$

onde  $B_x$  denota o centro do elemento estruturante implantado em cada ponto  $\vec{x}$ .

Desta forma, para cada posição  $\vec{x}$  em  $R^2$ , o centro do elemento estruturante é implantado, e são considerados pertencentes ao objeto erodido os pontos  $\vec{x}$  tais que  $B_x$  fica completamente incluso em  $X$ . Esta mesma definição é utilizada em espaços discretos. Adotando-se o elemento estruturante exposto na Fig. 82, pode-se expor o resultado da erosão da Fig. 83a na Fig. 83b.



**Figura 82:** Elemento Estruturante  $3 \times 3$



**Figura 83:** Operação de Erosão na imagem (a) pelo elemento estruturante da Fig. 82 resultando na imagem (b).

### A.2.2 Operação de Dilatação

O dilatado de  $X$  por  $B$ ,  $D^B(X)$ , é definido como:

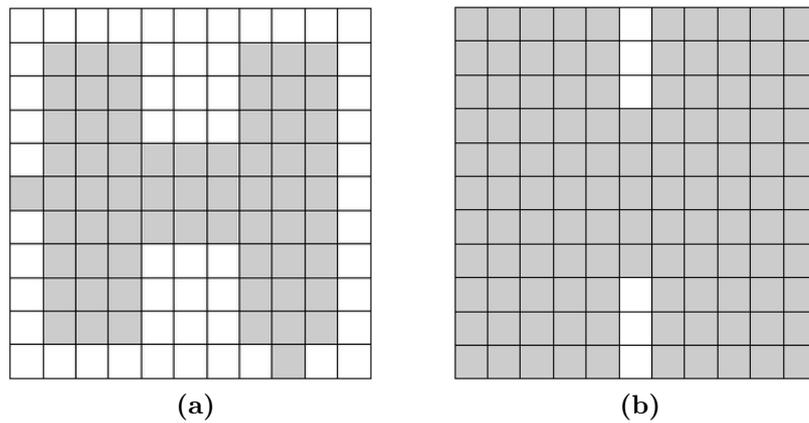
$$D^B(X) = \{x \in R^2 : B_x \cap X \neq \emptyset\} \quad (\text{A.6})$$

Assim, o objeto dilatado consiste do conjunto de pontos  $\vec{x}$  tais que o centro do elemento estruturante implantado em  $\vec{x}$  tem uma intersecção não nula com  $X$ . Na Fig. 84 ilustra-se o princípio da operação de dilatação pelo mesmo elemento estruturante já utilizado anteriormente.

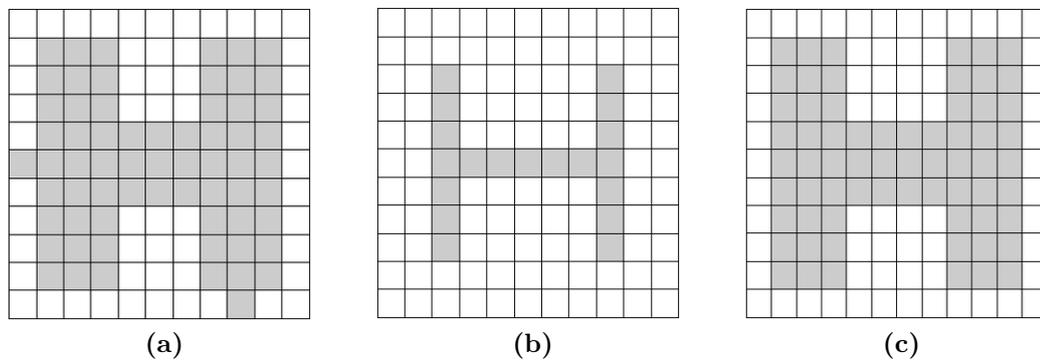
### A.2.3 Operação de Abertura

A abertura consiste de uma operação de erosão com uma dada bola sendo a imagem resultante submetida a uma operação de dilatação com a mesma bola. Uma ilustração da operação de abertura é mostrada na Fig. 85.

As operações de erosão e dilatação são classicamente realizadas tendo-se o círculo (no espaço discreto) como elemento estruturante. Entretanto, dado que é fundamentado na



**Figura 84:** Operação de Dilatação na imagem (a) pelo elemento estruturante da Fig. 82 resultando na imagem (b).



**Figura 85:** Processo de Abertura. (a) Imagem Inicial, (b) Imagem erodida, (c) Imagem dilatada após erosão

distância euclidiana, a utilização do círculo nos conduz à manipulação de números reais.

Utilizam-se o elementos estruturantes apresentados na seção A.1 baseados nas métricas  $d_{3-4}$  e  $d_{5-7-11}$  que como vistos são octógonos e hexadécágonos respectivamente.

Outra questão diz respeito ao fato de que classicamente as operações são realizadas na imagem binária, o que requer testes entre os conjuntos elemento estruturante e imagem como definidos pelas Eq. A.5 e Eq. A.6. Neste trabalho, as operações são realizadas na imagem de distância ao fundo (IDF), acarretando em uma grande diminuição do número de operações envolvidas para a realização da erosão e da dilatação. De fato, como visto na seção A.1.3 a imagem binária contém apenas a informação a que fase um dado pertence, enquanto que na imagem de distância ao fundo tem-se a informação da fase a que pertence o pixel e adicionalmente sua distância mínima à fase complementar.

Com a consideração da imagem de distância ao complementar para se realizar uma operação de abertura com uma bola  $d_{3-4}$  de raio  $r$  procedem-se as etapas:

- erosão: conservam-se os *pixels* de valor de IDF superior a  $3r$ ;
- dilatação: os pixels do contorno do objeto, após a erosão, terão valor de IDF compreendido entre  $[3r, 3(r + 1)]$  e os do interior valores superiores a  $3(r + 1)$ . Conserva-se os pixels interiores e gera-se a bola em torno dos *pixels* do contorno do objeto.

A operação de abertura com bolas oriundas da métrica  $d_{5-7-11}$  segue procedimentos análogos à da abertura com métrica  $d_{3-4}$ .

# *APÊNDICE B – Demonstração da Convergência do Algoritmo Homogêneo do SA*

Neste apêndice expõe-se as definições e conceitos necessários para provar a convergência do algoritmo homogêneo do SA.

## **B.1 Demonstração**

O algoritmo converge assintoticamente para o conjunto de soluções ótimas com probabilidade igual a 1 caso as seguintes condições sejam mantidas:

- Cada cadeia de Markov deve atingir o equilíbrio antes da temperatura ser abaixada;
- O valor da temperatura deve se aproximar de zero no limite, ou:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} t_k = 0 \tag{B.1}$$

- As matrizes  $A(t_k)$  e  $G(t_k)$  definem uma cadeia de Markov homogênea irreduzível e aperiódica.

Segue-se uma definição formal de convergência assintótica:

**Definição B.1.1.** Convergência assintótica é definida de forma que à medida que o número de tentativas de Markov se aproxima de infinito, o sistema a ser otimizado estará em um dos estados globais ótimos com probabilidade 1, ou

$$\lim_{k \rightarrow \infty} Pr \{X_k \in S_*\} = 1 \tag{B.2}$$

onde  $S_*$  é o conjunto de soluções ótimas.

Ainda é necessário definir a distribuição de probabilidades estacionária para cada cadeia de Markov:

**Definição B.1.2.** A distribuição de probabilidades  $\pi$  é um vetor que define a distribuição de probabilidades das soluções depois de um número infinito de tentativas, ou seja:

$$\pi_i = \lim_{k \rightarrow \infty} P_r \{X_k = i | X_0 = j\} \quad (\text{B.3})$$

Para provar a convergência, utiliza-se o teorema a seguir:

**Teorema B.1.3.** *O vetor de distribuição de probabilidades  $\pi$  de uma cadeia de Markov homogênea existe se a cadeia de Markov é irredutível e aperiódica, onde  $\pi$  é unicamente determinado pelas equações:*

$$\forall i \in S : \pi_i \geq 0, \quad (\text{B.4})$$

$$\sum_{i \in S} \pi_i = 1, \quad (\text{B.5})$$

$$\forall j \in S : \sum_{i \in S} \pi_i P_{ij} = \pi_j \quad (\text{B.6})$$

Torna-se necessário definir irredutibilidade e aperiodicidade.

**Definição B.1.4.** Uma cadeia de Markov é irredutível se e somente se para todos os pares de solução  $i, j \in S$  há uma probabilidade não zero de alcançar  $j$  a partir de  $i$  com um número finito de passos  $n$ , ou:

$$\forall i, j \in S \exists k : 1 \leq k < \infty \wedge P_{ij}^k > 0 \quad (\text{B.7})$$

**Definição B.1.5.** Uma cadeia de Markov é aperiódica se e somente se o maior divisor comum de todos os inteiros  $n \geq 1$  é tal que:

$$MDC(\forall n \geq 1, \forall i \in R : P_{ii}^n > 0) = 1 \quad (\text{B.8})$$

No que diz respeito à analogia física, a cadeia de Markov homogênea e estacionária corresponde ao estado de equilíbrio térmico. Claramente, as cadeias de Markov definidas pelas matrizes  $A(t_k)$  e  $G(t_k)$  em cada temperatura  $t_k$  do algoritmo SA da forma definida pelas equações 4.4 a 4.9 são irredutíveis e aperiódicas, logo existe uma distribuição temporal de equilíbrio de soluções após um número infinito de tentativas.

O próximo passo é impor certas condições para as matrizes  $A(t_k)$  e  $G(t_k)$  tal que à medida que a temperatura  $t_k$  vai à zero, a distribuição estacionária convirja para a distribuição uniforme sobre o conjunto de mínimos globais, ou:

$$\lim_{t_k \rightarrow 0} \pi_i(t_k) = \pi^* = \begin{cases} |S_*|^{-1} & \forall i \in S_* \\ 0 & \text{nos demais casos} \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

As condições para a convergência são baseadas na forma da distribuição estacionária onde cada componente  $\pi_i(t_k)$  é definido por:

$$\pi_i(t_k) = \frac{\phi(c(i), t_k)}{\sum_{j \in S} \phi(c(j), t_k)} \quad (\text{B.10})$$

onde  $\phi(\varsigma, t_k)$  é uma função arbitrária de dois argumentos que deve seguir os seguintes requisitos para assegurar a convergência de  $\pi^*$  à medida que  $t_k$  vai a zero:

**Teorema B.1.6.** *Para assegurar a convergência da distribuição estacionária  $\pi$  para  $\pi^*$  como descrito pelas equações B.9 e B.10, as seguintes condições para a função  $\phi(\varsigma, t_k)$  são suficientes:*

$$\forall i \in S, t_k > 0 : \phi(c(i), t_k) > 0 \quad (\text{B.11})$$

$$\lim_{t_k \rightarrow 0} \pi_i(\varsigma, t_k) = \begin{cases} 0 & \text{se } \varsigma > 0 \\ \infty & \text{se } \varsigma < 0 \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{\phi(\varsigma_1, t_k)}{\phi(\varsigma_2, t_k)} = \phi(\varsigma_1 - \varsigma_2, t_k) \quad (\text{B.13})$$

$$\forall t_k > 0 : \phi(0, t_k) = 1 \quad (\text{B.14})$$

Dadas as condições sobre  $\phi(\varsigma, t_k)$  descritas no Teorema B.1.6, o Teorema B.1.7 descreve um requisito de balanço global do sistema para a geração da matriz  $G(t_k)$  para o qual  $\pi(t_k)$  é a função de probabilidades estacionária da cadeia de Markov homogênea gerada em uma temperatura  $t_k$  do SA.

**Teorema B.1.7.** *Se  $\phi(\varsigma, t_k)$  cumpre os requisitos do Teorema B.1.6 e se  $\forall j \in S$*

$$\sum_{i \in S} \pi_i(t_k) G_{ij}(t_k) A_{ij}(t_k) = \sum_{j \in S} \pi_j(t_k) G_{ji}(t_k) A_{ji}(t_k) \quad (\text{B.15})$$

*tal que  $\pi(t_k)$  é a distribuição de probabilidades estacionária da cadeia de Markov homogênea definida pelas equações B.9 e B.10.*

Observa-se, porém, que na prática é difícil obter a distribuição estacionária utilizando as equações B.10 a B.14. Por esta razão, AARTS; LAARHOVEN [1985] utilizam uma forma especial da função  $\phi(\varsigma, t_k)$  que permite a derivação de uma forma mais explícita da distribuição estacionária  $\pi_i(t_k)$ . Explicitamente, a nova forma a ser considerada usa a função  $\phi(c(i) - c(i_*), t_k)$  onde  $i_* \in S_*$ . Se  $\phi(c(i) - c(i_*), t_k)$  escrever-se como  $\phi(\Delta C_{i_*i}, t_k)$  e a matriz de geração  $G_{ij}$  não for dependente da temperatura  $t_k$ , então o teorema B.1.8 é suficiente para provar a convergência do SA.

**Teorema B.1.8.** *Se a função  $\phi(\varsigma, t_k)$  for escrita como  $\phi(\Delta C_{i_*i}, t_k)$  para qualquer  $i_* \in S_*$  e a matriz de geração  $G_{ij}$  não for dependente da temperatura  $t_k$ , então a distribuição de probabilidades estacionária  $\pi_i(t_k)$  é dada por:*

$$\forall i \in S : \frac{\phi(\Delta C_{i_*i}, t_k)}{\sum_{j \in S} \phi(\Delta C_{i_*j}, t_k)} \quad (\text{B.16})$$

*Se as matrizes  $A_{t_k}$  e  $G_{ij}$  cumprirem os seguintes requisitos para todo  $t_k > 0$ :*

$$\forall i, j \in S : G_{ij} = G_{ji} \quad (\text{B.17})$$

$$\forall h, i, j \in S : c(h) \leq c(i) \leq c(j) \Rightarrow A_{hj}(t_k) = A_{hi}(t_k)A_{ij}(t_k) \quad (\text{B.18})$$

$$\forall i, j \in S : c(i) \geq c(j) \Rightarrow A_{ij}(t_k) = 1 \quad (\text{B.19})$$

$$\forall i, j \in S : c(i) < c(j) \Rightarrow 0 < A_{ij}(t_k) < 1 \quad (\text{B.20})$$

$$\forall i, j \in S : c(i) < c(j) \Rightarrow \lim_{t_k \rightarrow 0} A_{ij}(t_k) = 0 \quad (\text{B.21})$$

Além do Teorema B.1.8, [LUNDY; MEES, 1986] mostra que a condição de simetria de  $G$  representada pela equação B.18 pode ser reposta pela seguinte equação:

$$\forall i \in S : G_{ij} = \begin{cases} |R_i|^{-1} & \text{se } j \in R \\ 0 & \text{nos demais casos} \end{cases} \quad (\text{B.22})$$

Em adição, se B.18 e B.22 forem válidas, então  $|R_i|$  é independente de  $i$ .

É fácil ver que a formulação homogênea clássica do SA exposta por [KIRKPATRICK; GELATT; VECCHI, 1983; CERNY, 1985], onde  $A(t_k)$  e  $G$  são dadas pelas equações 4.6 e B.22, respectivamente, satisfazem as equações B.18 a B.22. Como resultado, a cadeia de Markov homogênea associada a  $A(t_k)$  e  $G$  em cada temperatura  $t_k$  é irredutível e aperiódica, levando a uma distribuição de probabilidades estacionária da forma:

$$\pi_i(t_k) = \frac{e^{-\left(\frac{\Delta C_{i^*i}}{t_k}\right)}}{\sum_{j \in S} e^{-\left(\frac{\Delta C_{i^*j}}{t_k}\right)}} \quad (\text{B.23})$$

Portanto, a formulação original do SA é convergente de forma assintótica para o conjunto de soluções ótimas com probabilidade igual a 1. A convergência assintótica do SA homogêneo pode ser descrita formalmente como:

$$\lim_{t_k \rightarrow 0} \left( \lim_{k \rightarrow \infty} P_r \{X_k = i\} \right) = \lim_{t_k \rightarrow 0} \begin{cases} |S_*|^{-1} & \text{se } i \in S_* \\ 0 & \text{nos demais casos} \end{cases} \quad (\text{B.24})$$

Além disso, ROMEO; SANGIOVANNI-VINCENELLI [1991] mostra que se a matriz de geração  $G$  é simétrica, como descrito pela equação B.18 e a distribuição de probabilidades estacionária é da forma como descrita na equação B.16, então a matriz de aceitação da equação 4.6 é ótima para a formulação apresentada, uma vez que ela permite a convergência mais rápida para a distribuição de probabilidade estacionária.

## ***APÊNDICE C – Método para o cálculo de permeabilidade utilizando Lattice Boltzmann***

A predição de propriedades de transporte e equilíbrio em meios porosos é um problema de grande interesse prático, especialmente na engenharia de reservatório de petróleo. A permeabilidade é uma propriedade física importante de um meio poroso e sua determinação é vital para o projeto e aplicação dos esquemas de produção de petróleo, entretanto, a geometria complexa das estruturas porosas dificulta os processos de simulação no nível do poro. O método de *Lattice Boltzmann* (LBM) fornece uma alternativa aos métodos tradicionais de dinâmica dos fluidos que são baseados na discretização da equação de Navier-Stokes. Por outro lado, LBM é baseado na equação de transporte de Boltzmann e é menos sensível à complexidade da geometria do meio poroso. Este método tem sido bastante estudado nos últimos anos e aplicado com considerável sucesso em problemas de física computacional [SUCCI, 2001].

### **C.1 O método de *Lattice Boltzmann***

#### **C.1.1 Dinâmica microscópica**

O espaço físico 3D é considerado como sendo uma rede cúbica onde cada ponto  $\mathbf{X}$  tem  $b_m$  vizinhos, como na Figura 86. Cada ponto é caracterizado por uma distribuição de partículas  $N_i(X, T)$  que evolui de acordo com a equação de *Lattice Boltzmann*:

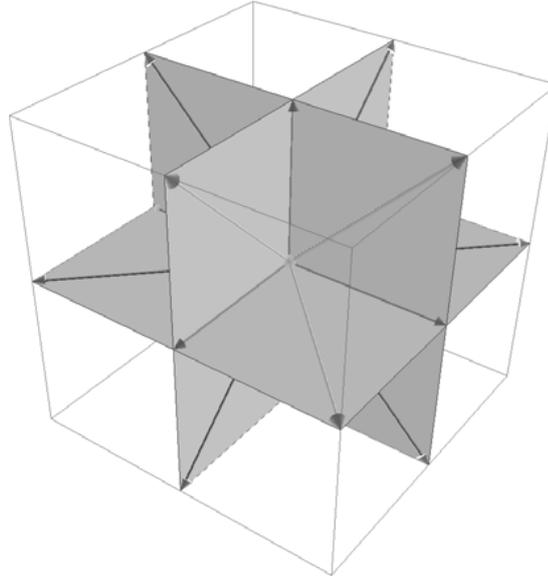
$$N_i(X + c_i, T + 1) = N_i(X, T) + \Omega_i \quad (\text{C.1})$$

onde  $T$  é a variável tempo, o índice  $i$  indica o vizinho,  $c_i$  é um vetor de velocidade apontando para o vizinho  $i$  ( $i = 0$  se refere à distribuição de partículas em repouso). O termo do lado direito é chamado termo de colisão e é escrito de forma que:

$$\sum_i \Omega_i = 0 \quad (\text{C.2})$$

$$\sum_i \Omega_i c_i = 0 \quad (\text{C.3})$$

para preservar a massa e o momento de cada ponto.



**Figura 86:** Rede 3D com 19 velocidades

A evolução do modelo descrito pela Equação C.1 pode ser dividido em dois processos. No primeiro, chamado de colisão, a função distribuição é alterada pela ação do operador de colisão. No segundo, chamado propagação, os valores  $N_i$  são propagados aos pontos vizinhos, de acordo com a direção do vetor  $c_i$ . As variáveis massa e momento são definidas com o auxílio da função distribuição:

$$\sum_i^b N_i = \rho \quad (\text{C.4})$$

$$\sum_i^b N_i c_i = \rho \mathbf{u} \quad (\text{C.5})$$

### C.1.2 O termo de colisão BGK

Neste trabalho, uma aproximação do operador de colisão com um único tempo de relaxação foi utilizada para o operador de colisão (veja [QIAN; D.; P., 1992]).

$$\Omega_i = \frac{N_i^{eq} - N_i}{\tau} \quad (\text{C.6})$$

onde  $\tau$  é o tempo de relaxação e  $N_i^{eq}$ , a distribuição de equilíbrio, é determinada para obter as equações macroscópicas desejadas. A taxa de mudança para a distribuição de equilíbrio é imposta para produzir a viscosidade do fluido, que é a única propriedade macroscópica relacionada às colisões em escoamentos de um único fluido.

### C.1.3 Distribuições de equilíbrio

Quando o equilíbrio é alcançado, o processo de colisão não deve afetar a distribuição de partículas. Portanto a distribuição de equilíbrio deve ser especificada pelos invariantes de colisão  $\rho$  e  $\rho\mathbf{u}$ . Para o caso de velocidades baixas, ou seja, pequenos  $\mathbf{u}$ , pode-se escrever:

$$N_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = A_i + B_{i\alpha}\mathbf{u}_\alpha + D_{i\alpha\beta}\mathbf{u}_\alpha\mathbf{u}_\beta, i = 1, \dots, b_m \quad (\text{C.7})$$

onde  $b_m$  indica o número de direções da rede e índices repetidos indicam somas. Os parâmetros  $A_i$  e  $B_{i\alpha}$  podem ser determinados impondo-se conservação de momento e massa. O parâmetro restante,  $D_{i\alpha\beta}$  é escolhido de forma a obter as equações da hidrodinâmica macroscópica desejadas. A forma final das distribuições de equilíbrio é:

$$N_0^{eq} = \frac{\rho}{3} - \frac{\rho}{2}u^2 \quad (\text{C.8})$$

para as partículas em repouso,

$$N_i^{eq} = \frac{\rho}{18} + \frac{\rho}{6}c_i \cdot \mathbf{u} + \frac{\rho}{4}(c_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{\rho}{12}u^2 \quad (\text{C.9})$$

para partículas se movendo nos eixos principais, e

$$N_i^{eq} = \frac{\rho}{36} + \frac{\rho}{12}c_i \cdot \mathbf{u} + \frac{\rho}{8}(c_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{\rho}{24}u^2 \quad (\text{C.10})$$

para partículas se movendo nas diagonais ( $|c_i| = \sqrt{2}$ ).

### C.1.4 Indo para a escala das variáveis físicas

Usando  $h$  e  $\delta$  como, respectivamente, uma escala espacial e temporal, faz-se:

$$x = h\mathbf{X} \quad (\text{C.11})$$

$$t = \delta\mathbf{T} \quad (\text{C.12})$$

quando  $h$  e  $\delta$  são pequenos, pode-se considerar  $x$  e  $T$  como variáveis físicas variando continuamente no domínio espaço e tempo do sistema físico a ser descrito.

### C.1.5 Equações LBM de hidrodinâmica

Usando o método de Champman-Enskog na equação de *Lattice Boltzmann*, no limite de um baixo número de Knudsen ( $K_n = \frac{h}{L} = \frac{\delta}{\Gamma} \ll 1$ ), onde  $L$  é o comprimento característico e  $\Gamma$  é um tempo característico, e desprezando os termos abaixo de segunda ordem, chega-se a:

$$\partial_t(\rho) + \partial_\beta(\rho u_\beta) = 0 \quad (\text{C.13})$$

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha(\rho) + \nu \partial_\beta[\partial_\beta(\rho u_\alpha) + \partial_\alpha(\rho u_\beta)] \quad (\text{C.14})$$

onde a pressão  $p$  e a viscosidade cinemática  $\nu$  são dadas por:

$$p = \frac{1}{3}\rho \quad (\text{C.15})$$

$$\nu = \frac{1}{3}(\tau - 1/2) \quad (\text{C.16})$$

A equação do balanço de massa é, exatamente, a mesma equação obtida na hidrodinâmica clássica. Considerando baixo número de Mach ( $p$  constante), a equação de balanço de momento estará, claramente, de acordo com a equação de Navier-Stokes.

### C.1.6 Condições de contorno

Nas superfícies sólidas se impõem as condições de borda *bounce back* para as distribuições de partículas, ou seja, todas as partículas que acertaram paredes nesses passos de propagação reverterem sua direção no passo. Esta condição de borda assegura a condição de não escorregamento próximo às bordas. Duas condições de contorno foram aplicadas na entrada e na saída do domínio na direção do fluxo:

- condições de contorno periódicas foram aplicadas ao impor que qualquer fluido saindo de uma ponta (diga-se, a saída) reentra na outra ponta (a entrada);
- condição de derivada nula na direção do fluxo foi obtida ao impor que os pontos na entrada ( $x=0$ ) assumem a velocidade dos pontos adjacentes ( $x=1$ ) e o mesmo foi feito na saída.

No primeiro caso, para forçar o fluxo, uma quantidade fixa de momento é adicionada a cada ponto. No segundo, o fluxo é obtido ao impor um gradiente de pressão.

## C.2 Simulações

A Lei de Darcy relaciona a taxa de fluxo  $\mathbf{J}$  de um fluido com a força aplicada a ele. Pode ser escrita como:

$$\mathbf{J} = \frac{k}{\mu} (\rho g - \nabla p) \quad (\text{C.17})$$

onde  $\mu$  é a viscosidade do fluido,  $g$  é a densidade de força gravitacional,  $\nabla p$  é o gradiente de pressão e  $k$  é o coeficiente de permeabilidade.

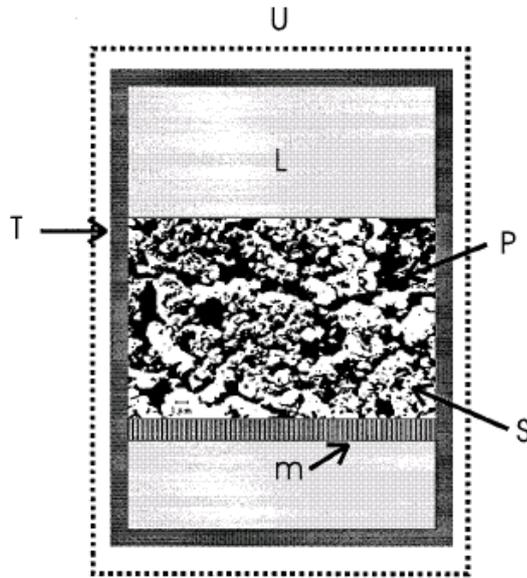
Em um fluxo estacionário, a força aplicada ao fluido se iguala ao momento perdido nas superfícies sólidas. Nas simulações preferiu-se calcular a quantidade de momento perdida na etapa de propagação para calcular a permeabilidade, então o mesmo algoritmo pode ser aplicado, sendo indiferente se a força ( $\rho g$ ) ou o gradiente de pressão (ou ambos) está impelindo o fluido.

## *APÊNDICE D – Método para o cálculo de interfaces de dois fluidos em meios porosos*

Esta metodologia trata de determinar a interface entre dois fluidos imiscíveis em um espaço poroso tridimensional em um dado estado de equilíbrio mecânico, desconsiderando transferência de massa entre as fases. Para isso, utilizam-se técnicas de morfologia matemática.

### **D.1 Método de [MAGNANI et al., 2000]**

Considera-se um sistema  $U$  composto de uma amostra porosa rígida  $M \subset U$ . Seja  $L$  a região livre entre a amostra porosa e as paredes  $T$  do sistema, ou seja,  $L = U - (M \cup T)$ . Considera-se que  $L$  é muito maior que o diâmetro dos poros de  $M$ , deste modo, o raio de curvatura de  $L$  é muito maior que o raio de curvatura dos poros. Define-se a região  $M$  como a união de um espaço poroso  $P$  com a rocha sólida  $S$  e considera-se essas regiões invariantes no tempo. De mesmo modo, a região que pode ser ocupada por qualquer fluido é definida como  $F = U - (U \cup S)$ . Estas regiões podem ser visualizadas na Figura 87.



**Figura 87:** Regiões do sistema  $U$  definido por MAGNANI et al. [2000]

Considerando um processo de invasão onde um fluido  $B$  retira um fluido  $A$  dentro do espaço poroso, sendo esse processo uma seqüência de processos quase estáticos ( $i, i = 0, 1, \dots, p$ ) entre estados de equilíbrio. Para cada passo  $i$ ,  $B^i$  é a região ocupada pelo fluido  $B$  e no passo inicial esse fluido está fora do espaço poroso. Observa-se que à medida que o processo avança,  $B$  sempre permanece uma região geometricamente conectada, enquanto  $A$  se torna uma união de várias regiões desconectadas.

Define-se, então, uma bola  $E_x^i$  de raio  $r_i$  centrado em  $x$ , para um dado ponto  $x$  pertencente à região  $F$ . O raio é determinado pela equação de *Young-Laplace*, que estabelece condição de equilíbrio na interface entre dois fluidos  $A$  e  $B$ :

$$r^i = \left| \frac{(d-1)\sigma_{AB}}{P_A - P_B} \right| \quad (\text{D.1})$$

onde  $d$  é a dimensão do espaço Euclidiano,  $\sigma_{AB}$  é a tensão interfacial entre  $A$  e  $B$ .  $P_A$  é a pressão no fluido  $A$  conectado à região  $L$  e  $P_B$  a pressão no fluido  $B$  no passo  $i$ .

Caso o ponto  $x$  esteja mais perto da borda do que  $r_i$ , desconsidera-se a bola centrada neste ponto. Matematicamente, define-se uma nova bola  $E_x^{*i}$  da seguinte forma:

$$E_x^{*i} = \begin{cases} E_x^i & \text{se } d_x \geq r^i \\ \emptyset & \text{se } d_x < r^i \end{cases} \quad (\text{D.2})$$

Uma região de abertura  $H$  é definida, então, entre os pontos  $x$  e as bordas de  $F$ .

$$H^i = \bigcup_x = E_x^{*i} \quad x \in F \quad (\text{D.3})$$

Uma consideração importante é que a região  $H$  possui raio de curvatura constante e igual a  $r_i$ . Para a simulação, a região  $L$  é acrescentada, definindo uma nova região de abertura e sua região complementar:

$$\begin{aligned} G^i &= L \cup H^i \\ \underline{G}^i &= F - G^i \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Para localizar a região de fronteira, define-se um novo operador de união  $K(J, Q)$ , sendo  $J_j$  as componentes de  $J$ :

$$K(J, Q) = \bigcup_{k=1}^{n(J)} \begin{cases} J_j & \text{se } J \cap Q \neq \emptyset \\ \emptyset & \text{se } J \cap Q = \emptyset \end{cases} \quad (\text{D.5})$$

Este operador é utilizado para encontrar onde o fluido  $B$  está a cada passo da seguinte forma:

Define-se  $Y^i = A^i - A_0^i$  como o domínio de  $A$  que não está mais conectado à região  $L$  a cada passo, onde  $A_0^i$  é a porção do fluido  $A$  que permanece conectada à região  $L$ .

Assim:  $B^i = \Omega^i - u_A Y^i$  é a região ocupada pelo fluido  $B$  no passo  $i$ , onde  $\Omega^i = K\{[(W_B)\underline{G}^i \cup K(G^i, B^0)], B^0\}$  e  $W_B$  é um fator molhante para o fluido  $B$  ( $W_B = 1$  quando  $B$  é molhante e  $W_B = 0$  quando  $B$  é não molhante),  $u_A$  é um fator de compressibilidade para o fluido  $A$  ( $u_A = 0$  quando os fluidos são idealmente compressíveis e  $u_A = 1$  quando os fluidos são idealmente incompressíveis).

MAGNANI et al. [2000] também levaram em consideração o ângulo de contato  $\theta_{AB}$  com relação ao fluido molhante redefinindo a bola  $E_x^{*i}$ :

$$E_x^{*i} = \begin{cases} E_x^i & \text{se } d_i \geq r^i \cos \theta_{AB} \\ \emptyset & \text{se } d_x < r^i \cos \theta_{AB} \end{cases} \quad (\text{D.6})$$

O autor teve bons resultados para simulações de intrusão de mercúrio em meios reconstruídos em três dimensões. Também se simulou processos de embebição e drenagem com bons resultados em comparação a dados experimentais. A grande vantagem deste método é poder ser aplicado em qualquer geometria sem as considerações relativas à geometria utilizadas em sistemas de redes de percolação.