



EXPERIÊNCIAS NA ENGENHARIA DA UFF COM MICRO TOMOGRAFIA DE RAIOS-X

Andre Pereira

Ricardo Leiderman

Rodrigo Almeida

Rodrigo Bagueira

andremaues@id.uff.br

leider@ic.uff.br

rraposo@id.uff.br

rbagueira@vm.uff.br

Escola de Engenharia, Instituto de Computação e Química, Universidade Federal Fluminense
Rua Passo da Pátria 156, 24210-240, Rio de Janeiro, Niterói, Brasil

Abstract. Neste trabalho, apresentam-se as principais experiências adquiridas com a utilização de um micro tomógrafo durante análise de diversos materiais, através de estudos de casos realizados na Universidade Federal Fluminense. Uma das formas mais precisas de imagear um material é a micro tomografia computadorizada de raios-X (micro-CT). A partir das imagens de micro-CT é possível realizar inspeções visuais para a identificação de defeitos, grãos, minerais, vazios, oclusões, fraturas, trincas e outras estruturas notáveis; bem como realizar medições que permitam quantificar diferentes propriedades dos materiais, tais como porosidade, permeabilidade, elasticidade, entre outras. A micro tomografia pode desempenhar, dessa forma, papel importante na caracterização de materiais. Portanto, apresenta-se uma metodologia desenvolvida para utilização de micro tomógrafo no contexto de análise de materiais e aplicada nas seguintes investigações: desmineralização em dentes, porosidade em materiais compósitos, caracterização de ferro fundido, avaliação da integridade de instrumentos endodônticos e propriedades efetivas de rochas. Os parâmetros de ajuste do micro tomógrafo, os métodos de reconstrução e segmentação da imagem digital, bem como os procedimentos numéricos desenvolvidos para as investigações, são abordados.

Keywords: micro tomografia de raios-X, micro-CT, laboratório digital de materiais, processamento de imagens, micro tomógrafo

1 INTRODUÇÃO

A possibilidade de simular estruturas, em diferentes escalas, por meio de computador tem sido extremamente útil para avaliar o comportamento e determinar propriedades efetivas de materiais. Uma das maiores dificuldades durante o processo de simulação é a criação dos modelos. Para construção de modelos mais realistas e com precisão, contendo o máximo de informações e sendo fiel aos materiais a serem investigados, pode-se partir de imagens desses materiais. Uma das formas mais precisas de imagear um material é a micro tomografia computadorizada por meio de raios-X (micro-CT). A partir das micro-CT é possível realizar inspeções visuais para a identificação de defeitos, grãos, minerais, vazios, oclusões, fraturas, trincas e outras estruturas notáveis; assim como, para realizar medições que permitam quantificar diferentes propriedades dos materiais, tais como porosidade, permeabilidade e elasticidade. Tendo, dessa forma, papel importante na caracterização de materiais. Para mais detalhes sobre a técnica de micro-CT recomenda-se o trabalho de Landisa & Keaneb (2010), por ser um artigo de revisão tutorial bem abrangente e de fácil compreensão.

O presente trabalho tem como objetivo descrever as principais experiências adquiridas com a utilização de um micro tomógrafo de raios-X para investigação de diversos materiais, por meio de estudos de casos realizados na Universidade Federal Fluminense. Portanto, apresenta-se uma metodologia desenvolvida para utilização de um micro tomógrafo no contexto de análise de materiais. O equipamento foi adquirido através de um projeto de pesquisa do tipo P&D no âmbito da ANP, com recursos da empresa BG Brasil. Desde a sua instalação em abril de 2014 o equipamento tem sido utilizado em pesquisas de ponta na área de caracterização de rochas reservatórios de petróleo, e se mostrando como uma ferramenta extremamente promissora. Além da pesquisa principal, o equipamento tem atendido a diversos projetos de pesquisa na área de materiais compósitos, geotecnia, madeiras, fósseis, odontologia, soldas por atrito em alumínio, ligas de Ni-Ti, concreto armado, circuitos eletrônicos.

Descrevem-se também, no artigo, as principais experiências e aprendizados adquiridos durante as seguintes investigações e estudos de caso: na odontologia, tanto na área de ortodontia para avaliar o grau de desmineralização de dentes, assim como em endodontia para avaliar a vida útil de instrumentos de Ni-Ti para tratamento de canais; em materiais compósitos (com mantas de fibra de vidro e matriz em resina vinilester) tem sido fundamental para auxiliar na caracterização desses materiais, obtendo informações mais acuradas sobre porosidade e massa específica; em materiais metálicos, tem-se utilizado o equipamento para análise de falha em peças metálicas submetidas a pressões elevadas, falhas em soldas por atrito de peças de alumínio, caracterizar mecanicamente ferros fundidos; e determinação de propriedades efetivas de rochas, por meio de técnicas de homogeneização multi-escala aplicadas diretamente nas imagens. O grupo tem utilizado diversas ferramentas comerciais nos processos de aquisição e reconstrução das micro-CT, assim como vem trabalhando no desenvolvimento de diversas ferramentas computacionais para serem utilizadas nos processos de geração automática de modelos geométricos e de malhas de elementos finitos a partir de imagens obtidas por micro-CT, permitindo quando conveniente o controle do usuário, de forma simples e rápida.

Nosso fluxo de trabalho, desde a preparação das amostras até a estimativa de parâmetros efetivos dos materiais, passando pela montagem do corpo de prova, aquisição de dados, reconstrução, segmentação, geração da malha do modelo e simulações computacionais, está representado esquematicamente na Figura 1.

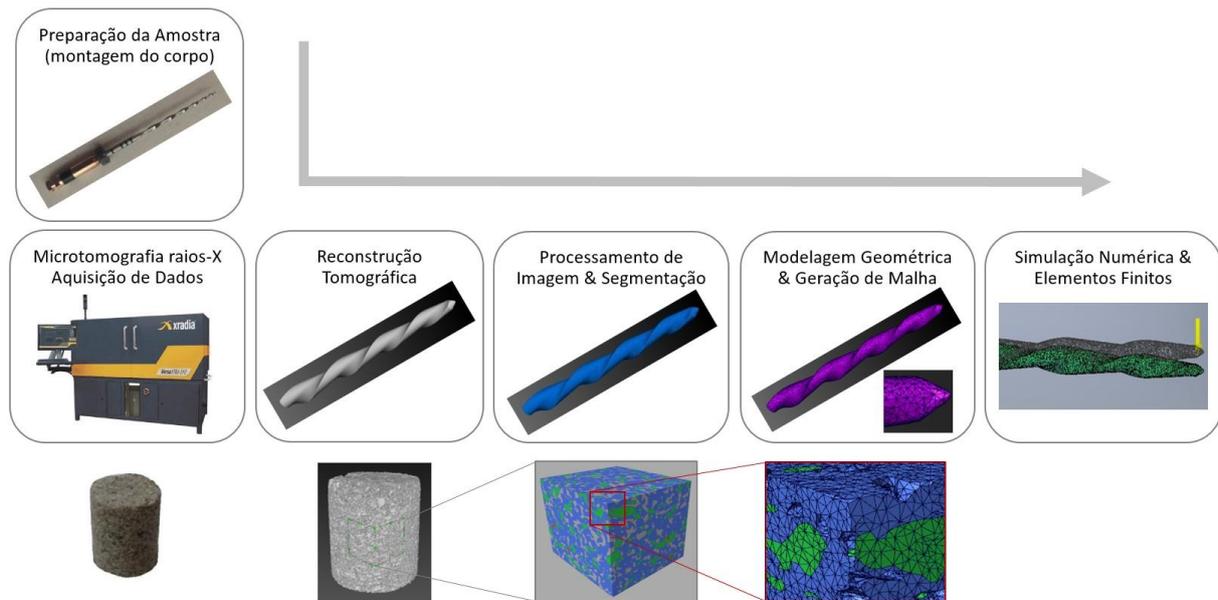


Figura 1. Nosso fluxo de trabalho, desde a preparação do material até obtenção dos resultados numéricos, passando pela montagem da amostra, aquisição de dados, reconstrução, segmentação, geração da malha do modelo e simulações computacionais.

Na próxima seção, apresentam-se as etapas envolvidas na aquisição de uma imagem com um micro tomógrafo. Em seguida, na seção 3, descreve-se o processo de reconstrução tomográfica. O processamento e segmentação das imagens, assim como a geração de modelos para simulações numéricas são discutidos na seção 4. Por fim, apresentam-se os estudos de casos, na seção 5, e conclui-se o trabalho com as considerações finais.

2 AQUISIÇÃO DE MICRO TOMOGRAFIA DE RAIOS-X

As amostras dos materiais são digitalizadas usando um sistema de imageamento por micro-CT de raios-X de alta resolução. As tomografias são realizadas utilizando um sistema de micro-CT (Zeiss Xradia Versa 510), tal como ilustrado na Figura 1, que gera raios-X com feixes em geometria de cone. A radiografia é uma técnica que utiliza raios-X para revelar a estrutura interna e a constituição de uma amostra de qualquer material. Radiografia utiliza feixes uniformes de raios-X produzidos por um gerador de raios-X acelerado em direção ao objeto. Parte da energia do feixe é absorvida no objeto e outra parte atravessa o objeto. O detector de raios-X colocado por trás do objeto registra o padrão de radiação que não foi absorvido, como esquematizado na Figura 2(a). A alteração na atenuação dos raios-X corresponde à mudança na densidade do objeto e, conseqüentemente, a estrutura interna pode ser revelada, como na Figura 2(b). A tomografia é o seccionamento repetitivo de um objeto com radiografia, capturando tal objeto sob grande número de ângulos diferentes e utilizando um algoritmo matemático para reconstruí-lo em 3D. A fonte de raios-X e o detector ficam estáveis, enquanto que o objeto gira com auxílio de uma base giratória, ver Figura 2(a). A partir do conjunto de radiogramas adquiridos, as imagens seccionais da amostra podem ser calculadas utilizando a reconstrução tomográfica, produzindo uma pilha de imagens em escala de cinza brutas 2-D (fatias) da amostra, formando o objeto digital tridimensional, como ilustrado na Figura 2(c). Em micro tomografia computadorizada de raios-X (micro-CT) as dimensões dos *voxels* (isto é, um elemento de pixel volumétrico) reconstruídos estão em escala micrométrica.

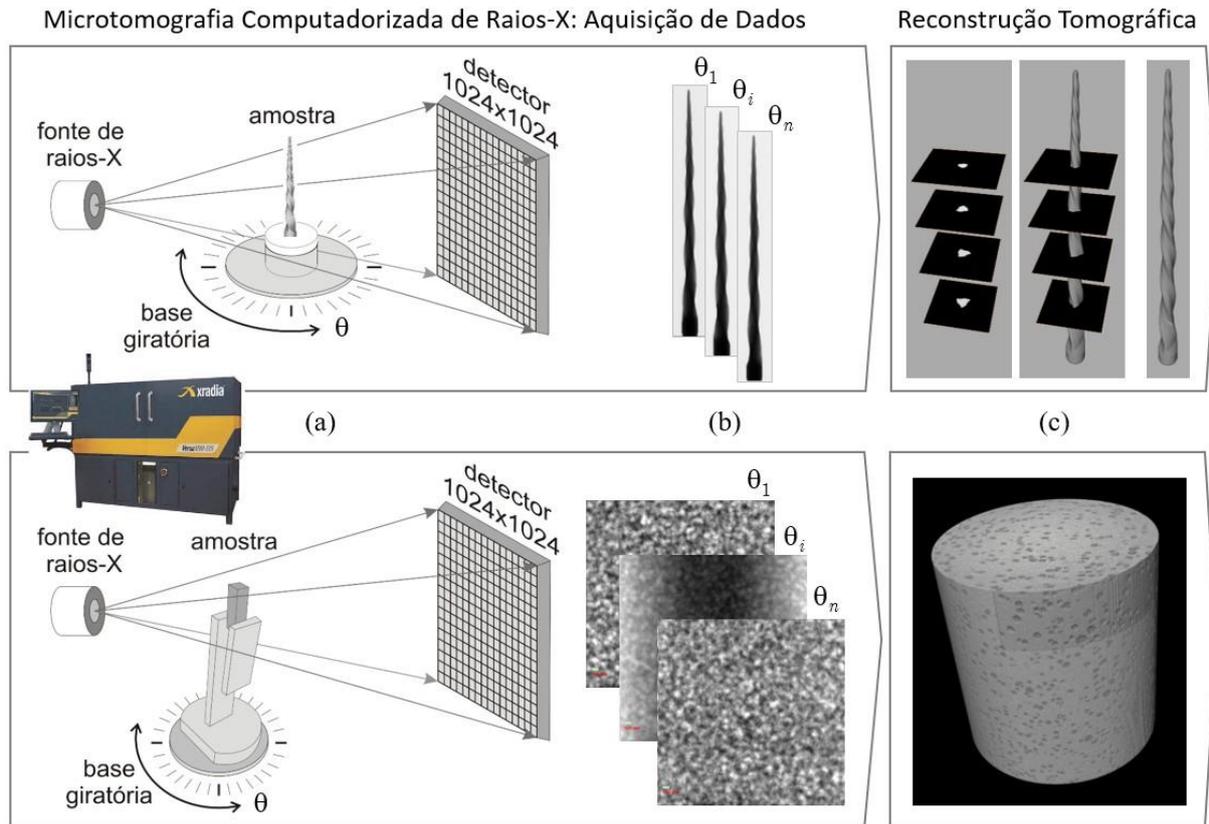


Figura 2. Esquema ilustrativo do fluxo de trabalho da aquisição tomográfica: (a) configuração do scanner de micro-CT para aquisição de imagem, (b) conjunto de projeções radiográficas individuais, (c) fatias ou pilha de imagens, o volume reconstruído. Instrumento endodôntico (acima) e ferro fundido (abaixo).

As principais etapas da aquisição de uma tomografia são basicamente: preparação da amostra, escolha da resolução e ajuste dos parâmetros do sistema. Essas etapas são apresentadas a seguir, discutindo-se os pontos chaves para obtenção de uma tomografia ótima.

2.1 Preparação das Amostras

A fim de estabilizar a amostra durante a digitalização, e para simplificar seu processo de montagem, a base das amostras de determinado material é simplesmente colada por resina a um suporte cilíndrico (suporte de aço). As amostras são montadas de modo que os feixes de raios-X fiquem perpendiculares ao eixo do suporte cilíndrico, ver Figura 2(a). O movimento involuntário da amostra durante a digitalização pode afetar a qualidade da imagem reconstruída. Mesmo que possa ser corrigido posteriormente pelo sistema, o movimento pode ser reduzido pela execução de uma digitalização prévia rápida (normalmente de meia hora) para aquecer o sistema e estabilizar a temperatura e umidade.

Exemplos das amostras discutidas na seção com estudos de casos, assim como diferentes opções de suportes disponibilizados pelo sistema para fixação das amostras, são ilustrados na Figura 3. Apesar da micro-CT ser um teste não destrutivo, pela experiência dos autores, a etapa de preparação da amostra geralmente demanda mais tempo do que o previsto, principalmente quando se prepara a amostra pela primeira vez. Deve-se também ter em mente, que por ser um sistema dimensionado para microescala, não é possível digitalizar em uma única vez, amostras com grandes dimensões (acima de 6 cm de diâmetro).

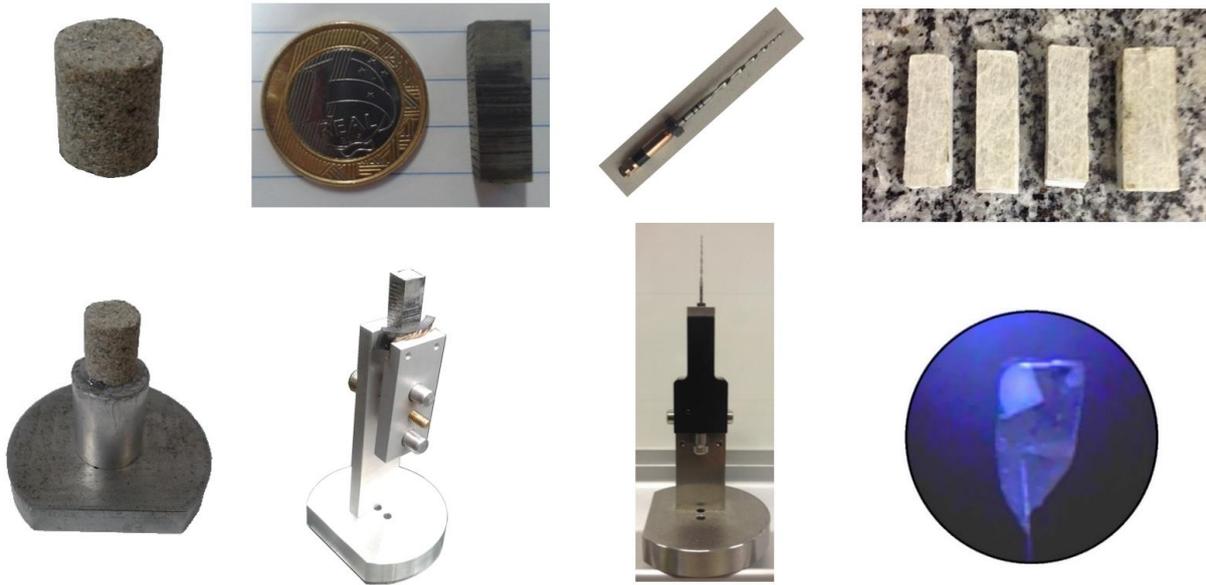


Figura 3. Preparação das amostras apresentadas nos estudos de caso, com diferentes tipos de suporte.

2.2 Seleção da Resolução das Imagens

As distâncias entre fonte-amostra e entre detector-amostra são dois dos parâmetros que determinam a resolução da imagem. A porção da amostra iluminada pela fonte e projetada no detector é normalmente chamada de Campo de Visão (*Field-Of-View*, FOV). Por exemplo, se 10 mm de um objeto é visto em um FOV de 1024 x 1024 pixels, a resolução (tamanho do *voxel*) é de 9,76 μm . Movendo-se o detector para perto da amostra ou a fonte para longe da amostra, aumenta-se o FOV, reduzindo assim a resolução da imagem. Inversamente, movendo-se tanto o detector para longe da amostra ou a fonte para perto da amostra, aumenta-se a resolução da imagem. Esta ideia é ilustrada esquematicamente na Figura 4. No nosso sistema, a distância máxima entre fonte-amostra é de 195 mm, enquanto a distância máxima entre fonte-detector é de 335 mm. Além do posicionamento fonte-amostra-detector, lentes de ampliação também podem ser colocadas na frente do detector para aumentar a resolução.

Quatro opções de lente de aumento estão disponíveis no sistema (0,4X, 4X, 20X e 40X), resultando em uma resolução de até 0,5 μm para o tamanho do *voxel*. O quarto parâmetro que contribui diretamente para a resolução da imagem é a razão BIN (ou *binning*), que é o processo de combinar um conjunto de pixels em apenas um único pixel. É um processo computacional em vez de um efeito ótico. Quando a razão BIN é definida como 2, por exemplo, a câmera de luz visível calcula a média de 4 pixels (uma matriz dois por dois) e a atribui em um único pixel. Portanto, o número de pixels da imagem (e resolução) é reduzido por um fator de 4. No nosso sistema, cada projeção pode ser capturada com BIN 1, BIN 2, BIN 4 ou BIN 8. Com BIN 1, tem-se o detector padrão matricial de 2048 x 2048 com 2-Byte, embora seja mais utilizado (para a grande maioria das digitalizações) o detector matricial de 1024 x 1024 com 2-Byte (BIN 2). A resolução da imagem irá, portanto, ser determinada pelo conjunto dos quatro parâmetros discutidos aqui e pode ser calculada com o auxílio da fórmula mostrada no canto superior esquerdo da Figura 4. Na fórmula, R é a dimensão do pixel, S é a distância fonte-amostra, D é a distância fonte-detector, e F é um fator que leva em conta as especificações do detector, a lente selecionada, e a razão BIN selecionada. No nosso sistema, por exemplo, $F = 68,926 \mu\text{m}$ para BIN = 2 e Lente = 0,4X, e $F = 6,7478 \mu\text{m}$ para BIN = 2 e Lente = 4X.

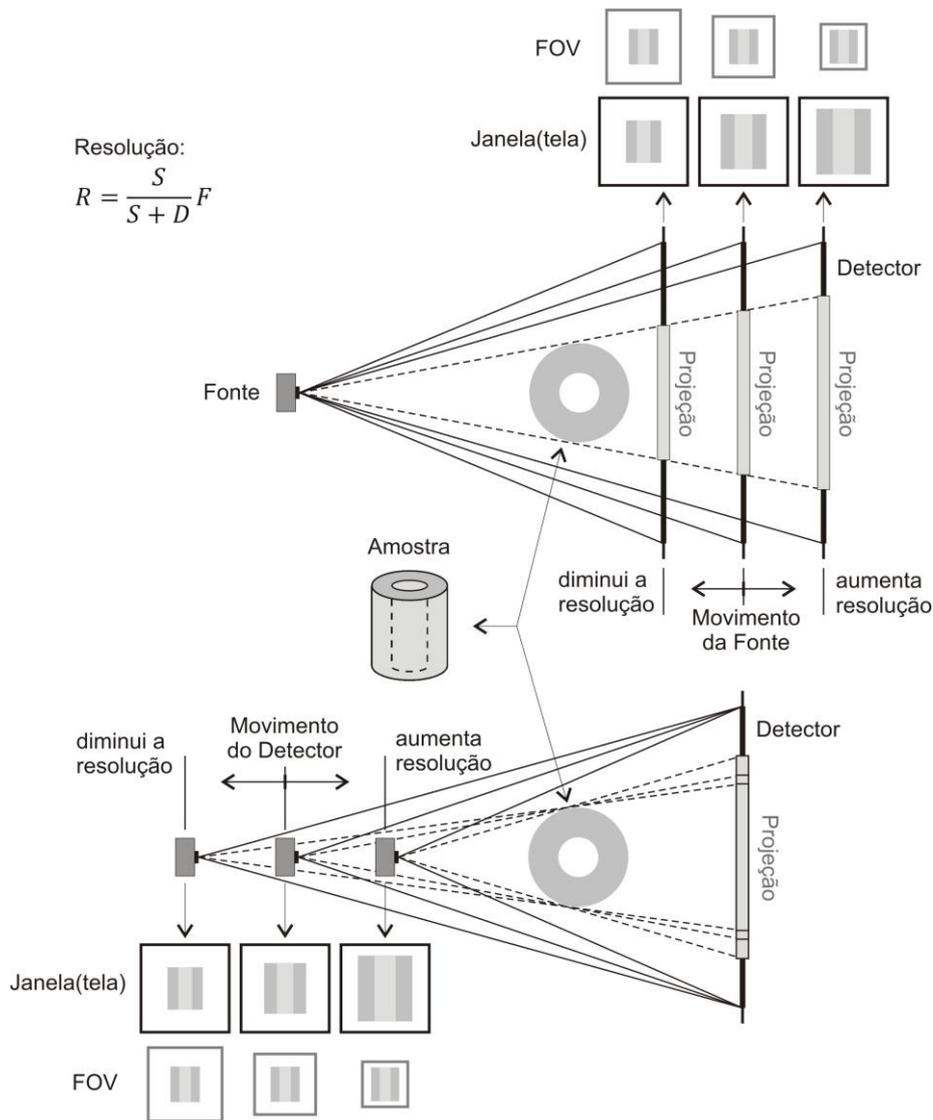


Figura 4. A relação das distâncias fonte-amostra e detector-amostra com a resolução da imagem.

2.3 Ajuste dos Parâmetros de Digitalização

Após escolha da resolução (pelo posicionamento da amostra entre fonte e detector, tipo de lente e *binning*), deve-se proceder para a escolha da energia ideal, definindo-se a tensão e a potência do sistema, com o objetivo de atingir a taxa de transmissão ideal (na faixa entre 20 a 35%). A tensão da fonte pode ser inicializada com 80 (variando entre 60-100) kV (com no máximo 7 kW) ou com 140 (variando entre 120-160) kV (com no máximo 10 kW), respectivamente, para materiais com baixas ou altas densidades (ou também de baixo para alto números Z ou espessura). Após inicialização da fonte de raios-X com a tensão selecionada, o procedimento pode indicar a instalação de um filtro, com o objetivo de atenuar os raios com maior ou menor energia. A decisão de qual filtro deve ser utilizado se dá após tirar uma referência da imagem, que é basicamente uma medida de atenuação/transmissão, sendo calculada pela diferença entre a intensidade dos feixes que chegam no detector ao atravessar o objeto e sem a presença do objeto. A faixa de transmissão obtida pela referência indicará que filtro deve ser utilizado. Para transmissões acima de 75% não há necessidade de filtro. Outra informação importante é que nos casos que se digitaliza imagens onde se tem ar

em volta do objeto, deve-se utilizar um filtro para a faixa de transmissão dois níveis acima daquela indicada no procedimento (ou seja, se o procedimento indica um filtro LE#5, então deve-se utilizar o filtro LE#3). Filtros de baixa energia ou de alta energia são instalados na trajetória do feixe (perto da fonte) para se obter uma tomografia otimizada. Os filtros também são importantes para corrigir o endurecimento dos feixes e artefatos em forma de anéis (que são discrepâncias entre a modelagem matemática e o processo de imagem física real).

Mesmo que o posicionamento da amostra em relação à fonte e ao detector definam a resolução de digitalização, deve-se estar ciente que essa escolha também influencia na tensão e na potência (energia) usadas no processo, pois a energia do feixe decai com o quadrado da distância. Portanto, sempre que possível, procura-se aproximar ao máximo a fonte do objeto.

Por fim, é necessário definir o tempo de exposição (o tempo necessário para adquirir uma única projeção). Este parâmetro determina diretamente a intensidade do feixe transmitido. Quanto mais intensa a imagem, sua qualidade fica melhor, no entanto, resulta em digitalizações demoradas. O procedimento indica que o tempo de exposição ideal é determinado encontrando a imagem com valores de intensidade acima de 5000. Para os materiais selecionados no presente trabalho, como nas amostras da Figura 3, o tempo de exposição pode variar de 1 a até 15 segundos, dependendo da resolução de digitalização.

Para digitalizações otimizadas, recomenda-se durante a extração e preparação das amostras, que as mesmas tenham a forma mais próximas possível de um cilindro. Isto é por causa do próprio processo de digitalização, pois como a amostra gira em torno de seu eixo, as distâncias da superfície da amostra para a fonte e detector poderão mudar para cada ângulo de giro. Se a forma do objeto não for cilíndrica, então, podem surgir dois problemas: o enquadramento da amostra no FOV (excesso de espaço com ar ou perda de informação para alguns ângulos de giro) e a necessidade de utilização de diferentes parâmetros de digitalização (por exemplo, tempo de exposição) para ângulos distintos. Nos casos em que o ajuste dos parâmetros convencionais não é suficiente para se obter imagens de alta qualidade, existem outras técnicas que podem ser utilizadas para melhorar a qualidade de imagem, tais como por exemplo a referência secundária e/ou energia-dual.

Como mencionado anteriormente, cada projeção pode ser capturada em um detector matricial padrão de 2048 x 2048 de 2-Bytes (BIN 1), no entanto, o detector matricial de 1024 x 1024 (BIN 2) é bem mais utilizado para captar as projeções. Isto se deve pela grande quantidade de dados gerados na aquisição, tanto com relação ao armazenamento em disco, como também para manipulação durante o processo de reconstrução. Como o *binning* é o processo de combinar um conjunto de pixels em um único pixel, isto significa que com BIN 2 a quantidade de memória necessária para armazenar uma única projeção é em cerca 2.1 MB e com BIN 1 é cerca de 8,4 MB.

As amostras são giradas em incrementos angulares geralmente através de 360⁰. Uma imagem com qualidade boa pode ser normalmente obtida com 1600 projeções, o que significa que a amostra é girada em incrementos angulares de 0.225⁰ e o montante total dos dados gerados precisa de 3,36 GB de armazenamento com BIN 2 (ou 13,44 GB com BIN 1). No entanto, para imagens de altíssima qualidade, e quando o tempo de digitalização e armazenamento de dados não forem problemas, recomenda-se a digitalização com pelo menos 3200 projeções (pelo menos duas vezes o tempo e a quantidade de dados, para um contraste de fase muito melhor). A extensão de arquivo utilizada para armazenar os dados brutos adquiridos pelo sistema é o TXRM. O software usado para executar a digitalização é o *TXM Controller* (ou o Sistema de Controle *Scout-and-Scan*, ambos da empresa Zeiss).

3 RECONSTRUÇÃO TOMOGRÁFICA

Após a aquisição das projeções, o conjunto de dados tomográficos é reconstruído para produzir o objeto digital 3-D, Figura 2(c). Esta etapa é chamada de reconstrução, e dois parâmetros definidos pelo usuário são fundamentais para a qualidade da imagem reconstruída: o fator de correção do centro de reconstrução (*Center Shift Constant, CSC*) e o fator de correção do endurecimento do feixe (*Beam Hardening Constant, BHC*). Na prática, cada um desses parâmetros é ajustado com base numa regra padrão. O valor de CSC é escolhido a partir da comparação visual entre várias reconstruções da mesma fatia horizontal, cada uma obtida com um valor de correção diferente. O valor de CSC selecionado será então aquele que dá a imagem mais nítida. A Figura 5(a) ilustra cinco imagens com diferentes CSC, onde a imagem do centro é a mais nítida, o que indica, portanto, que o CSC é igual a 21,5 para esse caso. O valor de BHC, por sua vez, é escolhido levando em conta o valor da escala de cinzas associados às diferentes fases do material. Nesse sentido, mais uma vez, comparam-se várias reconstruções da mesma fatia horizontal, cada uma obtida com um valor de correção diferente. Mais especificamente, analisa-se a escala-de-cinzas dos pixels ao longo de uma linha que cruza cada uma das reconstruções. Considerando que cada fase no segundo plano não muda ao longo desta linha, seleciona-se o valor de BHC que resulta no gráfico mais plano (horizontal) de todos. O problema do ajuste do BHC é ilustrado com o auxílio da Figura 5(b). Nesta figura, os três gráficos de escala-de-cinzas mostrados na parte superior estão respectivamente associados às "linhas" que atravessam as reconstruções mostradas na parte inferior. Cada reconstrução foi efetuada com um valor diferente de BHC. Seleciona-se o valor de BHC correspondente ao gráfico do centro, para realizar a reconstrução do objeto 3-D. Observar que o gráfico do lado esquerdo é curvado para cima, enquanto que o do lado direito é curvado para baixo. Como comentário final, enfatiza-se que para os ajustes de CSC e BHC, apenas a fatia horizontal usada na comparação é reconstruída, em vez do todo o objeto 3D.

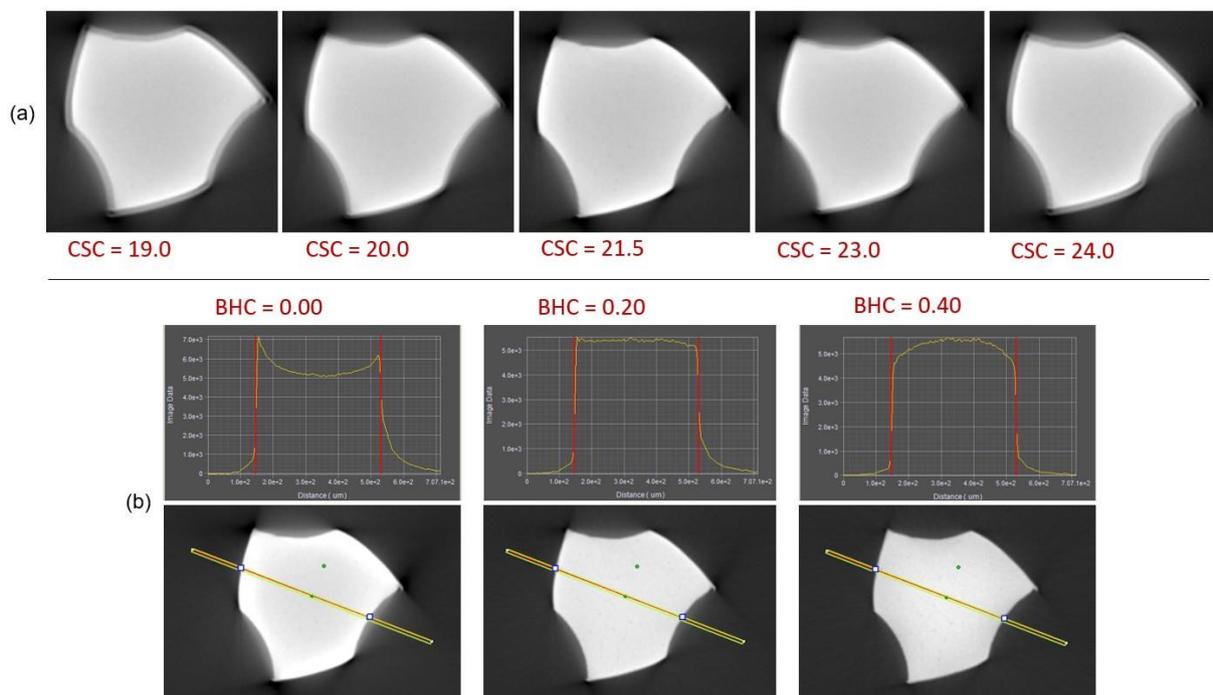


Figura 5. Definição dos parâmetros de reconstrução para um instrumento endodôntico (a) CSC e (b) BHC

Na grande maioria dos casos, a identificação do CSC é uma tarefa relativamente simples e direta. Já a identificação do BHC pode ser complicada, em alguns casos. No caso ilustrado na Figura 5, como este objeto é constituído de um único material (homogêneo), ficou muito simples identificar o BHC. Porém, quando o material for heterogêneo, constituído por mais de uma fase, como nos casos ilustrados na Figura 6, faz-se necessário que o analista tenha o mínimo de conhecimento dos materiais que ele está digitalizando, para “determinar” o BHC mais apropriado. Observar que os três gráficos mostrados na parte inferior da Figura 6, exigem que o analista indique por meio da escolha do BHC qual das fases do material (dente) é a mais homogênea, se é a dentina ou o esmalte.

Vale ressaltar que diferentes reconstruções do mesmo objeto, realizadas com diferentes BHC, levam a diferentes valores de cinza para um mesmo *voxel*. Isto significa que deve haver um meio para normalizar a gama de valores na escala de cinzas para uma dada imagem, através do conhecimento *a priori* dos materiais que constituem a amostra que foi digitalizada. Dessa forma, é interessante que ao se digitalizar uma amostra, seja colada (geralmente em sua superfície) algum material que sirva como referência para a normalização. Por exemplo, nas digitalizações de dentes é recomendado colar um pedaço de hidroxiapatita pura nas amostras de dentes, por ser um mineral importante encontrado no esmalte. Portanto, esta é uma das principais razões porque é tão importante para os autores trabalhar em um grupo de pesquisa multidisciplinar, composto por engenheiros químicos, geotécnicos, estruturais e mecânicos.

O software utilizado para executar a reconstrução da imagem é o *TXM Reconstructor* (também da empresa Zeiss). Para aquisições com BIN 2, a imagem possui 1024^3 (1 bilhão) de pontos de dados (*voxels*) (ou 8 bilhões com BIN 1), o que resulta em 2,0 GB de armazenamento com BIN 2 (ou 16,0 GB com BIN 1). Os dados reconstruídos podem ser armazenados em diferentes tipos de formatos. Os formatos mais comuns são as extensões de arquivo TXM, TIFF e DICOM, que são ambos formatos “*raster*”.

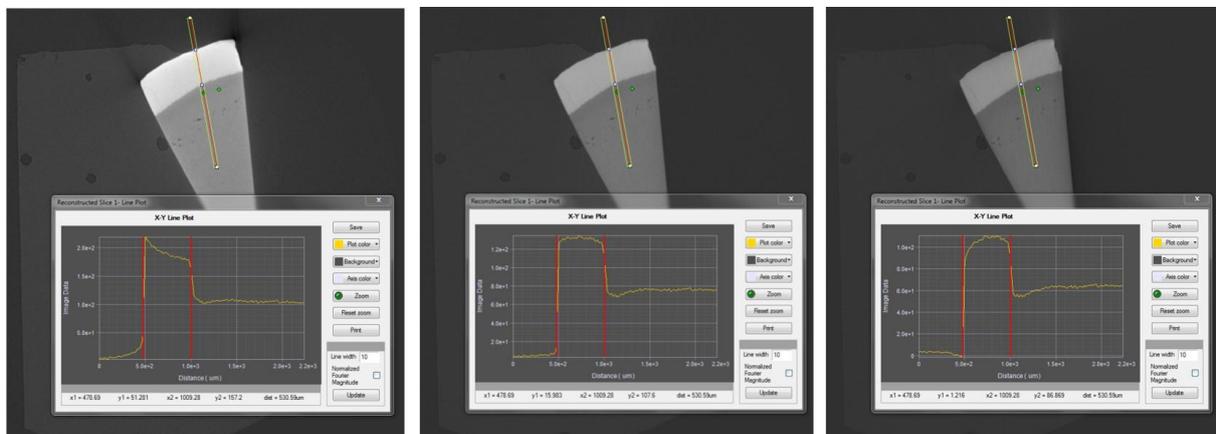


Figura 6. Definição do BHC em amostra heterogênea: dente.

4 PROCESSAMENTO E SEGMENTAÇÃO DAS IMAGENS

O método mais básico para explorar a configuração dos materiais (fases) é seccionar o volume de dados sequencialmente ao longo de secções transversais bidimensionais definidas pelo analista por meio de visualização computacional. Embora este seja um método simples, torna-se indiferente na visualização de conectividades das fases e de defeitos tridimensionais, em conjuntos de dados grandes e complexos. Dessa forma, os dados podem ser explorados usando renderização direta do volume. Este método permite que o analista estude detalhes na

variação composicional em termos de conectividade, distribuição e densidades relativas, podendo ainda realizar medições e quantificações.

Para o processo de análise seja mais simples e leve, é interessante trabalhar com volumes menores, os quais serão denominados aqui de Volumes de Interesse (*Volume-Of-Interest*, VOI). Estes dados constituem a base das medidas realizadas nas análises. Vale ressaltar, que o nosso sistema, por utilizar uma tecnologia onde os feixes são emitidos em formato de cone, o objeto reconstruído apresentará artefatos tanto no topo como na sua base, caso o mesmo não fique 100% enquadrado no FOV (dentro do cone), durante o giro completo da amostra. Esse problema ocorrerá, mesmo dispondo de algoritmos sofisticados de reconstrução. Portanto, quando isso ocorrer, recomenda-se descartar topo e base dos objetos 3-D, redefinindo assim o VOI, reduzindo naturalmente o volume de dados.

A fim de executar medições complexas, é importante identificar e separar diferentes fases do objeto. Este procedimento é chamado de segmentação. No contexto da engenharia digital de materiais, o principal objetivo da segmentação de imagens é identificar (e rotular) todas as fases distintas na imagem digital de amostra de materiais. No entanto, para fins de determinação de algumas propriedades, tais como porosidade e cálculo de permeabilidade direcional absoluta efetiva, só precisa definir o espaço poroso. Para fazer isso, um processo de *thresholding* simples (determinando um limiar global para a imagem inteira ou localmente através da aplicação de limiares diferentes em diferentes regiões espaciais) pode ser aplicado a fim de gerar uma imagem binária, em que uma cor está associada ao esqueleto sólido e uma outra cor está associado ao espaço poroso. Calcular a porosidade reduz-se então em contar o número total de *voxels* correspondente ao espaço de poros e dividir esse número pelo número total de *voxels* da imagem (desde que todos os *voxels* sejam do mesmo tamanho). Por outro lado, para o cálculo de módulos elásticos efetivos, é necessário identificar todas as fases distintas do material. A maneira mais simples de fazer isso consiste em aplicar um procedimento de *thresholding* múltiplo, onde com base na análise de histogramas, cada gama da escala de cinza definido corresponde a uma fase do material. Normalmente, ele funciona bem para imagens de alta qualidade e tem sido o nosso procedimento de rotina para a segmentação. Técnicas de segmentação mais sofisticadas são aquelas que são baseadas no conceito de crescimento de regiões, em que as regiões de sementes pequenas são escolhidas e cultivadas por algumas regras específicas. Estas técnicas demoram muito mais tempo para serem aplicadas e exigem um custo computacional muito maior do que o exigido pela técnica de *thresholding* múltiplo. Além disso, elas modificam (ligeiramente) a imagem reconstruída originalmente já que elas sinteticamente (re-) definem a microestrutura dos materiais. Nesse sentido, elas devem ser aplicadas com muito cuidado, a fim de não introduzir artefatos e preservar em todas as amostras as características microestruturais originais significativas.

Independentemente do método de segmentação, um filtro de suavização deverá ser aplicado antes do processo de segmentação, para melhorar a qualidade da imagem reconstruída. Existem vários filtros diferentes para este fim. Utilizamos geralmente o filtro de suavização de imagem mediano não-local, que remove os ruídos de alta frequência. Uma outra opção é o filtro de difusão anisotrópica tridimensional, que além de remover o ruído de alta frequência, visa também a preservar os contornos de grão e características nítidas na imagem. Tanto para a filtragem das imagens, assim como para o *thresholding* múltiplo das imagens, temos utilizado um pacote de processamento de imagem disponível comercialmente que é capaz de lidar com imagens de 2048 x 2048 x 2048 *voxels* em um período muito curto de tempo, utilizando um PC comum. Para uma discussão mais detalhada sobre a segmentação de imagens no contexto de materiais, sugerem-se os trabalhos de Andra et al. (2013) e Sakellariou et al. (2007).

5 ESTUDOS DE CASO

Para validar a metodologia desenvolvida para utilização de micro-CT no contexto de análise de materiais, apresentam-se as principais experiências e aprendizados adquiridos durante as seguintes investigações e estudos de caso selecionados: avaliação da capacidade de remineralização de dentes, porosidade em materiais compósitos, caracterização de ferro fundido nodular, avaliação da integridade estrutural de instrumentos endodônticos em ligas de Ni-Ti e determinação de propriedades efetivas de rochas.

5.1 Avaliação da Capacidade de Remineralização de Dentes

Inicialmente, foram realizados estudos investigativos para verificar se seria possível visualizar e quantificar informações da subsuperfície de dentes, como ilustrado na Figura 7.

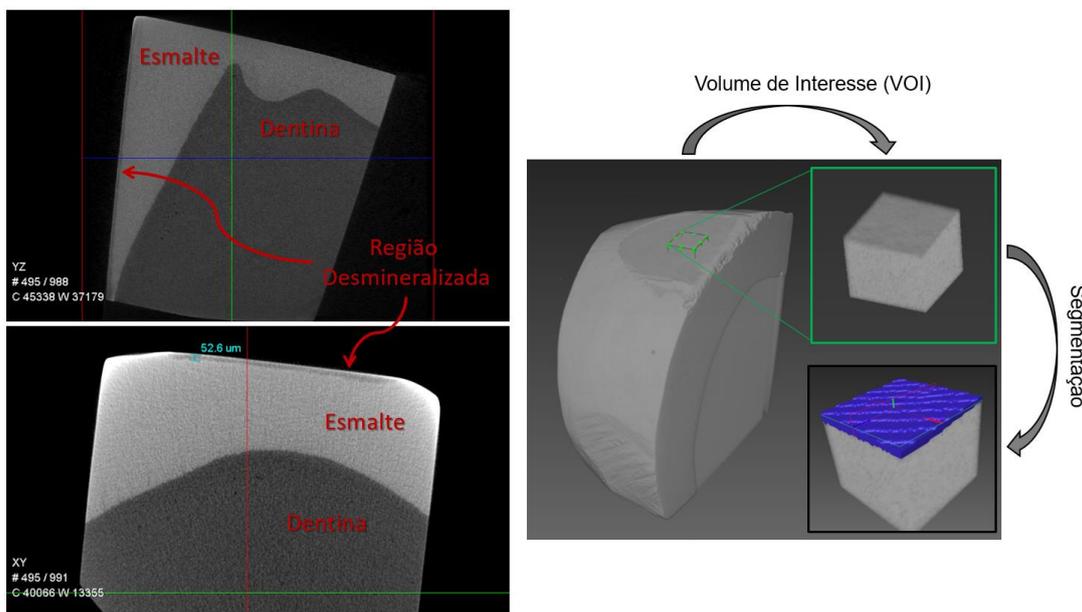


Figura 7. Micro-CT de amostras de dentes onde é possível identificar diferentes regiões.

A motivação principal para realização desse estudo de caso foi investigar a capacidade de remineralização de dentes quando submetidos ao tratamento de diferentes pastas de dentes, após terem passado por um processo de desmineralização. Os procedimentos usuais utilizados para realizar essa investigação são basicamente através de microscópios óticos com imagens da superfície dos dentes e por ensaios de micro dureza superficiais e transversais realizados nas amostras. Ambos os procedimentos não permitem inferir informações da profundidade da região desmineralizada, sendo então a micro-CT uma técnica muito atraente para tal fim. Após realizar diversas micro-CT das amostras dos dentes, com a metodologia descrita no artigo, foi possível não apenas visualizar a região desmineralizada, assim como realizar medições e estudos estatísticos da espessura dessa região, como ilustrado na Figura 7. Para mais detalhes sobre a pesquisa recomenda-se consultar Miyahira et al (2016).

5.2 Porosidade em Compósito de Fibra de Vidro com Resina Vinilester

Entre todas as amostras digitalizadas no nosso laboratório, as amostras de material compósito (com mantas longitudinais e entrelaçadas de fibra de vidro com matriz de resina vinilester) foi o único material até então que precisou ser digitalizado com BIN 1, pois no

ajuste dos parâmetros de tensão, percebeu-se que as radiografias ficavam superexpostas. Para identificar superexposição é preciso gerar uma radiografia com o tempo de exposição igual a 10 segundos, e verificar se as intensidades nos pixels da projeção ficam acima de 60000. Caso positivo, deve-se ajustar o sistema para evitar problemas na imagem. Como discutido anteriormente, com o BIN 1 tem-se imagens com o dobro da resolução, porém o tempo de digitalização fica demasiadamente demorado e a quantidade de dados gerada é muito grande, ficando difícil operar o computador durante o processamento das imagens.

Após conseguir visualizar a estrutura interna do compósito, foi possível identificar a grande quantidade de vazios nas amostras, como ilustrado na Figura 8. Daí surgiu a motivação de investigar e determinar a porosidade de tais materiais. Dentro desse estudo foram realizadas várias micro-CT, com posterior tratamento e segmentação das imagens, para realizar as análises e quantificações. Chegaram-se a diversas conclusões interessantes, onde mais detalhes podem ser obtidos em Vieira et al (2016).

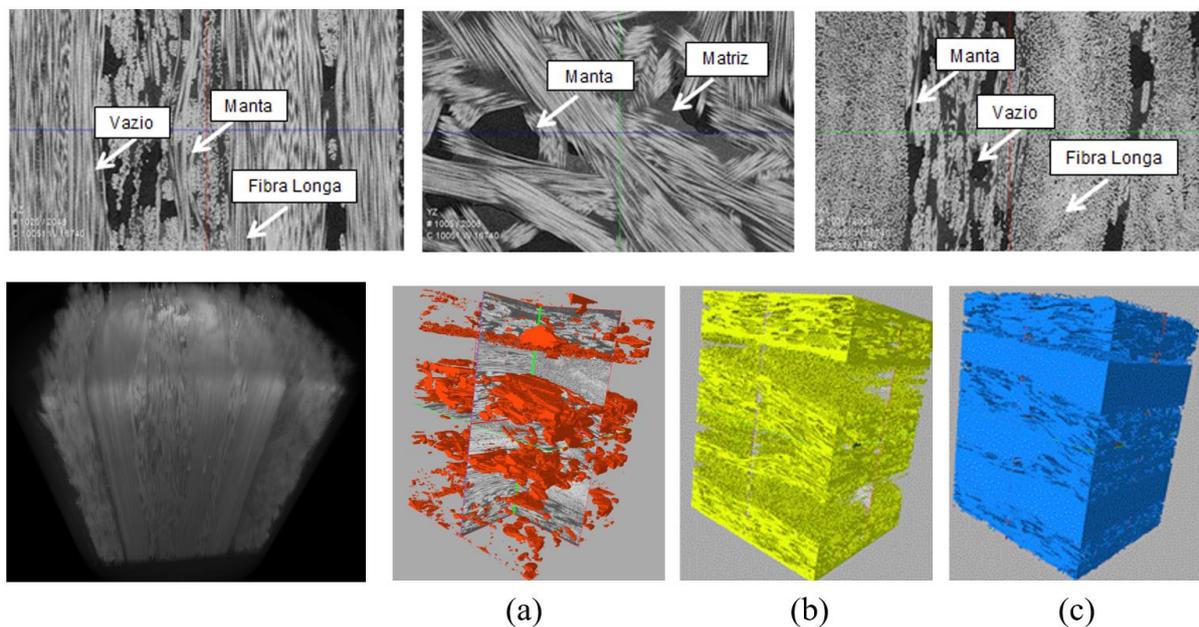


Figura 8. Anisotropia do material compósito. Variação na composição dos materiais componentes ao longo de toda a amostra: (a) vazios, (b) matriz, e (c) fibras. (Adaptado de Vieira et al, 2016)

5.3 Caracterização Micro Estrutural de Ferro Fundido Nodular

A resolução da imagem desempenha um papel central no sucesso das subsequentes medições e cálculo de propriedades efetivas. De um modo geral, a resolução deve ser selecionada com base em dois critérios antagônicos: i) deve ser suficientemente elevada para resolver bem a microestrutura; e ii) deve ser baixa o suficiente, tal que permita escolher um volume representativo cujo tamanho de imagem correspondente é tratável nos procedimentos da simulação numérica. Ilustramos a questão da seleção da resolução da imagem no exemplo a seguir.

Nas Figuras 9(b), 9(c) e 9(d), é possível ver três fatias de micro-CT do mesmo ferro fundido. Na Figura 9(d), o bloco foi digitalizado com uma resolução de 11 μm , enquanto que nas Figuras 9(b) e 9(c) ele foi digitalizado com resoluções de 1 μm e 3 μm , respectivamente. Ambas as fatias têm 1024 pixels de diâmetro.

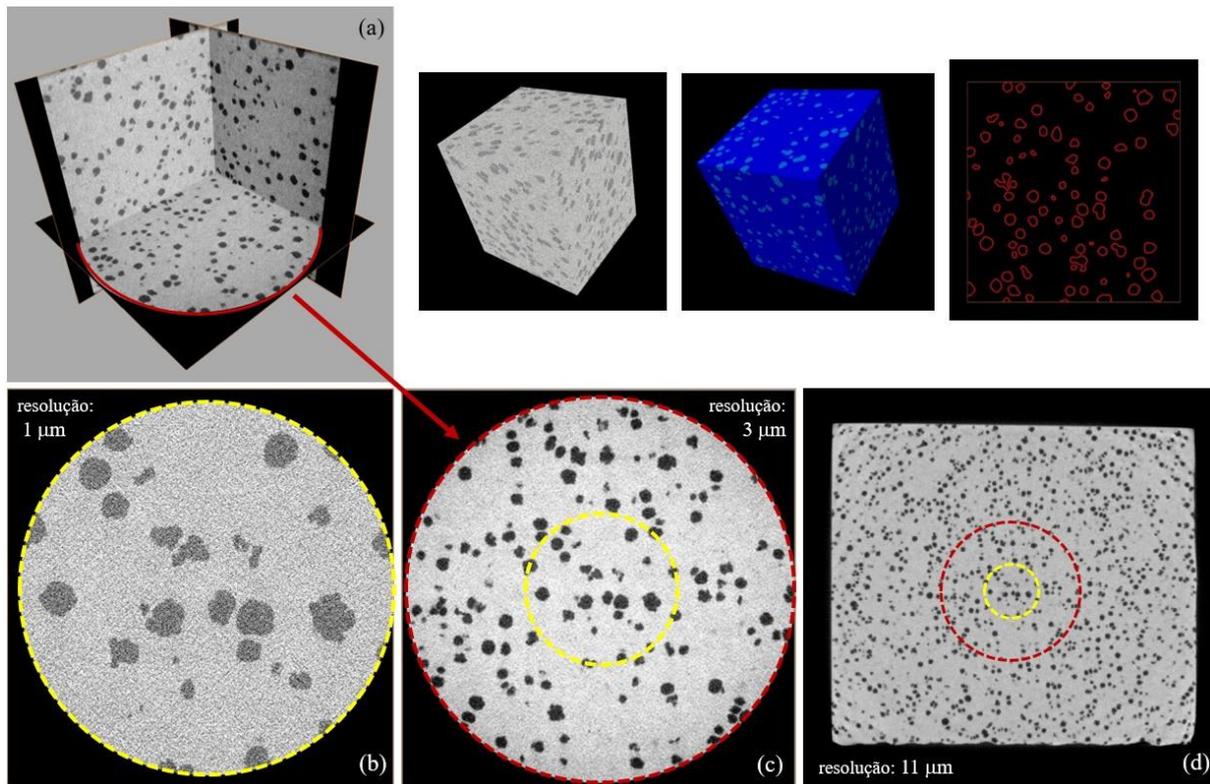


Figura 9. Fatias de três tomogramas obtidos da mesma amostra de ferro fundido. (a) Seções transversais ortogonais. (b) Tomogramas com 1 μm de resolução, (c) 3 μm de resolução, e (d) 11 μm de resolução. (e) VOI com segmentação (objeto binarizado) e curvas do contorno dos grãos de grafita.

Por inspeção visual da Figura 9(d), observa-se que a microestrutura da fatia é mais ou menos homogênea e que qualquer outra região circular (vermelha) escolhida dentro da fatia teria aproximadamente a mesma microestrutura. Nesse sentido, pode-se dizer que a fatia da Figura 9(c) pode ser tomada como um volume mais representativo (verificou-se que a microestrutura não difere significativamente de fatia a fatia na imagem 3D representada na Figura 9(a)). Além disso, observa-se que é possível distinguir bem os contornos de grãos da grafita na Figura 9(c), indicando que a resolução de 3 μm é suficiente para resolver a microestrutura do bloco. Concluí-se, então, que esta resolução é adequada para o presente caso, uma vez que atende a ambos os critérios acima mencionados. A linha tracejada em amarelo, delimitando uma região circular nas fatias da Figura 9 representa a quantidade da fatia de resolução 1 μm nas outras fatias. Corroborando com o que foi visto pela resolução de 3 μm , observa-se que a resolução de 1 μm é suficiente para resolver a microestrutura. Na verdade, é possível ver melhor os detalhes de contorno dos grãos de grafita nesta fatia do que na Figura 9(d), embora acredita-se que esses detalhes não teriam um impacto significativo nas simulações numéricas. Por outro lado, observa-se agora que há apenas poucos grãos na região circular, e que a escolha de outras regiões de mesmo diâmetro dentro da fatia teria potencialmente uma microestrutura muito diferente. Isto indica que para a resolução de 1 μm as fatias já não podem ser consideradas como um volume representativo, indicando assim que esta resolução não é adequada para os nossos objetivos. A partir da identificação e extração de um VOI das imagens (capazes de resolver bem a microestrutura), é possível aplicar o processo de segmentação discutido na Seção 4, para daí realizar as análises e quantificações desejadas.

5.4 Avaliação da Integridade Estrutural de Instrumentos Endodônticos

Outro estudo interessante, inclusive com o intuito de testar a capacidade do sistema em digitalizar materiais metálicos com alto número atômico, e tentar visualizar descontinuidades e defeitos na sua microestrutura, foi o de avaliação da integridade estrutural de instrumentos endodônticos, antes e após cada uso, simulados fisicamente em laboratório. Neste estudo, foi possível acompanhar a evolução das trincas e visualizar a orientação das descontinuidades dentro da amostra, como ilustrado na Figura 10. Além das solicitações que este instrumento será submetido, ao longo do seu uso, pode-se perceber pelas micro-CT que outro fator decisivo para a sua vida, são as ranhuras nas superfícies deixadas provavelmente pelo processo de usinagem, cujas orientações são desfavoráveis para a sua vida. O próximo passo do estudo é a geração de malhas de elementos finitos para realizar análise de tensões e estimar a vida a fadiga desse instrumento, confrontando com dados experimentais.

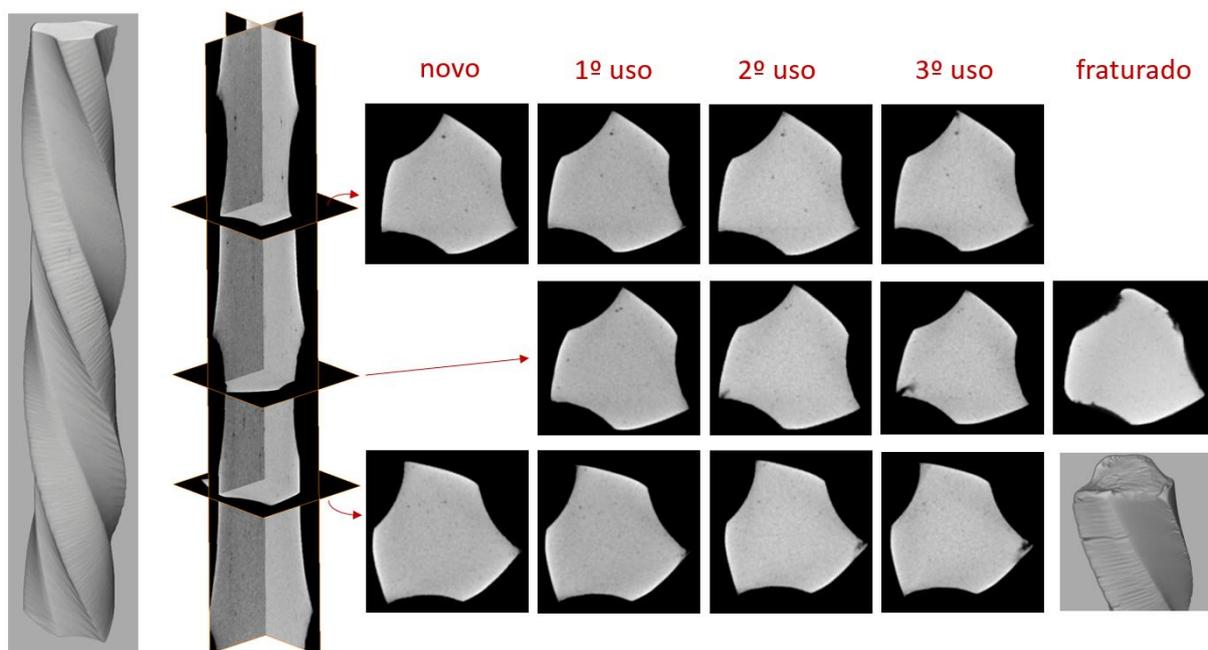


Figura 10. Imagem tridimensional com planos ortogonais e 3 seções transversais do instrumento: novo (antes do uso), após o primeiro uso, segundo uso, terceiro uso e quarto uso, quando ocorreu a fratura.

5.5 Determinação de Propriedades Efetivas de Rochas

Na presente pesquisa, assume-se que o material das amostras é isotrópico. Assim, apenas dois parâmetros elásticos são necessários para definir o seu comportamento constitutivo, ou seja, então considerados apenas o módulo de Young efetivo e o coeficiente de Poisson efetivo. Existem duas abordagens numéricas para estimar os parâmetros elásticos efetivos.

A primeira abordagem utilizada para determinação das propriedades elásticas efetivas se baseia em simplesmente reproduzir o teste de compressão não-confinado, da mesma forma que é realizado fisicamente em laboratório. Este teste consiste na aplicação de uma carga de compressão uniaxial no corpo de prova e medição da deformação global resultante. As condições de contorno para a correspondente simulação numérica são as seguintes: o fundo da amostra não pode mover-se na direção vertical, mas está livre para expandir-se lateralmente; as superfícies laterais do corpo de prova são consideradas como superfícies livres; prescreve-se deslocamento vertical uniforme na parte superior do corpo. O modelo para simulação

numérica e as condições de contorno correspondentes estão apresentados esquematicamente na Figura 11(a). O módulo de Young efetivo pode então ser calculado pela razão entre a deformação vertical global aplicada e a correspondente carga de compressão determinada pela simulação. O coeficiente de Poisson efetivo pode ser inferido a partir da razão entre as deformações globais axial e transversal.

A segunda abordagem é proveniente da homogeneização multi-escala computacional e consiste em utilizar as chamadas condições de contorno periódicas. O pressuposto básico por trás do uso de condições de contorno periódicas é que o modelo numérico é um volume representativo de um meio (estatisticamente homogêneo) não contornado. No contexto do Método dos Elementos Finitos, as condições de contorno periódicas são aplicadas atribuindo-se a mesma numeração para o par de nós correspondentes em lados opostos. Ver Nguyen et al. (2012) para os detalhes de implementação e Garboczi & Day (1995) para exemplos de aplicação com esta abordagem. O modelo para simulação numérica com as condições de contorno correspondentes é apresentado na Figura 11(c).

Como se pode notar, a geração das malhas de elementos finitos não é uma tarefa simples nesse contexto, demandando a utilização de software especializado ou implementação de algoritmos sofisticados. Dessa forma, os autores optaram por utilizar uma estratégia do Método dos Elementos Finitos baseada em *voxels*, onde cada *voxel* da imagem é um elemento finito. Para tirar proveito das características dessa estratégia, a mesma pode ser paralelizada com o auxílio de técnicas como o *greedy coloring*, como ilustrado na Figura 11(c). Essa técnica consiste em “colorir” grupos de elementos que não compartilham os mesmos graus de liberdade. Com isso, é possível acessar e escrever simultaneamente dados na memória sem se preocupar com a concorrência. A possibilidade concreta de paralelismo do procedimento nos permite resolver volumes representativos grandes o suficiente para obter propriedades efetivas confiáveis.

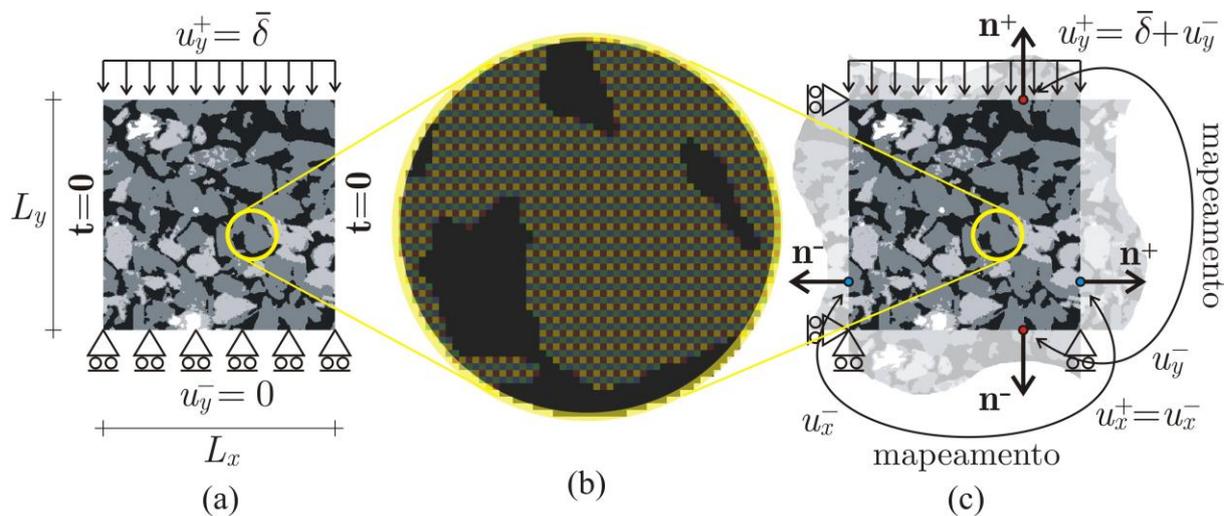


Figura 11. (a) Condições de contorno utilizadas na simulação do teste de compressão simples; (b) malha de elementos finitos baseada em *voxels* com *coloring*; e (c) condições de contorno periódicas.

CONCLUSÕES

No presente trabalho, descrevemos nossa experiência com laboratório digital de materiais, realçando as nossas escolhas para a execução das tarefas relacionadas, utilizando-se microcomputadores. Discutimos a aquisição e reconstrução de imagem digital de micro-CT, abordando a questão do ajuste dos parâmetros relacionados, e discutimos a seleção de resolução de imagem, processamento e segmentação das imagens. Além disso, apresentamos cinco estudos de casos selecionados, aplicando a metodologia desenvolvida para a realização de pesquisas e análises de diferentes materiais. Esperamos que as informações e dicas que damos aqui possa ser útil para pesquisadores que pretendem trabalhar no desenvolvimento desta tecnologia emergente, ajudando-os a desenvolver seus próprios laboratórios digitais de materiais.

AGRADECIMENTOS

BG Brasil por financiamento, ANP (Compromisso com Investimentos em Pesquisa e Desenvolvimento), CAPES, CNPq e FAPERJ. Os autores gostariam também de agradecer a todos os colaboradores que digitalizaram amostras no equipamento da UFF.

REFERÊNCIAS

- Andra, H., Combaret, N., Dvorkin, J., Glatt, E., Han, J., Kabel, M., Keehm, Y., Krzikalla, F., Lee, M., Madonna, C., Marsh, M., Mukerji, T., Saenger, E.H., Sain, R., Saxena, N., Ricker, S., Wiegmann, A., & Zhan, X., 2013. Digital rock physics benchmarks-Part I: Imaging and segmentation. *Computers & Geosciences*, vol. 50, pp. 25-32.
- Garboczi, E.J., & Day, A.R., 1995. An algorithm for computing the effective linear elastic properties of heterogeneous materials: three-dimensional results for composites with equal phase poisson ratios. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 43, n. 9, pp. 1349-1362.
- Landisa, E. N., & Keane, D. T., 2010. X-ray Microtomography. *Materials Characterization*, vol. 61, pp. 1305-1316.
- Miyahira, K., Coutinho, T. C., Silva, E., Pereira, A., & Tostes, M., 2016. Comparative evaluation of CPP-ACP and fluoride on inhibition of human enamel demineralization: Cross-sectional hardness and microCT studies. *Oral Health & Preventive Dentistry. (To appear)*
- Nguyena, V.-D., Béchéta, E., Geuzaine, C., & Noels, L., 2012. Imposing periodic boundary condition on arbitrary meshes by polynomial interpolation. *Computational Materials Science*, vol. 55, pp. 390-406.
- Sakellariou, A., Arns, C.H., Sheppard, A.P., Sok, R.M., Averdunk, A., Limaye, A., Jones, A.C., Senden, T.J., & Knackstedt, M.A., 2007. Developing a virtual materials laboratory. *Materials Today*, vol. 10, n. 12, pp. 44-51.
- Vieira, P.R., Vieira, J.D., Carvalho, E.M.L., Almeida, R.M.R., & Pereira, A.M.B., 2016. Propriedades Físicas de Material compósito pultrudado a partir de ensaios de laboratório e microtomografia. In. *XXXVII Jornadas Sul-americanas de Engenharia Estrutural*, Assunção, Paraguai.