

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS/ FÍSICA**

MARIO AUGUSTO CAMARGO

**CARACTERIZAÇÃO MICROMORFOLÓGICA E SIMULAÇÃO
COMPUTACIONAL DAS PROPRIEDADES DE RETENÇÃO DE MEIOS
POROSOS VIA ANÁLISE DE IMAGENS OBTIDAS PELA TÉCNICA DA
MICROTOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA 3D**

PONTA GROSSA

2024

MARIO AUGUSTO CAMARGO

**CARACTERIZAÇÃO MICROMORFOLÓGICA E SIMULAÇÃO
COMPUTACIONAL DAS PROPRIEDADES DE RETENÇÃO DE MEIOS
POROSOS VIA ANÁLISE DE IMAGENS OBTIDAS PELA TÉCNICA DA
MICROTOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA 3D**

Tese apresentada como requisito parcial à
obtenção do título de Doutor em Ciências, área de
concentração Física, na Universidade Estadual de
Ponta Grossa.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Fernando Pires

PONTA GROSSA

2024

C172 Camargo, Mario Augusto

Caracterização micromorfológica e simulação computacional das propriedades de retenção de meios porosos via análise de imagens obtidas pela técnica da microtomografia computadorizada 3D / Mario Augusto Camargo. Ponta Grossa, 2024.

138 f.

Tese (Doutorado em Ciências - Área de Concentração: Física), Universidade Estadual de Ponta Grossa.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Fernando Pires.

1. Umedecimento - secamento. 2. Drenagem - embebição. 3. Curva - retenção. 4. Método - Young-Laplace (ylm). 5. Abertura morfológica. I. Pires, Luiz Fernando. II. Universidade Estadual de Ponta Grossa. Física. III.T.

CDD: 530

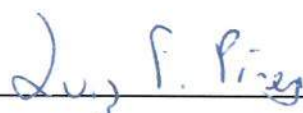
TERMO DE APROVAÇÃO

MARIO AUGUSTO CAMARGO

CARACTERIZAÇÃO MICROMORFOLÓGICA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DAS PROPRIEDADES DE RETENÇÃO DE MEIOS POROSOS VIA ANÁLISE DE IMAGENS OBTIDAS PELA TÉCNICA DA MICROTOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA 3D

Tese aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Ciências, no Programa de Pós-Graduação em Ciências, Área de Concentração Física Ambiental, da Universidade Estadual de Ponta Grossa, pela seguinte banca examinadora:

Orientador-


Dr. Luiz Fernando Pires – UEPG – Presidente

Dr. Paulo Cesar Facin – UEPG – Titular

Documento assinado digitalmente



THAIS NASCIMENTO PESSOA
Data: 24/06/2024 19:40:10-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Dr(a). Thais Nascimento Pessoa – LNLS/CNPEM – Titular


Dr. Ricardo de Oliveira Bordonal – LNBR/CNPEM – Titular


Dr. Paulo Leonel Libardi – USP/ESALQ – Titular

Ponta Grossa, 24 de junho de 2024.

Para Itamara Sandra de Camargo,
Karine Marcondes da Cunha e
Helena Maria da Cunha Camargo.

AGRADECIMENTOS

A meu orientador, professor Dr. Luiz Fernando Pires, pelas discussões, contribuições e por toda a orientação ao longo do desenvolvimento desta tese. Ao Instituto Federal de Santa Catarina (IFSC) pela concessão do afastamento para capacitação, que viabilizou todo este trabalho. Finalmente, agradeço a todas as pessoas que de forma direta ou indireta contribuíram para a conclusão desta tese.

Um passo à frente e você não está mais no mesmo lugar.

(Chico Science)

RESUMO

A utilização da técnica de microtomografia computadorizada de raios X (μ CT) 3D e análise de imagem podem contribuir para a caracterização da estrutura de meios porosos e fornecer informações para simulação computacional de propriedades de retenção de água em meios porosos? Para responder a este problema de pesquisa, este estudo propôs três capítulos (artigos) em que, em cada um deles, são abordados partes do problema de pesquisa e ao final, a inter-relação entre os resultados possibilitou verificar a robustez da hipótese de que a técnica da μ CT 3D e análise de imagens seriam adequadas para a caracterização da estrutura de meios porosos e capazes de fornecer informações para a simulação computacional de propriedades de retenção de água em meios porosos. Desta forma, no capítulo 2 utilizando a análise de imagem 3D, caracterizou-se a estrutura de meios porosos obtidas pela técnica da μ CT 3D e suas relações com as características de retenção de água através da curva de retenção. Nos capítulos 3 e 4, apresentou-se o método de Young-Laplace (YLM) e simulou-se a curva de retenção a partir das imagens 3D dos meios porosos utilizando o YLM. Uma das vantagens em acessar informações de retenção de meios porosos pela associação das técnicas de análise de imagem e simulação computacional é em termos de tempo de aquisição, visto a morosidade para a obtenção de uma curva de retenção em laboratório. Do ponto de vista da simulação computacional, embora existam outros métodos, o YLM se apresenta como uma opção leve (em termos de carga computacional), acessível (código sob licença GNU GPLv3), e que encontra na geometria de entrada (estrutura do meio poroso) as informações necessárias para que as distribuições de equilíbrio entre as fases (sólida, líquida e gasosa) possam ser determinadas.

Palavras-chave: Umedecimento e secamento. Drenagem e embebição. Curva de retenção. Método de Young-Laplace (YLM). Abertura morfológica.

ABSTRACT

Can the use of 3D X-ray micro-computed tomography (μ CT) and image analysis contribute to characterizing the structure of porous media and provide information for computer simulation of water retention properties in porous media? To answer this research problem, this study proposed three chapters (papers) in which, in each of them, parts of the research problem are addressed and, in the end, the interrelationship between the results made it possible to verify the robustness of the hypothesis that the 3D μ CT technique and image analysis would be suitable for characterizing the structure of porous media and capable of providing information for the computer simulation of water retention properties in porous media. In this way, Chapter 2, using 3D image analysis, characterized the structure of porous media obtained by the 3D μ CT technique and its relationship with water retention characteristics through the retention curve. Chapters 3 and 4 presented the Young-Laplace method (YLM) and simulated the retention curve from 3D images of porous media using the YLM. One of the advantages of accessing retention information for porous media by combining image analysis and computer simulation techniques is in terms of time consumption, given the slowness it takes to obtain a retention curve in the laboratory. From the point of view of computer simulation, although there are other methods, the YLM is a lightweight (in terms of computational load), accessible option (code under GNU GPLv3 license) that finds the necessary information in the input geometry (structure of the porous medium) to determine the equilibrium distributions between the phases (solid, liquid and gaseous).

Keywords: Wetting and drying. Drainage and imbibition. Retention curve. Young-Laplace method (YLM). Morphological opening.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Diagrama mostrando as inter-relações entre os capítulos (artigos) e os objetivos propostos buscando responder o problema de pesquisa da tese	18
Figura 2.1 – Ilustração (2D para o plano $Z = 1$) dos passos seguidos para determinar a conectividade dos poros (χ), tortuosidade (τ), porosidade acessível (ϕ) e curva de distribuição do tamanho dos poros (PSD) para a amostra Mb (grãos de areia). Nos itens (a) e (b) os tons de cinza mais claros representam maiores atenuações de fótons de raios X relacionados à matriz do meio poroso (sólidos). Nos itens (c) e (d) a cor preta (região 0) representa a matriz do meio poroso, enquanto a cor branca (região 255) é o espaço poroso. No item (e) a cor preta (região 0) representa a matriz do meio poroso, enquanto as demais cores indicam os diferentes diâmetros equivalentes de poros (as cores quentes estão associadas aos maiores diâmetros e as cores frias aos menores diâmetros)	27
Figura 2.2 – Representação esquemática do funil de Haines modificado. (a) a amostra encontra-se em condição de saturação, (b) uma tensão h é aplicada à amostra provocando a drenagem dos poros cujo diâmetro seja maior que d (Equação 2.2) .	32
Figura 2.3 – Reconstruções 3D de parte do volume de interesse (VOI) para a amostra La (esferas de vidro). Os itens (a) a (h) foram separados empregando o método do preenchimento (fiLMe), ou seja, seleciona todos os poros cujo diâmetro equivalente está associado a um intervalo de tensão aplicada (h). Os itens (i) a (p) foram separados pelo método da abertura morfológica, ou seja, seleciona todos os poros cujo diâmetro equivalente está associado a um valor de tensão aplicada abaixo de um limiar.....	35
Figura 2.4 – (a–c) Curva de retenção de água (CR), (d-f) conectividade de poros (χ), (g-i) tortuosidade (τ) e (j-l) distribuição de tamanho de poros (PSD) em função da tensão aplicada (h) relativa às três amostras de esferas de vidro (GB) estudadas (Sa, Ma e La)	38
Figura 2.5 – (a-c) Curva de retenção de água (CR), (d-f) conectividade de poros (χ), (g-i) tortuosidade (τ) e (j-l) distribuição de tamanho de poros (PSD) apresentada em função da tensão aplicada (h) relativa às três amostras constituídas por grãos de areia (SG) (Sb, Mb e Lb).....	40
Figura 2.6 – Porosidade acessível (ϕ) em função da maior tensão aplicada para todos os meios porosos avaliados pelos dois métodos (fiLMe e abertura morfológica). Os pontos cheios conectados por linha foram obtidos seguindo o método de	

preenchimento (fiLMe) proposto neste estudo, enquanto os pontos vazados conectados por linha foram obtidos seguindo o método da abertura morfológica (VOGEL, 1997). A maior tensão aplicada (h) corresponde à tensão (dada pela Equação 2.2) associada ao diâmetro da esfera utilizada como elemento estruturante (método da abertura morfológica) ou à tensão associada ao diâmetro da esfera d_i , utilizada como limiar (método fiLMe)42

Figura 3.1 – Esquema mostrando os processos de drenagem e embebição pelo método de Young-Laplace (YLM). Os fluidos não molhantes e molhantes são apresentados em azul e vermelho, respectivamente. a) Ascensão capilar de um fluido molhante em um tubo cilíndrico. A figura representa a seção longitudinal do tubo. b) Dois estados de equilíbrio para diferentes valores da pressão capilar (P_c). $P_c(I) < P_c(II)$, resultando em um raio de curvatura maior para o caso I. c) Comparação entre os estados de equilíbrio obtidos pelo YLM e LBM para um processo de drenagem.....53

Figura 3.2 – Determinação dos pixels dentro da região porosa que podem ser ocupados por um círculo de 7 pixels de diâmetro (região delimitada pela linha branca). Os pixels pretos representam a região sólida enquanto que os pixels vermelhos são os que não puderam ser ocupados pelo círculo (elemento estruturante)55

Figura 3.3 – Geometria de referência usada para analisar e demonstrar o algoritmo unificado. As imagens superior e inferior representam a distribuição inicial de fluidos para drenagem e embebição, respectivamente. Os fluidos molhantes e não molhantes são representados, respectivamente, pelas cores vermelha e azul. Em ambos os casos, a entrada está posicionada no lado esquerdo e a saída no lado direito do meio. Assim, os quadrados azul escuro e vermelho escuro são a fonte ou sumidouro de cada fluido, dependendo do caso57

Figura 3.4 – Estados de equilíbrio selecionados para a drenagem (a e c) ou embebição (b e d) usando o algoritmo YLM unificado na geometria de referência com ângulo de contato de 0° (a e b) ou 45° (c e d). Cada caso é representado por um código de duas letras. A primeira diz respeito à molhabilidade do fluido invasor: não molhante (N) ou molhante (W). A segunda indica se o fluido deslocado é incompressível (I) ou compressível (C)58

Figura 3.5 – Estrutura do algoritmo YLM apresentada em quatro etapas. As operações de conjunto representam a estrutura do algoritmo para cada um dos quatro casos. Os símbolos são: região porosa (P), elemento estruturante (D'), conjunto da 1ª etapa (A_i), operações da 2ª etapa ($N_i(k)$ ou $W_i(k)$, dependendo do caso) , processo de filtragem

na fonte do fluido invasor (Flv), distribuição do fluido invasor na etapa de pressão anterior ($li - 1$), conjunto da 3ª etapa (Bi), operações da 4ª etapa ($Ci(k)$), processo de filtragem no sumidouro de fluido deslocado (FOv) e distribuição do fluido deslocado na etapa de pressão anterior ($Oi - 1$)59

Figura 3.6 – Operações da análise de imagem para determinar a distribuição de equilíbrio dos fluidos em uma etapa de pressão. a) Drenagem: o fluido invasor não é molhante e o fluido deslocado é totalmente compressível (NC). b) Embebição: o fluido invasor é molhante e o fluido deslocado é totalmente compressível (WC). A fonte de fluido (Iv) está na extrema esquerda e o sumidouro de fluido (Ov) na extrema direita. Os pixels beges representam os dados de entrada do algoritmo: região porosa e distribuição inicial (ou passo de pressão anterior) do fluido invasor. Os pixels roxos indicam as operações realizadas para encontrar a imagem final que representa o resultado obtido para a drenagem ou embebição em uma etapa61

Figura 3.7 – Operações da análise de imagem para determinar a distribuição de equilíbrios dos fluidos em uma etapa de pressão. a) Drenagem: o fluido invasor é não molhante e o fluido deslocado é totalmente incompressível (NI). b) Embebição: o fluido invasor é molhante e o fluido deslocado é totalmente incompressível (WI). A fonte de fluido (Iv) está na extrema esquerda e o sumidouro de fluido (Ov) na extrema direita. Os pixels beges representam os dados de entrada do algoritmo: região porosa e distribuição inicial (ou passo de pressão anterior) do fluido invasor. Os pixels roxos indicam as operações realizadas para encontrar a imagem final que representa o resultado obtido para a drenagem ou embebição em uma etapa62

Figura 3.8 – Demonstração do uso da generalização de Schulz et al. (2015) para simular a embebição com um ângulo de contato α . A erosão de um valor de raio de círculo R' e a subsequente dilatação por um círculo de raio maior R são indicadas na mesma imagem. Lm indica o comprimento da membrana.....64

Figura A.1 – Desenho esquemático representando os pontos do centro dos subvolumes (V_{sb}) considerados na análise de variabilidade espacial da porosidade acessível (ϕ). P1 a P8 indicam a posição (x, y) do centro dos V_{sb} considerados na análise da ϕ das amostras estudadas. O quadrado vermelho limita um subvolume com centro no ponto P1.....89

Figura A.2 – Boxplots da porosidade acessível (ϕ) dos meios porosos estudados constituídos por esferas de vidro (GB) com granulometria fina (Sa), intermediária (Ma) e

grossa (La) e também por grãos de areia (SG) apresentando granulometria fina (Sb), intermediária (Mb) e grossa (Lb). Os dados medidos, com base na análise de imagens 3D, são representados pelos pontos cheios. Dentro das caixas, a barra horizontal representa a mediana enquanto o ponto vazado (quadrado) indica o valor médio...90

Figura B.1 – Representação de uma função capacidade de água (WCF) típica obtida através do ajuste da curva de retenção da água (CR) segundo o modelo de Van Genuchten (VG). Os valores h_1 e h_2 indicam os valores de tensão (h) usados como limiares entre as regiões da CR das amostras estudadas94

Figura C.1 – Exemplos das operações fundamentais de Morfologia Matemática (MM). Em a) a região porosa P é mostrada em bege. Itens b) e c) as regiões bege E e O representam o conjunto de pontos resultantes das operações de erosão e dilatação, respectivamente. Item d) exhibe o resultado final da operação de abertura ($\ominus$). O elemento estruturante D é representado pelo disco esverdeado. O símbolo $\ominus$ denota uma operação de erosão, enquanto que o símbolo $\oplus$ indica a operação de dilatação96

Figura C.2 – A operação de abertura em P na Figura C.1a é realizada por duas operações de erosão. Isso é possível porque o negativo da dilatação é igual à erosão do negativo. a) Resultados do negativo da região E na Figura C.1b. Itens b) e c) as regiões bege N e O representam o conjunto de pontos resultantes das operações de erosão e negativo da região N , respectivamente. d) Exhibe o resultado final. O símbolo $\ominus$ denota uma operação de erosão, enquanto que a barra superior indica o negativo da imagem98

Figura C.3 – Operação de abertura da região porosa por um círculo de 7 pixels de diâmetro (i.e., $R_2 = 3.52 = 12.25$) usando a EDT (ver Figura 3.2). a) Mostra os valores da EDT usados na erosão da região porosa. b) Valores da EDT usados na erosão da imagem negativa de a). c) A imagem negativa de b) equivale à operação de abertura da região porosa diretamente. d) Imagem final após operação de abertura da região porosa por um círculo de 7 pixels de diâmetro.....99

Figura C.4 – Uma drenagem de baixo para cima através de um canal estreito com o fluido molhante em vermelho e a fonte de fluido não molhante representada pelo quadrado azul escuro. b) A operação de abertura identifica duas regiões (cor bege) que poderiam ser ocupadas pelo c) fluido não molhante invasor (azul claro), mas a região superior não está conectada à fonte do fluido (pixel azul escuro) e, portanto, não pode ser preenchido na etapa de pressão atual 100

Figura D.1 – Representação de um processo de drenagem a) do fluido molhante (vermelho) de baixo para cima em uma geometria com duas grandes regiões de poros P separadas por um canal estreito, geometria “*ink bottle*”. Comum a ambos os casos, a operação de erosão é realizada em b). Os itens c), e) e g) mostram uma drenagem no algoritmo YLM originalmente proposto por HAZLETT (1995) e também por MAGNANI (1996) e MAGNANI et al. (2000). Os itens d), f) e h) apresentam a correção de HILPERT e MILLER (2001) no algoritmo YLM. A fonte de fluido invasor não molhante (azul) é representada pelo quadrado azul escuro 105

Figura D.2 – A sequência de operações de Morfologia matemática proposta por SCHULZ et al. (2015) para permitir simulações de drenagem com diferentes ângulos de contato (α). Os discos D' e D estão associados a R' para erosão e R para dilatação, respectivamente 106

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Tamanho da partícula, tamanho da amostra e símbolos usados para representar os meios porosos avaliados. O tamanho de partícula GB refere-se ao diâmetro da esfera de vidro, enquanto o tamanho de partícula SG refere-se ao intervalo de tamanho de grão selecionado por meio de peneiramento	24
Tabela A.1 – Coordenadas $P_{x,y}$ do centro dos subvolumes (VS_b) utilizadas para determinar a variabilidade espacial da porosidade acessível (ϕ) dos meios porosos avaliados (esferas de vidro – GB e grãos de areia – SG). Os valores são expressos em pixels	89
Tabela B.1 – Intervalos de tensão aplicadas (h) consideradas para cada região da curva de retenção de água (CR) das amostras estudadas	92
Tabela B.2 – Parâmetros de ajuste da curva de retenção de água (CR) pelo modelo de Van Genuchten (VG) usado para determinar a função capacidade de água (WCF) das amostras estudadas	93

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO GERAL	16
REFERÊNCIAS	19
2 COMO FATORES GEOMÉTRICOS INFLUENCIAM A RETENÇÃO DE ÁGUA PELO SOLO? UM ESTUDO USANDO TOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA	20
2.1 INTRODUÇÃO	20
2.2 MATERIAL E MÉTODOS	23
2.2.1 Os meios porosos	23
2.2.2 Obtenção e processamento das imagens	24
2.2.3 Análise de imagens	29
2.2.4 Curva de retenção (CR)	31
2.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO	33
2.4 CONCLUSÃO	42
REFERÊNCIAS	43
3 UM ALGORITMO UNIFICADO PARA O MÉTODO YOUNG-LAPLACE APLICADO A MEIOS POROSOS	48
3.1 INTRODUÇÃO	48
3.2 CONCEITOS BÁSICOS	51
3.3 O ALGORITMO UNIFICADO	54
3.3.1 Geometria de referência	56
3.3.2 Descrição do algoritmo	58
3.4 O PROCESSO DE EMBEBIÇÃO	62
3.5 CÓDIGO DISPONÍVEL	64
3.6 CONCLUSÃO	64
REFERÊNCIAS	65
4 MÉTODO YOUNG-LAPLACE: UMA INVESTIGAÇÃO ENTRE SIMULAÇÃO E EXPERIMENTO EM MEIOS POROSOS	69
4.1 INTRODUÇÃO	69

4.2	MATERIAIS E MÉTODOS.....	71
4.2.1	Amostras	71
4.2.2	Curva de retenção	71
4.2.3	Aquisição e processamento das imagens	72
4.2.4	Simulação – o YLM.....	73
4.2.4.1	<i>O método YLM</i>	73
4.2.4.2	<i>Implementação do YLM</i>	75
4.3	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	75
4.4	CONCLUSÃO.....	82
	REFERÊNCIAS.....	83
5	CONCLUSÃO GERAL	85
	APÊNDICE A – VARIABILIDADE ESPACIAL DA POROSIDADE ACESSÍVEL.....	87
	APÊNDICE B – SELEÇÃO DOS INTERVALOS DE TENSÃO	91
	APÊNDICE C – MORFOLOGIA MATEMÁTICA APLICADA AO YLM	95
	APÊNDICE D – MELHORIAS PARA A SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DRENAGEM COM O YLM	102
	ANEXO A – ARTIGO 1	108
	ANEXO B – ARTIGO 2.....	122

1 INTRODUÇÃO GERAL

A técnica de microtomografia computadorizada de raios X (μ CT) associada com análise de imagens tridimensionais (3D) tem sido empregada cada vez mais nos estudos envolvendo meios porosos, pois permite obter informações da estrutura da amostra, i.e., como estão distribuídas espacialmente as fases (sólida e gasosa) no meio poroso, resultando em uma série de trabalhos científicos na vanguarda do conhecimento em diversas áreas, tais como geociências, petrofísica, ciência do solo e física de materiais, para mencionar apenas algumas (Cássaro *et al.*, 2017; Galdos *et al.*, 2020; Pires *et al.*, 2019; Zhang *et al.*, 2023).

A capacidade de um meio poroso reter ou movimentar fluidos em seu interior está diretamente relacionada à sua estrutura, especialmente ao seu sistema poroso, uma vez que esse desempenha um papel fundamental em suas propriedades hidráulicas (Dorner; Sandoval; Dec, 2010; Kutílek, 2004). Recentemente, Fomin *et al.* (2023) investigaram mudanças na estrutura de um solo submetido a ciclos de umedecimento e secamento empregando técnicas de μ CT 3D e análise de imagens. Os autores, além de visualizarem as mudanças estruturais, quantificaram propriedades como porosidade, conectividade, diâmetro médio de poros, entre outros em diferentes condições de umidade. Os resultados mostraram que algumas propriedades apresentam comportamento elástico-histerético, enquanto outras apresentam degradação irreversível ou comportamento indefinido, revelando que a utilização de determinadas propriedades físicas do solo podem mascarar mudanças estruturais importantes quando submetido a ciclos de umedecimento e secamento. Além disso, o trabalho sugere a iniciativa de pesquisas no campo da simulação computacional para propriedades hidráulicas em condição de saturação e não saturação, utilizando metodologias na escala de poros.

Em outro estudo, Basset *et al.* (2023) realizaram uma revisão de literatura sistemática buscando responder a seguinte pergunta: Como a estrutura do solo afeta a infiltração da água? Após analisarem 153 trabalhos científicos, os autores verificaram, dentre outros pontos, que os estudos experimentais são hegemônicos em detrimento aos estudos de modelagem e que a área carece de estudos teóricos para avaliar os efeitos da estrutura do solo na infiltração da água. Desta forma, caracterizar a estrutura de meios porosos, em especial por meio de seus fatores geométricos (i.e. diâmetro de poro, formato dos poros, tortuosidade) e topológicos

(i.e. conectividade dos poros), e entender como esses fatores se relacionam com as propriedades hidráulicas pode contribuir no avanço da área da ciência relacionada com sistemas porosos.

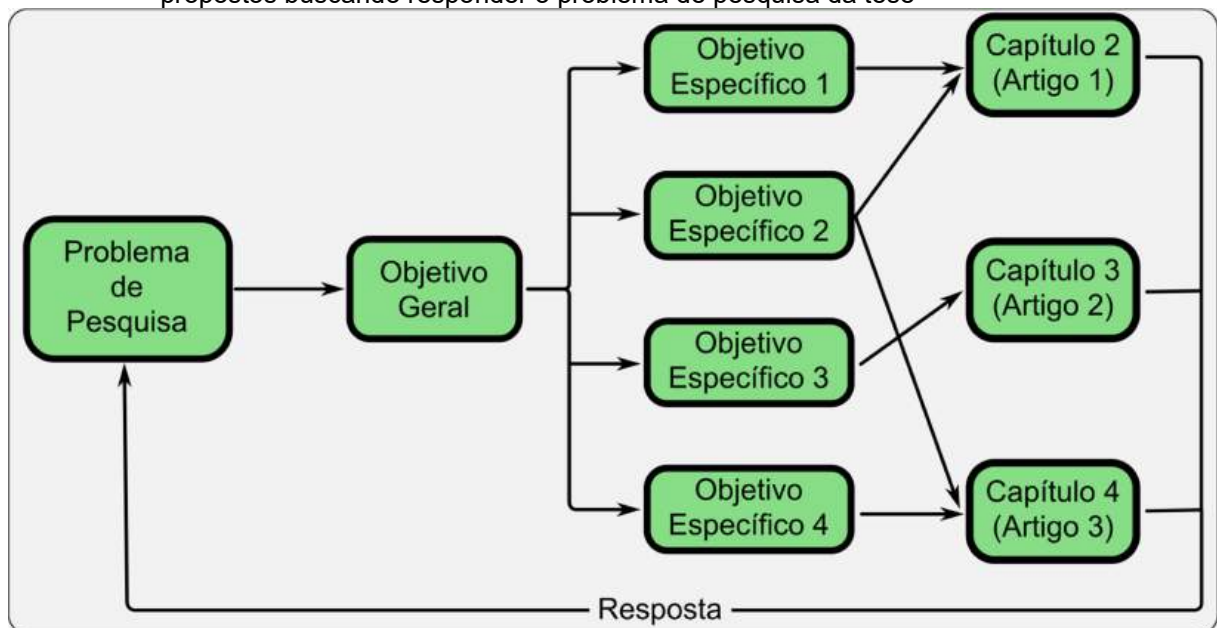
Nesta perspectiva, buscamos com esta tese de doutorado responder ao seguinte problema de pesquisa: A utilização da técnica de μ CT 3D e análise de imagem podem contribuir para a caracterização da estrutura de meios porosos e fornecer informações para simulação computacional de propriedades de retenção de água em meios porosos? A nossa hipótese é de que a técnica da μ CT 3D e análise de imagens são adequadas para a caracterização da estrutura de meios porosos e capazes de fornecer informações para a simulação computacional de propriedades de retenção de água em meios porosos.

Sendo assim, nosso objetivo geral é reconstruir tridimensionalmente a estrutura das amostras pela técnica da μ CT 3D, caracterizá-las através da análise de imagens 3D e simular computacionalmente, em 3D, as propriedades de retenção de água em meios porosos. Os objetivos específicos são 1) caracterizar as amostras por meio de propriedades geométricas e topológicas como: porosidade total, tortuosidade, curva de distribuição de poros e conectividade (número de Euler); 2) estabelecer procedimentos para a segmentação das imagens de μ CT 3D; 3) abordar o método de Young-Laplace (YLM) em um formalismo matemático coeso, simples e que favoreça futuros aprimoramentos e 4) utilizar o YLM para a obtenção da curva de retenção simulada baseando-se na análise de imagens 3D.

Neste contexto, além da introdução geral, a tese está distribuída em outros três capítulos (artigos) em que cada um busca contribuir para responder ao problema de pesquisa proposto. No segundo capítulo (artigo 1) verificamos como os parâmetros tortuosidade e conectividade dos poros, curva de distribuição de poros e porosidade, obtidos por meio da análise de imagens 3D da μ CT, influenciam na retenção da água por sistemas porosos. Conjuntamente, comparamos métodos de obtenção de parâmetros geométricos e topológicos, baseados na análise de imagens 3D da μ CT. No terceiro capítulo (artigo 2), apresentamos o algoritmo YLM, responsável por simular os processos de drenagem e embebição em meios porosos. Para além de ser meramente uma compilação de trabalhos anteriores, apresentamos um novo formalismo matemático coeso que simplifica a compreensão do método e estabelece as bases para futuras melhorias. Adicionalmente,

forneçamos um código C++ eficiente que utiliza essa nova estrutura, disponibilizado sob a licença GNU GPLv3. Por fim, no quarto capítulo (artigo 3) determinamos a curva de retenção simulada para meios porosos não estruturados, reconstruídos tridimensionalmente pela técnica de μ CT e analisados pelo algoritmo computacional YLM. A Figura 1.1 traz um diagrama de como o problema de pesquisa foi abordado e as inter-relações entre os resultados dos capítulos (artigos) e os objetivos da tese.

Figura 1.1 – Diagrama mostrando as inter-relações entre os capítulos (artigos) e os objetivos propostos buscando responder o problema de pesquisa da tese



Fonte: O autor.

REFERÊNCIAS

- BASSET, C.; ABOU NAJM, M.; GHEZZEHEI, T.; HAO, X.; DACCACHE, A. How does soil structure affect water infiltration? A meta-data systematic review. **Soil and Tillage Research**, v. 226, p. 105577, fev. 2023.
- CÁSSARO, F. A. M.; POSADAS DURAND, A. N.; GIMENEZ, D.; PEDRO VAZ, C. M. Pore-Size Distributions of Soils Derived using a Geometrical Approach and Multiple Resolution MicroCT Images. **Soil Science Society of America Journal**, v. 81, n. 3, p. 468–476, 1 maio 2017.
- DORNER, J.; SANDOVAL, P.; DEC, D. THE ROLE OF SOIL STRUCTURE ON THE PORE FUNCTIONALITY OF AN ULTISOL. **Journal of soil science and plant nutrition**, v. 10, n. 4, p. 495–508, 2010.
- FOMIN, D. S.; YUDINA, A. V.; ROMANENKO, K. A.; ABROSIMOV, K. N.; KARSANINA, M. V.; GERKE, K. M. Soil pore structure dynamics under steady-state wetting-drying cycle. **Geoderma**, v. 432, p. 116401, abr. 2023.
- GALDOS, M. V.; BROWN, E.; ROSOLEM, C. A.; PIRES, L. F.; HALLETT, P. D.; MOONEY, S. J. Brachiaria species influence nitrate transport in soil by modifying soil structure with their root system. **Scientific Reports**, v. 10, n. 1, p. 1–11, 1 dez. 2020.
- KUTÍLEK, M. Soil hydraulic properties as related to soil structure. **Soil and Tillage Research**, v. 79, n. 2, p. 175–184, dez. 2004.
- PIRES, L. F.; ROQUE, W. L.; ROSA, J. A.; MOONEY, S. J. 3D analysis of the soil porous architecture under long term contrasting management systems by X-ray computed tomography. **Soil and Tillage Research**, v. 191, p. 197–206, ago. 2019.
- ZHANG, H.; HE, H.; GAO, Y.; MADY, A.; FILIPOVIĆ, V.; DYCK, M.; LV, J.; LIU, Y. Applications of Computed Tomography (CT) in environmental soil and plant sciences. **Soil and Tillage Research**, v. 226, p. 105574, fev. 2023.

2 COMO FATORES GEOMÉTRICOS INFLUENCIAM A RETENÇÃO DE ÁGUA PELO SOLO? UM ESTUDO USANDO TOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA

RESUMO

Relacionar as características de retenção de água de meios porosos com parâmetros micromorfológicos é fundamental para o desenvolvimento de modelos de predição. O objetivo principal desse estudo foi verificar como os parâmetros conectividade, tortuosidade, porosidade acessível (imageada) e curva de distribuição de poros afetam a retenção de água de meios porosos. O estudo emprega análise de imagens tridimensionais (3D) obtidas pela técnica de microtomografia computadorizada de raios X (μ CT). A avaliação desses parâmetros foi realizada associando o método da abertura morfológica a uma abordagem proposta neste estudo, que denominamos método de preenchimento – fiLMe. O fiLMe permite a separação do sistema de poros em intervalos de diâmetro de poros, o que não é possível com o método da abertura morfológica. Nossos resultados indicaram que dentro da região de tensão associada a maior variação na retenção de água (variando de 2,5 a 52,5 $cm H_2O$ – considerando todos os meios porosos estudados), foi encontrado um maior número de poros conectados e sinuosos (maior tortuosidade). Isso significa que a principal característica desses poros é a drenagem. Os resultados de conectividade e tortuosidade obtidos pelos dois métodos (abertura morfológica e fiLMe) mostraram que as amostras analisadas apresentaram características de gargalo no espaço poroso. No entanto, o método fiLMe foi mais rápido e versátil quando comparado ao método da abertura morfológica. As reconstruções 3D do meio poroso permitiram uma análise quantitativa das propriedades de retenção de água das amostras investigadas, possibilitando a observação das regiões de saturação, maior variação da umidade e de umidade residual nas curvas de retenção.

2.1 INTRODUÇÃO

A modelagem que envolve o movimento e retenção de solutos em meios porosos, tal como a retenção de água no solo, tem despertado o interesse dos

cientistas do solo devido à vasta quantidade de aplicações em diferentes áreas como na agricultura, engenharia, ciências ambientais, etc. Sabe-se que a retenção de solutos e o transporte de massa em meios porosos estão intimamente relacionados com seus fatores geométricos (i.e. diâmetro de poro, formato dos poros, tortuosidade, etc) e topológicos (i.e. conectividade dos poros) (Cunha *et al.*, 2020; Fan *et al.*, 2021; Ferreira *et al.*, 2018, 2019; Galdos *et al.*, 2020; Rab *et al.*, 2014). Assim, estabelecer essas relações e apresentar uma interpretação física para o fenômeno pode trazer luz ao problema e auxiliar na construção e/ou melhoria de modelos para a predição das características de retenção de solutos e do transporte de massa em meios porosos.

A reconstrução 3D de meios porosos, obtida a partir de imagens bidimensionais originadas por técnicas como a microtomografia computadorizada de raios X (μ CT), tem possibilitado estudos detalhados da estrutura interna desses meios porosos em diferentes escalas (Guber *et al.*, 2021; Juyal *et al.*, 2018; Koestel *et al.*, 2021; Leue *et al.*, 2019; Park; Hyun; Park, 2015; Xiaoqin *et al.*, 2021; Zhou *et al.*, 2016). O aumento da capacidade computacional e o desenvolvimento de algoritmos dedicados à análise de imagens 3D de meios porosos tem permitido investigar de forma cada vez mais detalhada, a relação entre as propriedades geométricas e morfológicas de sistemas porosos e seu papel na dinâmica da água (Mady; Shein, 2018; Ngom *et al.*, 2011; Oliveira; Cássaro; Pires, 2020; Reis *et al.*, 2021; Schneider; Rasband; Eliceiri, 2012; Yu *et al.*, 2021).

Nos últimos anos, diferentes métodos para avaliar a curva de distribuição do tamanho dos poros (PSD) com base em imagens 3D foram desenvolvidos (Cássaro *et al.*, 2017; Houston *et al.*, 2017; Münch; Holzer, 2008; Song; Ding; Wei, 2019). Uma das vantagens dos métodos baseados em imagens 3D é a capacidade de analisar todo o espaço poroso (poros conectados e não conectados) (Kravchenko *et al.*, 2015; Schlüter; Vogel, 2016). Isso geralmente não é possível usando métodos convencionais experimentais, como porosimetria de intrusão de mercúrio e isothermas de adsorção de nitrogênio (Hajnos *et al.*, 2006; Lipiec; Hajnos; Świeboda, 2012). Esses métodos convencionais podem detectar apenas poros conectados devido às suas características de medição. Assim, entender como a conectividade dos poros está relacionada a PSD obtida por meio de imagens 3D pode ajudar no desenvolvimento de modelos para prever a retenção e o transporte de matéria em meios porosos.

Recentemente, muitos estudos têm se concentrado na análise de imagens 3D de propriedades como conectividade e tortuosidade dos poros, relacionando-as com mudanças no sistema poroso do solo induzidas pela ação antropogênica. Por exemplo, Katuwal *et al.* (2015) estudaram o comportamento do transporte de gás em redes de macroporos relacionando-o com as propriedades do solo, como permeabilidade ao ar e porosidade de aeração. Eles demonstraram que essas propriedades do solo são úteis no entendimento das funções dos macroporos do solo. Pires *et al.* (2017) mostraram que os sistemas de manejo do solo podem induzir mudanças importantes na arquitetura dos poros, influenciando sua conectividade e tortuosidade com impactos nas características de retenção de água. Recentemente, esses autores relacionaram a tortuosidade e a conectividade dos poros com suas distribuições em termos de tamanho e forma (Pires *et al.*, 2019).

Tseng *et al.* (2018) simularam o movimento 3D da água com base em parâmetros físicos obtidos por meio de análise de imagem. Anisotropia do sistema poroso, conectividade e entropia de Shannon foram utilizadas por esses autores para prever como a arquitetura do solo influencia a dinâmica da água. Borges *et al.* (2019) investigaram a influência dos sistemas de manejo no sistema poroso do solo, demonstrando que a conectividade e a tortuosidade dos poros são parâmetros importantes para explicar as variações na retenção de água e na condutividade hidráulica. Análise semelhante foi realizada por Galdos *et al.* (2019) em uma área sob plantio direto. Esses autores demonstraram que os sistemas de manejo do solo afetam a conectividade dos poros, a porosidade, o número de poros e a tortuosidade, com implicações importantes na ciclagem de nutrientes, crescimento das raízes, fluxos de gases no solo e dinâmica da água.

Silva *et al.* (2021) relacionaram o transporte de gás à morfologia dos poros em um solo sob sistema de manejo de plantio direto. Esses autores relataram que os parâmetros morfológicos derivados da tomografia de raios-X, especialmente a conectividade dos macroporos, apresentam alta capacidade de predição do transporte de gás. No entanto, todos os estudos citados consideraram a conectividade e a tortuosidade dos poros constantes, i.e., a medida destas propriedades foi realizada considerando todo o espaço poroso como sendo preenchido por uma única fase (e.g. água). Assim, foram desconsiderados possíveis efeitos da entrada de ar nos caminhos utilizados para o movimento da água no solo.

A presença de ar nos poros influencia muito a conectividade dos poros e a tortuosidade à medida que o solo começa a drenar.

Neste estudo, o principal objetivo foi o de verificar como os parâmetros tortuosidade e conectividade dos poros, curva de distribuição de poros e porosidade, obtidos por meio da análise de imagens 3D de μ CT, influenciam na retenção da água por sistemas porosos. A opção da investigação de meios porosos deformados se deu em função do maior controle, da menor complexidade apresentada em relação a outros meios porosos (e.g. um solo) e por minimizar eventuais efeitos associados à complexidade do meio poroso (ver Apêndice A).

Paralelamente, pretendeu-se comparar métodos de obtenção de parâmetros geométricos e topológicos, baseados na análise de imagens 3D de μ CT. Ao contrário de outros estudos recentemente publicados como em Borges *et al.* (2018) e Roque e Costa (2020), neste estudo a estimativa de parâmetros como a conectividade e tortuosidade dos poros foi realizada para cada intervalo de diâmetro de poro, método este que chamamos de preenchimento (fiLMe). O fiLMe além de ser rápido, também apresenta versatilidade, pois permite aplicar limiares (máximo ou mínimo) ou selecionar intervalos de interesse em termos de diâmetro de poro. Os mesmos parâmetros também foram determinados pelo método da abertura morfológica proposto por Vogel (1997). Embora o último autor não tenha realizado a medida da tortuosidade de meios porosos, a metodologia proposta em seu trabalho pôde ser estendida para tal grandeza física. O processo da abertura morfológica considera um limiar de diâmetro de esfera (elemento estruturante) e a análise é feita desconsiderando poros cujo diâmetro seja menor que o desse limiar. Portanto, este trabalho pode ser entendido como uma extensão do trabalho apresentado por Vogel (1997).

2.2 MATERIAL E MÉTODOS

2.2.1 Os meios porosos

Este estudo avaliou dois tipos de meios porosos: 1) esferas de vidro homogêneas (GB) acondicionadas aleatoriamente, caracterizando um meio poroso monodisperso e 2) grãos de areia (SG) distribuídos em intervalos de tamanhos conhecidos (diâmetro das partículas), obtidos por peneiramento. O segundo tipo

caracteriza um meio poroso polidisperso consistindo de partículas de areia fina a grossa de acordo com o sistema de classificação do USDA (Hillel, 1998). As amostras SG consistiram de partículas obtidas usando tamanhos de malha de peneira entre: 106 e 212 μm , 212 e 500 μm e 500 e 1.000 μm . Três granulometrias distintas de cada tipo de meio poroso (amostras GB e SG) foram estudadas, totalizando seis amostras (Tabela 2.1).

Tabela 2.1 – Tamanho da partícula, tamanho da amostra e símbolos usados para representar os meios porosos avaliados. O tamanho de partícula GB refere-se ao diâmetro da esfera de vidro, enquanto o tamanho de partícula SG refere-se ao intervalo de tamanho de grão selecionado por meio de peneiramento

Amostra	Tamanho de partícula (μm)	Tamanho da amostra (mm)	Símbolo ^a
GB	500	21,30 x 21,30 x 10,65	S _a
GB	1.000	21,30 x 21,30 x 10,65	M _a
GB	2.500	21,30 x 21,30 x 10,65	L _a
SG	106 – 212	5,91 x 5,91 x 5,78	S _b
SG	212 – 500	5,91 x 5,91 x 5,78	M _b
SG	500 – 1.000	5,91 x 5,91 x 5,78	L _b

Fonte: O autor.

Notas: ^a Simbologia utilizada para designar a amostra avaliada. S, M e L indicam, respectivamente, o menor valor, o valor intermediário e o maior valor da granulometria de cada meio poroso. O índice a indica o meio poroso constituído por esferas de vidros, enquanto que o índice b indica o meio poroso constituído por grãos de areia.

2.2.2 Obtenção e processamento das imagens

Os meios porosos estudados foram escaneados utilizando um sistema microtomográfico de bancada SkyScan 1172. As seguintes configurações foram selecionadas no escaneamento de cada meio poroso: 1) para as amostras GB, o tubo de raios X operou em 100 kV e 100 μA com a adição de filtros de alumínio (0,5 mm de espessura) e cobre (0,04 mm de espessura) posicionados entre a fonte e o detector, com tempo de aquisição de 158 ms para cada radiografia; 2) para as amostras SG, a configuração do tubo de raios X operou em 80 kV e 124 μA , com adição de filtro de alumínio (0,5 mm de espessura) e tempo de aquisição de 590 ms.

As imagens de μCT em 8 bits (256 tons de cinza) das amostras foram obtidas da reconstrução a partir das projeções (radiografias) pelo software NRecon (Figura 2.1a), fornecido com o equipamento de μCT . O tamanho de pixel para as

amostras GB foi de 25,79 μm e para as amostras SG foi de 6,15 μm (Vaz *et al.*, 2011). Um volume de interesse (VOI) abrangendo a maior porção do meio poroso foi selecionado (Figura 2.1b), sendo de 826x826x413 pixels para GB e de 961x961x940 pixels para SG, valores referentes às direções horizontal (eixo X), vertical (eixo Y) e em profundidade (eixo Z).

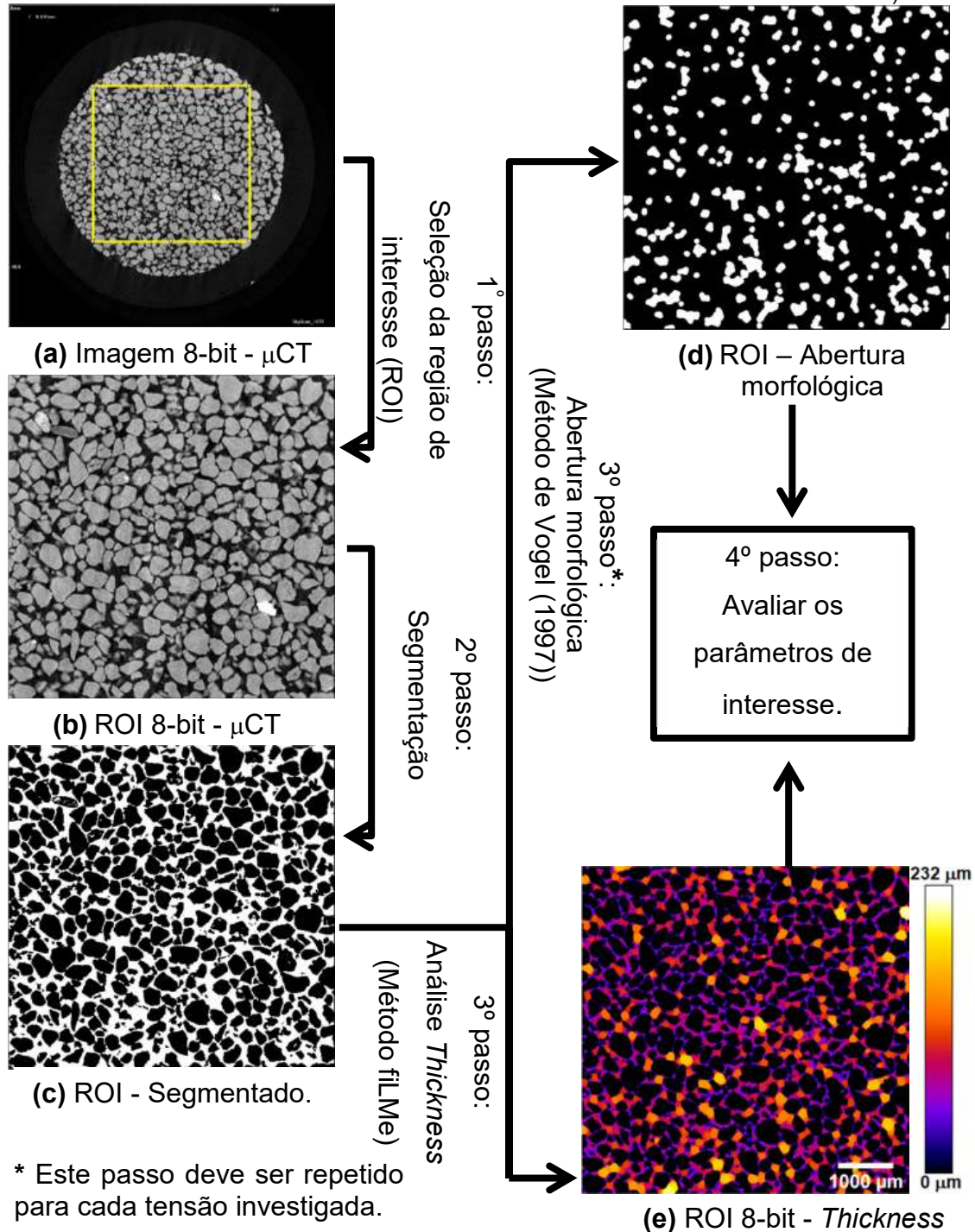
Os VOI's dos meios porosos obtidos em 8 bits sofreram o processo de segmentação (Figura 2.1c) para definir a região da matriz (sólido) e do espaço poroso (vazio) utilizando o algoritmo Isodata (Ridler; Calvard, 1978) disponibilizado no software ImageJ versão 1.53c (Schneider; Rasband; Eliceiri, 2012). Esse algoritmo realizou a análise baseado no histograma do VOI do meio poroso e inicialmente atribuiu um valor de limiar que serviu para separar o VOI em objeto (espaço poroso) e fundo (matriz). A média do nível de intensidade do objeto e do fundo (background) foi calculada e seus valores foram utilizados para se determinar o novo valor de limiar (dado pela média entre esses valores). O novo limiar foi aplicado ao VOI que novamente foi separado em objeto e fundo, o algoritmo seguiu essa rotina até a convergência no valor do limiar após as iterações necessárias (Ridler; Calvard, 1978).

O algoritmo Isodata foi escolhido devido à semelhança dos valores de densidade de partículas das amostras aqui estudadas; como os apresentados no estudo de Shou *et al.* (2020), que analisaram arenitos com cerca de 90% de quartzo em suas composições. Isso significa que as características de atenuação dos fótons de raios X foram semelhantes às obtidas para os materiais investigados em nosso estudo. As imagens de μCT de nossas amostras revelaram um bom contraste entre a fase porosa e os sólidos.

Após os procedimentos de segmentação, a análise *Thickness*, disponível no *plugin* BoneJ (Doubé *et al.*, 2010), foi empregada para preencher o espaço poroso (região de valor de pixel igual a 255 – branco puro) com esferas de diâmetros distintos conhecidos. Este procedimento calcula a maior esfera que pode ser inscrita dentro do espaço poroso do VOI (processo conhecido como *maximum ball*). Depois de preenchido o espaço poroso com a esfera é registrado o seu diâmetro equivalente (é definida uma cor, que está associada ao diâmetro equivalente da esfera). Este processo é repetido, ou seja, novas esferas são inscritas (com diâmetros cada vez menores) até que todo o espaço poroso esteja completamente preenchido com esferas de diferentes diâmetros. Esta rotina é semelhante àquela utilizada quando o

procedimento de simulação de intrusão de mercúrio é realizado para determinar a distribuição de tamanho de poros de sistemas porosos com base em imagens 3D (Cássaro *et al.* 2017; Oliveira *et al.* 2021).

Figura 2.1 – Ilustração (2D para o plano $Z = 1$) dos passos seguidos para determinar a conectividade dos poros (χ), tortuosidade (τ), porosidade acessível (ϕ) e curva de distribuição do tamanho dos poros (PSD) para a amostra M_b (grãos de areia). Nos itens (a) e (b) os tons de cinza mais claros representam maiores atenuações de fótons de raios X relacionados à matriz do meio poroso (sólidos). Nos itens (c) e (d) a cor preta (região 0) representa a matriz do meio poroso, enquanto a cor branca (região 255) é o espaço poroso. No item (e) a cor preta (região 0) representa a matriz do meio poroso, enquanto as demais cores indicam os diferentes diâmetros equivalentes de poros (as cores quentes estão associadas aos maiores diâmetros e as cores frias aos menores diâmetros)



Fonte: O autor.

Notas: O termo região de interesse (ROI) foi utilizado neste estudo devido às imagens 2D mostradas na ilustração esquemática. O processo da abertura morfológica representado foi obtido a partir de um elemento estruturante associado à tensão (h) de $28,5 \text{ cm H}_2\text{O}$.

Após a aplicação da análise *Thickness*, o próximo passo foi gerar o espaço poroso segmentado preenchido com as esferas (Figura 2.1e). Ao contrário das imagens em tons de cinza de 8 bits resultantes do μ CT (Figura 2.1b), que estão relacionadas à atenuação dos fótons de raios X, a escala de cores da Figura 2.1e indica os diâmetros equivalentes do espaço poroso preenchido com as esferas; cada cor (valor) está associada a um diâmetro equivalente da bola (esfera) utilizada pelo software para preencher o espaço poroso da amostra avaliada. Cores quentes e frias são selecionadas de acordo com o diâmetro equivalente do poro (quente – grande e frio – pequeno).

A seleção do intervalo de esferas com diâmetro equivalente d_i foi feita nas imagens 3D obtidas com a análise *Thickness* (o índice i está relacionado às diferentes cores – diâmetros equivalentes – apresentadas na Figura 2.1e). A distribuição de tamanho de poros, conectividade de poros (χ) e tortuosidade (τ) foram avaliadas para cada intervalo de d_i , no VOI cujo espaço poroso foi preenchido por esferas de diâmetros conhecidos (aproximando as esferas que preenchem o espaço poroso na análise *Thickness* ao diâmetro equivalente dos poros). O método *filMe* permitiu analisar como diferentes parâmetros (umidade do solo, conectividade dos poros, tortuosidade, PSD) variam em função da tensão aplicada (h), que está associada aos intervalos de esferas de diâmetros d_i resultantes do procedimento de preenchimento do espaço poroso.

No modelo baseado em conceitos de capilaridade, quando uma determinada tensão é aplicada ao meio poroso saturado, a água retida escoar dos poros cujos diâmetros são maiores que d dado por:

$$d = \frac{4\sigma \cos\alpha}{\rho gh} \quad (2.1)$$

onde d é o diâmetro de poro equivalente, σ é a tensão superficial da água, ρ é a densidade da água, g é a aceleração da gravidade e α é o ângulo de contato entre a água e a superfície sólida. Considerando o movimento ascendente da água em um tubo de vidro devido ao processo de capilaridade, a Equação 2.1 pode ser expressa por:

$$d(\mu m) \cong \frac{2.980}{h (cm H_2O)} \quad (2.2)$$

A equação 2.2 é o resultado numérico da equação de Young-Laplace considerando a densidade da água ($0,998 \text{ g cm}^{-3}$), aceleração da gravidade (981 cm s^{-2}), tensão superficial da água ($72,8 \text{ dinas cm}^{-1}$) e ângulo de contato igual a 0° . Esta equação também foi utilizada para associar os diâmetros de poros obtidos a partir da análise de imagens 3D com as tensões aplicadas.

As análises de χ e τ utilizando a metodologia proposta por Vogel (1997) - abertura morfológica - difere da metodologia descrita anteriormente (fiLMe) quanto à forma como foram selecionados os intervalos de diâmetros equivalentes das esferas. O método da abertura morfológica não seleciona um intervalo, mas um limiar de diâmetro de esfera equivalente para preencher o espaço poroso (Figura 2.1d). Outra diferença entre esses métodos é a necessidade de repetir o passo 3 (Figura 2.1) para cada tensão associada ao diâmetro equivalente do elemento estruturante sob investigação, o que implica maiores tempos de processamento.

As análises de abertura morfológica foram realizadas utilizando a ferramenta MorphoLibJ (Legland; Arganda-Carreras; Andrey, 2016) empregando esferas como elementos estruturantes e variando seu raio (ou diâmetro) para obter cada limiar de diâmetro equivalente de esfera. A relação entre o diâmetro do elemento estruturante e seu raio é dada por (Vogel, 1997):

$$d_{EE} = 2 \cdot r_{EE} + 1 \quad (2.3)$$

onde d_{EE} e r_{EE} são o diâmetro e o raio do elemento estruturante, respectivamente.

Após a aplicação do processo da abertura morfológica, poros cujo diâmetro seja menor que o diâmetro dado pela Equação 2.3 são excluídos do espaço poroso original (Figura 2.1c). Este processo permite separar e investigar toda a gama de poros, com diâmetros característicos distintos, que foram encontrados na amostra.

2.2.3 Análise de imagens

Todas as análises de imagens foram realizadas utilizando o software ImageJ, versão 1.53c (Schneider; Rasband; Eliceiri, 2012). As propriedades dos meios porosos analisadas foram: porosidade acessada (ϕ), conectividade dos poros (χ), tortuosidade (τ) e a curva de distribuição do tamanho de poros (PSD). Para a obtenção da PSD, o *plugin Thickness* foi empregado conforme descrito

anteriormente. Após a inserção das esferas necessárias para preencher o espaço poroso, a porcentagem de um determinado intervalo de esferas com diâmetro d_i ($D(d_i)$) foi obtida usando a Equação 2.4:

$$D(d_i) = \left(\frac{V_{d_i}}{V_t} \right) \times 100 \quad (2.4)$$

onde V_{d_i} representa o número de voxels ocupados pelo intervalo de esferas com diâmetro d_i e V_t é o volume total da amostra (imagem 3D).

Para determinar ϕ , a contribuição de todos os intervalos de esferas foi somada (ou integrada) desde o menor diâmetro (d_0) até o maior diâmetro equivalente (d_n) encontrado no processo de *Thickness*.

$$\phi(\%) = \sum_i^n D(d_i) \quad (2.5)$$

A conectividade dos poros foi estimada usando um invariante topológico chamado número de Euler (Toriwaki; Yonekura, 2002). O número de Euler avalia o número de estruturas conectadas no espaço poroso. A estimativa de χ foi realizada pela ferramenta *Connectivity*, também disponível no *plugin* BoneJ (Doube *et al.*, 2010). O software varreu todo o VOI contando as quantidades de clusters isolados ou ilhas (I), de ramos (B) e orifícios (H) para então calcular o valor do número de Euler (Vogel; Kretzschmar, 1996):

$$\chi = I + H - B \quad (2.6)$$

A definição de tortuosidade dos poros utilizada neste trabalho é dada pela razão entre a distância geodésica e a distância euclidiana de dois pontos em um caminho poroso conectado. O *plugin Tortuosity* desenvolvido por Roque e Costa (2020), baseado na reconstrução geodésica, foi empregado no cálculo da tortuosidade. O método consiste (para o caso 3D) em varrer o VOI na direção de interesse avaliando cada plano perpendicular à direção de varredura (nesse estudo avaliou-se a direção do fluxo d'água – eixo Z – relativo à profundidade da amostra). No plano inicial de varredura é realizada a operação morfológica de dilatação seguida da intersecção com a imagem original do plano e esta rotina (dilatação + intersecção) é então incrementada para os planos seguintes até a conclusão da

reconstrução geodésica. O número de reconstruções geodésicas necessárias para ligar o plano de varredura inicial até o plano final é a distância geodésica. A distância euclidiana é dada pela coordenada do plano final da reconstrução geodésica na direção de varredura. Para o caso em que a tortuosidade apresente o valor da unidade, temos que o caminho poroso não apresenta curvatura e, assim, as distâncias geodésica e euclidiana são iguais.

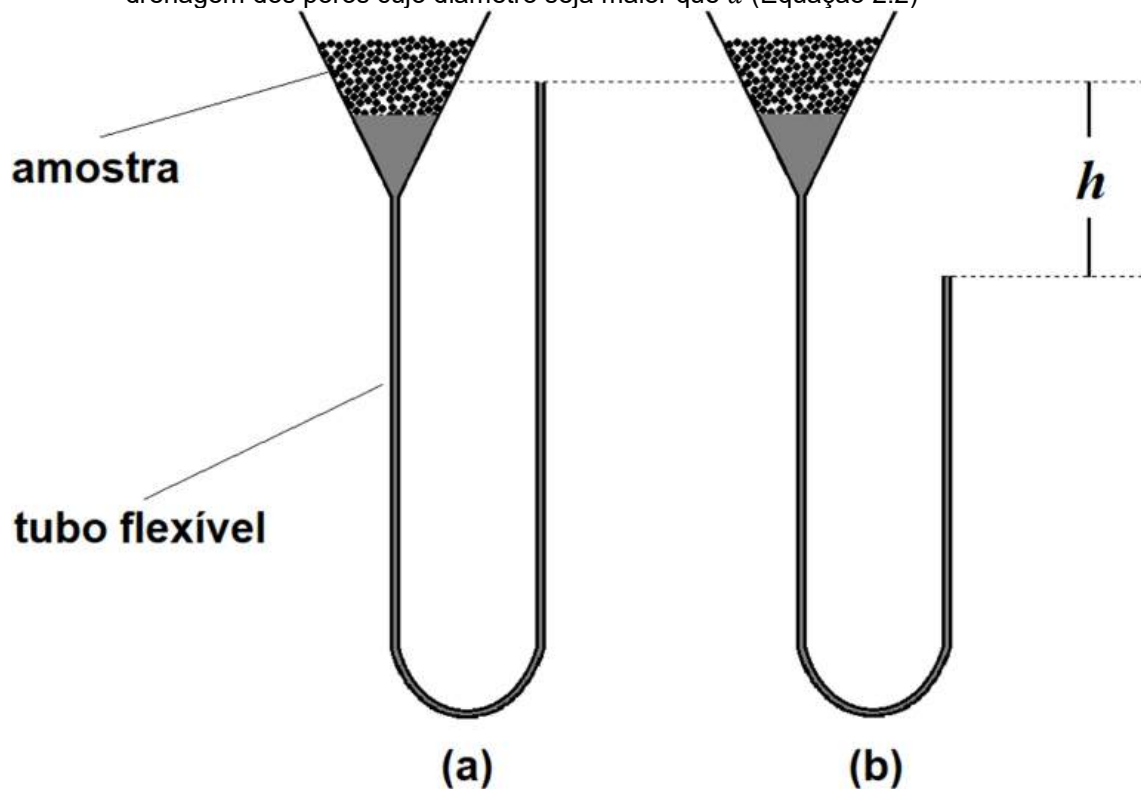
2.2.4 Curva de retenção (CR)

A curva de retenção de água para os meios porosos investigados foram obtidas usando um funil de Haines modificado (Cássaro *et al.*, 2009). Dois procedimentos foram seguidos para obter as CRs: 1) A amostra S_b foi acondicionada em cilindro metálico (aço) com dimensões: 4,8 *cm* de diâmetro e 5,2 *cm* de altura. O cilindro foi preenchido gradualmente com areia até seu volume total e, entre cada etapa de enchimento, a areia foi acomodada batendo levemente o cilindro em uma superfície plana. A amostra foi saturada pelo método de ascensão capilar seguindo três etapas. Primeiramente, a água foi adicionada lentamente à bandeja que continha a amostra até a metade da altura do cilindro, permanecendo nesta condição por 2 horas. Na segunda etapa, mais água foi adicionada lentamente a bandeja até cerca de 3/4 da altura do cilindro, permanecendo nesta condição por mais 2 horas. Por fim, a água foi adicionada lentamente na bandeja até uma altura próxima à superfície da amostra, permanecendo nesta condição por 24 horas para então, ser transferida para o funil de Haines. 2) As demais amostras (S_a , M_a , L_a , M_b e L_b), devido às suas características de retenção, apresentaram dificuldades experimentais na transferência após a saturação para o funil de Haines, sem que se iniciasse a drenagem da água. Optamos por sua acomodação e saturação (volume aproximado de 78 *cm*³) dentro do próprio conjunto (o funil de Haines) de forma semelhante ao procedimento adotado com a amostra S_b .

A Figura 2.2 apresenta uma representação esquemática do funil de Haines modificado empregado em nosso estudo. A Figura 2.2a mostra a condição de saturação quando a extremidade do tubo cheio de água é mantida no mesmo nível do centro geométrico da amostra. Após a saturação do meio poroso, tensões distintas e progressivamente maiores foram aplicadas à amostra (Figura 2.2b), drenando a água dos poros cujo diâmetro seja maior ao diâmetro d dado pela

Equação 2.2. Quando o equilíbrio foi alcançado, identificado pela ausência de gotejamento de água da amostra, um novo valor de tensão h foi aplicado. As tensões selecionadas variaram de: 1 a 27 $cm H_2O$ (S_a), 1 a 15 $cm H_2O$ (M_a), 1 a 9 $cm H_2O$ (L_a), 5 a 60 $cm H_2O$ (S_b), 1 a 30 $cm H_2O$ (M_b) e 1 a 20 $cm H_2O$ (L_b), com incrementos na h de 1 $cm H_2O$ até o ponto em que a umidade residual (variação insignificante na umidade com aumentos adicionais em h) foi alcançado. A amostra S_b foi uma exceção com incrementos na h de 5 $cm H_2O$ devido ao pequeno tamanho de suas partículas e a ampla faixa de tensão compreendida desde a saturação até o teor de umidade residual.

Figura 2.2 – Representação esquemática do funil de Haines modificado. (a) a amostra encontra-se em condição de saturação, (b) uma tensão h é aplicada à amostra provocando a drenagem dos poros cujo diâmetro seja maior que d (Equação 2.2)



Fonte: Adaptado de Cássaro *et al.* (2009).

O valor da umidade à base de volume (θ) é dado por:

$$\theta = \frac{V_w}{V} \quad (2.7)$$

onde V_w e V são o volume de água retido na amostra e o volume da amostra, respectivamente. O valor de V foi previamente determinado medindo-se os

tamanhos dos recipientes utilizados para acomodar as amostras, enquanto V_w foi determinado utilizando a seguinte relação:

$$V_w = \frac{m - m_s}{\rho} \quad (2.8)$$

onde m e m_s são a massa do conjunto (funil + amostra) úmida após atingir o equilíbrio e a massa do conjunto seca, respectivamente, e ρ é a densidade da água conforme já descrito na Equação 2.1.

2.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

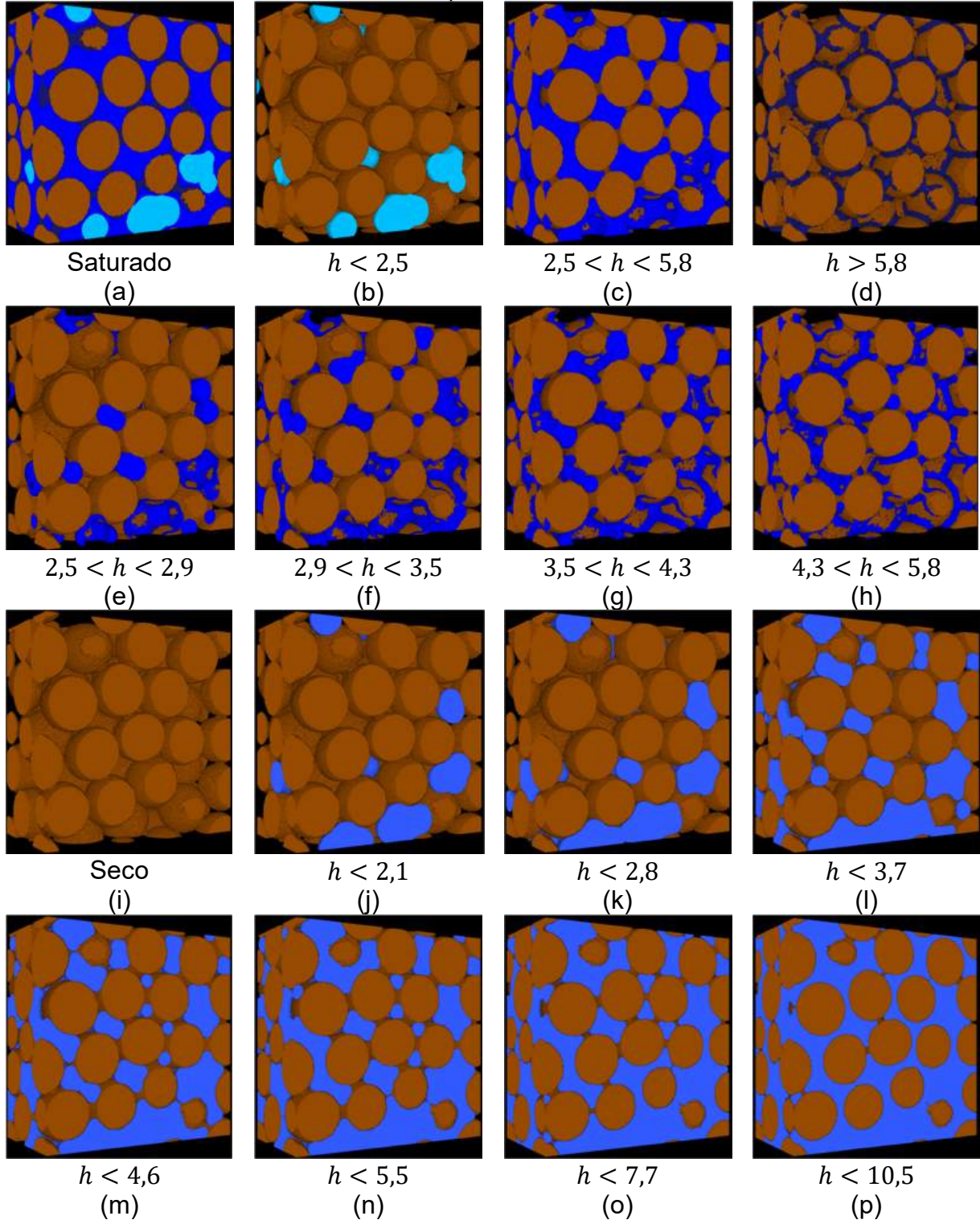
A Figura 2.3 apresenta a reconstrução 3D de uma porção do VOI da amostra L_a em diferentes condições de saturação usando os métodos fiLMe (Figura 2.3a-h) e abertura morfológica (Figura 2.3i-p). Nas imagens, o intervalo de diâmetro de poros selecionado (em termos da tensão h aplicada) em cada caso foi considerado cheio de água (representado pelos tons de azul). As reconstruções foram baseadas nas imagens 3D segmentadas da amostra L_a com a cor marrom associada à matriz do meio poroso (sólido), os tons de azul são referentes às diferentes condições de umidade e os espaços vazios (transparente) representam o espaço poroso ocupado pelo ar. O procedimento utilizado para a obtenção das imagens apresentadas na Figura 2.3 foi o de sobrepor as imagens reconstruídas da matriz do solo com as imagens reconstruídas em diferentes condições de umidade. É importante mencionar que para melhor visualização das regiões preenchidas e não preenchidas por água no meio poroso, o volume da amostra L_a (Figura 2.3) representa cerca de 1/8 do seu volume total.

A Figura 2.3a mostra a amostra saturada L_a , na qual cada tom de azul representa uma região da CR (detalhes sobre o critério de seleção dos intervalos de tensão aplicados podem ser encontrados no Apêndice B); ou seja, a tonalidade azul mais clara representa a faixa de diâmetro de poro equivalente associada à tensão na região de saturação (Figura 2.3b), a tonalidade azul intermediária está associada à faixa de tensão na região de maior variação do teor de umidade (Figura 2.3c), enquanto a tonalidade azul mais escura está relacionada à faixa de tensão na região de umidade residual (Figura 2.3d). Assim, a Figura 2.3a representa uma sobreposição das imagens 3D apresentadas nas Figura 2.3b–d.

O método filMe permite uma análise detalhada dos intervalos de diâmetro de poro de interesse no meio poroso (Figura 2.3e-h). Por exemplo, a região de poros na Figura 2.3c (cor azul) foi dividida em quatro intervalos de tensão ($2,5 < h < 2,9$, $2,9 < h < 3,5$, $3,5 < h < 4,3$ e $4,3 < h < 5,8 \text{ cm H}_2\text{O}$) para um melhor detalhamento dessa região da CR (estes quatro intervalos de tensão também foram usados para avaliar χ e τ no método filMe). A Figura 2.3i traz apenas a matriz da amostra L_a (cor marrom) com o espaço poroso vazio (ou cheio de ar – meio poroso em condições secas), enquanto as Figura 2.3j–p mostram como o método da abertura morfológica separa o espaço poroso na medida em que se incrementa o valor da tensão aplicada como limiar (associado ao diâmetro do elemento estruturante).

A Figura 2.4 mostra a curva de retenção (Figura 2.4a–c), conectividade de poros (Figura 2.4d–f), tortuosidade (Figura 2.4g–i) e distribuição do tamanho de poro (Figura 2.4j–l) para as amostras GB. As CRs quando comparados com χ , τ e PSD (via método filMe) mostram, de modo geral, que na região próxima à saturação (Figura 2.4a–c) houve um aumento na conectividade dos poros (χ mais negativo) quando a tensão aplicada aumentou. Em relação a PSD, verificou-se um pequeno número de poros (área abaixo da curva do PSD) com aumento da tensão aplicada (Figura 2.4j–l). A região de maior variação na umidade da CR (Figura 2.4a – c) demonstrou ser a região mais conectada (Figura 2.4d – f), mais tortuosa (Figura 2.4g – i) e de maior quantidade de poros acessados (Figura 2.4j – l), pois nessa região o intervalo de tensão aplicada na amostra é suficiente para drenar grande parte da água retida no meio poroso, de modo que todos os poros estão interligados comportando-se como um poro de característica única de drenagem (Figura 2.3c). Como esperado, a região de maior variação na umidade da CR (Figura 2.4a – c) possui maior amplitude (maior variação de tensão) para as menores granulometrias, entretanto, tais diferenças são bastantes sutis devido às características dos meios porosos avaliados. A região de umidade residual da CR, apresentou uma tendência de diminuição da conexão entre os poros (Figura 2.3d) e uma diminuição na tortuosidade dos meios porosos estudados (Figura 2.4g-i).

Figura 2.3 – Reconstruções 3D de parte do volume de interesse (VOI) para a amostra L_a (esferas de vidro). Os itens (a) a (h) foram separados empregando o método do preenchimento (fiLMe), ou seja, seleciona todos os poros cujo diâmetro equivalente está associado a um intervalo de tensão aplicada (h). Os itens (i) a (p) foram separados pelo método da abertura morfológica, ou seja, seleciona todos os poros cujo diâmetro equivalente está associado a um valor de tensão aplicada abaixo de um limiar



Fonte: O autor.

Notas: O VOI reconstruído representa cerca de 1/8 do volume total da amostra. As dimensões reconstruídas foram $400 \times 400 \times 200$ voxels nas direções horizontal (eixo X), vertical (eixo Y) e em profundidade (eixo Z), respectivamente. A cor marrom representa a matriz da amostra (sólido),

enquanto os espaços vazios (transparentes) e outras cores (tons azuis) representam o espaço poroso em diferentes condições de umidade. Os valores de tensão aplicada são expressos em $cm\ H_2O$.

Nossos resultados demonstraram que as tensões aplicadas removeram a água das amostras, aumentando a interface ar-água dentro de suas estruturas porosas como esperado (Liu *et al.*, 2020). As regiões onde a água foi substituída pelo ar tiveram grande impacto na dinâmica da água que ocorre em seus canais porosos (Singh; Singh; Kumar, 2020); influenciando a condutividade hidráulica não saturada das amostras (não avaliada neste estudo), que é altamente dependente da distribuição de umidade (Hillel, 1998). Notamos que os poros maiores drenaram primeiro (Figura 2.3b) com seus volumes sendo preenchidos pelo ar, forçando a água a fluir ao seu redor (Figura 2.3e–h). Este resultado explica o aumento da tortuosidade do meio poroso seguido pelo secamento da amostra. Nas situações em que a região de umidade residual foi atingida (baixa umidade), a movimentação da água fica muito prejudicada devido aos poucos caminhos que restam para tal movimento e se espera a criação de regiões úmidas desconectadas devido ao rompimento dos caminhos pelos quais a água pode fluir (Figura 2.3d). Essa água não estava mais disponível (como um fluxo) para o computo da água drenada na CR, pois ela ficava retida no meio poroso mesmo após aumentos na tensão aplicada. Assim, foi encontrada uma possível explicação para a redução da conectividade dos poros na região da umidade residual na CR; bem como pela diminuição da tortuosidade após atingir seu pico (Figura 2.4g–i), uma vez que os caminhos ao redor dos poros maiores não estavam mais conectados (o *plugin Tortuosity* avalia a distância geodésica e a distância euclidiana de dois pontos em um caminho poroso conectado).

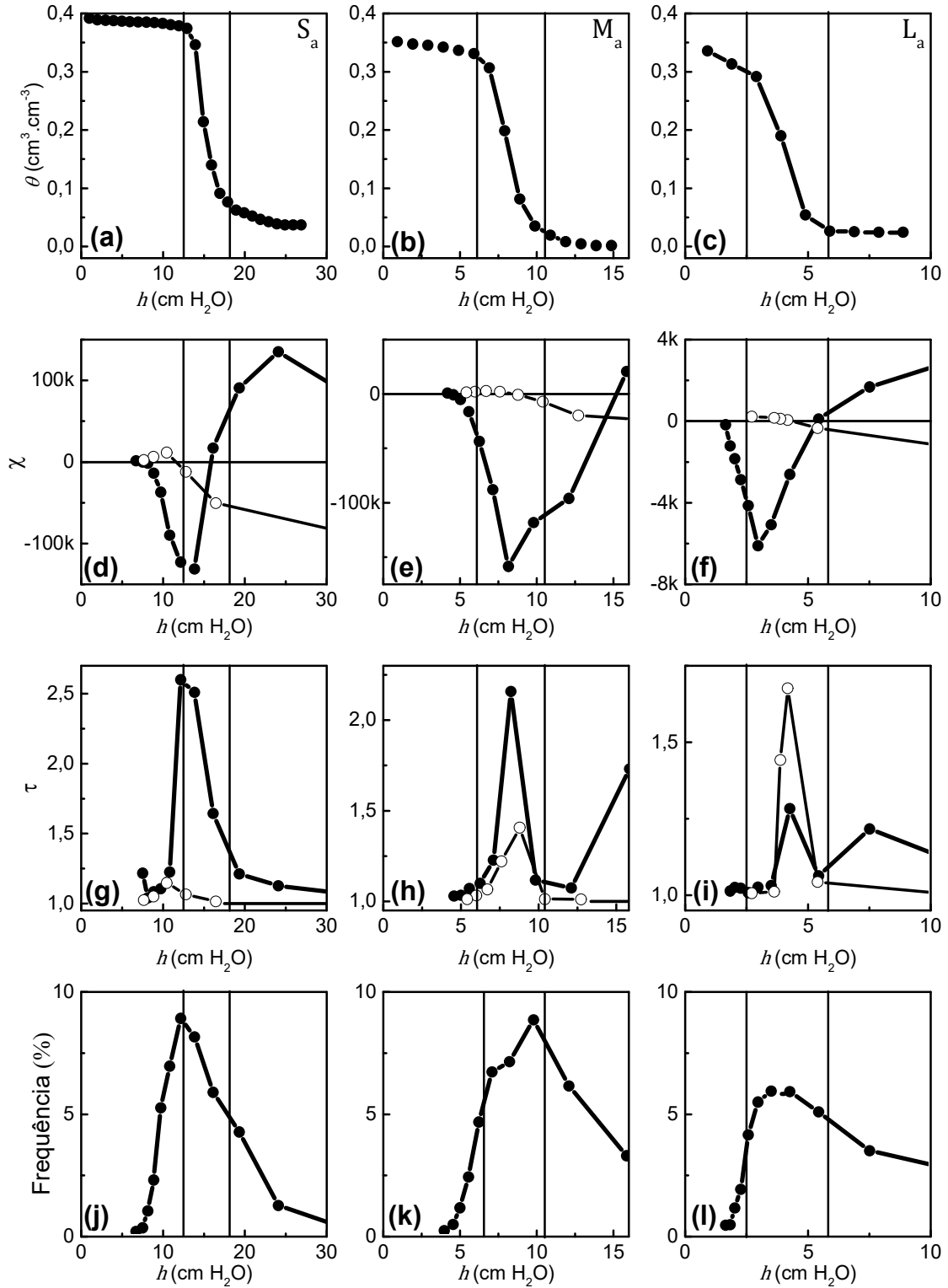
Embora valores diferentes de τ tenham sido encontrados usando *filMe* e abertura morfológica (Figura 2.4g–i), foi identificado um comportamento semelhante para as três granulometrias das amostras de GB, apresentando um valor máximo para, aproximadamente, a mesma faixa de tensão. Os valores de χ medidos pelos dois métodos apresentaram comportamentos distintos (Figura 2.4d–f). Uma provável explicação é a maneira como o meio poroso original (Figura 2.1c) foi manipulado para o cálculo da χ . O método *filMe* seleciona intervalos de diâmetro de poro (Figura 2.3e–h) para calcular χ e estimar como sua magnitude varia com as tensões aplicadas (relacionadas aos intervalos de diâmetro de poro). No método da abertura morfológica (Vogel, 1997), o meio poroso original é separado excluindo todos os

poros com diâmetros menores que o diâmetro do elemento estruturante utilizado no processo (Figura 2.3j–p). Por esta razão, para valores menores de diâmetro do elemento estruturante (maiores tensões), o cálculo de χ é feito considerando uma maior porosidade acessível (Figura 2.3n), quando comparado ao método fiLMe (Figura 2.3h).

O processo da abertura morfológica funciona como um filtro que preserva a forma e o formato de estruturas maiores que as do elemento estruturante ao custo de remover pequenos objetos (poros) da imagem original (Legland; Arganda-Carreras; Andrey, 2016). Este processo parece impactar menos no cálculo de τ (que é mais dependente da forma do meio poroso), mas como o cálculo de χ é dado pela Equação 2.6, a filtragem de pequenos objetos parece afetar substancialmente os valores de I , B e H , sobretudo os valores de B e H . São esperados para estruturas com baixa conectividade valores maiores de χ (menos negativos ou positivos), uma vez que a tendência desta estrutura é apresentar contagem elevada para I e H . Já para as estruturas mais conectadas são esperados valores menores de χ (mais negativos), pois a tendência dessas estruturas é apresentar grandes contagens para B e menores para I e H (Vogel; Kretschmar, 1996).

Embora se observe diferenças entre χ e τ obtidos pelas duas metodologias (fiLMe e abertura morfológica), o que se pode inferir a respeito da retenção nos meios porosos, em ambos os casos, é convergente (apresentam a mesma tendência). Vogel (1997) reporta em seu trabalho que em um contexto físico, o tamanho do poro crítico, onde a conectividade é perdida, pode ser interpretado como o valor de entrada de ar para a dessorção característica da estrutura. O autor também relata que pode haver um limite onde χ salta de valores negativos para positivos, indicando a presença de gargalos (*bottlenecks*) entre os diferentes tamanhos de poros existentes no sistema poroso. Assim, a partir das análises apresentadas neste artigo, podemos assumir que este é o caso das amostras GB (Figura 2.4). A presença de gargalos nestas amostras ocorreu de forma mais perceptível nas tensões associadas aos maiores valores de τ e menores de χ ou em tensões associadas a diminuições em χ quando analisadas pelo método da abertura morfológica (Vogel, 1997).

Figura 2.4 – (a–c) Curva de retenção de água (CR), (d–f) conectividade de poros (χ), (g–i) tortuosidade (τ) e (j–l) distribuição de tamanho de poros (PSD) em função da tensão aplicada (h) relativa às três amostras de esferas de vidro (GB) estudadas (S_a , M_a e L_a)



Fonte: O autor.

Notas: (a,d,g,j) Amostras com granulometrias menor (S_a), (b,e,h,k) intermediária (M_a) e (c,f,i,l) maior (L_a) são apresentadas nas colunas. Os pontos cheios conectados por linhas foram obtidos

seguindo o método de preenchimento (fiLMe), enquanto os pontos vazados conectados por linhas (gráficos χ e τ) foram obtidos seguindo o método (abertura morfológica) proposto por Vogel (1997). As linhas verticais dividem as CRs em três regiões (da esquerda para a direita: saturação, maior variação da umidade e umidade residual, respectivamente). Detalhes sobre o critério usado para selecionar os intervalos de tensão aplicada podem ser encontrados no Apêndice B. Os diâmetros de poros obtidos por meio de análise de imagem foram convertidos em tensões aplicadas usando a Equação 2.2.

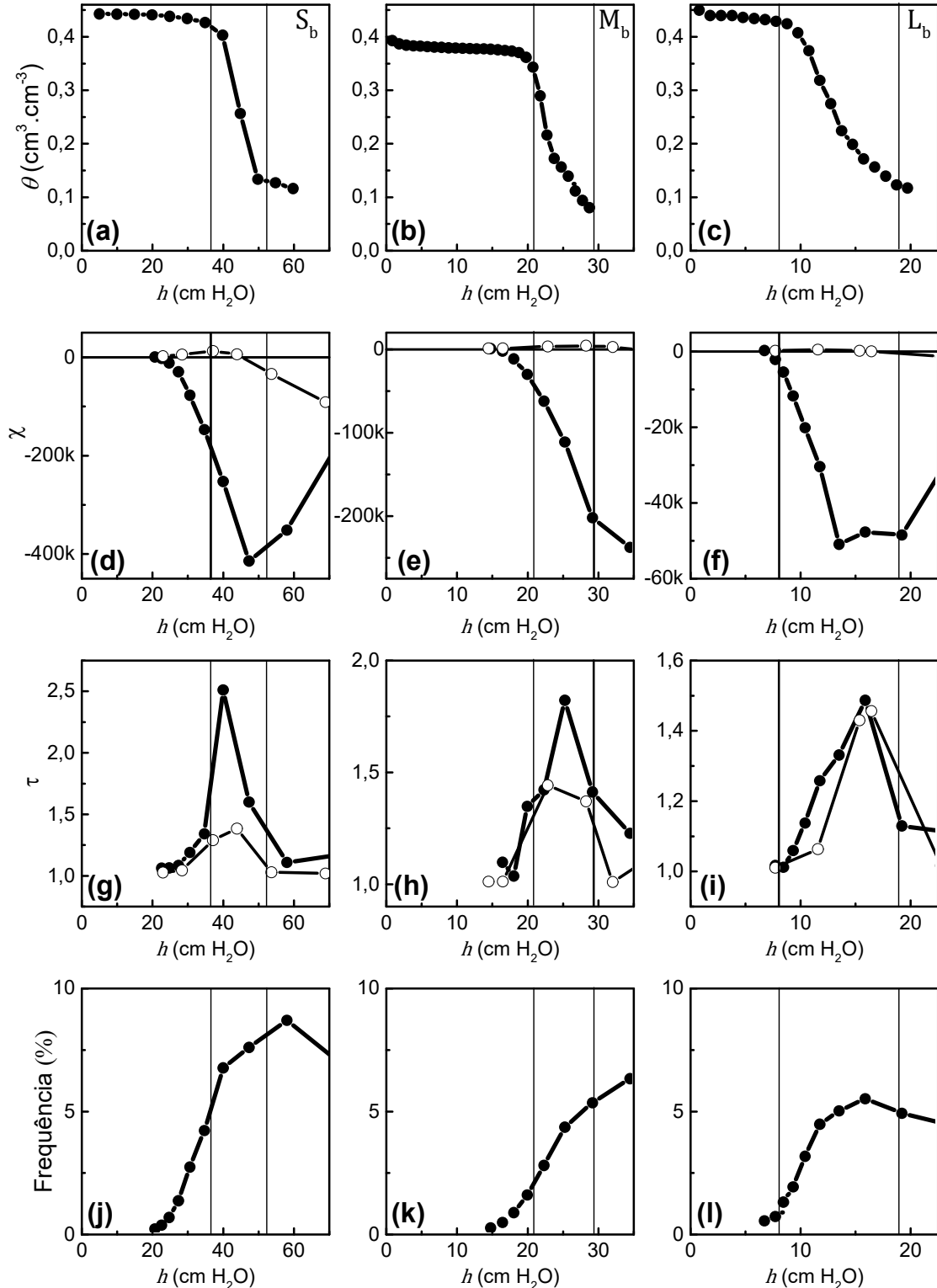
A Figura 2.5 mostra os resultados obtidos para as amostras de SG. O comportamento é similar ao observado para as amostras GB (Figura 2.4). Entretanto, os poros localizados na região de maior variação da umidade na CR para a amostra M_b , mesmo conectados, não apresentaram o menor valor de χ (método fiLMe) (Figura 2.5e). Em relação ao τ (Figura 2.5g–i), notamos uma melhor correlação entre os métodos (fiLMe e abertura morfológica), principalmente para a amostra L_b .

Outra diferença entre o comportamento das amostras SG e GB foi na característica de suas PSDs. O formato das partículas que compuseram as amostras de GB, seus tamanhos e a forma de contato partícula-partícula (Figura 2.3i), produziram configurações menos heterogêneas do espaço poroso, resultando em PSDs com faixa de tensão equivalente estreita. As amostras SG possuem partículas de formato irregular, cujos tamanhos foram definidos pelos intervalos de tamanho de malha da peneira, conforme descrito anteriormente. Assim, o contato partícula-partícula (Figura 2.1c) para essas amostras permitiu muito mais configurações para a criação do espaço poroso (maior complexidade), o que resultou em PSDs mais amplas.

Para todas as amostras de GB e SG, foi verificada uma relação direta entre a conectividade de poros, medida pelo método fiLMe, e a frequência de poros obtida via PSDs. De maneira geral, observamos que aqueles poros que apareciam com mais frequência também eram os mais conectados. Essa característica foi reforçada pelo formato das CRs, que tiveram grande parte de sua água escoada em uma faixa de tensão mais estreita (Figura 2.4a–c e Figura 2.5a–c). Para tensões maiores do que aquelas associadas aos poros mais frequentes observou-se uma redução na frequência de poros (Figura 2.4j–l e Figura 2.5j–l) seguida de uma redução em χ ao usar o método fiLMe (Figura 2.4d–f e Figura 2.5d–f). Isso pode estar relacionado à dessorção e com a proximidade da região de umidade residual da CR (Figura 2.3d), o que significa que mesmo com um aumento na tensão aplicada, não houve

mudanças significativas na umidade; característico de meios porosos compostos por poros desconectados.

Figura 2.5 – (a-c) Curva de retenção de água (CR), (d-f) conectividade de poros (χ), (g-i) tortuosidade (τ) e (j-l) distribuição de tamanho de poros (PSD) apresentada em função da tensão aplicada (h) relativa às três amostras constituídas por grãos de areia (SG) (S_b , M_b e L_b)



Fonte: O autor.

Notas: Os pontos cheios conectados por linha foram obtidos seguindo o método de preenchimento (fiLMe) proposto neste estudo, enquanto os pontos vazados conectados por linha foram obtidos seguindo o método (abertura morfológica) proposto por Vogel (1997). (a,d,g,j) Amostras com granulometrias menor (S_b), (b,e,h,k) intermediária (M_b) e (c,f,i,l) maior (L_b) são apresentadas nas colunas. As linhas verticais dividem as CRs em três regiões (da esquerda para a direita: saturação, maior variação da umidade e umidade residual, respectivamente). Detalhes sobre o critério usado para selecionar os intervalos de tensão aplicada podem ser encontrados no Apêndice B. Os diâmetros de poros obtidos por meio de análise de imagem foram convertidos em tensões aplicadas usando a Equação 2.2.

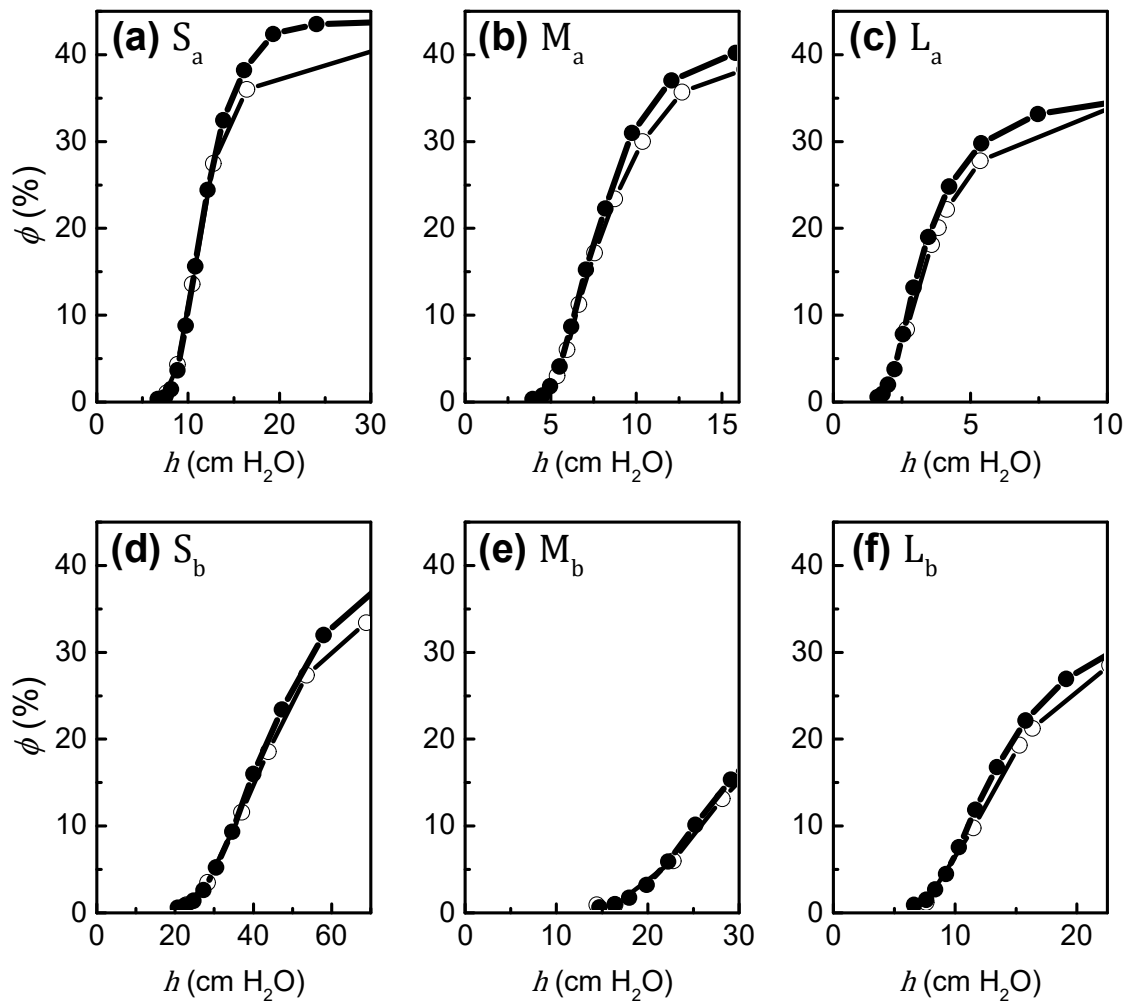
Outra característica interessante observada nos dados das amostras GB e SG foi a presença da maior τ na região de maior variação da umidade. Tal resultado pode parecer contraditório, pois parece razoável supor que seria mais fácil para a água fluir por poros menos tortuosos (Clennell, 1997; Fu; Thomas; Li, 2021; Roque; Costa, 2020). No entanto, menores valores de χ foram observados para esta faixa de tensão, o que está associado a uma maior conectividade dos poros. Observamos que os poros mais conectados, mesmo sendo mais sinuosos, apresentaram as maiores variações de umidade. Assim, os resultados deste estudo permitem inferir que a conectividade dos poros supera a importância da tortuosidade quando se considera o movimento e a redistribuição da água através do espaço poroso.

Para demonstrar a versatilidade do método fiLMe, a Figura 2.6 traz a porosidade acessível ϕ em função da maior tensão aplicada para todos os meios porosos avaliados usando os dois métodos (fiLMe e abertura morfológica). Entretanto, diferentemente do que se fez anteriormente para o método fiLMe, não se utilizou um intervalo de diâmetro de poro, mas sim um limiar.

Os resultados de ϕ avaliados pelo método fiLMe separaram o espaço poroso de maneira similar ao do método da abertura morfológica. No entanto, em todos os casos investigados, ϕ determinado pelo método da abertura morfológica subestima os valores em relação aos do método fiLMe. Essa propriedade física, que está relacionada com o volume de poros contido no volume total do meio poroso (Hillel, 1998), se mostrou sensível ao processamento das imagens, implicando em redução de informação do espaço poroso no método da abertura morfológica em todas as amostras analisadas. Novamente, associou-se essa redução de informação à característica de filtragem no processo da abertura morfológica. Percebeu-se que para as menores tensões (maiores diâmetros do elemento estruturante) o efeito é

minimizado devido ao menor número de poros associados às menores tensões (Figura 2.3j).

Figura 2.6 – Porosidade acessível (ϕ) em função da maior tensão aplicada para todos os meios porosos avaliados pelos dois métodos (fiLMe e abertura morfológica). Os pontos cheios conectados por linha foram obtidos seguindo o método de preenchimento (fiLMe) proposto neste estudo, enquanto os pontos vazados conectados por linha foram obtidos seguindo o método da abertura morfológica (Vogel, 1997). A maior tensão aplicada (h) corresponde à tensão (dada pela Equação 2.2) associada ao diâmetro da esfera utilizada como elemento estruturante (método da abertura morfológica) ou à tensão associada ao diâmetro da esfera d_i , utilizada como limiar (método fiLMe)



Fonte: O autor.

2.4 CONCLUSÃO

Este estudo analisou como os parâmetros morfológicos, como conectividade de poros, tortuosidade, distribuição de tamanho de poros e porosidade acessível,

obtidos por meio de análise de imagem 3D microtomográfica, estavam relacionados a dados experimentais de curva de retenção de meios porosos deformados. De modo geral, a maior variação da umidade na CR foi principalmente relacionada a poros altamente conectados (menor valor de χ) e tortuosos.

Os procedimentos de análise de imagens 3D foram realizados por meio de dois métodos distintos, um desenvolvido especialmente para este estudo denominado método de preenchimento (filMe), e outro baseado no processo da abertura morfológica (Vogel, 1997). Embora os métodos tenham apresentado valores e/ou comportamentos distintos, ambos os métodos nos permitiram chegar às mesmas conclusões. O método filMe despendeu menos tempo de processamento (análise mais rápida) e resultou em menor perda de informações do espaço poroso em relação ao método da abertura morfológica. A análise de tortuosidade e conectividade mostrou que a conectividade dos poros foi mais relevante do que a tortuosidade em relação à retenção e movimentação da água nos meios porosos avaliados.

Por fim, este estudo apresentou resultados importantes que relacionaram propriedades geométricas e morfológicas às características de retenção de água de alguns meios porosos selecionados. Mesmo sendo conduzidos em amostras deformadas, nossos resultados, principalmente os do método filMe, têm um enorme potencial para serem aplicados em meios porosos mais complexos como amostras porosas estruturadas (indeformadas).

REFERÊNCIAS

BORGES, J. A. R.; PIRES, L. F.; CÁSSARO, F. A. M.; AULER, A. C.; ROSA, J. A.; HECK, R. J.; ROQUE, W. L. X-ray computed tomography for assessing the effect of tillage systems on topsoil morphological attributes. **Soil and Tillage Research**, v. 189, p. 25–35, 1 jun. 2019.

BORGES, J. A. R.; PIRES, L. F.; CÁSSARO, F. A. M.; ROQUE, W. L.; HECK, R. J.; ROSA, J. A.; WOLF, F. G. X-ray microtomography analysis of representative elementary volume (REV) of soil morphological and geometrical properties. **Soil and Tillage Research**, v. 182, p. 112–122, 1 out. 2018.

CÁSSARO, F. A. M.; PIRES, L. F.; SANTOS, R. A. dos; GIMÉNEZ, D.; REICHARDT, K. Modified Haines' funnel: Soil water retention curves of soil samples near saturation. **Revista Brasileira de Ciencia do Solo**, v. 32, n. 6, p. 2555–2562, 2009.

CÁSSARO, F. A. M.; POSADAS DURAND, A. N.; GIMENEZ, D.; PEDRO VAZ, C. M. Pore-Size Distributions of Soils Derived using a Geometrical Approach and Multiple Resolution MicroCT Images. **Soil Science Society of America Journal**, v. 81, n. 3, p. 468–476, 1 maio 2017.

CLENNELL, M. Ben. Tortuosity: a guide through the maze. **Geological Society, London, Special Publications**, v. 122, n. 1, p. 299 LP – 344, 1 jan. 1997.

CUNHA, A. R.; FERNANDES, C. P.; DOS SANTOS, L. O. E.; KRONBAUER, D. P.; MANTOVANI, I. F.; MOREIRA, A. C.; SCHMITT, M. A phenomenological connectivity measure for the pore space of rocks. 27 nov. 2020.

DOUBE, M.; KLOSOWSKI, M. M.; ARGANDA-CARRERAS, I.; CORDELIÈRES, F. P.; DOUGHERTY, R. P.; JACKSON, J. S.; SCHMID, B.; HUTCHINSON, J. R.; SHEFELBINE, S. J. BoneJ: Free and extensible bone image analysis in ImageJ. **Bone**, v. 47, n. 6, p. 1076–1079, 1 dez. 2010.

FAN, Z.; HU, C.; ZHU, Q.; JIA, Y.; ZUO, D.; DUAN, Z. Three-dimensional pore characteristics and permeability properties of calcareous sand with different particle sizes. **Bulletin of Engineering Geology and the Environment**, v. 80, n. 3, p. 2659–2670, 13 mar. 2021.

FERREIRA, T. R.; PIRES, L. F.; WILDENSCHILD, D.; BRINATTI, A. M.; BORGES, J. A. R.; AULER, A. C.; REIS, A. M. H. dos. Lime application effects on soil aggregate properties: Use of the mean weight diameter and synchrotron-based X-ray μ CT techniques. **Geoderma**, v. 338, p. 585–596, mar. 2019.

FERREIRA, T. R.; PIRES, L. F.; WILDENSCHILD, D.; HECK, R. J.; ANTONINO, A. C. D. X-ray microtomography analysis of lime application effects on soil porous system. **Geoderma**, v. 324, p. 119–130, ago. 2018.

FU, J.; THOMAS, H. R.; LI, C. Tortuosity of porous media: Image analysis and physical simulation. **Earth-Science Reviews**, v. 212, p. 103439, 1 jan. 2021.

GALDOS, M. V.; BROWN, E.; ROSOLEM, C. A.; PIRES, L. F.; HALLETT, P. D.; MOONEY, S. J. Brachiaria species influence nitrate transport in soil by modifying soil structure with their root system. **Scientific Reports**, v. 10, n. 1, p. 1–11, 1 dez. 2020.

GALDOS, M. V.; PIRES, L. F.; COOPER, H. V.; CALONEGO, J. C.; ROSOLEM, C. A.; MOONEY, S. J. Assessing the long-term effects of zero-tillage on the macroporosity of Brazilian soils using X-ray Computed Tomography. **Geoderma**, v. 337, p. 1126–1135, 1 mar. 2019.

GUBER, A.; KUTLU, T.; RIVERS, M.; KRAVCHENKO, A. Mass-balance approach to quantify water distribution in soils based on X-ray computed tomography images. **European Journal of Soil Science**, v. 72, n. 2, p. 578–592, 27 mar. 2021.

HAJNOS, M.; LIPIEC, J.; ŚWIEBODA, R.; SOKOŁOWSKA, Z.; WITKOWSKA-WALCZAK, B. Complete characterization of pore size distribution of tilled and orchard soil using water retention curve, mercury porosimetry, nitrogen adsorption,

and water desorption methods. **Geoderma**, v. 135, p. 307–314, nov. 2006.

HILLEL, D. **Environmental soil physics: fundamentals, applications, and environmental considerations**. Amsterdam: Elsevier Science, 2014.

HOUSTON, A. N.; OTTEN, W.; FALCONER, R.; MONGA, O.; BAVEYE, P. C.; HAPCA, S. M. Quantification of the pore size distribution of soils: Assessment of existing software using tomographic and synthetic 3D images. **Geoderma**, v. 299, p. 73–82, ago. 2017.

JUYAL, A.; EICKHORST, T.; FALCONER, R.; BAVEYE, P. C.; SPIERS, A.; OTTEN, W. Control of Pore Geometry in Soil Microcosms and Its Effect on the Growth and Spread of *Pseudomonas* and *Bacillus* sp. **Frontiers in Environmental Science**, v. 6, 13 jul. 2018.

KATUWAL, S.; NORGAARD, T.; MOLDRUP, P.; LAMANDÉ, M.; WILDENSCHILD, D.; DE JONGE, L. W. Linking air and water transport in intact soils to macropore characteristics inferred from X-ray computed tomography. **Geoderma**, v. 237–238, p. 9–20, jan. 2015.

KOESTEL, J.; FUKUMASU, J.; GARLAND, G.; LARSBO, M.; NIMBLAD SVENSSON, D. Approaches to delineate aggregates in intact soil using X-ray imaging. **Geoderma**, v. 402, p. 115360, nov. 2021.

KRAVCHENKO, A. N.; NEGASSA, W. C.; GUBER, A. K.; RIVERS, M. L. Protection of soil carbon within macro-aggregates depends on intra-aggregate pore characteristics. **Scientific Reports**, v. 5, n. 1, p. 16261, 6 dez. 2015.

LEGLAND, D.; ARGANDA-CARRERAS, I.; ANDREY, P. MorphoLibJ: integrated library and plugins for mathematical morphology with ImageJ. **Bioinformatics**, v. 32, n. 22, p. 3532–3534, 15 nov. 2016.

LEUE, M.; UTEAU-PUSCHMANN, D.; PETH, S.; NELLESEN, J.; KODEŠOVÁ, R.; GERKE, H. H. Separation of Soil Macropore Types in Three-Dimensional X-Ray Computed Tomography Images Based on Pore Geometry Characteristics. **Vadose Zone Journal**, v. 18, n. 1, p. 1–13, 31 jan. 2019.

LIPIEC, J.; HAJNOS, M.; ŚWIEBODA, R. Estimating effects of compaction on pore size distribution of soil aggregates by mercury porosimeter. **Geoderma**, v. 179–180, p. 20–27, jun. 2012.

LIU, X.; ZHOU, A.; LI, J.; FENG, S. Reproducing micro X-ray computed tomography (microXCT) observations of air–water distribution in porous media using revised pore-morphology method. **Canadian Geotechnical Journal**, v. 57, n. 1, p. 149–156, jan. 2020.

MADY, A. Y.; SHEIN, E. Modelling and validation hysteresis in soil water retention curve using tomography of pore structure. *International Journal of Water*, v. 12, n. 4, p. 370–381, 2018.

MÜNCH, B.; HOLZER, L. Contradicting Geometrical Concepts in Pore Size Analysis Attained with Electron Microscopy and Mercury Intrusion. **Journal of the American Ceramic Society**, v. 91, n. 12, p. 4059–4067, dez. 2008.

NGOM, N. F.; GARNIER, P.; MONGA, O.; PETH, S. Extraction of three-dimensional soil pore space from microtomography images using a geometrical approach. **Geoderma**, v. 163, n. 1–2, p. 127–134, 15 jun. 2011.

OLIVEIRA, J. A. T.; CÁSSARO, F. A. M.; PIRES, L. F. The porous size distribution obtained and analyzed by free access software. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 42, 10 ago. 2020.

OLIVEIRA, J. A. T.; CÁSSARO, F. A. M.; PIRES, L. F. Estimating soil porosity and pore size distribution changes due to wetting-drying cycles by morphometric image analysis. **Soil and Tillage Research**, v. 205, p. 104814, 1 jan. 2021.

PARK, J.; HYUN, C.-U.; PARK, H.-D. Changes in microstructure and physical properties of rocks caused by artificial freeze–thaw action. **Bulletin of Engineering Geology and the Environment**, v. 74, n. 2, p. 555–565, 20 maio 2015.

PIRES, L. F.; BORGES, J. A. R.; ROSA, J. A.; COOPER, M.; HECK, R. J.; PASSONI, S.; ROQUE, W. L. Soil structure changes induced by tillage systems. **Soil and Tillage Research**, v. 165, p. 66–79, jan. 2017.

PIRES, L. F.; ROQUE, W. L.; ROSA, J. A.; MOONEY, S. J. 3D analysis of the soil porous architecture under long term contrasting management systems by X-ray computed tomography. **Soil and Tillage Research**, v. 191, p. 197–206, ago. 2019.

RAB, M. A.; HALING, R. E.; AARONS, S. R.; HANNAH, M.; YOUNG, I. M.; GIBSON, D. Evaluation of X-ray computed tomography for quantifying macroporosity of loamy pasture soils. **Geoderma**, v. 213, p. 460–470, jan. 2014.

REIS, A. M. H. dos; AULER, A. C.; ARMINDO, R. A.; COOPER, M.; PIRES, L. F. Micromorphological analysis of soil porosity under integrated crop-livestock management systems. **Soil and Tillage Research**, v. 205, p. 104783, jan. 2021.

RIDLER, T. W.; CALVARD, S. Picture Thresholding Using an Iterative Slection Method. **IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics**, v. SMC-8, n. 8, p. 630–632, 1978.

ROQUE, W. L.; COSTA, R. R. A. A plugin for computing the pore/grain network tortuosity of a porous medium from 2D/3D MicroCT image. **Applied Computing and Geosciences**, v. 5, p. 100019, 1 mar. 2020.

SCHLÜTER, S.; VOGEL, H.-J. Analysis of Soil Structure Turnover with Garnet Particles and X-Ray Microtomography. **PLOS ONE**, v. 11, n. 7, p. e0159948, 25 jul. 2016.

SCHNEIDER, C. A.; RASBAND, W. S.; ELICEIRI, K. W. NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. **Nature Methods**, v. 9, n. 7, p. 671–675, 28 jul. 2012.

SHOU, Y. D.; ZHAO, Z.; ZHOU, X. P. Sensitivity analysis of segmentation techniques and voxel resolution on rock physical properties by X-ray imaging. **Journal of Structural Geology**, v. 133, p. 103978, 1 abr. 2020.

SILVA, T. S. da; PULIDO-MONCADA, M.; SCHMIDT, M. R.; KATUWAL, S.; SCHLÜTER, S.; KÖHNE, J. M.; MAZURANA, M.; JUHL MUNKHOLM, L.; LEVIEN, R. Soil pore characteristics and gas transport properties of a no-tillage system in a subtropical climate. **Geoderma**, v. 401, p. 115222, nov. 2021.

SINGH, J.; SINGH, N.; KUMAR, S. X-ray computed tomography-measured soil pore parameters as influenced by crop rotations and cover crops. **Soil Science Society of America Journal**, v. 84, n. 4, p. 1267–1279, 31 jul. 2020.

SONG, S.; DING, Q.; WEI, J. Improved algorithm for estimating pore size distribution from pore space images of porous media. **Physical Review E**, v. 100, n. 5, p. 053314, 21 nov. 2019.

TORIWAKI, J.; YONEKURA, T. Euler number and connectivity indexes of a three dimensional digital picture. **Forma-Tokyo-**, v. 17, n. 3, p. 183–209, 2002.

TSENG, C. L.; ALVES, M. C.; CRESTANA, S. Quantifying physical and structural soil properties using X-ray microtomography. **Geoderma**, v. 318, p. 78–87, maio 2018.

VAZ, C. M. P.; DE MARIA, I. C.; LASSO, P. O.; TULLER, M. Evaluation of an Advanced Benchtop Micro-Computed Tomography System for Quantifying Porosities and Pore-Size Distributions of Two Brazilian Oxisols. **Soil Science Society of America Journal**, v. 75, n. 3, p. 832–841, 1 maio 2011.

VOGEL, H. J. Morphological determination of pore connectivity as a function of pore size using serial sections. **European Journal of Soil Science**, v. 48, n. 3, p. 365–377, 1 set. 1997.

VOGEL, H. J.; KRETZSCHMAR, A. Topological characterization of pore space in soil - Sample preparation and digital image-processing. **Geoderma**, v. 73, n. 1–2, p. 23–38, 1 set. 1996.

XIAOQIN, S.; DONGLI, S.; YUANHANG, F.; HONGDE, W.; LEI, G. Three-dimensional fractal characteristics of soil pore structure and their relationships with hydraulic parameters in biochar-amended saline soil. **Soil and Tillage Research**, v. 205, p. 104809, jan. 2021.

YU, H.; LU, C.; CHEN, W.; LI, H. Permeability changes in fractured Tamusu mudstone in the context of radioactive waste disposal. **Bulletin of Engineering Geology and the Environment**, v. 80, n. 10, p. 7945–7957, 20 out. 2021.

ZHOU, H.; FANG, H.; MOONEY, S. J.; PENG, X. Effects of long-term inorganic and organic fertilizations on the soil micro and macro structures of rice paddies. **Geoderma**, v. 266, p. 66–74, mar. 2016.

3 UM ALGORITMO UNIFICADO PARA O MÉTODO YOUNG-LAPLACE APLICADO A MEIOS POROSOS

RESUMO

Os algoritmos baseados na equação de Young-Laplace para simular o fluxo conduzido por capilares têm sido usados na pesquisa de meios porosos por mais de duas décadas. No entanto, a falta de uma descrição matemática uniforme dificulta uma aplicação mais ampla desses algoritmos, bem como impede sua comparação. Após realizar uma revisão detalhada das publicações mais importantes da área, propomos neste capítulo um algoritmo unificado. Esta estrutura resultante (algoritmo) é capaz de lidar com quatro situações físicas distintas: drenagem ou embebição, com o fluido de deslocamento sendo compressível ou incompressível. Além disso, não há restrição quanto à geometria ou à distribuição de fluido inicial utilizada. O algoritmo proposto pode simular molhabilidade variável ou mista, mesmo por embebição, o que ainda não foi descrito na literatura. Finalmente, fornecemos um código aberto C++ eficiente para o algoritmo unificado proposto e também muitos exemplos de seu uso.

3.1 INTRODUÇÃO

O método numérico discutido neste estudo recebeu diferentes nomes na literatura ao longo dos anos, sendo eles: *Full Morphology* (Schulz et al., 2007; Vogel et al., 2005), *Pore-morphology-based simulation* (Adalsteinsson; Hilpert, 2006; Hilpert; Miller, 2001; Schulz; Wargo; Kumbur, 2015; Shikhov; Arns, 2015), *Pore Morphology* (Mohammadmoradi; Kantzas, 2016; Mu; Sungkorn; Toelke, 2016), *Morphological approach* (Berg et al., 2016) e *Capillary Drainage Transform* (Mostaghimi et al., 2017; Norouzi; Apourvari; Arns, 2016). O que todos esses métodos têm em comum é o fato de serem baseados na equação de Young-Laplace. De agora em diante, a técnica será referida como Método de Young-Laplace (YLM). Esta escolha pretende evidenciar o princípio físico por trás do método, a equação de Young-Laplace (Equação 3.1), que relaciona as forças envolvidas em deslocamentos capilares.

O YLM foi proposto independentemente no final dos anos 1990 e início dos anos 2000 por Hazlett (Hazlett, 1995), Magnani (Magnani, 1996) e Magnani et al. (Magnani et al., 2000). No entanto, a maior parte da literatura na área creditou Hazlett (Hazlett, 1995) como o único criador do método. Partindo da hipótese de que a invasão de fluidos em um meio poroso é exclusivamente limitada pela pressão capilar, eles propuseram uma sequência de etapas para simular processos de embebição e drenagem, ainda que nenhum nome fosse dado a esse novo método. O YLM é capaz de determinar a distribuição espacial de dois fluidos imiscíveis dentro de qualquer geometria porosa para um valor de pressão capilar. Este resultado é obtido assumindo que a distribuição do fluido depende apenas do equilíbrio mecânico entre a diferença de pressão aplicada e as forças capilares. Com esta abordagem, os efeitos dinâmicos são negligenciados e a invasão do fluido é pensada como sendo um processo quase estático. Esta é uma hipótese forte que permite um método computacional muito eficiente e tem um grande impacto na aplicabilidade prática da técnica.

Apesar das limitações de aplicabilidade, restrito a processos quase estáticos, um interesse renovado no método surgiu nos últimos anos (Berg et al., 2016; Ellman et al., 2024; Liu et al., 2020). Uma possível razão para esse maior interesse é a expansão no acesso a ferramentas que possibilitam a reconstrução de imagens 3D (e.g., microtomografia 3D de raios X) e também na mensuração de propriedades físicas por intermédio da análise de imagem. Como o YLM não faz suposições quanto à geometria e tem baixo custo computacional, é uma excelente ferramenta para a primeira análise de imagens digitais de meios porosos.

A maioria das aplicações importantes na área de meios porosos foi publicada apenas 10 anos após a criação do método, quando o uso de imagens digitais de rochas obtidas por μ CT começou a ganhar popularidade. Vogel et al. (2005) compararam o uso do YLM, *Lattice-Boltzmann Method* (LBM) e *Pore Network Modeling* (PNM) para calcular a curva capilar. Os autores usaram imagens μ CT de um cilindro de borosilicato com tamanho de 98^3 voxels. Verificou-se que o custo computacional do YLM foi semelhante ao do PNM, que por sua vez foi milhares de vezes menor que o do LBM. É importante enfatizar que tanto o LBM quanto o PNM podem determinar as propriedades de transporte de fluxo como a permeabilidade, enquanto o YLM é limitado a processos quase estático, como dito anteriormente. Com relação à curva capilar, todos os métodos citados apresentaram resultados

equivalentes. Schulz et al. (2007) aplicaram o YLM para estudar a camada de difusão de gás dentro de uma célula de combustível de eletrólito polimérico, pois a presença de água nos locais de reação dificulta a eficiência da célula. Shikhov e Arns (2015) empregaram o YLM para simular três experimentos de pressão capilar: placa porosa, centrífuga e intrusão de mercúrio. Os resultados obtidos revelaram que as heterogeneidades desempenham um papel significativo nos resultados experimentais e concluíram que as simulações numéricas usando YLM podem ajudar a delinear melhor os experimentos de laboratório.

A determinação da permeabilidade relativa empregando o YLM é outra aplicação interessante que surgiu nos últimos anos (BERG et al., 2016; Mohammadmoradi; Kantzas, 2016, 2017; Mohammadmoradi, 2016). Embora limitado a fenômenos quase estáticos, o método é combinado com métodos dinâmicos para avaliar esta propriedade. Nesta abordagem, o YLM calcula a distribuição espacial dos fluidos em uma pressão capilar de interesse então a distribuição é usada como dados de entrada em um método dinâmico (como o LBM) para determinar a taxa de fluxo na fase de percolação.

A falta de um nome próprio e uniforme é uma dificuldade menor que alguém enfrentará ao tentar aplicar o YLM. Um obstáculo maior é a ausência de informações detalhadas sobre sua implementação. Com exceção de alguns trabalhos (Hilpert; Miller, 2001; Magnani et al., 2000), a maioria dos estudos se restringe a descrever características gerais do método, mesmo quando são propostas alterações relevantes (Berg et al., 2016). Frequentemente, aspectos computacionais críticos que podem impactar a eficiência computacional não são devidamente discutidos. Isso impede a comparação dos resultados obtidos com diferentes implementações, dificulta a replicação de simulações computacionais para melhorar o algoritmo e não revela se novos desenvolvimentos afetam a eficiência computacional.

Além da capacidade do YLM em determinar, para um valor de pressão capilar, a distribuição espacial de equilíbrio entre dois fluidos imiscíveis dentro de qualquer geometria porosa, o método possibilita a simulação da curva de retenção por drenagem ou embebição. Outra opção do YLM é de modificar o ângulo de contato entre o fluido e o sólido, simulando diferentes condições de molhabilidade. Desta forma, considerando a versatilidade apresentada pelo método, seu baixo custo computacional e os avanços na medida de propriedades físicas por intermédio

da análise de imagem, o YLM apresenta-se como uma ferramenta promissora para a análise de retenção em meios porosos.

Neste estudo, apresentamos um algoritmo unificado para o Método Young-Laplace, onde ambos os processos de drenagem e embebição são considerados em uma única estrutura. Ele incorpora várias melhorias existentes para simulação de drenagem (Hilpert; Miller, 2001; Schulz; Wargo; Kumbur, 2015) e descreve corretamente a presença de gânglios (quantidades de fluido aprisionadas no espaço poroso, como bolhas). Uma descrição mais detalhada das melhorias implementadas nos trabalhos de Hilpert e Miller (Hilpert; Miller, 2001) e Schutz et al. (Schulz; Wargo; Kumbur, 2015) é feito no Apêndice D. Mais do que apenas um agrupamento de trabalhos anteriores, propomos um novo e coerente formalismo matemático que simplifica o entendimento do método e estabelece as bases sobre as quais novas melhorias podem ser propostas. Além disso, um código C++ eficiente usando essa nova estrutura é disponibilizado usando o software GNU GPLv3.

O capítulo está organizado da seguinte forma: 1) na seção 3.2 descrevemos alguns conceitos físicos básicos sobre YLM; 2) na seção 3.3 é apresentado nosso algoritmo unificado para o YLM e sua descrição matemática formal usando a notação de operações de conjuntos e 3) na seção 3.4, discutimos o YLM para o caso de embebição, que, até agora, não é uma questão bem abordada. Mostramos também que a correção de Hilpert e Miller (Hilpert; Miller, 2001) não precisa ser aplicada neste caso e também revelamos como aplicar os ângulos de contato variáveis (Schulz; Wargo; Kumbur, 2015) para os processos de embebição. O código está disponibilizado na seção 3.5. Por fim, a seção 3.6 sintetiza as conclusões do capítulo.

3.2 CONCEITOS BÁSICOS

O principal objetivo do YLM é encontrar a distribuição espacial do fluido invasor dentro de um meio poroso, sem empregar equações dinâmicas. Uma vez que se limita à previsão dos estados de equilíbrio da pressão capilar é comumente considerado como um método quase-estático.

O YLM emprega a equação de Young-Laplace para determinar a curvatura na interface do líquido nas fases não molhante e molhante (Tiab; Donaldson, 2015).

Além disso, o método emprega uma aproximação de que os dois raios de curvatura (R) são iguais, o que, para um tubo capilar cilíndrico resulta em:

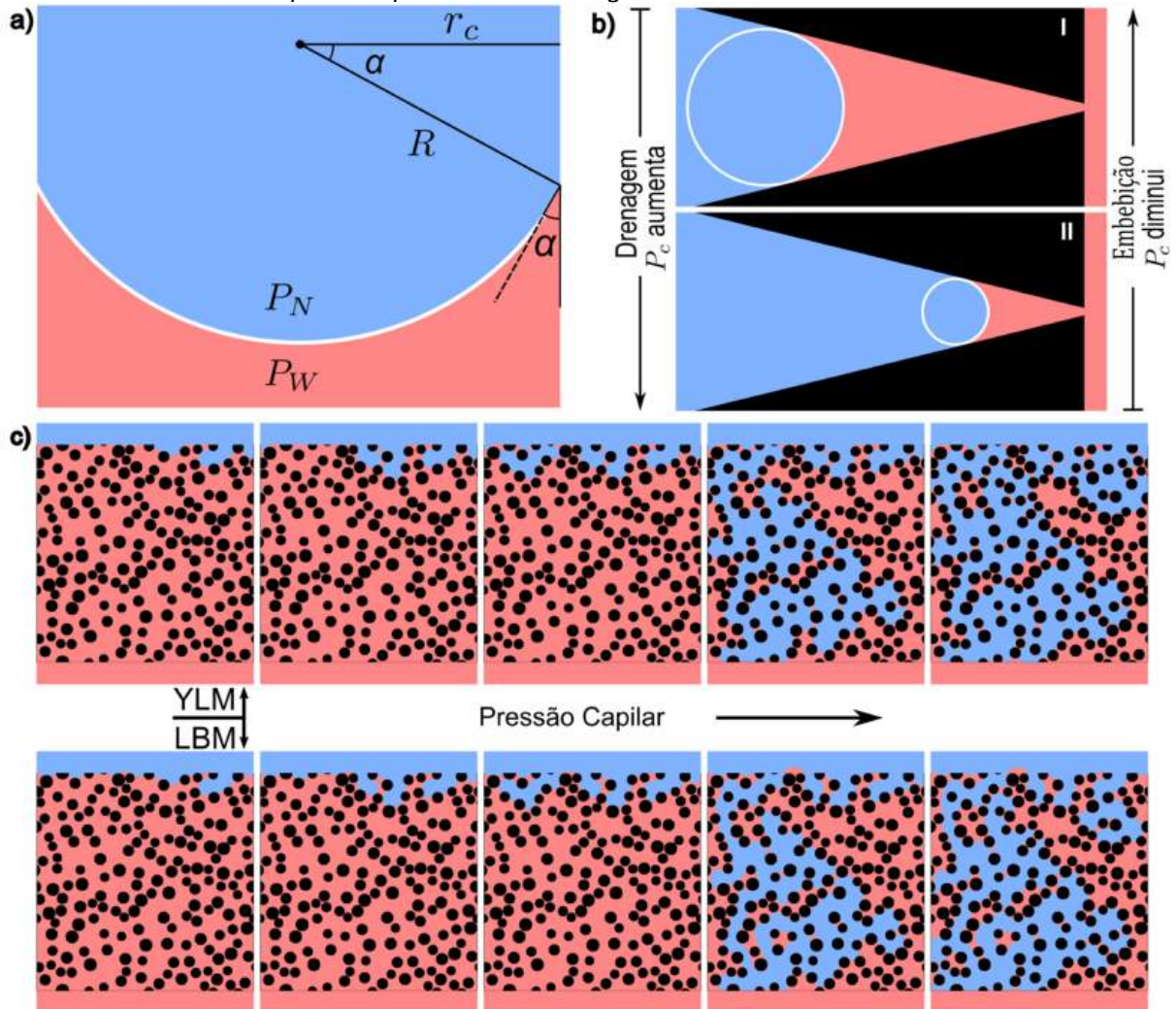
$$P_c = P_N - P_W = \frac{2\sigma \cos\alpha}{r_c} \quad (3.1)$$

onde P_c é a pressão capilar, ou seja, a diferença entre a pressão nas fases não molhante (P_N) e molhante (P_W), e σ é a tensão interfacial. Conforme mostrado na Figura 3.1a, α é o ângulo de contato do fluido molhante e r_c é o raio capilar ($r_c = R \cos\alpha$).

Da Equação 3.1, notamos que se a diferença de pressão aumentar, então o equilíbrio entre as forças só é possível se o raio de curvatura da interface (ou o raio capilar) diminuir. A Figura 3.1b mostra como as regiões ocupadas por cada fluido são afetadas pela mudança no capilar ou pressão aplicada para um tubo capilar com seção transversal variável. Na seção superior, o fluido não molhante (azul) não pode acessar a parte mais estreita do canal porque um valor de baixa pressão corresponde a um grande raio de curvatura. Na seção mais estreita, a diferença de pressão é aumentada e o novo equilíbrio é relacionado a raios menores. A ideia principal por trás do YLM, conforme proposta por Hazlett (Hazlett, 1995) e Magnani (Magnani, 1996) surgiu de uma ideia simples. Considerando um ângulo de contato nulo e um dado valor de P_c , uma região só pode ser ocupada pelo fluido não molhante se for possível inscrever uma esfera de raio $R = 2\sigma/P_c$ dentro desta região.

A Figura 3.1b apresenta cenários onde os dois fluidos estão estaticamente em equilíbrio. Na ausência de movimento do fluido, os dois fluidos devem permanecer nesta configuração. Se um processo dinâmico de invasão é realizado com baixo número de capilares (quando as forças capilares são dominantes sobre as viscosas), então esperamos que o sistema passe por essas configurações durante o processo de invasão. Assim, encontrar esses estados também é necessário para a compreensão dos processos dinâmicos.

Figura 3.1 – Esquema mostrando os processos de drenagem e embebição pelo método de Young-Laplace (YLM). Os fluidos não molhantes e molhantes são apresentados em azul e vermelho, respectivamente. a) Ascensão capilar de um fluido molhante em um tubo cilíndrico. A figura representa a seção longitudinal do tubo. b) Dois estados de equilíbrio para diferentes valores da pressão capilar (P_c). $P_c^{(I)} < P_c^{(II)}$, resultando em um raio de curvatura maior para o caso I. c) Comparação entre os estados de equilíbrio obtidos pelo YLM e LBM para um processo de drenagem



Fonte: O autor.

Durante a drenagem, o aumento da pressão associada a injeção do fluido não molhante desloca o fluido molhante que inicialmente preenche o meio poroso. O aumento ocorre em pequenos passos para permitir que os fluidos alcancem novas configurações de equilíbrio. Por outro lado, a embebição ocorre quando o fluido molhante invade a região previamente preenchida pelo fluido não molhante quando a pressão deste é diminuída. Utilizando como ilustração a Figura 3.1b, durante a drenagem o sistema passaria dos estados I para II, enquanto que para a embebição a evolução da frente molhante é no sentido contrário.

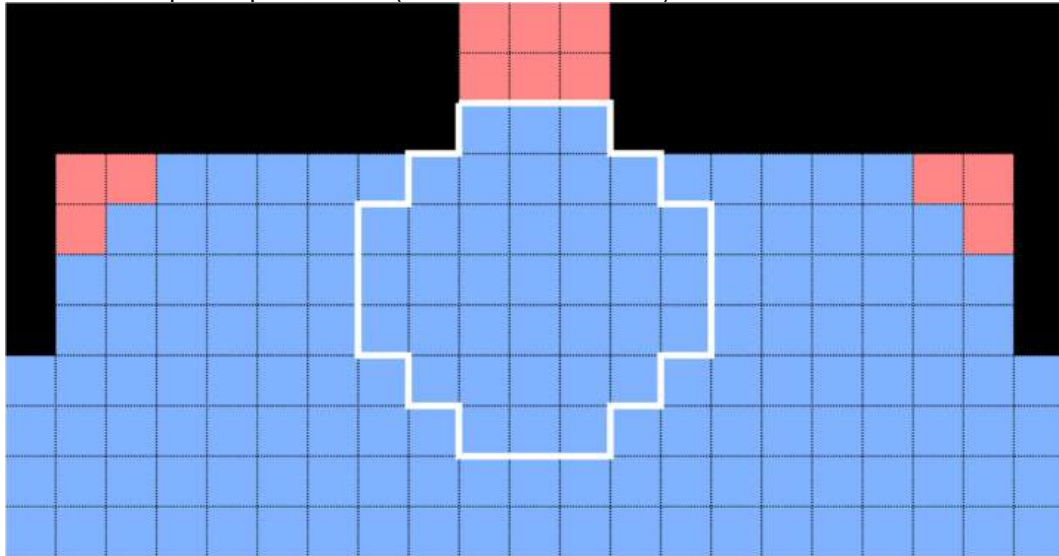
A Figura 3.1c mostra uma comparação entre os estados de equilíbrio para uma drenagem previstos pelo YLM e pelo LBM (Huang et al., 2007; Shan; Chen, 1993; Shan; Doolen, 1995; Wolf; Siebert; Surmas, 2020). Apesar de algumas pequenas diferenças, os resultados do YLM são bastante próximos aos do LBM, mostrando que o método pode prever os estados de equilíbrio estático desse processo de invasão gradual.

3.3 O ALGORITMO UNIFICADO

O YLM é aplicado a imagens segmentadas bidimensionais (2D) ou tridimensionais (3D); o algoritmo descrito funciona em ambos os casos sem qualquer adaptação. No entanto, para sermos coerentes com as imagens utilizadas no nosso estudo, usaremos expressões relacionadas ao caso 2D, como “pixel” e “círculo” ao invés de “voxel” e “esfera”.

As operações sobre imagens geralmente requerem *loops* iterados sobre todos os seus pixels. Isso ocorre, por exemplo, ao determinar as regiões de uma imagem onde um círculo pode ser inscrito sem sobreposição de pixels sólidos, conforme ilustrado na Figura 3.2. Uma primeira abordagem é “mover” o círculo sobre toda a imagem verificando as regiões de sobreposição dos pixels sólidos. Infelizmente, isso leva a operações da ordem de $\mathcal{O}(n^2)$ onde n é o número de pixels na imagem. É algo inviável computacionalmente se aplicado a meios porosos digitais tridimensionais, como imagens 3D de μ CT. Adicionalmente, o YLM requer que essas regiões sejam encontradas para diferentes raios do círculo (cada raio esta associado a um valor P_c dado pela Equação 3.1); então é essencial que o algoritmo não exija que todo o cálculo seja refeito para cada novo valor. Assim, para obter um algoritmo YLM eficiente, essa questão deve ser abordada com cuidado.

Figura 3.2 – Determinação dos pixels dentro da região porosa que podem ser ocupados por um círculo de 7 pixels de diâmetro (região delimitada pela linha branca). Os pixels pretos representam a região sólida enquanto que os pixels vermelhos são os que não puderam ser ocupados pelo círculo (elemento estruturante)



Fonte: O autor.

Até onde sabemos, não há nenhum estudo descrevendo em detalhes como implementar o YLM de forma eficiente. A solução é usar algoritmos de Morfologia Matemática (MM) (Soille, 2004), pois permitem descobrir a região ocupada por um círculo predeterminado, com uma operação de baixíssimo custo computacional chamada abertura (uma discussão mais detalhada sobre MM é abordada no Apêndice C). Esta operação é realizada com o auxílio da Transformada de Distância Euclidiana (EDT), que só precisa ser executada uma vez para cada imagem. Então, quando essas regiões são encontradas, outro algoritmo é usado para descobrir as regiões conectadas à fonte do fluido invasor.

Embora as melhorias relacionadas a utilização da MM às simulações de drenagem tenham sido mencionadas nas seções anteriores, existem algumas questões importantes que ainda não abordamos. Entre elas estão: (i) o comportamento compressível do fluido deslocado, (ii) o uso da MM em simulações de embebição e (iii) o tratamento de bolhas isoladas do fluido invasor (gânglios). Todas essas questões geralmente desempenham um papel significativo em problemas práticos como na retenção de líquidos em meios porosos, e.g., água retida no solo.

Estudos anteriores (Magnani, 1996; Magnani et al., 2000) dedicaram alguma atenção a essas questões. No entanto, ao tentar adaptar o YLM a alguns casos

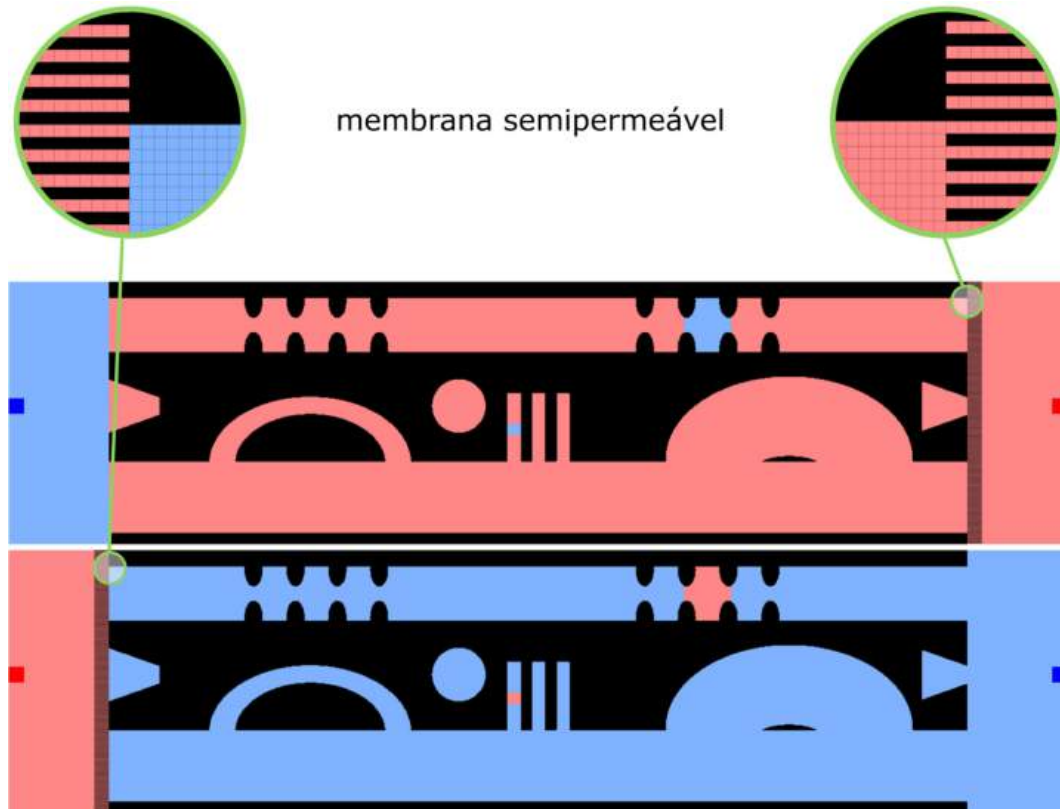
selecionados, os autores criaram inúmeras nomenclaturas e notações, que agregaram significativa complexidade ao algoritmo. Conforme descrito na seção 3.1, esses são fatores limitantes para a adoção mais ampla do YLM. Neste estudo, desenvolvemos um algoritmo unificado que combina essas diferentes soluções em uma abordagem mais simples.

3.3.1 Geometria de referência

A geometria de referência apresentada por Mohammadmoradi e Kantzas (2016) foi adaptada para testar e exemplificar o algoritmo unificado. Nossa geometria de referência é mostrada na Figura 3.3. Várias situações encontradas, por exemplo, em meios porosos contendo água/óleo foram incorporadas: gânglios, poros sem saída, poros isolados e canais com diferentes formas e tamanhos. Os fluidos molhantes (W) e não molhante (N) são representados pelas cores vermelha e azul, respectivamente. A figura superior representa o estado inicial da drenagem e a figura inferior o da embebição. Em ambos os casos, a entrada está posicionada no lado esquerdo e a saída no lado direito do meio poroso. Assim, os quadrados azul escuro e vermelho escuro são a fonte ou sumidouro de cada fluido, dependendo do caso.

Uma membrana semipermeável foi adicionada em locais diferentes em cada caso. No processo de drenagem, esta membrana é posicionada logo antes da saída para garantir que o máximo de poros seja invadido antes que o fluido finalmente percole. Para o processo de embebição, a membrana está localizada após a entrada para evitar que o fluido invasor preencha toda a geometria em uma única etapa de pressão.

Figura 3.3 – Geometria de referência usada para analisar e demonstrar o algoritmo unificado. As imagens superior e inferior representam a distribuição inicial de fluidos para drenagem e embebição, respectivamente. Os fluidos molhantes e não molhantes são representados, respectivamente, pelas cores vermelha e azul. Em ambos os casos, a entrada está posicionada no lado esquerdo e a saída no lado direito do meio. Assim, os quadrados azul escuro e vermelho escuro são a fonte ou sumidouro de cada fluido, dependendo do caso

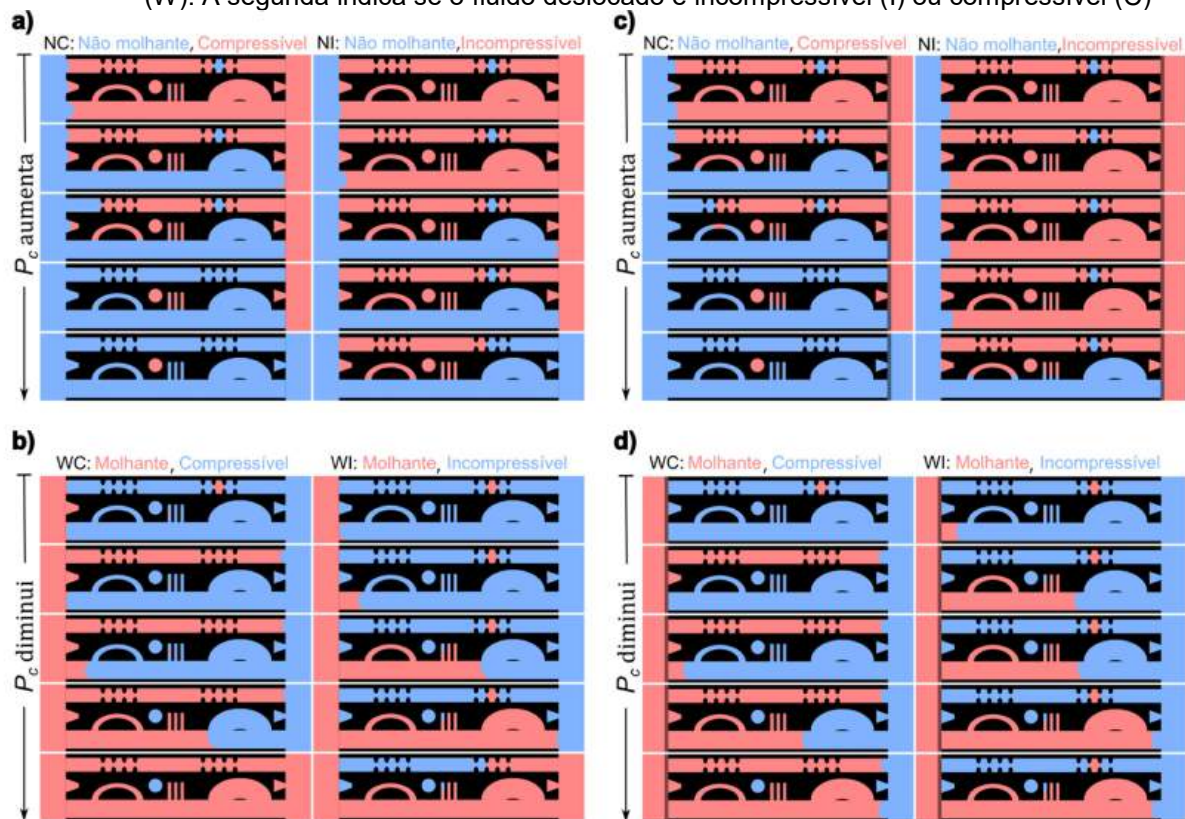


Fonte: O autor.

As Figuras 3.4a e 3.4b mostram os estados de equilíbrio para a drenagem e embebição, respectivamente, com um ângulo de contato de 0° . O caso para um ângulo de contato de 45° é mostrado na Figura 3.4c e na Figura 3.4d. Cada caso é representado por um código de duas letras. A primeira diz respeito à molhabilidade do fluido invasor: não molhante (N) ou molhante (W). A segunda indica se o fluido deslocado é incompressível (I) ou compressível (C). Assim, os quatro casos de interesse são expressos por: NC, NI, WI e WC. Durante a drenagem, a P_c aumenta até o ponto em que o diâmetro capilar atinge o valor de 1 pixel (Equação 3.1). Na embebição ocorre o contrário, ou seja, inicialmente a P_c é alta e conforme a pressão diminui o fluido molhante passa a ocupar os canais disponíveis. Para todos os quatro casos, o algoritmo forneceu resultados fisicamente consistentes. Cada linha das figuras indica um valor específico de P_c e elas resultaram de uma sequência de

operações aplicadas sobre as regiões de interesse na geometria de referência (Figura 3.3). Essas operações são descritas na próxima seção.

Figura 3.4 – Estados de equilíbrio selecionados para a drenagem (a e c) ou embebição (b e d) usando o algoritmo YLM unificado na geometria de referência com ângulo de contato de 0° (a e b) ou 45° (c e d). Cada caso é representado por um código de duas letras. A primeira diz respeito à molhabilidade do fluido invasor: não molhante (N) ou molhante (W). A segunda indica se o fluido deslocado é incompressível (I) ou compressível (C)



Fonte: O autor.

3.3.2 Descrição do algoritmo

A primeira etapa na construção dessa estrutura é identificar o conjunto mínimo de regiões de interesse sobre as quais as operações serão realizadas. Como cada uma dessas regiões é representada computacionalmente por uma matriz, o uso de muitas delas resulta em alto custo computacional e consome muito tempo. Enquanto Hazlett (1995) definiu essas regiões vagamente, Magnani (1996) e Magnani et al. (2000) utilizaram uma quantidade desnecessária de regiões. Hilpert e Miller (2001) apresentaram uma definição clara ao fornecer operadores simples para manipular essas regiões com base no formalismo da Morfologia Matemática. Assim, neste trabalho mantemos suas definições, onde o estado atual é definido por três

regiões: o fluido invasor, o fluido deslocado e o sólido. Além disso, alguns pixels devem ser rotulados como fonte e sumidouro dos fluidos invasor e deslocado.

A Figura 3.5 mostra uma imagem esquemática do algoritmo YLM. Usamos a notação para a análise de imagens baseadas em operações de conjunto. A sequência e o número de operações propostas foram projetados para permitir um algoritmo unificado para os quatro casos de interesse (NC, NI, WI e WC). Cada coluna da figura representa um desses casos. Para uma melhor organização, as operações são agrupadas em quatro etapas, sendo a última realizada apenas para os dois casos incompressíveis (NI e WI).

Figura 3.5 – Estrutura do algoritmo YLM apresentada em quatro etapas. As operações de conjunto representam a estrutura do algoritmo para cada um dos quatro casos. Os símbolos são: região porosa (P), elemento estruturante (D'), conjunto da 1ª etapa (A_i), operações da 2ª etapa ($N_i^{(k)}$ ou $W_i^{(k)}$, dependendo do caso), processo de filtragem na fonte do fluido invasor (F_{I_v}), distribuição do fluido invasor na etapa de pressão anterior (I_{i-1}), conjunto da 3ª etapa (B_i), operações da 4ª etapa ($C_i^{(k)}$), processo de filtragem no sumidouro de fluido deslocado (F_{O_v}) e distribuição do fluido deslocado na etapa de pressão anterior (O_{i-1})



Fonte: O autor

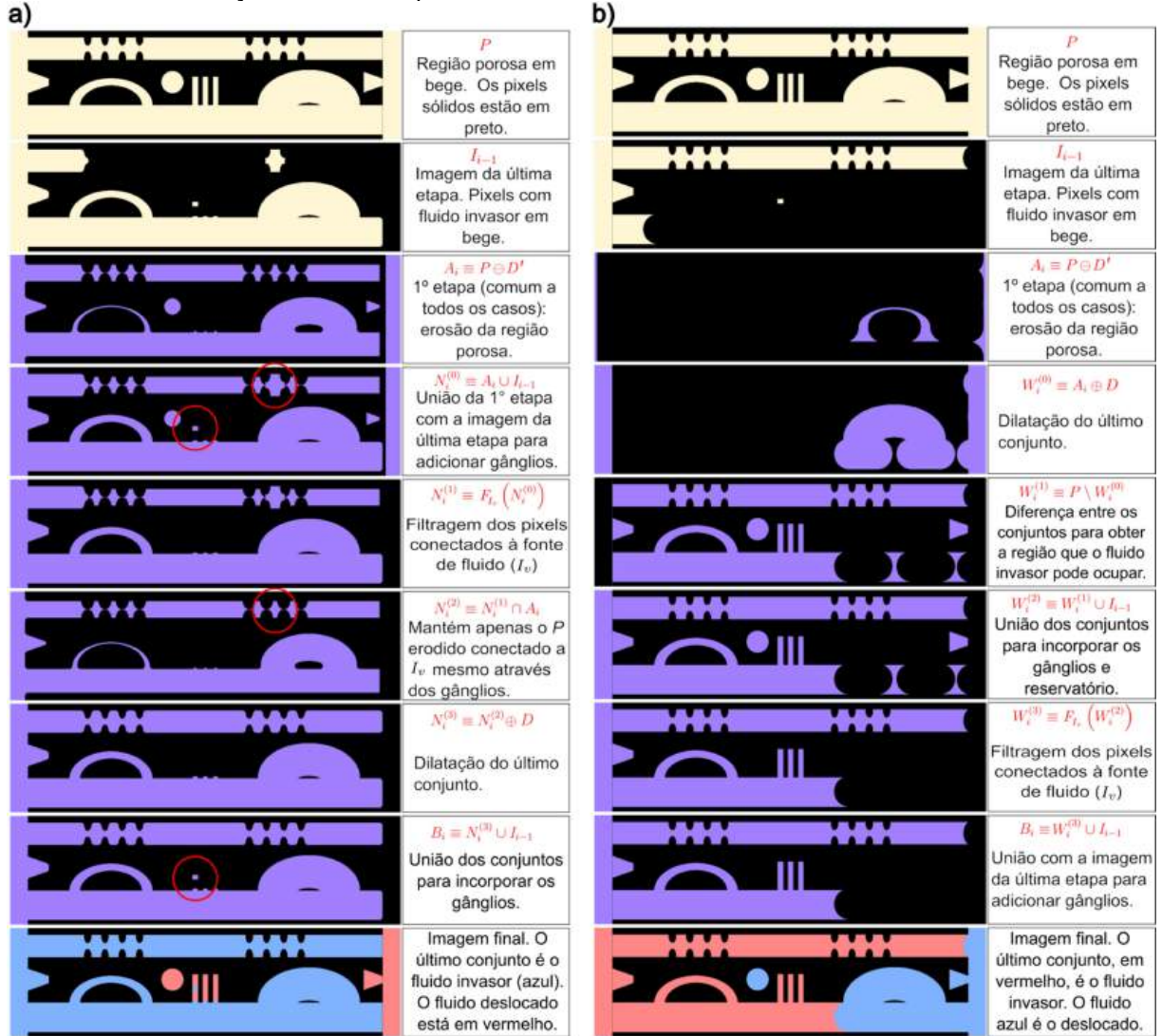
Comum a todos os casos, a primeira etapa (Figura 3.5) erode a região porosa (P) usando um círculo como elemento estruturante (D'), resultando no conjunto A_i . A segunda etapa consiste em um grupo de quatro operações ($N_i^{(k)}$ para NC e NI; $W_i^{(k)}$ para WC e WI) que expande a região anterior excluindo partes não

conectadas à fonte do fluido de entrada. O símbolo F_{I_v} denota a operação ou processo de filtragem que garante que apenas as regiões conectadas à fonte do fluido invasor (I_v) devem permanecer; e I_{i-1} indica a distribuição do fluido invasor na etapa de pressão anterior. A ordem das operações depende do tipo de fluido, conforme mostrado na Figura 3.5.

Após a identificação das regiões ocupadas pelo fluido invasor, associadas a uma determinada P_c , as regiões originalmente desconectadas (gânglios) são incluídas na terceira etapa, indicada por B_i (Figura 3.5). Se o fluido de deslocamento for totalmente compressível (NC/WC), esta é a última etapa para a obtenção da distribuição de equilíbrio para o presente valor de P_c . No entanto, se o fluido deslocado for incompressível (NI e WI), ainda é necessário excluir suas partes que não estão conectadas ao sumidouro. Isso acontece pois o fluido não tem para onde escoar e não pode ser comprimido, então essa porção de fluido fica aprisionada em sua posição no meio poroso. A operação do quarto passo (Figura 3.5) é indicada por $C_i^{(k)}$. De maneira semelhante a F_{I_v} e I_{i-1} , F_{O_v} é o processo de filtragem que garante que apenas as regiões conectadas ao sumidouro do fluido deslocado (O_v) devem permanecer; e O_{i-1} indica a distribuição do fluido deslocado na etapa de pressão anterior.

Os resultados de cada operação da Figura 3.5 realizada pelo algoritmo YLM, são exemplificados e comentados na Figura 3.6 (casos NC e WC) e na Figura 3.7 (casos NI e WI) para uma das etapas de pressão. Quanto aos dados de entrada, nenhum requisito especial foi imposto na distribuição inicial de fluidos ou pela geometria, tornando o algoritmo compatível com qualquer distribuição inicial de fluidos ou geometria, seja em 2D ou em 3D.

Figura 3.6 – Operações da análise de imagem para determinar a distribuição de equilíbrio dos fluidos em uma etapa de pressão. a) Drenagem: o fluido invasor não é molhante e o fluido deslocado é totalmente compressível (NC). b) Embebição: o fluido invasor é molhante e o fluido deslocado é totalmente compressível (WC). A fonte de fluido (I_v) está na extrema esquerda e o sumidouro de fluido (O_v) na extrema direita. Os pixels beges representam os dados de entrada do algoritmo: região porosa e distribuição inicial (ou passo de pressão anterior) do fluido invasor. Os pixels roxos indicam as operações realizadas para encontrar a imagem final que representa o resultado obtido para a drenagem ou embebição em uma etapa



Fonte: O autor.

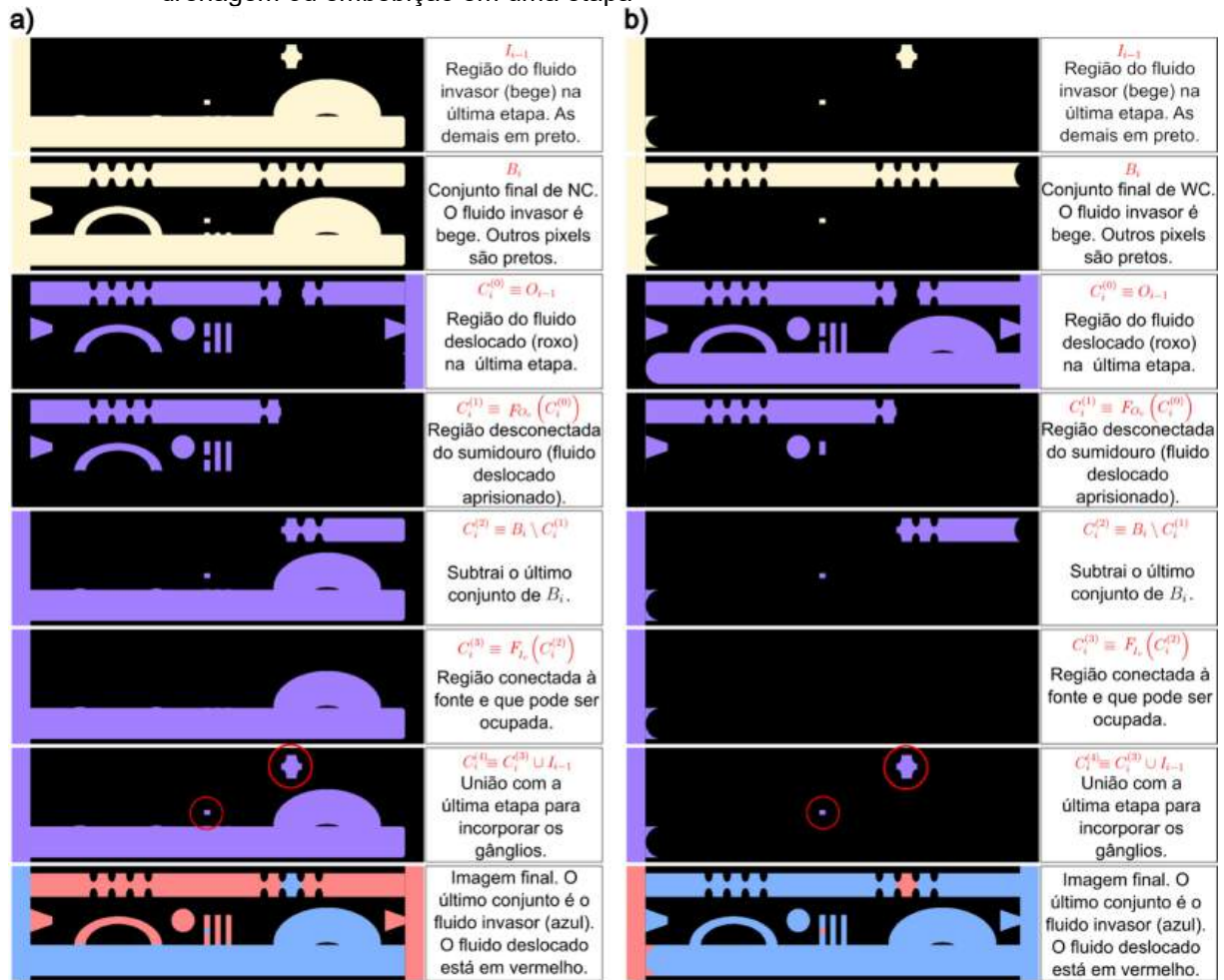
A curva capilar é então obtida aplicando a seguinte equação com diferentes raios para o círculo, cujos valores de P_c são dados pela Equação de Young-Laplace (Equação 3.1):

$$s(r) = \frac{\sum \{ [F_{I_v}(P \ominus D')] \oplus D \}}{\sum P} \quad (3.2)$$

onde $s(r)$ é a saturação do fluido invasor (umidade a base de volume) para um círculo de raio r e $D' \equiv D'(r)$, o símbolo de somatório representa a operação de

contagem dos pixels de cada região e o operador F_{I_v} denota o processo de filtragem dos pixels conectados com a fonte de fluido invasor.

Figura 3.7 – Operações da análise de imagem para determinar a distribuição de equilíbrios dos fluidos em uma etapa de pressão. a) Drenagem: o fluido invasor é não molhante e o fluido deslocado é totalmente incompressível (NI). b) Embebição: o fluido invasor é molhante e o fluido deslocado é totalmente incompressível (WI). A fonte de fluido (I_v) está na extrema esquerda e o sumidouro de fluido (O_v) na extrema direita. Os pixels beges representam os dados de entrada do algoritmo: região porosa e distribuição inicial (ou passo de pressão anterior) do fluido invasor. Os pixels roxos indicam as operações realizadas para encontrar a imagem final que representa o resultado obtido para a drenagem ou embebição em uma etapa



Fonte: O autor.

3.4 O PROCESSO DE EMBEBIÇÃO

Conforme discutido anteriormente, a correção proposta por Hilpert e Miller (2001) e a generalização proposta por Schulz et al. (2015) para o YLM não foram aplicadas ao caso de embebição em outros estudos. Nesta seção, mostramos que não houve necessidade de usar a correção de Hilpert e Miller (2001) para a

embebição e que a generalização de Schulz et. al. (2015) pode ser aplicada a ela, somente se uma membrana apropriada for usada.

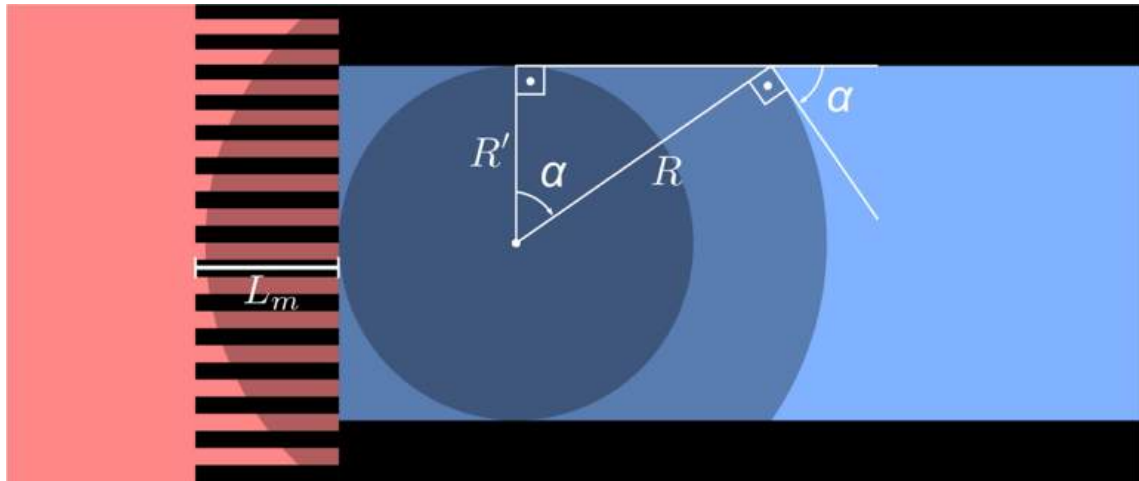
Na drenagem, os canais maiores drenam primeiro, a menos que haja um canal estreito no caminho para restringi-los, i.e., um gargalo. A restrição se deve a maior P_c necessária para drenar esses canais estreitos. É o chamado efeito “*ink bottle*”. A abordagem proposta por Hilpert e Miller (2001) é aplicada para corrigir uma saturação superestimada devido às geometrias “*ink bottle*” dentro do espaço poroso após o processo de abertura (ver Figura D.1 no Apêndice D). No entanto, o mesmo efeito não pode ocorrer na embebição porque os canais menores são preenchidos primeiro. Portanto, a correção de Hilpert e Miller (2001) é desnecessária para a embebição.

A generalização de Schulz et al. (2015) a outros ângulos de contato pode ser muito útil na embebição, pois a molhabilidade é um fator importante. No entanto, até onde sabemos, ainda não foi descrito na literatura. A Figura 3.8 mostra que, de acordo com o processo de Schulz, a dilatação com $R \cos \alpha$ resulta em um fluido deslocado que se move para trás, impedindo que o fluido molhante entre na membrana e, posteriormente, no canal. A solução é simples: usar uma membrana alongada com um comprimento maior que a diferença dos raios dos dois círculos, assim:

$$L_m > R - R' = R' \left(\frac{1}{\cos \alpha} - 1 \right) \quad (3.3)$$

onde L_m é o comprimento da membrana, R' é a metade da largura do canal e α é o ângulo de contato conforme indicado na Figura 3.8. Algumas etapas de simulação selecionadas são mostradas na Figura 3.4a e Figura 3.4c para ângulos de contato de 0° e 45° , respectivamente.

Figura 3.8 – Demonstração do uso da generalização de Schulz et al. (2015) para simular a embebição com um ângulo de contato α . A erosão de um valor de raio de círculo R' e a subsequente dilatação por um círculo de raio maior R são indicadas na mesma imagem. L_m indica o comprimento da membrana.



Fonte: O autor.

3.5 CÓDIGO DISPONÍVEL

O algoritmo unificado do Método Young-Laplace está disponível como um código-fonte C++, acompanhado por *scripts* de exemplo Python 3+. O código-fonte está licenciado sob a licença GPL-3.0. O código-fonte e os exemplos podem ser acessados em: <https://github.com/alexandrezaot/ylm>

3.6 CONCLUSÃO

Neste capítulo, apresentamos um algoritmo para simular o fluxo bifásico de fluido em meios porosos baseado na equação de Young-Laplace, combinando estudos anteriores em uma estrutura unificada. Seguindo Hazlett (1995), Magnani (1996) e Magnani et al. (2000), o algoritmo utiliza o formalismo da Morfologia Matemática. Também incorporamos melhorias de Hilpert e Miller (2001) e Schulz et al. (2015). Além da estrutura unificada, oferecemos, pela primeira vez na literatura, uma descrição completa e detalhada do algoritmo YLM e mostramos como aplicá-lo para o caso da embebição.

Essa estrutura generalizada permite a simulação de problemas de drenagem e embebição com o fluido deslocado sendo totalmente compressível ou incompressível. O algoritmo unificado também é capaz de lidar com qualquer

geometria ou distribuição inicial de fluidos. Assim, uma possibilidade de aplicação para este algoritmo unificado é prever a característica histerética da curva de retenção da água no solo que ocorre quando essa propriedade física do solo é determinada pelo processo de secamento ou umedecimento. No entanto, o método não se limita a somente esta aplicação.

Por fim, oferecemos um código livre C++ para o algoritmo, algo que ajudará o YLM a ganhar ainda mais espaço em diferentes aplicações envolvendo fenômenos de transporte em meios porosos.

REFERÊNCIAS

ADALSTEINSSON, D.; HILPERT, M. Accurate and Efficient Implementation of Pore-Morphology-based Drainage Modeling in Two-dimensional Porous Media. **Transport in Porous Media**, v. 65, n. 2, p. 337–358, 2006.

BERG, S.; RÜCKER, M.; OTT, H.; et al. Connected pathway relative permeability from pore-scale imaging of imbibition. **Advances in Water Resources**, v. 90, p. 24–35, 2016.

CELIA, M. A.; REEVES, P. C.; FERRAND, L. A. Recent advances in pore scale models for multiphase flow in porous media. **Reviews of Geophysics**, v. 33, n. S2, p. 1049–1057, 1995.

ELLMAN, S.; MASCINI, A.; BULTREYS, T. Validating mechanistic models of fluid displacement during imbibition. **Advances in Water Resources**, v. 183, p. 104590, 2024.

GALINDO-TORRES, S. A.; SCHEUERMANN, A.; LI, L.; PEDROSO, D. M.; WILLIAMS, D. J. A Lattice Boltzmann model for studying transient effects during imbibition–drainage cycles in unsaturated soils. **Computer Physics Communications**, v. 184, n. 4, p. 1086–1093, 2013.

HAZLETT, R. D. Simulation of capillary-dominated displacements in microtomographic images of reservoir rocks. **Transport in Porous Media**, v. 20, n. 1–2, p. 21–35, 1995.

HILPERT, M.; MILLER, C. T. Pore-morphology-based simulation of drainage in totally wetting porous media. **Advances in Water Resources**, v. 24, n. 3–4, p. 243–255, 2001.

HUANG, H.; THORNE, D. T.; SCHAAP, M. G.; SUKOP, M. C. Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models. **Physical Review E**, v. 76, n. 6, p. 066701, 2007.

LANDRY, C. J.; KARPYN, Z. T.; AYALA, O. Relative permeability of homogenous-

wet and mixed-wet porous media as determined by pore-scale lattice Boltzmann modeling. **Water Resources Research**, v. 50, n. 5, p. 3672–3689, 2014.

LI, Z.; GALINDO-TORRES, S.; YAN, G.; SCHEUERMANN, A.; LI, L. A lattice Boltzmann investigation of steady-state fluid distribution, capillary pressure and relative permeability of a porous medium: Effects of fluid and geometrical properties. **Advances in Water Resources**, v. 116, p. 153–166, 2018.

LIU, X.; ZHOU, A.; LI, J.; FENG, S. Reproducing micro X-ray computed tomography (microXCT) observations of air–water distribution in porous media using revised pore-morphology method. **Canadian Geotechnical Journal**, v. 57, n. 1, p. 149–156, jan. 2020.

MAGNANI, F. S. **Determinação das configurações de equilíbrio em meios porosos indeformáveis**, 1996. UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA.

MAGNANI, F. S.; PHILIPPI, P. C.; LIANG, Z. R.; FERNANDES, C. P. Modelling two-phase equilibrium in three-dimensional porous microstructures. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 26, n. 1, p. 99–123, 2000.

MEHMANI, A.; PRODANOVIĆ, M. The effect of microporosity on transport properties in porous media. **Advances in Water Resources**, v. 63, p. 104–119, 2014.

MOHAMMADMORADI, P.; KANTZAS, A. Petrophysical characterization of porous media starting from micro-tomographic images. **Advances in Water Resources**, v. 94, p. 200–216, 2016.

MOHAMMADMORADI, P.; KANTZAS, A. DyMAS: A Direct Multi-Scale Pore-Level Simulation Approach. Day 3 Tue, April 25, 2017. **Anais...**, 2017. SPE.

MOHAMMADMORADI, S. P. **Pore Morphological Multi-Phase Digital Rock Physics Models**, 2016. UNIVERSITY OF CALGARY.

MOSTAGHIMI, P.; ARMSTRONG, R. T.; GERAMI, A.; et al. Cleat-scale characterisation of coal: An overview. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, v. 39, p. 143–160, 2017.

MU, Y.; SUNGKORN, R.; TOELKE, J. Identifying the representative flow unit for capillary dominated two-phase flow in porous media using morphology-based pore-scale modeling. **Advances in Water Resources**, v. 95, p. 16–28, 2016.

NOROUZI APOURVARI, S.; ARNS, C. H. Image-based relative permeability upscaling from the pore scale. **Advances in Water Resources**, v. 95, p. 161–175, 2016.

PENG, Z.; LIU, S.; TANG, S.; ZHAO, Y.; LI, Y. Multicomponent Lattice Boltzmann Simulations of Gas Transport in a Coal Reservoir with Dynamic Adsorption. **Geofluids**, v. 2018, p. 1–13, 2018.

SAITO, T.; TORIWAKI, J.-I. New algorithms for euclidean distance transformation of an n-dimensional digitized picture with applications. **Pattern Recognition**, v. 27, n. 11, p. 1551–1565, 1994.

SCHULZ, V. P.; BECKER, J.; WIEGMANN, A.; MUKHERJEE, P. P.; WANG, C.-Y. Modeling of Two-Phase Behavior in the Gas Diffusion Medium of PEFCs via Full Morphology Approach. **Journal of The Electrochemical Society**, v. 154, n. 4, p. B419, 2007.

SCHULZ, V. P.; WARGO, E. A.; KUMBUR, E. C. Pore-Morphology-Based Simulation of Drainage in Porous Media Featuring a Locally Variable Contact Angle. **Transport in Porous Media**, v. 107, n. 1, p. 13–25, 2015.

SHAN, X.; CHEN, H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. **Physical Review E**, v. 47, n. 3, p. 1815–1819, 1993.

SHAN, X.; DOOLEN, G. Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction. **Journal of Statistical Physics**, v. 81, n. 1–2, p. 379–393, 1995.

SHIKHOV, I.; ARNS, C. H. Evaluation of Capillary Pressure Methods via Digital Rock Simulations. **Transport in Porous Media**, v. 107, n. 2, p. 623–640, 2015.

SOILLE, P. **Morphological Image Analysis**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004.

TIAB, D.; DONALDSON, E. C. **Petrophysics: Theory and Practice of Measuring Reservoir Rock and Fluid Transport Properties**. 4th ed. Gulf Professional Publishing, 2015.

VOGEL, H.-J.; TÖLKE, J.; SCHULZ, V. P.; KRAFCZYK, M.; ROTH, K. Comparison of a Lattice-Boltzmann Model, a Full-Morphology Model, and a Pore Network Model for Determining Capillary Pressure-Saturation Relationships. **Vadose Zone Journal**, v. 4, n. 2, p. 380–388, 2005.

WANG, J.; CHEN, L.; KANG, Q.; RAHMAN, S. S. Apparent permeability prediction of organic shale with generalized lattice Boltzmann model considering surface diffusion effect. **Fuel**, v. 181, p. 478–490, 2016.

WOLF, F. G.; SIEBERT, D. N.; SURMAS, R. Influence of the wettability on the residual fluid saturation for homogeneous and heterogeneous porous systems. **Physics of Fluids**, v. 32, n. 5, p. 052008, 2020.

ZACHAROUDIOU, I.; BOEK, E. S. Capillary filling and Haines jump dynamics using free energy Lattice Boltzmann simulations. **Advances in Water Resources**, v. 92, p. 43–56, 2016.

ZHANG, J. Lattice Boltzmann method for microfluidics: models and applications. **Microfluidics and Nanofluidics**, v. 10, n. 1, p. 1–28, 2011.

ZHANG, T.; SUN, S. A coupled Lattice Boltzmann approach to simulate gas flow and transport in shale reservoirs with dynamic sorption. **Fuel**, v. 246, p. 196–203, 2019.

ZHANG, T.; SUN, S. Thermodynamics-Informed Neural Network (TINN) for Phase Equilibrium Calculations Considering Capillary Pressure. **Energies**, v. 14, n. 22, p. 7724, 2021.

ZHAO, J.; QIN, F.; DEROME, D.; CARMELIET, J. Simulation of quasi-static drainage displacement in porous media on pore-scale: Coupling lattice Boltzmann method and pore network model. **Journal of Hydrology**, v. 588, p. 125080, 2020.

ZUO, J. Y.; GUO, X.; LIU, Y.; et al. Impact of Capillary Pressure and Nanopore Confinement on Phase Behaviors of Shale Gas and Oil. **Energy & Fuels**, v. 32, n. 4, p. 4705–4714, 2018.

4 MÉTODO YOUNG-LAPLACE: UMA INVESTIGAÇÃO ENTRE SIMULAÇÃO E EXPERIMENTO EM MEIOS POROSOS

RESUMO

A retenção de água apresenta uma estreita relação com a estrutura do meio poroso, pois o armazenamento da água ocorre nos poros e estes reterão a água com mais energia à medida que o tamanho desses poros diminui. A curva de retenção (CR) mostra como um meio poroso retém a água em função de uma tensão aplicada. Neste estudo utilizamos a técnica de microtomografia computadorizada de raios-X (μ CT) para acessar tridimensionalmente a estrutura de meios porosos deformados e simular computacionalmente a CR via o método de Young-Laplace (YLM). O YLM permite simular drenagem ou embebição com diferentes ângulos de contato, possibilitando a análise da CR por secamento (drenagem) ou umedecimento (embebição), e avaliando a influência do ângulo de contato (molhabilidade). Os resultados mostraram que a associação da técnica da μ CT com a simulação computacional via YLM se mostrou conveniente para a aquisição da CR de meios porosos deformados, com boa correlação entre as CR experimentais e simuladas. O ângulo de contato de 40° foi identificado como mais adequado para os meios porosos estudados. Outro aspecto destacado no YLM foi a obtenção das distribuições de equilíbrio do conteúdo de água no meio poroso, que possibilitou análises qualitativas que não são possíveis através do método experimental. Além disso, ao obtermos a CR simulada por embebição dos meios porosos a característica histerética da CR foi observada, demonstrando que o conteúdo de água retido no meio poroso é dependente do processo. Assim, o YLM, aliado a reconstrução 3D de meios porosos pela técnica de μ CT, foi utilizado para obter a CR de forma alternativa (simulada) aos métodos experimentais.

4.1 INTRODUÇÃO

A retenção de água em meios porosos, notadamente em solos, possui relevância em diversas áreas do conhecimento como na ambiental, segurança alimentar e gestão de recursos hídricos, apenas para citar algumas (Dey; Sundriyal; Sahoo, 2017; Tafteh; Davatgar; Sedaghat, 2022). No entanto, obter informações

sobre a retenção de água em meios porosos através de métodos experimentais pode ser um processo moroso, dispendioso e caro (Achieng, 2019). Felizmente, com os avanços recentes nas técnicas de obtenção de dados em meios porosos e no desenvolvimento, em especial na disponibilidade de hardware e software, a simulação computacional surge como uma alternativa viável para acessar tais informações.

A microtomografia computadorizada de raios-X (μ CT) se apresenta como uma ferramenta poderosa para o estudo de meios porosos. Considerada uma técnica não destrutiva e não invasiva, permite acessar informações tridimensionais detalhadas da estrutura interna do meio poroso sem alterá-lo. A técnica permite a reconstrução 3D do meio poroso, distinguindo os constituintes da estrutura, ou seja, a distribuição espacial das partes sólidas e do espaço poroso entre elas (Borges et al., 2019; Pires et al., 2020).

A associação da simulação computacional com o mapeamento tridimensional da estrutura de meios porosos, utilizando a técnica da μ CT introduz um conjunto de dados capazes de enriquecer a análise computacional e favorecer a compreensão dos fenômenos relacionados à retenção de água em meios porosos. Isso é particularmente relevante devido ao papel reconhecido da estrutura do meio poroso no controle de vários processos no solo, incluindo a retenção de água (Fan et al., 2021; Ferreira et al., 2018, 2019; Galdos et al., 2020; Zhang et al., 2021). Além disso, a simulação computacional associada à técnica da μ CT pode trazer vantagens em termos de custos e tempo de aquisição de dados.

O método de Young-Laplace (YLM) é um algoritmo computacional capaz de determinar a distribuição espacial de equilíbrio entre dois fluidos imiscíveis em qualquer geometria porosa, considerando um valor de pressão capilar conhecido. Essa análise é executada com base na premissa de que a distribuição dos fluidos é determinada pela equação de Young-Laplace, ou seja, exclusivamente pelo equilíbrio mecânico entre a diferença de pressão aplicada e as forças capilares envolvidas. Além disso, o YLM obtém as distribuições de equilíbrio simulando os processos de embebição (umedecimento) ou drenagem (secamento) para diferentes ângulos de contato, representando desta forma, diferentes molhabilidades e possibilitando a investigação do efeito da molhabilidade nas distribuições de equilíbrio entre as fases no sistema poroso (Zabot et al., 2024).

Assim, o objetivo principal deste trabalho foi obter a curva de retenção simulada de meios porosos deformados, reconstruídos tridimensionalmente pela técnica de μ CT e analisados pelo algoritmo computacional YLM. Experimentos de retenção para os meios porosos deformados simulados também foram executados para permitir a comparação entre os resultados simulados e experimentais. Diferentes ângulos de contato foram avaliados na simulação para verificar a dependência da curva de retenção com este parâmetro.

4.2 MATERIAIS E MÉTODOS

4.2.1 Amostras

Os meios porosos deformados avaliados neste estudo foram obtidos pelo empacotamento de dois tipos de partículas: 1) esferas de vidro (GB) e 2) grãos de areia (SG). Para cada tipo de partícula, três granulometrias distintas foram utilizadas, uma para cada meio poroso, totalizando seis amostras. Uma descrição detalhada das amostras é encontrada no tópico 2.2.1.

4.2.2 Curva de retenção

Os valores experimentais da curva de retenção (CR) da água para os meios porosos avaliados foram obtidas utilizando o método do funil de Haines modificado (Cássaro et al., 2009). As amostras foram acondicionadas, saturadas por ascensão capilar e submetidas a valores de tensão (h) para cada ponto da CR.

O tópico 2.2.4 detalha os procedimentos de acondicionamento, saturação e de drenagem das amostras deformadas, da mesma maneira o trabalho ainda descreve como são obtidos os valores da umidade (θ) à base de volume da CR (Camargo; Cássaro; Pires, 2022). No presente capítulo, optou-se pela utilização da saturação relativa (θ_r) em função do diâmetro de poro para a construção da CR, pois desta forma a comparação entre as diferentes granulometrias é facilitada devido ao intervalo de valores para θ_r ser entre 0 e 1 $cm^3.cm^{-3}$ (Libardi, 2018) e pela característica do YLM utilizar uma esfera como elemento estruturante, associado à tensão aplicada, nas simulações para determinar as distribuições de equilíbrio entre

as fases presentes no meio poroso (Zabot et al., 2024). A saturação relativa (θ_r) é uma razão entre o volume de água (V_w) retido nos poros e o volume de poros (V_p), matematicamente, temos:

$$\theta_r = \frac{V_w}{V_p}. \quad (4.1)$$

4.2.3 Aquisição e processamento das imagens

As imagens tridimensionais das amostras deformadas foram adquiridas utilizando um sistema μ CT de bancada SkyScan 1172. O software (NRecon) disponibilizado com o equipamento foi utilizado na reconstrução das fatias de seção transversal a partir das projeções de sombras adquiridas através dos meios porosos. O empilhamento das fatias reconstruídas de μ CT em 8 bits (256 tons de cinza) das amostras, permitiu a visualização e acesso às informações tridimensionais dos meios porosos.

Um volume de interesse (VOI), abrangendo a maior porção de cada meio poroso foi selecionado para simulação, sendo de 826 x 826 x 413 voxels para as amostras GB e de 961 x 961 x 940 voxels para as amostras SG, valores referentes às direções horizontal (eixo X), vertical (eixo Y) e em profundidade (eixo Z). A resolução espacial para as amostras GB foi de 25,79 μ m e para as amostras SG foi de 6,15 μ m; desta forma, o tamanho dos VOI's foi de aproximadamente 21,3 x 21,3 x 10,7 mm para as amostras GB e 5,9 x 5,9 x 5,8 mm para as amostras SG (Vaz et al., 2011). O processo de segmentação dos VOI's, ou seja, a separação da região da matriz (sólido) e do espaço poroso (vazio) foi realizada utilizando o algoritmo Isodata (Ridler; Calvard, 1978) disponibilizado no software ImageJ versão 1.53c (Schneider; Rasband; Eliceiri, 2012).

Informações adicionais relativas à energia de feixe, filtragem, tempo de aquisição e processo de segmentação podem ser encontradas no tópico 2.2.2.

4.2.4 Simulação – o YLM

4.2.4.1 O método YLM

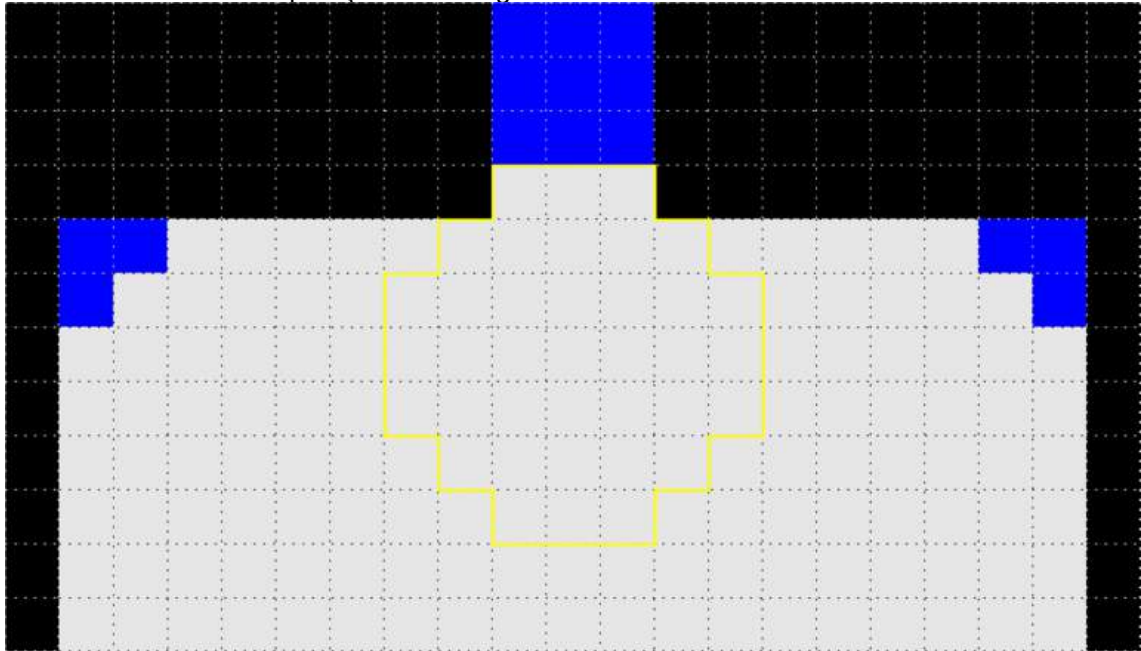
A obtenção da CR simulada dos meios porosos é obtida pela determinação da saturação relativa para cada pressão capilar simulada no meio poroso pelo código YLM. O código encontra a distribuição de equilíbrio entre as fases (líquida e gasosa) a uma dada pressão capilar por meio de uma série de operações morfológicas descritas com detalhes no capítulo anterior. Essas operações morfológicas são realizadas utilizando a esfera como elemento estruturante e o diâmetro desta esfera se relaciona com a pressão capilar simulada segundo a equação (4.2):

$$P_c = \frac{4\sigma \cos\alpha}{D_e} \quad (4.2)$$

em que P_c é a pressão capilar, σ é a tensão interfacial, α é o ângulo de contato do fluido molhante e D_e é o diâmetro da esfera utilizada como elemento estruturante nas operações morfológicas.

Após o código determinar a distribuição de equilíbrio entre as fases, avaliam-se os volumes ocupados através da contagem dos voxels associados a cada fase e desta forma, avalia-se a saturação relativa para a dada pressão capilar. A Figura 4.1 ilustra como é determinada a saturação relativa para uma distribuição de equilíbrio entre duas fases.

Figura 4.1: Distribuição de equilíbrio entre as fases água/ar para um meio poroso com um alargamento abrupto. Os voxels (representados pelos quadrados) pretos representam a região sólida do meio poroso, enquanto que a região porosa constituída pelos voxels cinza e azul indicam, respectivamente, ar e água. O elemento estruturante (esfera) utilizado nas operações morfológicas está destacado em amarelo



Fonte: o autor.

A Figura 4.1 mostra a distribuição de equilíbrio para um plano de uma situação hipotética tridimensional em que há um alargamento abrupto na região porosa para um meio de dimensões 21 x 12 x 10 voxels, totalizando um volume de 2520 voxels. Salienta-se que embora não mostrados, os demais planos são idênticos. Os voxels (representados pelos quadrados) pretos representam a região sólida do meio poroso, enquanto que a região porosa constituída pelos voxels cinza e azul indicam, respectivamente, ar e água. A esfera utilizada nas operações morfológicas esta destacada em amarelo e possui diâmetro igual a 7 voxels.

A saturação relativa para a distribuição de equilíbrio apresentada na Figura 4.1 feita pela contagem dos voxels da fase de interesse seguido pela divisão da contagem feita na região porosa; logo, teremos um total de 880 voxels para a região sólida e 1640 voxels para a região porosa e destes, 150 voxels contendo água e 1490 voxels contendo ar. Desta forma, representando uma saturação relativa, dada pela equação (4.1), de aproximadamente $0,09 \text{ cm}^3.\text{cm}^{-3}$ para a pressão capilar associada a esfera de diâmetro 7 voxels. Considerando que nessa situação hipotética cada voxel represente $10 \mu\text{m}$, a esfera teria $70 \mu\text{m}$ de diâmetro e a tensão simulada, dada pela equação (4.2), valeria aproximadamente $42 \text{ cm H}_2\text{O}$.

4.2.4.2 Implementação do YLM

O YLM é capaz de simular quatro situações envolvendo os dois fluidos imiscíveis (invasor e deslocado) presentes no meio poroso. Para o fluido invasor, o mesmo pode ser molhante ou não-molhante e para o fluido deslocado, este pode ser compressível ou incompressível. Além disso, o ângulo de contato do fluido invasor pode ser ajustado para valores de até 40° (Zabot et al., 2024). Tais informações devem ser ajustadas como entrada na simulação, bem como a informação da estrutura do meio poroso baseada no VOI segmentado obtido da reconstrução 3D do meio poroso.

A drenagem da água presente em um meio poroso saturado é mais bem representada na configuração do YLM utilizando como fluido invasor (representando o ar entrando no meio poroso) a opção não-molhante e como fluido deslocado (representando a água saindo do meio poroso) a opção incompressível. No processo da embebição, devido à inversão das características entre o fluido invasor e deslocado, a opção selecionada foi a de molhante para o fluido invasor (representando a água entrando no meio poroso) e compressível para o fluido deslocado (representando o ar saindo do meio poroso).

A avaliação dos efeitos do ângulo de contato na CR foi realizada pela alteração no valor do ângulo de contato na simulação, iniciando com o ângulo de contato nulo e incrementando a cada 10° até o valor máximo de 40°. Os demais parâmetros permaneceram inalterados.

O código YLM foi escrito em linguagem C++ e está disponível no seguinte repositório para download: <https://github.com/alexandrezabot/ylm>. A máquina utilizada para processar as simulações possuía a seguinte configuração: processador quadcore de 1,8 GHz e 32 Gb de memória RAM.

4.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A influência do ângulo de contato (α) na curva de retenção (CR) obtida por drenagem foi avaliada no intervalo de 0° à 40° com incremento de 10° e os valores estão mostrados na Figura 4.2a-f, assim como o valor experimental da CR. Os valores relativos aos meios constituídos por esferas de vidro (GB) são mostrados na Figura 4.2a-c e para os meios constituídos por grãos de areia (SG) na Figura 4.2d-f.

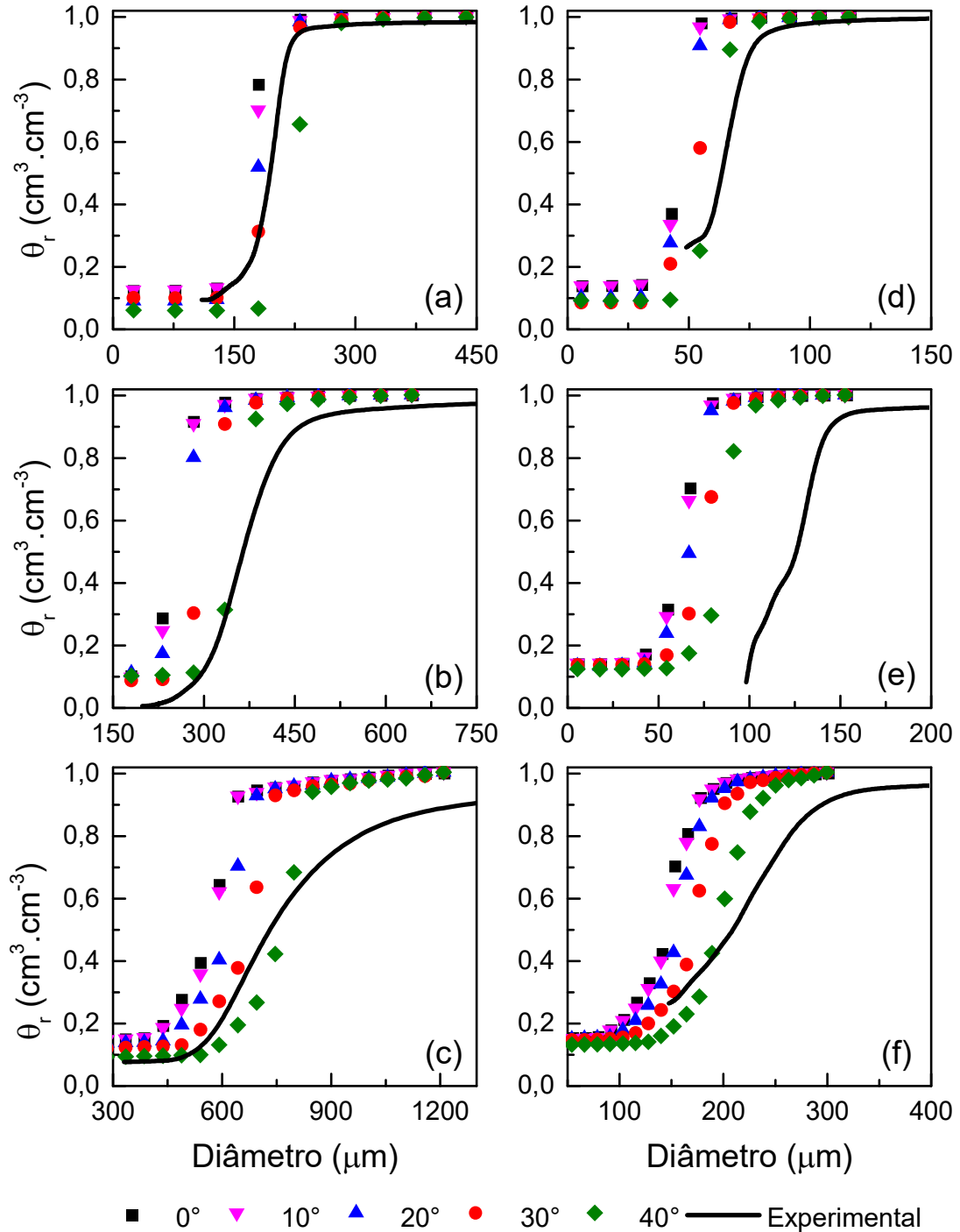
A limitação do ângulo de contato à 40° se deve a restrição do modelo, conforme pode ser visto em Zabot et al. (2024).

De maneira geral, as correlações entre os valores experimentais e simulados da CR melhoraram à medida que os ângulos de contato aumentaram, sendo observadas as melhores correlações para os valores de 30° e 40° . Como o ângulo de contato depende tanto do material sólido quanto da tensão superficial do líquido (Cawlfild, 1962), no trabalho de Mitra et al. (2016) ângulos de contato de recuo (ângulos de contato medidos quando a água é retirada dos poros) entre 22° e 43° foram encontrados entre água e partículas de vidro. Os materiais sólidos utilizados em nosso trabalho foram esferas de vidro e grãos de areia, desta forma, embora não sejam rigorosamente os mesmos materiais do trabalho de Mitra et al. (2016), uma comparação razoável pode ser estabelecida.

Em termos da granulometria dos meios porosos, as menores granulometrias (Figura 4.2a-d) apresentaram as melhores correlações entre simulação e experimento para os dois tipos de partículas sólidas. Uma possível explicação reside nas dificuldades experimentais para a obtenção da CR das amostras com maior granulometria, em especial, na determinação do equilíbrio após a aplicação de um valor de tensão.

A Figura 4.3 compara as curvas de retenção obtidas por drenagem, nas três granulometrias para cada um dos tipos de partículas analisadas no ângulo de contato $\alpha = 40^\circ$. A escolha deste valor de ângulo de contato se deu por apresentar melhor conformidade com os valores experimentais das amostras analisadas e também devido aos valores encontrados no trabalho de Mitra et al. (2016) para ângulo de contato de recuo entre água e partículas de vidro, pois na CR experimental obtida por drenagem o menisco formado nos poros, após se estabelecer uma condição de equilíbrio, irá recuar ao ser aplicado um novo valor de tensão no meio poroso. O oposto deve ocorrer no caso de uma CR por embebição, em que o ângulo de contato a ser considerado deve ser o de avanço, que geralmente é maior que o ângulo de contato de recuo nas mesmas condições de líquido e sólido (Cawlfild, 1962; Dey; Sundriyal; Sahoo, 2017; Good, 1992; Mitra et al., 2016). Na Figura 4.3a, nota-se uma boa correspondência entre os valores experimentais e simulados para as três granulometrias analisadas se comparadas com as que são observadas na Figura 4.3b, especialmente para a amostra constituída por partículas de areia entre $212 - 500 \mu\text{m}$.

Figura 4.2: Curva de retenção obtida por drenagem para meios porosos constituídos por partículas de esferas de vidro com diâmetros de (a) 500 μm , (b) 1000 μm e (c) 2500 μm ; e por partículas de grãos de areia com diâmetros no intervalo de (d) 106 – 212 μm , (e) 212 – 500 μm e (f) 500 – 1000 μm . As linhas representam os valores experimentais enquanto que os pontos representam os valores simulados para diferentes ângulos de contato

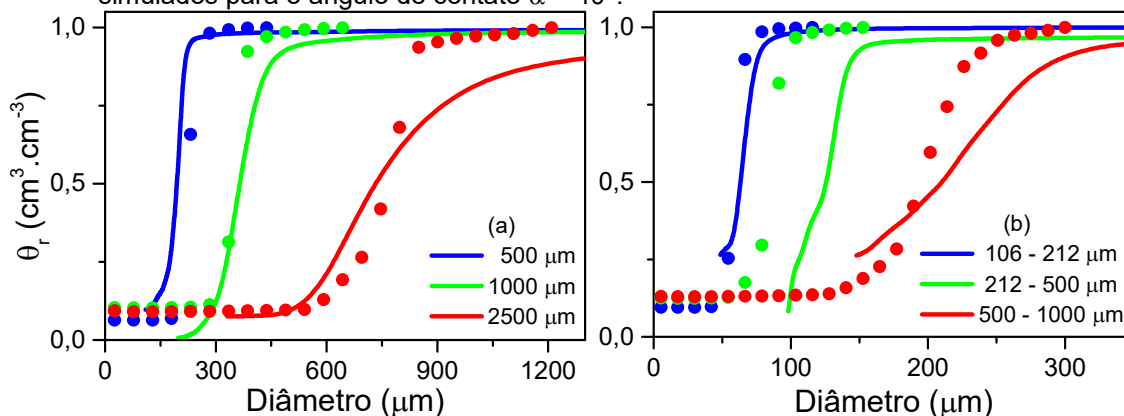


Fonte: o autor.

O ângulo de contato surge na interface entre as três fases presentes no meio poroso: sólido, líquido e gás. Devido às forças de adesão do líquido ao sólido e de coesão entre as moléculas do líquido, esse ângulo é específico para interações

entre diferentes substâncias líquidas e sólidas e, desta forma, quanto maior a atração das moléculas de água pela superfície sólida, mais próximo de zero será o ângulo de contato e maior será a molhabilidade do líquido (Cawfield, 1962; Good, 1992). Assim, o valor do ângulo de contato para as amostras GB (Figura 4.3a) convergem melhor os valores da CR experimental e simulada do que para as amostras SG (Figura 4.3b). Infelizmente, ângulos de contato maiores que 40° não puderam ser avaliados devido à limitação do YLM. Cabe salientar que, embora haja essa limitação, a possibilidade de avaliar diferentes molhabilidades por meio da alteração do ângulo de contato é uma característica notável do YLM.

Figura 4.3: Curvas de retenção obtida por drenagem para meios porosos constituídos por partículas de (a) esferas de vidro (GB) e por (b) partículas de grãos de areia (SG). As linhas representam os valores experimentais enquanto os pontos representam os valores simulados para o ângulo de contato $\alpha = 40^\circ$.



Fonte: o autor.

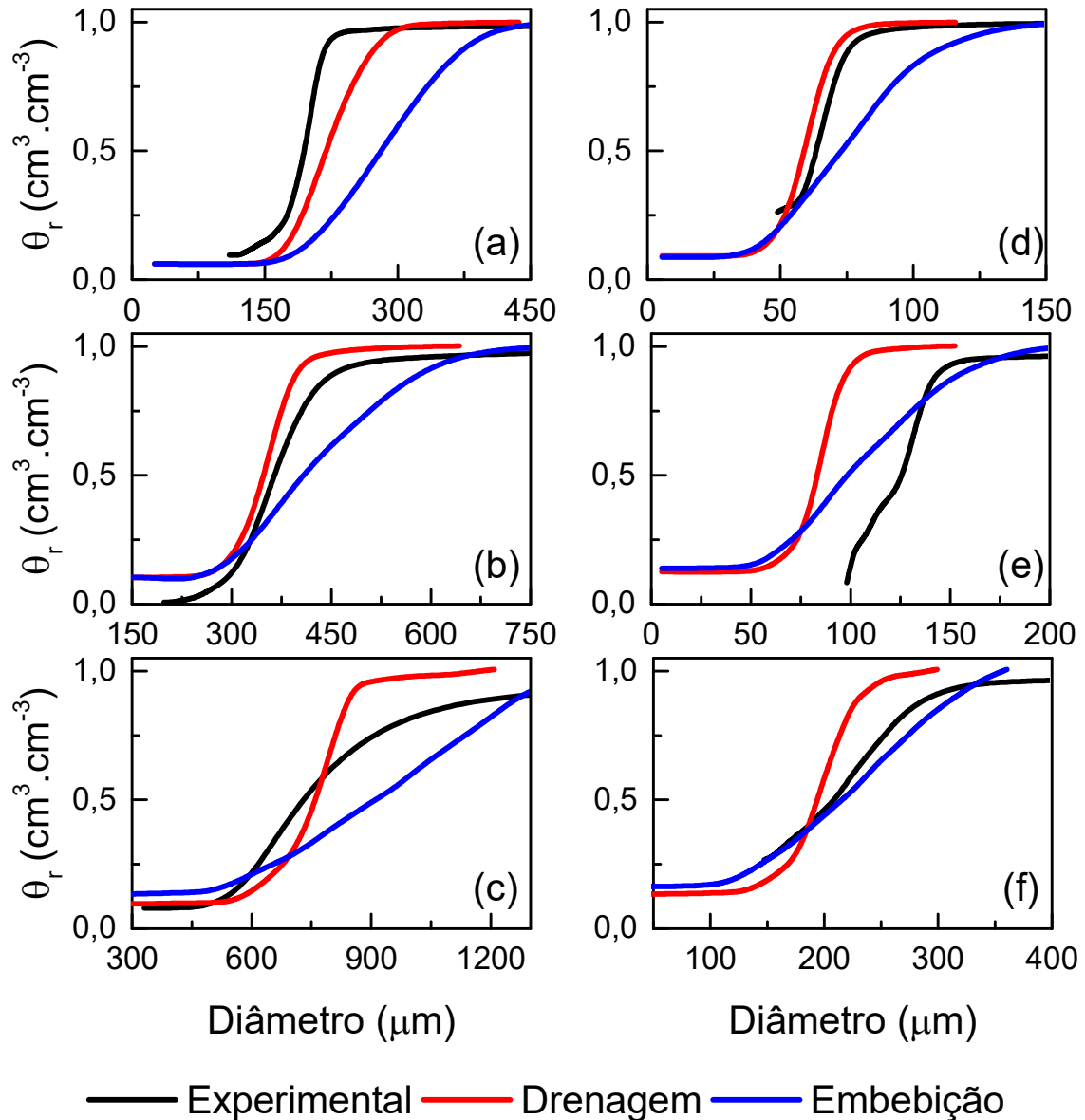
O YLM também é capaz de fornecer outras informações importantes sobre o meio poroso, como por exemplo, a CR simulada por embebição. Na Figura 4.4, mostramos as CR's simuladas por embebição, além das CR's experimentais e simuladas por drenagem. Ressaltamos que a CR por embebição experimental não foi avaliada neste trabalho e que a opção de explorarmos os dados simulados pelo YLM para tal situação, mesmo sem a sustentação experimental dos dados, é puramente preditiva e que necessita de análises futuras.

Considerando o caráter preditivo e com a ressalva da ausência de sustentação experimental nos dados simulados para a CR por embebição nos meios porosos, os resultados mostraram concordância em relação à previsão teórica. O conteúdo de água retido em um meio poroso associado a um diâmetro capilar (ou tensão aplicada) é diferente se a aferição for realizada enquanto o meio poroso é drenado ou embebido (Libardi, 2018). Essa descoberta, creditada à Haines (Dey;

Sundriyal; Sahoo, 2017) e chamada de histerese é atribuída a diversos fatores presentes no problema de retenção e movimentação de líquidos em meios porosos, em especial pela não uniformidade dos poros (efeito *ink bottle*), alteração no ângulo de contato devido à frente de molhamento ser de avanço ou recuo, aprisionamento de ar (bolhas de ar), mudanças na estrutura do meio poroso causadas por ciclos de umedecimento e secamento para citar alguns pontos (Libardi, 2018). A histerese na CR simulada foi observada tanto para os meios porosos GB (Figura 4.4a-c), quanto para SG (Figura 4.4d-f).

Outra funcionalidade oferecida pelo YLM é a análise qualitativa das distribuições de equilíbrio associadas aos valores de tensão aplicada ao meio poroso. Na Figura 4.5, são apresentadas algumas distribuições de equilíbrio para a amostra GB com diâmetro de 500 μm , tanto para a simulação por drenagem quanto por embebição. As imagens revelam a configuração das fases no meio poroso, permitindo uma análise qualitativa desses estados de equilíbrio. Como discutido anteriormente, na Figura 4.4 o fenômeno da histerese está presente nas simulações da CR para todos os meios porosos avaliados e ao observarmos a Figura 4.5 podemos constatar visualmente que o conteúdo de água no meio poroso é dependente do processo empregado para obter a CR, quer seja o processo a drenagem (Figura 4.5a - e) ou a embebição (Figura 4.5e - h; a), fornecendo, desta forma, indícios qualitativos do fenômeno da histerese.

Figura 4.4: Curva de retenção (CR) experimental e simulada para as amostras GB com diâmetros de (a) 500 μm , (b) 1000 μm e (c) 2500 μm ; e para as amostras SG com diâmetros no intervalo de (d) 106 – 212 μm , (e) 212 – 500 μm e (f) 500 – 1000 μm . As curvas experimentais (preto) foram obtidas por drenagem e as curvas simuladas foram obtidas por drenagem (vermelho) e embebição (azul)

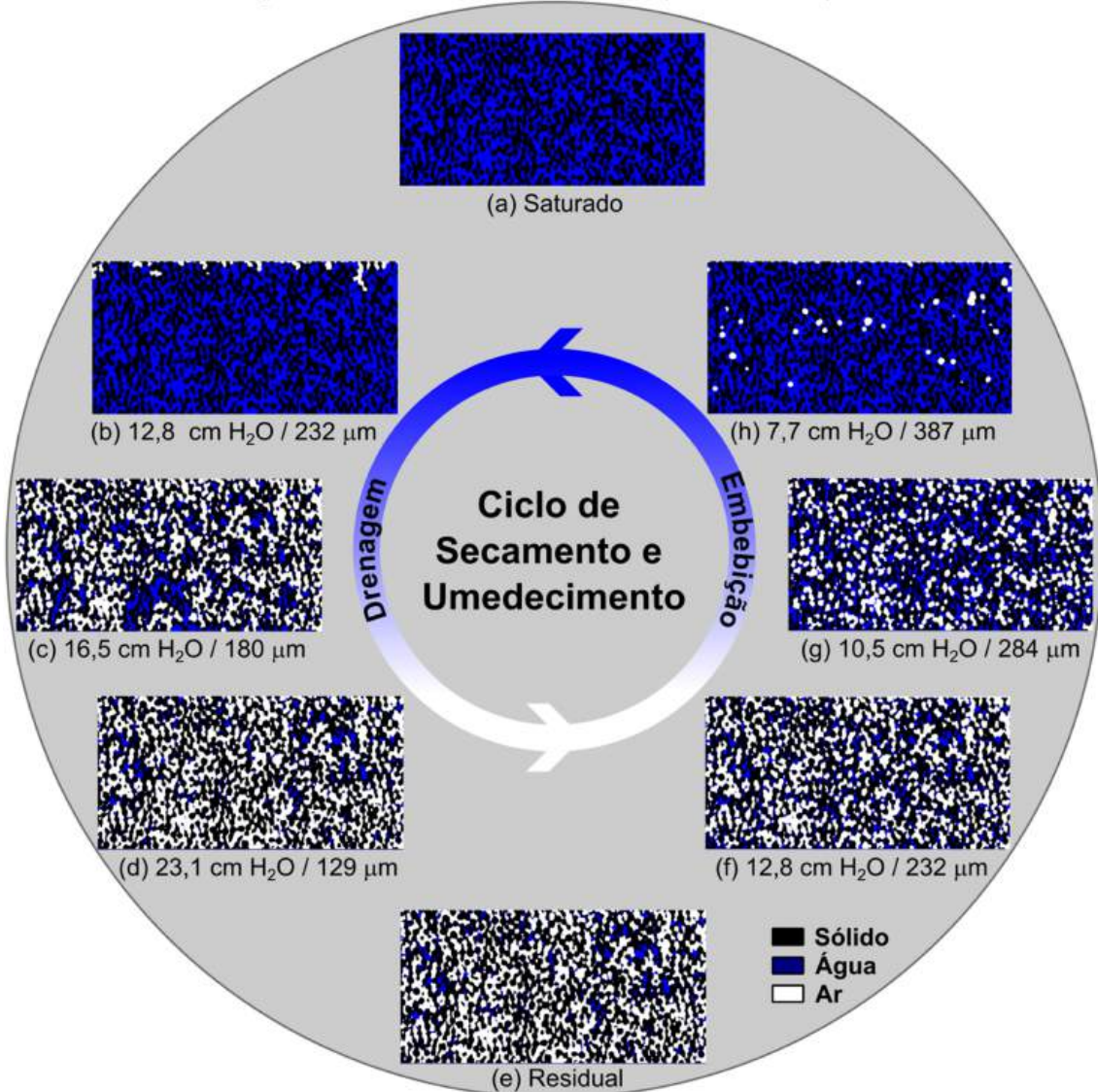


Fonte: o autor.

Na drenagem, partindo da Figura 4.5a que caracteriza a condição de saturação do meio poroso, após a aplicação de uma tensão de 12,8 cm H₂O (Figura 4.5b), uma pequena quantidade de ar passa a ocupar o meio poroso. O incremento na tensão aplicada para 16,5 cm H₂O (Figura 4.5c) é suficiente para drenar uma quantidade significativa do conteúdo de água no meio poroso, restando apenas algumas pequenas porções de água ainda com alguma conexão entre si. Para a tensão de 23,1 cm H₂O (Figura 4.5d), o conteúdo de água é reduzido a praticamente o valor da umidade residual, sendo caracterizado por porções isoladas de água, ou

seja, a conexão hidráulica é perdida. A condição de umidade residual (Figura 4.5e) é estabelecida após o valor do conteúdo de água não sofrer alteração em função do aumento da tensão aplicada.

Figura 4.5: Distribuições de equilíbrio entre as fases (sólido, líquido e gasoso) presentes no meio poroso, constituídos por esferas de vidro com diâmetros de 500 μm para diferentes tensões obtidas pelo YLM. A análise é 3D, porém apresentamos apenas um plano (2D) do meio poroso para melhor visualização. O primeiro valor refere-se à tensão aplicada em cm H_2O e o segundo valor ao diâmetro de poro equivalente em μm .



Fonte: o autor.

Para a embebição, partindo do meio poroso em condição de umidade residual (Figura 4.5e), para a tensão de 12,8 cm H_2O (Figura 4.5f) o conteúdo de água aumenta ligeiramente ao longo de todo o meio poroso, especialmente nos poros menores, criando um tipo de rede hidráulica conectada. Na tensão de 10,5 cm H_2O (Figura 4.5g) verifica-se a expansão dessa rede hidráulica para os poros

maiores com consequente aumento no conteúdo de água presente no meio poroso. Em 7,7 cm H₂O (Figura 4.5h) restam poucos poros preenchidos com ar, os maiores presentes na amostra. Quando o ar presente nestes poros é expulso e substituído por água, chegamos novamente à condição de saturação (Figura 4.5a), caracterizando um ciclo de secamento (drenagem) e umedecimento (embebição).

4.4 CONCLUSÃO

Neste estudo utilizamos o YLM para simular a CR obtida por drenagem para dois tipos de meios porosos deformados com três granulometrias cada. Avaliamos a influência do ângulo de contato (ou molhabilidade) na CR simulada obtida por drenagem para valores entre 0 e 40° e comparamos com valores experimentais. Além disso, exploramos o caráter preditivo do YLM para simular a CR obtida por embebição.

Os resultados mostraram que os maiores ângulos de contato e menores granulometrias se correlacionam melhor com os valores experimentais da CR obtida por drenagem. A simulação da CR por embebição, embora careça de sustentação experimental, se mostrou alinhada com a teoria que prevê o comportamento histerético da CR. A análise qualitativa das distribuições de equilíbrio obtida pelo YLM corrobora com a característica de histerese da CR, mostrando que o conteúdo de água retido no meio poroso é dependente do processo (drenagem ou embebição).

Desta forma, mostramos que a associação do mapeamento 3D do meio poroso pela técnica de μ CT e a aplicação do YLM é capaz de simular a CR de meios porosos deformados com boa correlação entre simulação e experimento para a CR obtida por drenagem, especialmente para o ângulo de contato de 40° e menores granulometrias, revelando o YLM ser uma ferramenta para a avaliação de retenção de meios porosos.

Permanece como desafio futuro aperfeiçoar o YLM para lidar com ângulos de contato superiores a 40°, além de validar as simulações para o caso da embebição.

REFERÊNCIAS

- ACHIENG, K. O. Modelling of soil moisture retention curve using machine learning techniques: Artificial and deep neural networks vs support vector regression models. **Computers & Geosciences**, v. 133, p. 104320, 2019.
- BORGES, J. A. R.; PIRES, L. F.; CÁSSARO, F. A. M.; et al. X-ray computed tomography for assessing the effect of tillage systems on topsoil morphological attributes. **Soil and Tillage Research**, v. 189, p. 25–35, 2019. Elsevier B.V.
- CAMARGO, M. A.; CÁSSARO, F. A. M.; PIRES, L. F. How do geometric factors influence soil water retention? A study using computerized microtomography. **Bulletin of Engineering Geology and the Environment**, v. 81, n. 4, p. 137, 2022.
- CAWLFIELD, G. E. **The contact angle between water and soil materials**, 1962. Montana State University.
- DEY, P.; SUNDRIYAL, P.; SAHOO, S. K. Science of Lagging Behind- Hysteresis in Soil Moisture Characteristic Curve - A Review. **International Journal of Current Microbiology and Applied Sciences**, v. 6, n. 10, p. 151–156, 2017.
- FAN, Z.; HU, C.; ZHU, Q.; et al. Three-dimensional pore characteristics and permeability properties of calcareous sand with different particle sizes. **Bulletin of Engineering Geology and the Environment**, v. 80, n. 3, p. 2659–2670, 2021.
- FERREIRA, T. R.; PIRES, L. F.; WILDENSCHILD, D.; et al. Lime application effects on soil aggregate properties: Use of the mean weight diameter and synchrotron-based X-ray μ CT techniques. **Geoderma**, v. 338, p. 585–596, 2019.
- FERREIRA, T. R.; PIRES, L. F.; WILDENSCHILD, D.; HECK, R. J.; ANTONINO, A. C. D. X-ray microtomography analysis of lime application effects on soil porous system. **Geoderma**, v. 324, p. 119–130, 2018.
- GALDOS, M. V.; BROWN, E.; ROSOLEM, C. A.; et al. Brachiaria species influence nitrate transport in soil by modifying soil structure with their root system. **Scientific Reports**, v. 10, n. 1, p. 1–11, 2020. Nature Research.
- GOOD, R. J. Contact angle, wetting, and adhesion: a critical review. **Journal of Adhesion Science and Technology**, v. 6, n. 12, p. 1269–1302, 1992.
- LIBARDI, P. L. **Dinâmica da água no solo**. 3^o ed. São Paulo: Edusp, 2018.
- MITRA, S.; DOROODCHI, E.; EVANS, G. M.; PAREEK, V.; JOSHI, J. B. Interaction dynamics of a spherical particle with a suspended liquid film. **AIChE Journal**, v. 62, n. 1, p. 295–314, 2016.
- PIRES, L. F.; AULER, A. C.; ROQUE, W. L.; MOONEY, S. J. X-ray microtomography analysis of soil pore structure dynamics under wetting and drying cycles. **Geoderma**, v. 362, p. 114103, 2020. Elsevier B.V.
- RIDLER, T. W.; CALVARD, S. Picture Thresholding Using an Iterative Slection Method. **IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics**, v. SMC-8, n. 8, p. 630–632, 1978.

SCHNEIDER, C. A.; RASBAND, W. S.; ELICEIRI, K. W. NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. **Nature Methods**, v. 9, n. 7, p. 671–675, 28. jul. 2012. Nature Publishing Group.

TAFTEH, A.; DAVATGAR, N.; SEDAGHAT, A. Estimation of important points on soil water retention curve (SWRC): comparison experimental-physical models and data mining technique. **Arabian Journal of Geosciences**, v. 15, n. 10, p. 968, 2022.

VAZ, C. M. P.; DE MARIA, I. C.; LASSO, P. O.; TULLER, M. Evaluation of an Advanced Benchtop Micro-Computed Tomography System for Quantifying Porosities and Pore-Size Distributions of Two Brazilian Oxisols. **Soil Science Society of America Journal**, v. 75, n. 3, p. 832–841, 2011. John Wiley & Sons, Ltd.

ZABOT, A. M.; CAMARGO, M. A.; WOLF, F. G.; et al. A Unified Algorithm for the Young–Laplace Method Applied to Porous Media. **Brazilian Journal of Physics**, v. 54, n. 3, p. 63, 2024.

ZHANG, T.; SUN, S. Thermodynamics-informed neural network (tinn) for phase equilibrium calculations considering capillary pressure. **Energies**, V. 14, N. 22, P. 7724, 2021.

5 CONCLUSÃO GERAL

Neste estudo buscamos responder ao seguinte problema de pesquisa: A utilização da técnica de μ CT 3D e análise de imagem podem contribuir para a caracterização da estrutura de meios porosos e fornecer informações para simulação computacional de propriedades de retenção de água em meios porosos?

A hipótese de que a técnica da μ CT 3D e análise de imagens seriam adequadas para a caracterização da estrutura de meios porosos e capazes de fornecer informações para a simulação computacional de propriedades de retenção de água em meios porosos se mostrou robusta diante dos resultados obtidos, especificamente, no capítulo 2 tratou-se da caracterização da estrutura de meios porosos e suas relações com as características de retenção de água e nos capítulos 3 e 4 abordou-se o método de Young-Laplace (YLM) e a simulação computacional da curva de retenção a partir de imagens 3D, obtidas pela técnica da μ CT 3D, via YLM.

Inerente às pesquisas, as limitações e dificuldades encontradas no desenvolvimento desta tese destacamos os seguintes pontos: 1) Os efeitos da pandemia (Covid-19) no Brasil, em meados de março de 2020, logo no início do desenvolvimento do projeto de doutorado, impactando diretamente o desenvolvimento das pesquisas devido às restrições impostas pelas autoridades competentes como *lock down*, distanciamento social, acesso aos laboratórios e equipamentos, entre outros. 2) A ausência dos dados experimentais da curva de retenção por embebição (umedecimento) e a necessidade de repetição nos experimentos para aprimorar a análise estatística dos dados experimentais. 3) O valor máximo para o ângulo de contato estar restrito a 40° nas simulações via YLM e 4) Intrínseco à técnica da μ CT 3D, a limitação ao acesso das estruturas porosas de tamanho superior à da resolução das imagens tomográficas.

Apesar das limitações e dificuldades relatadas acima, a técnica da μ CT 3D associada à análise de imagens se mostrou adequada para a caracterização da estrutura de meios porosos e capaz de fornecer informações para a simulação computacional de propriedades de retenção de água em meios porosos. Estudos futuros podem explorar o potencial do YLM em meios porosos como o solo, para a predição das características de retenção pelos processos de drenagem (secamento) ou embebição (umedecimento), fornecendo informações para a avaliação dos

fenômenos associados ao comportamento de histerese em meios porosos e suas relações com outros parâmetros de caracterização geométricos e topológicos. Outra questão que pode ser estudada no futuro está relacionada com avanços no YLM, seja do ponto de vista de implementação do YLM, incorporação de mais recursos ou até mesmo em termos de interface do YLM (tornar a aplicação mais amigável ao usuário) que este estudo se restringiu a um código em C++ muito eficiente.

APÊNDICE A – VARIABILIDADE ESPACIAL DA POROSIDADE ACESSÍVEL

A análise da variabilidade espacial da porosidade acessível (ϕ) dos meios porosos (esferas de vidro – GB e grãos de areia – SG) foi realizada para demonstrar que a estrutura porosa interna das amostras dos meios porosos estudados apresentavam semelhanças quanto a esta propriedade física. A análise também serviu para confirmar que o procedimento de deposição do material dentro dos recipientes utilizados para acondicioná-los apresentava semelhanças (baixo coeficiente de variação) entre as amostras.

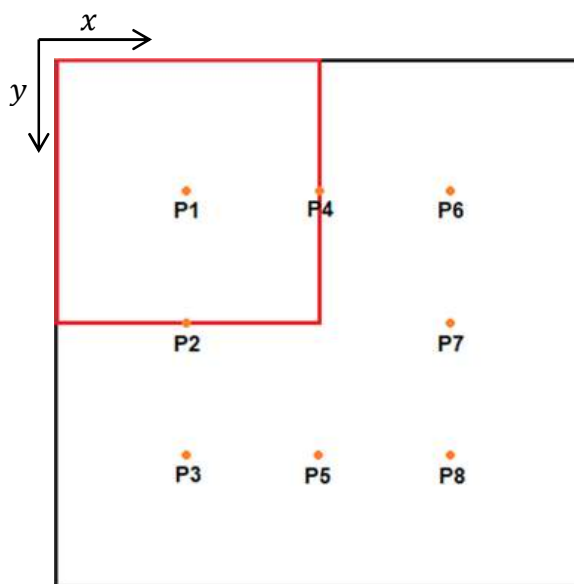
Os seguintes procedimentos foram realizados para analisar a variabilidade espacial da ϕ da estrutura interna das amostras:

- 1) Nas imagens segmentadas, subvolumes (V_{sb}) com 1 / 4 do volume total da amostra (V_t) foram selecionados a partir do volume de interesse (VOI) de cada amostra analisada;
- 2) Para cada V_{sb} selecionado foi contado o número de voxels pertencentes ao espaço poroso e o número total de voxels que compunham V_t ;
- 3) Em seguida, o número de voxels do espaço poroso foi dividido pelo número total de voxels dando o valor de ϕ para o V_{sb} considerado;
- 4) Para cada V_t estudado, oito V_{sb} foram selecionados e analisados.

As dimensões dos V_{sb} das amostras GB foram 413 x 413 x 413 pixels, enquanto para as amostras SG foram selecionados 480 x 480 x 940 pixels. A Figura A.1 mostra uma representação esquemática 2D das posições P1 a P8, que indicam o centro de cada V_{sb} empregado para avaliar a variabilidade espacial da ϕ . A região destacada em vermelho (Figura A.1) indica o V_{sb} , cujo centro está na posição P1.

As coordenadas $P(x, y)$ de cada uma das posições do centro do V_{sb} selecionados são apresentados na Tabela A.1. Não houve alteração na direção z, ou seja, o V_{sb} teve a mesma dimensão z para todas as amostras avaliadas de cada meio poroso (413 pixels para GB e 980 pixels para SG).

Figura A.1 – Desenho esquemático representando os pontos do centro dos subvolumes (V_{sb}) considerados na análise de variabilidade espacial da porosidade acessível (ϕ). P1 a P8 indicam a posição (x, y) do centro dos V_{sb} considerados na análise da ϕ das amostras estudadas. O quadrado vermelho limita um subvolume com centro no ponto P1



Fonte: O autor

A Figura A.2 apresenta os resultados obtidos para ϕ do V_{sb} para as amostras de meios porosos GB e SG. Três granulometrias foram avaliadas para cada tipo de meio poroso estudado, as quais foram definidas como S_a , M_a e L_a (GB) e S_b , M_b e L_b (SG). As granulometrias investigadas referem-se aos tamanhos de partículas finas (S), intermediárias (M) e grossas (L), respectivamente.

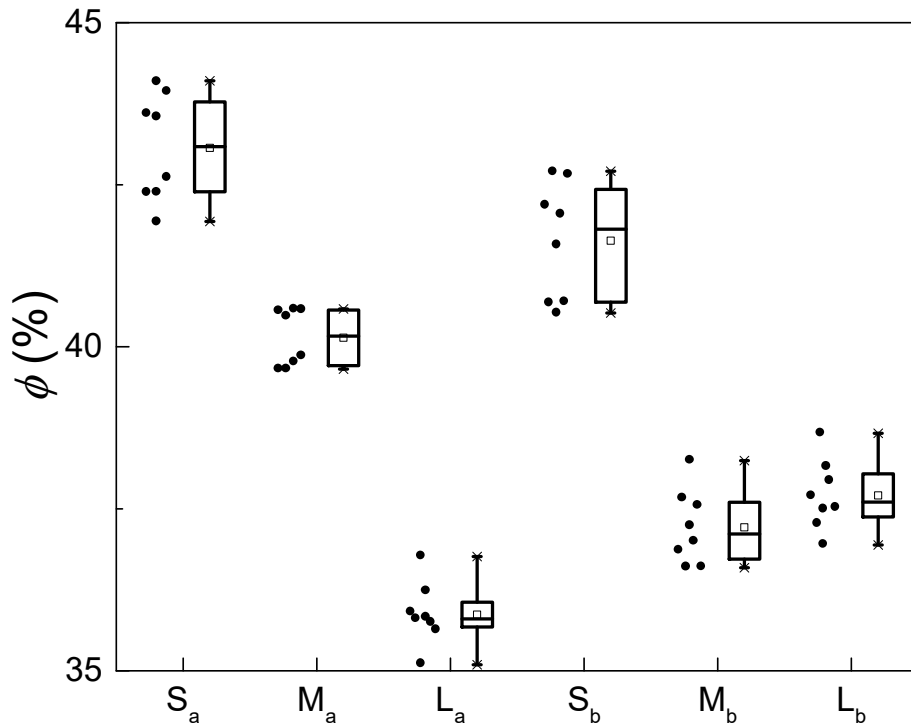
Tabela A.1 – Coordenadas $P(x, y)$ do centro dos subvolumes (V_{sb}) utilizadas para determinar a variabilidade espacial da porosidade acessível (ϕ) dos meios porosos avaliados (esferas de vidro – GB e grãos de areia – SG). Os valores são expressos em pixels

	GB	SG
P1	(206, 206)	(240, 240)
P2	(206, 412)	(240, 480)
P3	(206, 619)	(240, 720)
P4	(412, 206)	(480, 240)
P5	(412, 619)	(480, 720)
P6	(619, 206)	(720, 240)
P7	(619, 412)	(720, 480)
P8	(619, 619)	(720, 720)

Fonte: O autor

Os resultados apresentados (Figura A.2) mostram que, em geral, foi observada baixa variabilidade entre os valores de ϕ para os diferentes meios porosos estudados. O maior coeficiente de variação de ϕ foi encontrado para a amostra S_b ($CV = 2,18\%$). Também observamos uma tendência de menor variabilidade para os meios porosos compostos por granulometrias maiores. Assim, com base nos resultados obtidos, é possível inferir que as amostras GB e SG apresentam homogeneidade nas estruturas internas em relação à ϕ . Isso permitiu, em um primeiro momento, investigar amostras com menor complexidade quando comparadas a meios porosos consolidados (indeformados). Este procedimento foi seguido em nosso estudo visando um maior controle da complexidade dos meios porosos, já que o objetivo principal do trabalho foi comparar a relação entre retenção de água e propriedades do espaço poroso (conectividade, tortuosidade e curva de distribuição de tamanho de poros).

Figura A.2 – Boxplots da porosidade acessível (ϕ) dos meios porosos estudados constituídos por esferas de vidro (GB) com granulometria fina (S_a), intermediária (M_a) e grossa (L_a) e também por grãos de areia (SG) apresentando granulometria fina (S_b), intermediária (M_b) e grossa (L_b). Os dados medidos, com base na análise de imagens 3D, são representados pelos pontos cheios. Dentro das caixas, a barra horizontal representa a mediana enquanto o ponto vazado (quadrado) indica o valor médio



Fonte: O autor

APÊNDICE B – SELEÇÃO DOS INTERVALOS DE TENSÃO

A seleção dos intervalos de tensão considerados para cada região da curva de retenção de água (CR) (Tabela B.1) dos meios porosos avaliados foi realizada seguindo as etapas descritas a seguir:

1. Os dados experimentais da CR foram ajustados seguindo o modelo de Van Genuchten (VG) para determinar os parâmetros da CR;

Seguindo o modelo de VG, a CR é ajustada usando a Equação:

$$\theta = \theta_0 + \frac{(\theta_s - \theta_0)}{[1 + (ah)^n]^m} \quad \text{B.1}$$

onde: θ_s é a umidade de saturação da amostra, θ_0 é a umidade residual da amostra, enquanto que m , n e a são os demais parâmetros de ajuste adimensionais do modelo.

A função Capacidade de Água é obtida pela primeira derivada da equação B.1 em relação à tensão aplicada, assim:

$$\frac{d\theta}{dh} = \frac{(\theta_s - \theta_0)mna(ah)^{n-1}}{[1 + (ah)^n]^{m+1}} \quad \text{B.2}$$

2. A Função Capacidade de Água (WCF) foi obtida a partir dos parâmetros de ajuste da CR e foi identificado o valor máximo da WCF, denominado WCF_{max} , referente ao ponto de inflexão da CR;

3. Foi atribuído um valor de referência arbitrário igual a $0,15 WCF_{max}$ e dois valores de tensão aplicada foram identificados associados ao valor de referência, em que cada valor indicava um limite entre as três regiões CR consideradas (região de saturação, região de maior variação da umidade e região de umidade residual).

Tabela B.1 – Intervalos de tensão aplicadas (h) consideradas para cada região da curva de retenção de água (CR) das amostras estudadas

Amostra	Região da CR ($h - \text{cm H}_2\text{O}$)		
	Saturação	Maior Variação da Umidade	Umidade Residual
S_a	$h < 12,5$	$12,5 < h < 18,0$	$h > 18,0$
M_a	$h < 6,0$	$6,0 < h < 10,5$	$h > 10,5$
L_a	$h < 2,5$	$2,5 < h < 5,8$	$h > 5,8$
S_b	$h < 36,5$	$36,5 < h < 52,5$	$h > 52,5$
M_b	$h < 18,0$	$18,0 < h < 29,5$	$h > 29,5$
L_b	$h < 8,0$	$8,0 < h < 19,0$	$h > 19,0$

Fonte: O autor.

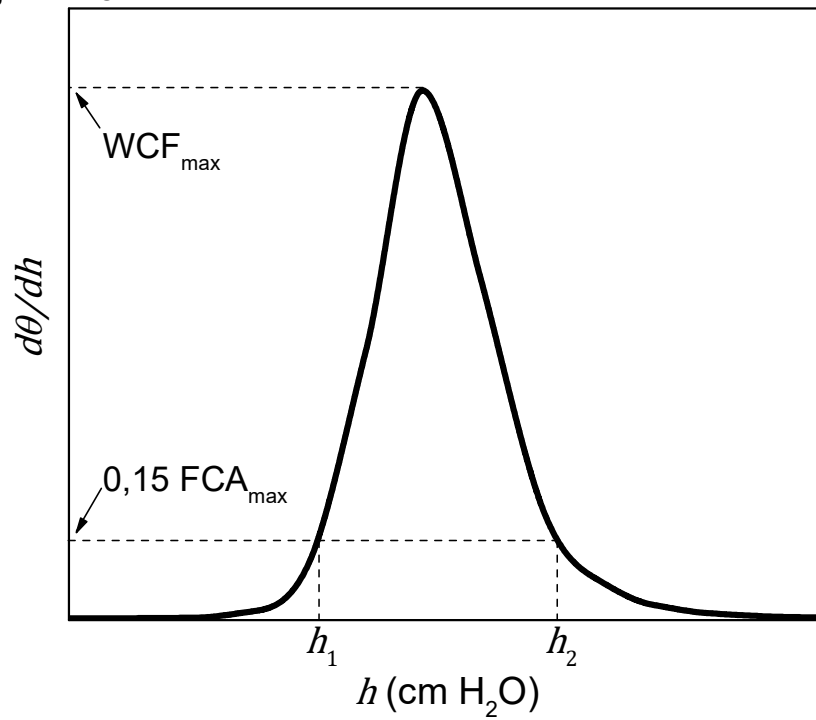
A Tabela B.2 apresenta os valores dos parâmetros de ajuste da CR pelo modelo de VG para as amostras deste estudo. A Figura B.1 mostra uma WCF típica, obtida através do ajuste da CR pelo modelo de VG, sendo h_1 e h_2 os valores de tensão usados como limiar das regiões da CR nas amostras avaliadas. O valor h_1 é o limiar entre a região de saturação e a região de maior variação da umidade, enquanto o valor h_2 limita as regiões de maior variação da umidade e da umidade residual.

Tabela B.2 – Parâmetros de ajuste da curva de retenção de água (CR) pelo modelo de Van Genuchten (VG) usado para determinar a função capacidade de água (WCF) das amostras estudadas

Amostra	Parâmetros de ajuste da CR – modelo VG				
	θ_s ($cm^3 cm^{-3}$)	θ_0 ($cm^3 cm^{-3}$)	m	n	a
S_a	0,387	0,045	0,946	18,650	0,066
M_a	0,344	0,003	0,921	12,724	0,123
L_a	0,320	0,021	0,898	9,762	0,249
S_b	0,439	0,116	0,953	21,163	0,023
M_b	0,382	0,049	0,927	13,616	0,043
L_b	0,440	0,106	0,872	7,816	0,078

Fonte: O autor.

Figura B.1 – Representação de uma função capacidade de água (WCF) típica obtida através do ajuste da curva de retenção da água (CR) segundo o modelo de Van Genuchten (VG). Os valores h_1 e h_2 indicam os valores de tensão (h) usados como limiares entre as regiões da CR das amostras estudadas



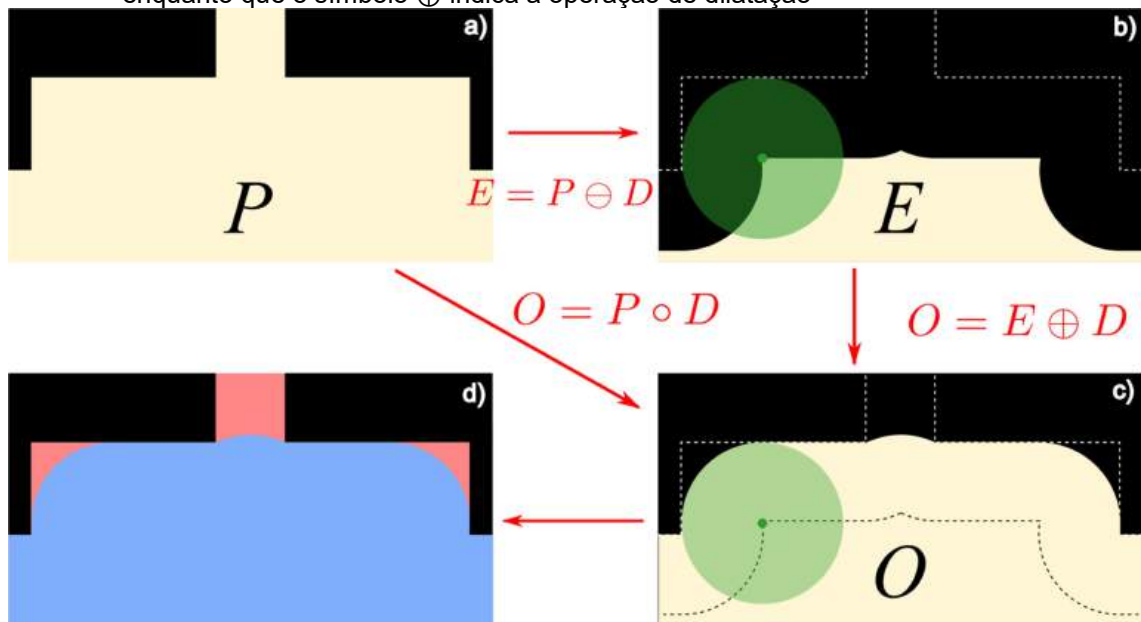
Fonte: O autor.

APÊNDICE C – MORFOLOGIA MATEMÁTICA APLICADA AO YLM

A Figura C.1 ilustra como a região ocupada pelo fluido invasor é encontrada usando operações de Morfologia Matemática (MM). No YLM, considera-se que a imagem é formada exclusivamente pela união entre os pixels relacionados com as regiões sólidas e porosas (P) e que as operações de MM não expandirão a imagem além de suas dimensões originais.

Em MM, a operação de abertura ($\circ$) é definida pela combinação de duas operações fundamentais: erosão e dilatação. Na operação de erosão, denotada por $\ominus$, um elemento estruturante com formato de disco D é aplicado sobre a região P (Figura C.1a) resultando em uma região $E = P \ominus D$, conforme mostra a Figura C.1b. A região E compreende todos os pontos em P onde o elemento estruturante pode ser centrado sem sobrepor a região sólida. Observe que, embora nenhum segmento possa se sobrepor à região sólida, é permitido que parte do elemento estruturante fique fora da imagem limite.

Figura C.1 – Exemplos das operações fundamentais de Morfologia Matemática (MM). Em a) a região porosa P é mostrada em bege. Itens b) e c) as regiões bege E e O representam o conjunto de pontos resultantes das operações de erosão e dilatação, respectivamente. Item d) exibe o resultado final da operação de abertura ($\circ$). O elemento estruturante D é representado pelo disco esverdeado. O símbolo $\ominus$ denota uma operação de erosão, enquanto que o símbolo $\oplus$ indica a operação de dilatação



Fonte: O autor.

A Figura C.1c exemplifica a operação de dilatação de E por um elemento estruturante D (denotado por $E \oplus D$) resultando na região O com todos os pontos

interceptados pelo disco D conforme seu centro se move em torno da região E . É importante observar que o resultado inclui apenas os pontos originalmente pertencentes a P , caso contrário, a imagem final seria expandida.

Por fim, a Figura C.1c também pode ser obtida (região O) diretamente como resultado da operação de abertura de P (Figura C.1a) pelo elemento estruturante D ($O = P \circ D$), que compreende todos os pontos de D à medida que este elemento se move em torno de P sem se estender sobre a região sólida. Percebe-se na Figura C.1b, que o elemento estruturante pode se estender para regiões além da imagem original, expandindo-a. Além disso, na Figura C.1c, a região resultante O contém apenas pontos pertencentes inicialmente a P , ou seja, preservando as dimensões originais da imagem. A Figura C.1d mostra o resultado final destacando a região acessada pelo elemento estruturante D de tamanho previamente definido.

Na Figura C.1, a erosão de P por D seguida da dilatação por D é idêntica à abertura de P por D , ou seja,

$$O = P \circ D = E \oplus D = (P \ominus D) \oplus D \quad (C.1)$$

Na verdade, é possível comprovar que a equação C.1 representa um resultado geral, de grande importância prática, pois permite realizar a operação de abertura utilizando a combinação das operações de dilatação e erosão. Além disso, a dilatação pode ser obtida aplicando erosão ao negativo de uma imagem. O negativo é recuperado trocando o primeiro plano e o segundo plano da imagem, que no nosso caso são regiões porosas e sólidas, respectivamente. Denotando o negativo por uma barra superior, pode-se mostrar que:

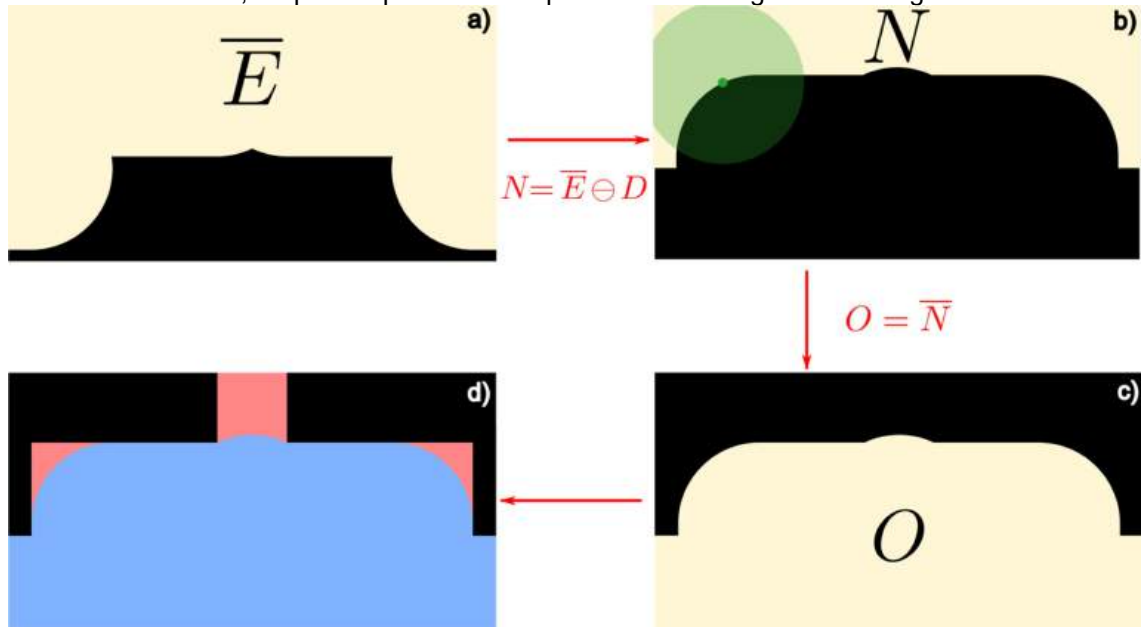
$$E \oplus D = \overline{(\bar{E} \ominus D)} \quad (C.2)$$

A operação do segundo membro da equação C.2 é representada na Figura C.2a-d, que dá o mesmo resultado já exibido na Figura C.1, que mostra a operação do primeiro membro. Usando a Equação C.2, a operação de abertura na Equação C.1 é escrito apenas em termos de erosões como segue:

$$O = \overline{(\bar{E} \ominus D)} = \overline{[(P \ominus D) \ominus D]} \quad (C.3)$$

Como mencionado anteriormente, para obter um algoritmo eficiente, as operações de erosão devem ser realizadas com o auxílio da Transformada de Distância Euclidiana (EDT). O resultado da EDT é um mapa com a distância de cada pixel de poro ao pixel sólido mais próximo, e pode ser calculado usando um algoritmo paralelo muito eficiente proposto por Saito e Toriwaki (1994).

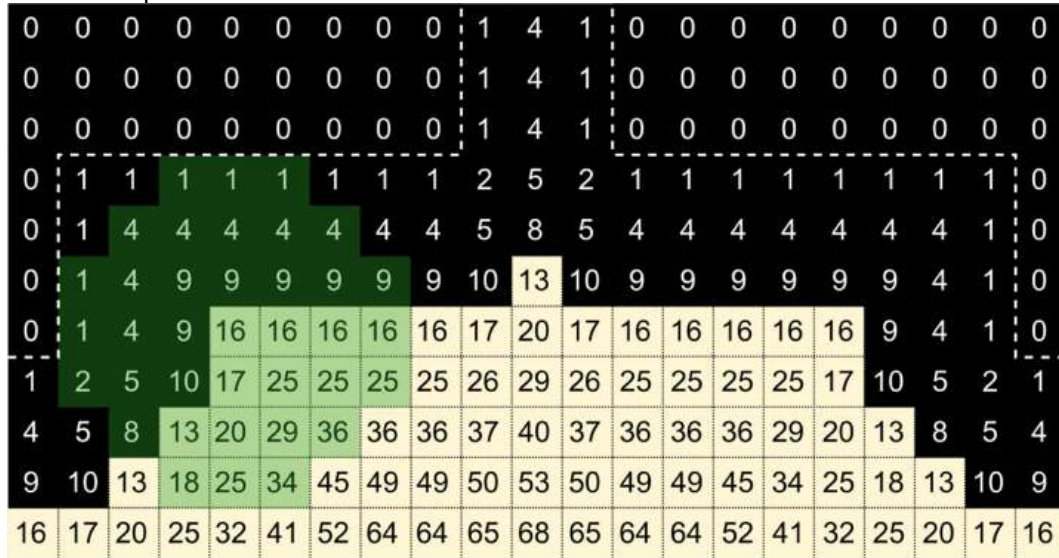
Figura C.2 – A operação de abertura em P na Figura C.1a é realizada por duas operações de erosão. Isso é possível porque o negativo da dilatação é igual à erosão do negativo. a) Resultados do negativo da região E na Figura C.1b. Itens b) e c) as regiões N e O representam o conjunto de pontos resultantes das operações de erosão e negativo da região N , respectivamente. d) Exibe o resultado final. O símbolo $\ominus$ denota uma operação de erosão, enquanto que a barra superior indica o negativo da imagem



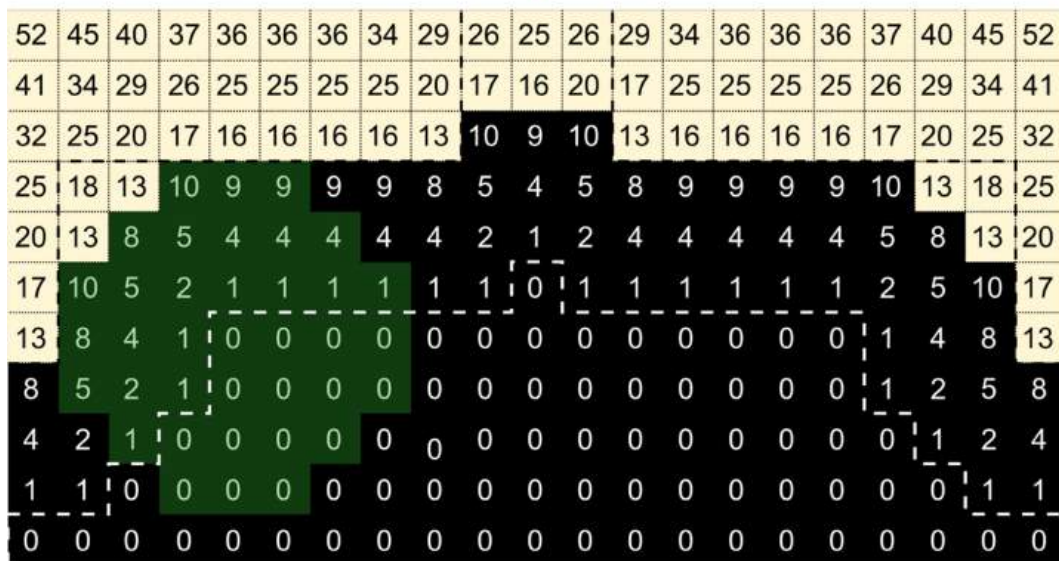
Fonte: O autor.

Se o elemento estruturante for um círculo de raio R , então a operação de erosão é dada pelo conjunto de pixels cuja distância ao sólido é maior que R ou, equivalentemente, $EDT_{ij}^2 > R^2$ onde EDT_{ij} indica a distância do pixel localizado na posição ij da imagem até o pixel sólido mais próximo (Glasbey; Horgan, 1995). O uso da distância ao quadrado é vantajoso, pois permite que o cálculo seja tratado apenas por números inteiros. A Figura C.3 mostra como a EDT pode ser usado para calcular a operação de abertura da região porosa por um círculo. O procedimento começa a partir do resultado EDT, mostrado na Figura C.3a. Conforme explicado, os valores são o quadrado da distância até o plano de fundo (sólido). Tomando-se o negativo deste resultado, ou seja, colocando-o como plano de fundo (Figura C.3b), aplica-se novamente a EDT a partir do qual se realiza uma nova erosão. O negativo do resultado desta última operação (Figura C.3c) dá a abertura da região porosa pelo círculo (Figura C.3d).

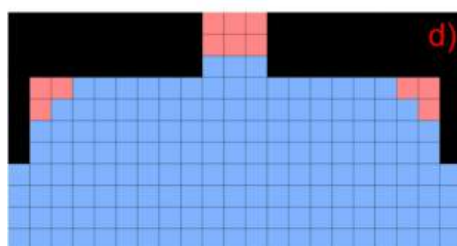
Figura C.3 – Operação de abertura da região porosa por um círculo de 7 pixels de diâmetro (i.e., $R^2 = 3.5^2 = 12.25$) usando a EDT (ver Figura 3.2). a) Mostra os valores da EDT usados na erosão da região porosa. b) Valores da EDT usados na erosão da imagem negativa de a). c) A imagem negativa de b) equivale à operação de abertura da região porosa diretamente. d) Imagem final após operação de abertura da região porosa por um círculo de 7 pixels de diâmetro



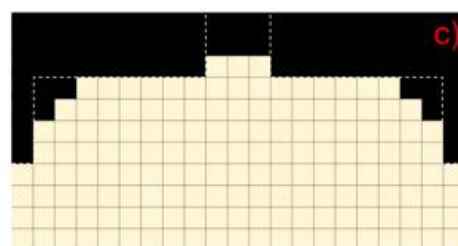
a)



b)



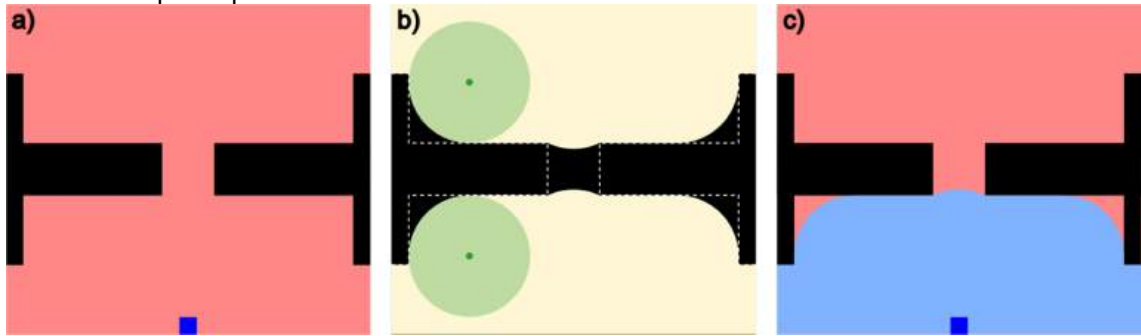
d)



c)

A Figura C.4 ilustra uma drenagem de baixo para cima através de um canal estreito. A fonte de fluido não molhante é representada pelo quadrado azul escuro (Figura C.4a). Pela operação de abertura e consequentemente pela equação de Young-Laplace, a região superior poderia ser ocupada pelo fluido não molhante, porém, o círculo não pode ultrapassar o estreitamento para este raio (Figura C.4b). Do ponto de vista morfológico, essa questão é abordada descartando a região superior por não estar ligada à fonte.

Figura C.4 – Uma drenagem de baixo para cima através de um canal estreito com o fluido molhante em vermelho e a fonte de fluido não molhante representada pelo quadrado azul escuro. b) A operação de abertura identifica duas regiões (cor bege) que poderiam ser ocupadas pelo c) fluido não molhante invasor (azul claro), mas a região superior não está conectada à fonte do fluido (pixel azul escuro) e, portanto, não pode ser preenchido na etapa de pressão atual



Fonte: O autor.

O próximo passo é a identificação da conexão entre as regiões que pode ser realizada utilizando o algoritmo de He et al. (2013). Essa técnica atribui um rótulo a cada grupo de pixels não conectado, permitindo ignorar os pixels com rótulos diferentes dos das fontes (Figura C.4c). Essa metodologia considera a possibilidade de fontes múltiplas.

Usando a notação da MM discutida acima, o YLM pode ser expresso por (Hilpert; Miller, 2001):

$$s(r) = \frac{\sum F_{l_v}(P \circ D)}{\sum P} \quad (C.4)$$

onde $s(r)$ é a saturação do fluido invasor para um determinado raio do círculo (r , e $D \equiv D(r)$) e o símbolo de somatório representa a operação de contagem dos pixels de cada região. Já o operador F_{l_v} denota o processo de filtragem dos pixels conectados com a fonte de fluido invasor.

Conforme descrito no tópico 3.2, a embebição pode ser obtida de forma semelhante aos processos de drenagem. Mas, na verdade, alguns detalhes de implementação distinguem esses dois processos. Essas diferenças foram notadas pelos primeiros autores do método (Hazlett, 1995; Magnani, 1996; Magnani et al., 2000) e foram discutidas no tópico 3.3.

REFERÊNCIAS

GLASBEY, C. A.; HORGAN, G. W. **Image Analysis for the Biological Sciences**. 1st ed. Wiley, 1995.

HAZLETT, R. D. Simulation of capillary-dominated displacements in microtomographic images of reservoir rocks. **Transport in Porous Media**, v. 20, n. 1–2, p. 21–35, 1995.

HE, L.-F.; CHAO, Y.-Y.; SUZUKI, K. An Algorithm for Connected-Component Labeling, Hole Labeling and Euler Number Computing. **Journal of Computer Science and Technology**, v. 28, n. 3, p. 468–478, 2013.

HILPERT, M.; MILLER, C. T. Pore-morphology-based simulation of drainage in totally wetting porous media. **Advances in Water Resources**, v. 24, n. 3–4, p. 243–255, 2001.

MAGNANI, F. S. **Determinação das configurações de equilíbrio em meios porosos indeformáveis**, 1996. UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA.

MAGNANI, F. S.; PHILIPPI, P. C.; LIANG, Z. R.; FERNANDES, C. P. Modelling two-phase equilibrium in three-dimensional porous microstructures. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 26, n. 1, p. 99–123, 2000.

SAITO, T.; TORIWAKI, J.-I. New algorithms for euclidean distance transformation of an n-dimensional digitized picture with applications. **Pattern Recognition**, v. 27, n. 11, p. 1551–1565, 1994.

**APÊNDICE D – MELHORIAS PARA A SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE
DRENAGEM COM O YLM**

Como a maioria das aplicações do YLM se limita a simulações de drenagem, esse processo recebeu maior atenção dos pesquisadores ao longo dos anos em relação à embebição. Consequentemente, melhorias importantes foram propostas na literatura para o processo de drenagem e, aqui, descrevemos duas mudanças significativas no procedimento original resumida pela Equação C.4.

Hilpert e Miller (2001) identificaram um problema na Equação C.4 que leva a uma superestimação do valor de saturação em algumas situações. Conforme exibido na Figura D.1a, para um processo de drenagem do fluido molhante (vermelho) de baixo para cima em uma geometria selecionada com duas grandes regiões de poros separadas por um canal curto ou estreitamento (geometria “*ink bottle*”), a operação de abertura resulta em duas regiões que estão conectadas (Figura D.1c). Porém, durante uma invasão real, o fluido não molhante (azul) não atingiria a seção superior para o valor da pressão referente ao raio do círculo indicado na Figura D.1b, pois não poderia atravessar o canal. Isso só seria possível se todo o círculo pudesse atravessar o canal.

Para evitar esse erro, Hilpert e Miller (2001) propuseram uma correção simples (Figura D.1d) que consiste em identificar as regiões conectadas à fonte de fluido entre a erosão (Figura D.1b) e a dilatação (Figura D.1f) em vez de após a dilatação (Figura D.1e). A Figura D.1g e a Figura D.1h mostram a diferença entre a drenagem YLM original e a drenagem YLM com a correção de Hilpert e Miller (2001), respectivamente. Considerando esta correção, a Equação C.4 é substituída por:

$$s(r) = \frac{\sum \{ [F_{lv}(P \ominus D)] \oplus D \}}{\sum P} \quad (D.1)$$

O processo de drenagem descrito pela Equação D.1 limita-se à simulação da invasão de um fluido totalmente não molhante, ou equivalentemente, o valor do ângulo de contato na Figura 3.1a é sempre zero. Schulz et al. (2015) apresentaram uma pequena modificação nesse algoritmo, permitindo que diferentes valores para o ângulo de contato sejam definidos. O conceito usado pelos autores é representado na Figura D.2. Ela mostra que se um círculo com um raio diferente for usado (R' para erosão e R para dilatação), então uma interface final com um raio de curvatura R' e ângulo de contato α , dado por,

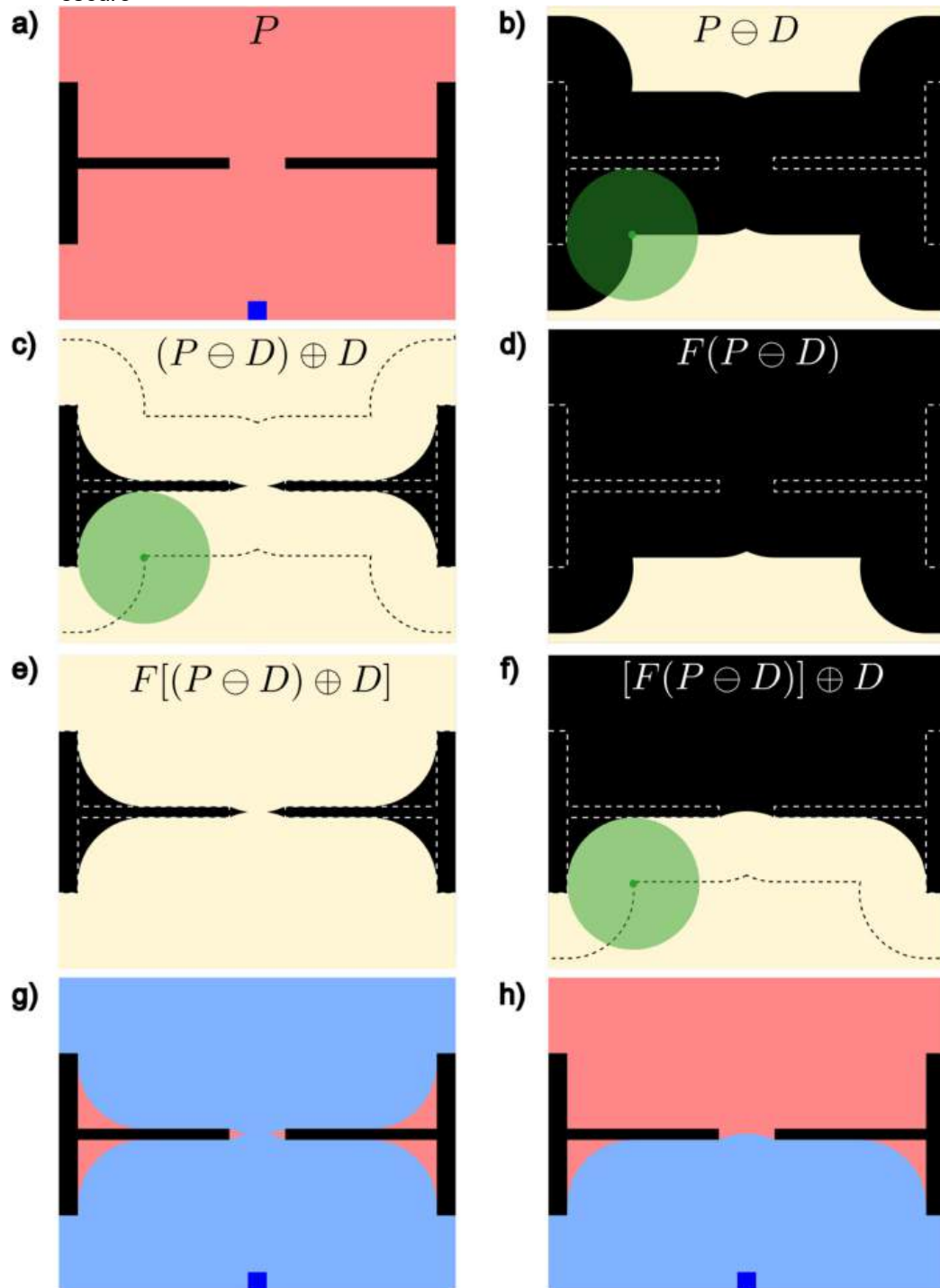
$$R' = R \cos \alpha, \quad (D.2)$$

é alcançado. Incluindo esta melhoria, a Equação D.1 é modificado para a Equação 3.2 em que o elemento estruturante D' está associado ao círculo de raio R' . Mesmo

essa generalização possibilitando aplicações mais realistas ao YLM, tal fato ainda não é amplamente conhecido pela comunidade científica, pois trabalhos recentes ainda apontam a impossibilidade de alteração do ângulo de contato (Camargo; Cássaro; Pires, 2022; Mostaghimi *et al.*, 2017).

Uma das principais vantagens dessa abordagem é a facilidade de implementação. Como apenas o raio da erosão precisa ser modificado, ele é facilmente incorporado ao código YLM existente. Além disso, como a erosão é computada pixel a pixel usando o resultado da EDT, um caso de molhabilidade mista pode ser prontamente realizado atribuindo-se um ângulo de contato individual a cada pixel (Schulz; Wargo; Kumbur, 2015).

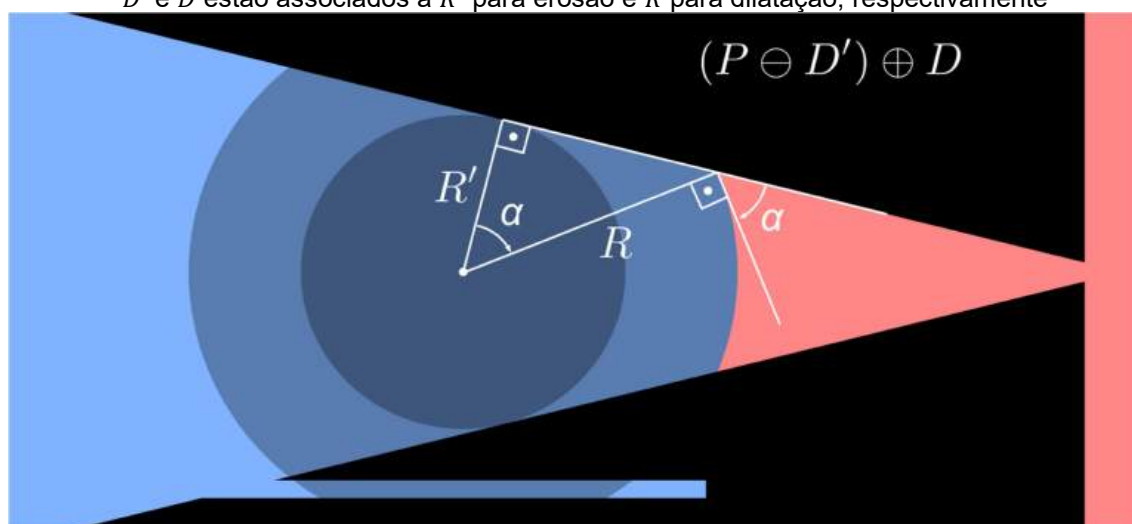
Figura D.1 – Representação de um processo de drenagem a) do fluido molhante (vermelho) de baixo para cima em uma geometria com duas grandes regiões de poros P separadas por um canal estreito, geometria “ink bottle”. Comum a ambos os casos, a operação de erosão é realizada em b). Os itens c), e) e g) mostram uma drenagem no algoritmo YLM originalmente proposto por Hazlett (1995) e também por Magnani (1996) e Magnani et al. (2000). Os itens d), f) e h) apresentam a correção de Hilpert e Miller (2001) no algoritmo YLM. A fonte de fluido invasor não molhante (azul) é representada pelo quadrado azul escuro



Fonte: O autor.

Por outro lado, como a superfície do meio poroso é, em geral, curva, o ângulo de contato dependerá dessa curvatura. Além disso, se o círculo maior usado na dilatação se estender além da parede até um poro próximo, essa região pode ser atribuída incorretamente como ocupada pelo fluido invasor. Porém, para isso acontecer, essa região também deve ter uma ligação com a fonte do fluido. Esta situação é mostrada na Figura D.2, onde o círculo com raio R' se estende até um canal inferior.

Figura D.2 – A sequência de operações de Morfologia matemática proposta por Schulz et al. (2015) para permitir simulações de drenagem com diferentes ângulos de contato (α). Os discos D' e D estão associados a R' para erosão e R para dilatação, respectivamente



Fonte: O autor.

Conforme mencionado pelos autores, em aplicações petrofísicas, essas duas desvantagens não representam um problema sério se $\alpha \lesssim 40^\circ$, pois as amostras de rocha geralmente têm baixa porosidade e um grande número de poros pequenos. Além disso, como tratado no tópico 3.4, uma membrana apropriada torna a modificação proposta por Schulz et al. (2015) adequada até mesmo para a embebição.

REFERÊNCIAS

- CAMARGO, M. A.; CÁSSARO, F. A. M.; PIRES, L. F. How do geometric factors influence soil water retention? A study using computerized microtomography. **Bulletin of Engineering Geology and the Environment**, v. 81, n. 4, p. 137, 2022.
- HAZLETT, R. D. Simulation of capillary-dominated displacements in

microtomographic images of reservoir rocks. **Transport in Porous Media**, v. 20, n. 1–2, p. 21–35, 1995.

HILPERT, M.; MILLER, C. T. Pore-morphology-based simulation of drainage in totally wetting porous media. **Advances in Water Resources**, v. 24, n. 3–4, p. 243–255, 2001.

MAGNANI, F. S. **Determinação das configurações de equilíbrio em meios porosos indeformáveis**, 1996. UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA.

MAGNANI, F. S.; PHILIPPI, P. C.; LIANG, Z. R.; FERNANDES, C. P. Modelling two-phase equilibrium in three-dimensional porous microstructures. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 26, n. 1, p. 99–123, 2000.

MOSTAGHIMI, P.; ARMSTRONG, R. T.; GERAMI, A.; et al. Cleat-scale characterisation of coal: An overview. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, v. 39, p. 143–160, 2017.

SCHULZ, V. P.; WARGO, E. A.; KUMBUR, E. C. Pore-Morphology-Based Simulation of Drainage in Porous Media Featuring a Locally Variable Contact Angle. **Transport in Porous Media**, v. 107, n. 1, p. 13–25, 2015.

ANEXO A – ARTIGO 1

First published in Bulletin of Engineering Geology and the Environment, volume 81, article 137, year 2022 by Springer Nature - Reproduced with permission from Springer Nature.



How do geometric factors influence soil water retention? A study using computerized microtomography

Mario A. Camargo¹ · Fabio A. M. Cássaro² · Luiz F. Pires²

Received: 19 August 2021 / Accepted: 26 February 2022
© Springer-Verlag GmbH Germany, part of Springer Nature 2022

Abstract

Relating porous media morphological parameters to their water retention characteristics is fundamental to develop predictive water retention models. The main objective of this study was to verify how connectivity, tortuosity, accessible porosity, and pore size distribution affect the porous media water retention characteristic. The study employed three-dimensional (3D) image analysis, obtained using X-ray computerized microtomography (μ CT). The evaluation of these parameters was accomplished associating the morphological opening method to an approach proposed in this study, which we called the filling method—fiLMe. The fiLMe allows the separation of the pore system into pore diameter intervals, which is not possible with the opening method. Our results indicated that within the tension region associated with greater variation in the water retention (ranging from 2.5 to 52.5 cmH_2O —considering all porous media studied), a higher number of connected and sinuous pores was found. This means that the primary characteristic of these pores is drainage. The connectivity and tortuosity results obtained by the two methods (morphological opening and fiLMe) showed that the samples analyzed presented bottleneck characteristics in the pore space. However, the fiLMe method was faster and more versatile when compared to the morphological opening method. The 3D reconstructions of the porous medium allowed a quantitative analysis of the water retention properties of the samples investigated, enabling the observation of the regions of saturation, highest moisture content variation, and residual moisture content in the retention curves.

Keywords ImageJ · Thickness · Filling method (fiLMe) · Morphological opening process · X-ray microtomography

Introduction

The modeling involving water movement and retention in porous media has aroused the scientific community's interest due to its great applicability in several different areas such as agriculture, engineering, and environmental sciences. Water retention and mass transport across porous media profiles are known to be closely related to their geometrical (pore diameter, pore shape, pore tortuosity, etc.) and topological (pore connectivity) properties (Rab et al. 2014; Ferreira et al. 2018, 2019; Cunha et al. 2020; Galdos et al. 2020; Fan et al. 2021). Thus, describing the relationship among these

properties and presenting a physical interpretation of the water dynamics phenomenon might shed light on this issue, helping the design and improvement of models to predict water retention and mass transport in pore systems.

The three-dimensional (3D) reconstruction of pore systems based on a set of two-dimensional (2D) images, acquired using X-ray computerized microtomography (μ CT), has enabled detailed studies of the inner structure of porous media across different scales (Park et al. 2015; Zhou et al. 2016; Juyal et al. 2018; Leue et al. 2019; Xiaoqin et al. 2021; Guber et al. 2021; Koestel et al. 2021). Increased computational capabilities and the development of algorithms dedicated exclusively to the analysis of 3D images of porous media have allowed a thorough investigation of the relation between the porous system geometrical and morphological properties and their role in water dynamics (Ngom et al. 2011; Schneider et al. 2012; Mady and Shein 2018; Oliveira et al. 2020; dos Reis et al. 2021; Yu et al. 2021).

In recent years, different methods to evaluate the pore size distribution curve (PSD) based on 3D images have been

✉ Mario A. Camargo
mario.camargo@ifsc.edu.br

¹ Federal Institute of Santa Catarina, Canoinhas Campus, 89.466-312, Canoinhas, Santa Catarina, Brazil

² Laboratory of Physics Applied To Soils and Environmental Sciences, Department of Physics, State University of Ponta Grossa, 84.030-900, Ponta Grossa, Paraná, Brazil

developed (Münch and Holzer 2008; Cássaro et al. 2017; Houston et al. 2017; Song et al. 2019). One of the advantages of the 3D image-based methods is their ability to analyze the whole pore space (connected and non-connected pores) (Kravchenko et al. 2015; Schlüter and Vogel 2016). This is not usually possible using other experimental conventional methods such as mercury intrusion porosimetry and nitrogen adsorption isotherms (Hajnos et al. 2006; Lipiec et al. 2012). These conventional methods can detect only connected pores due to their intrinsic measurement characteristics. Thus, understanding how pore connectivity is related to the PSD obtained via 3D images might help the design of models to predict the retention and transport of matter through porous media.

Recently, many studies have focused on 3D image analysis of properties such as pore connectivity and tortuosity, relating them with changes in the soil pore system induced by anthropogenic action. For instance, Katuwal et al. (2015) studied the gas transport behavior in macropore networks relating it with soil properties such as air permeability and air-filled porosity. They demonstrated that these soil properties are useful to infer soil macropore functions. Pires et al. (2017) demonstrated that soil management systems may induce important changes in the architecture of the pores, influencing their connectivity and tortuosity with impacts on water retention characteristics. Recently, these authors related the network tortuosity and connectivity of the pores with their size and shape distributions (Pires et al. 2019).

Tseng et al. (2018) simulated the 3D water movement based on physical parameters obtained via image analysis. Pore system anisotropy, connectivity, and Shannon entropy were utilized by those authors to predict how the soil architecture influences water dynamics. Borges et al. (2019) investigated the influence of management systems in the soil pore system, demonstrating that pore connectivity and tortuosity are important parameters to explain variations in water retention and hydraulic conductivity. A similar analysis was carried out by Galdos et al. (2019) in an area under a long-term zero-tillage management system. Those authors demonstrated that soil management systems affect the pore connectivity, porosity, number of pores, and tortuosity, with important implications for nutrient cycling, root growth, soil gas fluxes, and water dynamics.

da Silva et al. (2021) related gas transport to pore morphology in a soil under zero-tillage management system. Those authors reported that the morphological parameters derived from X-ray tomography, especially the connectivity of macropores, present high gas transport prediction ability. However, all the studies mentioned considered constant pore connectivity and tortuosity, regardless of the moisture conditions of the samples (saturated or unsaturated soil condition). Thus, possible effects of the air entrance in the pathways utilized to the water movement into the soil were disregarded.

The presence of air in the pores influences greatly pore connectivity and tortuosity as the soil starts draining.

The main objective of this study was to verify how pore tortuosity and connectivity, pore size distribution, and porosity influence water retention. We decided to investigate disturbed porous samples due to their simplicity and lower complexity in comparison to consolidated porous media (e.g. undisturbed soil samples). This choice was also made for minimizing possible effects associated with heterogeneities related to the porous medium porosity distribution (see Online Resource 1).

Simultaneously, we proposed the comparison of methods used to obtain geometrical and topological porous media parameters, based on the analysis of 3D μ CT images. Unlike other studies recently published such as Borges et al. (2018) and Roque and Costa (2020), this study proposes the estimation of parameters such as pore connectivity and tortuosity in different intervals of equivalent pore diameters. In this study, the method proposed was named the filling method (fiLMe). The fiLMe presents the advantages of being fast and versatile as it allows the application of thresholds (maximum or minimum) and the selection of intervals of interest in terms of pore characteristic diameter. The same parameters were also determined using the morphological opening method proposed by Vogel (1997). Although that author did not measure parameters as the porous media tortuosity, the methodology proposed in his paper was also applied to investigate this physical parameter. Therefore, this study can be considered an extension of the work presented by Vogel (1997).

Material and methods

Porous media

This study evaluated two types of porous media: (1) homogeneous glass beads (GB) randomly packed, characterizing a monodisperse porous medium and (2) sand grains (SG) distributed at intervals of previously picked sizes (diameter of the particles), obtained through sieving. The second group characterizes a polydisperse porous medium consisting of fine to coarse sand particles according to the USDA classification system (Hillel 1998). SG samples consisted of particles obtained using sieve mesh sizes between 106 and 212 μm , 212 and 500 μm , and 500 and 1000 μm . Three distinct granulometries of each porous media (GB and SG samples) were investigated, totaling six samples (Table 1).

Image capture and processing

The porous media samples were scanned with a benchtop μ CT system (SkyScan model 1172). The following energy

Table 1 Particle size, sample size, and symbols used to represent the porous media evaluated. GB sample size refers to the diameter of the glass bead, while the SG sample size refers to the grain size interval selected through sieving

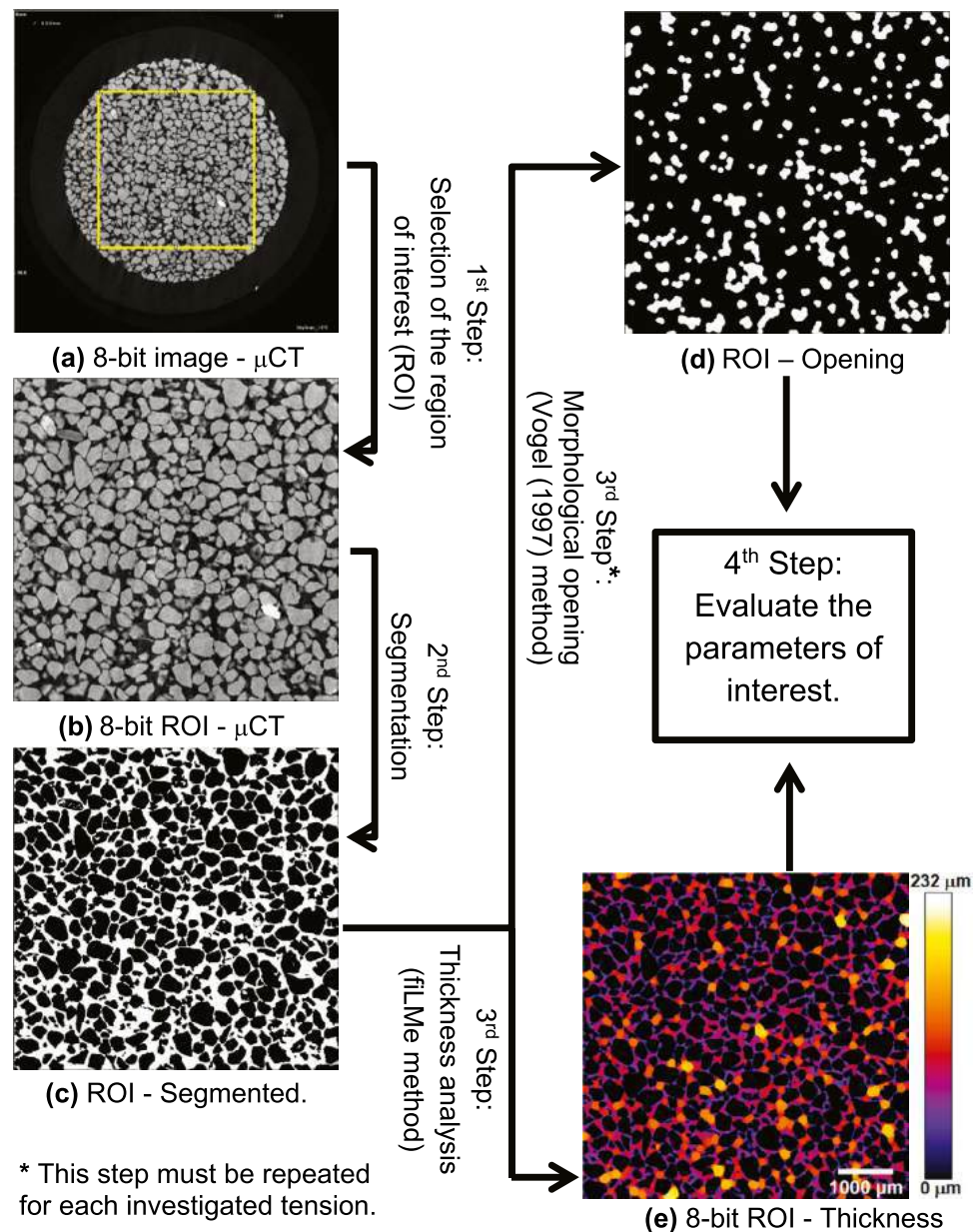
Porous media	Particle size (μm)	Sample size (mm)	Symbol ^a
GB	500	21.30×21.30×10.65	S _a
GB	1000	21.30×21.30×10.65	M _a
GB	2500	21.30×21.30×10.65	L _a
SG	106–212	5.91×5.91×5.78	S _b
SG	212–500	5.91×5.91×5.78	M _b
SG	500–1000	5.91×5.91×5.78	L _b

^aSymbology used to designate the sample evaluated

settings were selected to investigate each porous media: (1) for GB samples, X-ray tube operating at 100 kV and 100 μA , with the addition of aluminum (0.5 mm thick) and copper (0.04 mm thick) filters positioned between the source and the detector, and 158 ms acquisition time for each radiography, and (2) for SG samples, X-ray tube operating at 80 kV and 124 μA , with the addition of aluminum filter (0.5 mm thick), and 590 ms acquisition time.

The 8-bit μCT images (256 shades of gray) of the samples were obtained through reconstruction from the shade projections (radiographs) by the software NRecon (Fig. 1a), supplied by the μCT manufacturer (Vaz et al. 2011). The image pixel sizes were 25.79 μm (GB samples) and 6.15 μm (SG samples), respectively. A volume of interest (VOI)

Fig. 1 Illustration (2D for plane $Z = 1$) of the steps followed to determine pore connectivity (χ), tortuosity (τ), accessible porosity (ϕ), and pore size distribution (PSD) for the M_b sample (sand grains). The opening process represented was obtained using a structuring element associated to the tension (h) of 28.5 cmH₂O. In items (a) and (b), lighter gray shades represent higher X-ray photon attenuations related to the porous medium matrix (solids). In items (c) and (d), the black color (region 0) represents the porous medium matrix, while the white color (region 255) is the porous space. In item (e), the black color (region 0) represents the porous medium matrix, while the other colors indicate the different equivalent pore diameters (hot colors are associated to the largest diameters and the cold colors to the smallest diameters). The term region of interest (ROI) was used in this study due to the 2D images showed in the schematic illustration



covering the largest portion of the porous media studied was selected (Fig. 1b) comprising $826 \times 826 \times 413$ pixels (GB samples) and $961 \times 961 \times 940$ pixels (SG samples). These numeric values refer, respectively, to the horizontal (X -axis) and vertical (Y -axis) directions and depth (Z -axis).

The VOI of the porous media samples obtained in 8-bit grayscale images underwent a process of segmentation (Fig. 1c) to define the matrix region (solids) and the porous space (air) employing the Isodata algorithm (Ridler and Calvard 1978), which is available in the software ImageJ version 1.53c (Schneider et al. 2012). The algorithm performed the analysis based on the porous medium VOI histogram and initially ascribed a threshold value that separated the VOI into the object (porous space) and the background (matrix). The average intensity levels (gray-scale values) of the object and the background were calculated, and their values were used to determine the new threshold value (given by the average between these two values). The new threshold was applied to the VOI, which was separated again into object and background; and the algorithm followed this routine up to the convergence in the threshold value after the repeated iterations (Ridler and Calvard 1978).

The Isodata algorithm was chosen due to the similarity of the sample particle density values investigated here; as those presented in the study by Shou et al. (2020), who analyzed sandstones having around 90% of quartz in their compositions. This means that the X-ray photon attenuation characteristics were similar to the ones obtained for the materials investigated in our study. The μ CT images of our samples revealed a good contrast between the porous phase and the solids. In addition, the Isodata algorithm is also a routine plugin found in the software utilized for the analyses (ImageJ 1.53c).

After the segmentation procedures, the thickness analysis, available in the BoneJ plugin (Doube et al. 2010), was employed to fill up the porous space (region of pixel value equals to 255—pure white) with spheres of distinct known diameters. This procedure calculates the largest sphere that can be inscribed inside the porous space in the 3D image (*maximum ball* process). After the porous space is filled with the sphere its equivalent diameter is registered (a color is defined, which is associated with the equivalent diameter of the sphere). This process is repeated inscribed sphere(smaller diameters are chosen) until the whole pore space is completely filled with spheres of different diameters. This routine is similar to that used when the simulation of mercury intrusion procedure is carried out to determine the pore size distribution of porous systems based on 3D images (Cássaro et al. 2017; Oliveira et al. 2021).

After the application of the thickness analysis, the next step is to generate the segmented porous space filled with the spheres (Fig. 1e). Unlike the 8-bit grayscale images resulting from the μ CT (Fig. 1b), which are related to the

X-ray photon attenuation, the color scale in Fig. 1e indicates the equivalent diameters of the porous space filled with the spheres; each color (value) is associated with an equivalent diameter of the ball (sphere) used by the software to fill up the porous space of the sample under evaluation. Hot and cold colors are selected, respectively, according to the pore equivalent diameter (hot (large) and cold (small)).

As previously mentioned, the selection of the classes of balls having an equivalent diameter d_i was made on the 3D images obtained with the thickness analysis (index i is related to the different colors—equivalent diameters—presented in Fig. 1e). The pore size distribution, pore connectivity (χ), and tortuosity (τ) were evaluated for each interval of d_i in the VOI whose porous space was filled by balls of known diameters (approximating the balls filling up the porous space in the Thickness analysis to the equivalent diameter of the pores). The fiLMe method allowed us to analyze how different parameters (soil moisture, pore connectivity, tortuosity, PSD) vary as a function of the applied tension (h), which is associated with the classes of balls of diameter d_i resulting from the porous filling procedure.

In the capillary tube model, when a determined tension is applied to the saturated porous medium, it drains the water retained in the pores whose diameters are larger than or equal to d given by:

$$d = \frac{4\sigma \cos\alpha}{\rho gh} \quad (1)$$

where d is the equivalent pore diameter, σ is the water surface tension, ρ is the water density, g is the acceleration of gravity, and α is the contact angle between the water and the solid surface. Considering the water upward movement in a glass tube due to the capillarity, Eq. (1) can be expressed by:

$$d(\mu\text{m}) = \frac{2,980}{h(\text{cmH}_2\text{O})} \quad (2)$$

Equation (2) is the numerical result of the Young–Laplace equation considering water density (0.9998 gcm^{-3}), gravity acceleration (998 cms^{-2}), water surface tension ($74.2 \text{ dynescm}^{-1}$), and contact angle equal to 0° . This equation was also used to associate the pore diameters obtained from the 3D image analysis with the equivalent applied tensions.

The χ and τ analyses using the methodology proposed by Vogel (1997) differ from the previously described methodology (fiLMe) regarding the way the equivalent ball diameter classes were selected. The morphological opening method does not select an interval but an equivalent ball diameter threshold to fill up the porous space (Fig. 1d). Another difference between these methods is the need to repeat step 3 (Fig. 1) for each tension associated with the equivalent diameter of the structuring element under investigation, which implies longer processing times.

The morphological opening analyses were carried out using the tool MorphoLibJ (Legland et al. 2016) employing balls as structuring elements and varying their radius (or diameter) to obtain each ball equivalent diameter threshold. The relation between the structuring element diameter and its radius is given by (Vogel 1997):

$$d_{EE} = 2 \cdot r_{EE} + 1 \quad (3)$$

where d_{EE} and r_{EE} are the structuring element diameter and radius, respectively.

After the application of the morphological opening process, pores whose diameter was smaller than the diameter given by Eq. (3) were excluded from the original porous space (Fig. 1c). The end of this process makes it possible to separate and investigate the complete range of pores, with distinct characteristic diameters, which were found in the sample.

Image analyses

The 3D image analyses were carried out using the ImageJ software (version 1.53c) (Schneider et al. 2012). The properties of the porous media analyzed were accessible porosity (ϕ), pore connectivity, tortuosity, and pore size distribution. To obtain the PSD, the plugin thickness was employed as described earlier. After the insertion of the balls needed to fill up the porous space, the percentage of a given class of balls having a diameter d_i ($D(d_i)$) was obtained using Eq. (4):

$$D(d_i) = \left(\frac{V_{d_i}}{V_t} \right) \times 100 \quad (4)$$

where V_{d_i} represents the number of voxels occupied by the class of balls with diameter d_i and V_t is the sample total volume (3D image).

To determine ϕ , the contribution of all classes of balls was summed (or integrated) from the smallest (d_0) to the largest equivalent diameter (d_n) found in the thickness process. Therefore:

$$\phi(\%) = \sum_i^n D(d_i) \quad (5)$$

The pore connectivity was estimated using the topological invariant called Euler number (Toriwaki and Yonekura 2002). The Euler number evaluates the number of connected structures in the pore space. The estimation of χ was carried out using the tool connectivity, available in the plugin BoneJ (Doube et al. 2010). The software scanned the whole VOI counting the number of isolated clusters or islands (I), branches (B), and holes (H) and then calculated the Euler number value (Vogel and Kretzschmar 1996):

$$\chi = I + H - B \quad (6)$$

Pore tortuosity was determined by the ratio between the geodesic and the Euclidian distances between two points in a connected pore path. It was calculated using the plugin Tortuosity developed by Roque and Costa (2020). The method consists in scanning the VOI (3D case) in one direction of interest, which in our study was the water flow direction (Z -axis) related to the sample depth. In the initial scanning plane, the morphological operation of dilation followed by the operation of intersection with the original image plane was carried out; this routine (dilation + intersection) was then increased to the subsequent planes up to the conclusion of the geodesic reconstruction. The number of geodesic reconstructions needed to link the initial to the final scanning plane was the geodesic distance. The Euclidian distance was given by the coordinate of the final plane of the geodesic reconstruction in the scanning direction. Tortuosity values equal to the unit mean that the pore does not present sinuosity, and, therefore, the geodesic and the Euclidian distances are the same.

Retention Curve (RC)

The water retention curves of the investigated porous media were obtained using a modified Haines' Funnel (Cássaro et al. 2009). Two procedures were followed to obtain the RCs: (1) The S_b sample was placed into metallic (steel) cylinders (4.8 cm diameter and 5.2 cm height) gradually filled up, and between each filling step, the sand material was accommodated by tapping lightly the cylinder on a plain surface. The sample was saturated by the capillary rise method following three steps. Firstly, water was slowly added to the tray that contained the sample up to half of the cylinder height, remaining in this condition for 2 h. Secondly, more water was added slowly to the tray up to around 3/4 of the cylinder height, remaining in this condition for another 2 h. Finally, water was added slowly to the tray up to a height close to the sample surface, remaining in this condition for 24 h. (2) Regarding the remaining samples (S_a , M_a , L_a , M_b , L_b), due to their coarser granulometry and experimental difficulties found to transfer them saturated to the Haines' funnel without starting the water drainage, we opted for their accommodation and saturation (78 cm³ approximate volume) within the setup (the Haines' funnel) in a similar way to the procedure adopted with the S_b sample.

Figure 2 presents a schematic representation of the modified Haines' funnel employed in our study. Figure 2a shows the saturation condition when the extremity of the tube filled with water is maintained at the same level of the geometric center of the sample. After the porous media saturation was accomplished, distinct and progressive higher tensions were applied to the samples (Fig. 2b), draining water from the pores whose diameter was larger to the diameter d given by Eq. (2). When equilibrium was achieved, identified by the absence of

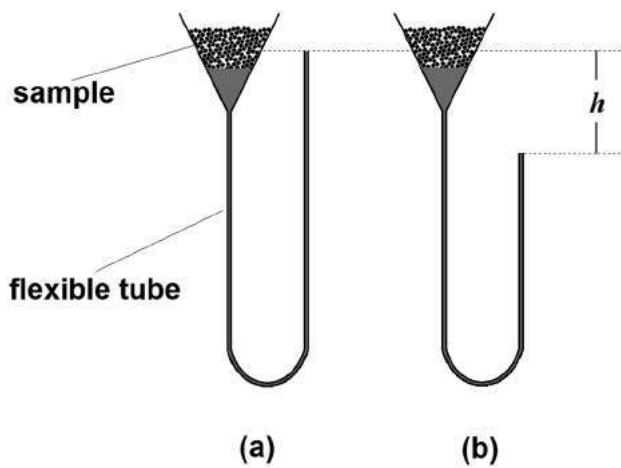


Fig. 2 Modified Haines' Funnel (adapted from the paper by Cássaro et al. (2009)). In item (a) the sample is under saturation condition. In item (b) a tension h is applied to the sample provoking its pores drainage up to the diameter of pores given by Eq. (2)

water dripping from the samples, a new tension value h was applied. The selected tensions varied from 1 to 27 cmH_2O (S_a), 1 to 15 cmH_2O (M_a), 1 to 9 cmH_2O (L_a), 5 to 60 cmH_2O (S_b), 1 to 30 cmH_2O (M_b), and 1 to 20 cmH_2O (L_b), with applied h intervals of 1 cmH_2O up to the point where residual moisture content (negligible variation in moisture with further increases in h) was reached. Sample S_b was an exception with h intervals of 5 cmH_2O chosen due to the small size of its particles and the tension range comprised from the saturation to the residual moisture content.

The volumetric water (moisture) content (θ) is given by:

$$\theta(\text{cm}^3\text{cm}^{-3}) = \frac{V_w(\text{cm}^3)}{V(\text{cm}^3)} \quad (7)$$

where V_w and V are the water volume retained in the sample and the sample volume, respectively. The V value was previously determined measuring the sizes of the containers utilized for accommodating the samples, while V_w was determined by using the following relation:

$$V_w(\text{cm}^3) = \frac{m(g) - m_s(g)}{\rho(\text{gcm}^{-3})} \quad (8)$$

where m and m_s are the moist set mass (funnel + sample) after reaching equilibrium and the dry set mass, respectively, and ρ is the water density as already described in Eq. (1).

Results and discussion

Figure 3 shows the 3D reconstruction of the L_a sample VOI under different moisture conditions using the fiLMe (Fig. 3a–h) and the morphological opening (Fig. 3i–p)

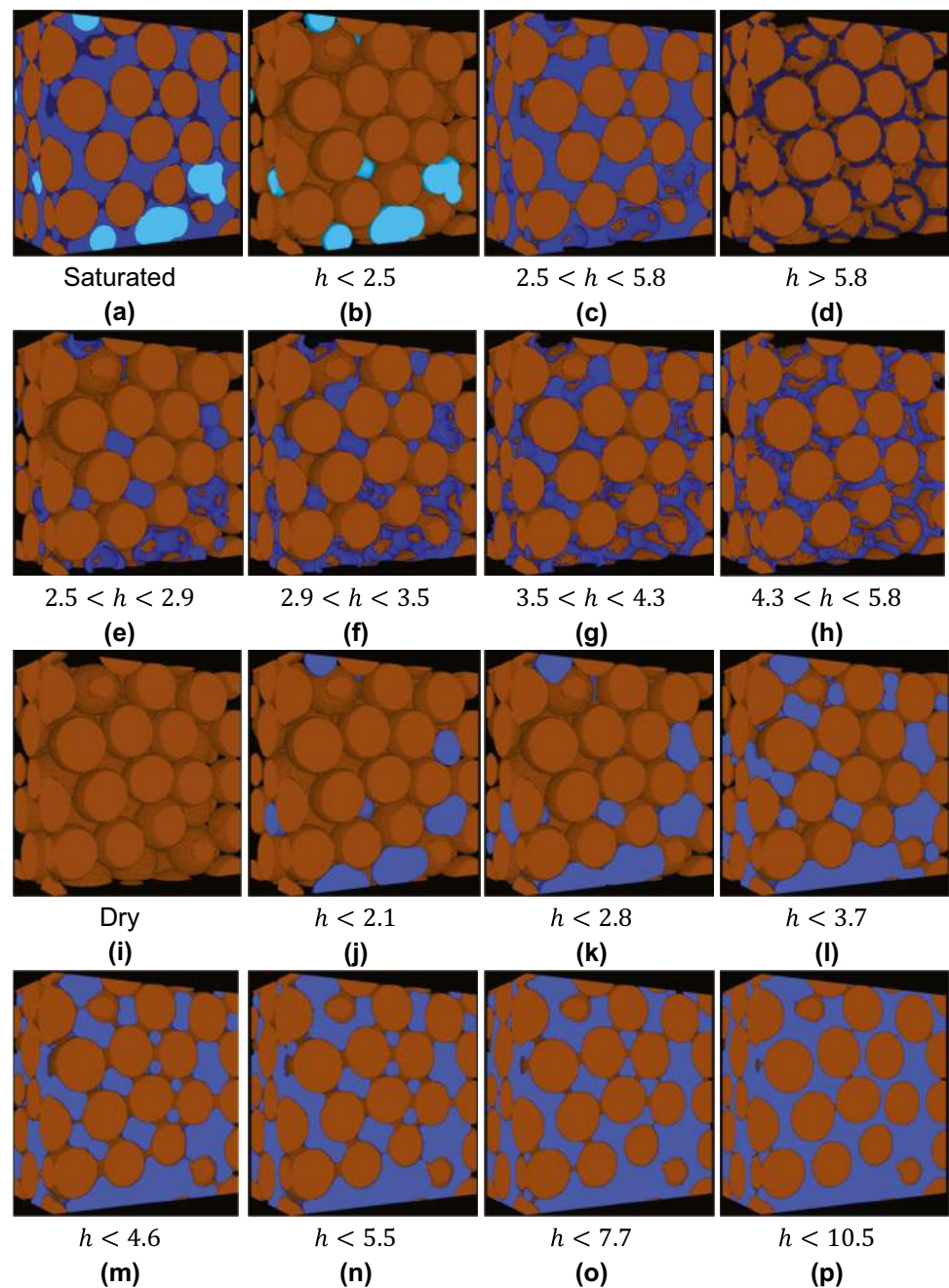
methods. In the images, the pore diameter intervals selected in each step are considered full of water. The reconstructions were based on the segmented 3D images of L_a sample with the brown color associated with the porous media matrix (solids), blue shades referring to the different moisture conditions, and no color (transparent) representing the porous space occupied by air. The procedure utilized to obtain the images shown in Fig. 3 was to overlap the reconstructed images of the soil matrix with the reconstructed images under different moisture conditions. It is important to mention that for better visualization of the regions filled and not filled by water, the volume of the L_a sample (Fig. 3) stands for 1/8 of its total volume.

Figure 3a shows the saturated L_a sample, in which each shade of blue represents a region of the RC (details about the criterion of selection of tension bands can be found in the Online Resource 2); i.e., the lightest blue shade represents the equivalent pore diameter range associated with the tension in the saturation region (Fig. 3b), the intermediate blue shade is associated with the tension range in the region of the highest moisture content variation (Fig. 3c), while the darkest blue shade is related to the tension range in the residual moisture region (Fig. 3d). Thus, Fig. 3a represents an overlay of the 3D images presented in Fig. 3b–d.

The fiLMe method enables a detailed analysis of pore diameter intervals of interest in the porous medium (Fig. 3e–h). For example, the pore region in Fig. 3c (blue color) was divided into four tension intervals ($2.5 < h < 2.9$, $2.9 < h < 3.5$, $3.5 < h < 4.3$, and $4.3 < h < 5.8 \text{ cmH}_2\text{O}$) for better detailing of this RC region (these four tension intervals were also used to evaluate χ and τ in the fiLMe method). Figure 3i shows the sample matrix (brown color) filled with air (dry porous medium), while Fig. 3j–p illustrate how the morphological opening method separates the porous space by increasing the applied tension as a threshold (associated with the structuring element diameter).

Figure 4 shows the retention curve (Fig. 4a–c), pore connectivity (Fig. 4d–f), tortuosity (Fig. 4g–i), and pore size distribution (Fig. 4j–l) for GB samples. The RCs when compared to χ , τ , and PSD (via fiLMe method) show, in general that in the region close to the saturation (Fig. 4a–c), there was an increase in the pore connectivity when the applied tension increased (more negative χ). Regarding PSD, a small number of pores was verified (area below the PSD curve) with the increase in the applied tension (Fig. 4g–l). The highest RC moisture content variation region (Fig. 4a–c) was also found to be the most pore-connected region (Fig. 4d–f) having the highest tortuosity (Fig. 4g–i) and the highest number of accessed pores (Fig. 4j–l). We found that in this region,

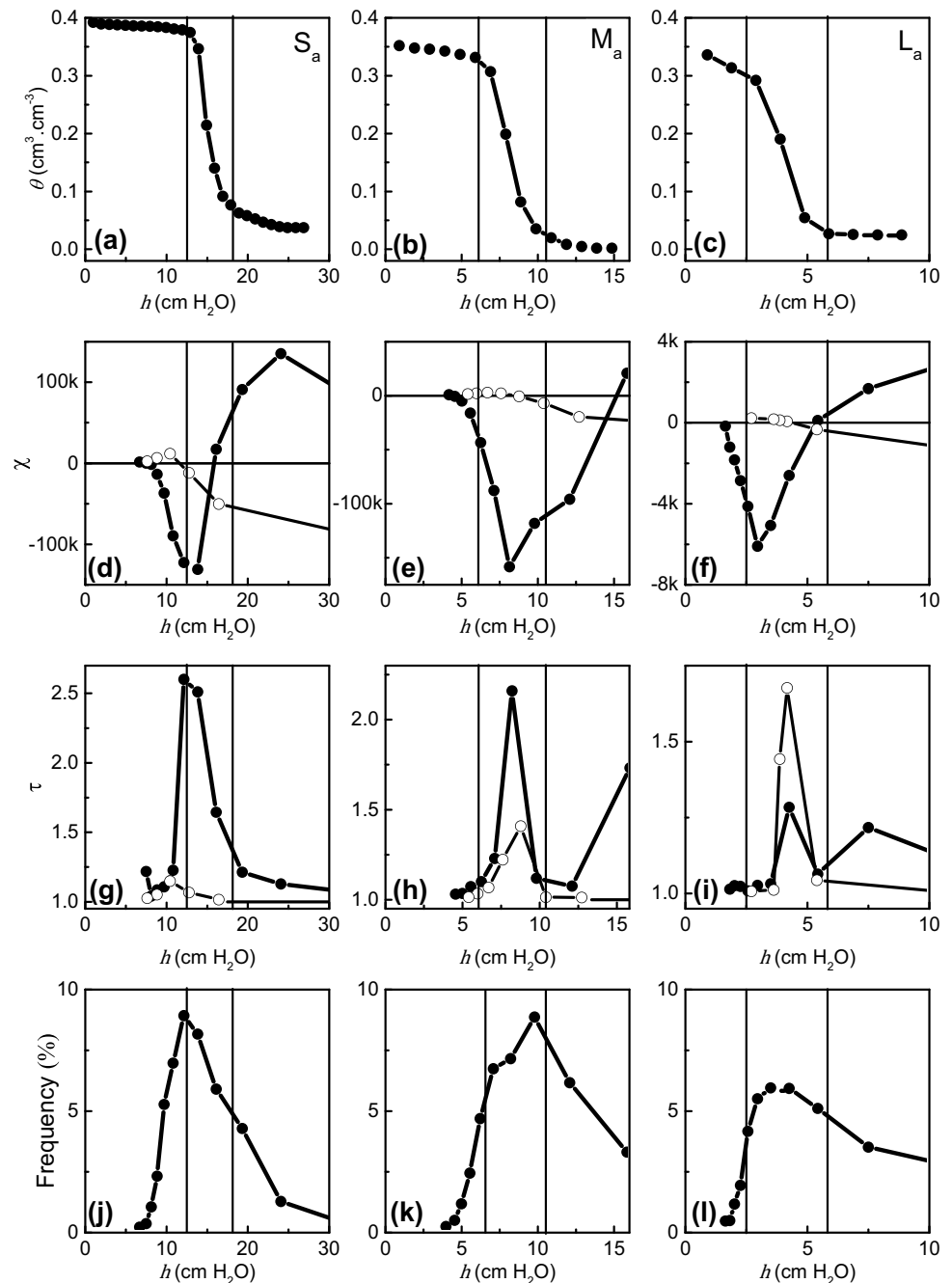
Fig. 3 3D reconstructions of part of the volume of interest (VOI) used in the analyses of the X-ray computerized microtomography (μ CT) images for the L_a sample (glass ball). Items (a)–(h) were separated employing the filling method (fiLMe), i.e., it selects all pores whose equivalent diameter is associated with an applied tension (h) interval. Items (i)–(p) were separated using the morphological opening method, i.e., it selects all pores whose equivalent diameter is associated with an applied tension value below a threshold. The VOI reconstructed represents around 1/8 of the total sample volume. The reconstructed dimensions were $400 \times 400 \times 200$ voxels in the horizontal (X -axis), vertical (Y -axis), and in-depth (Z -axis) directions, respectively. The brown color represents the sample matrix (solids), while empty spaces (transparent) and other colors (blue shades) represent the porous space in different moisture content conditions. The applied tension values are expressed in cmH_2O



the tension interval applied to the samples caused the drainage of great part of the water retained in the porous media, which indicates that all the pores are interconnected and behave as a single drainage pore (Fig. 3c). As expected, wider regions of moisture variation (Fig. 4a–c) are related to samples composed of particles presenting smaller sizes. The residual moisture content region in the RCs showed a trend of reduced pore connectivity (Fig. 3d) and decreased tortuosity for the porous media samples studied (Fig. 4g–i).

Our results demonstrated that the applied tensions removed water from the samples, increasing the air–water interfaces inside their porous structures as expected (Liu et al. 2020). The regions where the water was replaced by air had great impact on the water dynamics taking place in their porous channels (Singh et al. 2020), influencing the unsaturated hydraulic conductivity characteristics of the samples (not evaluated in this study), which is highly dependent on moisture distribution (Hillel 1998). We noticed that the largest pores drained firstly (Fig. 3b) with

Fig. 4 Water retention curve (RC) (graphs in the first line), pore connectivity (χ) (graphs in the second line), tortuosity (τ) (graphs in the third line), and pore size distribution (PSD) (graphs in the fourth line) presented as a function of the applied tension (h) related to the three glass bead (GB) samples studied (S_a , M_a , and L_a). Samples with the smallest (S_a), the intermediary (M_a), and the largest (L_a) granulometries are presented in the left, middle, and right columns. The full points connected by the line were obtained following the filling method (fiLMe), while hollow points connected by lines (χ and τ graphs) were obtained following the method (morphological opening) proposed by Vogel (1997). The vertical lines divide the RCs into three regions (from the left to the right: region of saturation, highest moisture content variation, and residual moisture content, respectively). Details about the criterion used to select the tension bands can be found in the Online Resource 2. The pore diameters obtained via image analysis were converted into applied tensions using Eq. (2)



their volumes being filled by air, forcing the water to flow around them (Fig. 3e–h). This result explains the increased porous medium tortuosity followed by the sample desorption. In situations in which the residual moisture content region was reached (low moisture), the water distribution was obstructed due to the few existing pathways for its movement. The creation of disconnected moist regions is expected due to the disruption of the pathways through which water can flow (Fig. 3d). That water was no longer available (as a flow) for the calculation of the RC drained

water since it was retained in the porous medium even after increases in the applied tension. Thus, a possible explanation for the reduced pore connectivity in the residual moisture content region was found, as well as for the decreased tortuosity after reaching its peak (Fig. 4g–i), since the pathways around the largest pores were no longer connected.

Although different values of τ were found using fiLMe and morphological opening (Fig. 4g–i), a similar behavior for the three granulometries of the GB samples was detected, presenting a maximum value for, approximately, the same

tension range. The χ values measured using the two methods presented distinct behaviors (Fig. 4d–f). A probable explanation is the manner the original porous medium (Fig. 1c) was manipulated for χ calculation. The fiLMe method selects pore diameter intervals (Fig. 3e–h) to calculate χ and estimate how its magnitude varies with the applied tensions (related to the pore diameter intervals). In the morphological method (Vogel 1997), the original porous medium is separated using the morphological opening process, resulting in a new porous medium at the end of the process. This procedure excludes all the pores with diameters smaller than the diameter of the structuring element used in the process (Fig. 3j–p). For this reason, for smaller diameter values of the structuring element (higher tensions), the computing of χ is carried out considering a larger reachable accessible porosity (Fig. 3n), when compared to the fiLMe method (Fig. 3h).

The morphological opening process works as a filter that preserves the shape of the structures that are larger than the structuring element at the expense of removing small objects (pores) from the original image (Legland et al. 2016). This process seems to have less impact on the tortuosity calculation, which is more dependent on the porous medium shape. However, since pore connectivity is calculated using Eq. (6), filtering small objects seemed to affect I , H , and mainly B values of the porous media studied. For low connected structures, higher χ is expected (less negative or even positive values), since these structures tend to have high I and H counts. On the other hand, more connected structures exhibit smaller χ (more negative values) characterized by higher B and lower I and H counts (Vogel and Kretschmar 1996).

Although differences were observed between χ and τ obtained using the two methods (fiLMe and morphological opening), the analysis in both cases was convergent (showing the same trend). Vogel (1997) reported that in a physical context, the critical pore size where the connectivity is lost could be interpreted as the air entry value for the desorption characteristic of the structure. He also reported that there might be a limit where χ jumps from negative into positive values, indicating the presence of bottlenecks between the connected pores with different sizes in the porous system. Therefore, from the analysis presented in this paper, we can assume that this is the case of the GB samples (Fig. 4). The bottleneck presence in these samples occurred more noticeably in tensions associated with higher τ and lower χ ; or in tensions related to decreases in χ when analyzed using the morphological opening method (Vogel 1997).

Figure 5 shows the results obtained for the SG samples. The behavior is similar to that observed for the GB samples (Fig. 4). However, pores located in the region of the highest RC moisture content variation for the M_b sample, even being connected, did not present the lowest χ value (fiLMe method) (Fig. 5e). Regarding τ (Fig. 5g–i), we noticed a

better correlation between methods (fiLMe and morphological opening), mainly for the L_b sample.

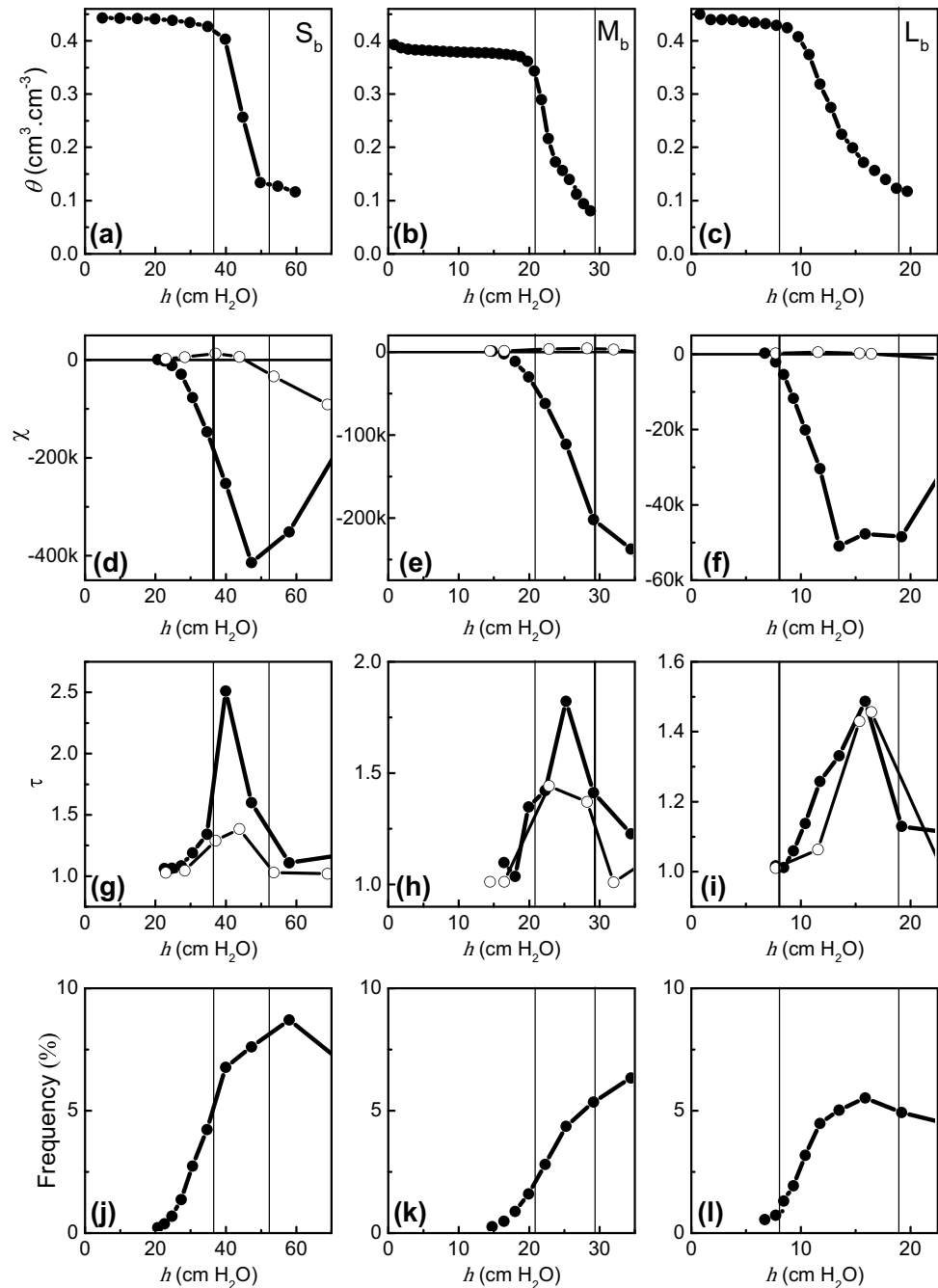
Another difference in the behavior of the SG and GB samples was the characteristic of their PSDs. The shape of the particles that made up the GB samples, their sizes, and the particle–particle contact configuration (Fig. 3i), produced less heterogeneous patterns of the porous space, resulting in PSDs with a narrow equivalent tension range. The SG samples were characterized by particles of irregular shape, whose sizes were defined by the sieve mesh size intervals, as described earlier. Thus, the particle–particle contact (Fig. 1c) for these samples enabled many more configurations for the pore space creation (higher complexity), which resulted in wider PSDs.

For all the GB and SG samples, a direct relationship was verified between the pore connectivity, measured using the fiLMe method, and the frequency of pores obtained via the PSDs. In general, we observed that those pores that appeared more frequently were also the most connected ones. This characteristic was reinforced by the shape of the RCs, which had a great amount of their water drained in a narrower tension band (Fig. 4a–c and Fig. 5a–c). For higher tensions than those associated with more frequent pores, a reduction in the pore frequency appearance was observed (Fig. 4j–l and Fig. 5j–l) followed by a reduction in χ when using the fiLMe method (Fig. 4d–f and Fig. 5d–f). This might be related to the desorption as well as the proximity to the RC residual moisture content region (Fig. 3d), which means that even in the presence of increased applied tension, there were no significant changes in moisture, as the porous medium is mainly characterized for comprising a bunch of disconnected pores.

Another interesting feature observed in the data of the GB and SG samples was the presence of the highest τ in the region of higher moisture content variations. Such a result might sound contradictory since it seems reasonable to assume that it would be easier for the water to flow through less tortuous pores (Clennell 1997; Roque and Costa 2020; Fu et al. 2021). Nonetheless, lower χ values were observed for this tension range, which is associated with greater pore connectivity. We observed that the most connected pores, even being more sinuous, presented the highest moisture content variations, which tends to facilitate water movement. Thus, the results of this study allowed us to conclude that the pore connectivity overcomes the importance of the tortuosity when the water movement and redistribution through the pore space is considered.

To demonstrate the versatility of the fiLMe method, Fig. 6 shows the accessible porosity as a function of the higher applied tension to all investigated porous media using the two methods (fiLMe and morphological opening). However, unlike the previous procedure in the fiLMe method, no pore diameter interval was used, since a threshold was set.

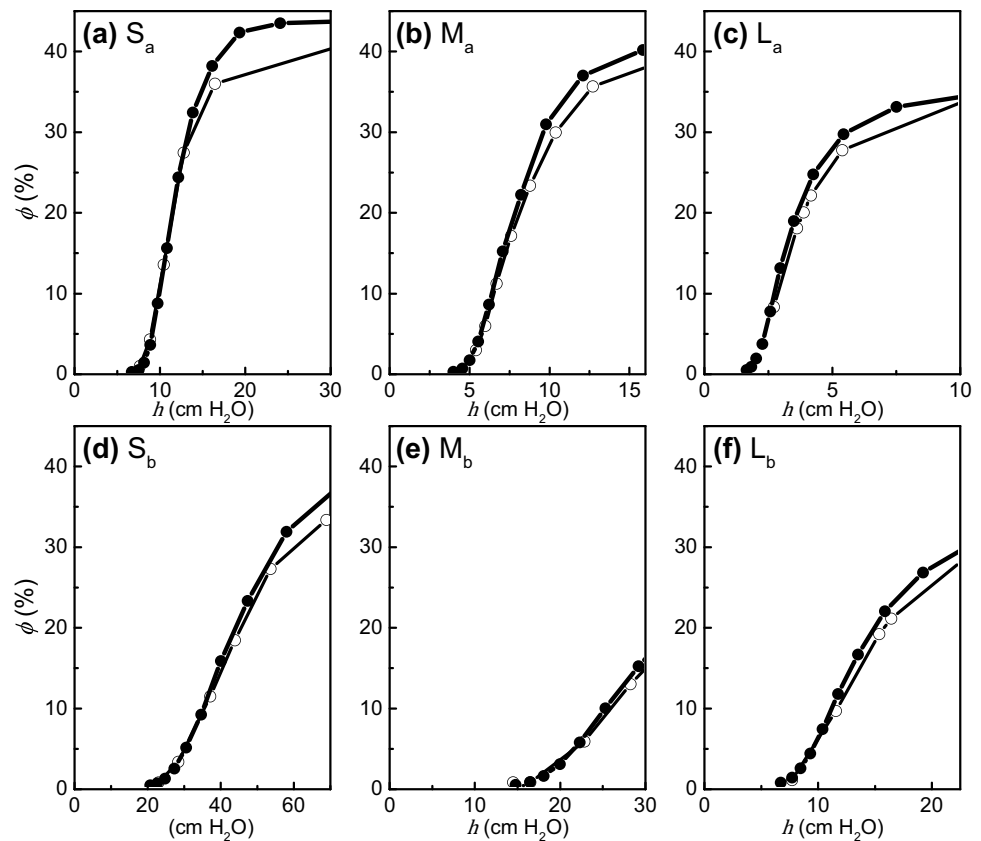
Fig. 5 Full points connected by the line were obtained following the filling method (fiLMe) proposed in this study, while the hollow points connected by the line were obtained following the method (morphological opening) proposed by Vogel (1997). The data shown include water retention curve (RC) (graphs in the first line), pore connectivity (χ) (graphs in the second line), tortuosity (τ) (graphs in the third line), and pore size distribution (PSD) (fourth line) presented as a function of the applied tension (h) related to the three sand grain (SG) samples (S_b , M_b , and L_b). Samples with the smallest (S_b), the intermediary (M_b), and the largest (L_b) granulometries are presented in the left, middle, and right columns. The vertical lines divide the RCs into three regions (from the left to the right: region of saturation, highest moisture content variation, and residual moisture content, respectively). Details about the criterion used to select the tension bands can be found in the Online Resource 2. The pore diameters obtained via image analysis were converted into applied tensions using Eq. (2)



We found that the ϕ results evaluated using the fiLMe method separated the porous space similarly to the morphological opening method. Nonetheless, in all investigated porous media cases, the accessible porosity determined using the morphological opening process was underestimated when compared to the fiLMe method. This physical property, which is related to the volume of pores comprised in the total volume of the porous medium (5)) (Hillel 1998),

was found to be sensitive to the image processing; implying reduction in the porous space information in the morphological opening method for all the studied samples. Again, this reduction of information was associated with the filtering characteristic of the morphological opening process. We noticed that in lower tensions (structuring element with larger diameters), the effect was seen to be minimized due to the small number of pores related to these tensions (Fig. 3j).

Fig. 6 Accessible porosity (ϕ) as a function of the highest applied tension for all the porous media evaluated using both methods (fiLMe and morphological opening). Full points connected by the line were obtained following the filling method (fiLMe) proposed in this study, while the hollow points connected by the line were obtained following the morphological opening method (Vogel 1997). The highest applied tension (h) corresponds to the tension (given by Eq. (2)) associated with the diameter of the ball used as structuring element (morphological opening method) or the tension associated to the d_i ball diameter, used as threshold (fiLMe method)



Conclusions

This study analyzed how morphological parameters such as pore connectivity, tortuosity, pore size distribution, and accessible porosity, obtained via microtomographic 3D image analysis, were related to retention curve experimental data of selected disturbed porous media. In general, the highest RC moisture content variation was mainly related to high connected (lower χ value) and tortuous pores.

The procedures of 3D image analysis were performed using two different methods, one specially developed for this study called the filling method (fiLMe) and another based on the morphological opening process (Vogel 1997). Although the methods presented distinct outcome values, both of them allowed us to draw the same conclusions. We found that the fiLMe method was less time-consuming (faster analysis) and resulted in less porous space information loss. The tortuosity and connectivity analysis showed that pore connectivity was more relevant than tortuosity regarding water retention and movement in the pore media evaluated.

Finally, this study presented important results that linked geometrical and morphological properties to water

retention characteristics of some selected porous media. Even being conducted using disturbed samples, our results, especially those of the fiLMe method, have an enormous potential to be applied to more complex porous media such as structured (undisturbed) porous samples.

Supplementary Information The online version contains supplementary material available at <https://doi.org/10.1007/s10064-022-02632-z>.

Acknowledgements The authors would like to thank Dr. J.A.T. de Oliveira for his contribution to the acquisition of experimental data, Dr. W.L. Roque for clarifying the Tortuosity used plugin, and Dr. C.M.P. Vaz for making available the tomographic system and his lab infrastructure for the analysis of the samples. L.F. Pires thanks the financial support of the National Council for Scientific and Technological Development (CNPq) for the research productivity grant (process no. 304925/2019-5).

Authors' contributions M.A. Camargo: Investigation, methodology, conceptualization, writing—original draft. F.A.M. Cássaro: Methodology, conceptualization, writing—review and editing. L.F. Pires: Methodology, conceptualization, writing—review and editing—resources.

Availability of data and material Not applicable.

Code availability Not applicable.

Declarations

Conflict of interest The authors declare no competing interests.

References

- Borges JAR, Pires LF, Cássaro FAM et al (2019) X-ray computed tomography for assessing the effect of tillage systems on topsoil morphological attributes. *Soil Tillage Res* 189:25–35. <https://doi.org/10.1016/j.still.2018.12.019>
- Borges JAR, Pires LF, Cássaro FAM et al (2018) X-ray microtomography analysis of representative elementary volume (REV) of soil morphological and geometrical properties. *Soil Tillage Res* 182:112–122. <https://doi.org/10.1016/j.still.2018.05.004>
- Cássaro FAM, Pires LF, dos Santos RA et al (2009) Modified Haines' funnel: Soil water retention curves of soil samples near saturation. *Rev Bras Cienc Do Solo* 32:2555–2562. <https://doi.org/10.1590/s0100-06832008000600032>
- Cássaro FAM, Posadas Durand AN, Gimenez D, Pedro Vaz CM (2017) Pore-Size Distributions of Soils Derived using a Geometrical Approach and Multiple Resolution MicroCT Images. *Soil Sci Soc Am J* 81:468–476. <https://doi.org/10.2136/sssaj2016.09.0291>
- Clenell M Ben (1997) Tortuosity: a guide through the maze. *Geol Soc London, Spec Publ* 122:299 LP – 344. <https://doi.org/10.1144/GSL.SP.1997.122.01.18>
- Cunha AR, Fernandes CP, dos Santos LOE et al (2020) A phenomenological connectivity measure for the pore space of rocks. *ArXiv*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2012.00835>
- Doube M, Klosowski MM, Arganda-Carreras I et al (2010) BoneJ: Free and extensible bone image analysis in ImageJ. *Bone* 47:1076–1079. <https://doi.org/10.1016/j.bone.2010.08.023>
- Fan Z, Hu C, Zhu Q et al (2021) Three-dimensional pore characteristics and permeability properties of calcareous sand with different particle sizes. *Bull Eng Geol Environ* 80:2659–2670. <https://doi.org/10.1007/s10064-020-02078-1>
- Ferreira TR, Pires LF, Wildenschild D et al (2018) X-ray microtomography analysis of lime application effects on soil porous system. *Geoderma* 324:119–130. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.03.015>
- Ferreira TR, Pires LF, Wildenschild D et al (2019) Lime application effects on soil aggregate properties: Use of the mean weight diameter and synchrotron-based X-ray μ CT techniques. *Geoderma* 338:585–596. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.10.035>
- Fu J, Thomas HR, Li C (2021) Tortuosity of porous media: image analysis and physical simulation. *Earth-Science Rev* 212:103439
- Galdos MV, Brown E, Rosolem CA et al (2020) Brachiaria species influence nitrate transport in soil by modifying soil structure with their root system. *Sci Rep* 10:1–11. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-61986-0>
- Galdos MV, Pires LF, Cooper HV et al (2019) Assessing the long-term effects of zero-tillage on the macroporosity of Brazilian soils using X-ray Computed Tomography. *Geoderma* 337:1126–1135. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.11.031>
- Guber A, Kutlu T, Rivers M, Kravchenko A (2021) Mass-balance approach to quantify water distribution in soils based on X-ray computed tomography images. *Eur J Soil Sci* 72:578–592. <https://doi.org/10.1111/ejss.13005>
- Hajnos M, Lipiec J, Świeboda R et al (2006) Complete characterization of pore size distribution of tilled and orchard soil using water retention curve, mercury porosimetry, nitrogen adsorption, and water desorption methods. *Geoderma* 135:307–314. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2006.01.010>
- Hillel D (1998) *Environmental Soil Physics: Fundamentals, Applications, and Environmental Considerations*. Academic Press, Massachusetts
- Houston AN, Otten W, Falconer R et al (2017) Quantification of the pore size distribution of soils: Assessment of existing software using tomographic and synthetic 3D images. *Geoderma* 299:73–82. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.03.025>
- Juyal A, Eickhorst T, Falconer R, et al (2018) Control of Pore Geometry in Soil Microcosms and Its Effect on the Growth and Spread of *Pseudomonas* and *Bacillus* sp. *Front Environ Sci* 6. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2018.00073>
- Katuwal S, Norgaard T, Moldrup P et al (2015) Linking air and water transport in intact soils to macropore characteristics inferred from X-ray computed tomography. *Geoderma* 237–238:9–20. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2014.08.006>
- Koestel J, Fukumasu J, Garland G et al (2021) Approaches to delineate aggregates in intact soil using X-ray imaging. *Geoderma* 402:115360. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2021.115360>
- Kravchenko AN, Negassa WC, Guber AK, Rivers ML (2015) Protection of soil carbon within macro-aggregates depends on intra-aggregate pore characteristics. *Sci Rep* 5:16261. <https://doi.org/10.1038/srep16261>
- Legland D, Arganda-Carreras I, Andrey P (2016) MorphoLibJ: integrated library and plugins for mathematical morphology with ImageJ. *Bioinformatics* 32:3532–3534. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btw413>
- Leue M, Uteu-Puschmann D, Peth S et al (2019) Separation of Soil Macropore Types in Three-Dimensional X-Ray Computed Tomography Images Based on Pore Geometry Characteristics. *Vadose Zo J* 18:1–13. <https://doi.org/10.2136/vzj2018.09.0170>
- Lipiec J, Hajnos M, Świeboda R (2012) Estimating effects of compaction on pore size distribution of soil aggregates by mercury porosimeter. *Geoderma* 179–180:20–27. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2012.02.014>
- Liu X, Zhou A, Li J, Feng S (2020) Reproducing micro X-ray computed tomography (microXCT) observations of air–water distribution in porous media using revised pore-morphology method. *Can Geotech J* 57:149–156. <https://doi.org/10.1139/cgj-2018-0662>
- Mady AY, Shein E (2018) Modelling and validation hysteresis in soil water retention curve using tomography of pore structure. *Int J Water* 12:370–381. <https://doi.org/10.1504/IJW.2018.095403>
- Münch B, Holzer L (2008) Contradicting Geometrical Concepts in Pore Size Analysis Attained with Electron Microscopy and Mercury Intrusion. *J Am Ceram Soc* 91:4059–4067. <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2008.02736.x>
- Ngom NF, Garnier P, Monga O, Peth S (2011) Extraction of three-dimensional soil pore space from microtomography images using a geometrical approach. *Geoderma* 163:127–134. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2011.04.013>
- Oliveira JAT, Cássaro FAM, Pires LF (2020) The porous size distribution obtained and analyzed by free access software. *Rev Bras Ensino Fis* 42. <https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-20200192>
- Oliveira JAT, Cássaro FAM, Pires LF (2021) Estimating soil porosity and pore size distribution changes due to wetting-drying cycles by morphometric image analysis. *Soil Tillage Res* 205:104814. <https://doi.org/10.1016/j.still.2020.104814>
- Park J, Hyun C-U, Park H-D (2015) Changes in microstructure and physical properties of rocks caused by artificial freeze–thaw action. *Bull Eng Geol Environ* 74:555–565. <https://doi.org/10.1007/s10064-014-0630-8>
- Pires LF, Borges JAR, Rosa JA et al (2017) Soil structure changes induced by tillage systems. *Soil Tillage Res* 165:66–79. <https://doi.org/10.1016/j.still.2016.07.010>
- Pires LF, Roque WL, Rosa JA, Mooney SJ (2019) 3D analysis of the soil porous architecture under long term contrasting management

- systems by X-ray computed tomography. *Soil Tillage Res* 191:197–206. <https://doi.org/10.1016/j.still.2019.02.018>
- Rab MA, Haling RE, Aarons SR et al (2014) Evaluation of X-ray computed tomography for quantifying macroporosity of loamy pasture soils. *Geoderma* 213:460–470. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2013.08.037>
- dos Reis AMH, Auler AC, Armino RA et al (2021) Micromorphological analysis of soil porosity under integrated crop-livestock management systems. *Soil Tillage Res* 205:104783. <https://doi.org/10.1016/j.still.2020.104783>
- Ridler TW, Calvard S (1978) Picture Thresholding Using an Iterative Selection Method. *IEEE Trans Syst Man Cybern SMC* 8:630–632. <https://doi.org/10.1109/tsmc.1978.4310039>
- Roque WL, Costa RRA (2020) A plugin for computing the pore/grain network tortuosity of a porous medium from 2D/3D MicroCT image. *Appl Comput Geosci* 5:100019. <https://doi.org/10.1016/j.acags.2020.100019>
- Schlüter S, Vogel H-J (2016) Analysis of Soil Structure Turnover with Garnet Particles and X-Ray Microtomography. *PLoS One* 11:e0159948. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0159948>
- Schneider CA, Rasband WS, Eliceiri KW (2012) NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. *Nat Methods* 9:671–675
- Shou YD, Zhao Z, Zhou XP (2020) Sensitivity analysis of segmentation techniques and voxel resolution on rock physical properties by X-ray imaging. *J Struct Geol* 133:103978. <https://doi.org/10.1016/j.jsg.2020.103978>
- da Silva TS, Pulido-Moncada M, Schmidt MR et al (2021) Soil pore characteristics and gas transport properties of a no-tillage system in a subtropical climate. *Geoderma* 401:115222. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2021.115222>
- Singh J, Singh N, Kumar S (2020) X-ray computed tomography-measured soil pore parameters as influenced by crop rotations and cover crops. *Soil Sci Soc Am J* 84:1267–1279. <https://doi.org/10.1002/saj2.20105>
- Song S, Ding Q, Wei J (2019) Improved algorithm for estimating pore size distribution from pore space images of porous media. *Phys Rev E* 100:053314. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.053314>
- Toriwaki J, Yonekura T (2002) Euler number and connectivity indexes of a three dimensional digital picture. *Forma-Tokyo-* 17:183–209
- Tseng CL, Alves MC, Crestana S (2018) Quantifying physical and structural soil properties using X-ray microtomography. *Geoderma* 318:78–87. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.11.042>
- Vaz CMP, de Maria IC, Lasso PO, Tuller M (2011) Evaluation of an Advanced Benchtop Micro-Computed Tomography System for Quantifying Porosities and Pore-Size Distributions of Two Brazilian Oxisols. *Soil Sci Soc Am J* 75:832–841. <https://doi.org/10.2136/sssaj2010.0245>
- Vogel HJ (1997) Morphological determination of pore connectivity as a function of pore size using serial sections. *Eur J Soil Sci* 48:365–377. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2389.1997.tb00203.x>
- Vogel HJ, Kretschmar A (1996) Topological characterization of pore space in soil - Sample preparation and digital image-processing. *Geoderma* 73:23–38. [https://doi.org/10.1016/0016-7061\(96\)00043-2](https://doi.org/10.1016/0016-7061(96)00043-2)
- Xiaoqin S, Dongli S, Yuanhang F et al (2021) Three-dimensional fractal characteristics of soil pore structure and their relationships with hydraulic parameters in biochar-amended saline soil. *Soil Tillage Res* 205:104809. <https://doi.org/10.1016/j.still.2020.104809>
- Yu H, Lu C, Chen W, Li H (2021) Permeability changes in fractured Tamusu mudstone in the context of radioactive waste disposal. *Bull Eng Geol Environ* 80:7945–7957. <https://doi.org/10.1007/s10064-021-02445-6>
- Zhou H, Fang H, Mooney SJ, Peng X (2016) Effects of long-term inorganic and organic fertilizations on the soil micro and macro structures of rice paddies. *Geoderma* 266:66–74. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2015.12.007>

ANEXO B – ARTIGO 2

First published in Brazilian Journal of Physics, volume 54, article 63, year 2024 by Springer Nature - Reproduced with permission from Springer Nature.



A Unified Algorithm for the Young–Laplace Method Applied to Porous Media

Alexandre Miers Zabet¹  · Mario Augusto Camargo²  · Fabiano Gilberto Wolf³  · Diogo Nardelli Siebert¹  · Rodrigo Surmas⁴  · Luis Orlando Emerich dos Santos¹  · Talita Rosas Ferreira⁵  · Fábio Augusto Meira Cássaro⁶  · Luiz Fernando Pires⁶ 

Received: 8 November 2022 / Accepted: 16 February 2024
© The Author(s) under exclusive licence to Sociedade Brasileira de Física 2024

Abstract

Young–Laplace equation-based algorithms for simulating capillary-driven flow have been used in porous media research for more than two decades. However, the lack of a uniform mathematical description hinders a wider application of these algorithms, as well as impede their comparison. After conducting a detailed review of the most important publications in the area, we propose a unified algorithm. This resulting framework is capable of handling four distinct physical situations: drainage and imbibition with either compressible or incompressible displacement fluid. Additionally, there is no restriction regarding the geometry or the initial fluid distribution used. The proposed algorithm can simulate variable or mixed wettability, even for imbibition, which has not already been described in the literature. Finally, at the end of the manuscript, we provide an efficient open-source C++ code for the proposed unified algorithm and also many examples of its use.

Keywords Two-phase fluid flow · Contact angle · Drainage · Imbibition · Mathematical morphology · Capillary pressure curve

1 Introduction

The numerical method discussed in this work has received different names in the literature throughout the years. Names such as Full Morphology [1, 2], Pore-morphology-based

Simulation [3–6], Pore Morphology [7, 8], Morphological [9] Approach, and Capillary Drainage Transform [10, 11] are found in the literature for Young–Laplace equation-based algorithms. Hereafter, the technique will be referred to as the Young–Laplace Method (YLM). This choice intends to clearly state the physical principle behind the method, which is related to the Young–Laplace equation (Eq. (1)), which fundamentally computes capillary forces that are involved in capillary-driven displacements.

The YLM was independently proposed in the late 1990s and initial 2000s by Hazlett [12], Magnani [13], and Magnani et al. [14]. Nonetheless, most of the cited literature in the area recognized Hazlett [12] as the sole creator of the method. Based on the hypothesis that the fluid invasion in a porous medium is exclusively limited by the capillary pressure, they proposed a sequence of steps to simulate both imbibition and drainage processes, even if no name was given to this new method. The YLM is capable of determining the spatial distribution of two immiscible fluids inside any porous geometry for a value of capillary pressure. This result is obtained under the assumption that the fluid distribution only depends on the mechanical equilibrium between the applied pressure difference and capillary forces. With this approach, dynamic effects are neglected and the fluid invasion is thought of as being a

✉ Mario Augusto Camargo
mario.camargo@ifsc.edu.br

¹ Porous Media Research Group (PORO), Scientific Computational Laboratory, Federal University of Santa Catarina, 89219-600 Joinville, SC, Brazil

² Federal Institute of Santa Catarina (IFSC), 89466-312 Canoinhas, SC, Brazil

³ Porous Media Research Group (PORO), Microfluidics Laboratory, Federal University of Santa Catarina, 89219-600 Joinville, SC, Brazil

⁴ Leopoldo Américo Miguez de Mello Research and Development Center (CENPES/Petrobras), 21941-598 Rio de Janeiro, RJ, Brazil

⁵ National Synchrotron Light Laboratory (LNLS), Brazilian Center for Research in Energy and Materials (CNPEM), 13083-100 Campinas, SP, Brazil

⁶ Laboratory of Physics Applied To Soils and Environmental Sciences (FASCA), State University of Ponta Grossa (UEPG), 84.030-900 Ponta Grossa, PR, Brazil

quasi-static process. This is a strong hypothesis that allows for a very efficient computational method and has a great impact on the practical applicability of the technique.

Despite the applicability limitations, a renewed interest in the method has emerged in recent years. This can be attested by the fact that more than ever, manuscripts applying YLM were published in these past years. A possible reason for this greater interest is the expansion in access to 3D imaging tools (e.g., 3D microtomography (μ CT)) and also in the acquisition of physical properties by image analysis, for example, in digital petrophysics. Since the method makes no assumption regarding the geometry and it has a low computational cost, it is an excellent tool for the first analysis of digital rock images.

Most of the important applications were published only 10 years after the method was created when the use of digital rock images obtained by μ CT started to gain popularity. Vogel et al. [2] compared the use of YLM, Lattice–Boltzmann Method (LBM), and Pore Network Modeling (PNM) to compute the capillary curve. The authors used μ CT images of a borosilicate cylinder with a size of 98^3 voxels. It was found that the computational cost of the YLM was similar to the PNM, which in turn was thousands of times lower than that of LBM. It is important to emphasize that both the LBM and the PNM can determine transport properties of the flow like permeability, whereas as said, the YLM is limited to the quasi-static circumstances. Regarding the capillary curve, all mentioned methods showed equivalent results. Schulz et al. [1] applied the YLM to study the gas diffusion layer inside a polymer electrolyte fuel cell as the presence of water in reaction sites hinders the efficiency of the cell. Shikhov and Arns [6] employed the YLM to simulate three capillary pressure experiments: Porous Plate, Centrifuge Multi-speed, and Mercury Intrusion Porosimetry. Obtained results revealed that heterogeneities play a significant role in the experimental results, and they concluded that the numerical simulations using YLM can help to better delineate laboratory experiments.

The determination of relative permeability employing the YLM is another interesting application that emerged in recent years [7, 9, 15, 16]. Although limited to quasi-static phenomena, the method is combined with dynamical methods to assess this property. In this approach, the YLM computes the space distribution of the fluids in an interest capillary pressure then the distribution is used as input data in a dynamical method (like LBM) to determine the flow rate in the percolating phase.

The lack of a proper and uniform name is a minor difficulty one will face trying to apply the YLM. A greater obstacle is the absence of detailed information regarding its implementation. Except for a few papers [4, 14], most

works are restricted to describing the general characteristics of the method, even when relevant changes are proposed [9]. Frequently, critical computational aspects that can impact computational efficiency are not properly discussed. This prevents the comparison of obtained results with different implementations, difficult to replicate computational simulations for improving the algorithm, and makes unclear whether new developments affect computational efficiency.

In this paper, we present a unified algorithm for the Young–Laplace Method where both drainage and imbibition processes are considered in a single framework. It incorporates several existing improvements for drainage simulation [4, 5], and it correctly describes the presence of ganglia (quantities of fluid entrapped in the pore space, like bubbles). A more detailed description of the improvements implemented in the works of Hilpert and Miller [4] and Schutz et al. [5] is done in Appendix 2. More than just a grouping of previous works, we propose a new and coherent mathematical formalism that simplifies the understanding of the method and sets the basis upon which new improvements can be proposed. Moreover, an efficient C++ code using this new structure is made available using the GNU GPLv3 software.

The paper is organized as follows. In Sect. 2, we describe some basic physical concepts regarding YLM. Section 3 presents our unified algorithm for the YLM and its formal mathematical description using the notation of set operations. In Sect. 4, we discuss the YLM for the imbibition case, which, so far, is not a well-addressed question. We show that the correction from Hilpert and Miller [4] does not need to be applied in this case and also reveal how to apply Schulz et al.'s [5] variable contact angles for imbibition processes. Finally, Sect. 5 summarizes the conclusions of the paper.

2 Basic Concepts

The main purpose of the YLM is to find the spatial distribution of both the invading and displaced fluid inside a porous media, without employing dynamical equations. Since it is limited to the prediction of the equilibrium states of capillary pressure under this condition, it is commonly regarded as a quasi-static method.

YLM relies on the Young–Laplace equation to determine the interface liquid curvature in the non-wetting and wetting phases [17]. Additionally, the method employs an approximation that the two radii of curvature (R) are equal which, for a cylindrical capillary tube results on

$$P_c = P_N - P_W = \frac{2\sigma \cos\theta}{r_c} \quad (1)$$

where P_c is the capillary pressure, i.e., the difference between the pressure in the non-wetting (P_N) and wetting (P_W) phases, and σ is the interfacial tension. As shown in Fig. 1a, θ is the wetting fluid contact angle, and r_c is the capillary radius ($r_c = R \cos \theta$).

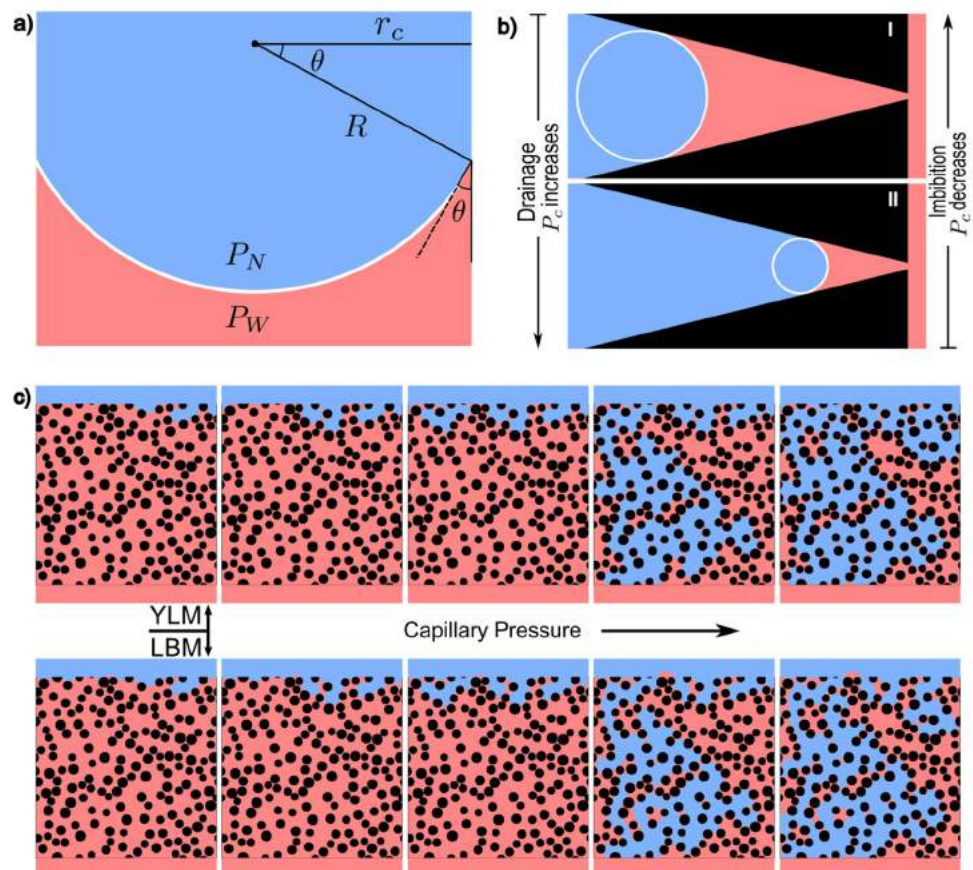
As seen in Eq. (1), the importance of capillary pressure in multiphase fluid flows is evident as the capillary radius decreases, especially in strongly wetting conditions. Therefore, modeling multiphase flows in porous media needs to consider the influence of capillary effects, as both the fluid flow dynamics in micro- and nanopores and the thermodynamic properties of the phases involved can be altered [18–21]. Figure 1b shows how the regions occupied by each fluid are affected by the change in capillary or applied pressure for a capillary tube with a variable cross-section. In the upper section, the non-wetting fluid (blue) cannot access the narrower part of the channel because a low-pressure value corresponds to a large curvature radius. In the narrower section, the pressure difference is increased, and the new equilibrium is related to smaller radii. The main idea behind the YLM, as proposed by Hazlett [12] and Magnani [13] came from a simple idea. Considering a null contact angle and a given value of P_c , a region can only be occupied by the non-wetting fluid if it is possible to inscribe a sphere of radius $R = 2\sigma/P_c$ inside this region.

Figure 1b presents scenarios where the two fluids are statically in equilibrium. In the absence of fluid motion, the two fluids should remain in this configuration. If a dynamic process of invasion is carried out with a low capillary number (when capillary forces are dominant over the viscous ones), then we expect the system to pass through these configurations during the invasion process. Thus, finding these states is also necessary for understanding dynamic processes.

During drainage, increasing the pressure associated with the injected non-wetting fluid displaces the wetting fluid that initially fills the porous media. The increase occurs in small steps to allow the fluids to reach new equilibrium configurations. On the other hand, imbibition happens when the wetting fluid invades the region previously filled by the non-wetting fluid when the pressure of the latter is decreased. Using Fig. 1b as an illustration, during the drainage the system would go from states I to II, whereas for the imbibition, the wetting front evolution is the opposite.

Figure 1c shows a comparison between the equilibrium states of drainage predicted by the YLM and by the Shan–Chen multicomponent LBM (SC-LBM) [22–25]. Despite some small differences, the results from the YLM are pretty close to the ones from SC-LBM, showing that the method can predict the static equilibrium states of this stepwise invasion process.

Fig. 1 The non-wetting and wetting fluids are presented in blue and red, respectively. **a** Capillary rise of a wetting fluid in a cylindrical tube. The figure depicts the longitudinal section of the tube. **b** Two equilibrium states for different values of the capillary pressure (P_c). $P_c^{(I)} < P_c^{(II)}$, resulting in a larger curvature radius in the upper case. **c** Comparison between equilibrium states obtained by YLM and LBM for a drainage process



In this study, we included the results of SC-LBM simulations as an indication of quality to show that YLM provides satisfactory results for the invasion process. Although we considered an idealized porous medium, the LBM (and its variations) has been considered a very powerful tool for predicting transport phenomena in more complex situations involving realistic 2D and 3D porous media [26–35].

3 Unified Algorithm

The YLM is applied to 2D or 3D segmented images; the algorithm described works in both cases without any adaptation. Nonetheless, to be coherent with the images used in the paper, we will use expressions related to the 2D case, such as “pixel” and “circle” rather than “voxel” and “sphere”.

Operations over images commonly require iterated loops over all its pixels. It occurs, for example, when determining the image regions where a circle can be inscribed without overlapping solid pixels, as illustrated in Fig. 2. A first approach is “to move” the circle over the whole image checking whether or not it overlaps solid pixels. Unfortunately, this leads to making operations of the order of $\mathcal{O}(n^2)$ where n is the number of pixels in the image. It is something that is computationally unfeasible if it is applied to three-dimensional digital porous media. Additionally, the YLM requires these regions to be found for different circle radii (each radius is associated with a P_c value by Eq. (1)), so it is essential that the algorithm does not demand all the computations to be remade for each new value. Thus, in order to obtain an efficient YLM algorithm, this question must be carefully addressed.

To the best of the author’s knowledge, there is not any work describing in detail how to implement the YLM efficiently. The solution is to use Mathematical Morphology (MM) algorithms [36] since they allow discovering the region occupied by a predetermined circle, with a very low computational cost operation called *opening* (a more detailed discussion of MM is addressed in Appendix 1). This operation is performed with the aid of the Euclidian Distance Transform (*EDT*), which only needs to be executed once for an image. The EDT can be computed using a very efficient and parallel algorithm proposed by Saito and Toriwaki [37], and the result is a map showing the distance of each pore pixel to the closest solid pixel. Then, when these regions are found, another algorithm is used to discover the regions connected to the source of the invading fluid.

Although improvements regarding drainage simulations were mentioned in previous sections, there are some significant issues that we have not yet addressed. Among them are (i) the compressible behavior of the displaced fluid, (ii) the use of these existing improvements in imbibition simulations, and (iii) the treatment of isolated bubbles of the invading fluid. All of these issues often play a significant role in practical problems.

Previous works [13, 14] devoted some attention to these questions. However, when trying to adapt the method to some selected cases, the authors created countless nomenclatures and notations, which added significant complexity to the algorithm. As described in Sect. 1, these are limiting factors for the wider adoption of the YLM. In this section, we develop a unified algorithm that combines these different solutions in a simpler approach.

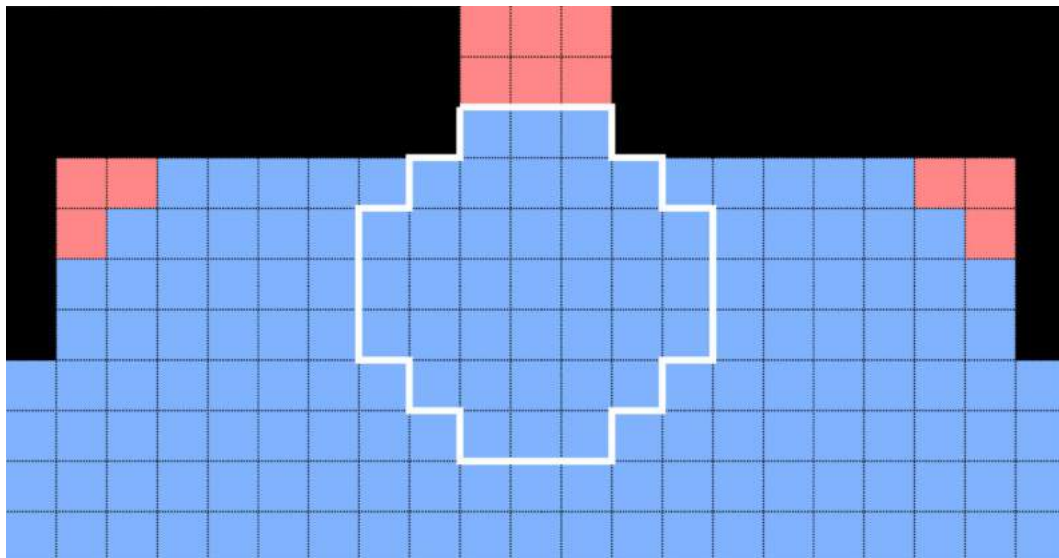


Fig. 2 Determination of the pixels inside the porous region which can be occupied by a circle of 7 pixels in diameter (region delimited by the white line). The black pixels represent the solid region while the red pixels are the ones that could not be occupied by the circle

3.1 Benchmark Geometry

We adopted the benchmark geometry of Mohammadmoradi and Kantzas [7]. Our benchmark is shown in Fig. 3. We have restricted its application to porous media with a simplified 2D geometry to test and exemplify the algorithm's performance in several situations found in, for instance, water/oil-filled rocks: ganglia, dead-end pores, isolated pores, and channels with different shapes and sizes. However, we emphasize the YLM is applied to 2D and 3D cases without any modifications. The wetting (W) and non-wetting (N) fluids are represented by red and blue colors, respectively. The top figure represents the initial state for the drainage, and the bottom figure is the one for the imbibition. In both cases, the inlet is positioned on the left side and the outlet on the right side of the medium. Thus, the dark blue and dark red squares are the source or sink of each fluid, depending on the case.

A semi-permeable membrane was added in different locations in each case. In the drainage process, this membrane is positioned just before the outlet to ensure that the maximum number of pores will be invaded before the fluid finally percolates. For the imbibition process, the membrane is located after the inlet to prevent the invading fluid from filling the whole geometry in a single pressure step.

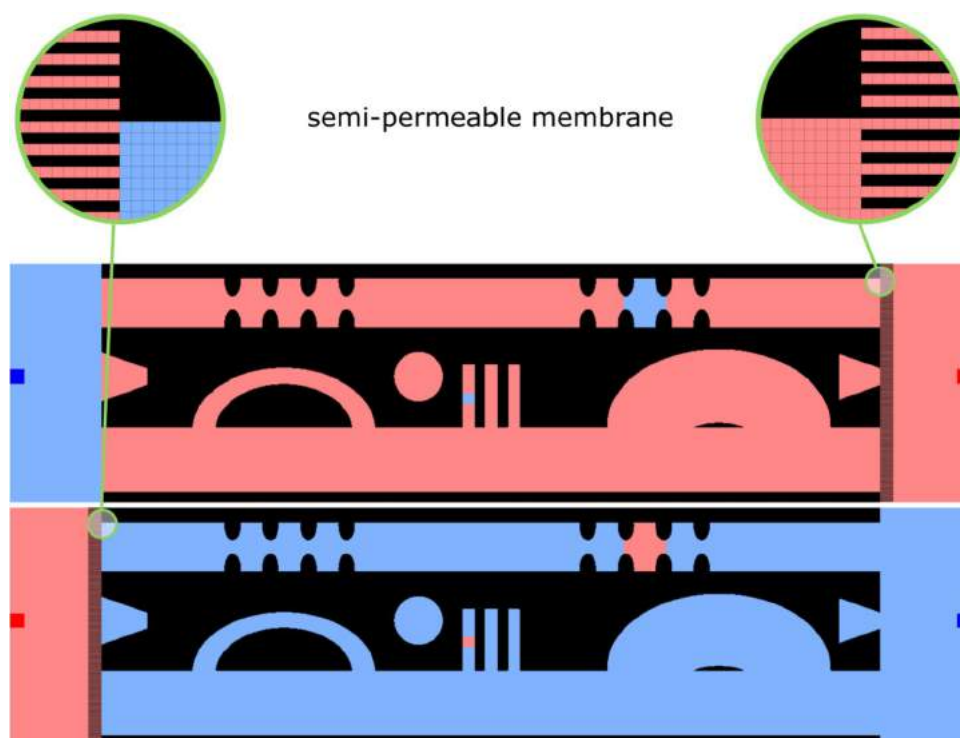
Figure 4a, b show equilibrium states for drainage and imbibition, respectively, for a 0° -contact angle. The case for a 45° -contact angle is shown in Fig. 4c, d. Each case is represented by a two-letter code. The first relates to the wettability of the invading fluid: non-wetting (N) or wetting (W). The second one indicates

if the displaced fluid is incompressible (I) or compressible (C). Thus, the four cases of interest are expressed as NC, NI, WI, and WC. During drainage, the P_c increases up to the point that the capillary diameter reaches a pixel length (Eq. (1)). In the imbibition the opposite occurs, i.e., initially, the P_c is high, and as the pressure decreases, the wetting fluid starts to occupy the available channels. For all four cases, the algorithm provided physically consistent results. Each row in the figures states a specific value of the P_c , and they resulted from a sequence of operations applied over the regions of interest of the benchmark images (Fig. 3). These operations are described in the next section.

3.2 Algorithm's Description

The first step in building this framework is to identify the minimal set of regions of interest over which the operations will be performed. Since each of these regions is represented computationally by a matrix, the use of too many of them results in a high computational cost, and it is time-consuming. While Hazlett [12] defined these regions vaguely, Magnani [13] and Magnani et al. [14] used a non-necessary large number of regions. Hilpert and Miler [4] presented a clear definition while providing simple operators to manipulate these regions based on the Mathematical Morphology formalism. Thus, in this present work, we keep their definitions, where the current state is defined by three regions: the invading fluid, the displaced fluid, and the solid. Additionally, some pixels must be labeled as the source and sink of the invading and displaceable fluids.

Fig. 3 The benchmark geometry used to analyze and demonstrate the unified algorithm. The top and bottom figures represent the initial fluids distribution for drainage and imbibition, respectively. The wetting and non-wetting fluids are represented, respectively, by red and blue colors. In both cases, the inlet is positioned on the left side and the outlet on the right side of the medium. Thus, the dark blue and dark red squares are the source or sink of each fluid, depending on the case



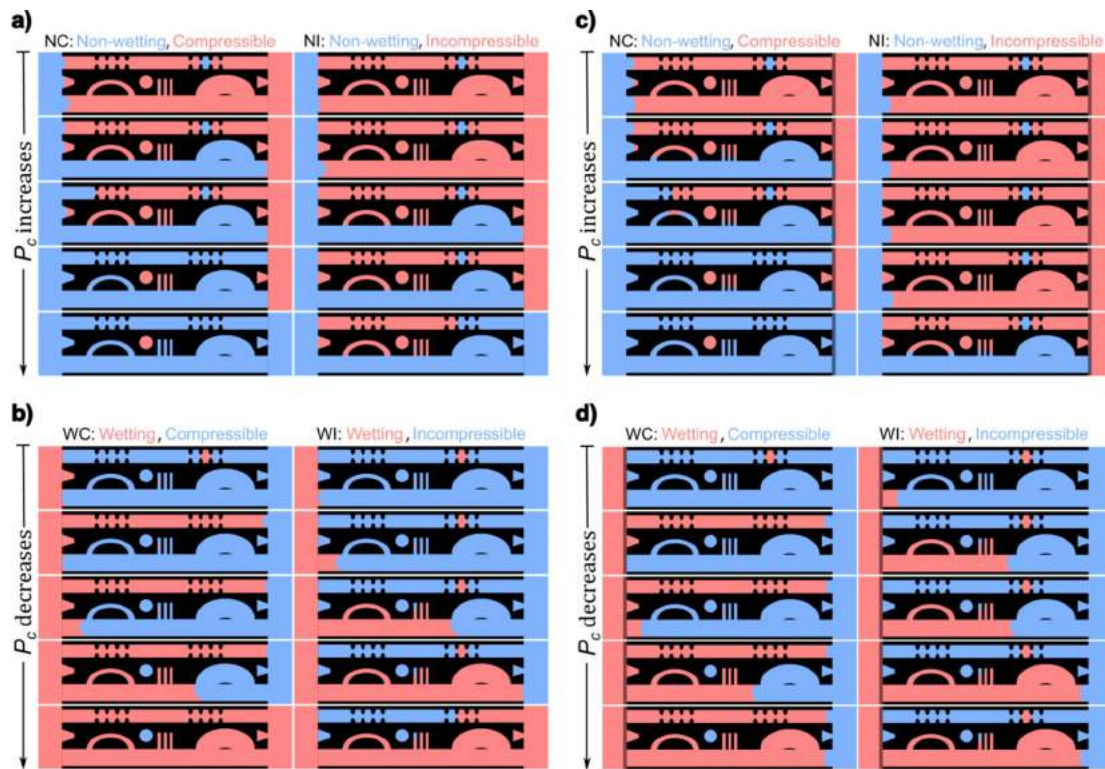


Fig. 4 Selected equilibrium states for the drainage (a and c) or imbibition (b and d) using the unified YLM algorithm in the benchmark geometries with a contact angle of 0° (a and b) or 45° (c and d). Each case is represented by a two-letter code. The first relates to the wet-

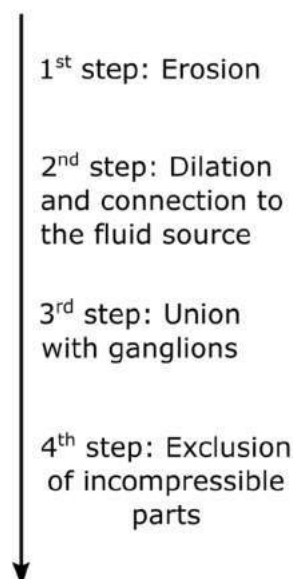
tability of the invading fluid: non-wetting (N) or wetting (W). The second one indicates if the displaced fluid is incompressible (I) or compressible (C)

Figure 5 shows a schematic picture of the YLM algorithm. We use image analysis notation based on set operations. The sequence and number of proposed operations were designed to allow a unified algorithm for the four cases of interest (NC, NI, WI, and WC). Each column of the figure represents each

of these cases. For a better organization, the operations are grouped into four steps, with the last step being performed solely for the two incompressible cases (NI and WI).

Common to all cases, the first step (Fig. 5) erodes the porous region (P) using a circle as a structuring element (D),

Fig. 5 The Algorithm structure is shown in four steps. Set operations represent the algorithm structure for each of the four cases. The symbols are: porous region (P), structuring element (D), 1st step set (A_i), 2nd step operations ($N_i^{(k)}$ or $W_i^{(k)}$, it depends on the case), filtering process at the invading fluid source (F_{I_v}), distribution of the invading fluid at the previous pressure step (I_{i-1}), 3rd step set (B_i), 4th step operations ($C_i^{(k)}$), filtering process at the displaced fluid sink (F_{O_v}), and distribution of the displaced fluid at the previous pressure step (O_{i-1})



NC	NI	WI	WC
$A_i \equiv P \ominus D'$			
$N_i^{(0)} \equiv A_i \cup I_{i-1}$ $N_i^{(1)} \equiv F_{I_v} \left(N_i^{(0)} \right)$ $N_i^{(2)} \equiv N_i^{(1)} \cap A_i$ $N_i^{(3)} \equiv N_i^{(2)} \oplus D$		$W_i^{(0)} \equiv A_i \oplus D$ $W_i^{(1)} \equiv P \setminus W_i^{(0)}$ $W_i^{(2)} \equiv W_i^{(1)} \cup I_{i-1}$ $W_i^{(3)} \equiv F_{I_v} \left(W_i^{(2)} \right)$	
$B_i \equiv N_i^{(3)} \cup I_{i-1}$		$B_i \equiv W_i^{(3)} \cup I_{i-1}$	
	$C_i^{(0)} \equiv O_{i-1}$ $C_i^{(1)} \equiv F_{O_v} \left(C_i^{(0)} \right)$ $C_i^{(2)} \equiv B_i \setminus C_i^{(1)}$ $C_i^{(3)} \equiv F_{I_v} \left(C_i^{(2)} \right)$ $C_i^{(4)} \equiv C_i^{(3)} \cup I_{i-1}$		

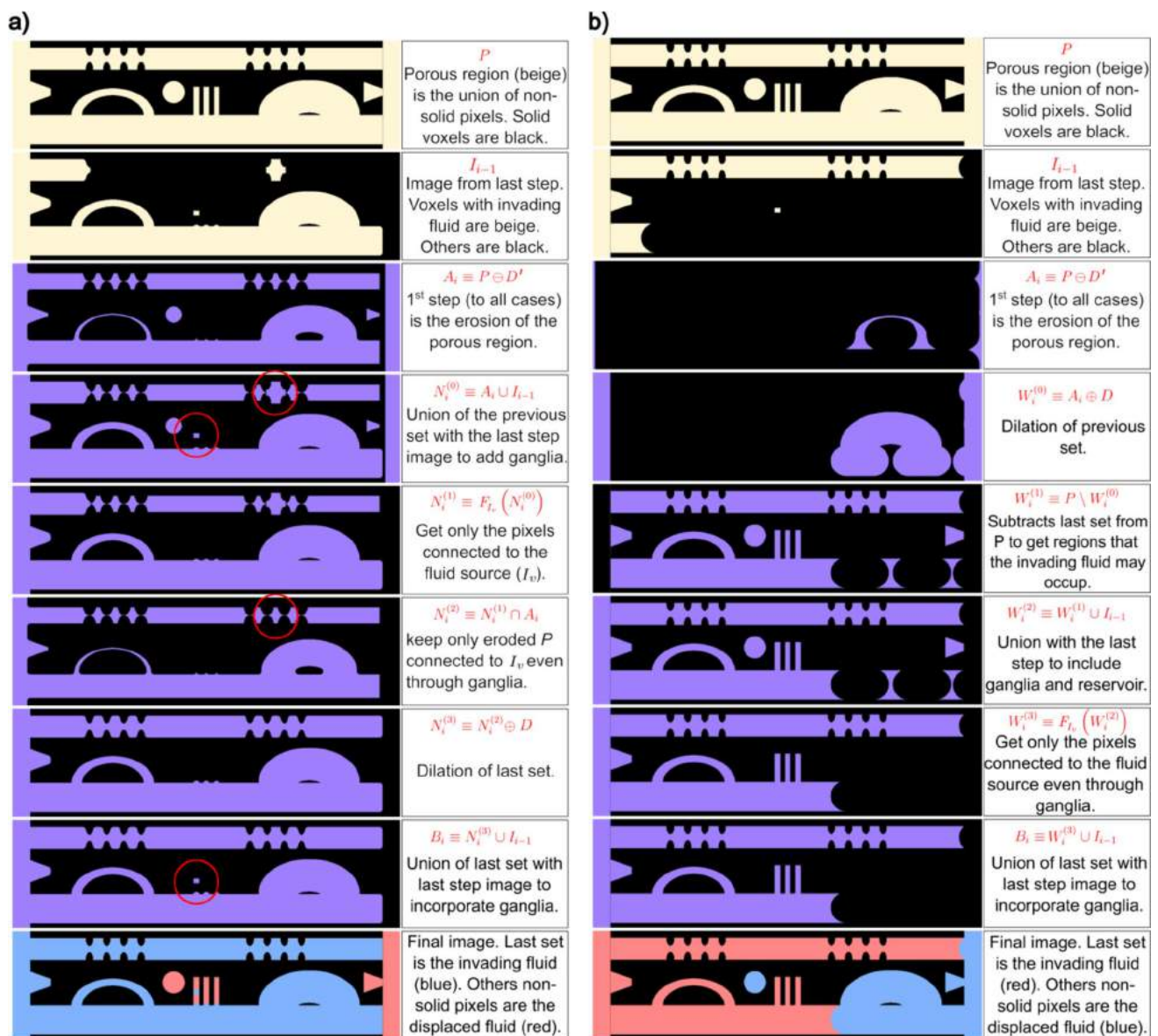


Fig. 6 Image analysis operations to determine the distribution of fluids in one pressure step. **a** Drainage: the invading fluid is non-wetting and the displaced fluid is fully compressible (NC). **b** Imbibition: the invading fluid is wetting, and the displaced fluid is fully compressible (WC). The fluid source I_v is at the extreme left and the fluid sink O_v

at the extreme right. The beige pixels represent the input data of the algorithm: porous region and initial (or previous pressure step) distribution of the invading fluid. The purple pixels indicate the operations performed to find the final image that represents the obtained result for the one-step drainage or imbibition

resulting in the A_i set. The second one consists of a group of four operations ($N_i^{(k)}$ for NC and NI; $W_i^{(k)}$ for WC and WI) that expands the previous region excluding parts not connected to the input fluid source. The symbol F_{I_v} denotes the operation or filtering process that guarantees that only the sections connected to the invading fluid source (I_v) should remain, and I_{i-1} indicates the distribution of the invading fluid at the previous pressure step. The operations order depends on the type of fluid, as shown in Fig. 5.

After identifying the regions occupied by the invading fluid, associated with a P_c , the regions originally disconnected (ganglia) are included in the third step, indicated by B_i (Fig. 5). If the displacement fluid is fully compressible (NC/WC), this is the last stage for the current P_c . However, if the displaced fluid is incompressible (NI and WI), it is still necessary to exclude its parts that are not connected to the sink. It happens as the fluid has no place to flow to, and it cannot be compressed; then, this portion of the fluid

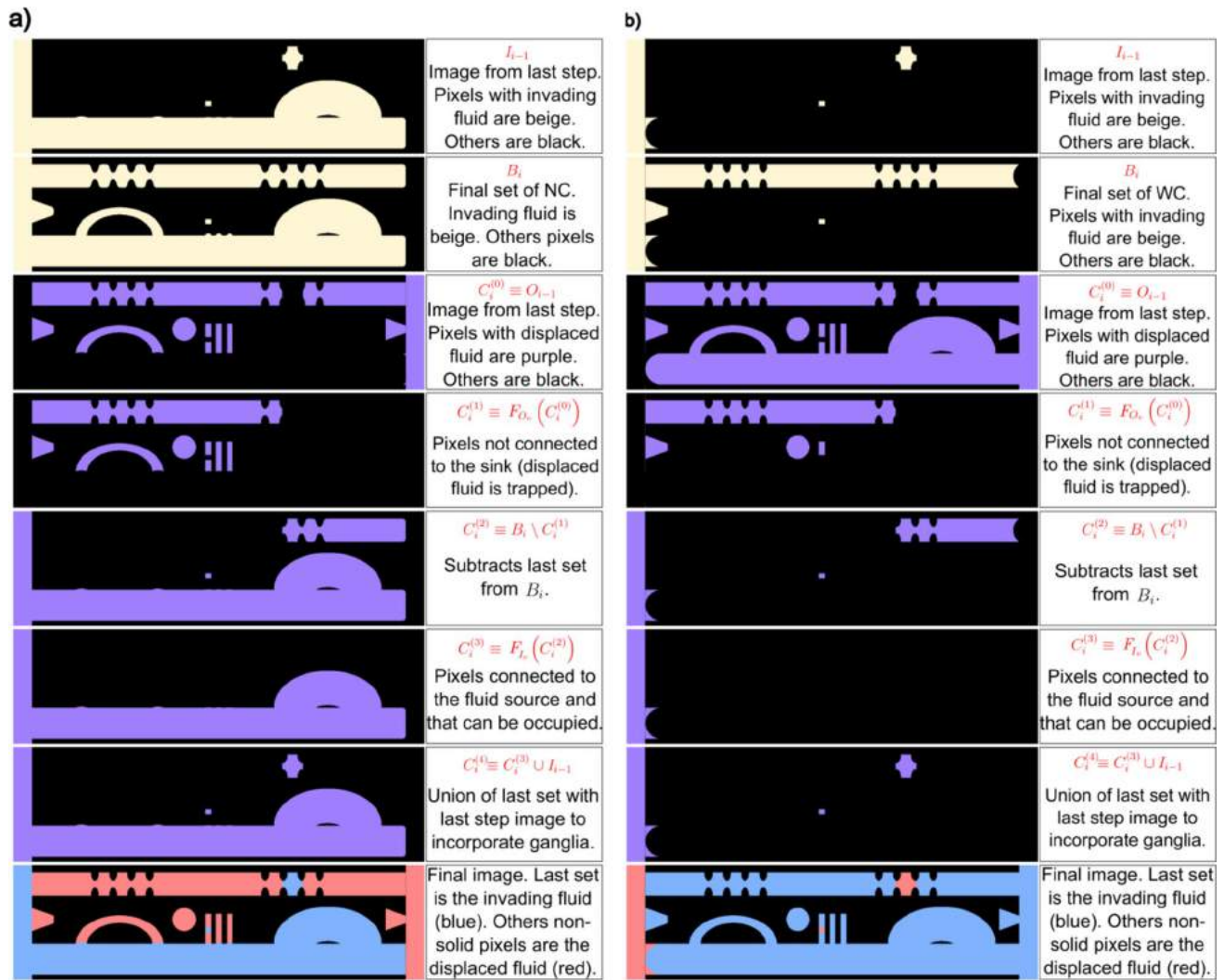


Fig. 7 Image analysis operations to determine the distribution of fluids in one pressure step. **a** Drainage: the invading fluid is non-wetting and the displaced fluid is fully incompressible (NI). **b** Imbibition: the invading fluid is wetting, and the displaced fluid is fully incompressible (WI). The fluid source I_v is at the extreme left and the fluid sink

O_v at the extreme right. The beige pixels represent the input data of the algorithm: porous region and initial (or previous pressure step) distribution of the invading fluid. The purple pixels indicate the operations performed to find the final image that represents the obtained result for the one-step drainage or imbibition

remains trapped in its position in the structure. The fourth step (Fig. 5) operation is indicated by the $C_i^{(k)}$. In a similar way to F_{I_v} and I_{i-1} , F_{O_v} , is the filtering process that guarantees that only the sections connected to the displaced fluid sink (O_v) should remain, and O_{i-1} indicates the distribution of the displaced fluid at the previous pressure step.

The results of each step in Fig. 5 performed by the YLM algorithm are exemplified and commented in Figs. 6 (NC and WC cases) and 7 (NI and WI cases) for one of the pressure steps. As for the input data, no special requirement was imposed on the initial fluids distribution or by the geometry, the algorithm is rather general.

The capillary curve is then obtained by applying the following equation with different radii for the circle, whose values are given by the P_c using the Young–Laplace Equation (Eq. (1)).

$$s(r) = \frac{\sum \{ [F_{I_v}(P \ominus D')] \oplus D \}}{\sum P} \quad (2)$$

where $s(r)$ is the saturation of the invading fluid for a circle radius (r , and $D' \equiv D'(r)$), and the summation symbol represents the operation of counting the pixels of each region, and the operator F_{I_v} , denotes the process of filtering the pixels connected with the invading fluid source.

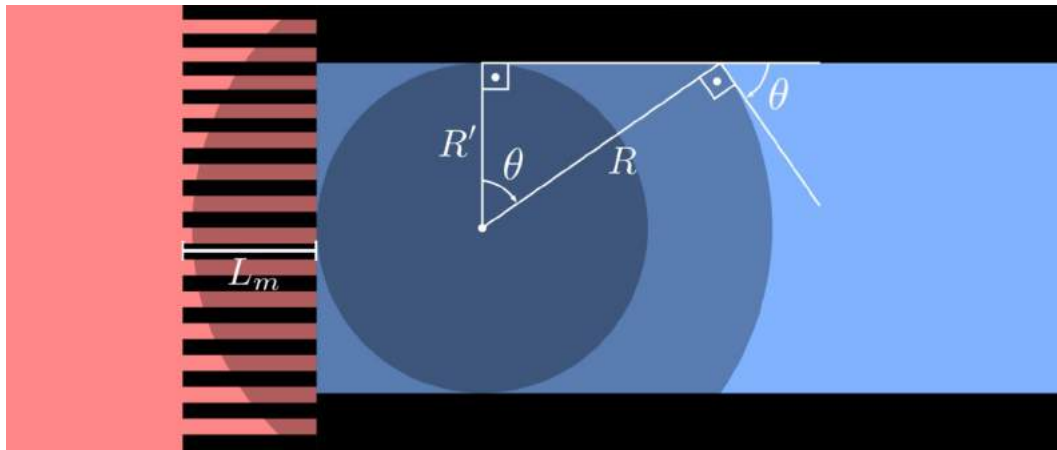


Fig. 8 Attempt to use the generalization by Schulz et al. [5] to simulate imbibition with a different wettability angle. Erosion for a circle radius and subsequent dilation by a circle of a larger radius is indicated in the same image

4 Imbibition Case

As discussed earlier, the correction proposed by Hilpert and Miller [4] and the generalization proposed by Schulz et al. [5] to YLM were not applied to the imbibition case in other works. In this section, we show that there was no need to use Hilpert's correction for imbibition and that the Schulz generalization can be applied to it, only if an appropriate membrane is used.

In drainage, larger channels drain first unless there is a narrow channel in the pathway to restrict them. The restriction is due to the higher P_c required for draining these narrow channels. It is called the *ink bottle effect*. The approach proposed by Hilpert and Miller [4] is applied to correct an overestimated saturation due to *ink bottle* geometries inside the porous space after the *opening* process (see Fig. 13 in Appendix 2). However, the same effect cannot happen on imbibition because the smaller channels fill first. Therefore, Hilpert's correction is unnecessary for imbibition.

The generalization of Schulz et al. [5] to other contact angles can be very useful in imbibition since wettability is an important factor. Nevertheless, as far as we know, it has never yet been described. Figure 8 shows that according to the Schulz process the *dilation* with $R\cos\theta$ results in a displaced fluid that moves backward, preventing the wetting fluid from entering the membrane and, subsequently, in the channel. The solution is straightforward: use an elongated membrane with a length greater than the difference in radii of the two circles,

$$L_m > R - R' = R' \left(\frac{1}{\cos\theta} - 1 \right) \quad (3)$$

where L_m is the membrane length, R' is the half channel width, and θ is the contact angle as indicated in Fig. 8. Some selected simulation steps are shown in Fig. 4a, c for contact angles of 0° and 45° , respectively.

5 Conclusion

In this work, we presented an algorithm to simulate capillary-driven two-phase fluid flow in porous media by combining several previous works into a single unified framework. Following Hazlett [12], Magnani [13], and Magnani et al. [14], the algorithm uses the Mathematical Morphology formalism. We also incorporated improvements from Hilpert and Miller [4] and Schulz et al. [5]. In addition to the unified structure, we offer, for the first time in the literature, a complete and detailed description of the YLM algorithm and show how to apply it in the imbibition case.

This generalized framework allows the simulation of both drainage and imbibition problems with the displaced fluid being either fully compressible or incompressible. The unified algorithm is also capable of handling any geometry or initial fluid distributions. So, one possibility of application for this unified algorithm is predicting the hysteretic characteristic of the soil retention curve by drying and wetting cycles. However, it is not limited to this application.

Finally, we offer an open-source C++ code for it, something that will help the YLM to gain even more space in different applications involving transport phenomena in digital porous media.

6 Computer Code Availability

The Young–Laplace Method unified algorithm is available as a C++ source code, accompanied by Python 3+ example scripts. The source code is licensed under the GPL-3.0 License. The source code and examples can be downloaded from the data repository [38].

Appendix 1. Mathematical Morphology Applied to YLM

Figure 9 illustrates how the region occupied by the invading fluid is found using Mathematical Morphology (MM) operations. In the YLM, it is considered that the image is exclusively formed by the union between the solid and pore (P) related pixels and that the MM operations will not expand the image beyond its original dimensions.

In MM, the *opening operation* ($\circ$) is defined using the combination of two fundamental operations: *erosion* and *dilation*. In the *erosion operation*, denoted by $\ominus$, a structuring element with a disk shape D is applied over the region P (Fig. 9a), resulting in region $E = P \ominus D$, as shown in Fig. 9b. Region E comprises all the points in P , where the structuring element can be centered without overlapping the solid region. Notice that although no segment can overlap over the solid region, it is allowed for part of the structuring element to be outside of the boundary image.

Figure 9c exemplifies the *dilation operation* of E by a structuring element D (denoted by $E \oplus D$), resulting in region O with all the points intersected by the disk D as its center moves around the E region. It is important to notice that the result includes only points originally belonging to P ; otherwise, the final image would be expanded.

Lastly, Fig. 9c is also the region O obtained directly as a result of the *opening operation* of P by the structuring element D ($O = P \circ D$), which comprises all the points of D , as this element moves around P without extending over the solid region. As the case shown in Fig. 9b, the structuring element is allowed to lay over regions outside the image. Moreover, as in Fig. 9c, the resulting region O contains only points belonging initially to P . Figure 9d shows the final results after relabeling the porous region.

As one can realize from Fig. 9, the *erosion* of P by D followed by the *dilation* by D is identical to the *opening* of P by D , i.e.,

$$O = P \circ D = E \oplus D = (P \ominus D) \oplus D \quad (4)$$

Actually, it is possible to prove that it represents a general result, which is of great practical importance because it allows performing the *opening* operation using the combination of *dilation* and *erosion* operations. Furthermore, *dilation* can be obtained by applying *erosion* to the negative of an image. The negative is retrieved by swapping the image foreground and background, which in our case are porous and solid regions, respectively. Denoting the negative by an overbar, one can show that

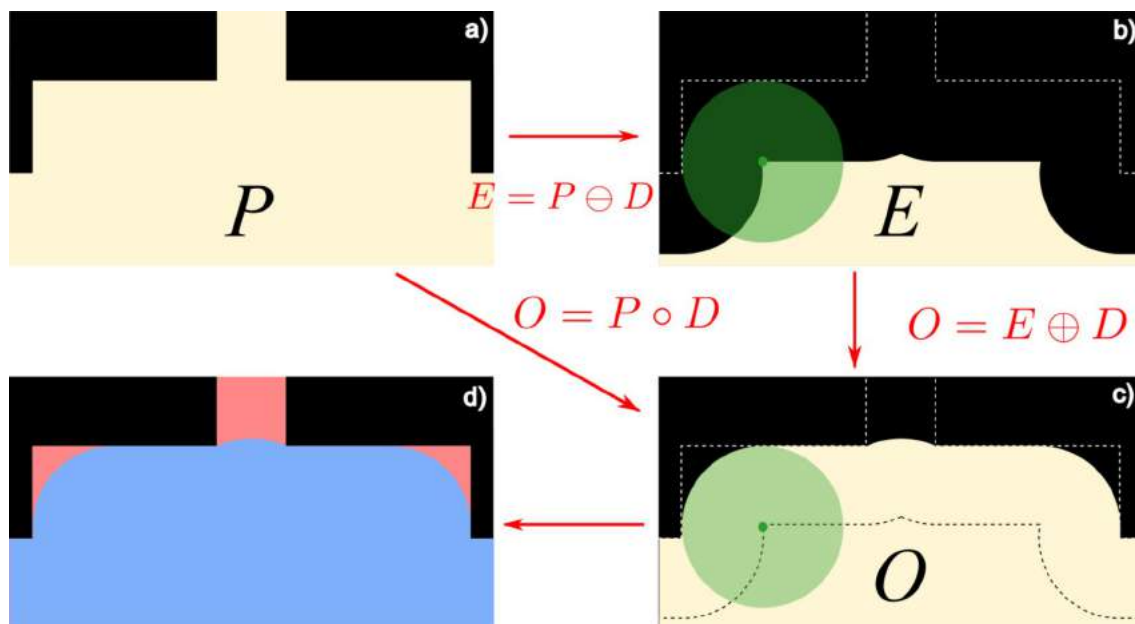


Fig. 9 Examples of the fundamental MM operations. **a** The porous region P is shown in beige. **b** and **c** The beige region represents the set of points resulting from the operations of erosion and dilation, respectively. **d** The final result

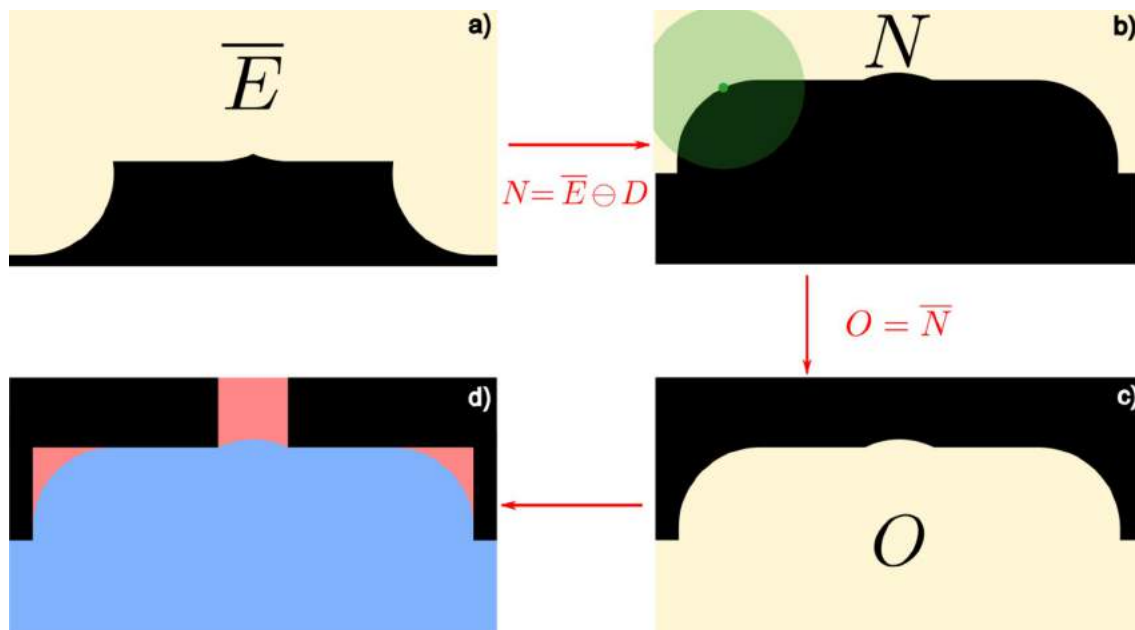


Fig. 10 The opening operation of P is performed by two erosion operations. This is possible because the negative of the dilation is equal to the erosion of the negative. **a** Results from the negative of

the E region in Fig. 9b. **b** and **c** The beige region represents the set of points resulting from the operations of erosion and the negative of the N region, respectively. **d** The final result

$$E \oplus D = \overline{(\overline{E} \ominus D)} \quad (5)$$

The right-hand side operation is shown in Fig. 10a–d, which gives the same result already displayed in Fig. 9, which depicts the operation of the left-hand side. Using Eq. (5), the *opening* operation in Eq. (4) is written solely in terms of *erosions*

$$O = \overline{(\overline{E} \ominus D)} = \overline{[(P \ominus D) \ominus D]} \quad (6)$$

As previously mentioned, to obtain an efficient algorithm, the *erosion* operations must be performed with the aid of the Euclidian Distance Transform (EDT). The result of the EDT is a map with the distance of each pore pixel to the closest solid pixel, and it can be computed using a very efficient and parallel algorithm proposed by Saito and Toriwaki [37].

If the structuring element is a circle of radius R , then the *erosion* operation is given by the set of pixels whose distance to the solid is larger than R or, equivalently, $\text{EDT}_{ij}^2 > R^2$ where EDT_{ij}^2 indicates the squared distance of the pixel located at the image position ij to the closest solid pixel [39]. Using the squared distance is advantageous since it allows for the computation to be handled solely by integers. Figure 11 depicts how the EDT can be used to compute the *opening* operation of the porous region by a circle. The

procedure starts from the EDT result, shown in Fig. 11a. As explained, the values are the squared distance to the background (solid). By taking the negative of this result, i.e., setting it as background (Fig. 11b), the EDT is once again applied from which a new *erosion* is performed. The negative result of this last operation (Fig. 11c) gives the *opening* of the porous region by the circle (Fig. 11d).

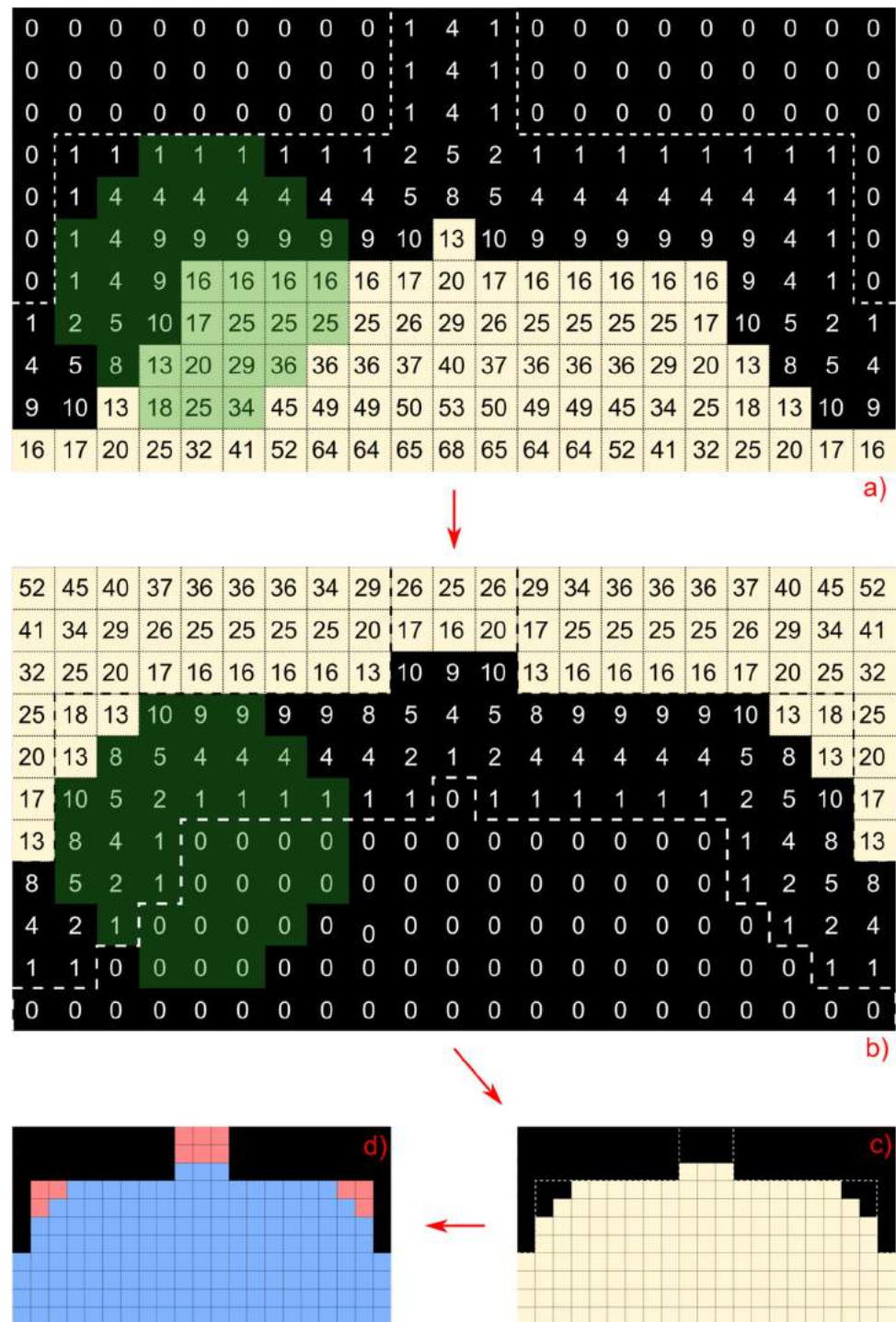
Figure 12 illustrates the bottom-up drainage through a narrow channel. The non-wetting fluid source is represented by the dark blue square (Fig. 12a). By the *opening* operation, and consequently, by the Young–Laplace equation, the upper region could be occupied by the non-wetting fluid; however, the circle cannot cross the constriction for this radius (Fig. 12b). From the morphological standpoint, this question is addressed by discarding the upper region since it is not connected to the source.

The next step is the identification of the connection between the regions can be performed by using the algorithm of He et al. [40]. This technique assigns a label to each unconnected group of pixels, allowing us to ignore the pixels with labels different from that of the sources (Fig. 12c). This methodology already considers the possibility of multiple sources.

By using the MM notation discussed above, the YLM can be expressed as [4]:

$$s(r) = \frac{\sum F_v(P \circ D)}{\sum P} \quad (7)$$

Fig. 11 Opening operation of the porous region by a circle of 7 pixels in diameter (i.e., $R^2 = 3.5^2 = 12.25$) using the EDT (see Fig. 2). **a** EDT values used to erode the porous region. **b** EDT values used to erode the negative image of **a**. **c** The negative image of **b** is equivalent to the opening operation of the porous region directly. **d** Final image after opening operation of the porous region by a circle of 7 pixels in diameter



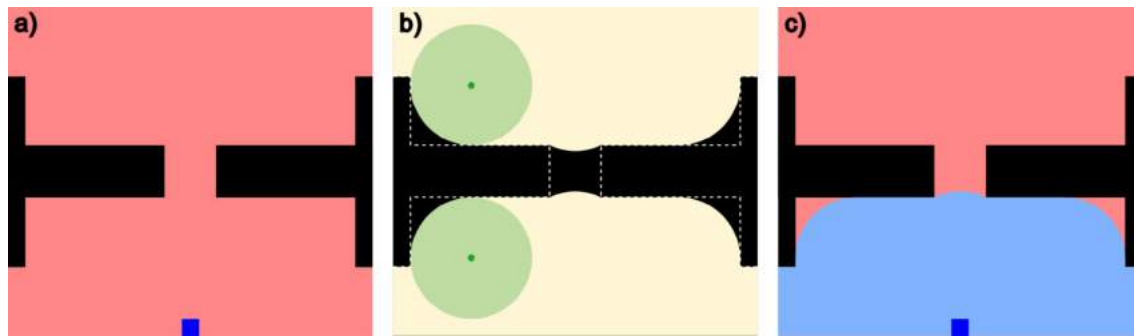


Fig. 12 **a** A bottom-up drainage through a narrow channel with the wetting fluid in red, and the non-wetting fluid source represented by the dark blue square. **b** The opening operation identifies two regions (beige color) that could be occupied by **c** the invading non-wetting

fluid (light blue), but the upper region is not connected to the fluid source (dark blue pixel), and hence cannot be filled in the current pressure step

where $s(r)$ is the saturation of the invading fluid for a given circle radius (r , and $D \equiv D(r)$), and the summation symbol represents the operation of counting the pixels of each region. As for the operator F_{I_v} , it denotes the process of filtering the pixels connected with the invading fluid source.

As described in Sect. 2, imbibition can be obtained in a similar way to the drainage processes. But actually, some implementation details distinguish these two processes. These differences were noticed by the earlier authors of the method [12–14], and they were discussed in Sect. 3.

Appendix 2. Main Improvements for Drainage Simulation with the YLM

Since the majority of the applications of the YLM are limited to drainage simulations, this process received greater attention from researchers over the years compared to imbibition. Consequently, important improvements were proposed in the literature for the drainage process, and here, we describe two significant changes to the original procedure summarized by Eq. (7).

Hilpert and Miller [4] identified an error in Eq. (7) which led to an overestimation of the saturation value in some situations. As displayed in Fig. 13a, for a drainage process of the wetting fluid (red) from the bottom to the top in a selected geometry with two large pore regions separated by a short channel (like an *ink bottle* geometry), the *opening* operation results in the two regions being connected (Fig. 13c). Nevertheless, during a real invasion, the non-wetting fluid (blue) would not reach the upper section for the value of pressure related to the circle radius indicated in Fig. 13b, since it cannot cross the channel. This would only be possible if the entire circle could cross the channel.

To avoid this error, Hilpert and Miller [4] proposed a simple correction (Fig. 13d) that consists of identifying the regions connected to the fluid source between the *erosion* (Fig. 13b) and the *dilation* (Fig. 13f) processes instead of after the *dilation* (Fig. 13e). Figure 13g, h shows the difference between the original YLM drainage and Hilpert's correction YLM drainage, respectively. Considering this correction, Eq. (7) is replaced by

$$s(r) = \frac{\sum \{ [F_{I_v}(P \ominus D)] \oplus D \}}{\sum P} \quad (8)$$

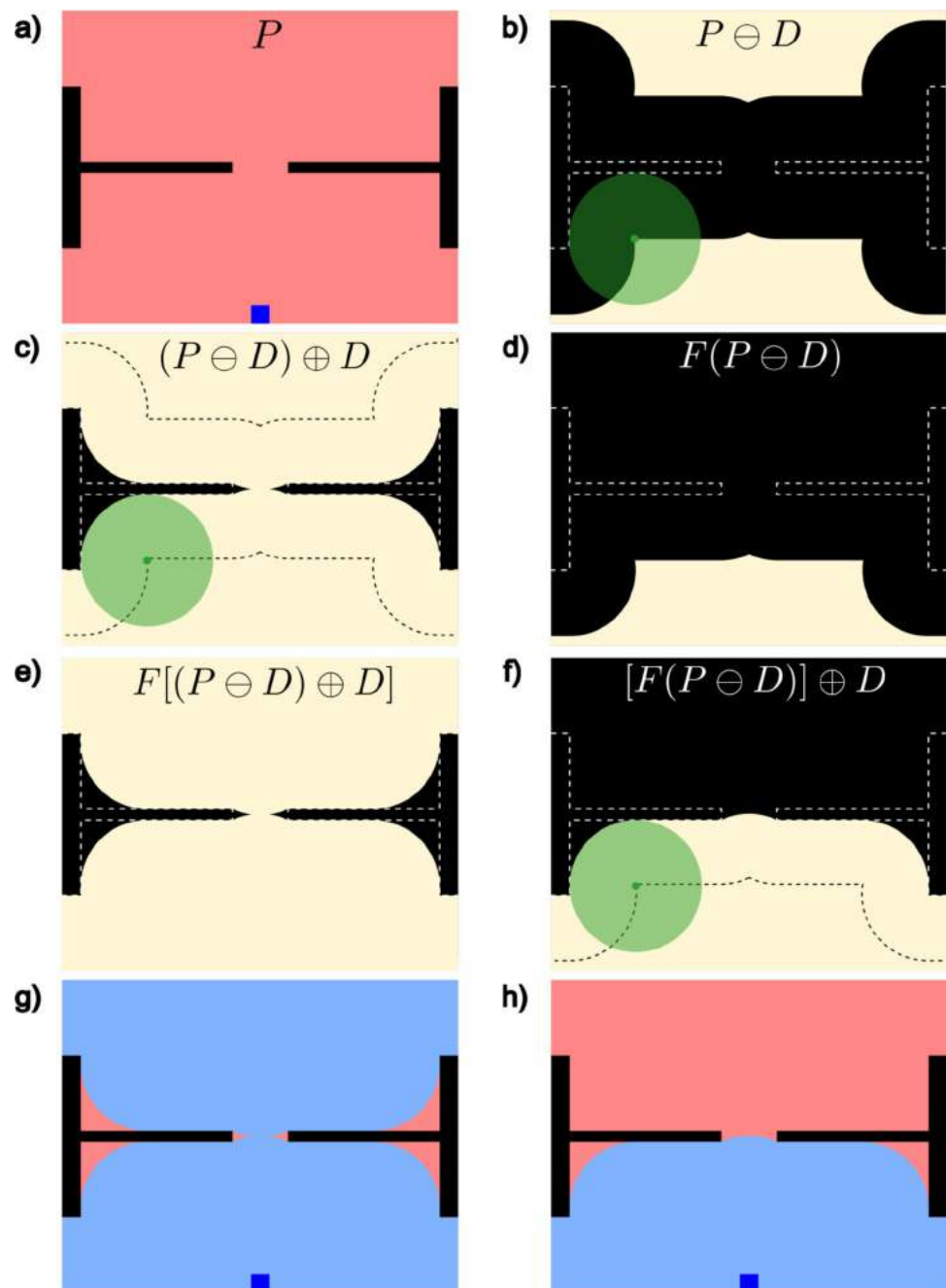
The drainage process described by Eq. (8) is limited to the simulation of the invasion of a fully non-wetting fluid, or equivalently, the value for the contact angle in Fig. 1a is always zero. Schulz et al. [5] presented a small modification to this algorithm, allowing different values to be set. The concept used by the authors is depicted in Fig. 14. It shows that if a circle with a different radius is used (R' for *erosion* and R for *dilation*); then, a final interface with a radius of curvature R' and contact angle θ , given by

$$R' = R \cos \theta \quad (9)$$

is achieved. Including this improvement, Eq. (8) is modified to Eq. (2) in which the structuring element D' is associated with a circle with a radius R' . Even though this generalization enables more realistic applications of the YLM, a fact that it is not yet widely known by the research community, as recent works still point out the inability to change the contact angle [10, 41].

One main advantage of this approach is concerning to its implementation easiness. Since just the radius of the *erosion* needs to be modified, it is easily incorporated into an existing YLM code. Moreover, as the *erosion* is computed pixel by pixel using the EDT result, a case of mixed

Fig. 13 **a** A drainage process of the wetting fluid (red) from the bottom to the top in a selected geometry with two large pore regions separated by a short channel. Common to both cases, the erosion operations are performed in **b**, **c**, **e**, and **g**. The original YLM drainage algorithm as proposed by Hazlett [12] and also by Magnani [13] and Magnani et al. [14]. **d**, **f**, and **h** The correction of Hilpert and Miller [4]. The non-wetting invading fluid (blue) source is represented by a dark blue square



wettability could be readily performed by assigning an individual contact angle to each pixel [5].

On the other hand, since the porous media surface is, in general, curved, the contact angle will depend on this curvature. Also, if the larger circle used in the *dilation* extends beyond the wall to a near pore, this region can be incorrectly assigned as occupied by the invading fluid. Although, for it to happen, this region must also have a connection with the fluid source. This situation is shown

in Fig. 14, where the circle with a radius R' extends to a bottom channel.

As mentioned by the authors, in petrophysics applications, these two drawbacks do not present a serious problem if $\theta \lesssim 40^\circ$ as the rock samples generally have low porosity and a large number of small pores.

As shown in Sect. 4, an appropriate membrane makes Schulz's proposed modification suitable even for imbibition.

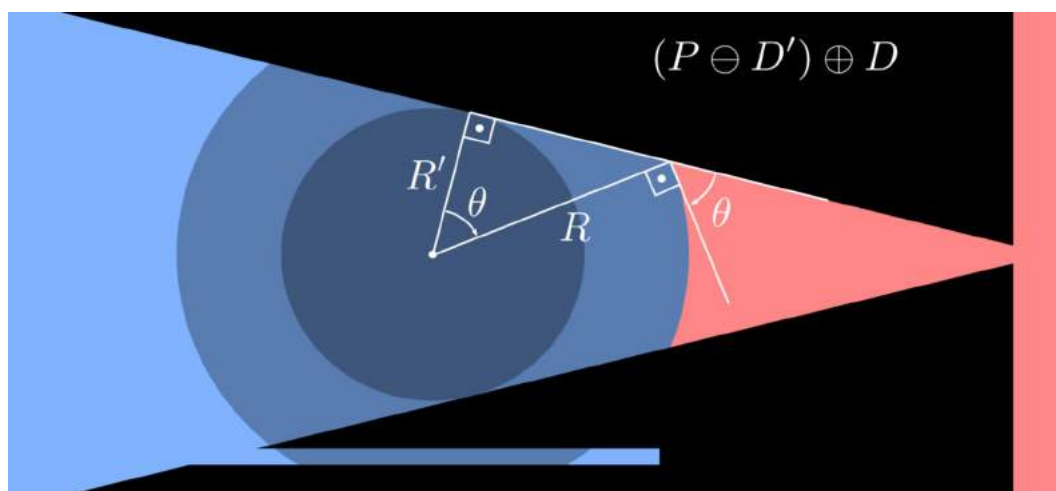


Fig. 14 The sequence of MM operations proposed by Schulz et al. [5] to enable drainage simulations with different contact angles. The disks D' and D are associated with R' for erosion and R for dilation, respectively

Acknowledgements The authors are grateful to the Brazilian Petroleum Company (Petrobras) for the financial support.

Author Contributions A.M.Z.: conceptualization, methodology, software, and writing—original draft; M.A.C.: writing—review and editing; F.G.W.: validation, resources, writing—review and editing, and funding acquisition; D.N.S.: resources, writing—review and editing, and funding acquisition; R.S.: software, resources, and funding acquisition; L.O.E.S.: conceptualization, writing—review and editing; T.R.F., L.F.P., and F.A.M.C.: writing—review and editing.

Funding Fabiano G. Wolf, Diogo Siebert, and Rodrigo Surmas report financial support provided by the Brazilian Petroleum Company (Petrobras) (project numbers 4600386529 and 2015/00388–4).

Availability of Data and Material Not applicable.

Code Availability An open-source C++ code for the proposed unified algorithm is available at: <https://github.com/alexandrezaobot/ylm>.

Declarations

Conflict of Interest The authors declare no competing interests.

References

- V.P. Schulz, J. Becker, A. Wiegmann, P.P. Mukherjee, C.-Y. Wang, J. Electrochem. Soc. **154**, B419 (2007)
- H.-J. Vogel, J. Tölke, V.P. Schulz, M. Krafczyk, K. Roth, Vadose Zo. J. **4**, 380 (2005)
- D. Adalsteinsson, M. Hilpert, Transp. Porous Media **65**, 337 (2006)
- M. Hilpert, C.T. Miller, Adv. Water Resour. **24**, 243 (2001)
- V.P. Schulz, E.A. Wargo, E.C. Kumbur, Transp. Porous Media **107**, 13 (2015)
- I. Shikhov, C.H. Arns, Transp. Porous Media **107**, 623 (2015)
- P. Mohammadmoradi, A. Kantzas, Adv. Water Resour. **94**, 200 (2016)
- Y. Mu, R. Sungkorn, J. Toelke, Adv. Water Resour. **95**, 16 (2016)
- S. Berg, M. Rücker, H. Ott, A. Georgiadis, H. van der Linde, F. Enzmann, M. Kersten, R.T. Armstrong, S. de With, J. Becker, A. Wiegmann, Adv. Water Resour. **90**, 24 (2016)
- P. Mostaghimi, R.T. Armstrong, A. Gerami, Y. Hu, Y. Jing, F. Kamali, M. Liu, Z. Liu, X. Lu, H.L. Ramandi, A. Zamani, Y. Zhang, J. Nat. Gas Sci. Eng. **39**, 143 (2017)
- S.N. Apourvari, C.H. Arns, Adv. Water Resour. **95**, 161 (2016)
- R.D. Hazlett, Transp. Porous Media **20**, 21 (1995)
- F.S. Magnani, Determinação Das Configurações de Equilíbrio Em Meios Porosos Indeformáveis, Universidade Federal De Santa Catarina, 1996
- F.S. Magnani, P.C. Philippi, Z.R. Liang, C.P. Fernandes, Int. J. Multiph. Flow **26**, 99 (2000)
- P. Mohammadmoradi, A. Kantzas, in *Day 3 Tue, April 25, 2017* (SPE, 2017)
- S.P. Mohammadmoradi, Pore morphological multi-phase digital rock physics models, UNIVERSITY OF CALGARY, 2016
- D. Tiab, E.C. Donaldson, *Petrophysics: Theory and Practice of Measuring Reservoir Rock and Fluid Transport Properties*, 4th edn. (Gulf Professional Publishing, 2015)
- M.A. Celia, P.C. Reeves, L.A. Ferrand, Rev. Geophys. **33**, 1049 (1995)
- J.Y. Zuo, X. Guo, Y. Liu, S. Pan, J. Canas, O.C. Mullins, Energy Fuels **32**, 4705 (2018)
- A. Mehmani, M. Prodanović, Adv. Water Resour. **63**, 104 (2014)
- T. Zhang, S. Sun, Energies **14**, 7724 (2021)
- H. Huang, D.T. Thorne, M.G. Schaap, M.C. Sukop, Phys. Rev. E **76**, 066701 (2007)
- X. Shan, H. Chen, Phys. Rev. E **47**, 1815 (1993)
- X. Shan, G. Doolen, J. Stat. Phys. **81**, 379 (1995)
- F.G. Wolf, D.N. Siebert, R. Surmas, Phys. Fluids **32**, 052008 (2020)
- J. Zhang, Microfluid. Nanofluidics **10**, 1 (2011)
- S.A. Galindo-Torres, A. Scheuermann, L. Li, D.M. Pedrosa, D.J. Williams, Comput. Phys. Commun. **184**, 1086 (2013)
- C.J. Landry, Z.T. Karpyn, O. Ayala, Water Resour. Res. **50**, 3672 (2014)
- I. Zacharoudiou, E.S. Boek, Adv. Water Resour. **92**, 43 (2016)
- J. Wang, L. Chen, Q. Kang, S.S. Rahman, Fuel **181**, 478 (2016)
- Q. Liu, Y.-L. He, Phys. A Stat. Mech. Its Appl. **465**, 742 (2017)

32. Z. Li, S. Galindo-Torres, G. Yan, A. Scheuermann, L. Li, *Adv. Water Resour.* **116**, 153 (2018)
33. Z. Peng, S. Liu, S. Tang, Y. Zhao, Y. Li, *Geofluids* **2018**, 1 (2018)
34. T. Zhang, S. Sun, *Fuel* **246**, 196 (2019)
35. J. Zhao, F. Qin, D. Derome, J. Carmeliet, *J. Hydrol.* **588**, 125080 (2020)
36. P. Soille, *Morphological Image Analysis* (Springer, Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004)
37. T. Saito, J.-I. Toriwaki, *Pattern Recognit.* **27**, 1551 (1994)
38. A. Zabot, (2022)
39. C.A. Glasbey, G.W. Horgan, *Image Analysis for the Biological Sciences*, 1st edn. (Wiley, 1995)
40. L.-F. He, Y.-Y. Chao, K. Suzuki, *J. Comput. Sci. Technol.* **28**, 468 (2013)
41. M.A. Camargo, F.A.M. Cássaro, L.F. Pires, *Bull. Eng. Geol. Environ.* **81**, 137 (2022)

Publisher's Note Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

Springer Nature or its licensor (e.g. a society or other partner) holds exclusive rights to this article under a publishing agreement with the author(s) or other rightsholder(s); author self-archiving of the accepted manuscript version of this article is solely governed by the terms of such publishing agreement and applicable law.