AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**MODELAGEM E VISUALIZAÇÃO DE MICROESTRUTURAS
DIGITAIS DE MATERIAIS POLICRISTALINOS MONOFÁSICOS**

André Montes Rodrigues

Dissertação apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do grau
de Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear – Materiais.

Orientador:
Dr. Ricardo Mendes Leal Neto

São Paulo

2014

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**MODELAGEM E VISUALIZAÇÃO DE MICROESTRUTURAS
DIGITAIS DE MATERIAIS POLICRISTALINOS MONOFÁSICOS**

André Montes Rodrigues

**Dissertação apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do grau
de Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear – Materiais.**

**Orientador:
Dr. Ricardo Mendes Leal Neto**

**Versão Corrigida
Versão original disponível no IPEN**

São Paulo

2014

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, por aceitarem minhas escolhas e dar apoio incondicional para trilhar um caminho pouco convencional na vida e na academia.

À minha namorada Pâmela, pelo amor, carinho e pelas frutíferas discussões sobre pontos cruciais do trabalho.

Ao prof. Dr. Marcelo Knorich Zuffo por acolher-me como membro da Caverna Digital do Laboratório de Sistemas Integrados da Escola Politécnica, experiência que propiciou aprendizado e apoio infraestrutural fundamentais ao desenvolvimento do trabalho.

Ao Dr. Márcio Cabral, coordenador do Núcleo de Realidade Virtual da Caverna Digital, pela participação como membro de banca da disciplina Tópicos de Tecnologia Nuclear e pelas valiosas recomendações.

Aos colegas do Laboratório de Intermetálicos do Centro de Ciência e Tecnologia de Materiais (CCTM – IPEN), da Caverna Digital (LSI – POLI) e do Centro Interdisciplinar de Tecnologias Interativas (CITI – USP), pelas frutíferas discussões, avaliações, opiniões e recomendações para solução de pontos críticos do trabalho.

À toda comunidade atuante no desenvolvimento de software open-source, em especial aos desenvolvedores do Blender 3D, mostrando o enorme potencial de iniciativas coletivas bem estruturadas para produzir ferramentas de incrível qualidade, permitindo o avanço da ciência e tecnologia.

À Fernando Bardella, por promover e facilitar minha aproximação ao programa de Tecnologia Nuclear do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro ao projeto.

Ao meu orientador, prof. Dr. Ricardo Mendes Leal Neto, pela oportunidade de ingresso no Grupo de Visualização Científica em Materiais, por aceitar conduzir este projeto multi e interdisciplinar e por acreditar em minha capacidade de enfrenta-lo com êxito. Por sua seriedade, paciência e prestatividade na condução da orientação e pelo comprometimento com a continuidade do trabalho.

*I love those who do not know how to live except their lives be a down-going,
for they are those who are going across...
I love him who lives for knowledge and who wants knowledge that one day
the superhuman may live. And thus he wills his own downfall...
I love him who throws golden words in advance of his deeds and always
performs more than he promised: for he wills his own downfall...
I love him whose soul is overfull, so that he forgets himself and all things
are in him: and thus all things become his downfall.*

Friedrich Nietzsche

MODELAGEM E VISUALIZAÇÃO DE MICROESTRUTURAS DIGITAIS DE MATERIAIS POLICRISTALINOS MONOFÁSICOS

André Montes Rodrigues

RESUMO

Neste trabalho se buscou criar uma base tecnológica para síntese digital e visualização virtual de microestruturas de materiais policristalinos monofásicos, visando disponibilizar software e metodologias de baixo custo aos pesquisadores da área ou de áreas correlatas. Para isso foram levantados e testados métodos, sistemas, bibliotecas e algoritmos computacionais pertinentes ao problema em questão. A técnica de síntese escolhida adotou uma simulação física de empacotamento de partículas seguida por tesselação espacial baseada no diagrama Voronoi. Para testar a abordagem uma amostra de um material real foi reconstituída digitalmente. O modelo reproduziu com grande precisão a distribuição de tamanhos de grão, o número de faces por grão e o número de vizinhos imediatos da referência. Na frente de visualização virtual buscou-se definir um modelo capaz de lidar com grandes quantidades de dados e baseado em princípios cognitivos sólidos, que permitisse maior extração de conhecimento de modelos microestruturais. A técnica de visualização em múltiplas escalas foi considerada a mais apropriada aos modelos cujos objetos e detalhes abrangem diversas escalas espaciais, permitindo ao computador lidar com vastas quantidades de dados ao alternar entre qualidade e quantidade no processo de geração de imagens. Técnicas de visualização tradicionais também foram testadas e a técnica de corte se mostrou fundamental, principalmente para a exploração direta do interior do modelo, mas também para a extração de dados voltados a análise microestrutural estereológica.

THREE-DIMENSIONAL MODELLING AND VISUALIZATION OF DIGITAL SINGLE-PHASE POLYCRYSTALLINE MATERIALS MICROSTRUCTURES

André Montes Rodrigues

ABSTRACT

The main goal of this work is to create a technological foundation for digital synthesis and virtual visualization of single-phase polycrystalline materials microstructures, aiming to offer low cost software and methodologies to materials science researchers and alike. Several methods, applications, libraries and algorithms were tested and the most appropriate were selected for further exploration. The chosen microstructural synthesis technique uses newtonian particle packing simulation, followed by a Voronoi-based tessellation. This simple approach were put to test using a real material sample. The sample were digitally built and meaningfull parameters like grain size distribution, edges per face and mean number of neighbours were replicated with acceptable precision. Regarding visualization, the most relevant issue was the specification of a computationally scalable method based on proven cognitive principles, capable to deal with a huge amount of information and to support efficient knowledge extraction from microstructural models. The multiscale approach has proved to be the most suited for models that spans several scales in space, allowing computers to store and display large quantities of data and to manage the tradeoff between quality and quantity in the rendering process. Traditional visualization techniques were tested as well and section visualization has proved to be paramount for internal model visualization, as it is for stereological microstructural analysis.

SUMÁRIO

Página

1 INTRODUÇÃO.....	8
1.1 Motivação	8
1.2 O IPEN.....	9
1.3 Justificativa	9
2 OBJETIVOS.....	14
3 REVISÃO DA LITERATURA.....	15
3.1 Síntese e simulação de microestruturas.....	15
3.1.1 Metodologias para síntese de microestruturas digitais.....	17
3.1.1.1 Caracterização microestrutural de amostras reais.....	18
3.1.1.2 Síntese digital de microestruturas.....	18
3.1.1.3 Extração de geometria.....	20
3.1.1.4 Tesselação.....	22
3.2 Modelagem Paramétrica.....	22
3.3 Benefícios do uso de auxílios visuais no ensino.....	24
3.3.1 Benefícios do uso de modelos tridimensionais	25
3.3.2 Benefícios do uso da animação e da interatividade.....	26
3.3.3 A importância da estratégia pedagógica na otimização do aprendizado.....	27
3.4 Visualização Computacional.....	29
3.4.1 Visualização de sólidos.....	31
3.4.1.1 Métodos computacionais de representação geométrica.....	33
3.4.1.1.1 Modelos tipo CSG	34
3.4.1.1.2 Modelos tipo B-Rep	36
3.4.1.1.3 Modelos tipo subdivisão espacial.....	36
3.4.1.2 Métodos e algoritmos para visualização de volumes.....	38
3.4.1.2.1 Renderização em tempo real.....	38
3.4.1.2.2 Cortes	39
3.4.1.2.3 Visualização volumétrica.....	40
3.4.1.2.4 Ícones	41
3.4.2 Visualização multiescalar.....	41
3.4.2.1 Escolha de plataformas de visualização.....	43
3.4.2.2 Procedimentos de especificação.....	45
4 METODOLOGIA.....	48
4.1 Atividades planejadas	48
4.1.1 Aprofundamento conceitual e técnico.....	48
4.1.2 Pesquisa, teste e seleção de funções e algoritmos computacionais.....	48
4.2 Métodos e recursos.....	49
4.2.1 Síntese microestrutural.....	50
4.2.2 Visualização.....	51
5 RESULTADOS.....	54
5.1 Síntese microestrutural.....	54

5.1.1 Empacotamento de partículas.....	55
5.1.2 Tesselação Voronoi.....	59
5.1.3 Características dos grãos	60
5.1.4 Análise das distribuições obtidas.....	62
5.1.5 Desempenho.....	67
5.1.6 Comentários	68
5.2 Visualização.....	69
5.2.1 Visualização básica.....	69
5.2.2 Cortes.....	72
5.2.3 Ícones.....	74
5.2.4 Visualização multiescalar	74
5.2.5 Comentários	78
6 DISCUSSÃO.....	79
6.1 Simulação.....	79
6.2 Tesselação Voronoi.....	83
6.3 Visualização.....	87
7 CONCLUSÕES.....	91
7.1 Síntese.....	91
7.2 Visualização.....	92
7.3 Trabalhos futuros.....	93
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	94

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

Muitos estudantes e profissionais da área de construção civil e mesmo aqueles provenientes de outros setores da engenharia carecem de conhecimento adequado sobre o comportamento dos materiais (Soboyejo, 2003; Torraca, 2009). Isso resulta de uma série fatores, tais como a complexidade inerente deste campo da ciência, deficiências curriculares, vícios culturais e profissionais e a falta de ferramentas e filosofias didáticas apropriadas.

O presente trabalho se originou para abordar essas carências e propor possíveis soluções ao problema. Após uma investigação preliminar constatou-se a ausência de tecnologias integradas para a geração e visualização de mídias mais apropriadas, neste caso, modelos tridimensionais de materiais em escala microscópica. Em outras palavras, apesar da existência de excelentes ferramentas especializadas para a criação de modelos microestruturais e da disponibilidade de diversos aplicativos de visualização de dados, constatou-se as seguintes deficiências: falta de integração entre as funções de síntese e visualização; pouco suporte à síntese de objetos em diversas escalas; ausência de suporte específico a modelos microestruturais, incluindo as estruturas de dados apropriadas; inadequação das interfaces, terminologia e ferramentas a um público não especializado; ausência de abordagens de visualização que explorem o potencial de tais modelos em aplicações didáticas; agilidade do processo de síntese incompatível com a aplicação pretendida.

Em suma, faltam referenciais compreensivos e sintéticos sobre os temas modelagem e visualização de microestruturas, além do que as ferramentas existentes não possuem a integração nem o direcionamento apropriados.

1.2 O IPEN

Esse trabalho é uma iniciativa multidisciplinar, envolvendo as áreas de ciências dos materiais, computação gráfica e programação. Apesar disso, entende-se que as disciplinas prioritárias para a condução do trabalho estão ligadas ao estudo dos materiais, especialmente em escalas microscópicas, aprendizado desenvolvido no Centro de Ciência e Tecnologia de Materiais (CCTM) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), por meio do Programa de pós-graduação em Tecnologia Nuclear. A instituição tem sólida reputação na área de ciência dos materiais, decorrente da qualidade técnica de seus laboratórios e da excelência de seus professores, pesquisadores e funcionários. O tema desta pesquisa também se adequou às atividades do recém formado Grupo de Visualização Científica em Materiais, ressaltando que suas contribuições serão benéficas ao ensino e pesquisa de ciência dos materiais de forma geral, principalmente nas áreas mais dependentes desta disciplina, tal como a tecnologia nuclear.

1.3 Justificativa

Produtos de engenharia são complexas composições de materiais e partes, produzidos em ambientes físicos e culturais variados e destinados a cumprir diversas funções. Estudos indicam que engenheiros tendem a possuir conhecimento muito básico sobre o comportamento macroscópico das estruturas, desconhecendo os constituintes microestruturais que podem afetar o comportamento geral dos materiais (Soboyejo, 2003). Segundo o autor, a falha no reconhecimento destas questões pode levar a erros de projeto, especialmente em situações excepcionais, onde as fórmulas e padrões comumente utilizados não respondem apropriadamente aos fatores inéditos. Desta forma, o desempenho desses produtos depende da consideração e resolução de uma série de questões inter-relacionadas, exigindo bom nível de entendimento em diversas disciplinas, tais como física, química e especialmente a ciência dos materiais (Watt, 2008).

Segundo Hansen (2009), em sua forma clássica, a ciência dos materiais é uma disciplina empírica e descritiva associada a certos tipos de materiais, como as madeiras, aços, concretos e plásticos. Porém, durante as últimas décadas a natureza das pesquisas realizadas em materiais de construção mudou, sendo cada vez mais conduzidas por especialistas de disciplinas teóricas como física e química. Os métodos utilizados tornaram-se mais sofisticados, sendo necessário interpretar os resultados para se tornarem palpáveis aos engenheiros. Isso criou uma lacuna entre a pesquisa e a prática no campo dos materiais de construção e a pesquisa básica gradualmente se fragmentou em disciplinas especializadas, tornando mais difícil aos pesquisadores comunicarem os novos conhecimentos fundamentais de maneira prática.

Na engenharia civil, uma tentativa de contornar esses problemas foi a introdução da disciplina ciência dos materiais no currículo universitário, focada na descrição das propriedades macroscópicas a partir das estruturas atômicas e moleculares. O primeiro expoente desta tendência foi Lawrence H. van Vlack, com sua obra “Princípios de Ciências dos Materiais” (1959), introduzida no curso de engenharia da Universidade Técnica da Dinamarca no fim dos anos 60. Segundo Hansen (2009), a baixa aceitação da disciplina no campo dos materiais de construção ocorre pois é baseada em disciplinas teóricas, refletindo a realidade profissional de forma bastante limitada - os problemas enfrentados na prática estão mais relacionados com complexas interações entre materiais, estruturas e ambientes do que com as propriedades dos materiais isolados. O autor ainda ressalta que as simulações digitais se tornaram alternativas aos cálculos e medições, sendo importante que os aplicativos sejam baseados em sólida ciência dos materiais e que os usuários tenham bom entendimento de física e química básica, permitindo a interpretação crítica dos resultados.

Desta maneira, um entendimento profundo dos mecanismos operantes nos níveis microscópicos é fundamental ao bom desempenho das atividades de engenheiros e arquitetos, especialmente em situações inéditas na

prática profissional. O maior desafio, segundo Torraca (2009) e Soboyejo (2003), é vencer a barreira entre as escalas micro e macroscópica e promover o entendimento das relações de interdependência, do átomo ao edifício. O mundo 'micro', quando apresentado aos estudantes, é apreendido de maneira muito abstrata e descontextualizada promovendo o uso de estereótipos ou fórmulas. Em outras palavras, a correta compreensão das propriedades dos materiais depende do entendimento da dinâmica entre as escalas macro e micro, ou seja, da apreensão da relação entre os parâmetros microestruturais e o comportamento macroestrutural. Mesmo que a informação esteja amplamente disponível, faltam conceitos que permitam integrar o material mental existente, colocando-o à disposição para uso na resolução de problemas reais. Desta maneira, torna-se necessário investir na criação de uma ponte entre as escalas, seja conceitual ou perceptiva. De fato, esta integração de escalas é um problema a ser resolvido até mesmo nos aplicativos de simulação (Interagency Group On Advanced Materials, 2011), sendo, portanto, tema de grande interesse tanto para o ensino como para o desenvolvimento de ferramentas digitais para a ciência dos materiais.

Autores como Dale (1954) e Chan & Black (2006), indicam caminhos para solucionar o problema específico da lacuna entre as escalas. Segundo esses estudos, o melhor entendimento das características dos materiais poderia ser cultivado no contato mais 'direto' com os fenômenos físico-químicos pertinentes. No âmbito da ciência dos materiais e do ensino, a implementação desta estratégia depende de recursos modernos e filosofias didáticas inovadoras. De acordo com a linha de argumentação exposta até aqui, muitos autores (Resta, 2002; Maizan, 2000; Maturana & Varela, 2001) indicam que as soluções mais promissoras adotarão o uso sistêmico de representações tridimensionais em múltiplas escalas de visualização, aliados à interatividade e participação ativa. Maturana e Varela (2001) deixam claro que modelos de ensino baseados na exposição passiva de conteúdos são falhos, pois a construção de conhecimentos dá-se através da interação ativa com o mundo e seus fenômenos.

No entanto, não existem ferramentas abertas e integradas para a criação e apresentação digital tridimensional de microestruturas, considerando principalmente aplicações didáticas. Faltam modelos tridimensionais digitais ou digitalizados mesmo para uso em estudos científicos (visualização básica e simulações) ou para confecção de maquetes tridimensionais por meio de impressão tridimensional. Ao mesmo tempo, professores e instrutores dependem do material didático existente e tem pouco ou nenhum treinamento em aplicativos digitais de modelagem 2D ou 3D (Resta, 2002). Além disso, a modelagem de microestruturas seria uma tarefa complexa, onerosa e demorada se encomendada ao mercado.

Existem aplicativos poderosos e gratuitos, tais como o Dream 3D (2013), que permitem a obtenção de modelos microestruturais a partir de parâmetros do usuário, permitindo que especialistas produzam os modelos sem a necessidade de executar onerosos procedimentos experimentais em materiais reais. No entanto é necessário conhecimento tanto para lidar com os parâmetros como para criar visualizações com o modelo resultante do processo. Também não é possível sintetizar objetos em múltiplas escalas e não existe integração direta com ferramentas apropriadas de visualização.

Torna-se assim necessária a criação de ferramentas práticas, automáticas e integradas, solução ideal para aumentar a autonomia de professores, instrutores, alunos e até de pesquisadores. O código fonte dos aplicativos atuais não é universalmente disponibilizado, dificultando tentativas de integrar as ferramentas existentes. Além disso, muitas soluções dependem de aplicativos comerciais, possuem interfaces pouco amigáveis ao público não especializado e são desenvolvidas por pesquisadores, com finalidade específica. Adicionalmente, as ferramentas que se pretende produzir podem acelerar o desenvolvimento de novos materiais e propiciar diminuição de recursos gastos com testes experimentais, necessários à validação e certificação dos materiais (Interagency Group On Advanced Materials, 2011).

Superada a falta de modelos digitais microestruturais apropriados, entende-se que o passo seguinte é a especificação, desenvolvimento e implementação de métodos de representação visual mais adequados ao problema. É esperado que a visualização forneça apoio à compreensão das estruturas microscópicas dos materiais e permita a apreensão da relação entre as características microestruturais e o comportamento mecânico. A literatura indica, como detalhado nos próximos capítulos, que isso pode ser atingido com interfaces interativas dotadas de elementos auxiliares de visualização.

Em suma, este trabalho pretende contribuir com métodos alternativos de síntese e de visualização de modelos tridimensionais de materiais digitais, gerando conhecimento para a criação de ferramentas integradas e mais acessíveis, que implementem abordagens apropriadas a aplicações didáticas. Esse esforço também faz parte do cenário de modernização do ensino almejado pela Unesco (Unesco, 1998). A organização frisa que a informatização é condição necessária para a modernização da educação, o que permitirá a transição de um modelo reprodutivo de aprendizado a um modelo independente, que promoverá a iniciação e a criatividade (Resta, 2002). Para isso recomenda o acompanhamento ativo do desenvolvimento técnico e a exploração do potencial das novas tecnologias, o que pode ser atingido com investimentos públicos e privados nas atividades de pesquisa e desenvolvimento de aplicativos, no aprimoramento de recursos humanos e na compra de equipamentos modernos.

2 OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho é estabelecer uma base tecnológica para o desenvolvimento futuro de um aplicativo que permita, de maneira integrada:

- sintetizar modelos digitais válidos de microestruturas de materiais policristalinos, a partir de parâmetros estabelecidos pelo usuário;
- visualizar os modelos criados de maneira a extrair conhecimento relevante.

O intuito é produzir e disponibilizar ferramentas de fácil uso para o ensino e pesquisa na área de ciência dos materiais.

As metas fundamentais para atingir esse objetivo são:

- viabilizar um método simplificado e ágil de síntese de microestruturas tridimensionais, que permita criar modelos sem a necessidade de complexos e onerosos procedimentos experimentais em materiais reais, nem de conhecimentos avançados em ciência dos materiais;
- obter adequada fidelidade microestrutural dos modelos, para que possam ser aceitos como representações de microestruturas reais;
- indicar as características desejáveis de um sistema de visualização que permita ampla extração de conhecimento de modelos microestruturais, além dos métodos computacionais para implementá-las.

Finalmente, pretende-se aumentar o valor do trabalho, estruturando-o como um guia prático aos pesquisadores interessados em criar aplicativos de síntese, simulação ou visualização de modelos microestruturais digitais, principalmente quando carecem de conhecimento em computação.

3 REVISÃO DA LITERATURA

Será apresentada uma revisão de temas relacionados às duas frentes de desenvolvimento do trabalho - síntese de microestruturas digitais e visualização de modelos digitais tridimensionais sólidos – além de um levantamento de bibliotecas e plataformas de software e suas principais funcionalidades e limitações.

3.1 Síntese e simulação de microestruturas

Já foi comprovada a interdependência entre as propriedades mecânicas e a microestrutura dos materiais. A dinâmica de interação entre os elementos microestruturais têm forte influência no comportamento mecânico e, portanto, as propriedades de serviço de um determinado material podem ser melhoradas ao modificar sua microestrutura. O termo ‘mesomecânica’ ganhou ampla aceitação após sua introdução por Panin (1998) como nome de uma nova área de pesquisa, sendo seu principal propósito o desenvolvimento de uma base teórica para a melhoria dos materiais, utilizando simulações de processos físicos no nível mesoscópico.

Na literatura, a escala denominada com o termo “meso” é usada para designar objetos com tamanho entre os níveis micro e o macroscópico. Em ciência dos materiais, segundo Mishnaevsky Jr. (2007), o termo comumente designa estruturas entre 100 nm e 100 μ m, compreendendo grãos isolados e conjuntos de grãos, além de defeitos microestruturais tais como discordâncias, porém não existe uma convenção que determine precisamente a divisão entre os níveis. Normalmente esse nível de escala ignora a estrutura atômica, considerando, em alguns casos especiais, apenas a configuração tridimensional da rede cristalina (Sintay, 2010). Mishnaevsky Jr. (2007) agrupa as escalas micro e mesoscópica entre 1 μ m e 1 mm. Panin (1998) divide a escala mesoscópica em duas categorias, sendo

a primeira relativa ao grão individual e a segunda relativa a um grupo de grãos. De maneira geral podemos dizer, portanto, que o termo refere-se ao tamanho de grãos individuais e ao de um grupo de grãos, definição adotada neste trabalho.

Segundo as definições de Mishnaevsky Jr. (2005), a mesomecânica estuda quantitativamente os efeitos da interação dos diversos elementos microestruturais - vazios, inclusões, bandas de cisalhamento, microfissuras - nas propriedades mecânicas dos materiais. Já a micromecânica lida com os efeitos dos elementos isolados e da média dos parâmetros microestruturais no comportamento mecânico. Na prática, a mesomecânica computacional procura criar ferramentas numéricas para a simulação do comportamento mecânico e da degradação, servindo de base para o projeto e desenvolvimento de materiais (Mishnaevsky Jr., 2007).

Desta maneira, as relações entre a microestrutura e as propriedades dos materiais podem ser analisadas através de modelos numéricos. Torna-se necessário, portanto, a modelagem ou síntese de microestruturas apropriadas para uso nas simulações, preferencialmente em três dimensões. No momento, as ferramentas capazes de sintetizar modelos microestruturais são criadas para aplicações muito específicas e não são disponibilizadas ao público. Os modelos são comumente criados através de modelagem simplificada de elementos microestruturais ou a partir de múltiplas seções obtidas de uma amostra real (Chawla *et al.*, 2006). Modelos também podem ser gerados através da simulação da evolução de microestruturas, de acordo com leis de crescimento específicas (Romanova *et al.*, 2005).

Na maioria dos trabalhos a estrutura de maior interesse é o grão, pois constitui a segmentação fundamental e natural do espaço amostral, caracterizada por uma mudança de fase ou de orientação cristalográfica. Ao mesmo tempo busca-se obter uma amostra que represente estatisticamente o material original. Ostoja-Starzewski (2002) diferencia duas abordagens, a RVE (*Representative Volume Element* – Elemento Volumétrico Representativo) e a SVE

(*Statistical Volume Element* – Elemento Volumétrico Estatístico). Em um SVE a distribuição de atributos não corresponde a nenhuma distribuição experimental – apenas a junção de múltiplas instâncias permite a obtenção das distribuições do material real. Um RVE, por outro lado, procura capturar todas as distribuições do material real (tamanho, forma, orientação de grão) em apenas uma instância. Neste trabalho o intuito é gerar microestruturas artificiais a partir de parâmetros do usuário, sendo assim, os modelos RVE são os mais apropriados, pois espera-se que a amostra gerada represente, em apenas uma única instância, o material que o usuário especificar.

Independentemente do método utilizado na síntese, é necessário que o modelo constitua uma representação microestrutural válida e minimamente precisa. Chawla *et al.* (2006) compararam modelos de microestruturas reais com modelos racionalizados (elementos simplificados) e estimativas analíticas, demonstrando que os modelos geometricamente mais precisos propiciam resultados simulados mais próximos aos experimentos reais, comparado aos modelos simplificados ou genéricos, considerando simulações mecânicas. Esta precisão geométrica é maior, portanto, conforme os grãos do modelo virtual forem mais semelhantes aos reais em termos de tamanho, aspecto geral (proporção) e precisão da curvatura dos contornos de grão. Baixas resoluções de polígonos não permitem a reprodução de contornos com pequenos raios de curvatura, comprometendo os resultados de simulações mecânicas. Desta maneira, sendo o grão a estrutura mais fundamental, a prioridade na fase de síntese microestrutural é criar uma estrutura de grãos geometricamente e estatisticamente válida, de acordo com a aplicação pretendida.

3.1.1 Metodologias para síntese de microestruturas digitais

Sintay (2010) identificou quatro passos comuns adotados pelos pesquisadores para a síntese ou reconstrução de modelos microestruturais:

- caracterização microestrutural de amostras reais;

- síntese digital de microestruturas;
- extração de geometria – criação dos modelos digitais;
- tesselação – geração de modelos sólidos apropriados a simulações físicas.

3.1.1.1 Caracterização microestrutural de amostras reais

A etapa de caracterização microestrutural busca coletar dados sobre a geometria dos grãos, utilizando tipicamente múltiplas seções bidimensionais das amostras aliadas a métodos esterológicos. Este caminho metodológico se vale de imagens pixelizadas, posteriormente processadas em busca dos parâmetros geométricos essenciais dos grãos, principalmente o tamanho médio de grão, o perfil de distribuição dos tamanhos de grão ou mesmo a geometria explícita do contorno de grão. A utilização de métodos esterológicos torna possível derivar aproximadamente os parâmetros geométricos tridimensionais dos grãos a partir de medidas bidimensionais (Underwood, 1970). Também é possível reconstruir a estrutura de grãos a partir do empilhamento sistemático de múltiplas seções bidimensionais, possibilitando a medida dos parâmetros geométricos diretamente em três dimensões, o que também é viável quando métodos de caracterização tomográficos estão disponíveis. Neste trabalho esta etapa não é necessária pois o método de síntese almejado não deve depender de dados experimentais, sendo o usuário quem define o caráter da distribuição de tamanhos de grão.

3.1.1.2 Síntese digital de microestruturas

Na etapa de síntese são utilizados processos estatísticos (Monte Carlo, *Simulated Annealing* – Arrefecimento Simulado) ou simulações físicas (Dinâmica Molecular, *Phase Field*, crescimento de grão) para produzir uma disposição geométrica geral da microestrutura sintética, ou seja, encontrar uma configuração válida de posições e limites dos grãos que reproduzam satisfatoriamente as características microestruturais solicitadas, principalmente a distribuição de tamanhos e o tamanho médio de grão. O método mais citado é o empacotamento de partículas utilizando o algoritmo *Simulated Annealing*, no

entanto, a solução utilizada neste trabalho foi a simulação física com corpos virtuais rígidos.

O empacotamento ótimo de objetos é um problema específico de otimização, de solução pouco trivial e altamente complexa no caso de partículas elipsoidais de aspecto arbitrário (Donev *et al.*, 2004). De acordo com Nocedal & Wright (2006), métodos de otimização executam buscas em um espaço repleto de soluções, procurando a melhor solução ou uma minimamente aceitável, de acordo com alguns critérios de avaliação - em termos matemáticos, trata-se de minimizar ou maximizar uma função específica cuja formulação é desconhecida, definida de acordo com a natureza e as restrições do problema. Ou seja, não se conhece a forma dessa função *a priori* e deseja-se encontrar um ponto na curva que represente a melhor solução ou uma solução satisfatória para o problema em questão (FIG. 1a, próxima página). Sendo diversas soluções localmente ótimas e apenas uma globalmente ótima, é prática comum buscar uma solução suficiente, pois encontrar a solução ótima para problemas complexos leva muito tempo (Nocedal & Wright, 2006).

Desta maneira, o encontro de soluções satisfatórias depende do estado e condições iniciais do sistema. A condição inicial significa a posição inicial de busca no espaço de soluções, sendo que qualquer posição inicial possui um ótimo local correspondente (FIG. 1a). Desta forma, alterar as condições iniciais pode levar a ótimos locais superiores. Na simulação física de partículas, são condições iniciais a posição de cada partícula ao início do processo e a mobilidade propiciada a ela para que alcance um local de melhor encaixe, de maneira a reduzir o espaço total ocupado. Diversos artifícios podem ser usados, neste caso, para alterar as condições iniciais da simulação, de maneira a encontrar um ótimo local mais favorável. Saltos podem ser executados, por exemplo, alterando a disposição inicial das partículas ou criando abalos durante a simulação, provocando a mudança brusca de posição das partículas no recipiente. Em suma, a melhoria do empacotamento, em simulações físicas, se dá por vibração, agitação ou

deslocamento brusco das partículas. No caso do *Simulated Annealing* um conjunto de elipsóides representativo da distribuição solicitada é disposto aleatoriamente no espaço amostral e os elipsóides são aleatoriamente movidos, retirados e reposicionados, sendo aceitas apenas as alterações que simultaneamente maximizarem o empacotamento e diminuïrem as sobreposições (Sintay, 2010). As condições iniciais são as posições de cada elipsóide e os abalos são executados por meio de operações aleatórias no posicionamento deles.

O resultado principal desta etapa é uma nuvem de pontos composta pelos centros de cada partícula, após o término da simulação. Eventualmente também é necessário obter os pontos de contato entre as partículas.

FIGURA 1 - (a) Ilustração do processo de otimização. A solução ótima está no pico da função.(fonte: <http://www.frankfurt-consulting.de/img/SimAnn.jpg>)
 (b) - Diagrama Voronoi 3D de um conjunto de esferas empacotadas.
 (fonte: http://math.lbl.gov/voro+/examples/custom_output/custom_output_1.png)

3.1.1.3 Extração de geometria

A etapa de extração geométrica busca produzir a representação explícita dos contornos dos grãos, utilizando algoritmos que os determinem a partir dos centros das partículas simuladas anteriormente, tais como *marching cubes*, *marching tetraedra*, *dual grid contouring* e um dos mais utilizados, inclusive neste trabalho, o diagrama Voronoi. O diagrama Voronoi utiliza uma nuvem de pontos para dividir o espaço amostral em células poliédricas convexas, resultando sempre em uma estrutura espacial compacta e hermética. Em algumas versões do diagrama utiliza-se os pontos de contato entre as partículas como referência de forma e tamanho, de maneira a criar uma célula tridimensional com tamanho

muito próximo à partícula simulada (Gellatly & Finney, 1982). O aspecto de um diagrama Voronoi tridimensional é muito semelhante a bolhas de sabão (FIG. 1b).

Do ponto de vista da metalurgia, a tesselação Voronoi tradicional pode ser interpretada como o resultado de um processo homogêneo de crescimento de cristais, onde os núcleos aparecem no mesmo instante e permanecem na mesma posição ao longo do processo, o crescimento dos núcleos é isotrópico e o crescimento de uma célula cessa quando há contato com outra (Kumar *et al.*, 1996). Autores como Kumar *et al.* (1996) constataram que as tesselações Voronoi geram amostras cujos grãos são geometricamente similares a microestruturas de materiais metálicos e cerâmicos, atendendo satisfatoriamente a relação de Euler - número médio de faces em torno de 15 e de arestas em torno de 5 – fato já discutido por Underwood (1970). Kumar *et al.* (1996) e Zhang *et al.* (2004) encontraram um número de faces médio de 12 para microestruturas reais, menor que os obtidos com o diagrama Voronoi (15) e com o tetracaidecaedro de Kelvin (14).

O tetracaidecaedro de Kelvin foi, por muito tempo, tido como a estrutura que melhor representa a forma de um grão em equilíbrio energético, possuindo 14 lados, 24 vértices e 5 arestas por face. Essa teoria determina um ângulo aproximado de 120° entre as faces, sendo que a média dos ângulos entre faces da tesselação Voronoi é 111° .

Krill *et al.* (2002) demonstraram que essa etapa e a anterior são bastante intensivas em termos computacionais, devido à complexidade dos algoritmos utilizados, principalmente em três dimensões. Os autores lembram que a resolução do problema em três dimensões é muitas vezes mais complexa que a solução bidimensional, sendo possível hoje em dia produzir amostras tridimensionais com poucos milhares de grãos, devido ao aumento do poder computacional disponível nos últimos anos.

3.1.1.4 Tesselação

A etapa de tesselação busca produzir representações sólidas dos grãos apropriadas a simulações físicas mecânicas, não prioritária neste trabalho. No entanto, a utilização do algoritmo Voronoi torna possível produzir com alguma facilidade o diagrama Delaunay, que divide cada célula Voronoi em diversos tetraedros, tipo de tesselação mais comum utilizada em simulações físicas baseadas no método de elemento finitos.

3.2 Modelagem Paramétrica

Como visto no tópico anterior, a criação de modelos tridimensionais de microestruturas de materiais constitui uma tarefa bastante complexa, sendo necessário conhecimento em diversas disciplinas, como estatística, modelagem tridimensional e caracterização de microestruturas. A adoção de conceitos do design paramétrico viabiliza a obtenção de objetos complexos dotados de características específicas, como é o caso em questão.

Na definição de Ibrahim *et al.* (1999), modelagem paramétrica é o controle ou manipulação de entidades gráficas utilizando variáveis matemáticas (parâmetros) que descrevem os atributos de uma entidade. Ao descrever modelos com parâmetros, permite-se ao usuário ajustar ou atualizar os atributos das entidades sem a necessidade de alterar a geometria explicitamente, algo apropriado ou até mesmo necessário quando um modelo é muito complexo. Para Aish (1992), modelagem paramétrica envolve o uso de restrições geométricas e relações dimensionais para controlar a definição da forma. Os valores internos às expressões paramétricas podem ser modificados e então propagados automaticamente em um modelo. Assim, a geometria associativa permite a manipulação dinâmica de relações de dependência definidas pelo usuário (Aish, 2005), ou seja, o papel do usuário é definir as relações internas e as restrições e o papel do sistema é encontrar configurações que respeitem esses parâmetros, atualizando-as conforme os parâmetros são alterados.

Podemos dizer então que os elementos essenciais das definições descritas acima são as relações entre os componentes da estrutura e as restrições impostas a elas, cabendo ao usuário manipular essas relações e restrições. Assim, em um sistema paramétrico nada pode ser criado que não se encaixe na estrutura pré-programada. Nesse sentido, a parametrização pode melhorar a busca por opções mais apropriadas ao contexto, reduzir o tempo e esforço necessários para execução de mudanças e permite melhor entendimento da estrutura conceitual de um modelo (Aish, 2005). Quando aplicada a áreas ou domínios específicos, os aplicativos de modelagem paramétrica definem relações e restrições que expressam a lógica ou a natureza profunda do modelo, definindo relações de interdependência específicas, ou seja, necessárias ou mesmo obrigatórias entre os objetos do sistema em questão (Sacks *et al.*, 2004). Quando não existem métodos que permitam controlar os parâmetros com precisão, o conceito de design gerativo (*generative design*) promove a parametrização a um outro patamar, tornando o computador um parceiro ativo no processo de criação, provendo assistência aos usuários, estendendo suas capacidades e gerando soluções em resposta a rigorosos requisitos de desempenho (Aish, 2005). Neste caso o computador gera muitas opções para a solução do problema, explorando a alta velocidade de cálculo dos computadores, enquanto o usuário escolhe as melhores opções, explorando a alta capacidade de julgamento do cérebro.

Os conceitos do design paramétrico e gerativo são bastante apropriados para o caso em questão, considerando dois níveis de aplicação. O primeiro nível é o da interface com o usuário. Em um sistema tradicional a flexibilidade de criação é maior, mas o usuário precisa possuir todo o conhecimento, ficando a cargo do aplicativo prover os elementos básicos de produção. Em um sistema paramétrico a flexibilidade é reduzida devido à especificidade da aplicação, mas o usuário não precisa possuir todo conhecimento necessário para produzir aquele objeto. Pode-se dizer, portanto, que a criação de microestruturas é uma tarefa que exige muito conhecimento e mesmo um

especialista não conseguiria ser produtivo usando aplicativos de criação tridimensional, pois não existe nenhum que possua os elementos básicos e muito menos métodos para lidar com eles. O segundo nível é o da natureza do método de síntese. Quando existe um método claro e direto para conciliar todos os requisitos basta implementá-lo em código, não sendo o caso em pauta, como já discutido anteriormente. Neste caso o controle direto das interdependências é muito complexo, tornando-se necessário gerar diversas opções mais ou menos próximas e adotar a melhor delas. Aqui o sistema deve ser capaz de medir os atributos da estrutura resultante para estabelecer a que melhor atende aos critérios determinados. Assim, apesar da regulação de parâmetros ficar a cargo do usuário, toda a complexidade de composição dos elementos é conduzido pelo aplicativo, por meio de princípios e regras apropriados. Quando a tarefa é extremamente complexa é possível ainda aumentar o grau de interação do sistema com o usuário, transferindo a ele a tarefa de fazer algumas escolhas iniciais e de avaliar as melhores opções. De qualquer maneira, um sistema paramétrico e generativo promete, simultaneamente, diminuir a complexidade da tarefa e aumentar a velocidade do processo de síntese microestrutural, medindo e mantendo certos parâmetros dentro de limites aceitáveis, permitindo que usuários de diversos níveis de conhecimento utilizem a ferramenta, mesmo que muita interação seja necessária ao longo do processo.

3.3 Benefícios do uso de auxílios visuais no ensino

Se o design paramétrico e gerativo fornece um paradigma apropriado às interfaces e mecanismos internos de ferramentas voltadas a síntese de microestruturas, é necessário levar em conta princípios didáticos adequados para informar os métodos de apresentação e manipulação dos modelos criados, visando aumentar o potencial de aprendizado da tecnologia proposta. A literatura sobre a utilização de meios visuais no ensino é vasta e este tópico focará no potencial dessas tecnologias, especialmente de modelos tridimensionais interativos.

3.3.1 Benefícios do uso de modelos tridimensionais

McGee (1979) demonstrou que existe alta correlação entre a habilidade espacial e o sucesso em engenharia e matemática, sendo fator mais importante do que o quociente de inteligência e as habilidades verbais. Outros trabalhos (Smith, 1964; Pellegrino *et al.*, 1984) também reforçam a importância da habilidade espacial na resolução de problemas em outras áreas, como design, arquitetura, física e matemática. As atividades sugeridas para aprimorar esta habilidade são similares às conduzidas no ensino de desenho técnico, disciplina comum nos cursos de engenharia e arquitetura (Baartmans & Sorby, 1996; Ben-Chaim *et al.*, 1985; Smail, 1983). Autores como Dixon (1995) também sugerem que o uso de computadores, especialmente aplicativos que se valem de computação gráfica, também pode aumentar as habilidades espaciais dos usuários. Já Lord (1987) apóia atividades espaciais em geral para desenvolver esta habilidade. Desta forma, a habilidade espacial deve ser um fator comum aos estudantes de engenharia e arquitetura, especialmente nos mais treinados em desenho manual (técnico e artístico, bidimensional e tridimensional), em montagem de modelos tridimensionais físicos e nos usuários de computadores.

Pesquisas recentes demonstram que a habilidade espacial também tem impacto na compreensão de visualizações tridimensionais digitais (Keehner *et al.*, 2004). Foi observado um uso mais prolongado de modelos tridimensionais por estudantes com alta habilidade espacial em comparação com os menos habilidosos, sugerindo que o uso dos modelos tridimensionais resultou em sobrecarga cognitiva nestes últimos, enquanto os primeiros se beneficiaram pela manutenção da carga cognitiva dentro dos limites adequados (Huk, 2006). Em suma, não podemos dizer que a implementação de modelos tridimensionais leva necessariamente a melhorias no processo de aprendizado, mas considerando que estudantes de arquitetura e engenharia possuem boas habilidades espaciais, espera-se que tenham benefícios no uso desses modelos. Assim, seguindo essa linha, Roth & Bowen (2002) concluem que a menos que os estudantes tenham sido

treinados para interpretar dados visuais, o impacto de meios multimídia será mínimo.

A falta de interesse do estudante no assunto também representa uma barreira. De fato o baixo interesse em ciência dos materiais é um fator recorrente em meio a estudantes de engenharia e arquitetura (Torraca, 2009) e pode ser um empecilho. Porém, estudos indicam que o interesse pode ser aumentado pelo alto grau de interatividade e fidelidade de modelos tridimensionais, principalmente em realidade virtual (Byrne, 1996).

Outros fatores apóiam o uso de imagens tridimensionais no ensino. Observa-se que a informação apresentada em um domínio familiar, neste caso, em forma tridimensional, torna-se mais acessível e fácil de compreender (Robertson *et al.*, 1991) por conta da diminuição de complexidade do conteúdo apresentado (Fairchild, 1993; Ware, 1994). Isso possibilita o aumento da quantidade de dados com a qual o usuário é capaz de interagir (Fairchild, 1988; Robertson *et al.*, 1991; Ware, 1994). Estudos sobre aprendizado também indicam que a apreensão de conteúdos é mais rápida e persistente quanto mais direto (menos abstrato) for o contato com o fenômeno estudado (Huk, 2006). De qualquer maneira, representações tridimensionais já podem ser encontradas nas mais diversas áreas da ciência e tecnologia, como a medicina (tomografia computadorizada) e a meteorologia (formação de furacões, camada de ozônio). A construção de modelos computadorizados esquemáticos de estruturas atômicas possibilitou a físicos e químicos não apenas o estudo destas estruturas abstratas e complexas mas também sua difusão à comunidade científica.

3.3.2 Benefícios do uso da animação e da interatividade

Park & Gittelman (1992) sustentam que animações ilustram eficientemente relações estruturais complexas entre objetos e eventos, permitindo aos usuários formar representações esquemáticas enquanto aprendem conceitos abstratos. ChanLin (1998) indica que os elementos estruturais e espaciais na

animação tem grande papel na decodificação de informação.

Segundo Chan & Black (2006) animações interativas foram mais eficientes no ensino de sistemas complexos, comparado aos métodos que utilizam texto e/ou imagens estáticas. Os autores sustentam que a manipulação direta da animação permite aos estudantes refletir sobre interações causais e relações funcionais, facilitando a construção de modelos mentais. Dixon (1995) conclui que a exploração dos conceitos geométricos de reflexão e rotação - em ambientes didáticos que utilizam instrução dinâmica digital - podem trazer benefícios ao aprendizado. Apesar de não comprovar a superioridade dos métodos de realidade virtual, Byrne (1996) também conclui que a interatividade é um fator importante na motivação e no aprendizado.

Porém, tal como no tópico anterior, a habilidade espacial mostrou-se essencial para o aproveitamento cognitivo das animações (Hays, 1996). Os mais habilidosos podem se concentrar mais no aprendizado do que na decodificação espacial. Desta forma, a exploração, manipulação e interação com objetos virtuais tridimensionais podem auxiliar o entendimento de formas espaciais e de suas características, relações e configurações (Piaget & Inhelder, 1948), além de melhorar o entendimento de fenômenos e sistemas complexos e das relações semânticas entre elementos, principalmente em indivíduos que possuem alta habilidade espacial.

3.3.3 A Importância da estratégia pedagógica na otimização do aprendizado

Shepard (2003) sintetiza alguns benefícios que as mídias educacionais bem escolhidas e projetadas podem trazer: controle sobre o passo e seqüenciamento de informação; acesso a informações auxiliares e de apoio; diversos pontos de vista; permitir a participação ativa e a aplicação de conhecimento em tarefas contextualizadas; entendimento sistêmico; desenvolvimento de habilidades de resolução de problemas, decisão, pensamento de alto nível, autonomia e foco. No entanto, estudos sugerem que ferramentas

avançadas de ensino não compensam abordagens didáticas pouco eficientes, indicando que a estratégia pedagógica é mais relevante ao aprendizado do que as mídias e meios utilizados (Clark & Feldon, 2005; Bernard *et al.*, 2004). Segundo Bruer (1993), o sistema educacional é normalmente orientado a categorizar e analisar recortes de conhecimento ao invés de uni-los. Além deste fator, é comum que os estudantes tenham preconceitos e experiências anteriores que muitas vezes são errôneas e representam barreiras ao aprendizado (Bransford *et al.*, 2000).

Métodos de ensino eficientes devem ser fundados nas teorias de aprendizagem. Em um documento da UNESCO (Resta, 2002), após extensa revisão do tema, se aponta que o aprendizado consiste em incrementar, combinar e rearranjar coleções de mapas cognitivos, muitos deles sobrepostos ou interconectados em uma complexa rede de associações. Bronowski (1990) indica que a realização de conexões mentais não se dá apenas com a transmissão de informação - as conexões entre dois fatos é um ato criativo e consciente. O 'ato de unificação' postula que as conexões podem até ser explicitadas, mas só pode ser consumada pelo estudante. Bransford *et al.* (2000) sugerem que esse ato de integração só pode ser realizado na ausência de barreiras ao aprendizado, ou seja, o desenvolvimento de redes de conhecimento requer que o estudante esteja motivado e aprenda sobre um tópico de maneira que se demonstre relevante e importante a ele. Ainda segundo o autor, o aprendizado é otimizado quando o estudante desenvolve estratégias metacognitivas, expondo conhecimentos anteriores e criando oportunidades de corrigir erros e de verificar onde de inserem os novos conceitos. O estudante auto-regulado tem consciência sobre seu conhecimento de um assunto, sendo a auto-regulação crucial em todas as fases do aprendizado, com o potencial de aumentar substancialmente o significado e valor do aprendizado (Schoenfeld, 1987). Nessa perspectiva, Hsiao (1999) indica que as tecnologias digitais podem ser utilizadas para expor o conhecimento dos estudantes, suportando o desenvolvimento das habilidades metacognitivas e formando estudantes reflexivos e auto-regulados.

Em suma, as sugestões desses autores convergem em alguns pontos. O ambiente deve estimular o desejo de aprender e diminuir as barreiras ao aprendizado, expondo conhecimentos anteriores e corrigindo concepções errôneas, estereotipadas ou preconceituosas. Na transmissão de novos conteúdos, os métodos eficientes são os que motivam e empolgam o estudante, transmitem informação de forma facilitada e demonstram a utilidade da informação em contextos reais de aplicação. A auto-reflexão sobre o processo de aprendizado e a discussão do processo de produção do conhecimento facilita a integração do conhecimento, sendo este o objetivo último do aprendizado.

3.4 Visualização computacional

Como discutido no item anterior, o uso mídias e sistemas tridimensionais interativos podem aprimorar substancialmente o entendimento de temas complexos como ciência dos materiais, se formatados de acordo com princípios didáticos adequados, refletidos nos métodos de exposição da informação visual disponível. No entanto, é necessário que existam paradigmas e tecnologias que permitam a implementação dos sistemas de visualização pretendidos, que suportem a quantidade e a natureza dos dados do modelo e possuam as ferramentas de visualização adequadas, além de capacidades interativas suficientes. As técnicas desenvolvidas pela área da visualização científica englobam boa parte destes requisitos, servindo simultaneamente como paradigma teórico e tecnologia de implementação dos conceitos discutidos anteriormente.

As técnicas de visualização científica representam ferramentas úteis à pesquisa e à educação (McCormick *et al.*, 1987), permitindo, através de linguagens visuais, a aproximação do mundo concreto ao mundo abstrato - dos conceitos e modelos – provendo modos de observar fenômenos naturais que, devido à escala física, temporal ou à localização, seriam difíceis ou impossíveis de serem observados diretamente (Furness *et al.*, 1998). O termo foi utilizado pela primeira vez por McCormick *et al.* (1987), criando um novo domínio do conhecimento

focado na apresentação da informação científica através da visualização de dados. As definições formais (Wolff & Yaeger, 1993; Foley & Ribarsky, 1994; Gershon, 1994; Schoeder *et al.*, 2000) convergem em um ponto principal – o intuito é criar uma ponte perceptiva através da computação gráfica, com o intuito de facilitar a apreensão de grandes volumes de informações e/ou conceitos complexos, principalmente na forma visual.

As técnicas de visualização científica compreendem algoritmos de processamento que filtram dados de uma amostra, realizando a tradução a uma linguagem de representação apropriada, tornando possível apreender de maneira controlada um conjunto de dados complexos. Adicionalmente, o uso de artifícios gráficos como destaques (bordas, contornos, interfaces), variação na transparência e luminosidade, planos de corte, projeções ortogonais torna possível a representação de dados não geométricos. O processo compreende três etapas principais: a aquisição de dados, a conversão em uma linguagem apropriada de representação e a apresentação no periférico de saída (Schoeder *et al.*, 2000).

Recentemente surgiu uma vertente da visualização científica denominada '*visual analytics*' que, de acordo com a definição de Thomas & Cook (2005), trata-se do suporte ao raciocínio analítico por interfaces interativas baseadas em princípios cognitivos, explorando a alta velocidade de processamento dos computadores e a alta capacidade de apreensão de padrões visuais do sistema visual humano. Esse conceito atribui maior valor aos aspectos cognitivos da visualização computacional, muitos deles já destacados no item 3.3, e sintoniza plenamente tanto com os requisitos técnicos estabelecidos para a frente de síntese microestrutural (ver itens 3.1.1 e 3.2), como com os princípios didáticos da frente de visualização dos modelos gerados (item 3.3). A síntese dos modelos microestruturais através de parâmetros será viável e relativamente ágil apenas com a participação ativa do usuário, em um processo iterativo de tomada de decisões, em uma ou múltiplas etapas. Já a visualização eficiente dos resultados e consequente apreensão de informações é possível apenas com o uso de

linguagens visuais apropriadas e recursos interativos que permitam vislumbrar todas as partes relevantes do objeto.

Nos próximos tópicos serão revisados temas elementares de computação gráfica e levantados sistemas, algoritmos e aplicativos de visualização científica, visando conhecer melhor seu funcionamento, limites e potenciais, para verificar a viabilidade da implementação dos conceitos principais do *visual analytics* para o caso em questão.

3.4.1 Visualização de sólidos

A pesquisa em representações computacionais de modelos sólidos foi iniciada incipientemente na metade da década de 1960, tomando força no início da década de 1970, quando diversos grupos de pesquisa foram criados nas principais nações industrializadas (Requicha & Voelcker, 1992). O principal interesse era o desenvolvimento de ferramentas e sistemas de projeto e produção de bens, denominados com as siglas CAD (desenho auxiliado por computador), CAE (engenharia auxiliada por computador) e CAM (manufatura auxiliada por computador). Inicialmente grupos distintos exploraram os diversos temas pertinentes, tais como aspectos teóricos, modelagem sólida, visão computacional, renderização e interação. A integração do conhecimento construído se iniciou apenas no início da década de 90 (Requicha & Rossignac, 1992).

Modelos sólidos são amplamente utilizados na computação gráfica, visão computacional, construção civil, circuitos integrados, medicina, engenharia (mecânica, automobilística, aeronáutica), desenho industrial, ciências exatas, dentre outros (Requicha & Rossignac, 1992).

Na área de ciências dos materiais os métodos de representação digital de objetos sólidos tem importância fundamental, pois todas as estruturas de interesse, tais como átomos, grãos, fibras e inclusões, dependem deste tipo de representação.

FIGURA 2 - Secionamento e reconstrução digital de microestruturas
(Fonte: <http://www.mpie.de/typo3temp/pics/64d599ab4d.jpg>)

A técnica de secionamento múltiplo de uma amostra real, consagrada no trabalho de Chawla *et al.* (2006), é a mais difundida para a reconstrução da microestrutura de materiais. Nesta técnica, uma amostra é secionada regularmente em espaçamentos micrométricos, são geradas imagens de cada seção e, a partir destas, um modelo tridimensional sólido é reconstruído (FIG. 2, acima), formado tipicamente por grãos poligonais. As seções digitais podem passar por diversos processos tradicionais de caracterização microestrutural, permitindo a análise do material e a extração de parâmetros geométricos. Já o modelo tridimensional reconstruído permite a medição desses parâmetros diretamente em três dimensões. Esse processo, além de custoso, demanda um grande número de seções e causa a perda da amostra original, por se tratar de um processo destrutivo. Modelos reconstruídos a partir de seções também estão limitados à resolução dos equipamentos, definida pelo espaçamento mínimo possível entre as seções, sendo que os interstícios entre elas são interpolados digitalmente (Shan & Gokhale, 2001).

De fato, as técnicas clássicas de caracterização de materiais se utilizam de seções bidimensionais e de técnicas estereométricas para obter os parâmetros tridimensionais dos materiais (Underwood, 1970). Essas técnicas são normalizadas e executadas por métodos manuais ou automáticos. Atualmente existem aplicativos que se valem de algoritmos de processamento e análise de imagem para caracterização de um material (Pinto, 1996). A análise tridimensional

direta ainda não é trivial e não existem muitos trabalhos dedicados à comparação de resultados obtidos por estereologia – inferência de dados tridimensionais a partir de seções bidimensionais – com aqueles obtidos diretamente em sólidos tridimensionais. Para a obtenção de bons resultados através de técnicas estereológicas, é necessário obter uma quantidade adequada de seções, que sejam representativas de uma amostra (Underwood, 1970; Exner, 1972). Isso não é trivial de executar em amostras reais, mas é possível fazê-lo a baixo custo em modelos digitais.

Em suma, a técnica de secionamento é de grande valor, tanto para a visualização do interior de modelos de sistemas, organismos e materiais, como para a extração de seções bidimensionais para caracterização de materiais através de métodos estereológicos clássicos. No entanto, a especificação, as limitações e os potenciais de qualquer técnica de visualização depende do modelo computacional de representação sólida adotado para os modelos digitais microestruturais. Esses modelos serão revisados na sequência.

3.4.1.1 Métodos computacionais de representação geométrica

Um modelo sólido é uma representação digital precisa de um objeto físico sólido (Requicha & Rossignac, 1992). A computação gráfica dispõe de diversos métodos para a representação de modelos tridimensionais, selecionados de acordo com as aplicações pretendidas. As implementações das representações de sólidos digitais exploram bases matemáticas herdadas da geometria algébrica e topológica, além de estruturas de dados clássicas, como as árvores de dados. Nos aplicativos geométricos os sólidos são representados de três maneiras básicas (Requicha & Rossignac, 1992): por seu invólucro (representação de bordas ou B-Rep), por seu volume (subdivisão espacial) ou por uma sequência de operações em sólidos elementares (construtiva, *Constructive Solid Geometry*). Além das estruturas de representação dos objetos, os aplicativos possuem mais dois componentes principais: métodos de análise e de manipulação dos objetos (operações) e

ferramentas de criação de conteúdo (Requicha & Voelcker, 1992).

É comum nos aplicativos a manutenção simultânea de ao menos dois tipos de representação, pois cada tipo possui métodos específicos para o processamento e manipulação da informação. Algumas operações são viáveis ou mais simples de serem executadas em um determinado tipo de representação geométrica. A conversão de um tipo em outro não é sempre tarefa trivial e, em alguns casos, pode ser inviável (Hoffmann, 1991). Dentre as operações mais importantes destacam-se as detecções de colisão e as operações booleanas (união, subtração e interseção), técnicas fundamentais à visualização das estruturas internas, mas que demandam cuidados no momento da síntese dos modelos.

Requicha & Voelcker (1992), em um trabalho consagrado, revisam os modelos de representação existentes, brevemente descritos a seguir.

3.4.1.1.1 Modelos tipo CSG

A geometria sólida construtiva (CSG) descreve um sólido em termos de operações básicas realizadas em volumes primitivos, que constituem a unidade básica deste tipo de representação. A estrutura utilizada é a árvore de dados (*octree*), composta por nós que representam a sequência de operações realizadas e armazenam as primitivas utilizadas (FIG. 3, próxima página). As operações disponíveis são as transformações básicas (translação, rotação e escala) e as booleanas (adição, subtração e interseção). As primitivas mais comuns são os cubos, esferas, cones, cilindros e toróides, mas outras podem ser obtidas por operações simples, tais como extrusões lineares e radiais.

A execução de operações booleanas em sólidos CSG é trivial, já que fazem parte do cerne deste tipo de representação. A avaliação das superfícies é uma operação mais complexa, sendo necessário percorrer a árvore de dados e identificar as faces limítrofes das primitivas. Essa avaliação é necessária principalmente para executar a conversão de um modelo CSG para um B-Rep, descrito a seguir.

FIGURA 3 - Exemplo de um modelo em CSG (http://en.wikipedia.org/wiki/File:Csg_tree.png)

FIGURA 4 - Exemplo de um modelo B-rep (tetraedro)
(http://it.wikipedia.org/wiki/File:Tetraeder_f%C3%BCr_BRep.png)

FIGURA 5 - Exemplos de operações de corte em um cubo B-Rep. (a) modelo original. (b) corte sem preenchimento de face. (c) corte com preenchimento de face

3.4.1.1.2 Modelos tipo B-Rep

Boa parte dos aplicativos de modelagem tridimensional utiliza representações B-rep de seus objetos (FIG. 4, página anterior). As B-rep armazenam os elementos básicos que constituem a envoltória do sólido e as relações entre eles. Os elementos geométricos básicos são os vértices, as arestas e as faces. Outros mecanismos armazenam a topologia, ou seja, a relação entre os elementos geométricos. Da combinação de geometria e topologia, temos uma representação do tipo B-rep (Hoffmann, 1991). Quando procede-se a visualização do interior do objeto através de seções, observa-se a parte interna das faces (FIG. 5b, página anterior), prejudicando a percepção do objeto como um sólido. Para evitar isso alguns aplicativos mantêm representações alternativas, reconstróem o perímetro do sólido ou utilizam algoritmos de visualização para corrigir o problema visual (FIG. 5c). Desta maneira, a realização de cortes e operações booleanas (união, interseção e subtração) demanda a identificação das curvas de interseção entre as faces dos dois sólidos, além da classificação das partes internas e externas de cada face, resultando em um novo sólido.

3.4.1.1.3 Modelos tipo subdivisão espacial

Nesta representação o objeto preenche posições em um grid tridimensional, obtido através da divisão do espaço com células poliédricas regulares ou irregulares, preferencialmente de tamanho uniforme (Hoffmann, 1991). A divisão é feita com objetos simples, normalmente cubos que, conforme o nível de detalhamento necessário nas bordas, são divididos recursivamente. O modelo é representado pela estrutura de dados denominada árvore hierárquica (*octree*), representando quais setores contém maior número de células (FIG. 6, próxima página). É nítido que, em alguns casos, as bordas podem ficar 'voxelizadas', o que confere um aspecto visual irregular, muitas vezes indesejado.

FIGURA 6 - Exemplo de uma Octree (<http://en.wikipedia.org/wiki/File:Octree2.svg>)

De fato, o tamanho das árvores de dados são diretamente proporcionais à área superficial dos modelos e à resolução das bordas (Navazo, 1986; Hunter, 1978), desta maneira, o tamanho dos modelos é sensível à rotação e à complexidade da forma do objeto. Um problema clássico desse método é a dificuldade em obter informações sobre as bordas do objeto, pois é necessário encontrar os nós que contém células de borda. Cada face se estende por muitos nós da árvore e normalmente se usam representações de borda alternativas para a execução de operações que envolvam as faces do objeto.

Operações booleanas são facilmente executadas, porém os sólidos resultantes podem conter imprecisões, devido tanto as diferenças dimensionais entre as células como a diferenças de posicionamento e rotação dos grids dos dois sólidos. As operações booleanas são executadas percorrendo as árvores e identificando os nós que ocupam a mesma posição. Como as células dos dois sólidos dificilmente coincidem em tamanho e forma, os nós são recursivamente subdivididos de maneira a atingir a resolução necessária para executar a operação.

3.4.1.2 Métodos e algoritmos para visualização de volumes

3.4.1.2.1 Renderização em tempo real

Sistemas interativos de visualização demandam a renderização de modelos em tempo real, permitindo as operações básicas de zoom, rotação e translação sem atrasos perceptíveis. Quando os modelos são grandes ou possuem alta resolução, a visualização direta pode tornar-se lenta ou mesmo inviável, devido as limitações dos sistemas gráficos (Joy, 2009). A principal limitação é a quantidade de memória disponível no computador, principalmente a memória *ram* e a memória dedicada ao sistema de vídeo. Caso o pacote de dados não possa ser acomodado na memória torna-se necessário carregar os objetos gradualmente, conforme o usuário navega pela cena. Os principais métodos utilizados para lidar com essas limitações foram revisados por Joy (2009) e serão descritos na sequência.

O primeiro método é a adoção de modelos simplificados quando o objeto está distante da câmera ou durante a movimentação do usuário na cena, permitindo a visualização interativa fluida (alta taxa de quadros por segundo). Quando o usuário cessa o movimento ou se aproxima do objeto o sistema adota um modelo mais detalhado e renderiza a imagem estática com maior precisão. Esse método é conhecido como LOD (*level of detail*) e visa adequar a capacidade de renderização em tempo real ao tamanho e detalhamento do modelo, permitindo lidar com grandes volumes de dados em diversas escalas de visualização. As técnicas de LOD demandam a produção de modelos em menor resolução e, apesar de existirem ferramentas automáticas para a execução desta operação, a intervenção humana pode ser necessária para assegurar a coerência do modelo nas diversas escalas de visualização.

Limitar o alcance de visão da câmera é um artifício muito utilizado nos sistemas de visualização. A delimitação do campo visual da câmera é realizada em largura ou em profundidade, reduzindo a quantidade de polígonos processados pela placa de vídeo. Na maioria dos casos não existe sentido em

representar objetos muito distantes, pois a informação de interesse encontra-se no primeiro plano de visualização e, portanto, o usuário concentra-se nos elementos mais próximos à câmera.

Outro artifício é a setorização espacial do campo tridimensional, permitindo o carregamento seletivo de partes dos modelos, conforme a demanda de visualização. O sistema de visualização carrega apenas os dados dos setores ativos, deixando de lado as áreas não exploradas pelo usuário.

A união dos métodos descritos acima torna possível lidar com grandes amostras de dados e manter boa qualidade visual mesmo quando o *hardware* disponível é limitado.

3.4.1.2.2 Cortes

Os cortes são operações fundamentais para a boa compreensão de modelos internamente complexos. Os métodos utilizados para a execução de cortes dependem do tipo de representação adotada pelo aplicativo, mas normalmente são utilizadas operações booleanas, já introduzidas no tópico anterior. A visualização de cortes é comumente feita a partir de um ou mais planos de corte, definidos pelo usuário. Também é possível definir um objeto de corte, sendo o cubo e a esfera os mais utilizados. Após a escolha do objeto procede-se à realização de uma ou mais operações booleanas entre o sólido de interesse e o objeto de corte. Caso o volume de interesse seja composto por diversos objetos, é executada uma operação por objeto.

No caso de representações do tipo B-Rep, verifica-se a interseção entre os planos de corte e as faces do sólido. Após essa operação é necessário computar as faces resultantes da interseção e integrar um novo sólido (FIG. 5c, pag. 35). Alguns algoritmos computam apenas as interseções e não recomputam as faces, gerando resultados visuais indesejáveis, como já discutido, pois é possível observar as faces internas dos objetos (FIG. 5b, pag. 35). Quando rapidez de visualização é imprescindível são utilizados algoritmos aproximados, devido ao

custo computacional das operações booleanas.

Nos modelos CSG a operação de corte é feita diretamente, sendo executada em cada primitiva interseccionada pelos planos de corte, incluindo na árvore de dados tanto o objeto de corte como a operação de interseção. O custo de cada operação é baixo, mas o processo pode demorar caso existam muitas primitivas para processar.

Finalmente, no caso dos modelos de subdivisão espacial busca-se os nós interseccionados pelos planos de corte. Para agilizar o processo é possível adotar uma simplificação na operação, evitando a recursão nos nós que demandam maior resolução, porém em detrimento da qualidade de visualização.

3.4.1.2.3 Visualização volumétrica

A visualização volumétrica visa extrair informações relevantes de conjuntos volumétricos de dados, por meio de sistemas interativos que permitem a representação, manipulação e a renderização desses dados (Kaufman, 1992). Os métodos tradicionais operam em modelos de subdivisão espacial (ver item 3.4.1.1.3), compostos por células, voxels ou partículas, normalmente dotados de diversas propriedades não geométricas, denominadas campos escalares. O sistema de visualização volumétrica possibilita a visualização dos campos escalares, cabendo ao usuário determinar os valores ou faixas de valores relevantes.

No caso de volumes sólidos, métodos como a renderização direta permitem visualizar aspectos de interesse do interior de um sólido sem a necessidade de utilizar operações de corte (Clapworthy *et al.*, 2012), recorrendo a alterações de transparência e cor das partes relevantes (FIG. 7, pag. 42). Também é possível utilizar os mesmos princípios em dados geométricos do tipo B-Rep, porém os sistemas existentes comumente operam em conjuntos de dados volumétricos, discretizados em células espaciais.

3.4.1.2.4 Ícones

A representação por meio de ícones permite a utilização tanto de dados volumétricos como geométricos. A aplicação mais comum dos ícones é a indicação de direção e intensidade de campos vetoriais (FIG. 8, próxima página), muito utilizado em simulações de dinâmicas de fluidos, por exemplo. A variação das propriedades dos ícones (direção, tamanho, cor) ou mesmo do tipo de ícone expressam o valor ou a natureza do campo escalar. Como exemplo, a representação de densidade pode ser feita por uma nuvem regular de ícones esféricos, utilizando o raio da esfera para representar a densidade local. Ícones também podem também ser usados para indicar a existência de informação em outras escalas (Clapworthy *et al.*, 2012).

3.4.2 Visualização Multiescalar

O termo visualização multiescalar (*multiscale visualisation*) ou VM, engloba métodos para lidar com modelos ou imagens que possuem detalhes em diversas escalas (FIG. 9, próxima página), seja espacial ou temporal, excedendo a resolução da visão humana (Joy, 2009). As técnicas de VM são utilizadas nos mais variados domínios, tais como visualização médica e biológica, astrofísica, bioquímica, arquitetura e urbanismo, jogos eletrônicos e cartografia, tratando-se, na prática, de uma combinação sistemática das técnicas descritas no item 3.4.1.2.1. Clapworthy *et al.* (2012) executam uma excelente revisão do tema, fornecendo um roteiro para a implementação de sistemas de VM, brevemente descrito na sequência.

FIGURA 7 - Exemplo de visualização volumétrica com renderização direta (<http://en.wikipedia.org/wiki/File:CTWristImage.png>)

FIGURA 8 - Campo vetorial (http://en.wikipedia.org/wiki/File:Vector_Field_on_a_Sphere.png)

FIGURA 9 - Exemplo de visualização multiescalar. (Fonte: McRae *et al.*, 2010)

3.4.2.1 Escolha de plataformas de visualização

No caso deste trabalho, a abordagem mais simples para criar um novo aplicativo consiste em integrar soluções disponíveis em *engines* gráficas e bibliotecas de visualização. Essa abordagem permite criar uma ferramenta totalmente sintonizada com os objetivos do projeto, mas demanda tempo para solucionar os conflitos ou incompatibilidades entre as bibliotecas, principalmente se desenvolvidas em linguagens diferentes. Para contornar esses problemas é possível utilizar apenas uma plataforma de visualização, com o prejuízo da flexibilidade. Uma alternativa intermediária, já adotada por alguns autores como Friese *et al.* (2008) é o uso de plataformas que tenham capacidade de renderização e interfaces de programação, como as *engines* de jogos. Segundo os autores, estas plataformas são vantajosas em razão da velocidade e qualidade da renderização em tempo real e de interação no espaço tridimensional, além de serem otimizadas para extrair o máximo desempenho de *hardware* de baixa capacidade de processamento. Um exemplo é a Unity 3D (2012), otimizada tanto em termos de produtividade de desenvolvimento, como para oferecer alta qualidade gráfica em *hardware* de baixo custo. No entanto, os autores alertam que tais plataformas não possuem as robustas bibliotecas matemáticas utilizadas em aplicações científicas. Portanto, as plataformas de jogos são indicadas quando a prioridade é maior qualidade gráfica e interativa.

Por outro lado, aplicativos e pacotes específicos de visualização possuem uma ampla gama de filtros de dados, alta precisão matemática e são capazes de ler e escrever diversos formatos de arquivos. Existem plataformas projetadas para lidar com grandes volumes de dados, seja otimizando os modelos, seja utilizando processamento distribuído. No entanto, suas capacidades de visualização interativa são básicas, pois visualizações de dados são comumente pré-processadas. Friese *et al.* (2008) alerta sobre o alto custo da infraestrutura exigida para aplicações de visualização científica. No entanto já existem inúmeras plataformas *open-source* de qualidade.

Os aplicativos e pacotes específicos de visualização operam basicamente aplicando filtros aos dados fornecidos pelo usuário. Existem diversos pacotes que fornecem filtros de visualização, sendo o mais famoso o VTK (2013). O *Visualization Toolkit* (VTK) consiste em uma biblioteca *open-source* escrita na linguagem C++, destinada a aplicações de computação gráfica, processamento de dados e visualização. Ela também pode ser acessada através de consoles de linguagens interpretadas populares como o Java e o Python. Essas características tornam o VTK uma ferramenta multi-plataforma, funcionando em todos os sistemas operacionais (Schroeder *et al.*, 2000). O VTK é base para diversos aplicativos de análise de dados e visualização, tais como o Paraview, 3DSlicer, MayaVi, VisIt, OsiriX, e VisTrails. Diversos algoritmos foram desenvolvidos para o processamento de imagens, visualização (métodos escalares, de texturas, vetoriais, volumétricos) e até mesmo modelagem tridimensional avançada.

Essas características tornam o VTK uma excelente opção para o desenvolvimento de aplicativos específicos de visualização, mas dificultam a criação de protótipos, devido a necessidade de desenvolvimento de software (Schroeder *et al.*, 2000). No entanto, o aplicativo Paraview (2013) permite o acesso aos filtros mais utilizados do VTK, facilitando a prototipagem de sistemas de visualização customizados e o teste dos filtros disponíveis. O Paraview consiste em um aplicativo *open-source* destinado a análise e visualização de grandes conjuntos de dados, permitindo aos usuários agilidade na criação de visualizações através de uma interface gráfica, onde é possível, de maneira interativa, carregar os dados, escolher os filtros desejados, ajustar as configurações e parâmetros de visualização e visualizar os resultados desse processo. Além disso, também é possível utilizar as funcionalidades do aplicativo através de uma API de programação, utilizando a linguagem Python (Moreland, 2013). Os filtros de dados do Paraview utilizam boa parte dos módulos do VTK e exploram suas capacidades de processamento paralelo. Desta maneira, o aplicativo foi criado de maneira a permitir a análise de grandes conjuntos de dados, seja de maneira isolada, utilizando um computador

simples, seja de maneira distribuída, utilizando redes de computadores ou supercomputadores, dotados de alta capacidade de processamento paralelo. O Paraview também possui características que permitem sua exploração em uma estratégia mista de desenvolvimento de aplicativos de visualização interativa, onde cumpriria o papel de processar dados e enviá-los a uma *engine* gráfica ou a uma plataforma de jogos como a Unity 3D. Poderia-se argumentar que é melhor usar a biblioteca VTK para isso, porém é possível enviar comandos e dados ao Paraview com maior facilidade (Moreland, 2013), economizando tempo de desenvolvimento.

Devido às suas funcionalidades e facilidades, o Paraview foi escolhido para a condução dos testes de visualização básica e execução de seções bidimensionais. Já a Unity 3D foi escolhida para desenvolver o protótipo de visualização multiescalar, em razão de suas funcionalidades interativas e facilidade de desenvolvimento.

3.4.2.2 Procedimentos de especificação

O trabalho de Clapworthy *et al.* (2012) descreve um procedimento para a especificação de um sistema de VM. O desenvolvimento de aplicações de VM ainda exige grande esforço de pesquisa e programação, pois ainda não existem plataformas de software que englobem todas as funcionalidades necessárias.

O primeiro passo para a criação de um sistema de VM é a especificação do tipo de dados a ser utilizado e de métodos eficazes de obtenção desses dados. Comumente diversas fontes são utilizadas, levantando a questão do direito autoral. Além disso, os dados possuem tipos, formatos e adotam diferentes sistemas de referência. Após a fase de obtenção dos dados e a escolha da tecnologia de implementação, o conteúdo apropriado à visualização deve ser produzido. Esse conteúdo é tradicionalmente organizado em cenas, etapa bastante trabalhosa pois envolve trabalho artístico e técnico especializado. O trabalho de Gottschalk *et al.* (1996) sugere maneiras de automatizar a criação da hierarquia de

escalas da cena, a partir das características dos objetos presentes.

Os dados coletados são analisados, atentando a algumas características principais: tamanho do pacote de dados; quantidade de escalas presentes; escalas mais importantes e a transição entre elas; número de objetos de interesse; estrutura da cena e as oclusões. Considerando a quantidade e a natureza dos dados, a primeira escolha a ser feita é a dos métodos (introduzidos no item 3.4.1.2.1) para lidar com vastas bases de dados, devido à limitação de memória do computador. Caso o pacote de dados possa ser acomodado na memória do computador alvo, não é necessário utilizar esses métodos.

O segundo passo é escolher um sistema eficiente de navegação interativa em cenários repletos de objetos e informações - o usuário deve ser capaz de se situar no mundo virtual e buscar a informação que precisa. Um dos métodos de interação mais comuns é o *scene-in-hand*, onde o usuário manipula o mundo diretamente utilizando operações de rotação, zoom e translação. Outro método clássico é o *fly-through*, onde o usuário navega pelo cenário como se estivesse no comando de uma aeronave. Muitos outros esquemas derivam destes dois principais, utilizando-se, em alguns casos, da combinação deles. Por fim, a contextualização é feita com mapas e painéis de navegação global, ícones e árvores hierárquicas. McCrae *et al.* (2009, 2010) abordaram as dificuldades de navegação em ambientes multiescalares, desenvolvendo uma série de mecanismos para auxiliar a navegação.

Finalmente, é necessário indicar adequadamente a presença de dados em outras escalas. Quando o cenário é muito vasto e saturado com objetos em diversas escalas é necessário adotar soluções que diminuam a poluição visual, mas que, ainda assim, permitam encontrar informação em todas as escalas. Uma estratégia é utilizar ícones que transmitam, de maneira sintética e intuitiva, a natureza do objeto que representam. *Hyperlinks* permitem a visualização de informações adicionais a pedido do usuário. Técnicas de isolamento e magnificação permitem ao usuário se concentrar em um setor restrito do

ambiente, filtrando o excesso de informações. Janelas secundárias podem indicar a presença de objetos em outras escalas, evitando sobrecarregar a janela principal.

Após percorrer sistematicamente todas as etapas descritas acima, o sistema de visualização multiescalar está especificado e pode ser implementado mais facilmente, garantindo as funcionalidades de visualização apropriadas ao tipo de dados.

4 METODOLOGIA

O projeto foi organizado em duas frentes - síntese digital e visualização interativa de microestruturas. Para cada frente foi feito um levantamento do estado da arte e, na sequência, realizados experimentos práticos que provaram a viabilidade de pelo menos uma abordagem, julgada apropriada ao projeto e levando em considerando as limitações de tempo e recursos.

4.1 Atividades planejadas

Para a execução do trabalho foram propostas e conduzidas as seguintes atividades:

4.1.1 Aprofundamento conceitual e técnico

Revisão bibliográfica nos seguintes temas:

- técnicas e tecnologias pedagógicas para o ensino de ciência dos materiais;
- modelagem, síntese e simulação de microestruturas de materiais policristalinos;
- modelagem paramétrica e gerativa;
- visualização de sólidos, visualização multiescalar e visualização científica;
- tecnologias digitais de visualização tridimensional interativa;
- programação Python e Javascript.

4.1.2 Pesquisa, teste e seleção de funções e algoritmos computacionais

O trabalho proposto impôs a resolução dos seguintes desafios computacionais:

- geração e disposição espacial automática de objetos esféricos e elipsoidais;
- simulação física do empacotamento de numerosos objetos virtuais;
- criação de redes espaciais herméticas, compostas por objetos poliédricos

independentes e geradas a partir de uma nuvem de pontos;

- processamento de interfaces entre elementos geométricos tridimensionais (contato, interferência, união, intersecção e subtração);
- armazenamento flexível e hierárquico de modelos tridimensionais;
- manipulação e visualização de modelos tridimensionais: movimentação, rotação, ampliação e redução; cortes; visualização em perspectiva cônica, isométrica e estereográfica;
- isolamento e destaque de objetos específicos;
- visualizações alternativas (sólidos, superfícies, polígonos, curvas, células);
- acesso as propriedades de visualização de cada elemento microestrutural ou grupo de elementos: visibilidade, transparência, cor, tipo de representação geométrica e visual, destaque seletivo;
- renderização em tempo real e/ou de alta fidelidade;
- interface com dispositivos de realidade virtual

4.2 Métodos e recursos

Os testes foram conduzidos em aplicativos gratuitos, utilizando a infra-estrutura do Laboratório de Intermetálicos do Centro de Ciência e Tecnologia de Materiais, localizado no Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (CCTM – IPEN), além de recursos da Caverna Digital (LSI-POLI) e do Centro Interdisciplinar de Tecnologias Interativas (CITI), núcleo de pesquisa da Universidade de São Paulo. Foram realizados testes de conceito das funcionalidades cruciais, utilizando os aplicativos Blender 3D (modelagem tridimensional - *open source*), Unity 3D (plataforma de desenvolvimento de jogos - licença gratuita) e Paraview (visualização científica - *open source*). Após um período de treinamento na linguagem Python e nas funcionalidades dos aplicativos, foram conduzidos testes de métodos, funções e algoritmos selecionados para abordar os desafios listados no item anterior.

4.2.1 Síntese microestrutural

Na etapa de síntese, inspirada principalmente na abordagem adotada por Ghosh *et al.* (2008), utilizou-se o aplicativo de modelagem Blender 3D e sua API (interface de programação) na linguagem Python.

Os modelos tridimensionais de grãos virtuais foram preparados a partir de uma rotina de simulação física de empacotamento de partículas e de um algoritmo de tesselação baseado no diagrama Voronoi, descritos nos próximos capítulos. Os modelos possuem entre 350 e 1050 grãos virtuais e foram validados, do ponto de vista microestrutural, por critérios topológicos definidos na literatura e por experimentos que visaram replicar a distribuição de tamanhos de grão de uma amostra de ferro caracterizada por Zhang *et al.* (2004)

O tamanho dos grãos digitais foi medido pelo método do raio da esfera de volume equivalente (Exner, 1972), utilizado pela referência adotada (Zhang *et al.*, 2004) na medição da distribuição de tamanhos de grão de uma amostra de ferro. O volume de cada grão digital foi medido e o seu raio calculado com base em uma esfera de mesmo volume. Na sequência calculou-se a distribuição normalizada dos raios e os dados foram registrados em arquivos de texto especialmente formatados para uso direto em aplicativos de planilha. Foram adotadas as mesmas faixas de tamanho de grão da referência (Zhang *et al.*, 2004), possibilitando a comparação direta dos resultados. As distribuições foram comparadas adotando o teste Qui-Quadrado, recomendado por Exner *et al.* (1988).

Além da distribuição de tamanhos de grão, também foram medidos o número médio de faces por grão e o número médio de arestas por face, visando comparar com dados da literatura referentes a microestruturas reais de natureza similar. Foram executados testes preliminares para investigar a variação desses parâmetros de acordo com a variedade de tamanhos de partículas introduzidas na simulação. As baterias adotaram 1, 2, 3 e 7 classes de tamanho de partículas, cujas amplitudes foram escolhidas aleatoriamente dentro dos limites estabelecidos na curva log-normal (entre 20% e 260% do tamanho médio). As frequências de cada

classe foram constantes ou iguais. Cada bateria possui 5 amostras, variando aleatoriamente os valores de tamanho de partícula de todas as faixas. Uma última bateria com 4 amostras foi executada, utilizando a distribuição da referência de ferro (Zhang et al., 2004).

Finalmente, os modelos digitais também foram comparados visualmente com materiais reais utilizando cortes bidimensionais(2D) digitais.

4.2.2 Visualização

Na frente de visualização foram executados testes de visualização básica (zoom, translação, rotação), com ênfase nos cortes virtuais, executados no aplicativo Paraview. Uma série de cortes foi executada em espaçamentos regulares e as imagens foram tratadas para destacar os contornos de grão e uniformizar as cores, além de adicionar efeitos de curvatura. Os modelos utilizados foram produzidos na etapa de síntese descrita no item anterior e foram compostos por uma série de objetos poliédricos que, em seu conjunto, preenchem o volume de um cubo completamente (FIG. 11, pag. 53).

Em razão de limitações das funcionalidades de interação do aplicativo Paraview, foi produzido um protótipo exclusivo para teste dos conceitos de visualização multiescalar, com o aplicativo Unity 3D. A *engine* Unity 3D (2012) é uma plataforma adotada por diversos pesquisadores em projetos acadêmicos, no desenvolvimento de *serious games* e outros aplicativos interativos, sendo escolhida, dentre outras opções, devido à sua flexibilidade e praticidade (Petridis et al., 2010).

Todos os modelos microestruturais foram produzidos com alta compacidade, permitindo testar o desempenho da abordagem de visualização em cenários com grande oclusão visual. Por outro lado, o número de objetos desses modelos relativamente pequeno para testar o desempenho do protótipo, o que motivou a adoção de um segundo modelo, exclusivamente para este teste, contando com 6000 objetos e adotando texturas de alta resolução. Este segundo

modelo é composto por um objeto de aspecto cúbico e topologia orgânica, suficientemente complexa para testar o desempenho do sistema. Esse objeto foi replicado em distâncias regulares no espaço tridimensional, formando um grande bloco retangular (FIG. 12, próxima página).

Duas referências foram essenciais para o desenvolvimento do protótipo de visualização multiescalar. A primeira (Clapworthy *et al.*, 2012) forneceu a base metodológica para a especificação de sistemas de visualização multiescalar. A segunda (MacFarlane *et al.*, 2008) indicou e exemplificou um paradigma apropriado para a criação do protótipo básico de visualização, onde os objetos são representados de acordo com seu tamanho efetivo na tela.

Os algoritmos de visualização foram implementados utilizando a linguagem Javascript, uma das linguagens da interface de programação (API) da Unity 3D. Os comportamentos avançados de um objeto são estabelecidos por *scripts*, que nada mais são que partes de código associados ao objeto. Um *script* pode acessar e alterar as variáveis do objeto que, nesse caso, são aquelas relacionadas ao aspecto visual.

Por fim, foi possível testar o sistema de visualização multiescalar em um dispositivo de visualização tridimensional direta do tipo HMD (*Head Mounted Display*). O dispositivo disponível na ocasião foi uma versão de desenvolvimento do Oculus Rift, de baixo custo, boa resolução (640 x 800 por olho) e integração direta com a Unity 3D, não exigindo a implementação de código específico ou a criação de objetos especiais. O software disponibilizado com o aparelho contém uma câmera virtual estereoscópica, composta por duas câmeras especiais. A câmera disponibiliza alguns parâmetros, permitindo obter sintonia fina com as características ópticas do usuário do sistema. O dispositivo atua como um monitor de 1280 x 800, facilitando sua configuração e uso. Finalmente, o Oculus Rift é equipado com lentes esféricas, cujas distorções geométricas e cromáticas são corrigidas por algoritmos embutidos na câmera estereoscópica disponível na Unity 3D.

FIGURA 11 - Vistas isométricas do modelo utilizado

FIGURA 12 - Modelo para testes de desempenho

5 RESULTADOS

5.1 Síntese microestrutural

O objetivo da etapa de síntese foi obter uma amostra cúbica de um material digital, do tipo RVE (Gusev, 1997; Romanova *et al.*, 2005; Shan & Gokhale, 2001; Chawla *et al.*, 2006; Ostoja-Starzewski, 2002; Mishnaevsky Jr., 2005) cujas características são determinadas a partir de um ou mais parâmetros definidos pelo usuário. Verificou-se na literatura os dois fatores mais essenciais para a caracterização microestrutural básica, ou seja, o tamanho médio de grão e a distribuição de tamanhos de grão (Exner, 1972; Underwood, 1970). Desta maneira, buscou-se inicialmente um método para obter amostras caracterizadas por curvas de distribuição arbitrárias e tamanho médio de grão controlado. No entanto, como previsto na literatura e comprovado nos experimentos, encontrar ordenamentos específicos de objetos no espaço, especialmente de objetos de tamanhos e formatos variados, é um problema de otimização que leva muito tempo (Krill & Chen, 2002; Donev *et al.*, 2004). A obtenção de distribuições arbitrárias implica na necessidade de atingir altos níveis de empacotamento em conjuntos de partículas elipsoidais de tamanhos variados, bem como a de utilizar algoritmos de tesselação mais complexos, tais como o Voronoi ponderado ("*weighted Voronoi*"), ambos de implementação pouco trivial. Optou-se, portanto, em manter a linha de simplicidade adotada por este trabalho, reduzindo os parâmetros ao essencial e restringindo o conjunto de distribuições às frequentemente encontradas nos materiais policristalinos, especialmente os metálicos e cerâmicos, além de manter o formato das partículas e grãos próximo ao equiaxial.

Desta maneira, a abordagem considerada mais viável, ágil e simples foi a síntese de microestruturas através de simulação física de partículas, seguida por reconstrução da estrutura de grãos através do diagrama Voronoi (FIG. 12a, próxima página), muito utilizado nesse tipo de problema (Sintay, 2010). Dois

parâmetros foram adotados para controle das características das amostras, o tamanho médio de grão e o perfil de distribuição de tamanhos de grão. O padrão básico de distribuição que se procurou obter nas amostras digitais é o log-normal. Apesar de controvérsias, a curva log-normal (FIG. 12b, abaixo) pode ser considerada a mais adequada para representar a distribuição espacial de tamanhos de grão de materiais policristalinos (Underwood, 1970; Exner, 1972; Berbenni *et al.*, 2007; Raeisinia, 2008; Donegan *et al.*, 2013; Berdichevsky, 2012). Já o tamanho médio de grão é obtido mais facilmente, bastando calcular e aplicar um fator de escala nos grãos digitais, o que torna seu controle independente da distribuição.

FIGURA 12 - (a) Diagrama Voronoi 2D

(Fonte: <http://en.wikipedia.org/wiki/File:2Ddim-L2norm-10site.png>)

(b) Curva log-normal (Fonte: http://en.wikipedia.org/wiki/File:Some_log-normal_distributions.svg)

5.1.1 Empacotamento de partículas

A revisão bibliográfica indicou um método de otimização denominado *Simulated Annealing* (ver item 3.1.1.2), comumente utilizado na tarefa de empacotamento de partículas, visando diminuir o espaço entre as partículas e aumentar a compacidade do conjunto no espaço da amostra. No entanto, um processo de simulação física foi adotado neste trabalho, considerado mais simples de implementar e usar, além de mais ágil.

As partículas são geradas a partir da distribuição de tamanhos solicitada e arranjadas em posições aleatórias de um grid regular (FIG. 13d, FIG.

14c, próxima página), cujo espaçamento é definido pelo tamanho da maior partícula. Esse grid de partículas fica inicialmente sobre um dispositivo virtual de agitação e compactação. Diversos modelos de compactadores virtuais foram criados (FIG. 13), buscando empacotamento e homogeneidade de mistura superiores, avaliados qualitativamente por meio de análise visual das laterais da amostra. A intervenção humana foi necessária durante a simulação pois os mecanismos são manuais – um operador controla uma ou mais plataformas utilizando o teclado. Essa opção foi escolhida devido ao caráter experimental desta etapa e à natureza deste tipo de simulação, exigindo muitos ajustes antes da obtenção de resultados significativos.

Observou-se que o uso da força de gravidade causa um gradiente decrescente de tamanho de grão na direção vertical, pois as partículas menores passam entre os vãos deixados pelas maiores e se acumulam no fundo do recipiente virtual (FIG. 14b). Esse problema foi amenizado ao adotar um fundo cônico em uma das versões, artifício que diminui os espaços intersticiais conforme as partículas se acumulam no fundo (FIG. 13d). No entanto, a melhor opção foi adotar um recipiente com seis paredes móveis (FIG. 13c) em um ambiente sem gravidade. Nesta opção, o grid inicial de partículas se encontra no interior do recipiente e foi estabelecido um alto fator de amortecimento ao movimento das partículas (baixa inércia de movimento), evitando que o problema do gradiente ocorresse em outras direções, em razão das acelerações aplicadas pelas plataformas móveis. Amostras de maior qualidade e homogeneidade foram produzidas com tais configurações (FIG. 15, pag. 58).

Finalmente, para contornar as distorções de forma produzidas pelo diagrama Voronoi tradicional, ao invés de utilizar as partículas de maneira independente, foram criados grupos interdependentes de partículas. Esses grupos ou aglomerados foram configurados empiricamente, buscando amortecer a distorção produzida pelo diagrama Voronoi tradicional.

FIGURA 13 – Modelos de compactadores virtuais desenvolvidos

FIGURA 14 - (a) Amostra com gradiente, vista superior (topo do recipiente, grãos maiores).
 (b) Vista inferior (fundo do recipiente, grãos menores).
 (c) Disposição inicial das partículas no compactador

FIGURA 15 – Exemplos de amostras geradas neste trabalho

FIGURA 16 - (a) Partículas empacotadas
(b) Células Voronoi (fonte: <http://www-math.mit.edu/dryfluids/gallery/Voronoi.htm>)

FIGURA 17 - Vazios produzidos por uma versão alternativa do diagrama Voronoi

Em métodos de otimização como o *simulated annealing* é comum medir a qualidade das soluções após cada mudança, aceitando as melhorias e descartando retrocessos (Donegan *et al.*, 2013). Dependendo da tolerância estabelecida, boa parte das soluções locais ou parciais podem ser consideradas suficientes. Soluções satisfatórias foram obtidas com relativa facilidade e rapidez, principalmente para partículas equiaxiais, pois não é necessário atingir um alto grau de empacotamento para garantir uma boa sintonia de tamanho entre a partícula simulada e o grão gerado. Existem maneiras de executar abalos bruscos na posição das partículas, mas não existe medição instantânea da qualidade do resultado. No momento, o único indicador de melhoria é o volume geral da amostra, que pode ser inferido visualmente pela posição das plataformas. O método adotado neste trabalho é considerado o mais indicado para o cálculo do tamanho de grão (Exner, 1972) e baseia-se no volume. Desta maneira, são toleráveis pequenas variações na forma enquanto o volume for mantido. Já no caso de partículas de aspecto arbitrário é necessário maior grau de empacotamento para evitar desvios tanto no tamanho como na forma desejada, o que exigiria a aplicação de métodos de medição para averiguar instantaneamente a qualidade da solução, em termos de empacotamento.

5.1.2 Tesselação Voronoi

Após a simulação se obtém um conjunto de partículas empacotadas (FIG. 16a, página anterior). A posição final do centro de cada partícula é resgatada, gerando uma lista de pontos. Um algoritmo baseado no diagrama Voronoi gera um grão poliédrico convexo de faces planas para cada ponto desta lista (FIG. 16b).

As limitações do algoritmo Voronoi tradicional previstas na literatura para este tipo de aplicação foram constatadas. Diversas modificações foram feitas e testadas buscando contornar algumas dessas limitações. A limitação mais conhecida deve-se à natureza do diagrama Voronoi, produzindo apenas células poliédricas convexas, simplificação aceita por muitos trabalhos na área.

Adicionalmente, em alguns casos não foi possível obter uma amostra totalmente livre de defeitos geométricos, principalmente pequenos vazios (FIG. 17, pag. 58). Concluiu-se que tais defeitos deviam-se a dois problemas. O primeiro, já solucionado, são limitações em algumas das funções geométricas do software utilizado, gerando planos em ângulos que não obedecem as regras do diagrama Voronoi. Isso ocorre quando os objetos utilizados na simulação ultrapassam as limitações dimensionais da função. O segundo problema ocorreu em versões modificadas do algoritmo, quando buscou-se obter grãos com a mesma geometria das partículas utilizadas na simulação. Os algoritmos implementados foram produzidos a partir do diagrama Voronoi original, porém as mudanças ocasionaram quebras de princípios geométricos, gerando desencontros de planos na interface de alguns grãos, que, por sua vez, resultaram em poros (FIG. 17, pag. 58). Essas versões defeituosas do diagrama, apesar de descartadas neste trabalho, podem ser exploradas futuramente para a geração de amostras porosas. O Voronoi ponderado ou "*weighted Voronoi*" (Gellatly & Finney, 1982) corrige esse problema, mas só funciona diretamente em partículas equiaxiais, além de possuir implementação e funcionamento mais complexos. Como a solução para partículas de forma arbitrária tem o mesmo nível de complexidade para os dois algoritmos, optou-se por manter a simplicidade e explorar as possibilidades do diagrama Voronoi original, principalmente na obtenção de padrões de distribuição usuais, como o normal, multimodal e log-normal.

5.1.3 Características dos grãos

A fim de validar o modelo de síntese proposto procedeu-se inicialmente à verificação de algumas características geométricas dos grãos gerados, utilizadas em diversos trabalhos comparativos - o número médio de faces por grão (neste caso, também representa o número de vizinhos imediatos ou primeiros vizinhos) e o número médio de arestas por face. Foram feitas quatro baterias de testes preliminares, variando-se a distribuição de tamanhos das

partículas utilizadas na simulação. Na sequência foram feitos mais 5 testes, adotando uma distribuição de tamanhos de grão obtida em uma amostra de ferro puro, caracterizado por Zhang *et al.* (2004) via diferentes métodos, dentre eles, o método do raio da esfera de volume equivalente. Este método de medição é recomendado por Exner (1972) devido a grande precisão na medição de volumes por esterologia e para caracterizar distribuições espaciais de objetos equiaxiais.

Os resultados topológicos estão apresentados na TABELA 1 (pag. 63). As amostras geradas possuem propriedades geométricas similares às previstas na literatura (Underwood, 1970; Kumar *et al.*, 1996; Krill & Chen, 2002; Zhang *et al.*, 2004; Ullah *et al.*, 2013), relativas a materiais metálicos reais: grãos com número médio de faces entre 11 e 12 e número médio de arestas por face próximo de 5. Apesar da grande maioria dos dados das referências terem sido obtidos esterologicamente, Ullah *et al.* (2013) executaram a reconstrução tridimensional digital de uma amostra de ferro e obtiveram valores similares, medidos diretamente em três dimensões. Todos os resultados obtidos situam-se entre 11,6 e 12,8 faces, consideravelmente superiores aos obtidos quando se usa o diagrama Voronoi em um grupo de pontos dispostos aleatoriamente no espaço. Neste caso, o valor médio do número de faces se aproxima a 16.

As características geométricas obtidas das amostras baseadas em ferro geradas neste trabalho foram muito próximas às obtidas por Ullah *et al.* (2013) para número médio de faces por grão, entre 12,16 e 12,2 (referência 12,8) e quase idênticos para o número médio de arestas por face, entre 4,88 e 4,93 (referência 4,9). Vale frisar que Ullah *et al.* (2013) propuseram-se a reconstituir digitalmente uma amostra de ferro α a partir de múltiplas seções, executando as medições em três dimensões, obtendo uma amostra muito próxima à real. Também foi possível observar um padrão ao aumentar a variedade de tamanhos de grão - o número de arestas por face aumenta. De fato, de acordo com esse padrão, o número médio de arestas por face das amostras digitais de ferro foi o maior obtido, pois foi onde se utilizou maior variedade de tamanhos de partículas,

ou seja, uma distribuição mais ampla.

Apesar das diversas modificações feitas nas últimas amostras - descritas na sequência - deve ser frisado que as características geométricas dos grãos foram mantidas.

5.1.4 Análise das distribuições obtidas

Conforme alertado na literatura e comprovado nos testes, o diagrama Voronoi tradicional gera uma curva normal de distribuição, simétrica e de base estreita (Benedetti & Aliabadi, 2013). Isso significa que não é possível obter grande amplitude de tamanhos de grão. No entanto, a distribuição do ferro e da maioria dos metais não são simétricas e são consideravelmente mais amplas que as geradas pelo diagrama Voronoi.

Como já introduzido anteriormente, para contornar essa limitação, ao invés de utilizar partículas totalmente independentes quanto a mobilidade, adotaram-se agrupamentos de partículas com mobilidade interna reduzida. Esse método "protege" as partículas mais internas ao agrupamento da interação com as externas, produzindo gradações mais amplas de tamanho de grão e permitindo obter uma curva de distribuição muito similar à do ferro (FIG. 18, próxima página).

Após variar os tipos, misturas e o posicionamento dos agrupamentos utilizados nas amostras digitais de ferro, foram obtidos histogramas de distribuição próximos aos da referência (FIG. 19a, próxima página). A amostra possui largura da curva de distribuição muito próxima da referência (Zhang *et al.*, 2004), sendo consideravelmente maior que a esperada para distribuições geradas com o diagrama Voronoi (Benedetti & Aliabadi, 2013). De acordo com Exner(1988), o teste qui-quadrado é adequado para comparação de distribuições. O resultado do teste, executado e interpretado de acordo com o procedimento recomendado pelo autor, foi um X^2 de 6.7, o que garante uma probabilidade de coincidência das distribuições de aproximadamente 90%, um resultado aparentemente alto e positivo, mas menor do que o valor recomendado pelo autor (95%).

	Amostra	Faces por grão (média)	Arestas por face (média)
1 tamanho de partícula	Amostra 1	12,56	4,79
	Amostra 2	12,68	4,74
	Amostra 3	12,64	4,77
	Amostra 4	12,66	4,76
	Amostra 5	12,59	4,75
	<i>Média</i>	<i>12,63</i>	<i>4,76</i>
2 tamanhos de partícula	Amostra 1	12,77	4,8
	Amostra 2	12,32	4,82
	Amostra 3	12,11	4,79
	Amostra 4	12,23	4,8
	Amostra 5	12,26	4,82
	<i>Média</i>	<i>12,34</i>	<i>4,81</i>
3 tamanhos de partícula	Amostra 1	12,02	4,84
	Amostra 2	11,97	4,82
	Amostra 3	12,08	4,83
	Amostra 4	11,99	4,83
	Amostra 5	12,09	4,82
	<i>Média</i>	<i>12,03</i>	<i>4,83</i>
7 tamanhos de partícula	Amostra 1	11,71	4,87
	Amostra 2	12,02	4,77
	Amostra 3	11,66	4,74
	Amostra 4	11,85	4,87
	Amostra 5	12,19	4,9
	<i>Média</i>	<i>11,91</i>	<i>4,84</i>
Referência	Amostra 1	12,34	4,88
	Amostra 2	12,52	4,93
	Amostra 3	12,51	4,88
	Amostra 4	12,16	4,9
	<i>Média</i>	<i>12,38</i>	<i>4,90</i>
	Média geral	12,24	4,82

TABELA 1 (esq.) - Resultados topológicos obtidos

FIGURA 18 (dir.) - Ilustração do efeito de amortecimento de tamanho de grão. Os planos Voronoi (em vermelho) se aproximam da forma desejada (esferas) quando são adicionados vizinhos de tamanho similar.

FIGURA 19 - (a) Comparação de distribuições (normalizadas).
(b) Gráfico obtido após ajustes

A análise das distribuições indica maiores desvios nas primeiras e últimas faixas de tamanho (FIG. 19a, página anterior) e, após uma série exaustiva de experimentos, observou-se certa dificuldade em obter melhores resultados nessas regiões. Apesar da nítida melhora da amplitude da curva, notou-se certo esgotamento da técnica de aglomerados de partículas. Donegan *et al.* (2013) observam que a insistência em ajustar os dados ao padrão log-normal acaba resultando em uma ênfase na região intermediária das curvas, próximo à média e que os esforços de ajuste para aproximar a cauda da curva ao padrão log-normal devem ser feitos com critério pois podem gerar alguns grãos muito grandes e irrealistas, produzindo modelos pouco representativos, especialmente para a execução de testes mecânicos que dependem dos métodos de elementos finitos. Isso ocorre, segundo os autores citados, pois simulações baseadas na curva log-normal acabam inserindo uma grande quantidade de grãos muito pequenos ou muito grandes na microestrutura, o que gera questionamentos quanto à representatividade universal do padrão.

Uma opção imediata para aproximar as distribuições, evitando executar novas simulações, é alterar a distribuição da amostra operando transformações nos grãos gerados, ou seja, executando transformações locais na amostra. Duas operações foram vislumbradas, a divisão de grãos individuais e a soma de grãos vizinhos. A divisão de grãos (FIG. 20a, pag. 66) altera a curva de distribuição entre o início e o pico e, na prática, demanda a criação de mais pontos Voronoi dentro de um dado grão. Essa operação deve ser feita com ponderação, pois a inclusão de muitos grãos em uma só posição pode alterar significativamente a homogeneidade da distribuição. Sendo assim, o número de divisões em um grão foi limitado a 3 na simulação feita. A operação de soma de grãos vizinhos (FIG. 20b, pag. 66) altera a curva de distribuição entre o pico e o final, criando grãos de geometria côncava e de aspecto mais alongado em relação aos grãos da amostra original. A soma deve ser feita de modo a respeitar os limites da distribuição alvo, garantindo que não haja a inclusão de grãos anômalos na microestrutura digital,

tal como recomendado por Donegan *et al.* (2013). Segundo os autores, um grão anômalo é caracterizado por um tamanho três vezes maior que a média. Limitou-se, portanto, na simulação conduzida, um máximo de soma de dois grãos, sendo necessário assegurar que existam grãos vizinhos de tamanho similar.

Esse processo de soma e divisão deve ser enquadrado em uma metodologia que melhore a semelhança entre as distribuições e, ao mesmo tempo, evite as anomalias previstas por Donegan *et al.* (2013) e a introdução de desequilíbrios e heterogeneidades. Após o emprego das transformações (FIG. 19b, pag. 63) o teste Qui-Quadrado resultou em um X^2 de 1.8, o que garante uma probabilidade de coincidência das distribuições de, no mínimo, 99%. A amostra resultante não sofreu alterações significativas nos parâmetros geométricos dos grãos (número de faces por grão e número de arestas por face) nem heterogeneidades visíveis, introduzindo alguns poucos grãos maiores, côncavos e de aspecto ligeiramente alongado (FIG. 20b, próxima página), o que pode ser considerado um fator positivo devido à presença de grãos similares em microestruturas reais.

Apesar da melhoria substancial na correspondência entre as distribuições, o impacto dos processos que introduzem aglomerações de grãos de tamanho similar na amostra digital deve ser avaliado. O primeiro processo é a simulação de empacotamento físico, que utilizou aglomerados de partículas. O segundo processo é a divisão de grãos maiores para o ajuste do trecho inicial da curva de distribuição. No entanto, em uma análise preliminar foi possível encontrar aglomerações visualmente similares em cortes de um aço extra doce (FIG. 21, pag. 67), muito próximo ao ferro puro de um ponto de vista prático .

FIGURA 20 - (a) Exemplo de operação de divisão de grãos. (b) Exemplo de operação de soma de grãos. (c) Corte longitudinal em amostra de 1050 grãos (sem escala)

FIGURA 21 - (a) Destaque (em azul) de aglomerações de grãos em uma micrografia real de aço extra doce. (b) Notar a similaridade com as aglomerações presentes nos cortes de uma amostra digital gerada neste trabalho

5.1.5 Desempenho

O procedimento desenvolvido permitiu gerar, em menos de um minuto, amostras contendo mais de 1000 grãos. Amostras maiores também podem ser geradas, considerando maior tempo de geração. No entanto, existe uma limitação prática quanto ao tamanho máximo, pois uma amostra de 100000 grãos, por exemplo, demoraria dias, senão semanas para ser gerada. Isso ocorre porque tanto a simulação física como o algoritmo Voronoi são problemas computacionalmente complexos, cujo tempo de resolução não é linearmente proporcional ao tamanho da amostra, podendo ser até exponencial (Krill & Chen, 2002). O trabalho se limitou a amostras de aproximadamente 1000 grãos,

grandeza usualmente adotada por muitos trabalhos de síntese e simulação. Porém, se necessário, é possível utilizar o procedimento criado em um processo que sintetize os grãos por etapas, possibilitando a produção de amostras maiores em tempo aceitável.

Os algoritmos utilizados foram aprimorados em grande medida ao longo do desenvolvimento do trabalho. Em um primeiro momento foram adotadas estratégias algorítmicas do tipo 'força bruta', recomendadas apenas para testes devido à facilidade de implementação, mas resultam em maiores tempos de execução. Para amostras de 350 grãos, o algoritmo Voronoi do tipo força bruta levou em média 120 segundos para finalizar a tesselação. Nesta versão, para cada partícula da amostra, o algoritmo percorre todas as outras, executando todos os cálculos previstos, ou seja, o tempo de execução é proporcional a n^2 , sendo n o tamanho da amostra. O algoritmo foi modificado, diminuindo o tempo de de execução para 30 segundos e, após alguns ajustes, para menos de um segundo. Nesta última versão, para cada partícula, são percorridas apenas as partículas vizinhas, reduzindo substancialmente a quantidade de cálculos realizados, sendo o tempo de execução aproximadamente proporcional a n , considerando que o número médio de vizinhos de cada partícula é constante e independente do tamanho da amostra.

5.1.6 Comentários

Os resultados demonstraram que o método descrito neste trabalho permitiu obter rapidamente amostras satisfatórias do ponto de vista microestrutural, considerando tanto as características geométricas dos grãos como a curva de distribuição típica de materiais metálicos. O método de divisão e soma de grãos possibilitou um ajuste fino nas regiões inicial e final da curva de distribuição, no entanto, tal técnica deve ser melhor avaliada quanto aos impactos na homogeneidade das amostras.

Os resultados também apontaram, para os métodos utilizados, quais os parâmetros microestruturais mais facilmente controláveis e aqueles mais imprevisíveis. O tamanho médio de grão é facilmente controlado, para qualquer tipo de distribuição. Quanto ao perfil de distribuição, podem ser obtidas distribuições normais e aproximadamente log-normais. A largura e assimetria de curvas do tipo normal podem ser variadas de maneira qualitativa, porém ainda não é possível o controle fino da curva de distribuição. Em alguns testes foram obtidas distribuições multimodais, mas essa frente não foi explorada neste trabalho. Também é possível obter amostras com porosidade intergranular e, após ajustes nos compactadores virtuais, gradientes de tamanho de grão em qualquer direção. Outros parâmetros gerais como a forma da amostra e o número total de grãos também podem ser controlados.

Após a execução dos experimentos ficou patente, devido aos métodos utilizados e à natureza da simulação, que muitos parâmetros são interdependentes e a obtenção de amostras com características precisamente determinadas, se possível, depende de muita interação e experimentação com o sistema desenvolvido.

5.2 Visualização

5.2.1 Visualização básica

Os testes visaram avaliar as capacidades interativas do aplicativo Paraview em operações básicas como zoom, rotação e translação.

O modelo microestrutural foi exportado do aplicativo Blender (2013) no formato OBJ, contendo os vértices, arestas, faces e as relações entre eles. Essa representação é do tipo B-Rep (ver item 3.4.1.1.2), ou seja, cada grão é uma célula espacial representada apenas por suas faces externas. Desta forma, não foi possível utilizar os filtros do Paraview voltados a dados volumétricos, mas apenas os filtros destinados a dados geométricos. Essa limitação ocorrerá sempre que os dados de

entrada forem gerados por aplicativos de modelagem tridimensional, que não trabalham com representações volumétricas.

O Paraview aplica, quando necessário, conceitos de visualização multiescalar como o LOD (*Level of Detail*). Ao carregar o modelo na memória, o aplicativo gera automaticamente modelos simplificados, compostos por uma quantidade reduzida de triângulos (FIG. 22), para serem utilizados quando o usuário movimentar o modelo, mantendo a fluidez da visualização (Moreland, 2013). Outro artifício similar é utilizado para a visualização de resultados preliminares de animações, quando são geradas imagens de menor resolução visando aumentar a velocidade de síntese do vídeo (FIG. 23).

A FIGURA 24 (próxima página) mostra o modelo utilizado nos testes, em perspectiva cônica e isométrica. Devido a sua simplicidade superficial, não é notável a diferença entre o modelo original e o simplificado.

FIGURA 22 – Exemplo do LOD no Paraview (redução de polígonos) (Fonte: Moreland, 2013)

FIGURA 23 - Exemplo do LOD no Paraview (redução de resolução) (Fonte: Moreland, 2013)

FIGURA 24 - Modelo de testes (em perspectiva cônica e isométrica)

FIGURA 25 - Planos e volumes de corte

FIGURA 26 - (a) Aplicação dos filtros *Clip* (esquerda) e (b) *Clip Closed Surface* (direita)

5.2.2 Cortes

A região alvo é delimitada por meio de um ou mais planos ou volumes de corte (FIG. 25, página anterior). Os filtros utilizados no Paraview foram o *Clip*, o *Slice* e o *Clip Closed Surface*. O filtro *Clip* extrai a parte indesejada da amostra após a determinação do plano ou volume de corte. Porém, como já discutido anteriormente, o corte de modelos do tipo B-Rep gera modelos com faces abertas na região do corte (FIG. 26a, página anterior). Quando isso representa um problema, como é o caso, o filtro *Clip Closed Surface* pode ser utilizado, pois executa o fechamento automático das superfícies abertas (FIG. 26b, página anterior e FIG. 27, próxima página). Já o filtro *Slice* retira fatias bidimensionais da amostra (FIG. 27 e 28, próxima página; FIG. 20, pag. 66), funcionalidade extremamente útil, considerando as aplicações em ciência dos materiais.

Para destacar os contornos de grão, tanto nos cortes como no modelo tridimensional, foi necessário inserir um pequeno espaçamento entre os grãos. Esse artifício gera um problema de cor em alguns contornos de grão (FIG. 28a, próxima página), resultando em linhas claras e escuras. O ideal é obter uma cor uniforme em todos os contornos de grão, para evitar confusões visuais e facilitar a medição de características microestruturais em aplicativos de análise de imagens. Para contornar o problema as imagens foram processadas no aplicativo Inkscape, obtendo linhas nítidas e de mesma cor (FIG. 28b). Outros filtros de imagem podem ser utilizados para melhorar o aspecto visual e a verossimilhança das imagens, dado que os contornos de grão em metalografia raramente são lineares. Os filtros podem adicionar efeitos de curvatura suave nos contornos de grão (FIG. 28c), proporcionando um aspecto visual similar ao de micrografias reais. No entanto deve ser frisado que tal curvatura não existe no modelo tridimensional, sendo adicionada como um efeito, com o intuito de melhorar o aspecto visual em aplicações didáticas, considerando os pontos discutidos anteriormente no item 3.3.

FIGURA 27 – Cortes sequenciais

FIGURA 28 - (a) Imagem original dos cortes.
 (b) Uniformização de cores dos contornos de grão.
 (c) Destaque e aplicação de efeito de curvatura suave nos contornos de grão

FIGURA 29 - Filtro Glyph, representando o baricentro (esq.) e os vértices (dir.) dos grãos

5.2.3 Ícones

Ícones bi ou tridimensionais são disponibilizados no Paraview, tanto para dados geométricos como volumétricos. Apesar de serem artifícios mais relevantes quando os pontos possuem valores escalares, presentes apenas em dados volumétricos, também são úteis para indicar a existência de informações em outras escalas e como representação simplificada, quando muitos objetos estão presentes na tela (Clapworthy *et al.*, 2012). Neste caso, os ícones podem representar os vértices ou o centro geométrico dos grãos (FIG. 29, página anterior). Em desenvolvimentos futuros, ícones poderão expressar diversas propriedades relevantes dos grãos, tais como tamanho, número de vizinhos, orientação cristalográfica, forma, porosidade, dentre outros, permitindo explorar mais profundamente as informações presentes no modelo microestrutural.

5.2.4 Visualização multiescalar

O protótipo de visualização multiescalar visa demonstrar as funcionalidades básicas da abordagem no cenário de aplicação pretendido por este trabalho. Foi implementado no aplicativo Unity 3D com dois elementos básicos, os *scripts* (código) de controle e um cenário onde estão os objetos (grãos), duas câmeras, uma luz geral e uma direcional acoplada à câmera.

A interface do aplicativo possui duas janelas (FIG. 30, pag 76 e 77). A janela da esquerda tem o intuito de situar o usuário no cenário, mesmo quando estiver imerso no interior do modelo, adotando uma câmera estática. A posição do usuário é representada por uma esfera vermelha e três eixos, sendo o eixo vermelho o indicador da direção frontal. A janela da direita serve à navegação e visualização, operando em modo de perspectiva em primeira pessoa.

O protótipo permite a navegação e a seleção de qualquer grão visível. Dois *scripts* controlam o estado de seleção e definem a representação gráfica do grão, de acordo com seu tamanho em tela. O tamanho é definido pela razão entre o maior lado do grão virtual e a distância da câmera. Quatro limites de

tamanho foram estipulados para este protótipo, aqui representados sequencialmente (FIG. 30a-30d). As imagens permitem constatar que quão maior a proximidade de um dado grão, menor é quantidade de grãos presentes no campo visual. Esta abordagem permite, em teoria, balancear qualidade e desempenho, pois propicia a visualização de muitos elementos em baixo nível de detalhe ou a visualização de poucos objetos, em alto nível de detalhe.

O primeiro limite, quando o grão é visualmente pequeno, determina uma representação em ícone (FIG. 30a, pag. 76). Os dois limites seguintes, quando o grão tem tamanho visual intermediário, determinam duas representações, sendo a primeira menos detalhada e adotando uma cor simples aleatória (FIG. 30b) e a segunda adotando uma textura detalhada, neste caso, buscando representar a orientação da rede cristalina (FIG. 30c). Quando atingido o último limite e o grão ocupa praticamente toda a tela, adota-se uma representação transparente, permitindo visualizar os grãos oclusos (FIG. 30d, pag. 77). Por fim, o usuário pode isolar um objeto ao selecioná-lo com o mouse, mesmo se imerso na amostra de grãos (FIG. 30e).

Por fim, foram feitos testes preliminares em um dispositivo de realidade virtual do tipo HMD (*head mounted display*). Esse tipo de dispositivo é usado como um óculos e projeta uma imagem para cada olho, propiciando a sensação direta da profundidade. Sensores captam em tempo real os ângulos da cabeça, permitindo controle direto da rotação da câmera no cenário virtual e tornando a experiência mais imersiva. Apesar das vantagens, qualquer sistema de visualização tridimensional exige maior esforço de desenvolvimento. É necessário produzir uma imagem para cada olho e regular os parâmetros das duas câmeras virtuais de maneira a representar corretamente as proporções dimensionais individuais referentes ao sistema visual humano. Adicionalmente, os HMD normalmente adotam lentes, exigindo o processamento de cada imagem para corrigir distorções (FIG. 30f, pag. 77). O modo estereoscópico será desenvolvido em trabalhos futuros.

FIGURA 30

(a) Representação em ícones

(b) Representação em cores aleatórias

(c) Representação em texturas

FIGURA 30 (continuação)
(d) Transparência
(e) Seleção de grãos
(f) Modo estereoscópico

5.2.5 Comentários

Os testes de visualização permitiram identificar os potenciais e limitações dos aplicativos utilizados, além de averiguar preliminarmente a eficácia computacional e cognitiva da abordagem multiescalar. O protótipo reproduziu todas as características pretendidas, inspiradas no trabalho de McFarlane *et al.* (2008). Foi possível alterar a visualização dos objetos de acordo com seu tamanho efetivo na tela.

A interface do protótipo permitiu uma navegação eficiente e a detecção, busca e exploração de todos os objetos presentes na cena. É possível alterar rapidamente os limites de tamanho de cada modo de visualização, para que todo objeto se apresente com uma representação adequada e possa ser localizado na cena, mesmo se estiver encoberto. O teste básico de um HMD expôs as principais questões técnicas e os desafios a serem enfrentados no desenvolvimento de sistemas de visualização tridimensional direta.

A Unity 3D permitiu testar os aplicativos rapidamente durante o desenvolvimento e possui ferramentas para analisar o desempenho do código. Em duas situações o desempenho foi considerado satisfatório. O aplicativo manteve taxas de FPS (*frames per second* – quadros por segundo) entre 50 e 90, mesmo em cenas com mais de 6000 objetos tridimensionais, somando mais de um milhão de triângulos. Adicionalmente, objetos que estão fora dos limites de visão da câmera não são considerados pelo sistema de renderização e boa parte dos *scripts* também não é executada, de modo que a maior parte do processamento é utilizada nos objetos ativos.

Aplicativos interativos como o Unity 3D executam diversas operações a cada quadro. Desta maneira, para obter um bom desempenho de abordagens multiescalares, é essencial que o código dos *scripts* seja o mais eficiente e enxuto possível, pois boa parte é executada a cada quadro e, no caso deste trabalho, por uma grande quantidade de objetos.

6 DISCUSSÃO

Diversas decisões foram tomadas e as decorrentes limitações foram aceitas ao seguir um dos objetivos definidos para o trabalho: tornar mais acessível a implementação computacional aos interessados no tema e que não contam com apoio de especialistas, nem tem acesso a aplicativos comerciais e, em muitos casos, não possuem conhecimento ou habilidades necessários. Isso implicou em testar, experimentar, explorar e dar preferência a métodos e tecnologias mais simples, acessíveis, diretos, integráveis e flexíveis para abordar as duas frentes estudadas. Na sequência serão explicitadas as justificativas, vantagens, desvantagens e as consequências dessas decisões, nos pontos mais cruciais do trabalho.

6.1 Simulação

A opção pelo método de empacotamento utilizado pode ser questionável, devido ao amplo uso e aceitação do algoritmo *simulated annealing*. O fator que mais contribuiu para a adoção de métodos de simulação física é a ampla disponibilidade de implementações computacionais de qualidade, inclusive em alguns aplicativos de criação de modelos tridimensionais, tais como o Blender 3D e também em plataformas de criação de jogos, tais como o Unity 3D, ambos utilizados neste trabalho. Apesar das bibliotecas de simulação física desses aplicativos operarem com baixa precisão matemática, elas são capazes de lidar com grandes quantidades de objetos e demonstraram ser apropriadas aos desafios impostos por este trabalho. A grande vantagem é a agilidade e relativa facilidade de implementação da simulação, considerando a quantidade e complexidade de código necessário, além da flexibilidade de uso proporcionada pelos aplicativos, devido à presença de diversas ferramentas robustas de modelagem e visualização. Essa flexibilidade permite a implementação ágil de

novas funcionalidades. Por outro lado, como já explicitado, tanto os métodos heurísticos como as simulações físicas fornecem soluções aproximadas, considerando quatro requisitos: confinamento dos objetos dentro do espaço da amostra; minimização da sobreposição entre os objetos; maximização da densidade de empacotamento e da homogeneidade da distribuição espacial das partículas. Os dois primeiros requisitos foram plenamente atendidos pela simulação física e os dois últimos exigiram a criação de diversas versões de compactadores virtuais. Também foram feitos ajustes nos parâmetros físicos, tais como atrito e gravidade, de maneira a obter melhores soluções em termos de densidade de empacotamento. Siiriä & Yliruusi (2007) demonstraram que a utilização de baixos fatores de atrito propicia empacotamentos mais densos, devido ao aumento da mobilidade dos objetos. Apesar da homogeneidade não ser essencial neste trabalho, buscou-se evitar gradientes acentuados de tamanho de grão, preocupação que também se refletiu nas diversas versões de compactadores virtuais e também no método de geração e disposição inicial das partículas. A eliminação da gravidade e a imposição de um alto fator de arrasto produziram amostras mais homogêneas, avaliadas visualmente.

Desta maneira, o método de empacotamento via simulação física foi considerado o mais apropriado ao trabalho e se mostrou bastante rápido, eficaz e flexível, além de mais simples de operar e experimentar, considerando usuários pouco versados em programação. Claramente existe sempre espaço para melhorias em qualquer processo, mas o aprendizado necessário para configurar simulações nesses aplicativos e testar modificações é consideravelmente menor comparado ao necessário para implementar e alterar algoritmos de otimização. Diversas melhorias podem ser executadas sem a necessidade de programação, mas a iniciação em programação nos aplicativos utilizados é mais simples e rápida, devido à maior simplicidade das linguagens e à presença de muitas funcionalidades nos aplicativos. Outra vantagem do método físico é a fácil replicabilidade dos resultados quando todo o processo é automatizado, sem a

necessidade de registrar todas as variáveis durante o processo. A replicabilidade não é tão trivial nos algoritmos heurísticos, devido ao uso de diversas variáveis aleatórias, o que implicaria na criação de um sistema de registro. Podemos dizer que os algoritmos heurísticos podem produzir resultados superiores, principalmente em termos de densidade de empacotamento, mas tendem a ser mais lentos e a exigir mais dos recursos computacionais, muitas vezes não disponíveis. Melhorias quanto à homogeneidade também não são garantidas. Os algoritmos heurísticos, por definição são aproximados e baseados em uma estratégia de tentativa e erro, sendo utilizados quando não se compreende suficientemente determinado problema e não existe solução óbvia.

No entanto, no caso do empacotamento de partículas, existem paralelos com os processos de conformação baseados na compactação de pós, como a metalurgia do pó e a cerâmica, ou mesmo na fabricação de comprimidos na indústria farmacêutica. Nestes casos, a utilização de modelos físicos virtuais, tais como os empregados por Siiriä & Yliruusi (2007) conduz a soluções mais elegantes e, finalmente, à melhor compreensão do problema, criando pontes entre os métodos de simulação e os métodos de produção de materiais. Siiriä & Yliruusi (2007) demonstraram a simulação de um processo de compactação de pós, utilizando cerca de 10000 partículas, cujo paradigma é bastante similar ao adotado neste trabalho. Os pós utilizados em metalurgia do pó são constituídos normalmente por partículas policristalinas, e sua forma e tamanho podem ser controlados em certa medida (German, 1996). Considerando o artifício utilizado na síntese de amostras virtuais baseadas no ferro - foram adotadas aglomerações de partículas ao invés de partículas totalmente independentes – podemos dizer que existe uma proximidade conceitual entre uma partícula policristalina de pó e um aglomerado de partículas, o que pode ser explorado em trabalhos futuros. Mesmo que não seja possível controlar as características dos grãos em cada partícula de pó, é possível fazê-lo para todo o conjunto. Normalmente, após a compactação dos pós em moldes (matrizes) é feito um tratamento térmico para promover a

coesão das partículas compactadas e reduzir a porosidade. O tratamento pode alterar as características originais dos grãos do pó, porém, o crescimento de grão substancial se dá apenas no último estágio da sinterização (German, 1996). Ainda é possível prever a magnitude do crescimento de grão após o tratamento térmico e densificação, tornando possível obter amostras com distribuições controladas e menor porosidade.

A metalurgia do pó também permite certo controle da porosidade e introduzir gradientes de porosidade e de tamanho de grão nos materiais. Nos experimentos de síntese também foram produzidas amostras com porosidade intergranular (FIG. 17, pag. 58) e gradiente de tamanho de grão (FIG. 14a e 14b, pag. 57), inicialmente considerados defeitos, mas que podem ser explorados futuramente na produção de amostras digitais porosas. Apesar desse aspecto não ter sido profundamente investigado, já existem indicações de parâmetros relevantes na obtenção e controle de porosidade, tais como o tamanho do limite amostral, a 'pressão' de compactação e a variedade de tamanhos e formas de partículas utilizadas na simulação.

Devido a todos esses fatores podemos vislumbrar o potencial da técnica de empacotamento virtual de partículas demonstrado neste trabalho, na simulação de processos de metalurgia do pó e também o processo inverso – utilizar os conhecimentos da área no aperfeiçoamento dos compactadores virtuais, visando melhorar a homogeneidade e compacidade das amostras digitais. Esse diálogo pode ser muito frutífero para o desenvolvimento de metodologias de projeto e criação de novos materiais, provendo pesquisadores com ferramentas digitais de projeto e teste de materiais em níveis mesoscópicos e, ao mesmo tempo, criar pontes com técnicas consolidadas de produção, tais como a metalurgia do pó, de maneira a possibilitar a produção dos materiais digitais, mesmo aqueles mais difíceis de produzir por outras técnicas.

6.2 Tesselação Voronoi

Diversos estudos questionaram a representatividade de microestruturas digitais baseadas em diagramas Voronoi tradicionais, devido à superestimação do número de faces por grão, à subestimação da distribuição de tamanhos de grão (Benedetti & Aliabadi, 2013) e à geração de grãos com faces planas. A curvatura das faces diminui a energia livre do sistema, ocorrendo em grãos reais e também em poliedros ideais tais como o tetracaidecaedro de Kelvin. Entretanto, tesselações Voronoi são amplamente utilizadas em modelos de microestruturas artificiais, em razão da simplicidade de síntese e de suas características geométricas, as quais facilitam a medição de diversas propriedades e a condução de simulações numéricas (Benedetti & Aliabadi, 2013).

De fato, o algoritmo Voronoi original impôs diversos limites aos resultados e foi adotado apesar da existência de versões que prometem resultados superiores em situações específicas, tal como o Voronoi ponderado. Nas simulações conduzidas neste trabalho, o algoritmo Voronoi original utilizou apenas a posição da partícula e não seu tamanho, distorcendo a distribuição de tamanho de grão desejada. Em um primeiro momento, o algoritmo foi modificado visando obter maior correspondência entre a distribuição solicitada e a gerada. Benedetti & Aliabadi (2013) utilizaram uma versão denominada de Voronoi "Hardcore", que impõe um raio esférico a cada célula, permitindo obter células de tamanho mais controlado e contornando as distorções geradas pelo algoritmo original. No entanto, a curva de distribuição divulgada no trabalho dos autores ainda é muito próxima à normal (Gaussiana). Modificações baseadas nesse conceito geraram amostras porosas, indesejáveis a princípio, mas que podem ser exploradas em aplicações que demandem ou admitam porosidade.

Existe uma versão denominada '*weighted Voronoi*' ou Voronoi ponderado, não testada neste trabalho, que possibilita a criação de células de tamanho muito próximo às partículas que as geraram (Gellatly & Finney, 1982). No entanto, o algoritmo é muito mais complexo e funciona diretamente, sem

modificações, apenas em partículas esféricas. Devido a melhor adequação do algoritmo apenas nesse caso específico, decidiu-se explorar em maior profundidade as possibilidades do algoritmo mais simples. Quando as partículas são elipsoidais é necessário utilizar composições de partículas esféricas para representar a forma elipsoidal, aumentando substancialmente o número de células Voronoi geradas, bem como a complexidade e o tempo de execução do processo. Porém, o princípio básico deste artifício também pode ser utilizado para compensar as deficiências do diagrama Voronoi original, permitindo a obtenção direta de distribuições arbitrárias e obtendo grãos com tamanho quase idêntico ao da partícula, eliminando a necessidade de utilizar algoritmos alternativos e mais complexos. Em outras palavras, o diagrama original é a opção mais simples quando se deseja obter, simultaneamente, distribuições arbitrárias de tamanho e forma dos grãos.

A primeira estratégia para lidar com as limitações do diagrama Voronoi original foi manipular o tamanho e o arranjo inicial das partículas de forma a obter uma distribuição de tamanhos de grão mais próxima à solicitada. No entanto, após uma série de testes, não foi possível alterar substancialmente o tamanho da base da curva de distribuição.

A segunda estratégia foi utilizar aglomerados de partículas ao invés de partículas independentes. Foi possível constatar um efeito de amortecimento (FIG. 18, pag. 63) nos tamanhos de grão e consequente aumento da amplitude da curva de distribuição (FIG. 19b, pag. 63), tornando-a similar à observada em materiais reais, em pouco tempo de processamento. Essa técnica é inédita e pode alterar significativamente os padrões de distribuição gerados pela tesselação Voronoi convencional, estendendo sua utilização na área de ciência dos materiais. Após maior experimentação com outros padrões de aglomeração, vislumbra-se obter distribuições arbitrárias e mesmo artificiais, consideradas improváveis em razão de limitações tanto de natureza termodinâmica como dos processos de produção e processamento de materiais disponíveis, como é o caso das

distribuições multimodais (Berbenni *et al.*, 2007). Porém, devido à variabilidade do processo de simulação - o processo possui etapas manuais – ainda não é possível traçar correspondências precisas entre as condições iniciais e os resultados. Desta maneira, os potenciais dessa estratégia se revelarão apenas com a completa automatização do processo de empacotamento, tornando possível obter relações mais precisas e determinísticas entre os parâmetros iniciais e as distribuições obtidas.

Apesar dos potenciais da técnica dos aglomerados e das melhorias nos resultados, foi necessário utilizar os artifícios de divisão e soma de grãos para executar ajustes mais finos (ver FIG. 19, pag. 63 e FIG 20, pag. 66). Como discutido, esse artifício pode introduzir heterogeneidades ou anomalias na amostra. No entanto, em um estudo preliminar constatou-se a existência de aglomerados de grãos em microestruturas reais (FIG. 21, pag. 67). A análise de micrografias reais conduzida aqui sugere que os grãos maiores tendem a possuir aspecto de forma mais irregular ou mais distante do equiaxial e os grãos menores tendem a se concentrar. Existe grande diferença visual entre microestruturas compostas apenas por grãos convexos e as que também possuem grãos côncavos. A limitação da convexidade imposta pelo algoritmo Voronoi, considerando especialmente os grãos de maior dimensão, parece impor limites à variedade de perfis de distribuição atingível. Em outras palavras, para distribuições compostas, em sua maioria, de grãos convexos, existem restrições geométricas que limitam os tipos de curva de distribuição atingíveis. Apesar dos indícios, investigações mais profundas são necessárias para comprovar essas hipóteses, o que certamente traria mais valor aos métodos e artifícios utilizados.

Também existem questionamentos quanto à precisão das medições estereológicas, especialmente para parâmetros como a distribuição de tamanhos de grão (Exner, 2004), quando os grãos mais alongados tendem a não ser bem representados. Essa dúvida quanto à confiabilidade dos métodos de medição se estende naturalmente à suposta representatividade universal da curva log-normal,

dado que boa parte das amostras são medidas estereologicamente. Alguns autores (Donegan *et al.*, 2013) verificaram desvios em relação ao padrão log-normal, utilizando medições tridimensionais diretas. Essa discussão é essencial pois, tal como sugeriu Exner (1972), diversos trabalhos simplesmente aceitam o padrão log-normal. O problema é a insistência em ajustar as curvas de distribuição de amostras digitais a esse padrão, principalmente nos extremos da curva, correndo o risco de introduzir anomalias microestruturais (Donegan *et al.*, 2013). No entanto, Exner (1972) frisa que a curva deve ser usada apenas como referência devido à sua simplicidade e por aparentar ser o melhor modelo matemático disponível para representar distribuições espaciais de tamanho de grão. Por outro lado, nos trabalhos comparativos também deveriam ser melhor analisadas as repercussões microestruturais do desvio em relação a esse padrão, caso realmente seja universal. Essa análise deve compreender principalmente as faixas de tamanho de grão mais distantes da referência. Porém, as faixas representam conjuntos de grãos e duas curvas com faixas idênticas e mesmo perfil certamente possuem diferenças internas. Enfim, o que se sugere aqui é que comparações devem considerar diferenças de comportamento, dada a complexidade de se analisar adequadamente as diferenças topológicas, morfológicas e geométricas, em razão das diversas variáveis presentes nos métodos de medição e de agrupamento dos resultados.

Poder-se-ia argumentar que o método de simulação proposto não adiciona valor ao processo de síntese, devido à inutilidade do tamanho da partícula na fase de tesselação e à relação nebulosa entre as distribuições solicitadas e as obtidas. Porém, as posições centrais das partículas resultam do processo, sendo a variável que mais contribuiu para garantir a excelente correspondência geométrica entre os grãos gerados e as referências adotadas. Ou seja, os resultados demonstram que, apesar do tamanho dos grãos não corresponder diretamente ao das partículas, a topologia resultante do processo de simulação é representativa do ponto de vista microestrutural e derivada da

distribuição solicitada. Além disso, a avaliação do método de simulação proposto é etapa essencial para a continuidade do trabalho, fornecendo um método viável para o empacotamento e indicando outras possibilidades.

Outro ponto não estudado foi a questão da curvatura dos contornos de grão, introduzida apenas como um efeito em alguns cortes. É possível introduzir esse efeito nos grãos tridimensionais por meio da tesselação e manipulação das faces, de modo a alterar os parâmetros relacionados à energia livre da microestrutura. A somatória dos desvios de curvatura dos grãos em uma amostra, em relação ao ângulo de equilíbrio, pode refletir o grau de desvio energético do sistema, comparado a uma condição ideal de menor energia, como a de uma amostra composta somente de tetracaidecaedros. Pretende-se abordar essa hipótese em trabalhos futuros.

6.3 Visualização

O usuário de um sistema de visualização científica define uma sequência linear de filtros de dados de forma a obter imagens ou animações, utilizadas no apoio de processos decisórios. No aplicativo Paraview essa sequência é determinada na interface intitulada '*pipeline* de visualização', permitindo ao usuário encadear as funcionalidades oferecidas pelo aplicativo, principalmente os filtros de dados, resultando em imagens ou animações (Moreland, 2013). Essa metodologia impõe barreiras à visualização em tempo real. O aplicativo, portanto, não se mostrou apropriado para aplicações interativas. Na prática da visualização científica a manipulação dos modelos é considerada apenas uma etapa para encontrar os pontos de vista desejados para, na sequência, realizar a renderização de imagens estáticas. Mesmo visualizações dinâmicas são comumente planejadas e pré processadas, gerando vídeos. De qualquer maneira, a visualização científica interativa não adota o paradigma do hiper-realismo visual. Pelo contrário, tem foco na precisão dos dados e na extração de informação relevante e estruturada, adotando representações visuais simbólicas (Frieze *et al.*, 2008). No entanto, apesar

desta limitação, o Paraview permite ao usuário realizar ajustes de qualidade de visualização, enquanto o uso de técnicas de LOD permite a navegação interativa fluida, mesmo em modelos grandes ou de alta resolução. A maior limitação está, de fato, na ausência de funcionalidades interativas que permitam explorar o interior dos modelos em tempo real, seja adotando cortes dinâmicos, seja criando destaques visuais ou isolando objetos de interesse.

Por outro lado, a extração de seções bidimensionais mostrou-se simples, apesar da ausência de um dos filtros em versões recentes do aplicativo. A análise microestrutural, como discutido anteriormente, utiliza diversos métodos estereológicos que necessitam de imagens bidimensionais (Underwood, 1970). Os aplicativos de análise de imagem utilizam essas imagens diretamente ou processam os dados para a retirada de ruídos (Pinto, 1996). No caso em questão, as imagens extraídas das amostras digitais são nítidas e livres de ruídos, sendo facilmente utilizáveis nos aplicativos de análise microestrutural, exigindo, em alguns casos, um processamento preliminar para corrigir as variações de cor dos contornos de grão (FIG. 28, pag. 73), como discutido no item 5.2.2. Desta maneira, é possível utilizar os métodos clássicos de caracterização de materiais nos modelos virtuais, possibilitando uma série de trabalhos comparativos nas áreas de simulação e síntese microestrutural e metalografia quantitativa. O processamento dos cortes também pode adicionar outros efeitos, que resultem num aperfeiçoamento do realismo visual em aplicações didáticas.

A ausência de funcionalidades interativas avançadas no Paraview motivou a investigação deste aspecto em outro aplicativo, o Unity 3D. Os testes ainda não exploraram de maneira integral o conceito das múltiplas escalas - o intuito foi justamente conhecer os desafios de implementação inerentes a essa abordagem.

O fator que determina o tamanho do objeto na tela é o maior lado de seu *bounding box*. Esse parâmetro não se mostrou representativo em todas as situações, porém se mostrou suficiente, simples e bastante prático para um

protótipo. Como a quantidade de dados em modelos multiescalares tende a ser muito maior, outras funcionalidades devem ser implementadas no protótipo para facilitar a visualização de todos os objetos da tela. Para ilustrar isso, caso todos os objetos da cena atual fossem compostos por muitos objetos menores, em outra escala, teríamos a todo momento uma profusão de ícones na tela, o que atrapalharia a visualização do todo, problema previsto por McFarlane *et al.* (2008). Neste caso, bastaria uma indicação da presença de um grande grupo de objetos menores dentro de um objeto maior, para que o usuário soubesse da existência de outra escala. Uma alternativa seria utilizar um menu de navegação composto por uma árvore hierárquica de escalas, que pode ser gerada automaticamente por alguns métodos (Gottschalk *et al.*, 1996). As soluções técnicas são vastas e indicadas na literatura, porém o protótipo implementou apenas algumas funções básicas de visualização.

Finalmente, é necessário adotar um sistema de particionamento espacial para cenas com mais de 6000 objetos, de forma a manter um bom desempenho, pois cada objeto, mesmo fora do campo de visão, demanda um processamento mínimo. Parte substancial do código é executado mais de 60 vezes por segundo, em diversos objetos. Existem métodos no Unity 3D que permitem a execução de código em intervalos fixos de tempo, o que pode reduzir bastante a demanda de processamento para todos os processos que não necessitam de atualização em tempo real. Neste caso, é possível reduzir esse número para quatro ou mesmo 1 execução por segundo, o que representa substancial redução de demanda de processamento, entre 15 e 60 vezes para esses processos.

Podemos dizer que, em uma primeira análise, a utilização de dois aplicativos distintos levaria a uma dificuldade futura de integração. No entanto, o originalmente proposto neste trabalho foi executar testes de conceito para informar decisões técnicas, metodológicas e tecnológicas, o que foi plenamente possível. Por outro lado, os aplicativos utilizados, não apenas em visualização (Paraview), mas também na síntese dos modelos (Blender), possuem interfaces de

programação na mesma linguagem (Python) e dispõem de modos de operação alternativos, que permitem o uso de suas funcionalidades prescindindo de suas interfaces gráficas, facilitando a criação de novos aplicativos a partir da combinação deles, sem necessidade de recompilação nem de junção de código. A independência entre os aplicativos também facilita o uso de múltiplos processadores ou processadores com múltiplos núcleos. Nesse sentido, o aplicativo Blender 3D pode ser utilizado como centralizador, pois possui um console Python integrado e permite a criação das interfaces gráficas de maneira simplificada, além de ser, convenientemente, o primeiro aplicativo no método adotado. O console Python pode ser utilizado como centralizador de comandos para todos os outros aplicativos. Todos esses fatores são extremamente positivos considerando um dos principais objetivos do trabalho - criar uma base de software simples de utilizar, que não exija conhecimento avançado de programação.

7 CONCLUSÕES

Em seu conjunto, o trabalho representa um referencial prático e integrado para pesquisadores interessados no desenvolvimento de software, mas limitados em recursos ou em conhecimentos de programação, indicando tecnologias prontamente disponíveis e tecnicamente mais acessíveis, além de métodos simplificados para a solução dos principais problemas. Todos os aplicativos e códigos utilizados são de uso livre para fins não comerciais e boa parte é *open source*, permitindo a reutilização de seu código em novos programas. Além disso, são todos compatíveis com a linguagem Python - amigável a iniciantes em programação e consideravelmente completa - permitindo a utilização conjunta de suas funcionalidades e agilizando a futura integração das funcionalidades criadas.

7.1 Síntese

Na frente de síntese microestrutural foi concebido um método simples, mas capaz de produzir com agilidade modelos de microestruturas constituídos por cerca de 1000 grãos convexos. O método de empacotamento por simulação física se mostrou uma opção eficaz e de rápida execução, considerando a facilidade de implementação e a flexibilidade, requisito essencial aos interessados no desenvolvimento de software, quando as ferramentas disponíveis não são satisfatórias ou são complexas de usar e modificar. O diagrama Voronoi original se mostrou limitado na obtenção de curvas de distribuição arbitrárias, mas ainda assim permitiu atingir aproximadamente uma distribuição log-normal, além de ser mais simples de entender e de implementar. Como a síntese de grãos de aspecto livre em amostras com distribuição de tamanhos de grão arbitrárias demanda maior número de células Voronoi, para qualquer diagrama, o diagrama original de mantém como a melhor opção.

Os modelos gerados possuem fidelidade microestrutural aceitável, de acordo com parâmetros geométricos fornecidos pela literatura e de comparações estatísticas das distribuições. Os números obtidos coincidiram consideravelmente com as referências e, apesar das variações no processo de síntese, as características geométricas foram mantidas em todas as amostras. No caso da distribuição de tamanho de grão, procurou-se obter a mesma distribuição do ferro, tal como caracterizado por Zhang *et al.* (2004). Foi possível obter uma curva muito similar à referência, de acordo com o teste qui-quadrado. Conforme a interpretação de Exner (1988), a probabilidade de coincidência das distribuições variou entre 90% e 99%, demonstrando que o processo de síntese concebido neste trabalho é capaz de criar modelos digitais microestruturais válidos, dotados das principais características esperadas para microestruturas reais.

A metodologia de síntese permitiu controlar quantitativamente parâmetros básicos como o tamanho médio de grão, o número total de grãos, a forma e tamanho da amostra, além de possibilitar a introdução qualitativa de gradientes de tamanho de grão, porosidade e concentrações locais. A definição da distribuição de tamanhos dos grãos da amostra é feita de maneira aproximada, partindo de configurações predefinidas que permitem a geração de curvas normais ou aproximadamente log-normais.

7.2 Visualização

Os testes de visualização indicaram requisitos fundamentais e direções práticas mais precisas voltadas à visualização de modelos digitais de microestruturas. Os aplicativos utilizados se mostraram suficientes, porém nenhum deles reúne todas as qualidades desejáveis. A plataforma Unity 3D possui grande capacidade interativa e de renderização em tempo real, sendo otimizada para produtividade de desenvolvimento e para operar em *hardware* de baixo poder de processamento. Já o Paraview é um aplicativo de visualização científica e não possui capacidades interativas suficientes, sendo concebido para a criação de

pipelines estáticas de visualização. No entanto é um aplicativo matematicamente robusto, pode operar em paralelo, possui filtros otimizados de processamento de dados e diversos mecanismos para lidar com grandes quantidades de dados.

A abordagem multiescalar de visualização se mostrou a mais adequada, tanto à eficiente apreensão de informação de modelos microestruturais como para lidar com as limitações computacionais de tais modelos. As características desejáveis desse sistema são: suporte a periféricos de visualização tridimensional (monitores 3D, óculos ou capacetes de realidade virtual) e de interação; funcionalidades básicas de interação em câmera de primeira e terceira pessoa; funcionalidades para exploração geométrica do interior dos modelos, tais como cortes dinâmicos e transparência seletiva; métodos de contextualização e posicionamento no ambiente virtual; artifícios visuais (ícones) e/ou interfaces (árvores hierárquicas) para indicar a presença e controlar configurações de visibilidade de objetos em outras escalas; artifícios gráficos para indicar a natureza de cada objeto, além da presença e intensidade de outras características relevantes; suporte a representações alternativas, tanto simplificadas, como detalhadas, utilizadas de acordo com o tamanho do objeto em relação ao campo de visualização.

7.3 Trabalhos futuros

A base tecnológica desenvolvida neste trabalho servirá à futura implementação de um sistema integrado de síntese e visualização. O sistema de síntese deve ser aprimorado para permitir o controle da distribuição de aspecto dos grãos, além de suportar a geração de elementos de outras fases, tais como fibras, partículas e poros. O sistema de visualização também poderá gerar elementos procedurais em outras escalas, como a estrutura cristalina e seus defeitos e os átomos. Finalmente, pretende-se criar uma interface amigável baseada em princípios cognitivos, a fim de potencializar o aprendizado.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. AISH, R. Computer-aided design software to augment the creation of form. In: PENZ, F. (Ed.). **Comput. archit.** London: Addison-Wesley Longman, 1992.
2. AISH, R.; SHEA, K.; GOURTOVAIA, M. Towards integrated performance-driven generative design tools. **Automat. Constr.**, v. 14, n. 2, p. 253– 264, 2005.
3. BAARTMANS, B. G.; SORBY, S.A. Making Connections: Spatial Skills and Engineering Drawings. **Math. Teach.** , v. 89, n. 4, p. 348-353, 1996.
4. BEN-CHAIM, D.; LAPPAN, G.; HOUANG, R.T. Visualizing rectangular solids made of small cubes: Analyzing and effecting students' performance. **Educ. Stud. Math.**, v. 16, n. 4, p. 389-409, 1985.
5. BENEDETTI, I; ALIABADI, M.H.; A three-dimensional grain boundary formulation for microstructural modeling of polycrystalline materials. **Comp. Mater. Sci.**, v. 67, p. 249-260, 2013.
6. BERBENNI, S; FAVIER, V.; BERVEILLER, M. Impact of the grain size distribution on the yield stress of heterogeneous materials. **Int. J. Plasticity**, v. 23, p. 114–142, 2007.
7. BERDICHEVSKY, V. L. Universal grain size distribution, most chaotic microstructures and tessellation condition. **Int. J. Eng. Sci.**, v. 57, p. 24–35, 2012.
8. BERNARD, R.M.; ABRAMI, P.C.; LOU, Y.; BOROKHOVSKI, E.; WADE, A.; WOZNEY, L.; WALLET, P.A.; FISET, M.; HUANG, B. How Does Distance Education Compare to Classroom Instruction? A Meta-analysis of the Empirical Literature. **Rev. Educ. Res.**, v. 74, n. 3, p. 379-439 2004.
9. Blender (2012) <<http://www.blender.org/>>
10. BRANSFORD, J.; BROWN, A.; COCKING, R. **How people learn: Brain, Mind, Experience, and School**. Washington, DC: National Academy Press, 2000.
11. BRONOWSKI, J. **Science and human values**. New York: Harper Collins, 1990.
12. BRUER, J. **Schools for thought**. Cambridge: MIT Press, 1993.
13. BYRNE, C. M. **Water on tap: the use of virtual reality as an educational tool**. 1996. Tese (Doutorado) - University of Washington, Washington.

14. CHAN, M. S.; BLACK, J. B. **Learning Newtonian mechanics with an animation game:** The role of presentation format on mental model acquisition. In: ANNUAL MEETING OF THE AMERICAN EDUCATIONAL RESEARCH ASSOCIATION, 2006, San Francisco. Disponível em: <<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.169.3864&rep=rep1&type=pdf>>. Acesso em: 22 Out. 2013.
15. CHANLIN, L. (1998). Animation to teach students of different knowledge levels. **J. Instr. Psychol.**, v. 25, n. 3, p. 166-175, 1998.
16. CHAWLA, N.; SIDHU, R. S.; GANESH, V. V. Three-dimensional visualization and microstructure-based modeling of deformation in particle-reinforced composites, **Acta Mater.**, v. 54, n. 6, p. 1541–1548, 2006.
17. CLAPWORTHY, G.; BESSIS, N.; MA, X.; McFARLANE, N. Multiscale Spatiotemporal visualisation: development of an open-source software library for the interactive visualisation of multiscale biomedical data - Report on best practice. 2012. Disponível em <https://www.biomedtown.org/biomed_town/MSV/reception/repository/MSV_D41_final.pdf>. Acesso em: 20 Set. 2013.
18. CLARK, R.E.; FELDON, D.F. Five Common but Questionable Principles of Multimedia Learning. In: MAYER, R. (Ed.). **Cambridge handbook of multimedia learning**. Cambridge: Cambridge University Press, 2005, p. 97-116.
19. DALE, E. **Audio-visual methods in teaching**. New York: Dryden, 1954.
20. DIXON, J.K. Limited English proficiency and spatial visualization in middle school students' construction of the concepts of reflection and rotation. **Biling. Res. J.**, v. 19, n. 2, p. 221–247, 1995.
21. DONEGAN, S.P.; TUCKER, J.C.; ROLLETT, A.D. ; BARMAK, K.; GROEBER, B.M. Extreme value analysis of tail departure from log-normality in experimental and simulated grain size distributions. **Acta Mater.** v. 61, p. 5592-5604, 2013.
22. DONEV, A.; STILLINGER, F.H.; CHAIKIN, P.M.; TORQUATO, S. Unusually Dense Crystal Packings of Ellipsoids. **Phys. Rev. Lett.** v. 92, n. 25, p. 255506-1 – 255506-4, 2004.
23. EXNER, H. E. Analysis of Grain-and Particle-Size Distributions in Metallic Materials. **Int. Mater. Rev.**, v. 17, p. 25-42, 1972.

24. EXNER, H. E.; HOUGARDY, H.P. **Quantitative image analysis of microstructures**: A practical guide to techniques, instrumentation and assessment of materials. Oberursel: DGM Informationsgesellschaft Verlag, 1988.
25. FAIRCHILD, K. M. Information Management Using Virtual Reality-Based Visualizations. In: WEXELBLAT, A. (Ed.). **Virtual reality: Applications and explorations**. San Diego: Academic Press Professional, 1993, p. 45–74.
26. FAIRCHILD, K. M.; POLTROCK, S. E.; FURNAS, G. W. SemNet: Three-dimensional graphic representation of large knowledge bases. In: GUINDON, R. (Ed.). **Cognitive science and its applications for human-computer interaction**. Hillsdale: Lawrence Erlbaum Associates, 1988, p. 201–233.
27. FOLEY, J.; RIBARSKY, B. Next-generation Data Visualization Tools, in Scientific Visualization. In: ROSENBLUM, L.; EARNSHAW, R.A. ; ENCARNACAO, J.; HAGEN, H.; KAUFMAN, A.; KLIMENKO, S.; NIELSON, G.; POST, F.; THALMANN, D. (Eds.). **Scientific visualization - Advances and challenges**. London: Academic Press, 1994.
28. FRIESE, K.; HERRLICH, M.; WOLTER, F. Using Game Engines for Visualization in Scientific Applications. In: CIANCARINI, P; NAKATSU, R; RAUTERBERG, M; ROCCETTI, M. (Ed.). **New frontiers for entertainment computing**. New York: Springer, 2008. v. 279, p. 11-22.
29. FURNESS, T.A.; WINN, W.; YU, R. **The impact of three dimensional immersive VE on modern pedagogy: Global change, VR and learning**. 1998. Disponível em <<http://www.hitl.washington.edu/publications/r-97-32/>> . Acesso em: 20 Abr. 2011.
30. GELLATLY, B.J.; FINNEY, J.L. Characterisation Of Models Of Multicomponent Amorphous Metals: The Radical Alternative To The Voronoi Polyhedron. **J. Non-Cryst. Solids**, v. 50, p. 313-329, 1982.
31. GERMAN, R.M. **Sintering theory and practice**. New York: Wiley, 1996.
32. GERSHON, N. From perception to visualization. In: ROSENBLUM, L.; EARNSHAW, R.A. ; ENCARNACAO, J.; HAGEN, H.; KAUFMAN, A.; KLIMENKO, S.; NIELSON, G.; POST, F.; THALMANN, D. (Eds.). **Scientific visualization - Advances and challenges**. London: Academic Press, 1994.
33. GHOSH, S.; BHANDARI, Y.; GROEBER, M. CAD-based reconstruction of 3D polycrystalline alloy microstructures from FIB generated serial sections. **Comput. Aided Design**, v. 40, n. 3, p. 293-310, 2008.

34. GOTTSCHALK, S.; LIN, M.C.; MANOCHA, D. OBBTree: a hierarchical structure for rapid interference detection. In: ANNUAL CONFERENCE ON COMPUTER GRAPHICS AND INTERACTIVE TECHNIQUES, 4-9 Ago, 1996, New Orleans. ***Proceedings of the 23rd annual conference on Computer graphics and interactive techniques***. New York: ACM Press, 1996. p. 171-180.
35. GUSEV, A. A. Representative volume element size for elastic composites: a numerical study, ***J. Mech. Phys. Solids***, v. 45, n. 9, 1449–1459, 1997.
36. HANSEN, P.F. ***Science of construction materials***. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.
37. HAYS, T.A. Spatial abilities and the effects of computer animation on short-term and long-term memory comprehension. ***J. Educ. Comput. Res.***, v. 14, n. 2, p. 139-155, 1996.
38. HOFFMANN, M.; VANECEK Jr., G. Fundamental Techniques for Geometric and Solid Modeling. In: ***Manufacturing and automation systems: techniques and technologies***. San Diego: Academic Press, 1991. v. 48, n. 4, p. 101-167.
39. HSIAO, J.W.D. ***Computer Support for Collaborative Learning***. 1999. Disponível em:
<<http://www.edb.utexas.edu/csclstudent/Dhsiao/theories.html#construct>>. Acesso em 20 Abr. 2011.
40. HUK, T. Who benefits from learning with 3D models: the case of spatial ability. ***J. Comput. Assist. Lear.***, v. 22, n. 6, p. 392–404, 2006.
41. IBRAHIM, R. N.; BOARDMAN, S.J.; ABACHI, H. Development of an Algorithm for Functional Modelling of Parametric System Design. In: 26th INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTERS & INDUSTRIAL ENGINEERING, 15-17 Dez. ,1999, Melbourne. ***Proceedings of The 26th International Conference on Computers & Industrial Engineering***. Melbourne, 1999, p. 147-152.
42. INTERAGENCY GROUP ON ADVANCED MATERIALS. ***Materials genome initiative for global competitiveness***. Washington, D.C.: National Science and Technology Council, 2011.
43. JOY, K.I. Massive data visualization: a survey. In: MÖLLER, T.; HAMANN, B.; RUSSELL, R. D. (Eds.).***Mathematical foundations of scientific visualization, computer graphics, and massive data exploration***. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009. p. 285-302.

44. KEEHNER, M.; MONTELLO, D.R.; HEGARTY, M.; COHEN, C. (2004) Effects of interactivity and spatial ability on the comprehension of spatial relations in a 3D computer visualization. In: 26TH ANNUAL CONFERENCE OF THE COGNITIVE SCIENCE SOCIETY, 5-7 Aug., 2004, Chicago. **Proceedings of the 26th Annual Conference of the Cognitive Science Society**. Cognitive Science Society: Mahwah, 2004, p. 1576.
45. KRILL, C.E. III; CHEN, L.Q. *Computer simulation of 3-D grain growth using a phasefield model*. **Acta Mater.**, v. 50, n. 12, p. 3059–3075, 2002.
46. KUMAR, S.; KURTZ, S.K.; ARGWALA, V.K. Microstress distribution within polycrystalline aggregate. **Acta Mech.**, v. 114, n. 1-4, p. 203-216, 1996.
47. LORD T. (1987) A look at spatial abilities in undergraduate women in science majors. **J. Res. Sci. Teach.**, v. 24, n. 8, p. 757–767, 1987
48. MAIZAM, A. **Spatial visualization ability and problem solving in civil engineering**. 2000. Tese (Doutorado) - University of Surrey, Surrey.
49. MATURANA, H.R.; VARELA, F.J. **A árvore do conhecimento: As bases biológicas da compreensão humana**. São Paulo: Pala Athenas, 2001.
50. MCCORMICK, B.H.; DEFANTI, T.A.; BROWN, M.D. Visualization in Scientific Computing. **Comput. Graphics**, v. 21, n. 6, 1987.
51. McCRAE, J.; GLUECK, M.; KHAN, A.; GROSSMAN, T.; SINGH, K. Exploring the design space of multiscale 3D orientation. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED VISUAL INTERFACES, 25-29 Mai., 2010, Roma. **Proceedings of the International Conference on Advanced Visual Interfaces**. New York: ACM Press, 2010, p. 81-88.
52. McCRAE, J.; MORDATCH, I.; GLUECK, M.; KHAN, A. Multiscale 3D navigation. In: SYMPOSIUM ON INTERACTIVE 3D GRAPHICS, 27 Feb - 1 Mar, 2009, Boston. **Proceedings of the Symposium on Interactive 3D Graphics, I3D'09**. New York: ACM, 2009. p. 7-14.
53. McFARLANE, N.; CLAPWORTHY, G.; AGRAWAL, A.; VICECONTI, M.; TADDEI, F.; SCHILEO, E.; BARUFFALDI, F. 3D multiscale visualisation for medical datasets. In: 5TH IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON BIOMEDICAL VISUALIZATION, 8-12 Jul, 2008, London. **Proceedings of the 5th IEEE International Conference on Biomedical Visualization**. IEEE, 2008. p. 47- 52.

54. McGEE, M. G. Human spatial abilities: Psychometric studies and environmental, genetic, hormonal, and neurological influences. **Psychol. Bull.** , v. 86, n. 5, p. 889-918, 1979.
55. MISHNAEVSKY JR, L. **Computational mesomechanics of composites:** Numerical analysis of the effect of microstructures of composites on their strength and damage resistance. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd, 2007.
56. MISHNAEVSKY JR, L. **Numerical experiments in the mesomechanics of materials.** 2005. Tese (Doutorado) - TU Darmstadt, Darmstadt.
57. MORELAND, K. The ParaView Tutorial - Version 3.98. Disponível em <http://www.paraview.org/Wiki/The_ParaView_Tutorial>. Acesso em: 22 Out. 2013.
58. OSTOJA-STARZEWSKI, M. Lattice models in micromechanics, **Appl. Mech. Rev.**, v. 55, n. 1, p. 35-60, 2002.
59. PANIN, V. (Ed.) **Physical Mesomechanics of Heterogeneous Media and Computer-Aided Design of Materials.** Cambridge: Cambridge International Science Publishing, 1998.
60. Paraview (2013) <<http://www.paraview.org/>>
61. PARK, O.C.; GITTELMAN, S.S. Selective use of animation and feedback in computer-based instruction. **Educ. Tech. Res.**, v. 40, n. 4, p. 27-38, 1992.
62. PELLEGRINO, J. W.; ALDERTON, D. L.; SHUTE, V. J. Understanding Spatial Ability. **Educ. Psychol.** , v. 19, n. 3, p. 239-253, 1984.
63. PETRIDIS, P.; DUNWELL, I.; PANZOLI, D.; de FREITAS, S. Game Engines Selection Framework for High-Fidelity Serious Applications. In: 2TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON GAMES AND VIRTUAL WORLDS FOR SERIOUS APPLICATIONS (VS-GAMES), 25-26 Mar., 2010, Braga. **Proceedings of the 2th International Conference on Games and Virtual Worlds for Serious Applications.** IEEE, 2010. p.27-34.
64. PINTO, L. C. M. **Quantikov: um analisador microstructural para o ambiente Windows.** 1996. Tese (Doutorado) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo.
65. RAEISINIA, B. **Modelling the effect of grain size distribution on the mechanical response of metals.** 2008. Tese (Doutorado) – University Of British Columbia, Vancouver.
66. REQUICHA, A. G.; ROSSIGNAC, J. R. Solid modeling and beyond. **IEEE Comput. Graph.**, v. 12, n. 5, p. 31-44, 1992.

67. REQUICHA, A. G.; VOELCKER H. B. Solid modeling: A historical summary and contemporary assessment. **IEEE Comput. Graph.**, v. 2, n. 2, p. 9–24, 1982.
68. RESTA, P.(ed.) Information and Communication Technologies In Teacher Education: A planning Guide. Disponível em: <http://unesdoc.unesco.org/images/0012/001295 /129533e.pdf>. Acesso em: 22 Out. 2013.
69. ROBERTSON, G. G.; MACKINLAY, J. D.; CARD, S. K. Cone trees: Animated 3D visualizations of hierarchical information. In: ACM CONF. HUMAN FACTORS IN COMPUTING SYSTEMS, April 27-May 2, 1991, Chicago. **Proceedings of the ACM Conf. Human Factors in Computing Systems**. New York: ACM Press, 1991, p. 189–194.
70. ROMANOVA, V. A.; SOPPA, E.; SCHMAUDER, S.; BALOKHONOV, R. R. Mesomechanical analysis of the elasto-plastic behavior of a 3D composite-structure under tension. **Comput. Mech.**, v. 36, n. 6, p. 475–483, 2005.
71. ROTH, W.M.; BOWEN, G.M. Why Students May not Learn to Interpret Scientific Inscriptions. **Res. Sci. Educ.**, v. 32, n. 3, p. 303–327, 2002.
72. SACKS, R.; EASTMAN, C. M.; LEE, G. Parametric 3D modeling in building construction with examples from precast concrete. **Automat. Constr.**, v. 13, n. 3, p. 291– 312, 2004.
73. SCHOENFELD, A. H. What's all the fuss about metacognition? In: SCHOENFELD, A. H. (Ed.). **Cognitive science and mathematics education**. Hillsdale, N.J.: Lawrence Erlbaum Associates, 1987, p.189-215.
74. SCHROEDER W. J., AVILA, L. S., HOFFMAN, W. Visualizing with VTK: a tutorial. **IEEE Comput. Graph.**, v. 20, n. 5, p. 20-27, 2000.
75. SHAN, Z.; GOKHALE, A. M. Micromechanics of complex three-dimensional microstructures. **Acta Mater.**, v. 49, n. 11, p. 2001–2015, 2001.
76. SHEPARD, A. Case for computer-based multimedia in adult literacy classrooms. **Encyclopedia of Educational Technology**, San Diego, 2003. Disponível em <http://www.etc.edu.cn/eet/articles/adultliteracy/index.htm>. Acesso em: 22 Out. 2013.
77. SIIRIÄ, S.; YLIRUUSI, J. Particle packing simulations based on Newtonian mechanics. **Powder Technol.**, v. 174, n. 3, p. 82-92, 2007.

78. SINTAY, S. D. **Statistical microstructure generation and 3D microstructure geometry extraction**. 2010. Tese (Doutorado) – Carnegie Mellon University, Pittsburgh, 2010.
79. SMAIL, B. Spatial visualization skills and technical drafts education. **Educ. Res.**, v. 25, n. 3, p. 230-1, 1983.
80. SMITH, I. M. **Spatial ability: Its educational and social significance**. San Diego, C.A.: R. R. Knapp, 1964.
81. SOBOYEJO, W. **Mechanical properties of engineered materials**. Switzerland: Marcel Dekker, 2003.
82. COOK, K.A.; THOMAS, J.J. (Ed.). **Illuminating the path: The R&D agenda for visual analytics**. Los Alamitos: IEEE Computer Society, 2005.
83. TORRACA, G. **Lectures on materials science for architectural conservation**. Los Angeles, CA: The Getty Conservation Institute, 2009.
84. UNDERWOOD, E. E. **Quantitative stereology**. Nova Iorque: Addison-Wesley Pub. Co., 1970.
85. UNESCO. World Education Report. Disponível em: <<http://www.unesco.org/education/information/wer/PDFeng/wholewer98.PDF>>. Acesso em: 20 Abr. 2011.
86. Unity 3D (2012) <<http://unity3d.com/>>
87. van VLACK, L.H. **Elements of materials science**. Massachusetts : Addison Wesley, 1959.
88. VTK (2013). <<http://www.vtk.org/>>
89. WARE, C.; FRANCK, G. Viewing a graph in a virtual reality display is three times as good as a 2D diagram. In: IEEE CONFERENCE ON VISUAL LANGUAGES, 4-7 Oct., 1994, St. Louis. **Proceedings of the IEEE Conference On Visual Languages**. IEEE, 1994, p. 182-183.
90. WATT, D. S. **Building pathology: Principles and practice**. Malden: Blackwell Publishing, 2008.
91. WOLFF, R. S.; YAEGER, L. **Visualization of natural phenomena**. New York: Springer, 1993.
92. ZHANG, C.; SUZUKI, A.; ISHIMARU, T.; ENOMOTO, M. Characterization of Three-Dimensional Grain Structure in Polycrystalline Iron by Serial Sectioning. **Metall. Mater. Trans. A**, v. 35, n. 7, 1927-1933, 2004.