

SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE RECONSTRUÇÃO EM TRÊS DIMENSÕES¹

Márcia Regina Baldissera²

Wesley Luiz da Silva Assis²

Artiane Fernanda Pereira de Freitas³

Paulo Rangel Rios⁴

Resumo

Trabalhos recentes estudam a reconstrução tridimensional via seccionamento em série. Entretanto, existem dificuldades que devem ser superadas na aplicação desta técnica em diversos materiais. Por exemplo, é necessário conhecer a distância ideal entre as séries de seções: distâncias pequenas aumentam demasiadamente o trabalho necessário, enquanto distâncias muito grandes comprometem a exatidão da reconstrução 3D. Desta forma, a simulação da microestrutura pode ser útil antes de começar o trabalho de seccionamento. Por exemplo, em um material que contém dispersão de partículas esféricas é possível obter estimativas razoáveis do número das partículas por unidade de volume e do raio médio da partícula, que poderia ser usado para gerar uma microestrutura simulada. Neste trabalho, foi usada a simulação com o Autômato celular para gerar a microestrutura 3D a partir de medidas preliminares de ferro fundido nodular. As seções foram introduzidas num programa de reconstrução microestrutural 3D. Este trabalho mostra ser útil para aperfeiçoar o trabalho experimental do seccionamento em série.

Palavras-chave: Simulação; Reconstrução tridimensional; Seccionamento em série; Autômato celular.

SIMULATION OF THREE-DIMENSIONAL RECONSTRUCTION PROCESS

Abstract

Many recent papers deal with computer aided three-dimensional microstructural reconstruction via serial sectioning. However, several difficulties must be overcome in order to successfully apply this technique to real materials. For instance, it is necessary to know what would be the best "cost-benefit" distance between serial sections: a too small distance increases the work whereas a too large distance may compromise the accuracy of the 3D reconstruction. Therefore, computer simulation of the microstructure could be useful before one starts serial sectioning. For example, in a material containing spherical particle dispersion it is possible to obtain reasonable estimates of the number of particles per unit of volume and of the mean particle radius that could be used to generate a simulated microstructure. In this work, cellular automata simulation was used to generate the "test" 3D microstructures taking preliminary measurements on a nodular cast iron as the starting point. From this simulation, serial sections were introduced in a program designed to reconstruct the 3D microstructure. This previous work is shown to be quite useful in the optimum design of the experimental serial sectioning.

Key-words: Simulation; 3D reconstruction; Serial sectioning; Cellular automata.

¹ Contribuição técnica ao 62º Congresso Anual da ABM – Internacional, 23 a 27 de julho de 2007, Vitória – ES, Brasil.

² Aluno de Doutorado – Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda/UFRJ

³ Aluna de Mestrado – Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda/UFRJ

⁴ Professor Titular – Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda/UFRJ

1 INTRODUÇÃO

A maioria das microestruturas de materiais opacos é geralmente caracterizada através de superfícies planas bidimensionais, utilizando análises estereológicas para obter informações quantitativas sobre a microestrutura. No entanto, informações precisas sobre a topologia dos grãos são limitadas pelas observações em duas dimensões, principalmente no caso de microestruturas complexas.^(1,2) Desta forma, os cientistas de materiais freqüentemente fazem suposições a respeito da forma e distribuição das características microestruturais em três dimensões, as quais estão ocultadas dentro do material.⁽³⁾ Devido a estas dificuldades, atualmente há um grande interesse em se obter representações microestruturais em três dimensões, com a finalidade de facilitar os estudos sobre a relação processamento-microestrutura-propriedades dos materiais.⁽⁴⁾

Certas informações geométricas e morfológicas sobre uma microestrutura tridimensional não podem ser deduzidas somente a partir de observações metalográficas no plano bidimensional, pois ficam limitadas. Por isso, observações diretas na microestrutura tridimensional são de grande interesse. Uma caracterização microestrutural em três dimensões possibilita um estudo mais realista e detalhado dos contornos de grãos, orientações cristalográficas, morfologia e até a variação composicional. Através da reconstrução em três dimensões é possível conhecer a evolução microestrutural a partir do formato dos precipitados.⁽⁵⁾

A visualização em três dimensões de uma microestrutura obtida a partir do processo de reconstrução 3D tem sido uma importante ferramenta no estudo da estereologia quantitativa de materiais opacos. Dependendo do interesse particular, uma microestrutura tridimensional pode ser renderizada utilizando algumas técnicas, tais como, tomografia computadorizada de raios X, ressonância magnética e seccionamento em série (*serial section*).⁽⁴⁾

A técnica de seccionamento em série desenvolvida em 1970 possibilita reconstruir um volume da microestrutura em 3D a partir de seções planas da mesma. Esta técnica é bastante utilizada para caracterizar quantitativamente microestruturas de materiais opacos. O volume microestrutural contém um grande número de características do material reconstruído, como os grãos, os poros ou partículas de segunda fase, possibilitando o conhecimento da conectividade das fases, bem como uma análise da topologia de cada região/fase do material.^(1,4)

O processo convencional do seccionamento em série envolve obter uma imagem em um microscópio ótico de uma região do plano da microestrutura, com o posterior polimento da amostra para retirada de pequenas camadas da mesma, em seguida obter imagens dos planos localizados exatamente abaixo dos planos anteriores. Este procedimento é repetido várias vezes para gerar uma pilha de seções a qual será renderizada para a visualização de um volume em três dimensões. Para a obtenção das seções deve-se considerar que a distância entre cada seção deve ser menor do que o tamanho médio dos grãos da amostra, evitando assim qualquer perda de informação sobre a microestrutura. Além disso, devem-se levar em conta as características que serão estudadas e as limitações de cada material, pois a resolução da representação tridimensional obtida a partir de seccionamentos em série, é muitas vezes limitada pela espessura de cada camada das séries de seções.⁽¹⁾

A simulação do processo de reconstrução em três dimensões utiliza imagens de seções planas, obtidas através de modelos gráficos, que apresentam a geometria e as dimensões reais dos grãos. Este artifício tem sido de grande utilidade no estudo

da topologia e da conectividade dos grãos individuais.⁽⁶⁾ Contudo, a reconstrução tridimensional com voxel (pixel em 3D) de alta resolução é de difícil obtenção.

O processo de reconstrução em três dimensões ocorre através da integração entre os pontos de cada plano. Quanto menor o espaço de integração entre os planos, maior será a quantidade de planos necessários para a obtenção de uma boa resolução para visualização dessa integração (reconstrução em 3D). A parte experimental da reconstrução requer várias tentativas até atingir as melhores condições de polimento, ocasionando perda de tempo e material. Com a simulação de todas as partes do processo de reconstrução 3D, será possível prever, por exemplo, a quantidade exata de seções que devem ser retiradas da amostra em estudo, evitando testes experimentais aleatórios.

O método proposto neste trabalho consiste em gerar uma microestrutura semelhante à obtida experimentalmente. Esta microestrutura será gerada com o programa Autômato Celular (A.C.). Os autômatos celulares são códigos computacionais geralmente desenvolvidos para simular evoluções discretas e dinâmicas. Os dados de saída do programa A.C. podem ser apresentados na forma gráfica, os quais podem ser visualizados como figuras. O programa A.C. de Rios e Assis⁽⁷⁾ desenvolvido para simular transformação de fase por nucleação e crescimento foi adaptado para gerar microestruturas com duas ou mais fases. A matriz de ferro fundido nodular pode ser gerada a partir de parâmetros estereológicos microestruturais, tais como: fração volumétrica (V_V), superfície por unidade de volume (S_V), ou número de núcleos por unidade de volume (N_V).

A microestrutura gerada pelo algoritmo Autômato Celular não é idêntica à microestrutura real de onde foram medidos os parâmetros estereológicos, apenas tem as mesmas características quantitativas dos parâmetros medidos. A diferença está apenas no posicionamento dos precipitados de grafita no interior da matriz de ferro fundido, pois o código gera um posicionamento aleatório para cada precipitado de grafita. Estas microestruturas geradas são seccionadas com auxílio do programa comercial de visualização Tecplot® e a reconstrução é feita com o programa Reconstruct.⁽⁸⁾

O presente trabalho tem por objetivo utilizar a simulação computacional como uma importante ferramenta na obtenção de informações que auxiliem a parte experimental da reconstrução em três dimensões, fornecendo dados como: a espessura adequada que deve ser retirada em cada seção, quais são as regiões da amostra de maior interesse entre outras informações. Com os resultados do modelamento do processo de reconstrução tridimensional é possível verificar quantas seções são necessárias para reconstruir o volume microestrutural de amostras de ferro fundido nodular. A maior vantagem deste modelo é a capacidade de gerar informações sobre qualquer microestrutura conhecendo apenas algumas características quantitativas das mesmas, (V_V , S_V e N_V), podendo assim aplicar este método para vários materiais opacos distintos.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

A microestrutura da amostra de ferro fundido nodular foi recriada a partir do código computacional Autômato Celular utilizando os dados de N_V e V_V , considerando o ferro como matriz e a grafita como a fase dispersa. Para o desenvolvimento do código utilizou-se como base o método do Autômato Celular em três dimensões⁽⁹⁾. As medidas de S_V (área superficial de grafita por unidade de volume) e V_V (volume de grafita por unidade de volume) foram obtidas por meio de metalografia quantitativa.

A partir dos dados obtidos experimentalmente, calculou-se N_v (número de grafita por unidade de volume). Os resultados obtidos acima foram utilizados como dados de entrada para o programa de simulação computacional Autômato Celular. Como complementação dos dados de entrada foram utilizados: matriz cúbica, vizinhança de von Neumann, condições de contorno periódicas e autômatos celulares probabilísticos. A técnica de autômato celular probabilístico é utilizada para garantir formatos mais semelhantes aos precipitados de grafita (esférico) dispersos no ferro. A vizinhança de von Neumann foi escolhida pelos bons resultados alcançados em outras simulações computacionais de transformação de fase ⁽¹⁰⁾. No decorrer da simulação computacional o soluto (precipitado de grafita) evolui até alcançar a fração volumétrica necessária para compor a microestrutura.

O programa comercial Tecplot® foi utilizado para realizar o seccionamento, a captura e o alinhamento das seções bidimensionais. Os planos 2D foram salvos e nomeados em seqüência, por ordem de captura. A reconstrução tridimensional foi realizada com o programa Reconstruct utilizando 50 seções planas bidimensionais da microestrutura simulada, o que possibilitou a geração e visualização do volume microestrutural dos precipitados de grafita.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

As microestruturas simuladas através do programa Autômato Celular ficaram bastante semelhantes à microestrutura real da amostra de ferro fundido nodular. A Figura 1 mostra a microestrutura modelada.

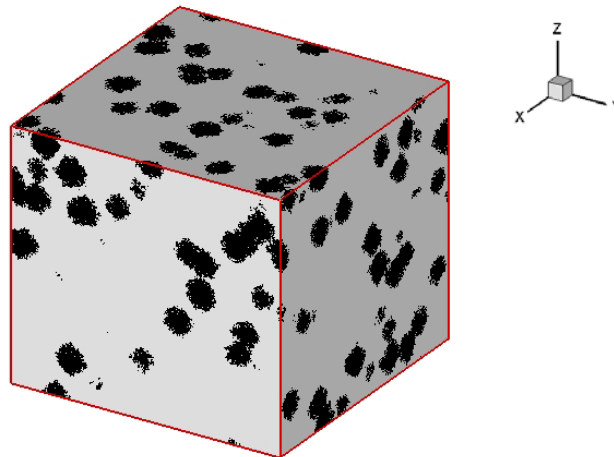


Figura 1: Microestrutura simulada pelo programa Autômato Celular.

Os resultados mostraram que a simulação do seccionamento realizado através do programa Tecplot foi bastante eficiente, possibilitando gerar seções planas bidimensionais da microestrutura, com diferentes espessuras. Desta forma foi possível avaliar a qualidade final da reconstrução tridimensional em relação às diferentes espessuras retiradas em cada seção. A Figura 2 mostra duas seções planas seccionadas com diferentes espessuras 0,025 μm e 0,05 μm . Observou-se que a diferença na espessura das seções não é perceptível quando as seções estão isoladas, no entanto, esta diferença interfere muito no resultado final da reconstrução tridimensional. Notou-se que as seções com espessura inferior geraram um volume microestrutural mais completo, possibilitando a visualização de pequenos pontos de grafita, os quais não são visualizados quando o volume é

reconstruído a partir de seções retiradas com espessuras maiores. Isto indica que para uma visualização 3D mais precisa da microestrutura do ferro fundido nodular é necessário a retirada de material com espessuras entre as seções bastante pequenas, isto evita a perda de informação sobre os precipitados de grafita.

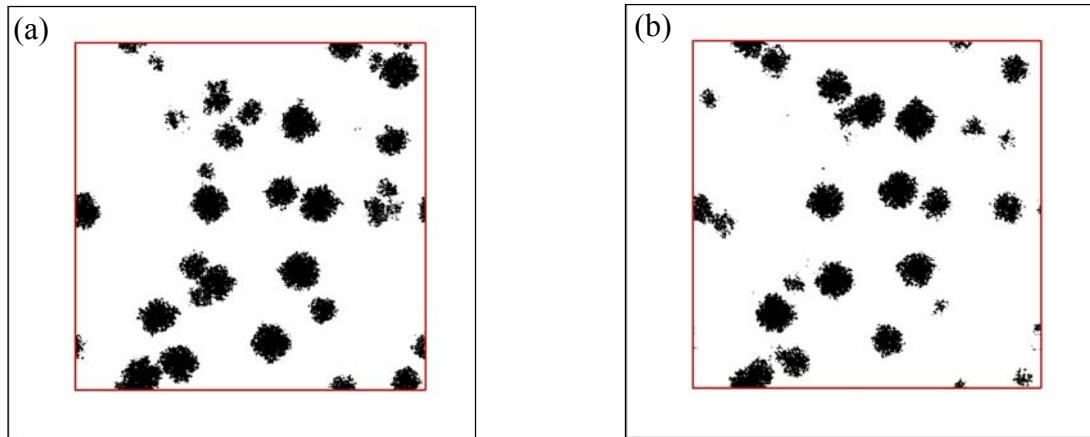


Figura 2: Seções planas bidimensionais retiradas com espessuras diferentes da microestrutura simulada: (a) 0,025 μm e (b) 0,05 μm .

Neste trabalho foram reconstruídos somente os precipitados de grafita pertencentes à microestrutura de ferro fundido nodular. A Figura 3 mostra qual é a forma e a distribuição destes precipitados no interior da microestrutura.

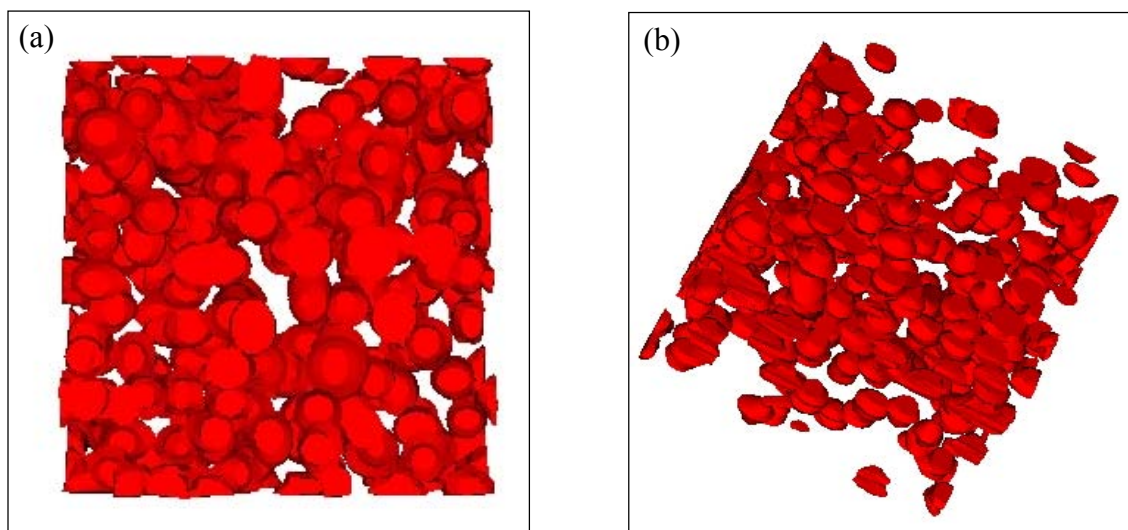


Figura 3: (a) vista ortográfica e (b) vista tridimensional dos precipitados de grafita.

Através deste trabalho de modelamento, pôde-se confirmar que a espessura de cada seção retirada da amostra simulada tem grande influência no resultado final da microestrutura reconstruída. No volume microestrutural reconstruído a partir de seções planas com espessuras de 0,05 μm observou-se que os precipitados de grafita ficaram mais alongados (Figura 4a), como se o material tivesse sido submetido a algum tipo de processo de tração na direção longitudinal dos precipitados, o que representou um resultado errôneo da microestrutura original.

A Figura 4b mostra os precipitados reconstruídos a partir de seções planas com 0,025 μm de espessura. Esta microestrutura mostra que os precipitados de grafita estão mais arredondados e distribuídos aleatoriamente pela matriz, não apresentando nenhum tipo de direcionamento. Este resultado está de acordo com a microestrutura real do ferro fundido nodular.

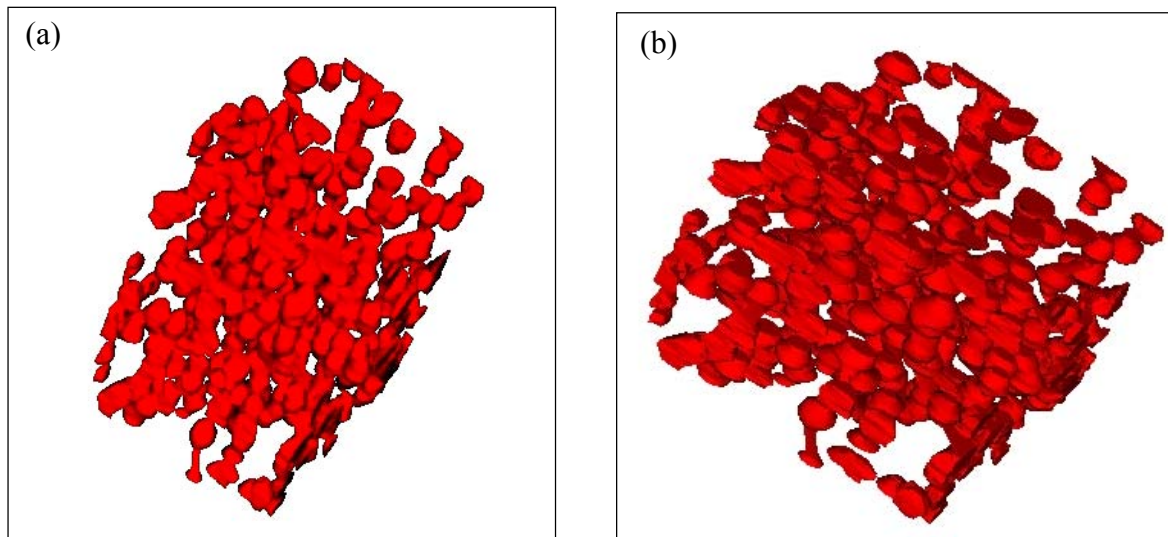


Figura 4: Reconstrução tridimensional dos precipitados de grafita a partir de seções planas: (a) de 0,05 μm e (b) de 0,025 μm .

Através da reconstrução tridimensional desta microestrutura foi possível também analisar a conectividade entre os precipitados de grafita, observou-se no material reconstruído que os precipitados não são contínuos em toda a microestrutura, eles geralmente estão interligados apenas com os precipitados mais próximos. Isto foi comprovado ao notar que alguns precipitados desaparecem logo após aproximadamente 5 seções (seções de 0,025 μm). Enquanto outros precipitados começam a se desenvolver no meio da microestrutura.

O resultado desta reconstrução em três dimensões possibilitou também avaliar os precipitados de grafita separadamente uns dos outros. A Figura 5 mostra alguns precipitados de grafita isolados, reconstruídos com: (a) seis seções retiradas com espessura de 0,05 μm e (b) vinte seções retiradas com espessura de 0,0125 μm .

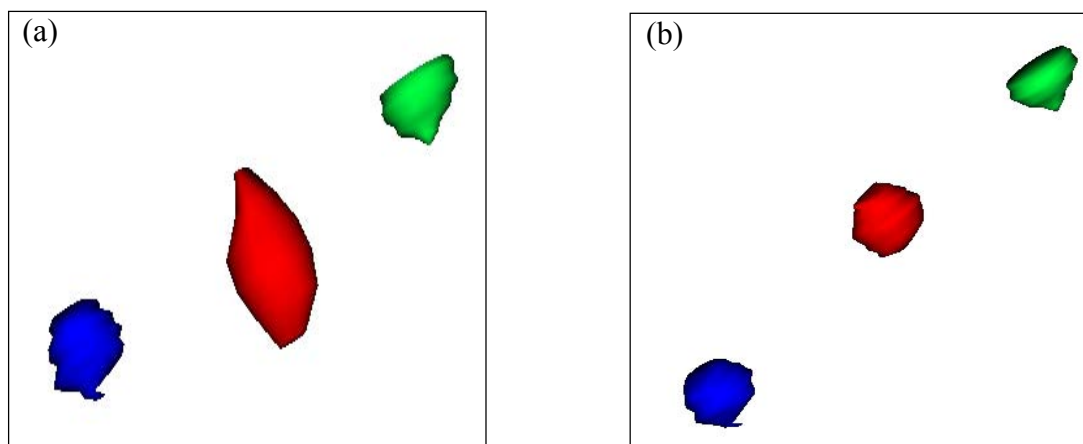


Figura 5: Reconstrução tridimensional dos precipitados de grafita isoladamente a partir de seções planas: (a) de 0,05 μm e (b) de 0,0125 μm .

Os precipitados de grafita reconstruídos isoladamente com o menor número de seções e maior espessura, não apresentaram boa resolução de seus volumes. Isto ocorreu porque o espaço de integração entre as seções foi maior, utilizando assim poucos pontos, o que provocou a perda de informação dos grãos, obtendo-se uma imagem com baixa resolução. No entanto, na reconstrução dos precipitados utilizando um número maior de seções planas com menor espessura entre elas, observou-se que o volume dos grãos individuais apresentaram com maior definição. Tendo em vista que a integração foi realizada com uma quantidade bem maior de pontos, gerando, portanto, uma imagem com melhor resolução.

4 CONCLUSÕES

Os resultados deste trabalho mostraram a possibilidade de modelar o processo de reconstrução em três dimensões através de seccionamento em série. Com isto foi possível estimar a quantidade e a espessura das seções planas que devem ser retiradas do material (ferro fundido nodular) durante o processo experimental.

Através desta simulação foi possível também avaliar a qualidade da microestrutura reconstruída, bem como os componentes específicos desta microestrutura. Na análise dos precipitados de grafita ficou evidente a influência da quantidade e da espessura das seções. Onde um número maior com espessura menor de seções gera uma resposta com resolução extremamente superior.

Os resultados confirmam a possibilidade de encontrar informações sobre o processo de reconstrução tridimensional, referentes à microestrutura de qualquer material partindo apenas de seus parâmetros estereológicos.

Agradecimentos

Os autores agradecem o suporte financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoa de Nível Superior, CAPES.

REFERÊNCIAS

- 1 TEWARI, A.; GOKHALE, A. M., Application of three-dimensional digital image processing for reconstruction of microstructural volume from serial sections., *Materials Characterization*, v. 44, p. 259- 269, 2000.
- 2 TEWARI, A.; GOKHALE, A. M., Estimation of three-dimensional grain size distribution from microstructural serial sections., *Materials Characterization*, v. 46, p. 329- 335, 2001.
- 3 KRAL, M. V.; MANGAN, M. A.; SPANOS, G.; ROSENBERG, R. O., Three-dimensional analysis of microstructures., *Materials Characterization*, v. 45, p. 17- 23, 2000.
- 4 LIEBERMAN, S. I.; GOKHALE, A. M.; TAMIRISAKANDALA, S.; Reconstruction of three-dimensional microstructures of TiB phase in a powder metallurgy alloy using montage serial sectioning., *Scripta Materialia*, v. 55, p. 63-68, 2006.
- 5 LEWIS, A. C., BINGERT, J. F., ROWENHORST, D. J., GUPTA, A., GELTMACHER, A., B., SPANOS, G., Two- and three-dimensional microstructural characterization of a super-austenitic stainless steel., *Materials Science and Engineering A*, v. 418, p. 11-18, 2006.

- 6 ZHANG, C.; SUZUKI, A.; ISHIMARU, T.; ENOMOTO, M., Characterization of Three-Dimensional Grain Structure in Polycrystalline Iron by Serial Sectioning., *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 35A, p. 1927-1933, 2004.
- 7 .L. S. Assis, L.O. Pereira, F. F. Oliveira, J. A. Castro e P. R Rios, Simulação da Evolução Microestrutural em 3D de Reações de Nucleação d Crescimento pelo Método do Autômato Celular., in *Seminário de Metalurgia Física 2006*, Rio de Janeiro, ABM 2006 1 CD
- 8 FIALA, J. C., Reconstruct: a free editor for serial section microscopy., *Journal of Microscopy*, v. 218, p. 52-61, 2005.
- 9 RIOS, P. R. OLIVEIRA V T; PEREIRA. L O. PEREIRA M. R. CASTRO, J. A., Cellular automata simulation of site-saturated and constant nucleation rate transformations., *Materials Research Mat. Res.*, vol.9, no.2, São Carlos 2006
- 10 J. VON NEUMANN, Theory of self-reproducing automata., in: A.W. Burks (Ed.), *University of Illinois Lectures on the Theory and Organization of Complicated Automata*, University of Illinois Press, Urbane, 1949.