

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

MARLY TEREZINHA QUADRI SIMÕES DA SILVA

**CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DA CORROSÃO EM ESTRUTURAS DE
CONCRETO ATRAVÉS DA DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO
DO ÍON CLORETO USANDO MOVIMENTO BROWNIANO**

CURITIBA

2024

MARLY TEREZINHA QUADRI SIMÕES DA SILVA

**CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DA CORROSÃO EM ESTRUTURAS DE
CONCRETO ATRAVÉS DA DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO
DO ÍON CLORETO USANDO MOVIMENTO BROWNIANO**

**CONTRIBUTION TO THE STUDY OF CORROSION IN CONCRETE
STRUCTURES THROUGH THE DETERMINATION OF THE DIF
FUSION COEFFICIENT OF CHLORIDE ION USING BROWNIAN MOTION**

Trabalho de Tese apresentada como requisito para
obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil do
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
(UTFPR).

Orientador: Dr. Wellington Mazer

CURITIBA

2024



[4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Esta licença permite remixe, adaptação e criação a partir do trabalho, para fins não comerciais, desde que sejam atribuídos créditos ao(s) autor(es). Conteúdos elaborados por terceiros, citados e referenciados nesta obra não são cobertos pela licença.



MARLY TEREZINHA QUADRI SIMOES DA SILVA

CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DA CORROSÃO EM ESTRUTURAS DE CONCRETO ATRAVÉS DA DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO DO ÍON CLORETO USANDO MOVIMENTO BROWNIANO

Trabalho de pesquisa de doutorado apresentado como requisito para obtenção do título de Doutor Em Engenharia Civil da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR). Área de concentração: Construção Civil.

Data de aprovação: 06 de Junho de 2024

Dr. Wellington Mazer, Doutorado - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Dra. Cristina Vitorino Da Silva, Doutorado - Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões (Uri)

Dr. Joao Elias Abdalla Filho, Doutorado - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Dr. Peter Ludvig, Doutorado - Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (Cefet/Mg)

Dr. Roberto Carlos Moro Filho, Doutorado - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Documento gerado pelo Sistema Acadêmico da UTFPR a partir dos dados da Ata de Defesa em 06/06/2024.

Agradeço à Deus pela oportunidade,
força, coragem e apoio!

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus pela oportunidade de melhorar meu conhecimento técnico profissional. Que seja utilizado para fazer o bem e ajudar aos que passarem por minha vida de forma honesta e justa.

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. Wellington Mazer, pela oportunidade, paciência, incentivo, dedicação nas correções e discussões da pesquisa e sabedoria com que me guiou nesta trajetória.

Gostaria de agradecer as contribuições para a melhoria da pesquisa encaminhadas pelos membros da banca, Profa. Dra. Cristina Vitorino da Silva da Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões (URI), Prof. Dr. João Elias Abdalla Filho da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR- CT), Prof. Dr. Péter Ludvig do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFET/MG) e Prof. Dr. Roberto Carlos Moro Filho da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR-CT).

Agradeço a Dra. Flávia Konowalenko, Dra. Raquel da Cunha Ribeiro da Silva e Dra. Sediane Carmem Lunardi Hernandez da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR-GP) pelo apoio incondicional para a realização desse sonho.

Agradeço aos demais professores da UTFPR-GP pela amizade e em especial aos do curso de Engenharia Civil onde sempre recebi apoio para a melhoria profissional.

Agradeço a amizade de todos os técnicos da UTFPR-GP.

Agradeço aos técnicos da UTFPR-CT, em especial ao Felipe e Vítor.

Ao Felipe agradeço a amizade, paciência e companhia na salinha onde a pesquisa foi realizada.

Agradeço a UTFPR por permitir o afastamento integral para desenvolver a pesquisa.

Agradeço os professores do PPGEC-CT, UTFPR-CT, pelo conhecimento adquirido em suas disciplinas.

Aos amigos da pós-graduação um agradecimento especial pela paciência e apoio durante o curso.

Agradeço aos amigos Rosângela e Carlos o apoio nas disciplinas e incentivo durante o curso.

A todos os que por algum motivo contribuíram direta ou indiretamente para a realização desta pesquisa.

Agradeço a minha família a paciência e incentivo durante essa jornada que sabem muito bem não ter sido fácil. Agradeço as minhas filhas Andressa e Débora, meu neto Matheus, meus genros Tiago e Bruno e ao meu esposo Miguel.

“As nuvens mudam sempre de posição, mas são sempre nuvens no céu. Assim devemos ser todo dia, mutantes, porém leais com o que pensamos e sonhamos: lembre-se, tudo desmancha no ar, menos os pensamentos”.
(Paulo Baleki).

RESUMO

O transporte de íon cloreto é importante para a previsão da durabilidade das estruturas de concreto armado. Para isso a previsão da penetração do íon cloreto, a previsão da difusão e da tortuosidade para materiais estruturais porosos melhora a definição de vida útil estrutural. O coeficiente de difusão influencia o transporte de íons cloreto, o que pode causar corrosão das estruturas. Este trabalho propõe a definição do coeficiente de difusão devido movimento Browniano. Foram sugeridos modelos para determinação do coeficiente de difusão de íons cloreto. Na pesquisa foi utilizada como referência a equação de difusão de Stokes-Einstein. A sua combinação com a equação de difusão de Langevin e da relação de Einstein oportunizaram outras equações de difusão para determinação de outros parâmetros como a tortuosidade, concentração e penetração do íon cloreto para um tempo até 10 anos. Assim, surgiram dois caminhos sugeridos para a realização do movimento Browniano: um levando em consideração dois tipos de correção na média do quadrado do deslocamento Browniano ao utilizar as equações de Langevin e a relação de Einstein e outro caminho onde a correção ocorre na combinação das equações de difusão de Stokes-Einstein, de Langevin e relação de Einstein para determinar a difusão para posteriormente implementar o movimento Browniano. Essas sugestões evitam que o valor numérico da tortuosidade, devido a difusão lenta, seja maior que a encontrada com a equação de referência. Um elemento representativo de volume foi considerado e a tortuosidade dos poros pode ser determinada. Foram utilizadas imagens escaneadas para a reconstrução do elemento representativo 3D onde em sua rede porosa as simulações realizadas em diversos pontos de partidas das partículas de íon cloreto para verificar se haveria diferenças para valor do coeficiente de difusão e da tortuosidade. As diferenças só ocorreram quando do uso das equações de difusão sem as devidas correções e não devido a localização do ponto de partida do movimento Browniano.

Palavras-chave: difusão, tortuosidade, Stokes-Einstein, movimento Browniano, íon cloreto.

ABSTRACT

Chloride ion transport is important for predicting the durability of reinforced concrete structures. For this purpose, the prediction of chloride ion penetration, the prediction of diffusion and tortuosity for porous structural materials improves the definition of structural useful life. The diffusion coefficient influences the transport of chloride ions, which can cause corrosion of structures. This work proposes the definition of the diffusion coefficient due to Brownian motion. Models were suggested to determine the chloride ion diffusion coefficient. In the research, the Stokes-Einstein diffusion equation was used as a reference. Its combination with the Langevin diffusion equation and the Einstein relationship provided the opportunity for other diffusion equations to determine other parameters such as tortuosity, concentration, and penetration of the chloride ion for a period of up to 10 years. Thus, two suggested paths for carrying out Brownian motion emerged: one considering two types of correction in the mean square of the Brownian displacement when using Langevin's equations and Einstein's relationship and another path where the correction occurs in the combination of the equations of Stokes-Einstein diffusion, Langevin and Einstein relation to determine the diffusion to later implement the Brownian movement. These suggestions prevent the numerical value of tortuosity, due to slow diffusion, from being greater than that found with the reference equation. A representative volume element was considered, and the tortuosity of the pores could be determined. Scanned images were used to reconstruct the 3D representative element where, in its porous network, simulations were carried out at different starting points of the chloride ion particles to check whether there would be differences in the value of the diffusion coefficient and tortuosity. The differences only occurred when using the diffusion equations without the necessary corrections and not due to the location of the starting point of the Brownian movement.

Keywords: diffusion; tortuosity, Stokes-Einstein, Brownian motion, chloride ion.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Tortuosidade 2D – exemplo 1	30
Figura 2 – Tortuosidade 2D - exemplo 2	31
Figura 3 – Tortuosidade 3D	31
Figura 4 – Rede de Dijkstra	33
Figura 5 – <i>Skeleton Shortest-Path Search Method</i> (SSPSM)	34
Figura 6 – Fast Marching Method – FMM - GRID	34
Figura 7 – <i>Pore Centroid Method</i> - PCM	35
Figura 8 – Difusão molecular e intersticial	45
Figura 9 – Construção de Cantor	51
Figura 10 – Construção Curva de Koch.....	52
Figura 11 – Triângulo de Sierpinski	53
Figura 12 – Conjunto Mandelbrot.....	53
Figura 13 – Esponja de Menger	53
Figura 14 – Curva de Koch.....	54
Figura 15 – Movimento Browniano - 3D.....	64
Figura 16 – Geometria 2D e 3D	72
Figura 17 – Resolução – PPI	73
Figura 18 – Amostra física	74
Figura 19 – Micro-CT.....	74
Figura 20 – Imagem sintética generalizada- Poros	75
Figura 21 – Estrutura hierárquica - 3D voxel.....	76
Figura 22 – Representação para reconstrução 3D	77
Figura 23 – Métodos para extrair a rede porosa.....	79
Figura 24 – Fluxograma metodologia- Etapa 1	81
Figura 25 – Amostra.....	82
Figura 26 – Amostra após fatiamento.....	82
Figura 27 – Fluxograma metodologia- Etapa 2	84
Figura 28 – Fluxograma metodologia- Etapa 2.1	85
Figura 29 – Fluxograma metodologia- Etapa 2.1	86
Figura 30 – Fluxograma metodologia- C1Cor1	87
Figura 31 – Fluxograma metodologia- C1Cor2	89
Figura 32 – Fluxograma metodologia- C2	91
Figura 33 – Fluxograma metodologia- C2S1	92
Figura 34 – Fluxograma metodologia- C2S2.....	93
Figura 35 – Fluxograma metodologia- C2S3.....	94
Figura 36 – Fluxograma metodologia- etapa3.....	95
Figura 37 – Fluxograma metodologia- etapa4.....	96
Figura 38 – Fluxograma metodologia- etapa 5.....	97
Figura 39 – Fluxograma metodologia- etapa 5.....	98
Figura 40 – Fluxograma metodologia- etapa 7.....	99
Figura 41 – Fluxograma geral da metodologia	101
Figura 42 – Filtragem	102
Figura 43 – Tamanho dos poros.....	104
Figura 44 – Poros + parte sólida - 3D (em voxel).....	105
Figura 45 – Rede Porosa e parte sólida - 3D (em voxel)	106
Figura 46 – Agregados (Volume Viewer) - 3D (em voxel)	107
Figura 47 – Movimento Browniano - 3D (voxel).....	108

Figura 48 – Movimento Browniano e Meio Poroso – 3D (em voxel).....	109
Figura 49 – Movimento Browniano - 3D (voxel).....	110
Figura 50 – REV - 3D (voxel)	111
Figura 51 – REV - Movimento Browniano - 3D (em voxel).....	112
Figura 52 – Elemento 3D (50-70x50-70x50-70 - em voxel)	113
Figura 53 – Média da Tortuosidade - Stokes-Einstein	115
Figura 54 – Difusão - Stokes-Einstein.....	116
Figura 55 – Média da Difusão comparativo.....	117
Figura 56 – Média da Tortuosidade comparativo.....	119
Figura 57 – Média da concentração na superfície x profundidade.....	121
Figura 58 – Média da concentração x profundidade	122
Figura 59 – Média da difusão na superfície x profundidade	123
Figura 60 – Média da profundidade x tempo.....	124
Figura 61 – Média da concentração na superfície x tempo.....	125
Figura 62 – Média da concentração x tempo	126
Figura 63 – Média da difusão x tempo	127
Figura 64 – Tortuosidade TauFactor.....	128
Figura 65 – Box-Counting	176
Figura 66 – Dimensão Hausdorff	181

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Classificação de modelos preditivos de vida útil	19
Tabela 2 – Teor crítico de cloreto em concreto para diversas	21
Tabela 3 – Teor crítico de cloreto em concreto para diversas	22
Tabela 4 – Classe e condições das estruturas de concreto	22
Tabela 5 – Modelos de previsão do íon cloreto - I	27
Tabela 6 – Modelos previsão do íon cloreto - II	28
Tabela 7 – Métodos de simulação numérica para a previsão	36
Tabela 8 – Métodos de simulação numérica para a previsão	36
Tabela 9 – Métodos de simulação numérica para a previsão	37
Tabela 10 – Métodos de simulação numérica para a previsão	37
Tabela 11 – Método de avaliação da tortuosidade geométrica - I	38
Tabela 12 – Métodos de avaliação da tortuosidade geométrica - II	38
Tabela 13 – Pacotes de software de código aberto e comercial para	39
Tabela 14 – Tamanho da amostra	82
Tabela 15 – Resolução para cada 1 voxel	83
Tabela 16 – Tamanho da imagem da Figura 29 b	83
Tabela 17 – Parâmetros de varredura do micro CT	83
Tabela 18 – Parâmetros adotados	85
Tabela 19 – Caminho 1 - Correção 1 (X1)	88
Tabela 20 – Caminho 1- correção 2 (X2)	90
Tabela 21 – Número de equações, simulações.	99
Tabela 22 – Número de equações e parâmetros	100
Tabela 23 – Porosidade e tamanho da imagem	103
Tabela 24 – Média da Tortuosidade - Stokes-Einstein	114
Tabela 25 – Média da Difusão - Stokes-Einstein	115
Tabela 26 – Média da Difusão - equação 1-8 - conforme Tabela 21	118
Tabela 27 – Média da Tortuosidade - equação 1-8 da Tabela 23	120
Tabela 28 – Resolução considerada no TauFactor	128
Tabela 29 – Resultado TauFactor – comparativo – Resolução 0,001	129
Tabela 30 – Tortuosidade comparativo	130
Tabela 31 – Difusão comparativo	131
Tabela 32 – Coordenadas dos poros - 50-70x50-70x50-70 voxel – resolução 3	170
Tabela 33 – Coordenadas dos poros - 0-70x0-70x0-70 voxel- resolução 3	171
Tabela 34 – Rede porosa – raios dos poros - 50-70x50-70x50-70 voxel- resolução 3	173
Tabela 35 – Rede porosa – raios dos poros - 0-70x0-70x0-70 voxel – resolução 3	173
Tabela 36 – Determinação de N_{med}	177
Tabela 37 – Dimensão fractal – D3	178
Tabela 38 – Dimensão fractal – D2	179
Tabela 39 – Dimensão fractal – D2	180

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
ACI	American Concrete Intitute
BET	Brunauer, Emmett, Teller
BSI	British Standard Institution
CP	Comprimento do passo
C1	Caminho 1
C2	Caminho 2
CNN	<i>Convolutional Neural Network</i>
DB	Dimensão Box-Counting
DC	Dimensão de Correlação
DD	Dimensão do Divisor
DE	Dimensão Euclidiana
DH	Dimensão Hausdorff
DI	Dimensão da Informação
DL	Dimensão de Lyapunov
DM	Dimensão Pontual Média
DP	Dimensão Pontual
<i>DT</i>	Dimensão Fractal da Tortuosidade
DP	Dimensão Fractal do Poro
DT	Dimensão Topológica
DRX	Difração de Raios-X
DS	Dimensão de Similaridade
DSPSM	<i>Direct Shortest Path Searching Method</i>
EHE	<i>Estándar de Hormigón Estructural</i>
EN	<i>European Standard</i>
FDM	<i>Finite Difference Method</i>
FEM	<i>Finite Element Method</i>
FIB	<i>Focused Ion Beam</i>
FMM	<i>Fast Marching Method</i>
FVM	<i>Finite Volume Method</i>
ISO	<i>International Organization for Standardization</i>
JSCE	<i>Japan Society of Civil Engineers</i>
LSCM	<i>Laser Scanning Confocal Microscopy</i>
LBM	<i>Lattice Boltzmann method</i>
MC	Monte Carlo
MEV	Microscopia Eletrônica de Varredura
NBR	Norma Brasileira
NZS	<i>New Zeland Standart</i>
PCM	<i>Pore Centroid Method</i>
PDI	Processamento Digital de Imagens
PIM	Porosimetria por Intrusão de Mercúrio
PTM	<i>Path Tracking Method.</i>
REV	Representative Element Volume
RM	Ressonância Magnética
RWM	<i>Random Walk Method</i>
SEM	<i>Scanning Electron Microscope</i>
SSPSM	<i>Skeleton Shortest Path Searching Method</i>

TC	Tomografia Computadorizada
TH	<i>Thresholding</i>
UTFPR	Universidade Tecnológica Federal do Paraná
VMAs	<i>Viscosity Modifying Admixtures</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

A	área da seção transversal
A	admitância do modelo de Langevin
a/c	água/cimento
Ad	teor de adições
$B(0)$	Movimento Browniano na origem
$B(t)$	Movimento Browniano variando com o tempo
α	fator de capacidade
C_0	concentração do íon cloreto inicial
$C(x, t)$	concentração do íon cloreto para a profundidade x no tempo t
$C_F(x, t)$	concentração do íon cloreto livre para a profundidade x no tempo t
C_S	concentração do íon cloreto na superfície
C_i	concentração da espécie em i
C_T	concentração do íon cloreto total
C_F	concentração do íon cloreto livre
C_0	concentração do íon cloreto inicial
$C(x, 0)$	concentração do íon cloreto para a profundidade x no tempo zero
$C(0, t)$	concentração do íon cloreto para o tempo t na profundidade de posição 0
$C(L, t)$	concentração do íon cloreto para o tempo t na profundidade L
C_x	concentração de íons cloreto a uma determinada profundidade
C	concentração de íon cloreto
C_{int}	concentração de íon cloreto na interface entre concreto e a armadura
c	capacidade de fixação dos íons cloretos
Cl	íon cloreto
C_{sa}	concentração na superfície da substância adsorvida
CP_T	comprimento do passo total
$Cor1$	correção1
$Cor2$	Correção2
c_+	concentração positiva
c_-	concentração negativa
D_B	coeficiente de difusão Browniano
D_{in}	coeficiente de difusão intrínseca da fase condutora - poro
D_{NH}	coeficiente de difusão pela equação de Nerst-Heckell
d	raio da partícula
D_{ap}	coeficiente de difusão aparente
D_i	coeficiente de difusão na solução para a espécie i
$D_{i,ref}$	coeficiente de difusão de referência avaliado para a temperatura T
D_c	coeficiente de difusão do cloreto
D_S	coeficiente de difusão na superfície
D_{MB}	coeficiente de difusão devido ao movimento Browniano
D_M	coeficiente de difusão molecular
D_{SE}	coeficiente de difusão de Stokes-Einstein

D_L	coeficiente de difusão de Langevin
D_{RE}	coeficiente de difusão de relação de Einstein
D_{C1S1}	coeficiente de difusão do caminho 2, sugestão 1
D_{C2S2}	coeficiente de difusão do caminho 2, sugestão 2
D_{C2S3}	coeficiente de difusão do caminho 2, sugestão 3
D_s	coeficiente de difusão no estado estacionário
D_{ns}	coeficiente de difusão no estado não estacionário
D_{eff}^K	coeficiente de difusão de Knudsen efetivo
D_{eff}^M	coeficiente de difusão efetivo molecular
D_{eff}	coeficiente de difusão efetivo
D_{eff}^{mult}	coeficiente de difusão na superfície devido aos multicomponentes
D_{sup}	coeficiente de difusão na superfície
D	coeficiente de difusão
D_{Tt}	coeficiente de difusão total turbulenta
D_M	coeficiente de difusão molecular
D_R	coeficiente de difusão por redemoinho
θ	ângulo de passo
∂C	variação de concentração
∂x	variação de distância
∂t	variação de tempo
dE/dy	gradientes elétricos
dC/dx	gradiente de concentração
$\partial^2 C / \partial x^2$	gradiente de concentração em função da posição
Δx_i	passos de movimentos na direção x_i
Δy_i	passos de movimentos na direção y_i
erf	função erro de Gauss
η	viscosidade do líquido
F_a	número de Faraday
F_T	fator tortuosidade
Fe	ferro
f_1, f_2, f_3	constante que considerando a influência da temperatura
f_c	resistência a compressão do concreto
f_{ck}	resistência característica a compressão do concreto
$f(\lambda)$	função para determinar o diâmetro do poro
ϕ	potencial eletrostático
F	constante de Faraday
G	constante de gases
γ	coeficiente de fricção
H	hidrogênio
h	umidade relativa
h_r	altura atual da amostra
I	densidade de corrente causada por campo elétrico externo
i	espécie de solução utilizada
j_c	número de camadas
J	fluxo difusional
K_T	constante de decaimento de primeira ordem
k_1, k_2	fatores que representam a influência da temperatura e umidade relativa

K_1	representa a influência do tipo de cimento
K_2	representa a influência do tipo de adições ao concreto
k_B	constante de Boltzmann
L_{p_1, p_2}	caminho tortuoso em um fluxo passando por dois pontos considerados
p_1, p_2	dois pontos considerados
L_{eg}	comprimento médio
L_f	caminho tortuoso do fluxo
L_0	comprimento original
L_p	tamanho que fica após o L_0 ser dividido em N_{med} partes
L_{rec}	espessura de recobrimento da armadura
L_y	caminho percorrido pelo escoamento
L_r	comprimento em linha reta
L_D	caminho médio de difusividade química
L_H	comprimento do fluxo hidráulico efetivo
L_a	comprimento do poro fractal atual
L_E	caminho efetivo da transmissão elétrica
L_z	comprimento do lado do elemento representativo de volume
λ_0	fluxo térmico da massa
λ_{ef}	condutividade térmica efetiva
λ	diâmetro do poro
λ_+^0	condução do iônico limitante cátion
λ_-^0	condução do iônico limitante ânion
λ_{max}	diâmetro máximo do poro
λ_{min}	diâmetro mínimo do poro
$\bar{\lambda}$	diâmetro médio do poro
μ	massa molecular
M	massa
m_a	massa da amostra saturada
m_0	massa inicial do concreto após a secagem
m	massa da amostra
m', m'_1, m'_{11}, n'	constantes para zona "SPRAY ZONE"
m_a	massa de água da amostra
N_{med}	medida do objeto: comprimento, área ou volume
N	número de partículas
n_c	número total de camadas
n_+	fluxo de difusão de valência cátion
n_-	fluxo de difusão de valência ânion
m_+	fluxo de massa de valência cátion
m_-	fluxo de massa de valência ânion
N_c	número de caixas
N_p	número de poros
N_{med}	número de partes que L_0 é dividido
O	oxigênio
ω	frequência angular
ω	quantidade de água
ω_{sat}	quantidade de água evaporável do concreto
π	número pi
P	quantidade de passos

\emptyset	porosidade
q	número total das espécies na solução
\mathbf{q}	carga
R	constante universal dos gases
ρ	densidade
T_{am}	tamanho linear
$\overline{r^2}$	deslocamento quadrado médio
$\overline{r_L^2}$	deslocamento quadrado médio de Langevin
$\overline{r_{RE}^2}$	deslocamento quadrado médio da relação de Einstein
$\overline{r_{SE}^2}$	deslocamento quadrado médio de Stokes-Einstein
$\overline{r_{LC1Cor1}^2}$	deslocamento quadrado de Langevin do caminho 1 e correção 1
$\overline{r_{REC1Cor1}^2}$	deslocamento quadrado médio da relação de Einstein do caminho 1 e correção 1
$\overline{r_{LC1Cor2}^2}$	deslocamento quadrado médio de Langevin do caminho 1 e correção 2
$\overline{r_{REC1Cor2}^2}$	deslocamento quadrado médio da relação de Einstein do caminho 1 e correção 2
$\overline{r_{C2S1}^2}$	deslocamento quadrado médio do caminho 2, sugestão 1
$\overline{r_{C2S2}^2}$	deslocamento quadrado médio do caminho 2, sugestão 2
$\overline{r_{C2S3}^2}$	deslocamento quadrado médio do caminho 2, sugestão 3
r_i	comprimento dos passos na posição i
ρ_a	densidade da água
t_d	tempo de deslocamento
S_e	superfície específica
S_i	concentração dos íons de contorno da espécie em i
θ	saturação das estruturas
t	tempo
t_m	tempo de maturação
T	temperatura
T_g	coeficiente da tortuosidade geométrica
T_l	tamanho linear
t_{MB}	tempo de deslocamento devido ao movimento Browniano
τ_g	tortuosidade geométrica
τ_D	tortuosidade difusa
τ_H	tortuosidade hidráulica
τ_E	tortuosidade elétrica
τ	tortuosidade
τ_T	tortuosidade térmica
τ_x	tortuosidade na direção x
τ_y	tortuosidade na direção y
τ_z	tortuosidade na direção z
$\bar{\tau}$	tortuosidade média ‘
μ	massa molecular
v	velocidade
V_{ω_s}	volume de água da amostra saturada
V_r	volume real da amostra
$X1$	valor da correção 1

X^2	valor da correção 2
\bar{x}	profundidade média da penetração do íon cloreto
x	profundidade de penetração do íon cloreto
x^2	deslocamento na direção x
$\overline{x^2}$	deslocamento quadrado médio na direção x
x, y	coordenadas
X, Y, Z	coordenadas centrais do poro
$\overline{y^2}$	deslocamento quadrado médio na direção y
y^2	deslocamento na direção y
$Y(t_{MB})$	deslocamento no tempo t_{MB}
$Y(0)$	deslocamento no tempo 0
z^2	deslocamento na direção z
$\overline{z^2}$	deslocamento quadrado médio na direção z
Z_i	carga elétrica da espécie em i
Z_a	constante de resistência ao atrito

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	Objetivos	16
1.1.1	Objetivo Geral	16
1.1.2	Objetivos específicos	16
1.2	Justificativa	17
1.3	Estrutura da Tese	18
2	DURABILIDADE	19
2.1	Íons Cloretos	20
2.1.1	Transporte dos íons cloretos	20
2.1.2	Concentração dos íons cloretos	21
2.1.3	Corrosão por íons cloretos.....	25
2.1.4	Modelos de previsão dos íons cloretos	27
2.2	Porosidade	28
2.2.1	Tortuosidade	29
<u>2.2.1.1</u>	<u>Tortuosidade geométrica</u>	<u>30</u>
<u>2.2.1.2</u>	<u>Tortuosidade física.....</u>	<u>32</u>
2.2.2	Métodos para obter a tortuosidade	33
3	DIFUSÃO	43
3.1	Difusão em corpos porosos	48
3.2	Fluxo difusional	50
4	FRACTAIS	51
4.1	Dimensão Fractal	54
4.2	Teoria do fractal	55
4.3	Movimento Browniano	57
4.3.1	Definição	58
4.3.2	Construção do movimento Browniano	59
4.3.3	Propriedades de invariância	60
4.3.4	Inversão de tempo	60
4.3.5	Continuidade	60
4.3.6	Indiferenciabilidade	61
4.3.7	Variação ilimitada.....	61
4.3.8	Métodos.....	61

4.3.9	Langevin.....	65
4.3.10	Relação de Einstein	67
4.3.11	Stokes-Einstein	68
5	GEOMETRIA 3D VOXEL.....	71
5.1	Extração da rede porosa	77
6	METODOLOGIA	80
7	RESULTADOS	102
8	CONCLUSÃO	133
9	SUGESTÕES TRABALHOS FUTUROS	135
	REFERÊNCIAS.....	136
	APÊNDICE A - ALGORITMOS	158
	APÊNDICE B - COORDENADA DOS POROS	169
	APÊNDICE C - BOX-COUNTING – DIMENSÃO FRACTAL	175

1 INTRODUÇÃO

Os materiais utilizados na construção civil procuram ser sustentáveis, manter a durabilidade e contribuir com aumento de vida útil das estruturas (PAGE, SHORT e TARRAS 1981; ZHANG *et al.*, 2017; ANDRADE e KROOP, 2002; FERREIRA, 2004).

Os ambientes onde se encontram as estruturas de concreto armado apesar de possuírem características distintas são influenciadores da penetração dos íons cloreto, presentes no cobrimento do concreto (MAZER, 2010; MAES *et al.* 2013; MAZER *et al.* 2021). Assim a corrosão nas armaduras induzida por cloretos é um dos principais causadores da degradação nas estruturas (PAGE, SHORT e TARRAS 1981; ZHANG *et al.*, 2017; ANDRADE e KROOP, 2002; FERREIRA, 2004). A determinação do coeficiente de difusão do íon cloreto é de grande importância portanto, pois auxilia avaliação da vida útil estrutural.

A difusão do íon cloreto (WEGEN, POLDER e BREUGEL, 2012; PATEL *et al.*, 2016) afeta o transporte do íon cloreto na estrutura (YUAN *et al.*, 2009; LIN, LIU e XIANG, 2010; SHI *et al.*, 2016; CHIDIAC e SHAFIKHANI, 2019). Estudar o mecanismo de transporte desse íon cloreto e assim obter informações moleculares auxilia na estimativa da vida útil das estruturas (HOU *et al.*, 2018; JAIN e GENCTURK, 2021). Esse mecanismo pode ser estudado com métodos computacionais incluindo a tensão aplicada nos meios porosos. (HUANG *et al.*, 2021) (KONDRAIVENDHAN, DIVSHOLI e TENG, 2013; SHAFIKHANI e CHIDIAC, 2019).

Uma forma de estudar a difusão é através da modelagem com fractais representando os materiais porosos (WANG *et al.*, 2018; ZENG *et al.*, 2020). Com isso é possível representar as propriedades macroscópicas de permeabilidade e porosidade dos materiais (YU, 2008; CAI *et al.*, 2015; XU *et al.*, 2017; ZENG *et al.*, 2020; HUANG *et al.*, 2021).

Atualmente os métodos computacionais auxiliam as modelagens pois proporcionam o menor tempo e precisão na obtenção de resultados. Os parâmetros implementados nessas modelagens envolvendo coeficiente de difusão do íon cloreto geralmente são: a tortuosidade das redes porosas que contribui na modelagem de transporte de massa (ISHIDA, IQBAL e ANH, 2009; KONDRAIVENDHAN, DIVSHOLI e TENG, 2013; PARDO-ALONSO *et al.*, 2014; SHAFIKHANI e CHIDIAC, 2019), o

volume do agregado, a porosidade, a resistência dos materiais a compressão (YE *et al.*, 2018; CHEN *et al.*, 2021), teor de composição do material cimentício (PATEL *et al.*, 2016; CHIDIAC e SHAFIKHANI, 2019) e conjuntamente ao tamanho das partículas incluindo a sua distribuição (YAO *et al.*, 2020). Esses parâmetros podem ajudar a minimizar perdas econômicas no dimensionamento estrutural adequado minimizando perdas e desperdícios de materiais (ZENG *et al.*, 2020).

Para a caracterização da microestrutura dos materiais porosos algumas técnicas utilizadas são: Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) e Porosimetria por Intrusão de Mercúrio (PIM) entre outras existentes. Na determinação de área superficial o uso de técnicas de adsorção-dessorção, conhecida como técnica Brunauer, Emmett, Teller (BET) (SING, 1985; SING, 2001; DA SILVA *et al.*, 2023). Essas técnicas são utilizadas para determinar a difusão de íons cloretos nos concretos superando limitações dos métodos experimentais (BITARAF e MOHAMMADI, 2008; LIN, LIU e XIANG, 2010; SUN, LIANG e CHANG, 2012; ŠAVIJA, LUKOVIC e SCHLANGEN, 2014).

Algumas pesquisas envolvendo estudos sobre o coeficiente de difusão, a tortuosidade e o movimento Browniano:

Catipovic *et al.* (2013) buscou reduzir quais parâmetros que causavam erro em experimentos de laboratório visando melhorar a quantificação do movimento Browniano. Estudou a modelagem teórica sobre esses parâmetros: erro de amostragem, erro da incerteza para o coeficiente de difusão, erro de rastreamento, erro da vibração e desvio microscópico.

Borghini (2016) afirma que uma partícula Browniana está em constante movimento em diversas direções, devido a sucessivas colisões com os constituintes do fluido em que se encontra.

Promentilla *et al.* (2016) utilizaram técnicas de análise de imagens tridimensionais para quantificar o tamanho dos poros, a porosidade, a tortuosidade e permeabilidade com imagens de tomografia computadorizada de raios X.

Zambrano *et al.* (2017) estudaram grãos de carbonato onde um quantitativo tridimensional das propriedades da rede porosa de amostras de rochas foi desenvolvido por análise de imagens de micro-CT de raios X.

Segundo Yio, Wong e Buenfeld (2017) o elemento representativo de volume (*Representative Element Volume* - REV) é uma propriedade fundamental de um material. Foi estudado a estrutura tridimensional dos poros com microscopia confocal

a laser (*Laser Scanning Confocal Microscopy* - LSCM) com métodos de esqueletização, bola máxima e algoritmo do caminho aleatório (*random walker*).

Tartakovsky e Dentz (2019) fizeram revisão dos fenômenos de difusão em meios porosos considerando abordagens distintas para modelar a difusão em fluídos. Foi utilizado abordagem de Langevin com o movimento Browniano.

Vachier e Mazza (2019) solucionaram analiticamente a equação de Fokker-Planck para o processo estocástico e para descrever a dinâmica de uma partícula Browniana ativa em 3D.

Liu e Jia (2021) pesquisaram com base na teoria de Einstein-Smoluchowski e a teoria de Langevin. Ambas as teorias envolvem números aleatórios e os resultados estatísticos formam diretriz para estudos sobre o movimento Browniano.

Morán (2022) pesquisa sobre a ligação fundamental entre a equação de Langevin e os núcleos na coagulação no regime de transição variando de balístico a difusivo. Propõe uma expressão nova e simples para determinar esses núcleos.

Spiechowicz *et al.* (2023) pesquisaram o coeficiente de difusão para uma partícula Browniana modelada na estrutura de Langevin.

Zhang *et al.* (2023) modelaram partículas de cimento simulando a difusão de íons cloreto com o método de passeio aleatório tridimensional baseado no movimento Browniano (ZHANG, *et al.*, 2023).

Evstigneev e Kaffashnia (2023) desenvolveram uma expressão analítica para o coeficiente de difusão de uma partícula Browniana livre derivada da fórmula de Green-Kubo.

Chen *et al.* (2023) desenvolveram um método numérico com movimento Browniano para predição do teor do coeficiente de difusão e do íon cloreto da pasta de cimento considerando o formato da partícula.

Zhao *et al.* (2024) propuseram um modelo para a difusão de cloreto em materiais cimentícios baseado no aumento da viscosidade comportamento da solução de poros usando aditivos modificadores de viscosidade (*Viscosity Modifying Admixtures* -VMAs) e assim retardar o ataque do íon cloreto.

Erdoğdu, Kondratova e Bremner (2024) determinaram o coeficiente de difusão aparente do íon cloretos do concreto usando medições de potencial de circuito aberto simulando a condição de maré.

Haizhen *et al.*, (2024) estudara a previsão de concentração de cloreto modelo baseado no método de rede neural convolucional unidimensional

(*convolutional neural network* - CNN) com dados existentes de testes de concentração de íons cloreto de concreto com cinzas volantes em ambientes naturais e simulação do ambiente acelerado.

Jiang *et al.* (2024) estudaram os fatores que influenciam a difusão do cloreto na pasta de cimento ao adicionar calcário. Atribuíram a redução da resistência ao cloreto na pasta de cimento devido ao calcário e ao aumento da difusão do cloreto.

A originalidade da pesquisa consiste nos dois caminhos sugeridos para a definição do coeficiente de difusão. Um dos caminhos sugere correção na equação do deslocamento para o movimento Browniano. O outro caminho sugere novas equações para determinação do coeficiente de difusão devido a fusão das equações de Stokes-Einsten, Langevin e relação de Einstein, escolhidas para o estudo. Estas equações sugeridas são usadas para iniciar o movimento Browniano, movimento aleatório de partículas, em busca de parâmetros como nova difusão (objetivo geral), a tortuosidade, a concentração do íon cloreto na superfície, a profundidade de penetração do íon cloreto e a concentração no tempo 10 anos e do elemento representativo do concreto modelado em 3D.'

1.1 Objetivos

Os objetivos dessa pesquisa estão divididos em geral e específicos.

1.1.1 Objetivo Geral

Determinar o coeficiente de difusão devido a ação do íon cloreto no concreto utilizando abordagem de fractais.

1.1.2 Objetivos específicos

Para alcançar o objetivo geral os seguintes objetivos específicos devem ser realizados:

- Representar a rede porosa a partir da modelagem do elemento representativo de volume.
- Sugerir novo modelo de equação para determinação do coeficiente de difusão efetivo para usar no movimento Browniano.

- Determinar o coeficiente de difusão bem como a tortuosidade obtidos devido ao movimento Browniano.
- Determinar o perfil de penetração do íon cloreto.

1.2 Justificativa

A modernização das técnicas de microscopia permite obter imagens de alta resolução (TRANTER *et al.*, 2019; FU, THOMAS e LI, 2021) devido a rapidez de obtenção das propriedades do transporte de fluxo nos materiais porosos (TRANTER *et al.*, 2019).

O uso das imagens permite também a reconstrução de um volume elementar representativo (REV), parâmetro importante para a compreensão e modelagem das propriedades de materiais compósitos multiescala, como materiais à base de cimento (YIO, WONG e BUENFELD, 2017).

A determinação do coeficiente de difusão é importante porque ajudará no cálculo da profundidade de penetração do íon cloreto na estrutura em estudo. Ao usar fractais em escala microscópica, as propriedades dos materiais podem ser definidas para a escala macro. A caracterização microscópica e obtenção de parâmetros intrínsecos aos materiais, por vezes dificultados em testes laboratoriais, produzem resultados sobre a difusão mais rápidos e precisos.

A tortuosidade das redes porosas no meio poroso influencia no comportamento do transporte de fluídos (SHEN e CHEN, 2007; PARDO-ALONSO *et al.*, 2014; TRANTER *et al.*, 2019). Essa tortuosidade pode ser estudada através do REV dos materiais porosos.

As equações da difusão sugeridas na pesquisa pelo autor podem ser utilizadas com o movimento Browniano sem precisar da equação de Stokes-Einstein. Essas equações com as correções sugeridas: o equilíbrio na concentração do íon cloreto é mantido, o deslocamento das partículas permanece na mesma escala quando do uso da equação Stokes-Einstein, a tortuosidade é impedida de aumentar devido a uma difusão lenta. Assim a utilização dessas equações são novas alternativas para a definição da difusão com o movimento Browniano.

1.3 Estrutura da Tese

No capítulo 1 são apresentados: introdução, onde serão abordadas pesquisas realizadas ao íon cloreto, coeficiente de difusão, fractal, modelagem de elemento representativo de volume, tortuosidade, porosidade. Abordando de modo geral esses assuntos que fazem parte da pesquisa. Também são definidos o objetivo geral e os objetivos específicos, para atingir o que se pretende com a pesquisa. A justificativa é o ítem que mostra o porquê do desenvolvimento da pesquisa, sua viabilidade e contribuição.

No capítulo 2 apresenta uma abordagem da durabilidade das estruturas. Abordagem sobre íons cloreto: transporte, concentração, corrosão, modelos de previsão. Uma descrição sobre a porosidade, a tortuosidade, tipos de tortuosidade e métodos que são importantes parâmetros para o transporte de íon cloreto.

No capítulo 3 é apresentada uma revisão sobre difusão, difusão em corpos porosos, fluxo difusional para mostrar o que se pretende em relação a esse assunto na pesquisa.

No capítulo 4 é apresentado um breve resumo dos assuntos: fractais, dimensão fractal, teoria e movimento Browniano e suas propriedades. O movimento Browniano é o assunto das rotinas de programação na determinação do coeficiente de difusão, tortuosidade.

O capítulo 5 descreve a geometria 3D voxel. Apresenta a descrição da representação das imagens obtidas por escaneamento e a reconstrução do elemento representativo do concreto.

No capítulo 6 é apresentada a metodologia da pesquisa mostrando o desenvolvimento do trabalho para atingir o objetivo geral.

O capítulo 7 de resultados descrito em tabelas, gráficos, figuras as simulações realizadas.

No capítulo 8 apresenta a conclusão dos resultados obtidos devido as simulações descritas no capítulo da metodologia.

No capítulo 9 apresenta sugestões para pesquisas futuras.

O capítulo das Referências bibliográficas relaciona os pesquisadores que contribuíram para a pesquisa.

Nos Apêndices estão as informações complementares da pesquisa.

2 DURABILIDADE

A durabilidade de uma estrutura é a capacidade de resistir às influências ambientais previstas e definidas em projeto NBR6118 (ABNT, 2023). A ISO 13823 (2008) define durabilidade como sendo a capacidade de satisfazer os requisitos de desempenho do projeto por um período específico sob ações ambientais ou processo de envelhecimento natural (POSSAN e DEMOLINER, 2013).

Define-se desempenho da estrutura a sua capacidade de manter-se em condições plenas de utilização durante sua vida útil sem presença de danos. O termo vida útil aplica-se à estrutura como um todo ou para algumas partes, sendo o período efetivo quando a estrutura, ou parte dela, satisfaz os requisitos de desempenho do projeto sem que seja necessário fazer reparos (NBR6118 (ABNT, 2023); ISO 13823 (2008); NBR 15575 (ABNT, 2024).

Os modelos preditivos de vida útil das estruturas de concreto são classificados em empíricos, analíticos ou numéricos (LOPES, OLIVEIRA e CASCUDO, 2022), como apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Classificação de modelos preditivos de vida útil

CLASSIFICAÇÃO PRINCIPAL	CARACTERÍSTICAS	CLASSIFICAÇÃO SECUNDÁRIA
EMPÍRICO	<ul style="list-style-type: none"> • Não são baseados em mecanismos de transporte. • São geralmente modelos matemáticos. • Necessidade de calibração constante 	-
ANALÍTICO	<ul style="list-style-type: none"> • Indicadores de desempenho de durabilidade, como dados de entrada. • Consideração dos mecanismos de transporte de forma simplificada (somente difusão pela segunda Lei de Fick). São modelos físicos. 	Modelo específico aplicado somente para tipo específico de concreto.
NUMÉRICO	<ul style="list-style-type: none"> • Mecanismos de transporte no concreto não saturado. • Simulação numérica do transporte de cloreto no concreto com uso de métodos numéricos. 	Resolvido numericamente

Fonte: Adaptado (BAROGHEL-BOUNY et al., 2014)

A vida útil da estrutura depende da porosidade e do meio ambiente (CEB, 1993). A porosidade, o tamanho e distribuição dos poros também são parâmetros que afetam diretamente as propriedades mecânicas e a durabilidade do concreto (LI,

et al. 2021). Entender a porosidade e a difusão de íons cloretos atualmente através do uso de fractais contribui na avaliação sobre a durabilidade estrutural (ZENG *et al.* 2020). A quantificação com relação a fraturas no elemento estrutural solido-poroso (XU e Yu, 2008) que pode ser obtida pela caracterização da microestrutura (WU *et al.*, 2019).

A utilização do movimento Browniano, nesse caso para determinação do coeficiente de difusão, é uma alternativa pois o impacto molecular afeta o deslocamento das partículas (MANDELROT, 1982).

2.1 Íons Cloretos

O cloreto penetra no concreto acompanhado por outros íons, e outras espécies iônicas que influenciam diretamente no fenômeno de transporte. Para entender os mecanismos envolvidos deve-se considerar a interação íon-íon no transporte iônico (ELAKNESWARAN *et al.*, 2010).

O ingresso de íons cloreto nos poros do concreto é por dissolução na água. Conforme as condições de exposição, o transporte de íons cloreto acontecerá por permeação, absorção, difusão ou uma combinação dos mesmos (BERROCAL, LUNDGREN, LÖFGREN, 2016).

O principal mecanismo de transporte de cloreto no concreto é a difusão estando em condições de umidade nos poros estável e sem aplicação de campo elétrico (SONG, LEE e ANN, 2008).

2.1.1 Transporte dos íons cloretos

Os mecanismos de transporte de massa são absorção capilar, difusão, migração iônica. O transporte de agentes agressivos na forma líquida, gasosa ou iônica, através da estrutura porosa afeta a sua durabilidade e depende da porosidade, do tamanho e da rede porosa (DOMONE e ILLSTON, 2010; OLLIVIER e TORRENTI, 2014; LI, *et al.* 2021).

No transporte de íon cloretos no interior das estruturas de concreto a absorção e a difusão são fenômenos mais importantes (CASCUDO, 1997). Na condução dos íons cloretos, a absorção ocorre nas camadas mais superficiais para caso de saturação parcial seguido pela difusão. Para saturação total será a difusão

o único mecanismo que atua no transporte (ANDRADE, 1993). Somente a difusão será abordada com mais detalhes nessa pesquisa.

2.1.2 Concentração dos íons cloretos

Para que aconteça a corrosão das armaduras o fator mais importante é o transporte de íons cloreto da superfície das estruturas de concreto armado até as armaduras. Na maioria das normas o íon cloreto Cl é limitado a 0,4 % do peso da massa de cimento (SOUZA e RIPPER, 1998) devido a sua capacidade de romper a camada protetora da armadura e causar corrosão na presença de umidade e oxigênio (SOUZA e RIPPER, 1998). É possível ver nas Tabelas 2 e 3 o teor crítico de cloreto em concreto definidos nas diversas normas e organismos internacionais.

Tabela 2 – Teor crítico de cloreto em concreto para diversas normas e organismos internacionais – I

Norma/ Local	Teor crítico de cloretos recomendado	Referência do teor de cloretos
NBR 12655 (ABNT, 2015) Brasil	$\leq 0,15$ % em concretos expostos a cloretos $\leq 0,30$ % em concretos não expostos a cloretos $\leq 0,40$ % em concretos em brandas condições de exposição (seco ou protegido da umidade)	
EN 206-1 (ECS, 2000) Europa	$\leq 0,10$ a $0,20$ % (concreto protendido) $\leq 0,20$ a $0,40$ % (concreto armado)	
Bulletin 34 (FIB, 2006) Suíça	$\leq 0,20$ %	
EHE - 08 (CPH, 2011) Espanha	$\leq 0,60$ % (concreto armado) $\leq 0,30$ % (concreto protendido)	cloretos totais (% massa de cimento)
Hong Kong Building Depart (HKBD, 2016) China	$\leq 0,10$ % (concreto protendido) $\leq 0,20$ % (com cimento resistente a sulfato) $\leq 0,35$ % (com cimento Portland de endurecimento rápido)	
318-08 (ACI, 2008) EUA	$\leq 0,15$ % em ambiente com cloretos $\leq 0,3$ % em ambiente normal $\leq 1,0$ % em ambiente seco $\leq 0,06$ % (concreto protendido)	
BS 8110:1 (BSI, 1997) Inglaterra	$\leq 0,10$ %	

Fonte: Adaptado (FIGUEIREDO, 2005; MEIRA, 2017; MAGALHÃES, 2019)

Tabela 3 – Teor crítico de cloreto em concreto para diversas normas e organismos internacionais – II

Norma/ Local	Teor crítico de cloretos recomendado	Referência do teor de cloretos
Committee 222 (ACI, 2002) EUA	$\leq 0,08$ % (concreto protendido) 1 $\leq 0,10$ % (concreto armado) úmido 1 $\leq 0,20$ % (concreto armado) seco 1 $\leq 0,06$ % (concreto protendido) 2 $\leq 0,08$ % (concreto armado) úmido 2 $\leq 0,15$ % (concreto armado) seco 2	1 cloretos totais (% massa de cimento) 2 cloretos livres (% massa de cimento)
NZS 3101 (NZS, 2006) Nova Zelândia	$\leq 0,02$ % (concreto protendido) $\leq 0,03$ % (concreto armado) úmido $\leq 0,07$ % (concreto armado) seco	cloretos totais (% massa de concreto)
JSCE-15 (JSCE, 2010) Japão	$\leq 1,20$ kg/m ³ de concreto	

Fonte: Adaptado (FIGUEIREDO, 2005; MEIRA, 2017; MAGALHÃES, 2019)

A Tabela 4 apresenta as classes e condições das estruturas de concreto definidas pela NBR 12655 (ABNT, 2015).

Tabela 4 – Classe e condições das estruturas de concreto

Classe de agressividade	Condições de serviço da estrutura
Todas	Concreto protendido
III e IV	Concreto armado exposto a cloreto nas condições de serviço da estrutura
II	Concreto armado não exposto nas condições de serviço da estrutura
I	Concreto armado em brandas condições de exposição (seco ou protegido da umidade em condições de serviço da estrutura)

Fonte: Adaptado (ABNT NBR 12655, 2015)

Alguns inconvenientes que podem ocorrer devido a presença de cloreto em altos teores no concreto (SOUZA e RIPPER, 1998) são os seguintes:

- a) os cloretos funcionam como acelerador de pega do concreto com altas temperaturas;
- b) os cloretos de cálcio podem acelerar a corrosão em casos de cobrimentos com pouca espessura;
- c) estruturas de concreto com presença de cloretos próximas a correntes elétricas de alta tensão podem resultar em corrosão eletrolítica;
- d) a retração do concreto cresce praticamente com o quadrado da aceleração da pega, aumentando enormemente a fissuração interna e superficial.

A ligação ou reação de cloretos depende de muitos fatores: do tipo de cimento, da composição do poro, da temperatura etc. Atkinson e Nickerson (1984) propuseram a equação 1 para calcular a proporção de concentração do íon cloreto total, assumindo uma ligação linear:

$$C_T = \emptyset C_S + (1 - \emptyset)C_F \quad (1)$$

Sendo:

C_S = concentração do íon cloreto na superfície (%)

C_T = concentração do íon cloreto total (%)

C_F = concentração do íon cloreto livre (%)

\emptyset = porosidade

Dependendo da localização da concentração do íon cloreto na solução do poro ou na amostra total, a denominação da difusão será diferente: difusão no estado estacionário (D_s) e difusão no estado não estacionário (D_{ns}). Outra formulação para determinar a concentração do íon cloreto envolve a solução da segunda lei de Fick. A segunda lei de Fick é da forma da equação 2 (MENG *et al.*, 2018):

$$\frac{\partial C_F(x,t)}{\partial t} = D_{ap} \frac{\partial^2 C_F(x,t)}{\partial x^2} \quad (2)$$

Sendo:

$C_F(x, t)$ = concentração do íon clorídrico livre (%/m³)

x = profundidade (m)

D_{ap} = coeficiente de difusão aparente (m^2/s)

t = tempo (s)

A concentração inicial do íon cloreto (MENG *et al.*, 2018), é representada na forma da equação 3:

$$C(x, 0) = C_0 \quad (3)$$

Sendo:

$C(x, 0)$ = concentração para a profundidade x no tempo zero (%)

x = profundidade (m)

C_0 = concentração do íon cloreto inicial (%)

Na segunda lei de Fick, definida na equação 2, para o estado não estacionário e considerando as condições de contorno de Dirichlet, a concentração do íon cloreto na superfície será como mostra a equação 4 (MENG *et al.*, 2018):

$$C(0, t) = C_s \quad (4)$$

Sendo:

C_s = concentração do íon cloreto na superfície (%)

$C(0, t)$ = concentração do íon cloreto para o tempo t na profundidade zero (%)

t = tempo (s)

Considerando as concentrações de íon cloreto inicial, definidas na equação 2, e a condição de contorno definida na equação 3, a solução exata da segunda lei de Fick (equação 64) para um concreto ideal será dada pela equação 5, (MENG *et al.*, 2018):

$$C(x, t) = C_0 + (C_s - C_0) \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{D_{ap}t}} \right) \right] \quad (5)$$

O valor de C_0 será constante.

Sendo:

C_0 = concentração do íon cloreto inicial (%)

C_s = concentração do íon cloreto na superfície (%)

D_{ap} = coeficiente de difusão aparente (m^2/s)

erf = função erro de Gauss

$C(x, t)$ = concentração do íon cloreto para a profundidade x no tempo t (%)

t = tempo (s)

x = profundidade de penetração do íon cloreto (%)

2.1.3 Corrosão por íons cloretos

A presença de cloretos no concreto através da porosidade pode ocorrer pelo uso de aditivos aceleradores de pega, dos agregados, pelo uso do ácido muriático para limpeza do concreto ou da utilização de águas contaminadas. (SOUZA e RIPPER, 1998). Os íons cloretos podem ocorrer pela exposição a água/ atmosfera marinha e a utilização de sal do degelo (PETER Ludvig). Na difusão dos íons de cloreto a água enche os poros do concreto e o grau de propagação dependerá dos mecanismos de transporte (SOUZA e RIPPER, 1998).

Considera-se grave o ataque pela ação do cloreto nas estruturas de concreto armado e as variáveis e fenômenos que interagem nesse ataque são amplas. Particularmente o ataque de cloreto se difere de outros mecanismos de deterioração de concreto armado por ser o primeiro a causar corrosão da armadura tendo como consequência o dano no concreto (NEVILLE, 1995).

O aço do concreto desenvolve uma camada de passividade protetora sobre sua superfície. Esta camada que se forma na hidratação do cimento consiste em Fe_2O_3 . Assim o aço permanece intacto devido a existência dessa camada protetora. O processo de corrosão se inicia no momento que os íons cloretos entram em contato com a água, oxigênio e ferro rompendo a camada protetora (NEVILLE, 1995).

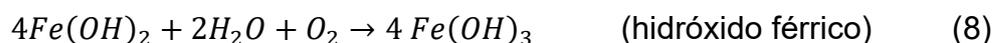
Para acontecer o fenômeno de corrosão deve existir uma diferença de potencial ao longo do aço no concreto para configurar uma célula eletroquímica.

Assim surgem as regiões anódicas e catódicas conectadas pelo eletrólito na forma de água de poro na pasta de cimento endurecido (NEVILLE, 1995).

A região carregada positivamente de íons ferrosos (Fe^{2+}) no ânodo passam para a solução enquanto os elétrons livres carregados negativamente passam através do aço no cátodo onde são absorvidos pelos constituintes do eletrólito e se combinam com água e oxigênio para formar íons hidroxila (OH^-) (NEVILLE, 1995).

O movimento do eletrólito combinado com os íons ferrosos para formar hidróxido férrico e a ação da oxidação se transforma em ferrugem. As reações envolvidas são representadas pelas equações 6, 7, 8 e 9 (NEVILLE, 1995):

Reação anódica



Reação catódica



O oxigênio é consumido e a água é regenerada devendo o processo continuar. A corrosão aparece com umidade relativa de 60% sendo a umidade ideal de 70-80%. As células eletroquímicas se formam devido a uma variação na concentração de sal na água dos poros ou devido a um acesso não uniforme do oxigênio.

A corrosão se inicia quando a camada passivadora deixa de existir (despassivação). Os íons cloreto ativam a superfície do aço para formar um ânodo, e a superfície passivada forma o cátodo. As reações envolvidas são apresentadas nas equações 10 e 11 (NEVILLE, 1995):



O cloreto (Cl^-) é regenerado ficando a ferrugem isenta do cloreto, embora cloreto de ferro seja formado no estágio intermediário. A porosidade tem importante influência na corrosão permitindo que a célula eletroquímica faça a conexão entre o ânodo e o cátodo através da água que passa pelo poro, bem como pela própria armadura.

Essa conexão controla o fluxo da corrente elétrica. O teor de umidade influencia a resistividade elétrica pela composição iônica da água dos poros e pela continuidade do sistema de poros na pasta do cimento endurecido (NEVILLE, 1995).

2.1.4 Modelos de previsão dos íons cloretos

São vários os modelos para previsão do íon cloreto no concreto: modelos analíticos, empíricos e numéricos. Os modelos analíticos são baseados na solução da segunda lei de Fick, enquanto outros modelos mostram a relação do tempo com o coeficiente de concentração do cloreto na superfície, a relação da difusão com o tempo (NILSON, 2001; BERROCAL, LUNDGREN, LÖFGREN, 2016).

Outros modelos matemáticos (ANDRADE, 2001; WANG *et al.*, 2005; MAZER, 2010) que determinam a penetração dos íons cloreto nas estruturas de concreto são apresentados na Tabela 5:

Tabela 5 – Modelos de previsão do íon cloreto - I

MODELO	REFERÊNCIAS
Modelo de Saetta <i>et al.</i> (1993)	SAETTA <i>et al.</i> (1993)
Modelo de Bob	Bob (1996)
Modelo de Jairo Andrade	Andrade (2001),
Modelo de Wang <i>et al.</i>	(WANG <i>et al.</i> , 2005).
Modelo de Liang e Lin	Liang e Lin (2003)

Fonte: Adaptado (ANDRADE, 2001; WANG *et al.*, 2005; MAZER, 2010)

A utilização dos métodos físicos auxilia na descrição do transporte de cloreto, também na descrição da ligação de íons com as expressões físicas separadas (NILSON, 2001), estão apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 – Modelos previsão do íon cloreto - II

MODELOS	REFERÊNCIAS	EQUAÇÃO GOVERNANTE
Collepardi	COLLEPARDI, MARCIALIS e TURRIZIANI, 1970.	
LightCon	NILSSON, 2001.	
Bamforth	THOMAS e BAMFORTH, 1999.	Solução da função de erro analítica para a 2ª lei de difusão de Fick
Duracrete	DURACRETE, 1998.	
Nilsson	NILSSON, 2009.	
Mjlbros-Poulsen	POULSEN e MEJLBRO, 2010.	Solução da função não-erro analítica para a 2ª lei de Fick de difusão
Heteque	FREDERIKSEN, MEJLBRO e POULSEN, 2000.	
NIST	BENTZ, CLIFTON e SNYDER, 1996.	Solução numérica para a 2ª lei de Fick de difusão
LIFE-365	EHLEN, THOMAS e BENTZ, 2009	
ClinConc	TANG, 1996.	Solução numérica para 2ª lei de Fick de difusão
Toronto	STANISH, HOOTON e THOMAS, 2014.	
MsDiff	KHITAB, 2005; TRUC, 2000; TRUC, OLLIVIER e NILSSON, 2000	Solução numérica para a equação do balanço de massa em combinação 1ª lei de Fick de difusão
Johannesson	JOHANNESSON, 2000.	
STADIUM	ANDRADE e KROPP, 2000.	

Fonte: Adaptado (KHITAB, ANWAR e ARSHAD, 2017)

2.2 Porosidade

Os poros são defeitos da microestrutura do concreto que variam de mm (milímetros) a tamanhos menores que nm (nanômetro, $1 nm = 10^{-9} m$) genericamente classificados por ordem crescente de grandeza em poros gel (ou microporos ou poros de intercamadas), poros capilares e macroporos (ar incorporado) (FORNASIER, 1995).

A porosidade (\emptyset) é calculada pela equação 24 (LI *et al.*, 2021):

$$\emptyset = \frac{V_{\omega_s}}{V_r} \quad (24)$$

Sendo:

V_{ω_s} = volume de água da amostra saturada (m^3)

V_r = volume real da amostra (m^3)

\emptyset = porosidade (%)

O volume de água da amostra saturada V_{ω_s} é calculado pela equação 25 (LI *et al.*, 2021):

$$V_{\omega_s} = \frac{m_a}{\rho_a} \quad (25)$$

Sendo:

m_a = massa de água da amostra (kg/m^3)

ρ_a = densidade da água (kg/m^3)

O volume real da amostra (V_r) é calculado pela equação 26 (LI *et al.*, 2021):

$$V_r = \frac{1}{4} \pi d_{da}^2 h_r \quad (26)$$

Sendo:

V_r = volume real da amostra (m^3)

d_{da} = diâmetro da amostra (mm)

h_r = altura atual da amostra (mm)

A massa da amostra (m) é calculada usando a equação 27 (LI *et al.*, 2021):

$$m = \frac{m_a - m_0}{m_0} \quad (27)$$

Sendo:

m_a = massa de água da amostra (kg/m^3)

m_0 = massa inicial do concreto após a secagem (kg/m^3)

2.2.1 Tortuosidade

A tortuosidade corresponde a sinuosidade dos caminhos de percolação interna, conforme pode ser vista nas Figuras 3 e 4 (CLENELL, 1997; BARRANDE, BOUCHET e DENOYEL, 2007; GHANBARIAN *et al.*, 2013; FU, THOMAS e LI, 2021; DA SILVA, 2022, DA SILVA 2023b).

É um parâmetro importante pois influencia o fluxo de transporte de íons no meio poroso (CLENELL, 1997; FU, THOMAS e LI, 2021; DA SILVA, 2022). A sua determinação é usada para prever e quantificar as propriedades de transporte de meios porosos (CLENELL, 1997; BARRANDE, BOUCHET e DENOYEL, 2007; GHANBARIAN et al., 2013; FU, THOMAS e LI, 2021; DA SILVA, 2022; DA SILVA 2023b).

O termo tortuosidade é amplo e tem múltiplas definições e vários métodos de avaliação para diferentes contextos. Esse termo é confundido em muitas pesquisas com o termo fator tortuosidade (F_T) que é o quadrado do valor da tortuosidade. A tortuosidade pode ser dividida em: geométrica e física (FU, THOMAS E LI, 2021).

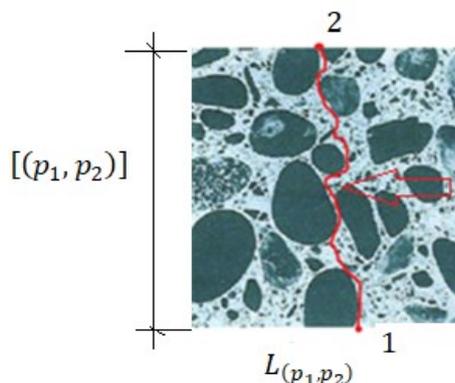
2.2.1.1 Tortuosidade geométrica

A tortuosidade geométrica caracteriza a estrutura e depende da microestrutura do meio poroso (FU, THOMAS e LI, 2021). Algumas definições de como encontrar a tortuosidade geométrica (τ_g) serão abordadas neste trabalho.

A tortuosidade geométrica (τ_g), Figura 1, pode ser definida como sendo a razão entre o caminho tortuoso do fluxo passando por dois pontos (L_{p_1,p_2}) e a distância entre dois pontos $[(p_1, p_2)]$ considerados dentro do fluido conforme a), equação 28 (CLENNEL, 1997):

$$\tau_{g(p_1,p_2)} = L_{(p_1,p_2)} / [(p_1, p_2)] \quad (28)$$

Figura 1 – Tortuosidade 2D – exemplo 1

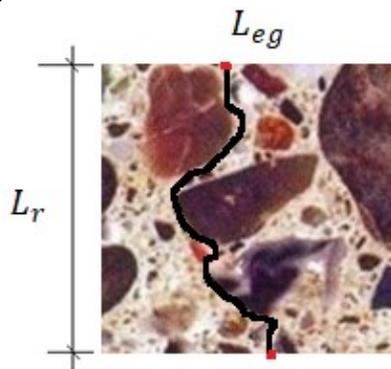


Fonte: Adaptado (METHA e MONTEIRO, 2008)

Outra forma de definir a tortuosidade geométrica (τ_g) devido ao meio poroso pode ser entendida como sendo a razão entre o comprimento (L_{eg}) e o comprimento da linha reta (L_r), Figura 2 e determinada pela equação 29 (GHANBARIAN, 2013):

$$\tau_g = L_{eg}/L_r \quad (29)$$

Figura 2 – Tortuosidade 2D - exemplo 2

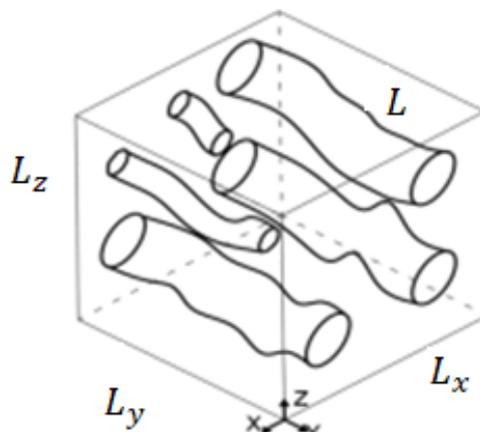


Fonte: Adaptado (METHA e MONTEIRO, 1994)

Em outra pesquisa a tortuosidade geométrica (τ_g) é definida pelo caminho tortuoso (L) em razão do caminho percorrido pelo escoamento (L_y), Figura 3. O valor de (L_y) coincide com um dos lados do cubo em estudo (YANG e ZHANG, 2020) e pode ser verificada pela equação 30:

$$\tau_g = L/L_y \quad (30)$$

Figura 3 – Tortuosidade 3D



Fonte: Adaptado (Da SILVA, 2022)

Algumas considerações sobre a tortuosidade geométrica: será sempre maior que um ($\tau_g > 1$) e o coeficiente da tortuosidade geométrica (T_g) que é o inverso da tortuosidade geométrica terá o valor $0 > T_g > 1$ ($T_g = 1/\tau_g$) (GHAMBARIAN *et. al*, 2013; AL-RAOUSH e MADHOUN, 2017).

2.2.1.2 Tortuosidade física

A tortuosidade física ocorre no processo de transporte dentro da microestrutura (FU, THOMAS e LI, 2021). Pode ocorrer devido aos fenômenos:

a) Difusão molecular

A tortuosidade difusa (τ_D) como mostra a equação 31, considera a razão entre o caminho médio de difusividade química (L_D) e o comprimento em linha reta (L_r) no meio poroso (EPSTEIN, 1989; FU, THOMAS e LI, 2021):

$$\tau_d = L_D/L_r \quad (31)$$

b) Permeação de fluido

A tortuosidade hidráulica (τ_H) é a razão entre o comprimento do fluxo hidráulico efetivo (L_H) e o comprimento em linha reta (L_r) no meio poroso e determinada pela equação 32 (CLENELL, 1997; FU, THOMAS e LI, 2021):

$$\tau_H = L_H/L_r \quad (32)$$

c) Condução elétrica

A tortuosidade elétrica (τ_E) resulta da razão entre o caminho efetivo da transmissão elétrica (L_E) e o comprimento em linha reta (L_r) no meio poroso definida pela equação 33 (FU, THOMAS e LI, 2021):

$$\tau_E = L_E/L_r \quad (33)$$

d) Escoamento viscoso

A condutividade térmica efetiva (λ_{ef}) pode ocorrer devido a simulação do fluxo de calor considerando o fluxo térmico (λ_0) da massa (volume) e a porosidade

(\emptyset). Então a tortuosidade térmica (τ_T) pode ser obtida na forma da equação 34, (FU, THOMAS e LI, 2021):

$$\tau_T = \sqrt{(\lambda_0/\lambda_{ef}) \emptyset} \quad (34)$$

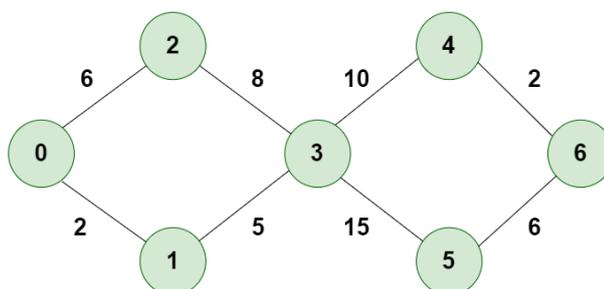
2.2.2 Métodos para obter a tortuosidade

A determinação da tortuosidade geométrica, definida em 3.2.1.1, e o caminho tortuoso pode ser determinado por 4 métodos conhecidos pela comunidade científica (FU, THOMAS e Li, 2021):

- i. Método de pesquisa de caminho mais curto direto (*Direct Shortest-Path Search Method -DSPSM*)

Baseado no algoritmo Dijkstra, Figura 4, para encontrar o caminho tortuoso do fluxo.

Figura 4 – Rede de Dijkstra



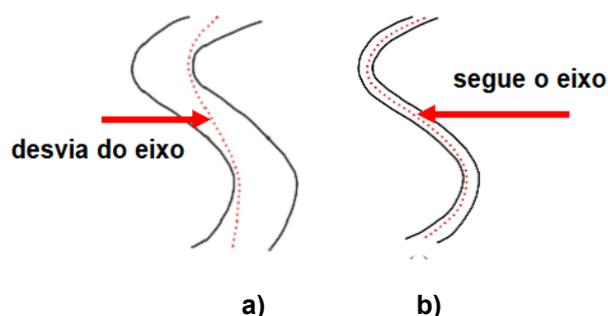
Fonte: [https://media.geeksforgeeks.org/wp-content/uploads/20230303115424/d1-\(1\).png](https://media.geeksforgeeks.org/wp-content/uploads/20230303115424/d1-(1).png)

O algoritmo de Dijkstra tem início no nó considerado como origem. Faz análise da condição do gráfico e seus caminhos para encontrar a distância mais curta entre o nó fornecido e todos os outros nós no gráfico (GEEKSFORGEEEKS, 2023). Faz o rastreamento da distância mais curta conhecida de cada nó até o nó de origem e atualiza o valor depois de encontrar o caminho ideal (GEEKSFORGEEEKS, 2023). Encontrando o caminho mais curto entre o nó de origem e o nó de destino, o nó específico é marcado como visitado (GEEKSFORGEEEKS, 2023).

- ii. Método de pesquisa do caminho mais curto do esqueleto (*Skeleton Shortest-Path Search Method – SSPSM*).

Os canais de poros mais curtos identificados pelo método *Direct Shortest-Path Search Method* - DSPSM se desviam do eixo médio da rede porosa como na Figura 5a.

Figura 5 – Skeleton Shortest-Path Search Method (SSPSM)



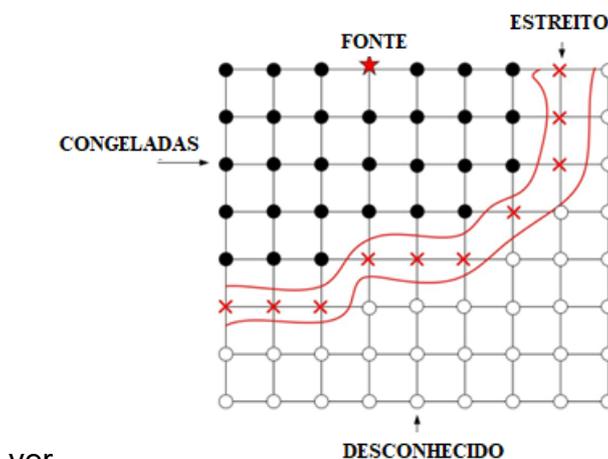
Fonte: (FU, THOMAS e LI, 2021)

iii. Método de marcha rápida (*Fast Marching Method* - FMM)

O Método de marcha rápida (FMM) pode ser aplicado diretamente no *grid* de uma imagem, Figura 6. Segundo Sethian (1996), os pontos da grade são divididos em três classes (PENG e WANG, 2019):

- congelados, pontos atrás da frente de onda e foram calculados;
- estreito, pontos na frente de onda ainda esperando para serem calculados;
- desconhecido, intocado e que permanece na frente de onda.

Figura 6 – Fast Marching Method – FMM - GRID



ver

Fonte: Adaptado (PENG e WANG, 2019)

As posições de origem no início da avaliação são consideradas congeladas. São pontos iniciais com tempo de viagem considerado zero. Os pontos da grade distante são considerados estreitos e seu tempo de viagem é calculado analiticamente. Os outros pontos da grade são marcados como desconhecidos e têm um valor de tempo de viagem "infinitamente grande" (PENG e WANG , 2019).

iv. Método do centroide dos poros (*Pore Centroid Method - PCM*)

O método do centroide dos poros (PCM), Figura 7, calcula a tortuosidade geométrica (σ_{eg}) com a mudança média das localizações dos centroides dos poros entre fatias 2D adjacentes na microestrutura 3D (GOSTOVIC *et al.*, 2007; COOPER *et al.*, 2013; TJADEN *et al.*, 2018; FU, THOMAS e Li, 2021).

O canal de poro efetivo é determinado calculando a coordenada do centroide dos poros em cada camada e depois conectando esses centros em um caminho. O caminho tortuoso do fluxo (L_f) é dado pela equação 35 (FU, THOMAS e Li, 2021):

$$L_f = \sum_{j_c=1}^{n_c-1} L_{j_c} = \sum_{j_c=1}^{n_c-1} \sqrt{(X_{j_c+1} - X_{j_c})^2 + (Y_{j_c+1} - Y_{j_c})^2 + (Z_{j_c+1} - Z_{j_c})^2} \quad (35)$$

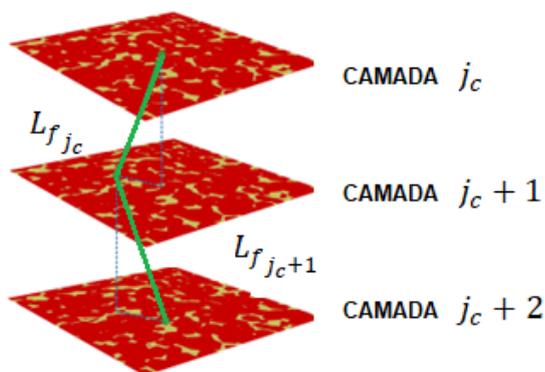
Sendo:

j_c = número de camadas

n_c = número total de camadas

X, Y, Z = coordenadas centrais do poro

Figura 7 – Pore Centroid Method - PCM



Fonte: Adaptado (FU, THOMAS e LI, 2021)

Serão apresentadas a seguir tabelas exemplificando como as pesquisas sobre a tortuosidade física e geométrica avançaram e seus métodos numéricos desenvolvidos internacionalmente. Nas Tabelas 7, 8, 9 e 10 é possível observar os tipos de tortuosidade físicas bem como o método numérico existente para determiná-los.

Tabela 7 – Métodos de simulação numérica para a previsão de tortuosidade física - Hidráulica

Tipo de Tortuosidade	Método Numérico	Meio poroso	Dimensão	Referência	
Hidráulica		Autômatos de rede de gás (precursor do LBM)	modelos artificiais	3D	ZHANG e KNACKSTEDT, 1995.
		LBM	Rochas porosas e modelos artificiais	2D e 3D	KOPONEN, KATAJA e TIMONEN, 1996; MATYKA, KHALILI e KOZA, 2008; DUDA, KOZA e MATIKA 2011; MATYKA e KOZA, 2012; DEGRUYTER <i>et al.</i> , 2010.
		FEM	modelos artificiais	2D	SAOMOTO e KATAGIRI, 2015.
		FVM	modelos artificiais	2D	LUO <i>et al.</i> , 2014.

Nota: *Lattice Boltzmann method* (LBM), *Finite Element Method* (FEM), *Finite Volume Method* (FVM).
Fonte: Adaptado (FU, THOMAS e LI, 2021)

Tabela 8 – Métodos de simulação numérica para a previsão de tortuosidade física - Térmica.

Tipo de Tortuosidade	Método Numérico	Meio poroso	Dimensão	Referência
Térmico	FVM	eletrodos de célula de combustível	3D	COOPER <i>et al.</i> , 2013; TJADEN <i>et al.</i> , 2016; BROWN <i>et al.</i> 2016.
	FEM	eletrodos de célula de combustível	3D	SUN <i>et al.</i> , 2016.

Nota: *Finite Volume Method* (FVM), *Finite Element Method* (FEM).

Fonte: Adaptado (FU, THOMAS e LI, 2021)

Tabela 9 – Métodos de simulação numérica para a previsão de tortuosidade física - Difusional

Tipo de Tortuosidade	Método Numérico	Meio poroso	Dimensão	Referência
Difusional	FVM	Rochas porosas e cátodo da bateria	3D	HUTZENLAUB et al., 2013; PENG, MARONE e DULTZ, 2014.
	FEM	eletrodos de célula de combustível	3D	WILSON et al., 2006; CHEN-WIEGART et al., 2014.
	FDM	rochas porosas e eletrodos de célula de combustível	3D	PISANI, 2011; COOPER et al., 2016; FINEGAN et al., 2016; BACKEBERG et al., 2017.
	LBM	Solos e eletrodos de células de combustível	3D	WEERTS et al., 2001; IWAI et al., 2010; OSTADI et al., 2010.
	Método de Gauss–Seidel	alumina porosa	3D	SHANTI et al., 2014.
	RWM	rochas porosas, eletrodos de células de combustível, concretos e pacotes de esferas.	2D e 3D	NAKASHIMA e WATANABE, 2002; NAKASHIMA e KAMIYA, 2007; IWAI et al., 2010; KISHIMOTO et al., 2013; TRANTER et al., 2019.

Nota: *Lattice Boltzmann method* (LBM), *Finite Element Method* (FEM), *Finite Volume Method* (FVM), *Finite Difference Method* (FDM), *Random Walk Method* (RWM).

Fonte: Adaptado (FU, THOMAS e LI, 2021)

Tabela 10 – Métodos de simulação numérica para a previsão de tortuosidade física - Elétrica.

Tipo de Tortuosidade	Método Numérico	Meio poroso	Dimensão	Referência
Elétrica	Lattice gas automata (precursor de LBM)	modelos artificiais	3D	ZHANG e KNACKSTEDT, 1995.
	FEM	modelos artificiais	2D	SAOMOTO e KATAGIRI, 2015.

Nota: *Lattice Boltzmann method* (LBM), *Finite Element Method* (FEM).

Fonte: Adaptado (FU, THOMAS e LI, 2021)

Nas Tabelas 11 e 12 são apresentados métodos populares de análise de imagens para calcular tortuosidade geométrica em 2D e 3D que foram já desenvolvidos por pesquisadores.

Tabela 11 – Método de avaliação da tortuosidade geométrica - I.

Método de avaliação	Meio poroso	Dimensão	Referência
DSPSM (algoritmo de Dijkstra)	Rochas porosas, nanocompósitos e eletrodos de células de combustível	3D	THOVERT, SALLES E ADLER, 1993; GOMMES <i>et al.</i> (2009); CECEN <i>et al.</i> (2012); WARGO <i>et al.</i> (2013); LITSTER <i>et al.</i> (2013); STENZEL <i>et al.</i> (2016).
DSPSM (algoritmo de Propagação da frente de onda)	Estruturas de sódio compactos de cloreto	2D	SAN WU <i>et al.</i> (2006).

Nota: *Direct Shortest Path Searching Method* (DSPSM).

Fonte: Adaptado (FU, THOMAS e LI, 2021)

Tabela 12 – Métodos de avaliação da tortuosidade geométrica - II.

Método de avaliação	Meio poroso	Dimensão	Referência
DSPSM (algoritmo de A-star)	Estruturas de compactos sinterizados	2D	MONTES, CUEVAS e CINTAS, 2007.
SSPSM (algoritmo de Dijkstra)	rochas porosas, eletrodos de célula de combustível, alumina e papel microestruturas	3D	LINDQUIST <i>ET AL.</i> , 1996; AXELSSON e SVENSSON, 2010; SUN, ANDRADE e RUDNICKI, 2011; SHANTI <i>et al.</i> , 2014; AL-RAOUSH e MADHOUN, 2017.
FMM	rochas porosas, eletrodos de célula de combustível, alumínio infiltrado, materiais celulares e materiais de armazenamento de energia	3D	BRUN <i>et al.</i> , 2008; JORGENSEN <i>et al.</i> (2011); PARDO-ALONSO <i>et al.</i> , 2014; CHEN-WIEGART <i>et al.</i> , 2014; TAIWO <i>et al.</i> , 2016.
PCM	rochas porosas, solo e combustível eletrodos celulares	3D	GOSTOVIC <i>et al.</i> , 2007; DESRUES, VIGGIANI e BESUELLE, 2010; SHEARING <i>et al.</i> , 2012; KACZMAREK <i>et al.</i> , 2017.
Path tracking method (Método de rastreamento de caminho)	modelos artificiais	3D	SOBIESKI <i>et al.</i> , 2018.

Nota: *Direct Shortest Path Searching Method* (DSPSM), *Skeleton Shortest Path Searching Method* (SSPSM), *Fast Marching Method* (FMM), *Pore Centroid Method* (PCM), *Path tracking method*.

Fonte: Adaptado (FU, THOMAS e LI, 2021).

Na Tabela 13, os *softwares* que foram desenvolvidos para a avaliação da tortuosidade. Muitos são livres de código aberto permitindo a colaboração de diversas melhorias científicas e outros são apenas para uso comercial.

Tabela 13 – Pacotes de software de código aberto e comercial para avaliação de tortuosidade geométrica e física.

Nome	Tortuosidade	Método	Natureza	Referência
iMorph	Geométrica	FMM	código aberto	BRUN <i>et al.</i> , 2008.
Tort3D	Geométrica	DSPSM	código aberto	CECEN <i>et al.</i> , 2012.
TORT3D	Geométrica	SSPSM	código aberto	AL-RAOUSH e MADHOUN, 2017.
Palabos	Hidráulica Difusional	LBM simulação de fluxo laminar LBM simulação de difusão molecular	código aberto	PALABOS, 2019.
OpenLB	Hidráulica Difusional	LBM simulação de fluxo laminar LBM simulação de difusão molecular	código aberto	OpenLB, 2019.
TauFactor	Difusional	FDM	código aberto	COOPER <i>et al.</i> , 2016.
PuMA	Difusional	FDM ou RWM	código aberto	FERGUSON <i>et al.</i> , 2018.
pytrax	Difusional	RWM	Open-source	TRANTER <i>et al.</i> , 2019.
Avizo	Geométrica Hidráulica Difusional Elétrica Térmica	PCM FVM simulação de fluxo laminar FVM simulação de difusão molecular FVM Simulação de condução elétrica FVM simulação de transferência de calor	Comercial	Avizo, 2017.
Simpleware	Geométrica Hidráulica Difusional Elétrica Térmica	SSPSM FEM simulação de fluxo laminar FEM simulação de difusão molecular FEM simulação de condução elétrica FEM simulação de transferência de calor	Comercial	Simpleware, 2019.
GeoDict	Geométrica Hidráulica Difusional Elétrica Térmica	DSPSM ou SSPSM FVM simulação de fluxo laminar FVM simulação de difusão molecular FVM simulação de condução elétrica FVM simulação de transferência de calor	Comercial	GeoDict, 2020.

Nota: *Lattice Boltzmann method* (LBM), *Direct Shortest Path Searching Method* (DSPSM), *Skeleton Shortest Path Searching Method* (SSPSM), *Finite Volume Method* (FVM), *Finite Element Method* (FEM), *Random Walk Method* (RWM), *Finite Difference Method* (FDM), *Fast Marching Method* (FMM), *Pore Centroid Method* (PCM).

Fonte: Adaptado (FU, THOMAS e LI, 2021).

Muitos modelos teóricos ou fenomenológicos estimam a tortuosidade de meios porosos como funções da porosidade (DUDA, KOZA e MATYK, 2011; AHMADI, MOHAMMADI e HAYATI, 2011; Da SILVA *et al.*, 2022) sendo a correlação de Bruggeman a mais usada (BRUGGEMAN, 1935; DIAS *et al.*, 2006).

Alguns modelos envolvendo a relação entre a tortuosidade com a porosidade são citados a seguir e utilizadas para comparativo com a difusão pesquisada:

a) Modelo de BRUGGEMAN (1935), onde a tortuosidade é encontrada pela equação 36:

$$\tau_D = \sqrt{\phi^{1-x}} \quad (36)$$

Sendo:

τ_D = tortuosidade difusa

$x = 1,5$, para meio granular considerado como esferas

ϕ = porosidade

b) Modelo de IVERSEN e JORGENSEN (1993), que define a tortuosidade conforme a equação 37:

$$\tau_D = \sqrt{1 + q(1 - \phi)} \quad (37)$$

Sendo:

τ_D = tortuosidade difusa

$q = 2$, areia, lodo e sedimentos.

ϕ = porosidade

c) Modelo de SUN, TANG e CHENG (2013), para determinar a tortuosidade pela equação 38:

$$\tau_D = \sqrt{1 - x \ln \phi} \quad (38)$$

Sendo:

τ_D = tortuosidade difusa

$x = 0,357$, argila seca

ϕ = porosidade

d) Modelo de PETERSEN (1958), representa a tortuosidade pela equação 39:

$$\tau_D = \sqrt{2 - \phi} \quad (39)$$

Sendo:

τ_D = tortuosidade difusa

ϕ = porosidade

e) Modelo de DU PLESSIS e MASLIAH (1991), que define a tortuosidade pela equação 40:

$$\tau_D = \frac{\phi}{1 - (1 - \phi)^{2/3}} \quad (40)$$

Sendo:

τ_D = tortuosidade difusa

ϕ = porosidade

f) Modelo de MOTA *et al.* (2001), onde a tortuosidade pode ser determinada pela equação 41:

$$\tau_D = \sqrt{\phi^{-x}} \quad (41)$$

Sendo:

ϕ = porosidade

$x = 0,4$, esferas de tamanho único

τ_D = tortuosidade difusa

g) Modelo de WEISSBERG (1963), onde a tortuosidade é definida pela equação 42:

$$\tau_D = \sqrt{1 - \frac{\ln \phi}{2}} \quad (42)$$

Sendo:

ϕ = porosidade

τ_D = tortuosidade difusional

h) Modelo de BEECKMAN (1990), para a determinação da tortuosidade com a equação 43:

$$\tau_D = \sqrt{\frac{1}{1-(1-\phi)^{1/3}}} \quad (43)$$

Sendo:

τ_D = tortuosidade difusional

ϕ = porosidade

i) Modelo de COMITI e RENAUD (1989), para definir a tortuosidade com a equação 44:

$$\tau_D = \sqrt{1 + q(1 - \phi)} \quad (44)$$

Sendo:

τ_D = tortuosidade difusa

$q = 0,49$ (esferas)

ϕ = porosidade

Esses modelos foram utilizados para comparar a tortuosidade encontrada pelo movimento Browniano.

3 DIFUSÃO

A difusão é a transferência de massa através de um elemento sólido de forma espontânea através dos poros do material. A matéria é transportada de uma região para outra devido aos movimentos moleculares aleatórios, gerados por um gradiente de concentrações (CRANK, 1975).

O transporte iônico de massa por difusão ocorre por diferença de potencial termodinâmico das moléculas (GJORV, 2015; CALLISTER, 2012) devido a diferença de concentração química. Com o aumento da temperatura, as vibrações térmicas dispersam aleatoriamente os átomos para posições de menor energia no interior de sólidos, de líquidos ou de um gás (CALLISTER, 2012; VLACK, 1970; ÀVILA, 2019). É mais efetiva quando a pasta de cimento já está endurecida (NEVILLE, 1997).

O coeficiente de difusão é o parâmetro determinante (AL-RAOUSH e MADHOUN, 2017) para calcular a taxa de penetração de cloretos no concreto (ANDRADE, 2002).

A difusão no estado estacionário (D_s) se refere a concentração do íon cloreto no poro. Expressa o movimento dos cloretos solúveis em água sendo denominado por coeficiente de difusão efetivo (D_{eff}) (ANDRADE, 1993; ANDRADE, 2002; LIZARAZO e CLAISSE, 2009; AGUAYO *et al.*, 2014).

O coeficiente de difusão no estado não estacionário (D_{ns}) é aquele que se encontra no volume da amostra e denominado de coeficiente de difusão aparente (D_a). O coeficiente de difusão em estado não estacionário é a quantidade de cloretos total da amostra (ANDRADE, 1993; ANDRADE, 2002; LIZARAZO e CLAISSE, 2009; AGUAYO *et al.*, 2014)

A definição do coeficiente de difusão para o estado estacionário (D_s), conhecido por coeficiente de difusão efetivo (D_{eff}) (ANDRADE, 1993) é demonstrada com as equações 45 e 46:

$$J(x) = \frac{dC}{dt} = -D_{eff} \frac{dC(x)}{dx} \quad (45)$$

$$D_{eff} = -J \frac{dC(x)}{dx} \quad (46)$$

Sendo:

$$D_{eff} = \text{coeficiente de Difusão efetivo (cm}^2\text{/s)}$$

$J(x)$ = fluxo difusional (mol/cm^2s)

∂C = variação de concentração (mol/cm^3)

∂x = variação de distância (cm)

∂t = variação de tempo (s)

A definição do coeficiente de difusão (D_{ns}) para o estado não estacionário : (ANDRADE, 1993), também conhecido por coeficiente de difusão aparente (D_{ap}), é mostrado na forma das equações 47 e 48:

$$J = -\frac{\partial C(x)}{\partial t} = -D_{ap} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (47)$$

$$D_a = -J \frac{\partial^2 C(x)}{\partial x^2} \quad (48)$$

Sendo:

D_{ap} = coeficiente de Difusão aparente (cm^2/s)

$J(x)$ = fluxo difusional (mol/cm^2s)

∂C = variação de concentração (mol/cm^3)

∂x = variação de distância (cm)

∂t = variação de tempo (s)

A difusão pode ocorrer de 3 formas (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE, 1975): molecular, browniana e turbulenta.

a) Molecular

A difusão molecular pode ocorrer por lacunas ou intersticial (BUKOWSKI *et al.*, 2021) devido a difusão de gases, líquidos ou sólidos (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE, 1975).

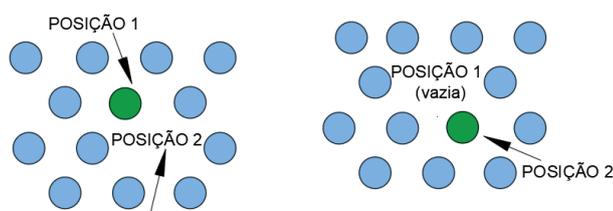
A difusão molecular representada pela Figura 8, é parte de um transporte de soluto em um fluido decorrido da agitação das moléculas. A difusão molecular por lacunas, Figura 10a, ocorre com o átomo migrando para nova posição atingindo energia suficiente para causar distorção na rede atômica e causar o movimento (CALLISTER, 2012).

A difusão molecular intersticial, Figura 8b, ocorre devido o átomo migrar para posições intersticiais sem a necessidade de haver lacunas nas vizinhanças

(CALLISTER, 2012). Ocorre mais rápido que a difusão por lacunas. Os átomos possuem maior mobilidade por serem menores ocupando mais posições nos interstícios.

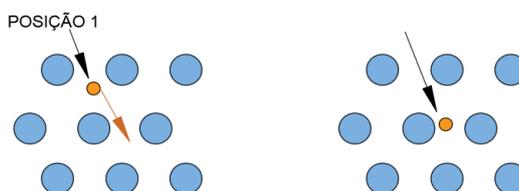
Figura 8 – Difusão molecular e intersticial

MOVIMENTO DO ÁTOMO DA POSIÇÃO 1 PARA A POSIÇÃO 2
(VAZIO EXISTENTE)



a) difusão molecular por lacunas

POSIÇÃO DO ÁTOMO INTERSTICIAL ANTES DA DIFUSÃO POSIÇÃO DO ÁTOMO INTERSTICIAL DEPOIS DA DIFUSÃO



b) difusão molecular intersticial

Fonte: Adaptado (CALLISTER, 2012)

b) Browniana

Em relação ao movimento Browniano, a difusão ocorre quando as partículas se movem de forma aleatória devido a interação entre partículas com moléculas agitadas termicamente (LEIROZ e AZEVEDO, 2007). As partículas colocadas no gás ou líquido em repouso, migram aleatoriamente no volume acarretando o fenômeno conhecido por Movimento Browniano (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE, 1975).

A média do deslocamento ao quadrado ($\overline{r^2}$) das partículas conforme os princípios gerais da mecânica pode ser encontrada na forma da equação 49 (SHERWOOD, PIGFORD e WILKE, 1975):

$$\overline{r^2} = 2 D_{MB} t \quad (49)$$

Sendo:

D_{MB} = coeficiente de difusão da partícula browniana (m^2/s)

$t =$ tempo (s)

Para partículas de raios esféricos (r_a) o coeficiente de difusão é determinado pela equação 50 de Stokes-Einsten (SHERWOOD, PIGFORD e WILKE,1975; VLAHOS *et al.*, 2008):

$$D_{SE} = \frac{k_B T}{6\pi \eta r_a} \quad (50)$$

Sendo:

k_B = constante de Boltzmann

D_{SE} = difusão de Stokes-Einstein (cm^2/s)

T = temperatura (Kelvin)

η = viscosidade do líquido (Ns/m^2)

r_a = raio da partícula (cm)

Na difusão de fluxo turbulento, ou agitado artificialmente, a transferência ocorre em nível macro onde os gases ou líquidos são deslocados. Na difusão em soluções eletrolíticas existem os íons (cátions (n_+) e ânions (n_-)) determinados pela equação 51 de Nerst-Heckell (SHERWOOD, PIGFORD e WILKE,1975):

$$D_{NH} = \frac{RT(1/n_+)+(1/n_-)}{F_a^2(1/\lambda_+^0)+(1/\lambda_-^0)} \quad (51)$$

Sendo:

D_{NH} = coeficiente de difusão pela equação de Nerst-Heckell (m^2/s)

T = temperatura (kelvin)

R = constante dos gases

F_a = número de Faraday

n_+ = fluxo de difusão de valência cátion

n_- = fluxo de difusão de valência ânion

λ_+^0 = condução do ionico limitante cátion ($m^2/\Omega^4 mol$)

λ_-^0 = condução do ionico limitante ânion ($m^2/\Omega^4 mol$)

Para sistemas eletrólitos mistos por exemplo cátion leve, a difusão pode ser unidirecional por causa da ação de gradientes elétricos e de concentração

determinadas pelas equações 52, 53 e 54 (SHERWOOD, PIGFORD e WILKE,1975) o fluxo de massa será:

$$\mathbf{m}_+ = \frac{\lambda_+^0}{F_a^2} \left[-R T \frac{dc_+}{dy} + F_a c_+ \frac{dE}{dy} \right] \quad (52)$$

$$\mathbf{m}_- = \frac{\lambda_-^0}{F_a^2} \left[-R T \frac{dc_-}{dy} + F_a c_- \frac{dE}{dy} \right] \quad (53)$$

$$\Sigma \mathbf{m}_+ = \Sigma \mathbf{m}_- = \Sigma \mathbf{m} = 0 \quad (54)$$

\mathbf{m}_+ = fluxo de massa de valência cátion

\mathbf{m}_- = fluxo de massa de valência ânion

T = temperatura (*kelvin*)

R = constante universão dos gases

F_a = número de Faraday

λ_+^0 = condução do ionico limitante cátion (m^2/Ω^4mol)

λ_-^0 = condução do ionico limitante ânion (m^2/Ω^4mol)

c_+ = concentração positiva

c_- = concentração negativa

$\frac{dE}{dy}$ = gradientes elétricos

c) Turbulenta

O transporte das moléculas ocorre na forma turbulenta pode ser caracterizado pela presença de vórtices (SHERWOOD, PIGFORD e WILKE,1975). Ocorre a tranferência de massa em nível macro com volume turbulento de gás ou líquido (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE,1975).

A intensidade de uma transferência turbulenta é consideravelmente maior do que a resultante de movimentos moleculares (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE,1975).

A transferência de massa total na difusão turbulenta será o resultado do efeito conjunto da difusão molecular e turbulenta como mostra a equação 55 (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE,1975):

$$D_{Tt} = D_R + D_M \quad (55)$$

Sendo:

D_R = coeficiente de difusão turbulenta (m^2/s)

D_M = coeficiente de difusão molecular (m^2/s)

D_{Tt} = coeficiente de difusão total turbulenta (m^2/s)

3.1 Difusão em corpos porosos

Especificamente para corpos porosos a difusão pode ser dividida em: molecular, Knudsen e de superfície (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE, 1975).

a) Molecular

A difusão molecular ocorre em sólidos com grandes poros, maior que o caminho livre das moléculas de gás em difusão. Aqui o coeficiente de difusão é denominado efetivo e determinado pela equação 56 (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE, 1975):

$$D_{eff}^M = D_M \frac{\phi}{\tau} \quad (56)$$

Sendo:

D_{eff}^M = coeficiente de difusão efetivo molecular (m^2/s)

D_M = coeficiente de difusão molecular (m^2/s)

ϕ = porosidade (%)

τ = tortuosidade

b) Knudsen

A difusão de Knudsen ocorre em sólidos cheios de gás com poros pequenos determinada pela equação 57 (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE, 1975):

$$D_{eff}^K = \frac{8\phi^2}{3\tau\rho S_e} \left(\frac{2r_a T}{\pi\mu} \right)^{0,5} \quad (57)$$

Sendo:

D_{eff}^K = coeficiente de difusão de Knudsen efetivo (m^2/s)

r_a = Raio da partícula

S_e = superfície específica

T = Temperatura (*kelvin*)

μ = massa molecular da substância difusora

ρ = densidade (kg/m^3)

\emptyset = porosidade (%)

τ = tortuosidade

Em regiões de transição é importante a determinação da difusão de Knudsen e a difusão molecular sendo então o coeficiente de difusão definitivo a soma das duas dada pela equação 58 (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE, 1975):

$$D_{eff} = \left(\frac{1}{D_{eff}^M} + \frac{1}{D_{eff}^K} \right)^{-1} \quad (58)$$

Sendo:

D_{eff}^K = coeficiente de difusão de Knudsen efetivo (m^2/s)

D_{eff}^M = coeficiente de difusão de molecular efetivo (m^2/s)

D_{eff} = coeficiente de difusão efetivo (m^2/s)

c) Superfície.

A difusão de superfície ocorre na adsorção da substância em um sólido e a sua determinação na forma da equação 59 (MOSTINSKY, 2011; SHERWOOD, PIGFORD e WILKE, 1975):

$$D_{eff}^{mult} = - \left(\frac{1}{D_{eff}^M} + \frac{1}{D_{eff}^K} \right)^{-1} \frac{dC_{sa}}{dy} - D_{sup} \frac{d(S_e \rho C_{sa})}{dy} \quad (59)$$

Sendo:

D_{eff}^{mult} = coeficiente de difusão na superfície devido aos multicomponentes (m^2/s)

D_{eff}^K = coeficiente de difusão de Knudsen efetivo (m^2/s)

D_{eff}^M = coeficiente de difusão efetivo molecular (m^2/s)

D_{sup} = coeficiente de difusão na superfície (m^2/s)

S_e = superfície específica (m^2)

C_{sa} = Concentração na superfície da substância adsorvida (%)

ρ = densidade (kg/m^3)

3.2 Fluxo difusional

A taxa de transferência de massa normalmente conhecida por fluxo difusional (J) é definido pela massa (M) que sofre a difusão em uma determinada seção transversal de área (A) de um sólido em função do tempo (t) como mostra a equação 60 (CALLISTER, 2012):

$$J = \frac{M}{At} \quad (60)$$

Considerando as unidades para o fluxo difusional (J) representados em $kg/m^2 \cdot s$ ou $átomos/m^2 \cdot s$, e a forma diferencial desse fluxo pode ser determinada como mostra a equação 61:

$$J = \frac{1}{A} \frac{dM}{dt} \quad (61)$$

Em caso do fluxo difusional (J) não variar com o tempo a difusão está em regime estacionário que é o caso de difusão de gases em uma placa metálica. Matematicamente o processo da difusão de um determinado componente é relacionado a concentração em termos de massa.

No caso de difusão molecular em regime estacionário (D_s) e na direção (x), o fluxo é proporcional ao gradiente de concentração (dC/dx) como mostra sua representação na equação 45. É também conhecida como a primeira lei de Fick (ANDRADE, 1993; CALLISTER, 2012). O sinal negativo ($-$) indica que a direção de difusão se dá contra o gradiente de concentração (dC/dx).

Variando com o tempo, no regime não estacionário (D_{ns}), o fluxo difusional e o gradiente de concentração pela equação 47 conhecida como a segunda lei de Fick (ANDRADE, 1993; CALLISTER, 2012; ÁVILA, 2019; MENG *et al.*, 2018, LIU *et al.*, 2023).

4 FRACTAIS

O termo fractal significa forma geométrica com dimensão fracionária. Diferem da geometria clássica (euclidiana) como a representação do quadrado, círculo, esfera. Os objetos fractais são de forma irregular ou os fenômenos da natureza são espacialmente não uniformes (BRITANNICA, 2022).

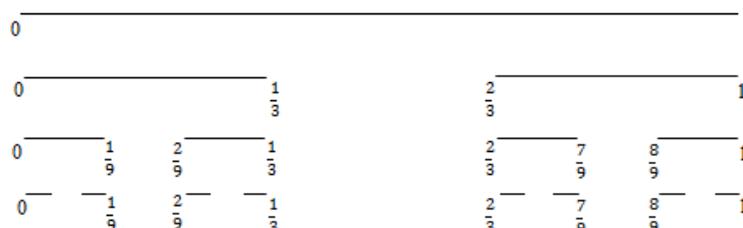
Benoit Mandelbrot foi um matemático e deu origem a palavra Fractal que tem origem do latim do adjetivo *fractus*. O verbo *frangere* significa irregular ou quebrar: criar fragmentos irregulares, fragmentar (DOMINGOS, 2013).

Mandelbrot é caracterizado como o pai da geometria fractal sendo que suas descrições retornam à matemática clássica de Georg Cantor (1872), Giuseppe Peano (1890), David Hilbert (1891), Helge von Koch (1904), Waclaw Sierpinski (1916), Gaston Julia (1918) ou Felix Hausdorff (1919) (PEITGEN, JÜRGENS e SAUPE, 2004).

Para a nova geometria de Mandelbrot foram importantes esses matemáticos pois seus conceitos geraram nova percepção da geometria da natureza (PEITGEN, JÜRGENS e SAUPE, 2004).

O conjunto de Cantor, a curva de Koch, a curva de Peano, a curva de Hilbert e a junta de Sierpinski, foram considerados matematicamente de soluções difíceis. Os primeiros fractais surgiram de pesquisas matemáticas sobre limites das noções fundamentais do 'contínuo' ou da 'curva'. O cenário Cantor, o tapete Sierpinski e a esponja Menger são exemplos (PEITGEN, JÜRGENS e SAUPE, 2004). Mandelbrot demonstrou que esses primeiros fractais matemáticos na verdade têm muitas características em comum com formas encontradas na natureza. (PEITGEN, JÜRGENS e SAUPE, 2004). Mandelbrot transformou a interpretação matemática e o valor das formas como o Conjunto Cantor, Figura 9.

Figura 9 – Construção de Cantor

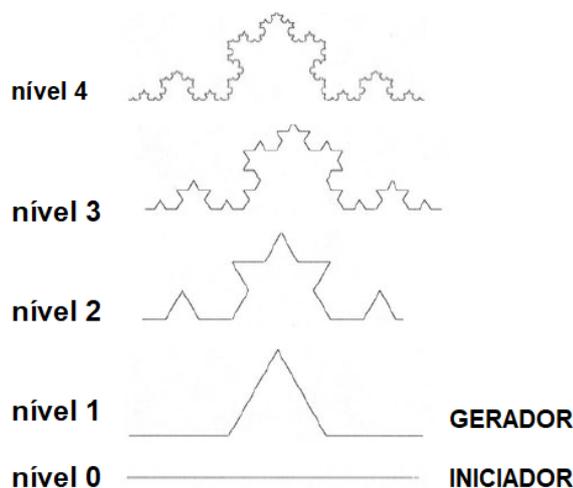


Fonte: Adaptado (KAN e ISLAM (2013)).

No Conjunto de Cantor os segmentos são divididos, é retirar o pedaço intermediário e prossegue essa operação infinitamente, como na Figura 11.

Os fractais possuem algumas propriedades de autossimilaridade e diferentes escalas. Possuem reprodução exata de uma parte com padrões infinitos. (DOMINGOS, 2013). Como exemplo a cabeça da couve-flor contém galhos ou partes que, quando removidas e comparados com o todo são praticamente iguais, só que menores (PEITGEN, JÜRGENS e SAUPE, 2004). Essas partes novamente podem ser decompostas em partes menores, que novamente parecem muito semelhantes ao todo, bem como os ramos da primeira geração. Essa autossimilaridade ocorre por cerca de três a quatro estágios, Figura 10. Depois disso as estruturas são muito pequenas para novo particionamento. Em uma idealização matemática a propriedade de autossimilaridade de um fractal pode ser continuada infinitamente muitas etapas (PEITGEN, JÜRGENS e SAUPE, 2004).

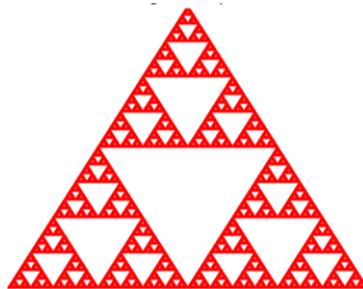
Figura 10 – Construção Curva de Koch



Fonte: Adaptado (PEITGEN, JÜRGENS e SAUPE, 2004)

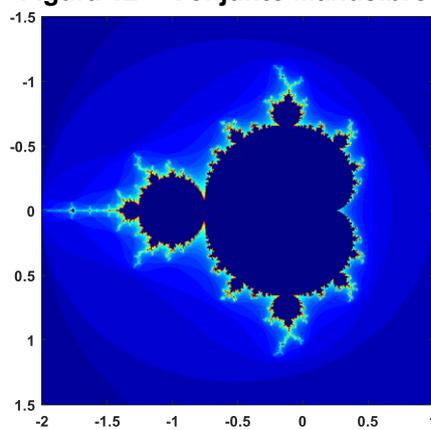
Utilizando algoritmos desenvolvidos por pesquisadores com a utilização do MATLAB®, as Figuras 11, 12, 13 e 14 mostram alguns exemplos de fractais (SILVA, 2022; PINHEIRO, 2022; DOUILLET, 2024; WANSAPURA, 2022). A Figura 11 representa o Triângulo de Sierpinski. A Figura 12 representa o conjunto Mandelbrot. Na Figura 13 pode ser vista a esponja de Menger e na Figura 14 a representação das curvas de Koch.

Figura 11 – Triângulo de Sierpinski



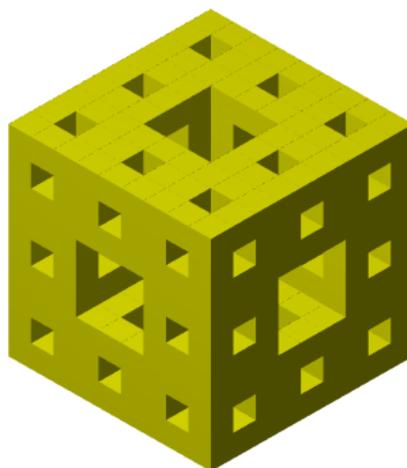
Fonte: Adaptado (SILVA, 2022)

Figura 12 – Conjunto Mandelbrot



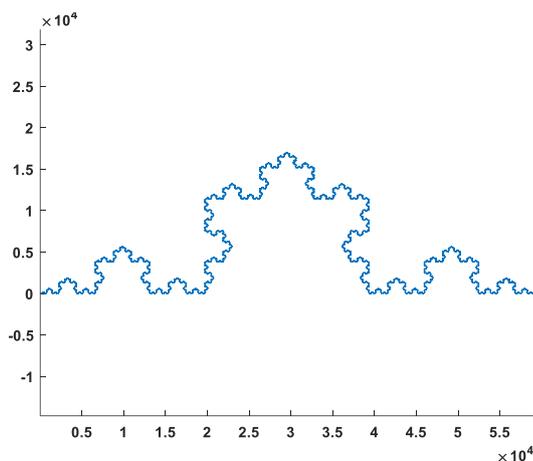
Fonte: Adaptado (PINHEIRO, 2022)

Figura 13 – Esponja de Menger



Fonte: Adaptado (DOUILLE, 2022)

Figura 14 – Curva de Koch



Fonte: Adaptado (WANSAPURA, 2022)

4.1 Dimensão Fractal

A noção de “dimensão tem vários significados. Os fractais têm sua própria dimensão e nem sempre é uma dimensão inteira. A dimensão fractal de um objeto é maior que sua dimensão topológica (DT) e menor que sua dimensão euclidiana (DE) (ADDISON, 1997).

As definições de dimensão fractal são diversas(ADDISON, 1997):

- dimensão de similaridade (DS),
- dimensão do divisor (DD),
- dimensão Hausdorff (DH),
- dimensão Box-Counting (DB),
- dimensão de correlação (DC),
- dimensão da informação (DI),
- dimensão pontual (DP),
- dimensão pontual média (DM) e a
- dimensão de Lyapunov (DL)

A dimensão de contagem de caixas (*Box-Counting*), como mostra o Apêndice C, é uma das várias definições de dimensão que podem ser aplicadas a fractais. Exemplo da dimensão de Hausdorff pode ser visto no Apêndice C.

4.2 Teoria do fractal

A análise fractal é uma forma eficaz de representar a microestrutura de materiais porosos cimentícios e de fornecer as propriedades dos materiais cimentícios (ZENG *et al.*, 2020) e auxiliar no desenvolvimento de modelos de difusão (GAO *et al.*, 2016; ZENG *et al.*, 2020).

Alguns parâmetros fractais de materiais porosos como a comprimento, superfície e dimensão da massa relacionam as propriedades macroscópicas (GAO *et al.*, 2016; KIM, CHOI e CHOI, 2018; ZENG *et al.*, 2020). Da teoria da geometria fractal são apresentadas algumas formulações. A determinação do número de poros (N) pode ser determinada pela equação 66 (YU e CHENG, 2002; XIAO *et al.*, 2018; ZENG *et al.*, 2020):

$$\log(N_p(\lambda)) = DP \left(\frac{\lambda_{max}}{\lambda} \right) \quad (66)$$

Sendo:

N_p = número de poros

λ_{max} = diâmetro máximo do poro

λ = diâmetro do poro

DP = dimensão fractal do poro

Derivando a equação 66, resulta na função (f) para determinar o diâmetro do poro (λ) dada pela equação 67 (YU e CHENG, 2002; XIAO *et al.*, 2018; ZENG *et al.*, 2020):

$$f(\lambda) = -\frac{dN_p(\lambda)}{d\lambda} = DP \lambda_{max}^{DP} \lambda^{-DP-1} \quad (67)$$

Sendo:

N_p = número de poros

λ_{max} = diâmetro máximo do poro (m)

λ = diâmetro do poro (m)

DP = dimensão fractal do poro

$f(\lambda)$ = função para determinar o diâmetro do poro

Teoricamente a dimensão do poro fractal (**DP**) pode ser determinada pela equação 68 (YU e CHENG, 2002; ZENG *et al.*, 2020)

$$DP = DE - \frac{\ln(\phi)}{\ln(\lambda_{min}/\lambda_{max})} \quad (68)$$

Sendo:

ϕ = porosidade

DE = dimensão euclidiana

λ_{max} = diâmetro máximo do poro (m)

λ_{min} = diâmetro mínimo do poro (m)

DP = dimensão fractal do poro

Para um elemento representativo de volume o comprimento de um poro fractal (L_a) individual pode ser determinado com a equação 69 (XIAO *et al.*, 2018; ZENG *et al.*, 2020):

$$L_a = \lambda^{(1-DT)} L_z^{DT} \quad (69)$$

Sendo:

λ = diâmetro do poro (m)

L_z = comprimento do lado do elemento representativo de volume (m)

DT = dimensão fractal da tortuosidade ($1 \leq DT \leq 2$)

L_a = comprimento fractal do poro atual (m)

Se os materiais cimentícios são macroscopicamente isotrópicos (ZENG *et al.*, 2020) podem ser considerados os comprimentos dos lados de um elemento representativo de volume com sendo iguais ($L_x = L_y = L_z$). A tortuosidade do poro será dada pela equação 70 (ZENG *et al.*, 2020):

$$\tau = \lambda^{(1-DT)} L_z^{(DT-1)} \quad (70)$$

Sendo:

τ = tortuosidade

λ = diâmetro do poro (m)

L_z = comprimento do lado do elemento representativo de volume (m)

DT = dimensão fractal da tortuosidade (m)

A dimensão da tortuosidade fractal depende da porosidade do material. E pode ser determinada com a equação 71 (ZENG *et al.*, 2020):

$$DT = 1 + \frac{\ln \bar{\tau}}{\ln(L_z/\bar{\lambda})} \quad (71)$$

Sendo:

$\bar{\tau}$ = tortuosidade média

L_z = comprimento do lado do elemento representativo de volume (m)

$\bar{\lambda}$ = diâmetro médio do poro (m)

DT = dimensão fractal da tortuosidade

A tortuosidade média ($\bar{\tau}$) é dada pela equação 72 (XU e Yu, 2008; ZENG *et al.*, 2020):

$$\bar{\tau} = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{2} \sqrt{1 - \emptyset} + \frac{\sqrt{(1 - \sqrt{1 - \emptyset})^2 + 0,25(1 - \emptyset)}}{1 - \sqrt{1 - \emptyset}} \right] \quad (72)$$

Sendo:

$\bar{\tau}$ = tortuosidade média

\emptyset = porosidade

No ambiente meio poroso os canais tortuosos são considerados como capilares curvos de raios diferentes, para uma simplificação de cálculo (HUANG *et al.*, 2021).

4.3 Movimento Browniano

Os primeiros estudos matemáticos do movimento Browniano foram de Louis Bachelier (MÖRTERS e PERES, 2010) com a “Teoria matemática do movimento Browniano” (DIMAND, 2009). O movimento Browniano tem esse nome devido ao botânico escocês Robert Brown (1773-1858) sendo explicado por Einstein.

A primeira construção matemática rigorosa do movimento Browniano foi devida a Wiener (MÖRTERS e PERES, 2010). Robert Maiocchi estudou a história do movimento Browniano desde a descoberta de Robert Brown em 1827 até a teoria

matemática de Albert Einstein de 1905. Em 1905 Albert Einstein publicou artigo onde resolveu o problema do movimento browniano clássico, não relativístico (EINSTEIN, 1905). As simulações de difusão com o movimento Browniano são usadas em ciências e engenharia em meios sólidos e fluídos (ADDISON, 1997).

Robert Brown (1773-1858) observava grãos de pólen por microscópio flutuando na água, notou seus movimentos irregulares rápidos. Movimento Browniano é uma descrição de movimento de partículas, em um fluído devido aos choques com outras partículas (ADDISON, 1997; MOUVEMENT BROWNIEN, 2022).

O movimento Browniano descreve a imagem microscópica emergindo de um passeio aleatório de incrementos numericamente pequenos para não causar saltos visíveis na descrição macroscópica (MÖRTERS e PERES, 2010). A difusão de coloides (partículas com pelo menos uma dimensão na faixa de 1-1000 nm) é mais uma forma de definir o movimento browniano (PHILIPSE 2011)

4.3.1 Definição

São diversas as formas de construção do movimento Browniano encontrada na literatura. Segundo um dos pioneiros matemáticos, Paul Lévy, um processo estocástico de valor real $\{B(t): t > 0\}$ é chamado de movimento Browniano (linear) com início em $x \in \mathbb{R}$ se for válido o seguinte (MÖRTERS e PERES, 2010):

- $B(0) = x$
- O processo tem incrementos independentes. Para todo tempo $0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n$ o incremento $B(t_n) - B(t_{n-1}), B(t_{n-1}) - B(t_{n-2}), \dots, B(t_2) - B(t_1)$ são variáveis independentes.
- Para todo $t \geq 0$ e $h > 0$, os incrementos $B(t+h) - B(t)$ são normalmente distribuídos com expectativa zero e variância h .
- A função $t \mapsto B(t)$ é contínua.

O processo $\{B(t): t > 0\}$ é um movimento Browniano padrão se $x = 0$.

O movimento Browniano representa uma distribuição normal. Uma variável aleatória X é normalmente distribuída com média (μ) e variância (σ^2) como mostra a equação 73 (MÖRTERS e PERES, 2010):

$$\mathbb{P}\{X > x\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_x^\infty e^{-\frac{(u-\mu)^2}{2\sigma^2}} du \quad \text{para todo } x \in \mathbb{R} \quad (73)$$

O processo estocástico $\{B(t): t > 0\}$ pode ser interpretado como de variáveis aleatórias $\omega \mapsto B(t, \omega)$ definindo uma probabilidade espacial $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$. Pode ser interpretado como função aleatória com funções amostras definidas por $t \mapsto B(t, \omega)$ (MÖRTERS e PERES, 2010). Pelas distribuições finitas do processo estocástico $\{B(t): t > 0\}$ as leis dos vetores aleatórios são definidas pela equação 74 (MÖRTERS e PERES, 2010):

$$(B(t_1), B(t_2), \dots, B(t_n)) \quad \text{para todo } 0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n \quad (74)$$

Para descrever essas leis conjuntas é suficiente descrever como sugere a equação 75 (MÖRTERS e PERES, 2010):

$$(B(t_1) - B(t_0), B(t_2) - B(t_1), \dots, B(t_n) - B(t_{n-1})) \quad \text{para todo } 0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n \quad (75)$$

O conjunto $\{\omega \in \Omega: t \mapsto B(t, \omega) \text{ contínuo}\}$ em geral não está na σ -álgebra gerada pelos vetores aleatórios $(B(t_1), B(t_2), \dots, B(t_n)), n \in \mathbb{N}$ (MÖRTERS e PERES, 2010).

4.3.2 Construção do movimento Browniano

O movimento Browniano é construído como um limite uniforme de funções contínuas para garantir caminhos contínuos. É preciso construir um movimento Browniano padrão $\{B(t): t > 0\}$ pois $X(t) = x + B(t)$ são movimento Browniano com início ponto x (MÖRTERS e PERES, 2010).

Um vetor aleatório $X = (X_1, \dots, X_n)$ é chamado de vetor aleatório Gaussiano se existe uma matriz $n \times m$ matriz A , e um vetor n -dimensional b tal que $X^t = AY + b$, onde Y é um vetor m -dimensional com entradas normais padrão independentes (MÖRTERS e PERES, 2010).

4.3.3 Propriedades de invariância

Muitos conjuntos naturais derivados dos caminhos do movimento Browniano são fractais aleatórios. Fractais são conjuntos que possuem uma estrutura geométrica em todas as escalas. A propriedade de invariância de escala do movimento Browniano identifica uma transformação no espaço de funções, que altera as funções aleatórias Brownianas individuais com a sua distribuição inalterada.

Invariância de escala: suponha $\{B(t): t > 0\}$ um movimento Browniano padrão e que $a > 0$. Então o processo $\{X(t): t > 0\}$ definido por $X(t) = \frac{1}{a} B(a^2 t)$ também é um movimento Browniano padrão.

4.3.4 Inversão de tempo

Suponha que $\{B(t): t > 0\}$ seja um movimento Browniano padrão. Então o processo $\{X(t): t > 0\}$ definido pela equação 76:

$$X(t) = \begin{cases} 0 & \text{para } t = 0 \\ t B(1/t) & \text{para } t > 0 \end{cases} \quad (76)$$

também é um movimento Browniano padrão.

4.3.5 Continuidade

A definição de movimento Browniano já requer que as funções de amostra sejam contínuas. No intervalo $[0,1]$ as funções de amostra são uniformemente contínuas (existe alguma função aleatória) e a função φ com $\lim_{h \downarrow 0} \varphi(h) = 0$ chamado módulo de continuidade da função $B: [0,1] \rightarrow \mathbb{R}$, será de tal modo representada pela equação 77:

$$\lim_{h \downarrow 0} \sup_{0 \leq t \leq 1-h} \frac{B(t+h) - B(t)}{\varphi(h)} \leq 1 \quad (77)$$

4.3.6 Indiferenciabilidade

As trajetórias do movimento browniano não têm intervalos de monotonicidade. Para todo $0 < a < b < \infty$ o movimento Browniano não é monótono no intervalo $[a, b]$. Para todo t : qualquer $D^*B(t) = +\infty$ ou $D^*B(t) = -\infty$ ou ambos.

4.3.7 Variação ilimitada

O movimento browniano não possui variação limitada. Uma função contínua à direita $f: [0, t] \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função limitada variação se ocorrer como mostra a equação 78:

$$V_f^{(1)}(t) := \sup \sum_{j=1}^k |f(t_j) - f(t_{j-1})| < \infty \quad (78)$$

onde o supremo é sobre todos $k \in \mathbb{N}$ e partições todo $0 = t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_{k-1} \leq t_k = t$. Se o supremo é infinito, diz-se que f é de variação ilimitada.

Suponha que $0 = t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_{k-1} \leq t_k = t$ em cada etapa onde um ou mais pontos de partição são adicionados e a malha a seguir converge para zero conforme dado na equação 79:

$$\Delta(n) := \sup_{1 \leq j \leq k(n)} \{t_j^{(n)} - t_{j-1}^{(n)}\} \quad (79)$$

O movimento Browniano tem variação ilimitada como mostra a equação 80:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{k(n)} \left(B(t_j^{(n)}) - B(t_{j-1}^{(n)}) \right)^2 \quad (80)$$

4.3.8 Métodos

No plano o movimento Browniano é curva fractal aleatória. Faz o registro da posição do movimento e dos deslocamentos em intervalos de tempo discretos. Nesses movimentos os pontos da curva são conectados com segmentos de linha reta. Essa curva denomina-se curva 'jerky' (ADDISON, 1997).

A teoria do movimento Browniano de Einstein apresenta o deslocamento quadrado médio ($\overline{r^2}$) em uma direção com a equação 81 (SEN, 2004; LI e RAIZEN, 2013; PROMENTILLA *et al.*, 2009; BIAN, KIM e KARNIADAKIS, 2016):

$$\overline{r^2} = [Y(t_{MB}) - Y(0)]^2 = 2 D_{MB} t \quad (81)$$

Sendo:

$\overline{r^2}$ = deslocamento quadrado médio

t_{MB} = tempo entre deslocamentos devido ao movimento Browniano

$Y(t_{MB})$ = deslocamento no tempo t_{MB}

$Y(0)$ = deslocamento no tempo 0

D_B = coeficiente de difusão Browniano

Existem dois métodos numéricos que auxiliam a desenvolver o movimento Browniano (ADDISON, 1997) e são presentes em algumas pesquisas:

- Método x, y : selecionar aleatoriamente (*randn*) etapas nas direções de coordenadas dos pontos (x_i, y_i) conhecidas e construir o movimento no plano usando Δx e Δy passos. Amostrados no tempo t_i , e a distribuição dos saltos observados nas direções das coordenadas x e y , sendo $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ e $\Delta y_i = y_i - y_{i-1}$. Esses deslocamentos seguem uma distribuição gaussiana (normal) sendo o comprimento dos passos (r_i) na posição i dado por equação 82:

$$r_i = \sqrt{(\Delta x_i)^2 + (\Delta y_i)^2} \quad (82)$$

- Método θ : selecionar aleatoriamente o comprimento total do passo (CP_T) a partir de uma distribuição gaussiana considerando o ângulo de passo (θ) de uma distribuição constante entre 0 e 2π rad.

O deslocamento quadrado médio é calculado pelas equações 83 e 84 (SEN, 2004; LI e RAIZEN, 2013; PROMENTILLA *et al.*, 2009; BIAN, KIM e KARNIADAKIS, 2016):

$$\overline{r^2} = \left(\frac{1}{n}\right) \sum_{i=1}^n \{[x_i(t) - x_i(0)]^2 + [y_i(t) - y_i(0)]^2 + [z_i(t) - z_i(0)]^2\} \quad (83)$$

$$\overline{r^2} = \left(\frac{1}{n}\right) \sum_{i=1}^n \{\overline{x^2}(t) + \overline{y^2}(t) + \overline{z^2}(t)\} \quad (84)$$

Considerando $\overline{r^2}$ como sendo o deslocamento quadrado médio no tempo t , entre os deslocamentos devido o movimento Browniano $x(t)$ no tempo t , $x(0)$ no tempo inicial zero. O deslocamento na direção x, y, z é obtido na forma das equações 85, 86 e 87 (SEN, 2004; LI e RAIZEN, 2013; PROMENTILLA *et al.*, 2009; BIAN, KIM e KARNIADAKIS, 2016; DA SILVA 2023b).

$$\overline{x^2}(t) = \left(\frac{1}{n}\right) \sum_{i=1}^n \{[x_i(t) - x_i(0)]^2\} \quad (85)$$

$$\overline{y^2}(t) = \left(\frac{1}{n}\right) \sum_{i=1}^n \{[y_i(t) - y_i(0)]^2\} \quad (86)$$

$$\overline{z^2}(t) = \left(\frac{1}{n}\right) \sum_{i=1}^n \{[z_i(t) - z_i(0)]^2\} \quad (87)$$

Para cada direção o deslocamento representado pelo movimento Browniano será dado pelas equações 89, 90 e 91:

$$\overline{x^2}(t) = 2 D_{MB} t \quad (89)$$

$$\overline{y^2}(t) = 2 D_{MB} t \quad (90)$$

$$\overline{z^2}(t) = 2 D_{MB} t \quad (91)$$

O deslocamento quadrado médio ($\overline{r^2}(t)$) em relação a um tempo (t) para 3D devido a isotropia no movimento Browniano é representada pelas equações 92 e 93 (SEN, 2004; BIAN, KIM e KARNIADAKIS, 2016; SALVO, 2021; DA SILVA 2023b).

$$\overline{r^2}(t) = 2 D_{MB} t + 2 D_{MB} t + 2 D_{MB} t \quad (92)$$

$$\overline{r^2}(t) = 6 D_{MB} t \quad (93)$$

A média do coeficiente de difusão (D_{MB}) no poro devido ao movimento Browniano pode ser calculado pelo deslocamento quadrado médio ($\overline{r^2}(t)$), considerando número de passos (n), tempo (t), viscosidade (η) como mostra a equação 94:

$$D_{MB} = \frac{1}{6} \frac{\overline{r^2}(t)}{t} \quad (94)$$

Para determinar a tortuosidade (média) devido ao movimento Browniano encontrada pela equação 95 (PROMENTILLA *et al.*, 2009; PAE *et al.*; 2021)

$$\tau = \frac{1}{r^2(t)} \quad (95)$$

A tortuosidade direcional é obtida pelas equações 96, 97 e 98 (PROMENTILLA *et al.*, 2009:

$$\tau_x = \frac{1}{3} \frac{1}{r^2(t)} \quad (96)$$

$$\tau_y = \frac{1}{3} \frac{1}{r^2(t)} \quad (97)$$

$$\tau_z = \frac{1}{3} \frac{1}{r^2(t)} \quad (98)$$

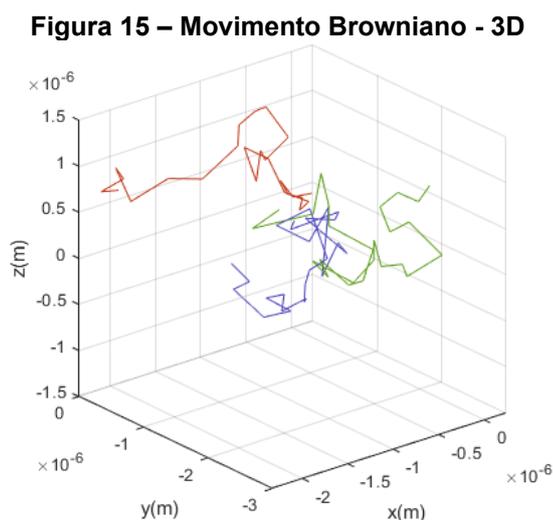
Sendo:

τ_x = tortuosidade na direção x

τ_y = tortuosidade na direção y

τ_z = tortuosidade na direção z

Na Figura 15 apresenta um exemplo de movimento Browniano para 3 partículas com 25 deslocamentos (passos). Quando as partículas de tamanhos em microns estando em um gás estacionário ou líquido em repouso vão migrar aleatoriamente no volume ocorrendo o movimento browniano por ausência da pulsação de pressão que afeta as partículas e em zigue zague mudam de direção aleatoriamente.



Fonte: Autor (2022)

4.3.9 Langevin

Considerando o movimento Browniano de uma partícula com massa m realizando um passeio aleatório dentro de um fluido devido a colisão pelas moléculas do fluido, que obedecem a uma distribuição em equilíbrio (Maxwelliano). Pierre Langevin (LEMONS e GYTHIEL, 1997) descreveu este movimento com uma simples equação diferencial estocástica demonstrada pela equação 99 (VLAHOS *et al.*, 2008; SPIECHOWICZ *et al.*, 2023):

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -r_a \frac{dx}{dt} + F(t) \quad (99)$$

Sendo:

m = é a massa

r_a = raio da partícula

$\frac{dx}{dt}$ = velocidade da partícula

$F(t)$ = força flutuante , termo aleatório

Com a ausência da força aleatória a partícula começaria com velocidade v_0 desacelerando gradualmente devido o atrito. Multiplicando a equação 99 por x e sendo $x F(t) > 0$ (VLAHOS *et al.*, 2008) chega-se a equação 100:

$$m x \frac{d^2 x}{dt^2} = \left[\frac{dx}{dt} \frac{dx}{dt} - \frac{dx^2}{dt} \right] = -r_a x \frac{dx}{dt} + x F(t) \quad (100)$$

Calculando as médias das partículas $\langle x F(t) \rangle = 0$, que é a irregularidade da força $F(t)$ resultando na equação 101 (VLAHOS *et al.*, 2008):

$$m \frac{d\langle x x \rangle}{dt} = m x \frac{dx}{dt} - r_a x \frac{dx}{dt} \quad (101)$$

Como o gás de fundo está em equilíbrio, a energia cinética da partícula é proporcional à temperatura do gás, $m(x \frac{dx}{dt} / 2) = k_B T / 2$. Sendo k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura do gás.

Assim a equação 101 forma da equação 102 (VLAHOS *et al.*, 2008):

$$\left(\frac{d}{dt} + \gamma \right) x \frac{dx}{dt} = \frac{k_B T}{m} \quad (102)$$

Considerando $\gamma = d/m$, a equação 102 resulta na equação 103:

$$x \frac{dx}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt} = C e^{-\gamma t} + \frac{k_B T}{r_a} \quad (103)$$

Para o tempo $t = 0$ a média do deslocamento é zero e $0 = C + \frac{k_B T}{r_a}$, a equação 102 fica na forma apresentada como a equação 104, (VLAHOS *et al.*, 2008):

$$\frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt} = \frac{k_B T}{r_a} (1 - e^{-\gamma t}) \quad (104)$$

Integrando chega-se à equação 105 (VLAHOS *et al.*, 2008):

$$x^2 = \frac{2k_B T}{r_a} \left[t - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right] \quad (105)$$

No limite $t \ll 1/\gamma$ a solução da equação 105 considera $x^2 \sim t^2$ chamada de difusão que é chamada de difusão “balística” e significa que em tempos pequenos as partículas ainda não são prejudicadas pelas colisões e se difundem muito rapidamente. Considerando outro limite onde $t \gg 1/\gamma$, a solução da equação 105 tem a forma da equação 106 (VLAHOS *et al.*, 2008):

$$x^2 = \frac{2k_B T}{r_a} t \quad (106)$$

Para 3D, o deslocamento quadrado médio, agora simbolizado x^2 de $\overline{r^2}$, será dado pelas equações 107 e 108 (VLAHOS *et al.*, 2008):

$$\overline{r^2} = \frac{6k_B T}{r_a} t \quad (107)$$

$$\overline{r^2} = Dt \quad (108)$$

Onde a difusão na equação 108 será determinada pela equação 109 (VLAHOS *et al.*, 2008):

$$D = \frac{6k_B T}{r_a} \quad (109)$$

4.3.10 Relação de Einstein

Do modelo de Langevin considera admitância dada pela equação 110 e a velocidade pela equação 111 (POTTIER, 2010):

$$A(\omega) = \frac{1}{m} \left(\frac{1}{\gamma - i\omega} \right) \quad (110)$$

$$\langle v(\omega) \rangle = A(\omega) F_{ext}(\omega) \quad (111)$$

Sendo:

A = admitância do modelo de Langevin

ω = frequência angular

F_{ext} = força externa da transformada de Fourier.

$\langle v(\omega) \rangle$ = velocidade

A velocidade média da partícula Browniana responde linearmente a força aplicada externa. A partícula Browniana com uma carga (q), adquire sob o efeito de um campo elétrico estático (E) a velocidade limite $\langle v \rangle = qE/m\gamma$. Sua mobilidade $\mu = \langle v \rangle / E$ será conforme a equação 112 (POTTIER, 2010):

$$\mu = \frac{q}{m\gamma} = q A(\omega = 0) \quad (112)$$

Sendo:

γ = coeficiente de fricção

A = admitância do modelo de Langevin

μ = mobilidade

ω = frequência angular

Considerando a difusão (D) expressa na forma da equação 113 (POTTIER, 2010):

$$D = \frac{D}{\gamma^2} \quad (113)$$

Considerando D o coeficiente de difusão relacionado com a velocidade do espaço.

A partir das equações 112 e 113 obtemos uma relação entre a mobilidade e o coeficiente de difusão da partícula browniana e assim a equação 114 será (POTTIER, 2010):

$$\frac{D}{\mu} = \frac{mD}{q\gamma} \quad (114)$$

A relação interna entre a sistemática e partes aleatórias de forças microscópicas é manifestada pelo teorema de flutuação-dissipação. O teorema relaciona a relação geral entre uma resposta de um dado sistema interna com perturbação externa e flutuação interna (KUBO, 1966). Por conta do segundo teorema de dissipação de flutuação tem-se a relação da equação 114 será agora na forma da equação 115 (POTTIER, 2010):

$$\frac{D}{\mu} = \frac{k_B T}{q} \quad (115)$$

A equação 115 é a relação de Einstein entre o coeficiente de difusão (D), associado com o deslocamento flutuações, e a mobilidade, relacionada à dissipação. Também pode ser escrito na forma de uma relação entre a difusão (D) dado conforme a equação 116 (POTTIER, 2010):

$$D = \frac{k_B T}{\eta} \quad (116)$$

4.3.11 Stokes-Einstein

A relação entre o movimento molecular e a difusão (D) em um líquido pode ser expressa pela equação 117 (MILLER, 1924):

$$D = \frac{\overline{r^2}}{2t} \quad (117)$$

Sendo:

$\overline{r^2}$ = deslocamento quadrado médio

t = tempo

Considerando que as partículas possuem mesma energia cinética média que as moléculas de gás na mesma temperatura a média do deslocamento quadrado assume a forma da equação 118 (MILLER, 1924):

$$\overline{r^2} = \frac{2RT}{N} \frac{t}{Z_a} \quad (118)$$

Sendo:

R = constante do gás

N = número do Avogrado

T = temperatura

Z_a = constante de resistência ao atrito

Assim, a difusão (D) na equação e é dada conforme a equação 119 (MILLER, 1924):

$$D = \frac{RT}{N} \frac{1}{Z_a} \quad (119)$$

Para partículas esféricas movendo-se em um meio proporcionalmente pequeno moléculas, Stokes mostrou que uma relação hidrodinâmica é válida considerando os parâmetros agrupados em uma constante denominada de Z_a e demonstrada na equação 120 (MILLER, 1924):

$$Z_a = 6 \pi \eta r_a \quad (120)$$

Sendo:

r_a = raio da partícula

η = viscosidade

Substituindo a equação 120 na equação 119, a difusão terá a forma da equação 121 (MILLER, 1924):

$$D = \frac{RT}{N} \frac{1}{6 \pi \eta r_a} \quad (121)$$

Sendo R/N a constante de Boltzmann (k_B) e substituindo na equação 121, a difusão será, equação 122:

$$D = \frac{k_B T}{6 \pi \eta r_a} \quad (122)$$

Assim essa equação 122 de difusão é utilizada por pesquisadores como referência.

5 GEOMETRIA 3D VOXEL

Para pesquisar as propriedades da microestrutura de materiais porosos é comum uma amostra ser representada em formato cúbico. Essa representação pode levar a modelagem computacional considerando diversos métodos de reconstrução 3D e a utilização de softwares como MATLAB®, Python e outros. Existem várias definições de elemento representativo de volume (*Representative Elementary Volume* - REV), mas existem dois requisitos comuns (ROZENBAUM e ROSCOAT, 2014; YIO, WONG e BUENFELD, 2017):

- o REV possui o tamanho certo para conter microestruturais suficientes para representar a propriedade macroscópica de forma representativa,
- o REV é determinado para uma propriedade específica e independe da posição de amostragem dentro do material.

Essa representação é eficaz para modelagem de transporte de fluídos e massas e pode utilizar como solução das equações o método Lattice Boltzmann (LBM) (KHAN *et al.*, 2012; BRINKMANN, 2012; FRONING *et al.*, 2013), método dos elementos finitos (*Finite Element Method* - FEM) (COSTA, 2006) e outros métodos citados no capítulo 3.

A representação em 3D do meio poroso reproduz o comportamento macroscópico com aplicação em vários campos: medicina, ciência dos materiais, hidrologia e engenharia de petróleo (HAJIZADEH e FARHADPOUR, 2012). Essas entidades 3D possuem informações em seu interior sobre as superfícies e bordas que não são completamente obtidas por amostragem, simulação ou algumas técnicas de modelagem (KAUFMANN, 1995).

Os micromodelos podem estabelecer as relações quantitativas para as propriedades de transporte (como a condutividade elétrica efetiva) e parâmetros de microestrutura correspondentes (como a fração de volume, a tortuosidade) (GAISELMANN *et al.*, 2014).

Exemplificando uma modelagem em 3D iniciando com a escolha do software de programação (WALLE e JANSSEN, 2016):

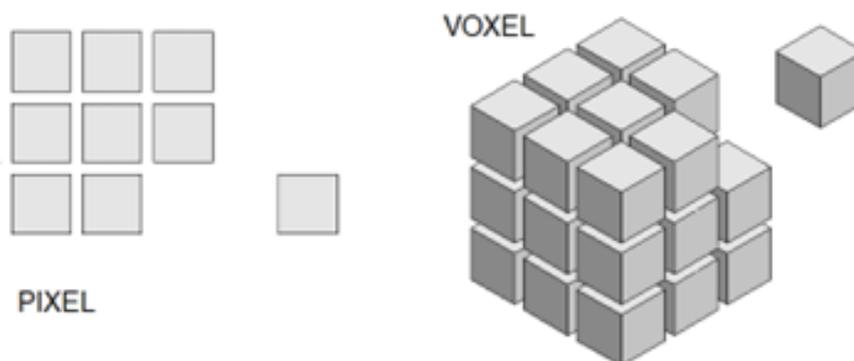
- obter a representação geométrica da microestrutura em 2D e posteriormente a 3D,
- escolher método: elementos finitos, diferenças finitas, ou outro de forma a usar equações adequadas,

- simular o problema.

Essas etapas podem ser aperfeiçoadas de forma mais minuciosa partindo de uma escolha de técnicas para obtenção de imagens 2D até o método de reconstrução do modelo em 3D.

O sistema a ser utilizado deve ser automatizado e parametrizável. As representações da microestrutura em 2D são denominadas de pixel e as representações em 3D são denominadas de voxel, Figura 16. O valor numérico de cada voxel indica a fase do material e em que local específico se localiza (WALLE e JANSSEN, 2016).

Figura 16 – Geometria 2D e 3D

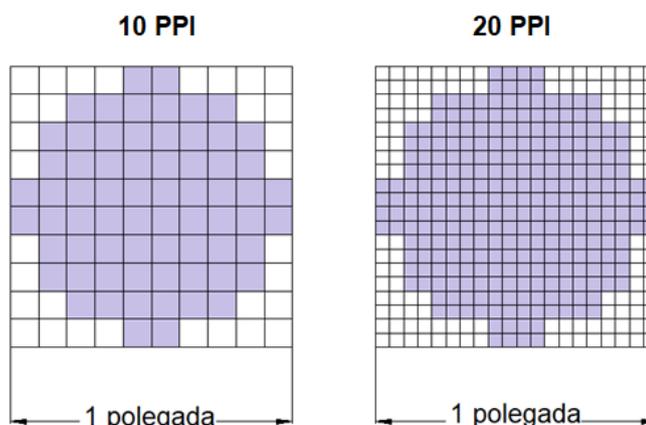


Fonte: Adaptado (<https://www.techiesdiary.com/wp-content/uploads/pixel-vs-voxel.webp>)

O pixel não tem uma medida definida em centímetros e pode ter diferentes tamanhos. O tamanho visual do pixel está diretamente relacionado à quantidade de pixels por polegada (*ppi*, que significa *pixel per inch* (CANSON-INFINITY, 2022).

A resolução da imagem é descrita em pixels, Figura 17, exibidos por polegada de uma imagem (PPI). Com isso as resoluções mais altas mostram mais pixels por polegada (PPI) com mais informações resultando na imagem de alta qualidade (MLIBRARY, 2022; CANSON-INFINITY, 2022).

Figura 17 – Resolução – PPI



Fonte: Adaptado (<https://files.tecnoblog.net/wp-content/uploads/2023/04/ppi-768x432.png>)

Para melhorar a qualidade das informações no seu interior, pode ser realizada sequência de imagens de cortes 2D de uma amostra física, Figura 18, obtidas por ressonância magnética (RM), micro-CT, Figura 19 (KAUFMANN, 1995; WALLE e JANSSEN, 2016) ou outras técnicas.

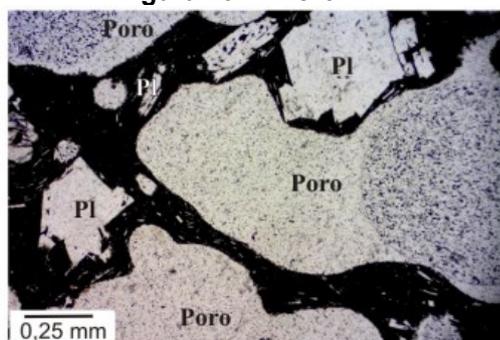
A tomografia de feixe de íons focalizado (FIB- *Focused Ion Beam*) é uma técnica destrutiva usada para coletar informações estruturais tridimensionais (3D). A amostra de material é degradada em camadas e cada camada fotografada por um microscópio eletrônico de varredura (SEM - *Scanning Electron Microscope*). Assim uma série consecutiva de seções transversais da amostra de material tridimensional é registrada (SARDHARA et al., 2022). FIB é uma técnica importante para imagens 3D de materiais nanoporosos com uma resolução de 1 *nm* no plano SEM e 10 *nm* na direção fora do plano (KNOTT et al., 2008).

Os dados de tomografia FIB podem ser gerados em duas etapas: geração de microestruturas virtuais e a geração de imagens virtuais SEM dessas microestruturas usando simulações Monte Carlo (MC) (SARDHARA et al., 2022).

Através da segmentação as imagens podem ser convertidas em formas binárias. Com a microestrutura digital já segmentada, adotando uma resolução, a imagem reconstruída pode ser usada como um elemento representativo de volume (*Representative Element Volume- REV*) (HOFFMANN e ROSSIGNAC 1996).

Figura 18 – Amostra física

Fonte: Autoria própria (2022)

Figura 19 – Micro-CT

Fonte: Adaptado (LOPES *et. al.*, 2012)

São vários os métodos utilizados para a segmentação de imagem como: agrupamento *k-means*, limites, divisor de águas e ferramentas de aprendizado de máquina como *weka* (BOLLMANN e KLEINEBUDDE, 2021).

As imagens já em voxel (3D), geralmente podem ser adquiridas por duas maneiras:

- por meio de varredura de microtomografia (micro-CT) de raios X com visualização 3D (tridimensional),
- geração de dados sintéticos, gerados por técnicas capazes de imitar dados reais.

Ambos os métodos fornecem uma imagem de voxel (3D), com bom nível de detalhes (total quantidade de voxel), variando a escala utilizada. A imagem pode ser importada para o software, exemplo Matlab®, como uma matriz binária 3D. Assim o cálculo de várias propriedades microestruturais como porosidade, tamanho dos poros distribuição entre outras podem ser realizados (WALLE e JANSSEN, 2016).

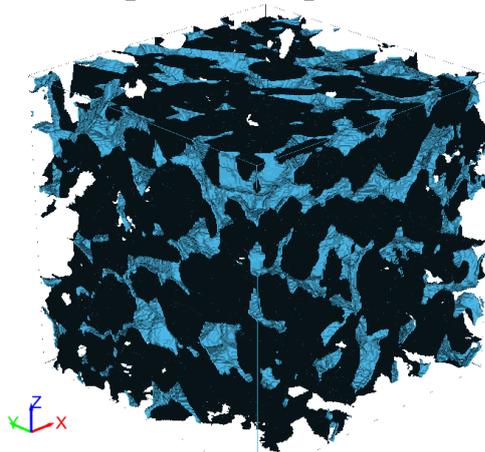
Quando a imagem passa por varredura micro-CT ela passa a seguir pelo processamento digital de imagens (PDI). Esse processamento delimita os pixels

(2D) da imagem e obtém as regiões de interesse. A segmentação pode ser realizada por diversas técnicas e a mais usual é a limiarização conhecida por *thresholding* (TH) (ENRÍQUEZ-LEÓN *et al.*, 2020).

Na técnica TH, o tom de cinza dos pixels diferencia as fases do material e gera uma imagem binária. No tom de cinza abaixo do corte que delimita os pixels são transformados em branco e acima do corte em preto (GOMES, 2001).

Usando métodos de geração sintética, Figura 20, o voxel (3D) de uma imagem é construída de forma determinística ou estocástica (WALLE e JANSSEN, 2016; GAISELMANN *et al.*, 2014). Essa técnica ajuda a desenvolver novas microestruturas permitindo um estudo mais aprofundado de parâmetros específicos em microescala (WALLE e JANSSEN, 2016). Permite a geração e inserção de poros esféricos em um material sólido (SHE, ZHANG e JONES, 2014; GAISELMANN *et al.*, 2014).

Figura 20 – Imagem sintética generalizada- Poros

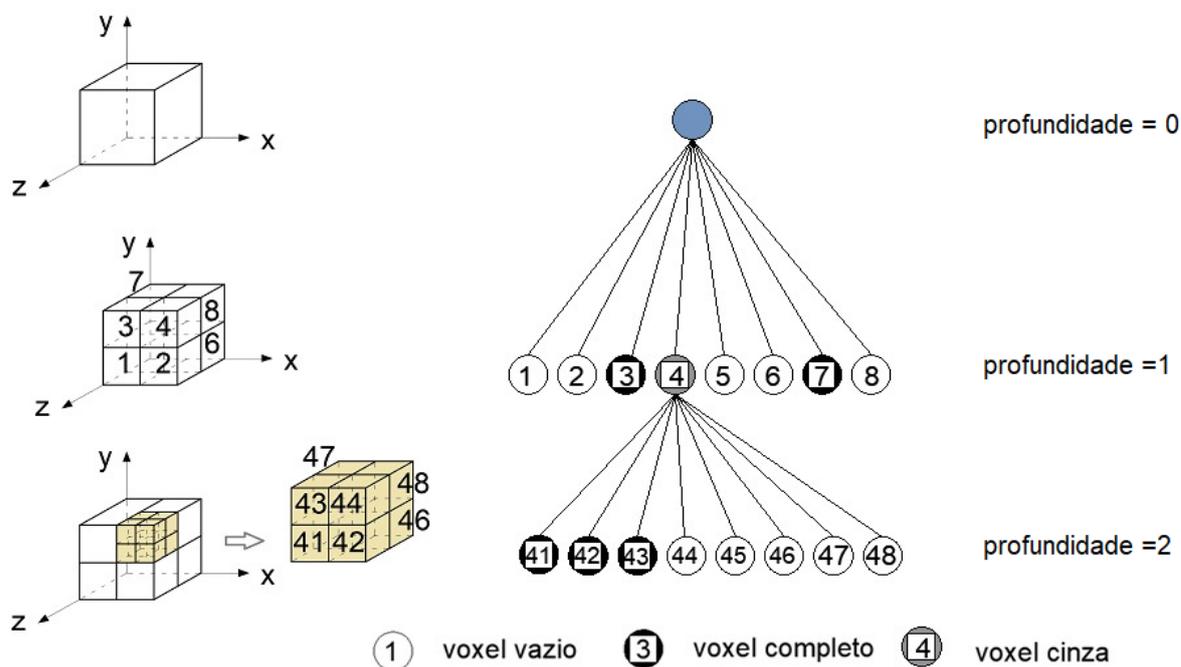


Fonte: Aatoria própria (2022)

Cada voxel (3D) é conectado e descrito como uma estrutura topológica e geométrica simples. Em grades, um volume é subdividido em regiões menores (8 subvoxel) por planos apropriados paralelos aos eixos do sistema de coordenadas, normalmente usando um sistema de coordenadas cartesianas, Figura 21.

Um voxel inicial delimitando todos os dados de ponto recursivamente divide um volume em oito subvoxel, organizados em uma estrutura hierárquica (SAMET, 1989).

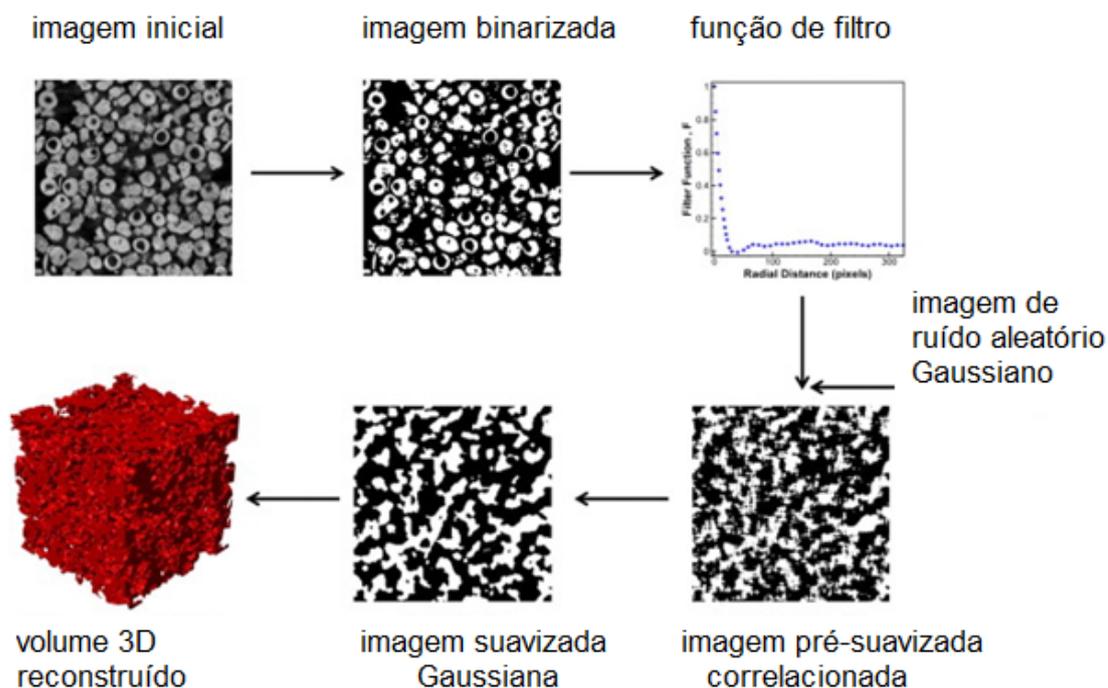
Figura 21 – Estrutura hierárquica - 3D voxel



Fonte: Adaptado (HINKS *et al.*, 2013)

Os voxel podem ser rotulados como branco, preto ou cinza dependendo de suas posições, Figura 21. Nesse caso, os voxel pretos são considerados aqueles dentro do sólido, enquanto os voxel brancos considerados fora (HOFFMANN e ROSSIGNAC, 1996). As imagens microscópicas brutas, processadas serão armazenadas como pixels ou voxel em escala de cinza (SAMET, 1989). A Figura 22 mostra um exemplo de reconstrução 3D.

Figura 22 – Representação para reconstrução 3D



Fonte: (BODLA, GARIMELLA e MURTHY, 2014)

5.1 Extração da rede porosa

A modelagem da rede porosa é importante pois auxilia o estudo do fluxo de fluido dos materiais porosos (RABBANI *et al.*, 2016; RABBANI, JAMSHIDI e SALEHI., 2014). De modo geral a modelagem da rede porosa pode ser feita usando (AL-RAOUSH e WILSON, 2005):

- Lattice- Boltzmann (LB)
- modelos de rede porosa.

A modelagem utilizando modelos de Lattice-Boltzmann (LB), utiliza conceitos introduzidos com modelos Lattice-gás para simular o fluxo e transporte no espaço poroso. São modelos complexos e dados limitados para comparações (AL-RAOUSH e WILSON, 2005):

Os modelos de rede porosa ajudam a prever as propriedades da escala macroscópicas utilizando volumes geométricos. (AL-RAOUSH e WILSON, 2005). As redes porosas são representadas através de elementos como: poros (esferas, cilindros, cubos) e gargantas de poros (tortuosidade) (AL-RAOUSH e WILSON,

2005; (THIBODEAUX, SHENG e THOMPSON, 2015). Propriedades como raio inscrito, conectividade, área da superfície e outras então obtidas.

Para obter a rede porosa com a utilização de imagens obtidas por micro-CT as mesmas devem ser segmentadas em vazios e sólidos. O espaço vazio é discretizado em rede com poros e gargantas (THIBODEAUX, SHENG e THOMPSON, 2015).

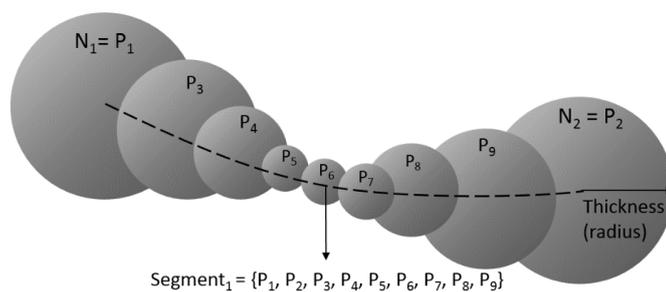
Como obter a rede porosa pode ser explicada através (AL-RAOUSH e WILSON, 2005; AL-KHARUSI e BLUNT, 2007; RABBANI, JAMSHIDI e SALEHI., 2014; SHENG e THOMPSON, 2015):

- de entender o processo sedimentar que forma o material estudado (concreto).
- da estimativa do tamanho dos poros por curvas de saturação da medida de pressão capilar.
- do estudo das curvas de saturação de pressão geradas para medida das curvas.
- do escaneamento por micro-CT para criar a imagem 3D.
- da estatística da rede porosa a partir da caracterização 3D do espaço poroso com base nas seções das imagens 2D.
- da estatística com dois pontos ou múltiplos pontos para reconstrução 3D com dados obtidos por imagens.

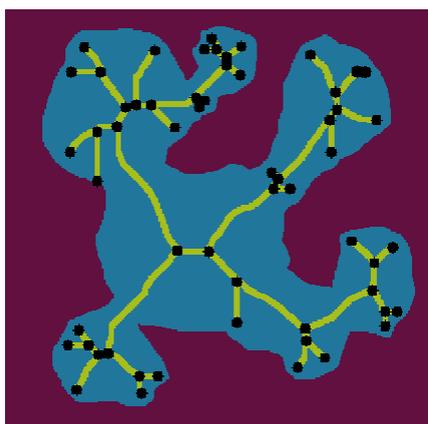
Os métodos mais comuns para extrair o volume 3D dessas redes porosas seguem as seguintes considerações (AL-RAOUSH e WILSON, 2005; WILDENSCHILD e SHEPPARD, 2013; RABBANI, JAMSHIDI e SALEHI., 2014; RABBANI *et al.*, 2016), Figura 23:

- esfera máxima inscrita e distância do espaço do poro aproximada.
- esqueletização e métodos de afinamento e análise do eixo médio.
- segmentação de bacias hidrográficas (*watershed segmentation*).

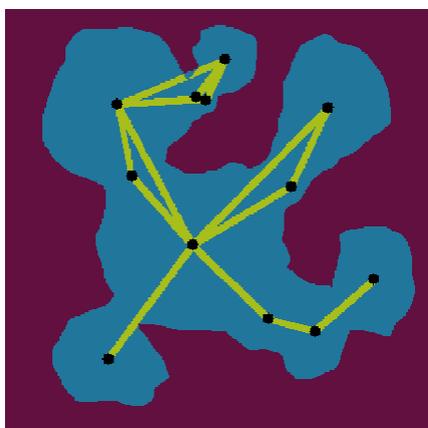
Figura 23 – Métodos para extrair a rede porosa



a) esfera máxima inscrita



b) esqueletização



c) watershed segmentation

Fonte: Adaptado (a) de SILVA (2019) e b) e c) do site https://github.com/ArashRabbani/Superpixels_PNM/raw/main/Comparing_methods.PNG

Esses são alguns métodos existentes para a extração da rede porosa.

6 METODOLOGIA

Para que a pesquisa realize o objetivo geral que é definir o coeficiente de difusão fazendo uso do movimento Browniano o caminho resumido adotado foi:

1. Inicialmente obter a representação geométrica em 3D da microestrutura do concreto.
2. Adotar a equação de difusão de Stokes-Einstein para ser a equação de referência.
3. Fazer a modelagem do movimento Browniano.
4. Determinar a difusão e a tortuosidade devido ao movimento Browniano.
5. Adotar o período (t) de até 10 anos para fazer a previsão da profundidade de penetração, da concentração superficial, concentração e da difusão do íon cloreto.

Um dos objetivos específicos é encontrar novo modelo de equação para a determinação do coeficiente de difusão. A pesquisa sugere dois caminhos encontrados durante o desenvolvimento para determinar o coeficiente de difusão devido ao movimento Browniano.

A simbologia adotada pelo autor para explicar a metodologia adotada através do fluxograma geral apresentado na Figura 41, considerando a notação: caminho da referência, caminho 1 e caminho 2. São alternativas de simulações para a determinação do coeficiente de difusão obtidas durante a pesquisa.

Para melhor entender a metodologia é descrita posteriormente denominando de etapas.

Foi utilizado o software MATLAB®. A UTFPR possui licença para a utilização do MATLAB®. Foi então utilizado o *Matrix Laboratory*, MATLAB®, cuja função é auxiliar a realização de cálculos numéricos com vetores e desenvolvimento de matrizes. Possui *Integrated Development Environment* (IDE) e um conjunto de bibliotecas (*toolboxes*) para diversas áreas de pesquisa.

Possui ferramentas de elementos finitos, inteligência artificial, depuração de processamento em tempo real e diversas outras soluções com recursos visuais (*Opencadd*). Sua função é: desenvolver matrizes; construir gráficos; manipular funções específicas e variáveis simbólicas; trabalhar com números reais e complexos; analisar e visualizar dados; implementar e projetar algoritmos diferentes; criar interfaces e aplicativos de programação entre outras (*Opencadd*).

Uma rotina do MATLAB® utilizado para a comparação dos resultados da tortuosidade foi o *TauFactor* (COOPER *et al.*, 2016). Faz o cálculo do fator tortuosidade, frações de volume, áreas superficiais e fase tripla densidades limite. Os dados utilizados são das microestruturas baseadas em imagens. O fator tortuosidade quantifica a aparente diminuição no transporte difusivo resultante de convoluções dos caminhos de fluxo através de meios porosos (COOPER *et al.*, 2016).

TauFactor foi desenvolvido inicialmente para estudar a microestrutura de eletrodo de baterias e células de combustível. É comum usar correlações, como a desenvolvida por Bruggeman (1935), para aproximar o fator tortuosidade. A disponibilidade de técnicas de imagem 3D despertou o interesse em calcular essa quantidade diretamente. Fornece uma plataforma computacional rápida e precisa aplicável aos grandes conjuntos de dados ($>10^8$ voxel) típicos da tomografia moderna (COOPER *et al.*, 2016).

Foram utilizadas outras equações para o comparativo da tortuosidade: equações 36 até 44, citadas no capítulo 3.2.2. Para o comparativo da difusão foi utilizado o resultado do movimento Browniano dado pelas equações sugeridas no caminho 1 e 2 e com a equação 149.

Etapa 1

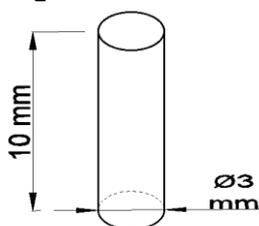
A primeira etapa foi a modelagem do elemento representativo de volume, Figura 24. A reconstrução em 3D da microestrutura porosa utilizou imagens obtidas da amostra utilizada por WALLE e JANSSEN (2017) conforme a Tabela 14 e Figura 25.b

Figura 24 – Fluxograma metodologia- Etapa 1



Fonte: Autoria própria (2023)

Figura 25 – Amostra



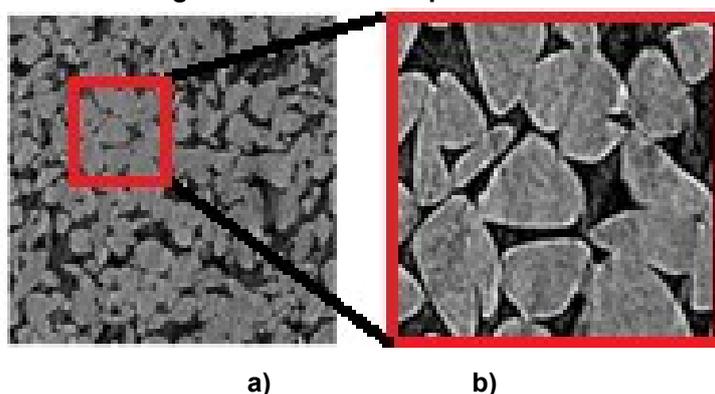
Fonte: Autoria própria (2022)

Tabela 14 – Tamanho da amostra

	mícron	mm	m
diâmetro	3000	3	0,003
altura	10000	10	0,01

Essa amostra, Figura 25, foi escaneada por Walle e Janssen (2017) e as imagens foram obtidas por varredura por micro-CT. As imagens foram filtradas e fatiadas para o formato 2D, Figura 26, e com uso de algoritmo Walle e Janssen (2017) removeram pequenos microporos não conectados. Foi adotada para essa pesquisa a Figura 26b. Essa imagem de material poroso auxiliou o estudo de um elemento representativo de volume. Na sua rede porosa foi estudado o movimento Browniano de íons cloreto.

Figura 26 – Amostra após fatiamento



Fonte: Adaptado (WALLE e JANSSEN, 2017)

Cada imagem possui resolução que é o número de pixels por polegada que ela contém (*Canson Infinity*). A Tabela 15 apresenta a representação das resoluções consideradas para cada 1 voxel e sua correspondência em micron. O *TauFactor* adota a resolução 1. Cada pesquisador pode fazer sua correspondência de voxel em micron que achar necessário. A resolução 3 foi adotada na reconstrução 3D dessa pesquisa usando a rotina no MATLAB®.

Tabela 15 – Resolução para cada 1 voxel

RESOLUÇÃO	voxel	mícron	m	mm	
1	1	1	0,000001	0,001	<i>TauFactor</i>
2	1	2	0,000002	0,002	
3	1	3	0,000003	0,003	MATLAB®.
4	1	4	0,000004	0,004	

A imagem reconstruída 3D na pesquisa utilizou rotina no MATLAB® com tamanho de 70x70x70 voxel com as dimensões conforme a Tabela 16:

Tabela 16 – Tamanho da imagem da Figura 29 b

Resolução 3		
voxel	mícron	m
1	3	0,000003
70	210	0,00021

As propriedades usadas por Walle e Janssen (2017) na amostra da Figura 26 estão descritas na Tabela 17.

Tabela 17 – Parâmetros de varredura do micro CT

CONTEXTO	AMOSTRA
Voltagem	88 kV
Atual	112 μ A
Angulo de rotação	0,2
Média de quadros	12
Modo de categorização	4k
Tamanho do voxel	1,9 μ m

Fonte: (WALLE e JANSSEN, 2017)

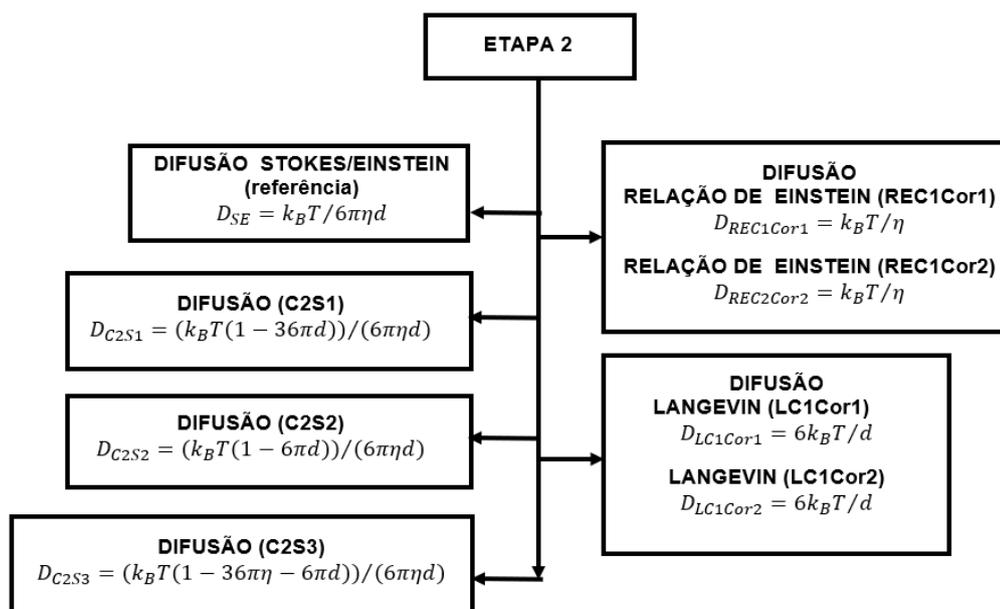
Foi adaptado o algoritmo desenvolvido por Arash Rabbani (2020b) para a reconstrução 3D da Figura 26b, utilizando a rotina no MATLAB® (MATrix LABoratory – Laboratório de Matrizes). Algumas adaptações foram feitas como os tamanhos do elemento e nas próximas etapas o movimento Browniano no elemento e no poro juntamente com a conectividade da rede porosa.

Com a reconstrução 3D é possível a determinação do volume da rede porosa da amostra. A rotina *Viewer* do MATLAB® é uma opção utilizada para mostrar um exemplo de visualização da imagem 3D do volume poroso.

Etapa 2

A etapa 2 serve igualmente para a simulação da equação de referência, iniciar o caminho 1 ou 2, Figura 27. Nessa etapa é feita a escolha da equação de difusão para realizar o movimento Browniano.

Figura 27 – Fluxograma metodologia- Etapa 2



Fonte: Autoria própria (2023)

Os parâmetros para as simulações, a serem apresentados na Tabela 22, foram escolhidos após vários testes. O número de partículas (N) inicialmente adotado não conseguiu que o software escolhido terminasse as simulações por falta de memória do notebook utilizado. Com isso foi adotado um número suficiente que o software pudesse finalizar os cálculos das simulações. O resultado não é afetado apesar disso. A adoção das quantidades de passos P também foi por esse motivo e foi escolhido o que se adequasse ao tamanho do elemento representativo. O tempo de deslocamento t_d foi aleatório pensando no tamanho do elemento representativo.

O início da simulação foi a entrada dos seguintes parâmetros adotados com suas respectivas simbologias utilizadas no MATLAB®, conforme a Tabela 18.

Tabela 18 – Parâmetros adotados

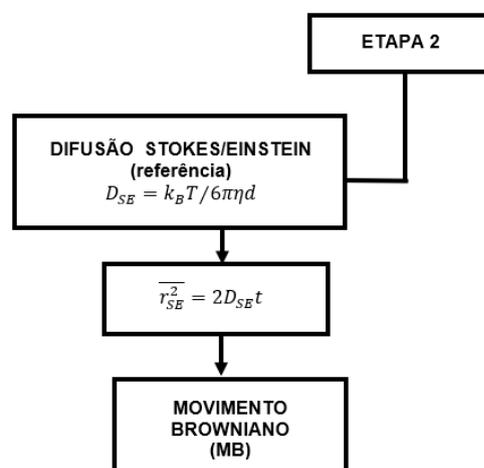
Quantidade de partículas de íon cloreto	$N (10,7,5)$
Quantidade de passos	P
Tempo de deslocamento	t_d em s
Temperatura	$T = 293$ em <i>kelvin</i>
Raio da partícula	$r_a = 1,0 \times 10^{-6}$ em m (estimado)
Constante de Boltzmann	$k_B = 1,38 \times 10^{-23}$,
Viscosidade do líquido (água)	$\eta = 1,0 \times 10^{-3}$ no SI (Pascal segundos).

Etapa 2.1

Essa etapa é a escolha da difusão a ser utilizada para dar início ao movimento Browniano. Uma escolha inicial foi a equação de referência de Stokes Einstein (VLAHOS *et al.*, 2008), Figura 28, conforme a equação 123, como entrada no algoritmo:

$$D_{SE} = \frac{k_B T}{6 \pi \eta d} \quad (123)$$

Figura 28 – Fluxograma metodologia- Etapa 2.1



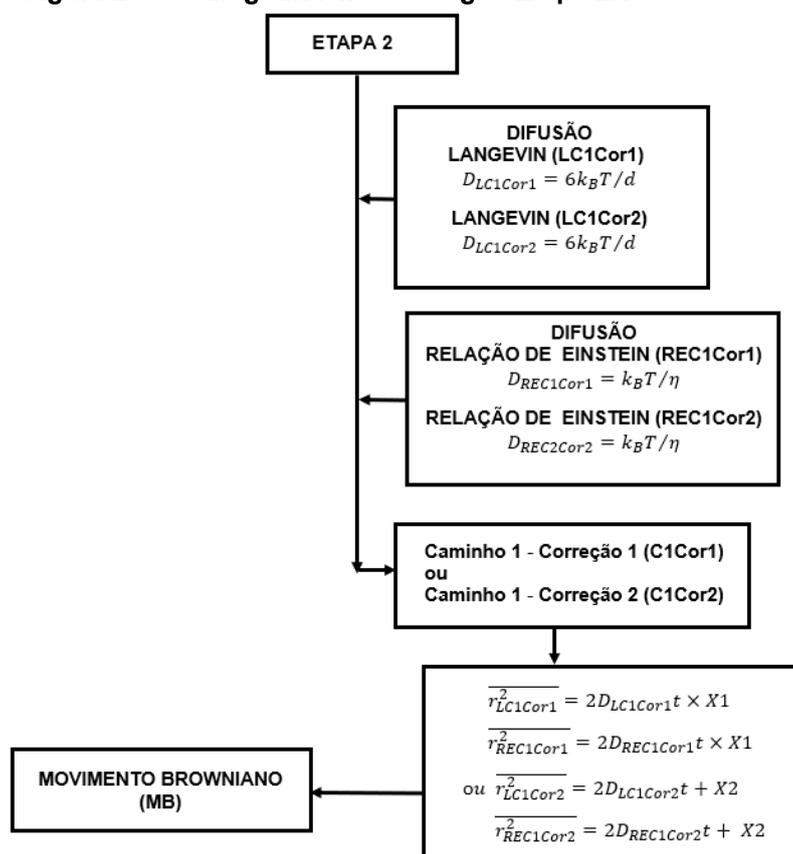
Fonte: Autoria própria (2023)

Essa equação 123 foi utilizada para determinar a média do deslocamento ao quadrado, ($\overline{r_{SE}^2} = 2 D_{SE} t$) na simulação usada como referência.

Etapa 2.2

O objetivo específico é sugerir novo modelo matemático para a determinação do coeficiente de difusão para iniciar o movimento Browniano. A pesquisa sugere duas alternativas encontradas e denominadas de caminho 1(C1) e caminho 2 (C2), conforme a Figura 29.

Figura 29 – Fluxograma metodologia- Etapa 2.1



Fonte: Autoria própria (2023)

No caminho 1(C1) a correção (Cor1 ou Cor2) é feita na equação do deslocamento ($\overline{r^2}$) com duas alternativas: $\overline{r_{REC1Cor1}^2}$, $\overline{r_{LC1Cor1}^2}$ ou $\overline{r_{REC1Cor2}^2}$, $\overline{r_{LC1Cor}^2}$, para então seguir com a simulação do movimento Browniano.

a) Caminho 1(C1)

Fazendo a simulação escolhendo o caminho 1 (C1), representado na Figura 29, a difusão (D) de entrada no algoritmo será a da relação de Einstein (POTTIER, 2010) conforme a equação 124:

$$D_{RE} = \frac{k_B T}{\eta} \quad (124)$$

ou de Langevin (VLAHOS *et al.*, 2008) conforme a equação 125:

$$D_L = \frac{6 k_B T}{d} \quad (125)$$

Essas equações na forma que sugeridas na literatura, apresentam difusão menor que a de Stokes-Einstein, usada como referência devido os parâmetros definidos nessas equações. Para que apresentem a difusão próximo da difusão usada como referência na pesquisa será necessária fazer correção nos parâmetros.

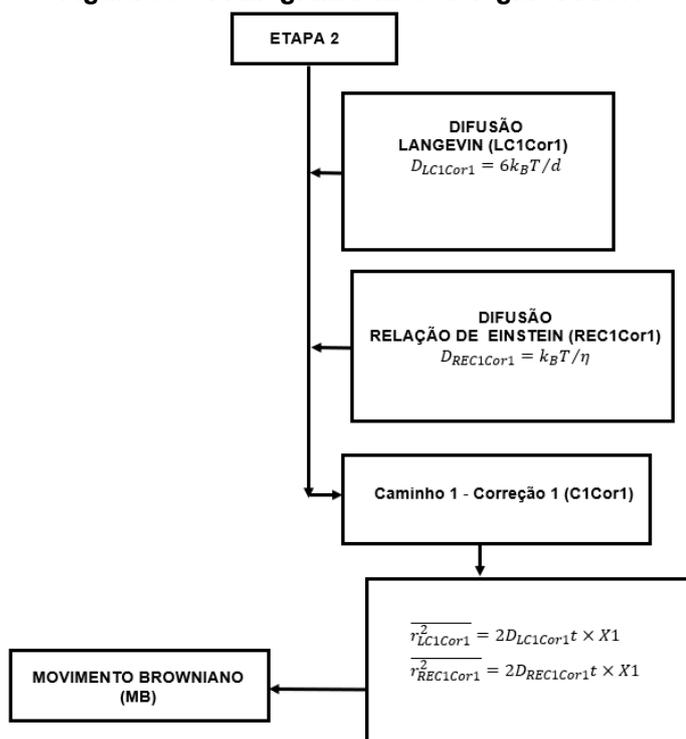
Caso não ocorra a correção, o valor numérico da tortuosidade será maior que a encontrada pela equação de Stokes-Einstein (SE). Significa que a difusão será mais lenta em relação a difusão definida pela simulação de referência.

Assim foi sugerido para o caminho 1 (C1) duas correções:

a.1. Caminho 1 - correção 1 (C1Cor1)

A correção ocorreu na equação do deslocamento $\overline{r_{C1Cor1}^2}$. Essa correção é feita considerando o valor do deslocamento de Stokes-Einstein $\overline{r_{SE}^2}$ representado por $\overline{r_{SE}^2} = 2D_{SE}t$, sendo dividido pelo deslocamento de Langevin $\overline{r_L^2}$ representado por $\overline{r_L^2} = 2D_L t$ ou dividido pelo deslocamento da relação de Einstein $\overline{r_{RE}^2}$, Figura 30

Figura 30 – Fluxograma metodologia- C1Cor1



Fonte: Autoria própria (2023)

A correção 1(Cor1) denominada de X1, será na obtida na forma da equação 126:

$$\frac{r_{SE}^2}{r_L^2} \text{ ou } \frac{r_{SE}^2}{r_{RE}^2} = X1 \rightarrow X1 \times r_L^2 \text{ ou } X1 \times r_{RE}^2 \cong r_{SE}^2 \quad (126)$$

Esse valor X1 é o fator de correção 1(Cor1), sendo multiplicado novamente ao deslocamento de Langevin ($\overline{r_L^2}$) ou multiplicado pelo deslocamento da relação de Einstein ($\overline{r_{SE}^2}$).

Assim o deslocamento de Langevin ($\overline{r_L^2}$) ou deslocamento da relação de Einstein ($\overline{r_{SE}^2}$) apresenta o valor do deslocamento próximo da referência calculado com a equação de Stokes-Einstein ($\overline{r_{SE}^2}$). Com isso pode seguir a simulação utilizando o movimento Browniano e determinar outros parâmetros.

Com essa correção o valor numérico da tortuosidade e da difusão permanecem na escala numérica próxima da obtida com a equação de referência (Stokes-Einstein). Assim o valor do deslocamento para a Equação de Langevin pela equação 127 e a relação de Einstein deverá ser representado pelas equações 128:

$$\overline{r_{LC1Cor1}^2} = 2D_{C1L} t \times X1 \quad (127)$$

$$\overline{r_{REC1Cor1}^2} = 2D_{C1RE} t \times X1 \quad (128)$$

A Tabela 19 mostra o valor para o fator de correção X1 encontrado na pesquisa e o valor da difusão e do deslocamento antes da correção X1.

Tabela 19 – Caminho 1 - Correção 1 (X1)

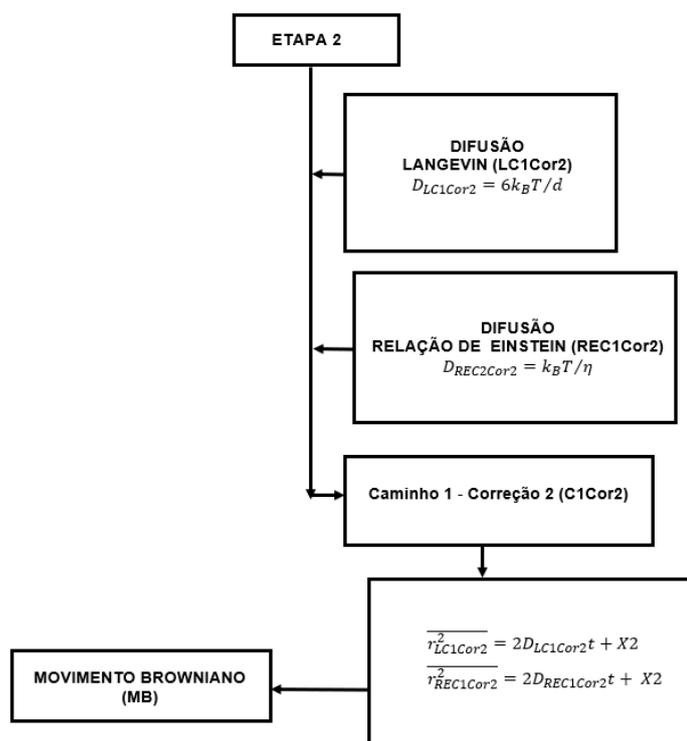
	Deslocamento (m^2)	Correção (X1)	Difusão (m^2/s)
Stokes-Einstein	$r_{SE}^2 = 0,926302396$		$2,1451 \times 10^{-13}$
Langevin	$r_L^2 = 0,311515008$	2,973540194	$2,46604 \times 10^{-14}$
Rel. Einstein	$r_{RE}^2 = 0,004021641$	230,329433	$4,0434 \times 10^{-18}$

A segunda sugestão para o caminho 1(Cor2) é:

a.2. Caminho 1 - correção 2 (C1Cor2)

A correção ocorreu na equação do deslocamento ($\overline{r_{C1Cor1}^2}$). Essa correção é feita considerando o valor do deslocamento de Stokes-Einstein ($\overline{r_{SE}^2}$) representado por $\overline{r_{SE}^2} = 2D_{SE}t$, sendo subtraído pelo deslocamento de Langevin ($\overline{r_L^2}$) representado por $\overline{r_L^2} = 2D_Lt$ ou subtraído pelo deslocamento da relação de Einstein ($\overline{r_{RE}^2}$), Figura 31.

Figura 31 – Fluxograma metodologia- C1Cor2



Fonte: Autoria própria (2023)

A correção 2(Cor2) denominada de $X2$, será na forma como se apresenta na equação 129:

$$r_{SE}^2 - r_L^2 \text{ ou } r_{SE}^2 - r_{RE}^2 = X2 \rightarrow X2 + r_L^2 \text{ ou } X2 + r_{RE}^2 \cong r_{SE}^2 \quad (129)$$

Esse valor $X2$ é o fator de correção 2(Cor2), sendo somado novamente ao deslocamento de Langevin ($\overline{r_L^2}$) ou deslocamento da relação de Einstein ($\overline{r_{SE}^2}$).

Assim o deslocamento de Langevin ($\overline{r_L^2}$) ou deslocamento da relação de Einstein ($\overline{r_{SE}^2}$) apresenta o valor do deslocamento próximo do obtido pelo

deslocamento com a equação de Stokes-Einstein ($\overline{r_{SE}^2}$). Com isso pode seguir a simulação utilizando o movimento Browniano e determinar outros parâmetros.

Com essa correção a tortuosidade a difusão permanece na escala numérica próxima da obtida com a equação de referência (Stokes-Einstein). Assim o valor do deslocamento para a Equação de Langevin ser representado pela equação 130 e o deslocamento para a relação de Einstein deverá ser representado pela equação 131:

$$\overline{r_{LC1Cor2}^2} = 2D_{C1L}t + X2 \quad (130)$$

$$\overline{r_{REC1Cor2}^2} = 2D_{C1RE} + X2 \quad (131)$$

A Tabela 20 mostra o fator de correção $X2$ encontrado para ser utilizado na simulação bem como a difusão e o deslocamento antes da correção $X2$.

Tabela 20 –Caminho 1- correção 2 (X2)

	Deslocamento (m^2)	Correção (X2)	Difusão (m^2/s)
Stokes-Einstein	$r_{SE}^2 = 0,926302396$		$2,1451 \times 10^{-13}$
Langevin	$r_L^2 = 0,3115150077$	0,614787389	$2,46604 \times 10^{-14}$
Rel. Einstein	$r_{RE}^2 = 0,004021641$	0,922281	$4,0434 \times 10^{-18}$

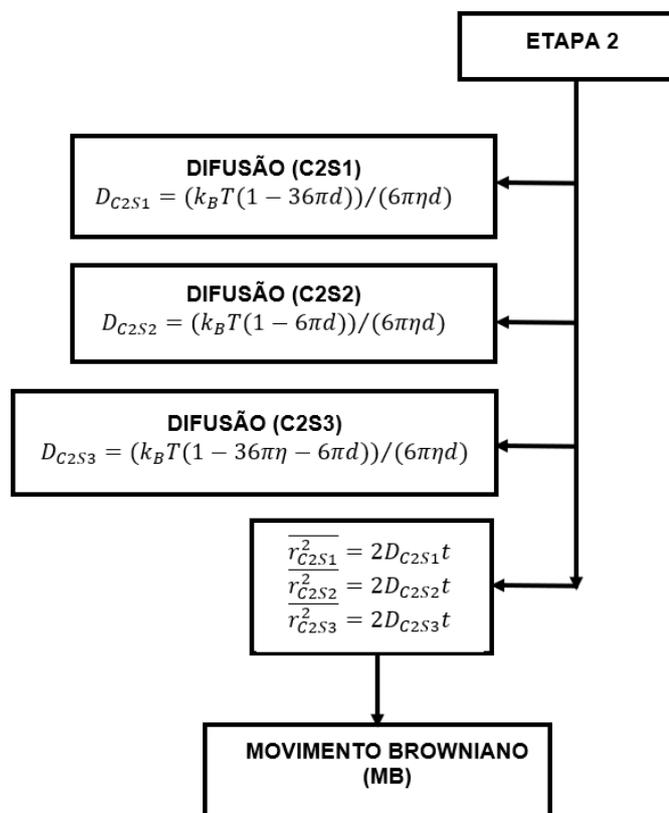
b) Caminho 2 (C2)

No caminho 2 (C2), representado na Figura 32, a sugestão é a modificação na equação de difusão (D) quando não for usada a equação de difusão de referência de Stokes Einstein (D_{SE}), equação 123, para o cálculo do deslocamento ($\overline{r^2}$) e não precisam de correção no deslocamento.

Assim ao usar a equação do deslocamento ($\overline{r^2} = 2Dt$), a equação de difusão (D), foi substituída pelas equações de difusão sugeridas no caminho2 (C2). As três sugestões das equações de difusão ($D_{C2S1}, D_{C2S2}, D_{C2S3}$) para o caminho 2(C2) são:

A equação de difusão utilizada como parâmetro de comparação continua sendo a de Stokes-Einstein (D_{SE}), Figura 32.

Figura 32 – Fluxograma metodologia- C2

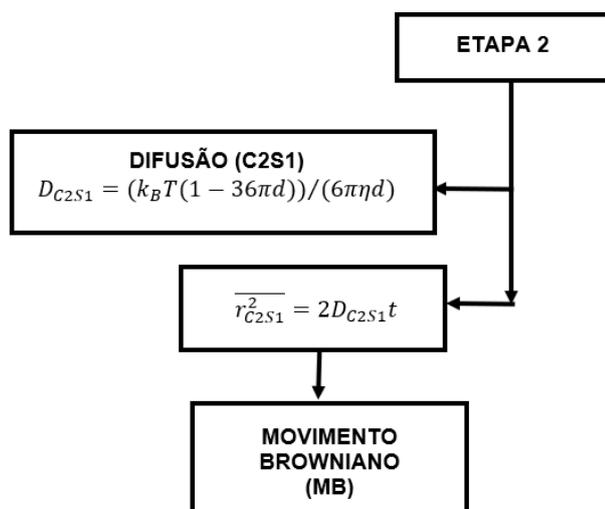


Fonte: Autoria própria (2023)

b.1. Caminho 2 - Sugestão 1 (C2S1), representado na Figura 33 ,sugere que usando a equação de difusão de Langevin (D_L) fazendo a subtração da equação de difusão Stokes-Einstein (D_{SE}) é determinada equação de difusão D_{C2S1} , representada pela equação 132:

$$D_{C2S1} = \frac{k_B T}{6\pi\eta d} - \frac{6k_B T}{d} = \frac{k_B T}{6\pi\eta d} - \frac{36\pi\eta k_B T}{6\pi\eta d} = \frac{k_B T(1-36\pi\eta)}{6\pi\eta d} \quad (132)$$

Figura 33 – Fluxograma metodologia- C2S1



Fonte: Autoria própria (2023)

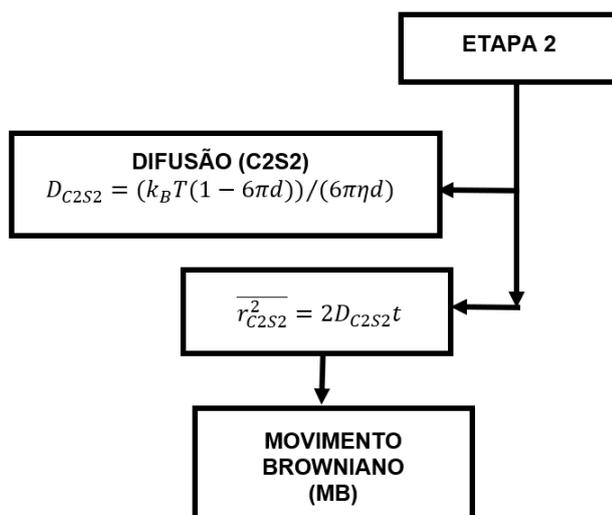
Levando em consideração apenas a equação de Langevin a difusão menor e tortuosidade maior, dificultando o transporte do íon cloreto. O efeito do raio (d) com a C2S1 é ignorado e o transporte do íon cloreto volta a ter uma tortuosidade menor, aumentando a difusão sendo os resultados próximos dos obtidos com os parâmetros de referência.

Assim para as simulações com essa equação de difusão (D_{C2S1}) seguirá a realização do movimento Browniano e encontrar os demais parâmetros pedidos na pesquisa. A tortuosidade agora se mantém em escala numérica próxima da referência, bem como a difusão devido o movimento Browniano.

b.2. Caminho 2 - Sugestão 2 (C2S2), representado na Figura 34, a sugestão ao usar a equação de difusão da relação de Einstein (D_{RE}), subtraindo da equação de difusão de Stokes-Einstein (D_{SE}), pode ser determinada equação de difusão D_{C2S2} , sendo representada pela equação 133:

$$D_{C2S2} = \frac{k_B T}{6 \pi \eta d} - \frac{k_B T}{\eta} = \frac{k_B T}{6 \pi \eta d} - \frac{k_B T 6 \pi d}{6 \pi \eta d} = \frac{k_B T (1 - 6 \pi d)}{6 \pi \eta d} \quad (133)$$

Figura 34 – Fluxograma metodologia- C2S2



Fonte: Autoria própria (2023)

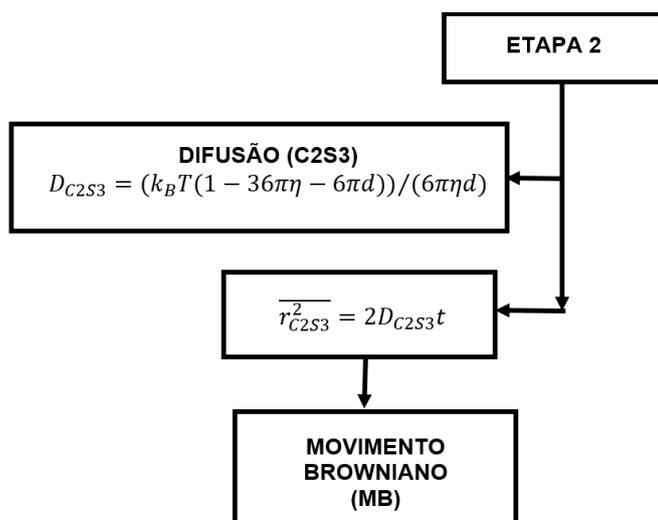
Levando em consideração apenas a equação da difusão da relação de Einstein a difusão menor e tortuosidade maior, dificultando o transporte do íon cloreto. O efeito da viscosidade (η) com a C2S2 é ignorado e o transporte do íon cloreto volta a ter uma tortuosidade menor, aumentando a difusão sendo os resultados próximos dos obtidos com os parâmetros de referência.

Assim para as simulações com essa equação de difusão (D_{C2S2}) seguirá a realização do movimento Browniano e encontrar os demais parâmetros pedidos na pesquisa. A tortuosidade agora se mantém em escala numérica próxima da referência, bem como a difusão devido o movimento Browniano.

b.3. Caminho 2 - Sugestão 3 (C2S3), representado na Figura 35, a sugestão ao utilizar a equação de difusão de Langevin (D_L) e a equação da difusão de relação de Einstein (D_{RE}), é a subtração com a equação de difusão da relação de Einstein (D_{RE}), resultando na equação de difusão D_{C2S3} , representada pela equação 134:

$$D_{C2S3} = \frac{k_B T}{6\pi\eta d} - \frac{6k_B T}{d} - \frac{k_B T}{\eta} = \frac{k_B T}{6\pi\eta d} - \frac{36\pi k_B T}{6\pi\eta d} - \frac{6\pi d k_B T}{6\pi\eta d} = \frac{k_B T(1-36\pi\eta-6\pi d)}{6\pi\eta d} \quad (134)$$

Figura 35 – Fluxograma metodologia- C2S3



Fonte: Autoria própria (2023)

Levando em consideração apenas a equação da difusão da relação de Einstein e de Langevin, a difusão menor e tortuosidade maior, dificultando o transporte do íon cloreto. O efeito da viscosidade (η), e o raio (d) com a C2S3 são ignorados, reduzidos, e o transporte do íon cloreto volta a ter uma tortuosidade menor, aumentando a difusão sendo os resultados próximos dos obtidos com os parâmetros de referência.

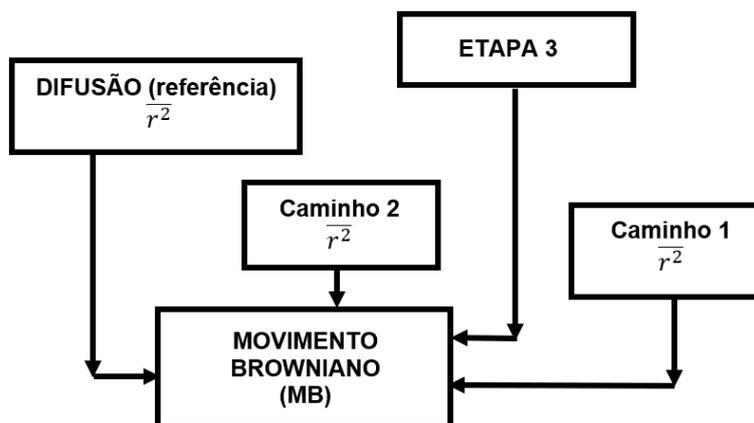
Assim para as simulações com essa equação de difusão (D_{C2S2}) seguirá a realização do movimento Browniano e encontrar os demais parâmetros pedidos na pesquisa. A tortuosidade agora se mantém em escala numérica próxima da referência, bem como a difusão devido o movimento Browniano.

Após ter escolhido uma das sugestões C2S1, C2S2, C2S3, seguir com o movimento Browniano fazendo o cálculo do deslocamento: $\overline{r_{C2S1}^2} = 2D_{C2S1} t$, $\overline{r_{C2S2}^2} = 2D_{C2S2} t$ ou $\overline{r_{C2S3}^2} = 2D_{C2S3} t$.

Etapa 3

Nessa etapa ocorre o movimento Browniano após adotar um dos caminhos citados: referência, C1 ou C2, conforme a Figura 36. O movimento Browniano utiliza a função randômica do MATLAB®, representada por $X = randn(sz_1, \dots, sz_N)$ e retorna uma matriz $sz_1 \times sz_N$ de números aleatórios onde sz_1, \dots, sz_N indica o tamanho de cada dimensão.

Figura 36 – Fluxograma metodologia- etapa3



Fonte: Autoria própria (2023)

Com a rotina desenvolvida da pesquisa de EPFL (2018) para 2D para o movimento Browniano, foram feitas alterações possibilitando a representação 3D dos parâmetros: difusão, a tortuosidade (tortuosidades nas direções (x,y,z), médias, incertezas, dados tabelados. Após a escolha da equação de referência e dos caminhos C1 ou C2 foi iniciado o movimento Browniano com o cálculo da média do deslocamento.

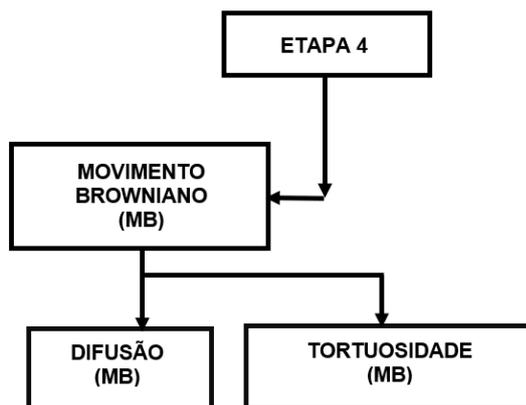
Quando a escolha for a equação de referência usar para calcular o deslocamento: $(\overline{r_{SE}^2} = 2 D_{SE} t)$. Quando for escolhido o caminho 1 (C1) utilizar uma das equações de deslocamento com as correções sugeridas: $\overline{r_{LC1Cor1}^2} = 2D_{LC1Cor1} t \times X1$, $\overline{r_{REC1Cor1}^2} = 2D_{REC1Cor1} t \times X1$, $\overline{r_{LC1Cor2}^2} = 2D_{LC1Cor2} t + X2$, $\overline{r_{REC1Cor2}^2} = 2D_{REC1Cor2} t + X2$.

Com a escolha do caminho 2 (C2) utilizar uma das equações de deslocamento com as difusões sugeridas: $\overline{r_{C2S1}^2} = 2D_{C2S1} t$, $\overline{r_{C2S2}^2} = 2D_{C2S2} t$ ou $\overline{r_{C2S3}^2} = 2D_{C2S3} t$.

Etapa 4

Na etapa 4 é a definição do coeficiente de difusão (D) e tortuosidade (Tor). O cálculo da média do deslocamento ao quadrado ($\overline{r^2}$), foi calculado com a equação específica devido o caminho adotado para o deslocamento: $\overline{r^2} = 2Dt$.

Figura 37 – Fluxograma metodologia- etapa4



Fonte: Autoria própria (2023)

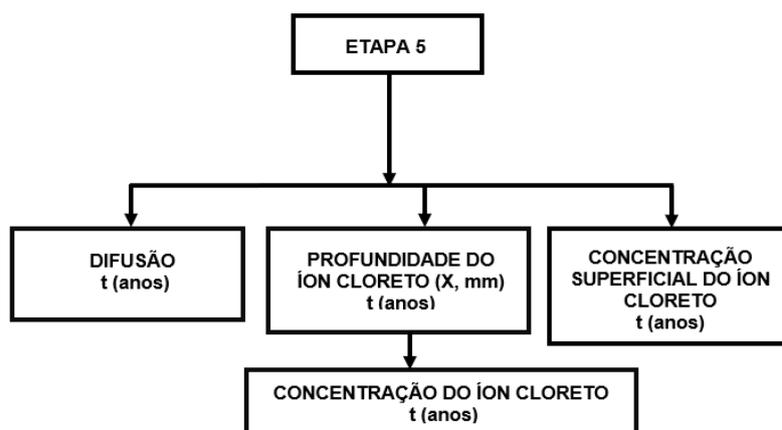
O deslocamento tridimensional devido ao movimento Browniano foi determinado com: $\bar{r}^2 = 2 D_{MB}t + 2 D_{MB}t + 2 D_{MB}t$ e a média da difusão com $D_{MB} = 6 \bar{r}^2 t$.

O algoritmo foi implementado para determinar o valor da tortuosidade ($Tort$) e a tortuosidade nas direções x, y, z ($TortDX, TortDY, TortDZ$), utilizando os seguintes comandos da seguinte forma: $\bar{r} = 6(1/\bar{r}^2)$.

Etapa 5

Após definido o deslocamento (\bar{r}^2), a difusão (D) e as tortuosidades ($Tort$), o algoritmo foi implementado para calcular outros parâmetros. Foi determinado a previsão da difusão variando no tempo $D(t)$ até 10 anos, a concentração superficial (C_s), a concentração (C), a profundidade de ataque de íon cloreto (X) devido ao movimento Browniano, Figura 38.

Figura 38 – Fluxograma metodologia- etapa 5



Fonte: Autoria própria (2023)

Foram considerados os seguintes valores para os parâmetros usados nessa etapa:

- Média da difusão obtida pelo movimento Browniano foi convertida de m^2/s para mm^2/ano usando a correção : $2 \times (\bar{D} \times 3,15 \times 10^{13})^2$.
- As constantes: $m'_1 = 0,245$, $m'_{11} = 0,49$ $m' = 0,51$, $n' = 0,47$ consideradas para zona “*SPRAY ZONE*” de exposição do concreto (COSTA e APPLETON, 1999a; COSTA e APPLETON, 1999b). Foi adotada “*SPRAY ZONE*” por ser a região de maior incidência.
- O tempo de exposição de até $t = 10$ anos.

Para a difusão variando no tempo $D(t)$ foi definida com a equação 135:

$$D(t) = D_1 t^{-m'} \quad (135)$$

O valor de D_1 será o encontrado na simulação do movimento Browniano concentração superficial (C_s) do clorídrico na superfície em relação ao tempo calculado com a equação 136:

$$C_s(t) = C_1 t^{n'} \quad (136)$$

A concentração (C) do clorídrico na superfície em relação ao tempo determinado pela equação 137:

$$C(x, t) = C_1 t^{n'} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{D_1 t^{1-m'_1}}} \right) \right] \quad (137)$$

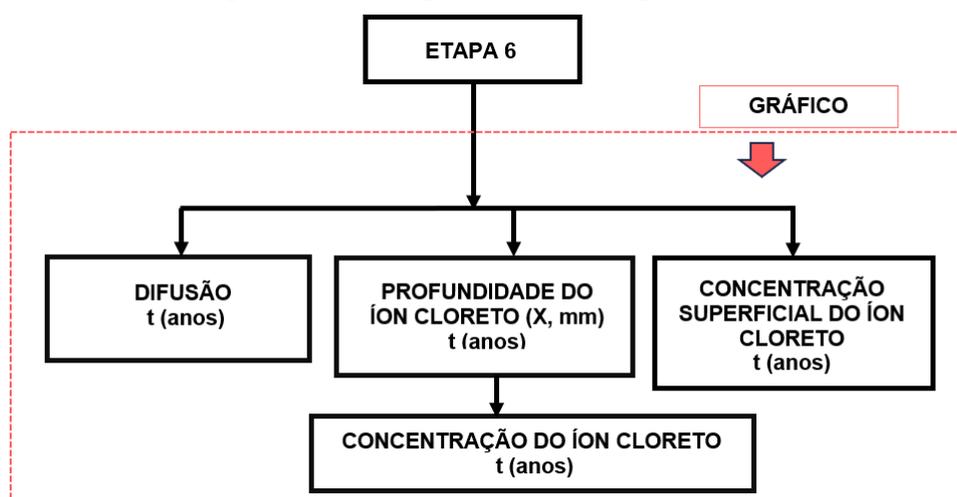
A previsão de parâmetros como a profundidade de ataque de íon cloreto (X) em relação ao tempo calculado pela equação 138:

$$x_{cr} = 2\sqrt{D_2 t^{(1-m'_{11}/2)}} \quad (138)$$

Etapa 6

Essa etapa é a da representação gráfica do valor a difusão (D), as tortuosidades ($Tort$) devido o movimento Browniano. Com o Excel foi representado o gráfico da difusão $D(t)$ em função do tempo até 10 anos, a concentração superficial (C_s), a concentração (C), a profundidade de ataque de íon cloreto (X), conforme a Figura 39.

Figura 39 – Fluxograma metodologia- etapa 5

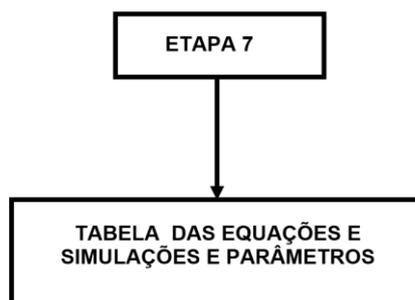


Fonte: Autoria própria (2023)

Etapa 7

A Tabela 21 apresenta o número das equações obtidas na pesquisa para as simulações como representado na Figura 40.

Figura 40 – Fluxograma metodologia- etapa 7



Fonte: Autoria própria (2023)

Tabela 21 – Número de equações, simulações.

	EQUAÇÕES DIFUSÃO	Quantidade de Simulações
1	DIFUSÃO STOKES/EINSTEIN $D_{SE} = k_B T / 6\pi\eta d$ (VLAHOS, 2008)	
2	DIFUSÃO LANGEVIN (LC1Cor1) $D_{LC1Cor1} = 6k_B T / d$ (VLAHOS <i>et al.</i> , 2008)	
3	DIFUSÃO LANGEVIN (LC1Cor2) $D_{LC1Cor2} = 6k_B T / d$ (VLAHOS <i>et al.</i> , 2008)	
4	DIFUSÃO RELAÇÃO DE EINSTEIN (REC1Cor1) $D_{REC1Cor1} = k_B T / \eta$ (POTTIER, 2010)	SIM 1,2,3, 4,5,6,7,8,9
5	DIFUSÃO RELAÇÃO DE EINSTEIN (REC1Cor2) $D_{REC1Cor2} = k_B T / \eta$ (POTTIER, 2010)	
6	DIFUSÃO (C2S1) $D_{C2S1} = (k_B T (1 - 36\pi d)) / (6\pi\eta d)$	
7	DIFUSÃO (C2S2) $D_{C2S2} = (k_B T (1 - 6\pi d)) / (6\pi\eta d)$	
8	DIFUSÃO (C2S3) $D_{C2S3} = (k_B T (1 - 36\pi\eta - 6\pi d)) / (6\pi\eta d)$	

Considerando as equações numeradas na Tabela 21 como sendo:

- 1- STOKES/EINSTEIN,
- 2- LC1Cor1- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 1,
- 3- LC1Cor2- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 2,
- 4- REC1Cor1 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho 1 Correção 1,
- 5- REC1Cor2 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho1 Correção 2,
- 6- C2S1 - Caminho 2, sugestão 1,
- 7- C2S2 - Caminho 2 ,sugestão 2,
- 8- C2S3 - Caminho 2, sugestão 3.

A Tabela 22 especifica a quantidade de simulações realizadas em cada equação da Tabela 21. A variação nos parâmetros foi decidida após várias simulações da pesquisa envolvendo até que parâmetro ideal poderia ser armazenado na memória do notebook utilizado.

Tabela 22 – Número de equações e parâmetros

Simulações	Ponto inicial (x, y, z)	Parâmetros/Constantes
SIM 1, 4, 7	63x68x70	$N=10, P=1 \times 10^7, \tau= 2 \times 10^{12}, k_B = 1,38 \times 10^{-23}$
SIM 2, 5, 8	65x65x68	$N=7, P=1 \times 10^7, \tau= 2 \times 10^{12}, k_B = 1,38 \times 10^{-23}$
SIM 3, 6, 9	68x55x70	$N=5, P=1 \times 10^7, \tau= 2 \times 10^{12}, k_B = 1,38 \times 10^{-23}$
TOTAL= 9		

Para cada equação simulada como mostra a Tabela 21, foram feitas 3 variações para o ponto de início do movimento Browniano com 3 variações na quantidade de partículas (N) totalizadas 9 simulações por equações. Considerando variações em alguns parâmetros conforme detalhado na Tabela 22.

O número de variações das (N) partículas adotadas na Tabela 22, foi após várias simulações testes com quantidades maiores acarretar ao computador utilizado não comportar a capacidade de memória necessária. O resultado não seria afetado com (N) partículas menores.

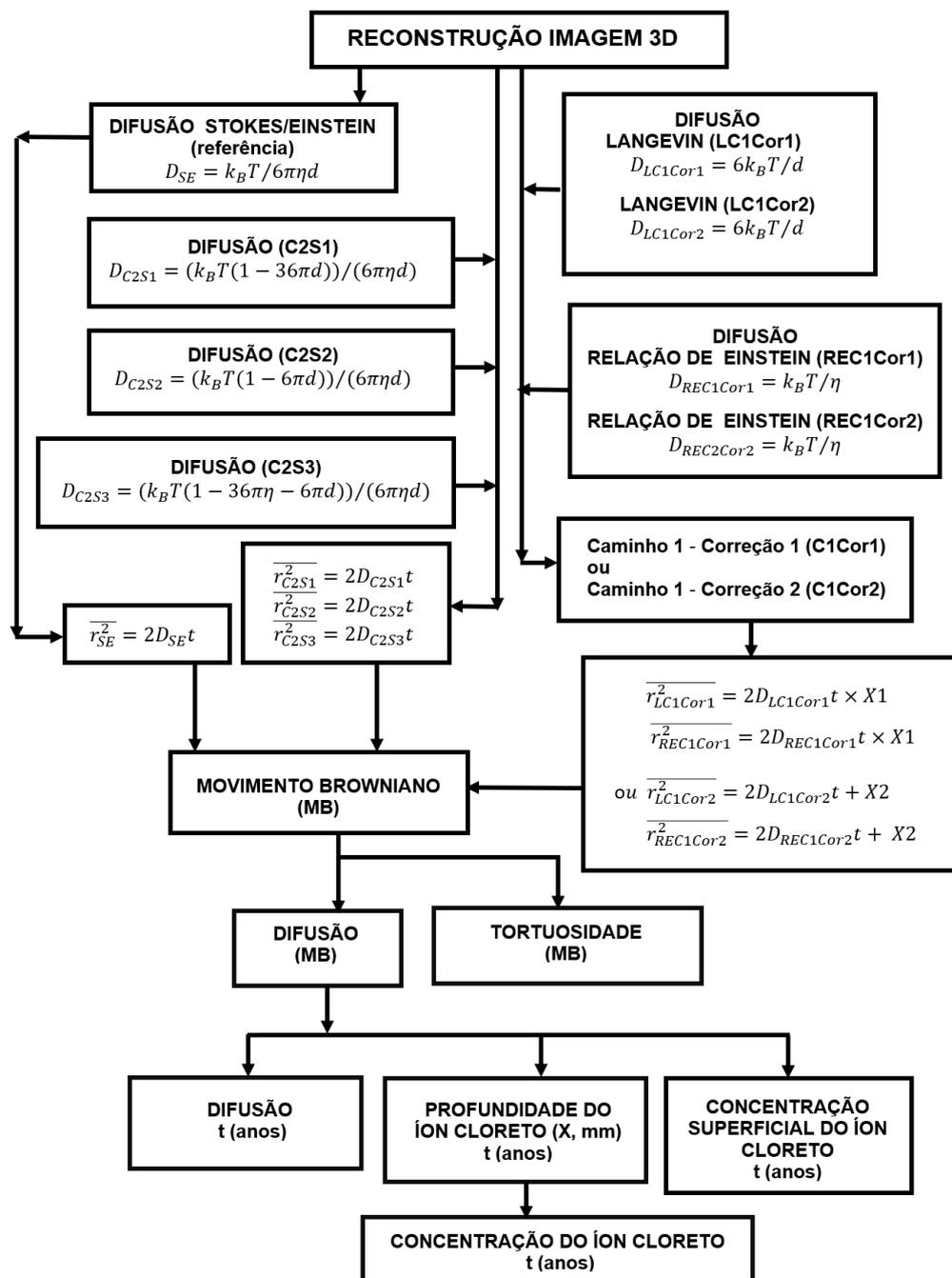
A quantidade de passos (P) e o tempo (τ) foi adequado ao elemento e que não afetasse a necessidade de memória do computador utilizado.

Sendo 8 equações, Tabela 21, foram realizadas 72 simulações que fazem parte da pesquisa. Foram realizadas outras simulações iniciais que foram descartadas durante o desenvolvimento da pesquisa devido ao número de parâmetros adotados, Tabela 22, apresentar melhores resultados e não comprometer a memória do computador utilizado para devidos cálculos.

A simulação com o aplicativo TauFactor, que utiliza o método FDM (Tabela 14), foi utilizada para comparativo para os valores da tortuosidade encontrados com o uso do MATLAB® na pesquisa

A metodologia desenvolvida será representada nas etapas como representado no fluxograma geral na Figura 41.

Figura 41 – Fluxograma geral da metodologia



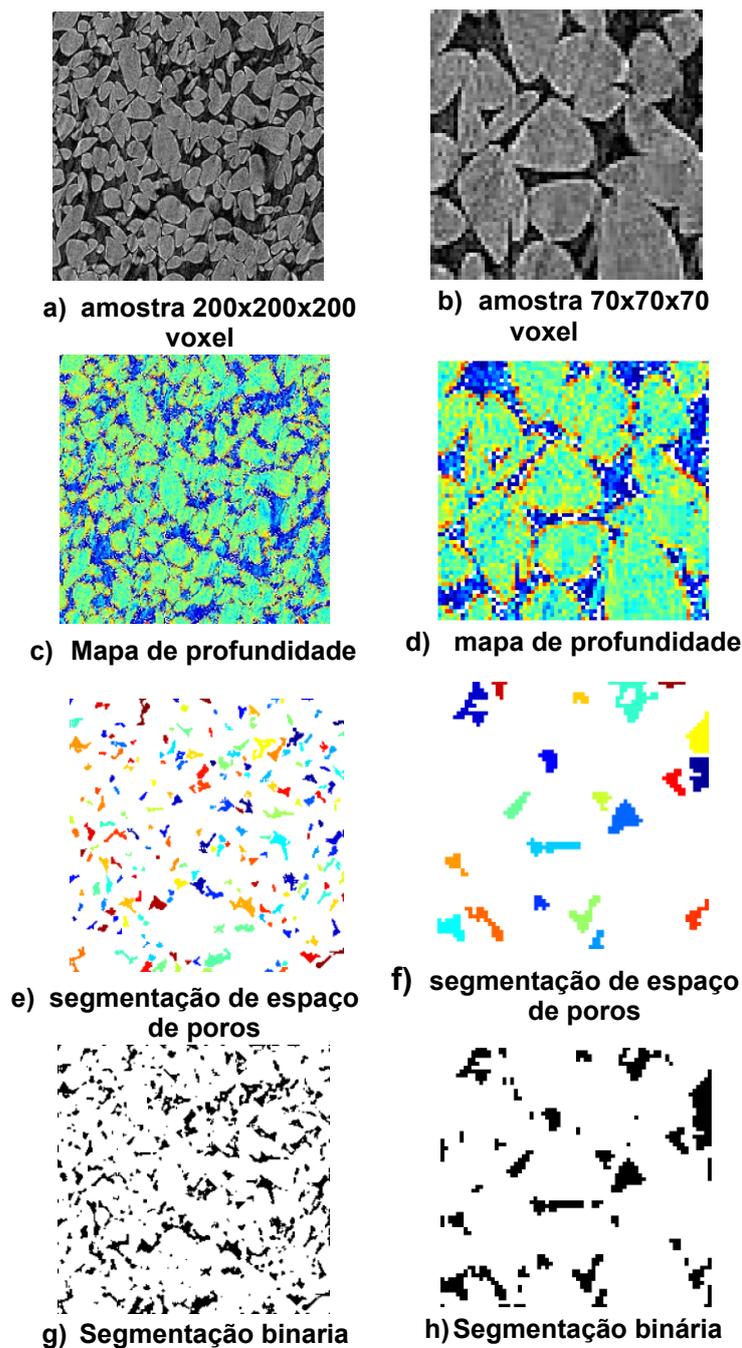
Fonte: Autoria própria (2023)

Através dessas etapas discutidas anteriormente, está representada a metodologia adotada para a pesquisa.

7 RESULTADOS

Iniciando as pesquisas com imagens e usando algoritmos no MATLAB® (autor) foram testados tipos de filtragem, binarização e outros necessários para a obtenção de parâmetros para o estudo das redes porosas. Figura 42 (em voxel), representando as fases de filtragem.

Figura 42 – Filtragem



Fonte: Adaptado (WALLE e JANSSEN, 2017)

A Figura 42, usada na pesquisa (WALLE e JANSSEN, 2017), foi recortada e ampliada em determinada região e denominada de Figura 42b. Essa ampliação serve para obter mais detalhes com relação a região porosa que será utilizada para fazer as simulações e posteriormente obter o volume reconstruído (3D).

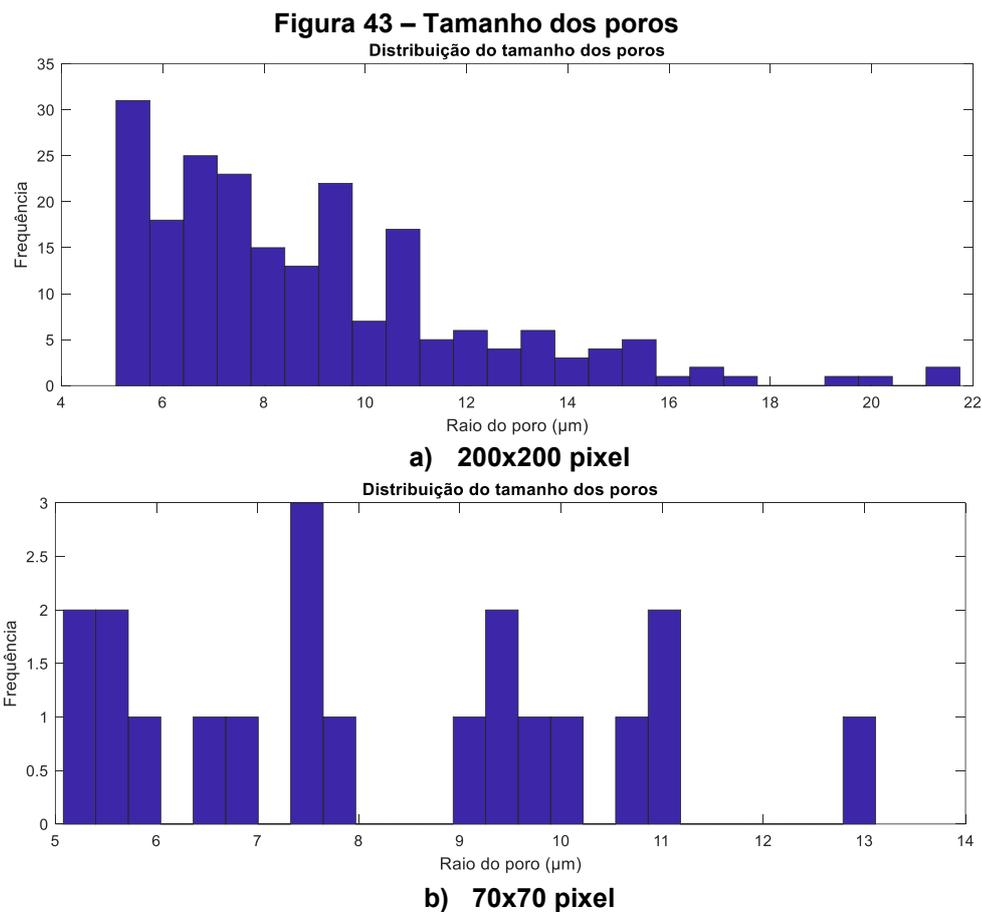
Na Figura 42a, 42b está representada a imagem original ampliada onde em preto é a representação da rede porosa e em branco a representação da parte sólida usando resolução 3, Tabela 16, para os tamanhos 200x200 e 70x70 pixel. A Figura 42c e 42d a representação da rede porosa aparece em azul escuro. Na Figura 42e e 42f representa a segmentação binária do espaço poroso, na filtragem a rede porosa aparece colorida indicando cada cor o diâmetro do raio do poro. Nas figuras 42g e 42h a representação da segmentação binária onde a parte sólida fica mais visível em branco e a rede porosa em preto

A Tabela 23 mostra o resultado da porosidade, do raio médio e desvio padrão do raio do poro para a imagem da região submetida ao estudo, mostrada na Figura 26, desenvolvida pela rotina do Matlab®, em relação ao tamanho do voxel.

Tabela 23 – Porosidade e tamanho da imagem

	200x200 pixel	70x70 pixel
Porosidade	14,8 %	12,47 %
Raio médio do poro	8,9893 μm	8,2428 μm
Desvio padrão do raio do poro	3,3114	2,2861

Na Tabela 23, a porosidade, o raio médio e o desvio padrão com a diminuiu com diminuição do tamanho da imagem. Isso pode ser visto também na Figura 43. A Figura 43 representa a distribuição Gaussiana para o tamanho dos poros da imagem da Figura 42.

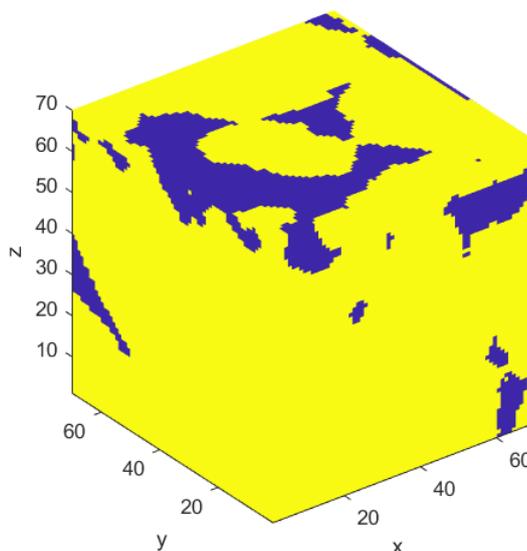


Fonte: Autoria própria (2022)

Na Figura 44a, a distribuição Gaussiana para a imagem de 200x200 pixel mostra a maior frequência de raios em torno de 5, 7, 9, 11 microns. Na figura 44b a frequência maior é de raios em torno de 6,7, 9,10,11,13 microns.

Para a modelagem do volume de agregado e rede porosa inicialmente foram utilizadas imagens da Figura 26 (WALLE e JANSSEN, 2017) no tamanho de 200x200x200 voxel. Posteriormente adotado o tamanho de 70x70x70 voxel e 20x20x20 voxel nas simulações. A determinação da tortuosidade foi através do MATLAB® e através da rotina do TauFactor usando a reconstrução 3D da Figura 30b. O coeficiente de difusão através do movimento Browniano também usou a Figura 30b por apresentar mais detalhe sobre a região porosa.

A Figura 44 representa a reconstrução tridimensional do elemento representativo de volume da Figura 30b.

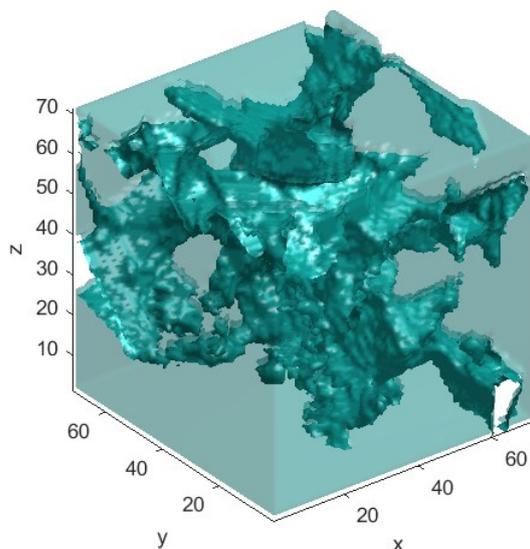
Figura 44 – Poros + parte sólida - 3D (em voxel)

Fonte: Autoria própria (2022)

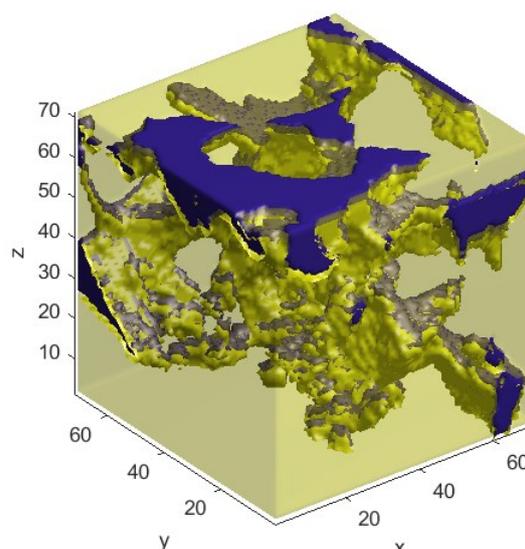
Na Figura 44, o que se pretende mostrar é a representação do meio poroso que está em azul e a parte sólida em amarelo. Essa reconstrução foi devida as imagens fatiadas em 2D de um elemento sólido 3D escaneado por micro-CT. A representação 3D foi desenvolvida com o MATLAB® adaptado de Arash Rabbani (2020b). Será adotado o tamanho de 70x70x70 voxel para padronizar com os dados obtidos no Taufactor e comparar com dados tortuosidade.

A Figura 45 (Da SILVA, 2023b) representa a reconstrução 3D da região porosa e da parte sólida do material poroso com a rotina de programação de Arash Rabbani (2020b) no Matlab®. Foi adaptado o tamanho desse elemento na rotina e a escolha das cores de representações, bem como os pontos de início e término e outros parâmetros necessários para as simulações do movimento Browniano e que será apresentado na sequência dos resultados da pesquisa.

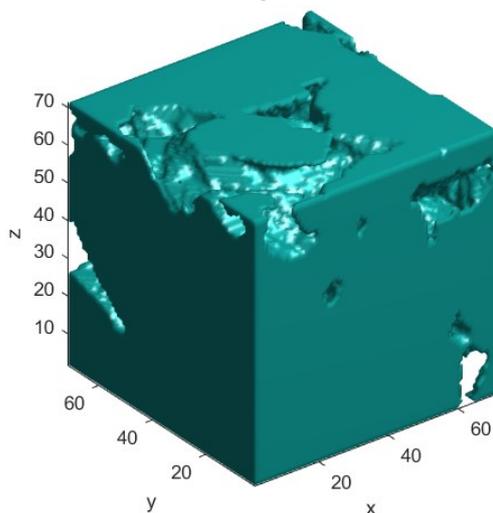
Figura 45 – Rede Porosa e parte sólida - 3D (em voxel)



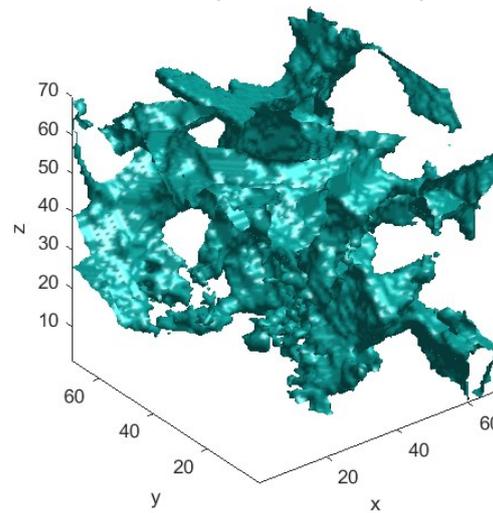
a) Parte sólida (azul claro) + rede porosa



b) Parte sólida (verde claro) + rede porosa (amarelo escuro)



c) Parte sólida (azul)



d) rede porosa (azul)

Fonte: Autoria própria (2022)

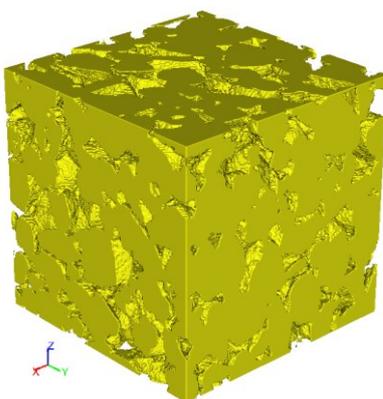
Na Figura 45 são mostradas as diferenças de representação gráfica devido a filtragem utilizada. Observa-se através de cores a representação da parte sólida do material poroso e a rede porosa nas Figuras 45a, 45b, 45c e 45d.

Na Figura 45a em azul mais claro está representado a parte sólida do elemento representativo de volume e em azul mais escuro a rede porosa. Na Figura 45b a rede porosa aparece em amarelo escuro e em azul a sua face superior, face lateral direita e parte face esquerda. Na Figura 45b a parte sólida está representada pela cor amarela clara. Na Figura 45c pode ser vista somente a representação da

parte sólida em azul. Na Figura 45d em azul aparece somente a representação da rede porosa.

A Figura 46 representa a reconstrução 3D apenas com a parte sólida em amarelo obtida *Volume Viewer* para o tamanho de 200x200x200 voxel. Essa representação foi feita para testar como se comporta a reconstrução 3D por esse aplicativo.

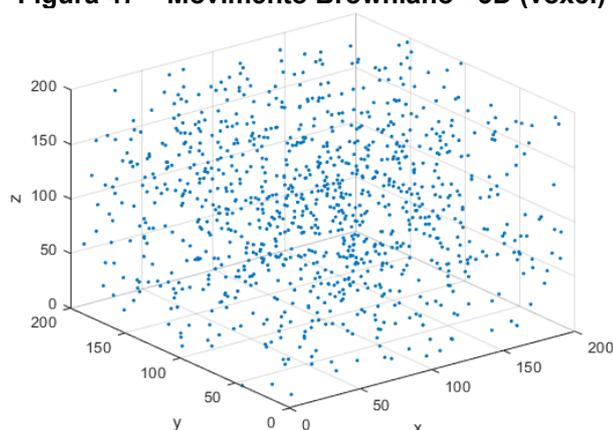
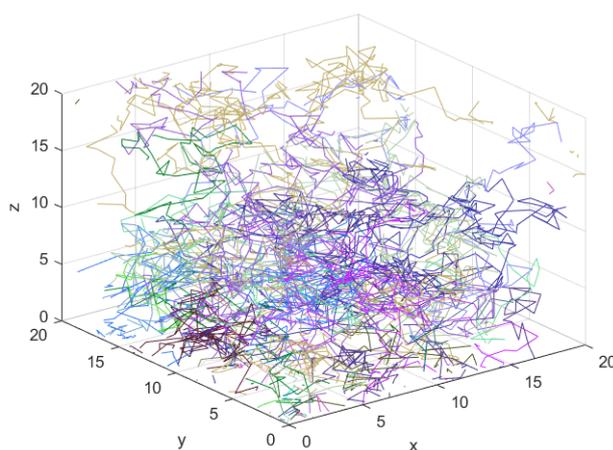
Figura 46 – Agregados (Volume Viewer) - 3D (em voxel)



Fonte: Autoria própria (2022)

Posteriormente aos testes de modelagem do elemento representativo de volume conforme visto nas figuras anteriores, iniciou-se as modelagens do movimento Browniano. Foram testados somente o movimento Browniano em partículas simples nas rotinas de programação.

A Figura 47 apresenta exemplo da modelagem do movimento Browniano em 3D.

Figura 47 – Movimento Browniano - 3D (voxel)**a) Movimento Browniano 300 partículas****b) Movimento Browniano 30 partículas**

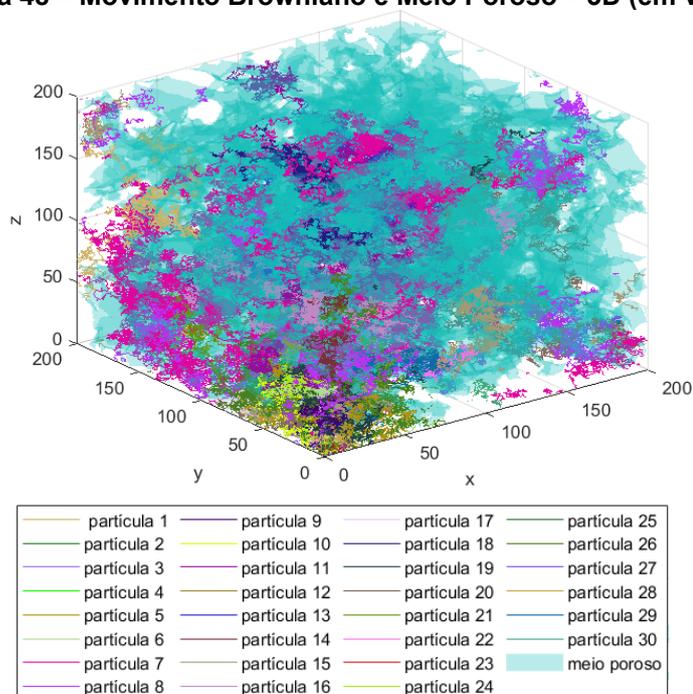
Fonte: Autoria própria (2022)

A Figura 47a é a modelagem em 3D do comportamento aleatório das 300 partículas em 200x200x200 voxel. A Figura 47b representa o movimento Browniano no elemento representativo de volume, com a utilização de 30 partículas para um tamanho de 20x20x20 voxel. O deslocamento de cada partícula está representado por uma cor diferente para melhor entendimento do caminho percorrido por cada partícula. O ponto inicial das 30 partículas foi a origem. Pode ser alterada essa posição inicial bem como o tempo e o tamanho dos passos. Com essa simulação já conseguiu-se perceber a importância de adequar os parâmetros tempo, passos, números de partículas e tamanho do elemento para que a simulação atinja o elemento, o poro ou uma região de interesse específica que se pretende explorar.

A Figura 48 apresenta o movimento Browniano das 30 partículas, aparecendo em linhas finas coloridas, o elemento e a rede porosa representada pela

cor azul clara. Nessa simulação o ponto inicial do movimento Browniano foi a origem. Foram feitas simulações alterando o ponto inicial do movimento Browniano no elemento.

Figura 48 – Movimento Browniano e Meio Poroso – 3D (em voxel)



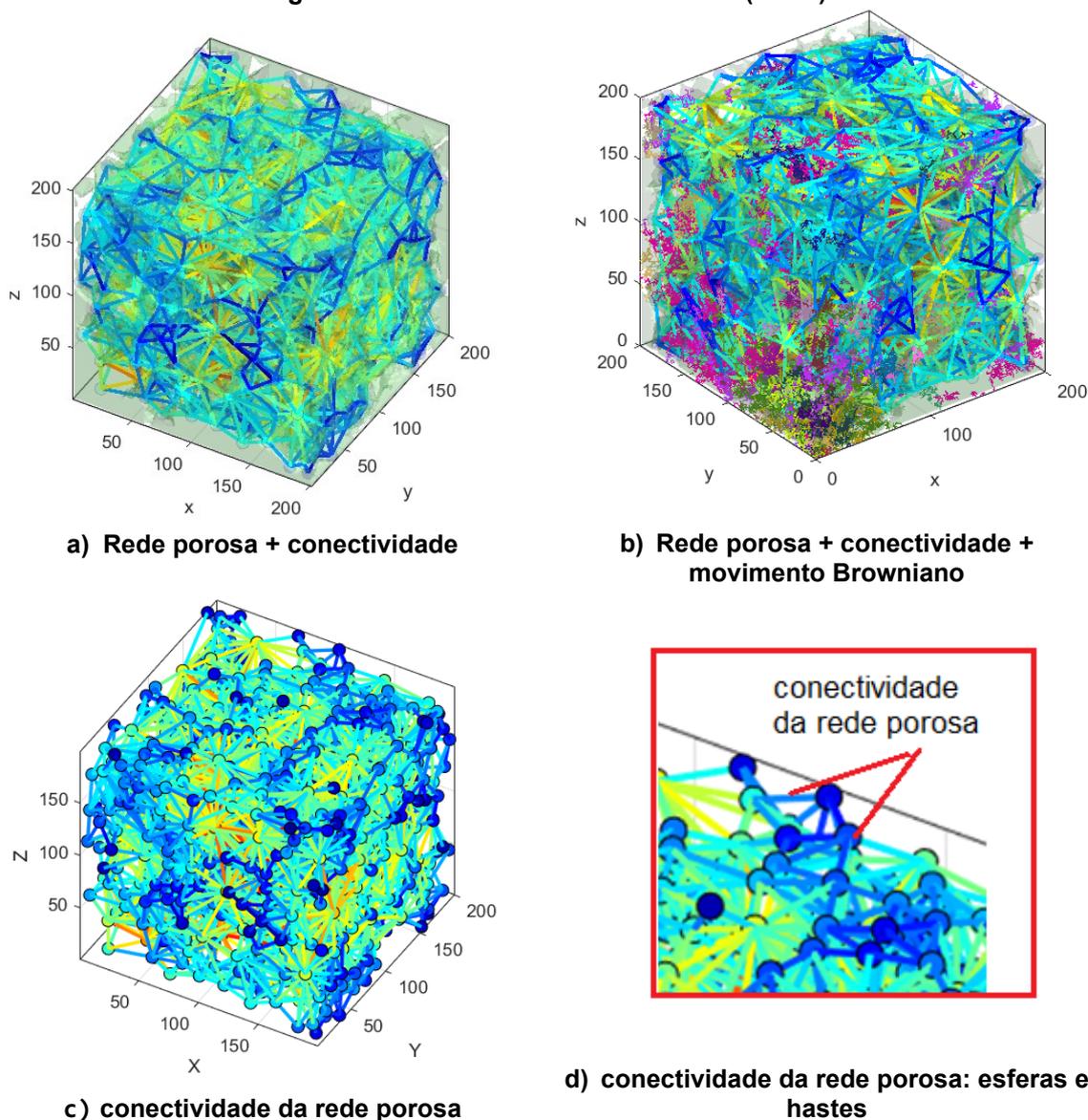
Fonte: Autoria própria (2022)

Para as simulações foram testados valores diferentes para os parâmetros: números de partículas, tempo de deslocamento e quantidades de passos de deslocamentos, tamanho do elemento representativo de volume, coordenada de poros.

A testagem e a limitação dessas alterações nos parâmetros foi para entender o comportamento das simulações e até que valor poderia ser trabalhado sem que comprometesse a memória do computador utilizado. As simulações ajudaram na definição dos valores a serem adotados para que esses parâmetros pudessem resultar em coeficientes de difusão confiáveis quando comparados com o de referência que foi a equação 41 de Stokes-Einstein. Foram utilizadas rotinas de código aberto adaptado de Arash Rabbani (2020b) e Rabbani e Babaei (2019) com adaptações em relação ao tamanho, representação do movimento Browniano na rede porosa para que representasse os resultados esperados. A Figura 49 representa a reconstrução em 3D do elemento representativo de volume agregado,

a rede porosa e a conectividade da rede porosa para um tamanho de 200x200x200 voxel.

Figura 49 – Movimento Browniano - 3D (voxel)



Fonte: Autoria própria (2022)

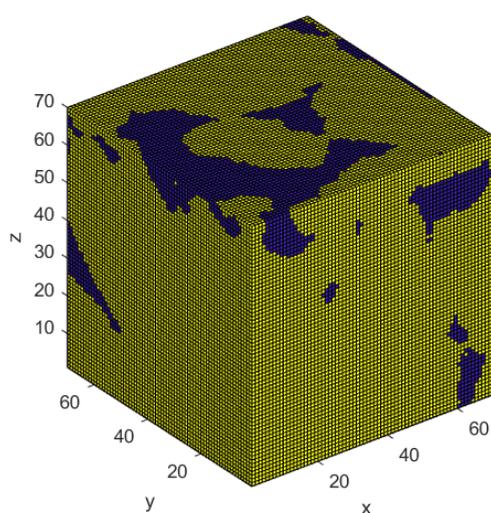
A Figura 49a mostra a conectividade da rede porosa representada na forma de hastes e a rede porosa em azul claro. As cores que a conectividade da rede porosa está apresentando representam o tamanho do diâmetro do poro na região.

A Figura 49b representando a conectividade da rede porosa em forma de hastes e a rede porosa em azul claro. A representação da conectividade da rede porosa mostra o centro dos poros apresentando círculos de diâmetros de tamanhos

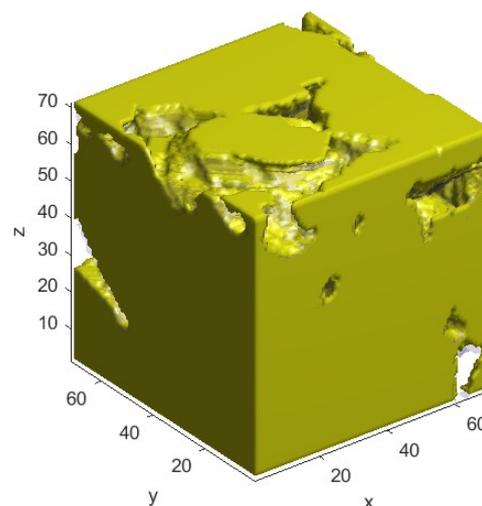
diversos representados coloridos e unidos a hastes para a conexão. A Figura 49d apresenta uma explicação dessa conectividade e sua forma de representação.

A Figura 50 apresenta a reconstrução 3D para o tamanho do elemento representativo de volume de 70x70x70 voxel.

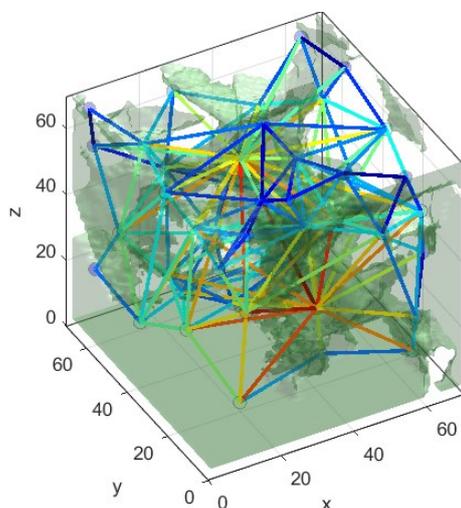
Figura 50 – REV - 3D (voxel)



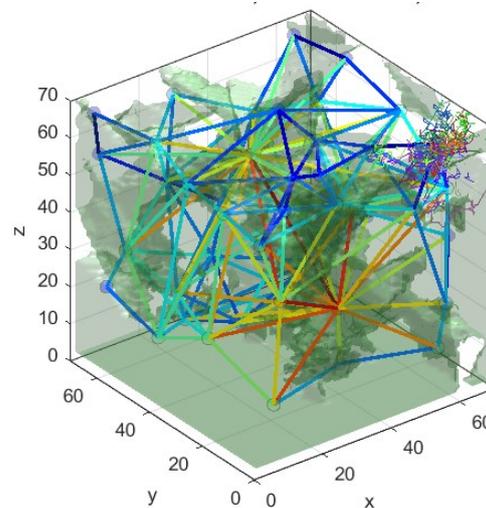
a) Parte sólida + rede porosa



b) Parte sólida



c) rede de conectividade porosa + parte sólida + rede porosa



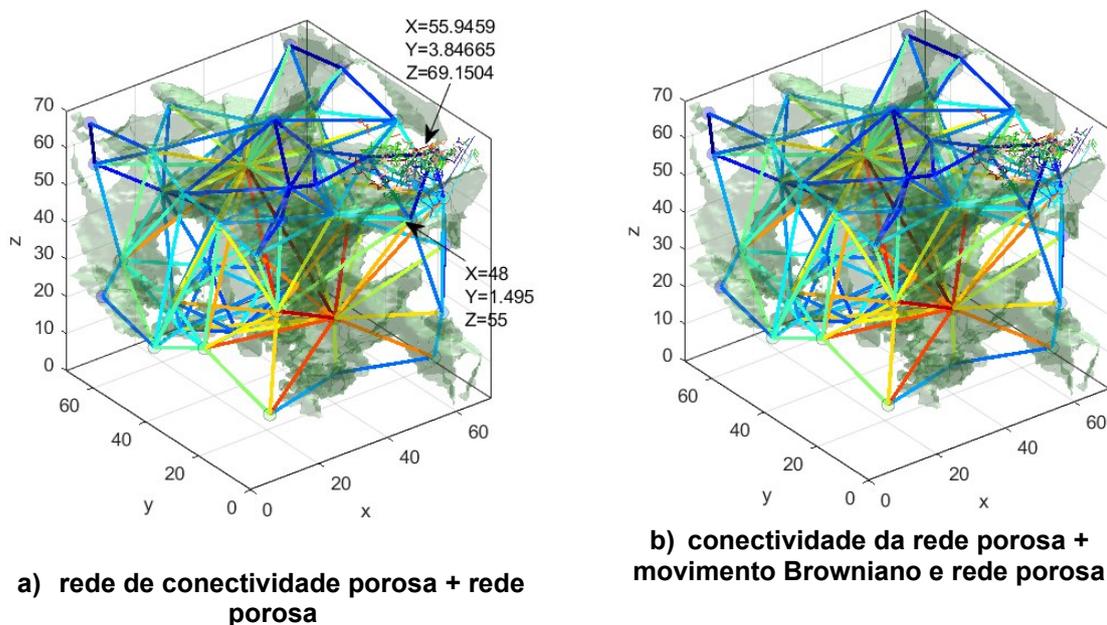
d) rede de conectividade dos poros + movimento Browniano + rede porosa + parte sólida

Fonte: Autoria própria (2022)

Na Figura 50a aparece o elemento reconstruído 3D com a representação da parte sólida em amarelo e rede porosa em azul. Devido aos comandos adotados na rotina de programação a aparência do volume 3D tem esse aspecto. Bastaria uma filtragem para deixar com aspecto mais liso e de cor homogênea. Ficou essa representação para mostrar como é o aspecto dessa resolução adotada. Na Figura 50b somente a representação da parte sólida do elemento na cor amarela. Na Figura 50c está representada a rede de conectividade porosa, a parte sólida em cinza claro, a rede porosa também em cinza escuro escuro no centro do elemento. A Figura 50d, além do descrito na Figura 50c aparece a representação do movimento Browniano para 30 partículas no lado direito superior pois foi adotado como início do movimento Browniano um ponto nessa região.

A Figura 51 representa em 3D a rede de conexões porosa colorida devido a representação dos raios, cada cor representa um tamanho de raio em microns, e o movimento Browniano representado por linhas coloridas indicando cada cor uma partícula de íon cloreto

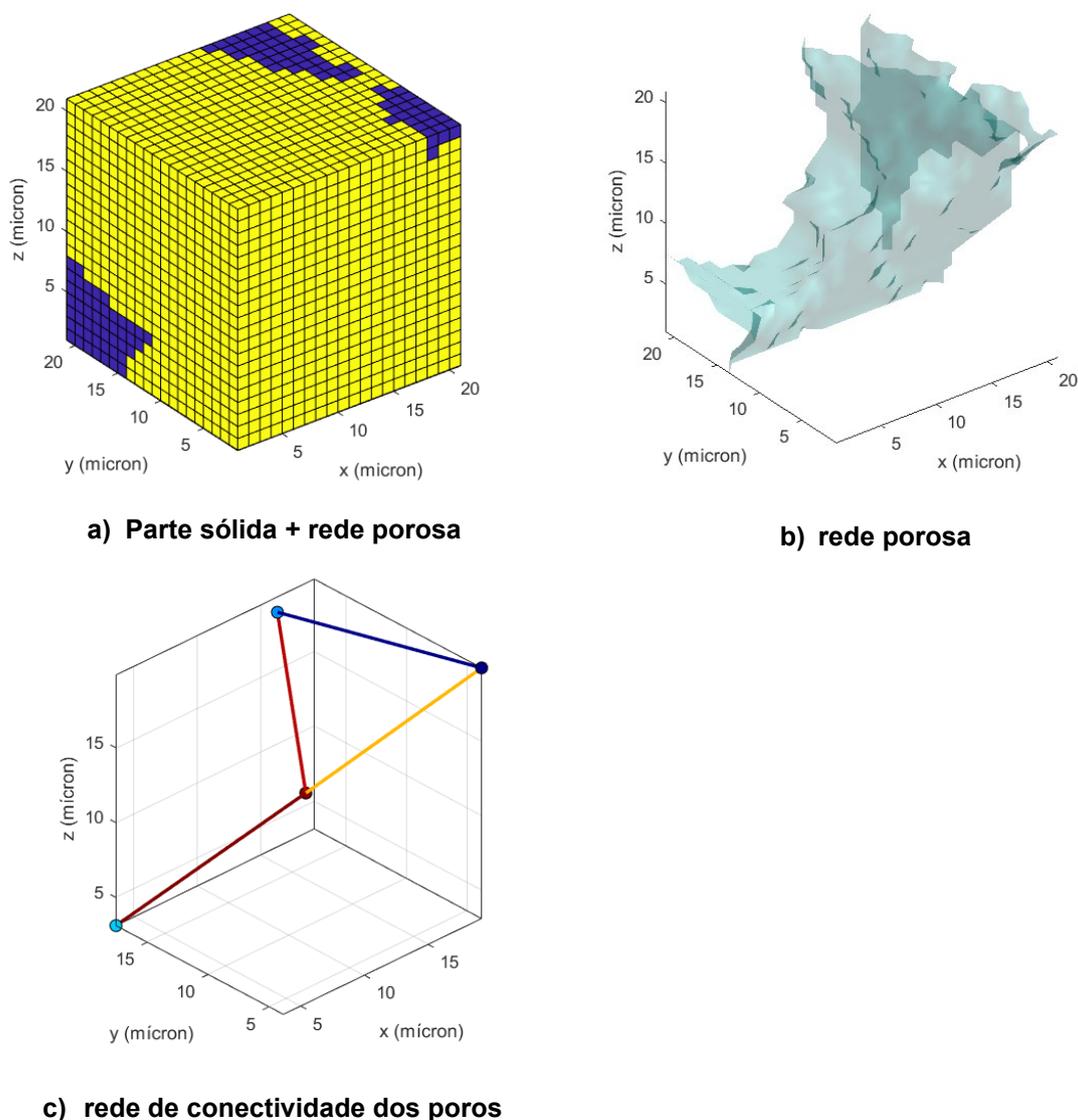
Figura 51 – REV - Movimento Browniano - 3D (em voxel)



Fonte: Autoria própria (2022)

A Figura 52 mostra simulação para o elemento de tamanho 50-70 voxel para melhor a representação naquela região.

Figura 52 – Elemento 3D (50-70x50-70x50-70 - em voxel)



Fonte: Autoria própria (2023)

A Figura 52a é o elemento, onde em amarelo aparece a parte sólida e em azul a rede porosa. A Figura 52b é a representação apenas da rede porosa e a Figura 52c representa somente a rede de conexões dos poros, colorida pois representa cada cor um tamanho de raio. As hastes são unidas por círculos coloridos também representando o tamanho dos raios em microns.

Após a reconstrução 3D foram realizadas simulações para a determinação da difusão e a tortuosidade. Iniciando com a simulação de referência Stokes-Einstein (simulação 1, equação 1, conforme Tabela 21)

Os dados da média da tortuosidade obtida com a equação 1, ou seja, equação de referência Stokes-Einstein, conforme a Tabela 21, podem ser vistos na Tabela 25 e representadas na Figura 53. A variação dos valores obtidos nas simulações ocorre após a 14^a, 15^a ou mais casas decimais e não foi representada na Tabela 25 devido por questão de simplificação.

Tabela 24 – Média da Tortuosidade - Stokes-Einstein

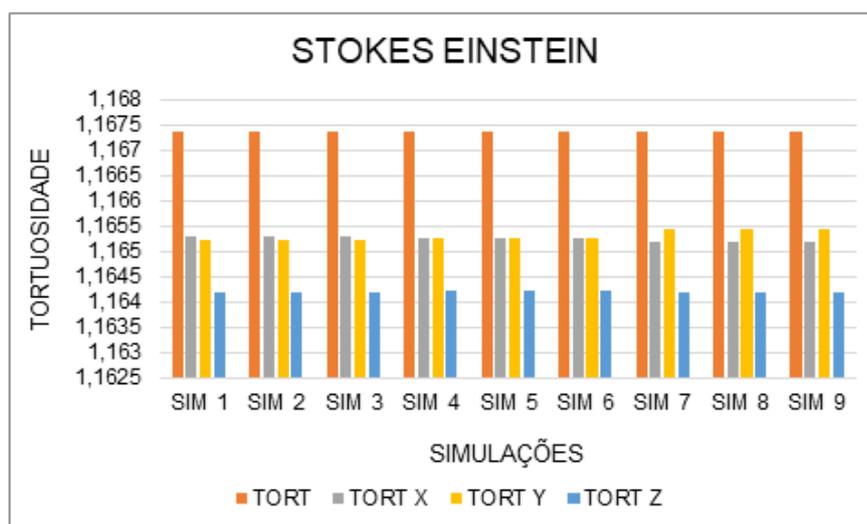
SIMULAÇÃO	TORT	TORT X	TORT Y	TORT Z
SIM 1	1,16736641	1,165289149	1,16520371	1,164194869
SIM 2	1,16736664	1,16528931	1,16520353	1,16419502
SIM 3	1,16736641	1,165289149	1,16520371	1,164194869
SIM 4	1,16736641	1,165254388	1,165257892	1,164232278
SIM 5	1,16736640	1,165254545	1,165257705	1,164232425
SIM 6	1,16736641	1,165254388	1,165257892	1,164232278
SIM 7	1,16736641	1,165200213	1,165420854	1,164194869
SIM 8	1,16736640	1,165200371	1,165420666	1,164195016
SIM 9	1,16736641	1,165200213	1,165420854	1,164194869

Os termos SIM 1 até SIM 9 representam as simulações conforme a variação de parâmetros nas equações definidas e mostradas nas Tabelas 21 e 22.

Na Tabela 24 a variação em relação aos valores da tortuosidade direcional (TORT X, TORT Y e TORT Z) foi devido ao caminho percorrido na rede porosa. Em cada direção o comprimento tortuoso é devido a própria estrutura do material. Essa variação é visualizada também na Figura 53.

Assim entende-se que os caminhos percorridos pela difusão do íon cloreto serão diferentes numericamente devido ao material poroso que possui caminhos diferentes em suas direções x, y e z.

Figura 53 – Média da Tortuosidade - Stokes-Einstein



Fonte: Autoria própria (2023)

A média da difusão, usando a equação de Stokes-Einstein (Equação 1, Tabela 23) pode ser vista na Tabela 25 e Figura 54.

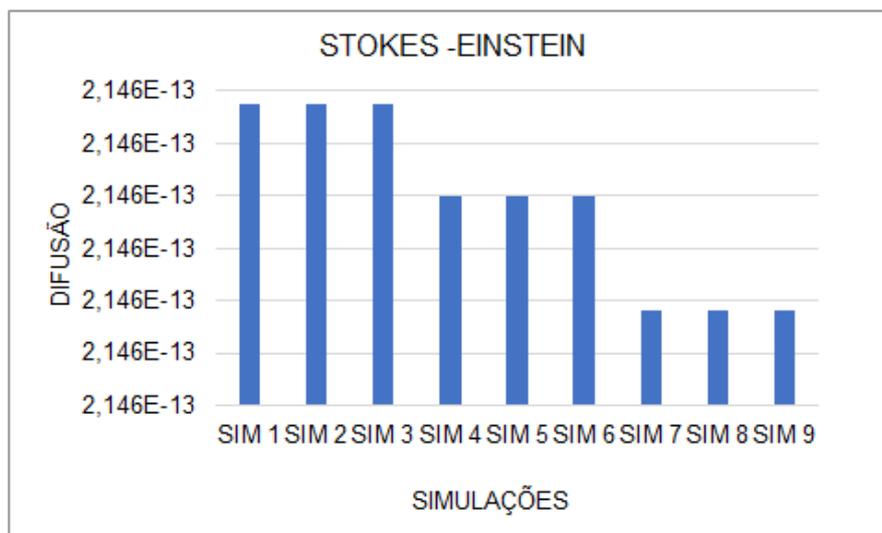
Tabela 25 – Média da Difusão - Stokes-Einstein

SIMULAÇÃO	DIFUSÃO (média) (m ² /s)
SIM 1	2,14611488478205000x10-13
SIM 2	2,1461148126704500X10-13
SIM 3	2,14611488478205000X10-13
SIM 4	2,14607996811538000X10-13
SIM 5	2,14607989600378000X10-13
SIM 6	2,14607996811538000X10-13
SIM 7	2,14603621811538000X10-13
SIM 8	2,14603614600378000X10-13
SIM 9	2,14603621811538000X10-13

Considerando que SIM 1 até SIM 9 representam as simulações conforme a variação de parâmetros nas equações definidas e mostradas nas Tabelas 21 e 22.

A variação dos valores obtidos nas simulações ocorre após a 5^a, 7^a ou mais casas decimais pode não ser vista na Tabela 25, mas representada na Figura 54.

Figura 54 – Difusão - Stokes-Einstein

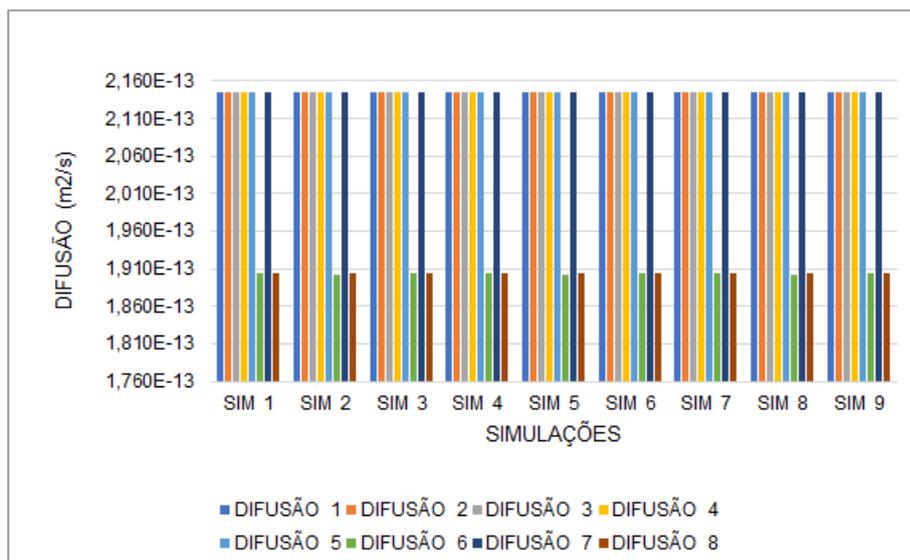


Fonte: Autoria própria (2023)

Na Figura 54, os valores médios da difusão, quando utilizada a equação de Stokes-Einstein, possuem diferenças no eixo com variações em escala pouco representativas. Um dos fatores dessa ocorrência é a posição inicial de partida do movimento Browniano. Outro fator pode ter sido o número de partículas que partem no momento do movimento Browniano. Pode ser entendido para a Tabela 25 também.

Os valores da difusão obtidos para todas as equações 1-8, consideradas na Tabela 21, e as simulações consideradas na Tabela 22, são apresentados na Figura 55 e Tabela 26. A Figura 55 apresenta variação numérica da difusão foi utilizada a equação 6 (C2S1) e 8 (C2S3) que pode ser originada pela tortuosidade menor ocorrida na rede porosa. A difusão nesse caso foi mais lenta que nas outras simulações. As diferenças em relação as equações utilizadas apresentaram resultados próximos devido ao critério de correções utilizadas por elas. O que é significativo entender é que a difusão dependendo da equação utilizada foi mais lenta devido ao caminho tortuoso que percorreu.

Figura 55 – Média da Difusão comparativo.



Fonte: Autoria própria (2023)

Considerando a simbologia adotada na legenda da Figura 55 como sendo:

DIFUSÃO 1 como sendo a difusão média obtida pela equação 1 conforme a Tabela 21,
 DIFUSÃO 2 como sendo a difusão média obtida pela equação 2 conforme a Tabela 21,
 DIFUSÃO 3 como sendo a difusão média obtida pela equação 3 conforme a Tabela 21,
 DIFUSÃO 4 como sendo a difusão média obtida pela equação 4 conforme a Tabela 21,
 DIFUSÃO 5 como sendo a difusão média obtida pela equação 5 conforme a Tabela 21,
 DIFUSÃO 6 como sendo a difusão média obtida pela equação 6 conforme a Tabela 21,
 DIFUSÃO 7 como sendo a difusão média obtida pela equação 7 conforme a Tabela 21,
 DIFUSÃO 8 como sendo a difusão média obtida pela equação 8 conforme a Tabela 21.

Os resultados da média da difusão estão resumidos na Tabela 26 obtida pelas equações tanto para a referência, caminho 1 e para o caminho 2, e numeradas conforme a Tabela 21.

Tabela 26 – Média da Difusão - equação 1-8 - conforme Tabela 21

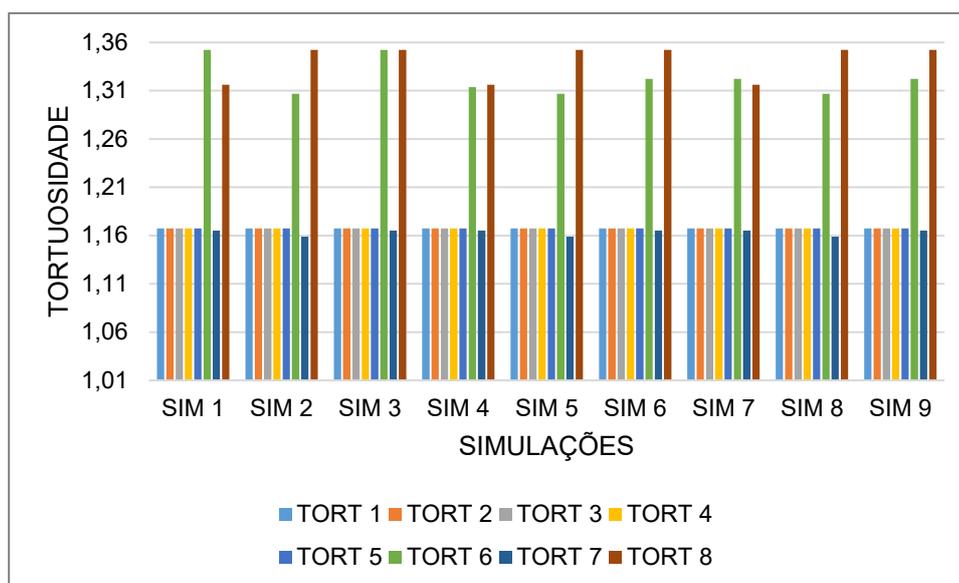
	SIM 1	SIM 2	SIM 3	SIM 4	SIM 5	SIM 6	SIM 7	SIM 8	SIM 9	MÉDIA
1	2,1461	2,1461	2,1461	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460
	14885	14813	14885	79968	79896	79968	36218	36146	36218	79968
	x10-13									
2	2,1461	2,1461	2,1461	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460
	14885	14750	14885	79969	79896	79969	36219	36146	36219	79969
	x10-13									
3	2,1461	2,1461	2,1461	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460
	14887	14815	14887	79970	79898	79970	36220	36148	36220	79970
	x10-13									
4	2,146	2,1461	2,1461	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460
	14	148	149	800	799	800	362	361	362	80000
	x10-13									
5	2,1461	2,1461	2,1461	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460	2,1460
	16021	15948	16021	81104	81032	81104	37354	37282	37354	81104
	x10-13									
6	1,9035	1,9026	1,9035	1,9045	1,9026	1,9031	1,9030	1,9026	1,9030	1,9030
	493	560	493	840	211	268	830	774	830	83000
	x10-13									
7	2,1461	2,1450	2,1461	2,1460	2,1451	2,1460	2,1460	2,1451	2,1460	2,1460
	11	98	11	76	19	76	32	19	32	32000
	x10-13									
8	1,9045	1,9045	1,9045	1,9045	1,9045	1,9045	1,9045	1,9035	1,9045	1,9045
	82	99	99	47	64	64	03	20	20	64000
	x10-13									

Na Tabela 26 as equações de 1-8 são numeradas conforme as Tabelas 21 e 22:

- 1- LC1Cor1- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 1,
- 2- LC1Cor2- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 2,
- 3- REC1Cor1 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho 1, Correção 1,
- 4- REC1Cor2 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho1, Correção 2,
- 5- C2S1 - Caminho 2, sugestão 1,
- 6- C2S2 - Caminho 2 ,sugestão 2,
- 7- C2S3 - Caminho 2, sugestão 3.

Os valores da tortuosidade obtidas pela comparação das equações de 1-8, conforme descritas na Tabela 21 são apresentados na Figura 56 e na Tabela 27.

Figura 56 – Média da Tortuosidade comparativo.



Fonte: Autoria própria (2023)

Considerando as equações numeradas conforme a Tabela 2, o significado da legenda da Figura 56 é:

- TORT 1 como sendo a tortuosidade média obtida pela equação 1,
- TORT 2 como sendo a tortuosidade média obtida pela equação 2,
- TORT 3 como sendo a tortuosidade média obtida pela equação 3,
- TORT 4 como sendo a tortuosidade média obtida pela equação 4,
- TORT 5 como sendo a tortuosidade média obtida pela equação 5,
- TORT 6 como sendo a tortuosidade média obtida pela equação 6,
- TORT 7 como sendo a tortuosidade média obtida pela equação 7,
- TORT 8 como sendo a tortuosidade média obtida pela equação 8.

A Figura 56 apresenta valores maiores para a tortuosidade quando foram utilizadas as equações 6 (C2S1) e 8 (C2S3). O que ocorreu foi que a difusão nesses casos foi mais lenta devido a tortuosidade da rede porosa ser maior numericamente. A difusão percorreu outro caminho que nas demais equações.

A Tabela 27 apresenta a média da tortuosidade obtida pelas equações numeradas de 1-8, conforme Tabela 21. A variação dos valores obtidos ocorre após a 5^a, 7^a ou mais casas decimais e não foi representada na Tabela 27.

Tabela 27 – Média da Tortuosidade - equação 1-8 da Tabela 23

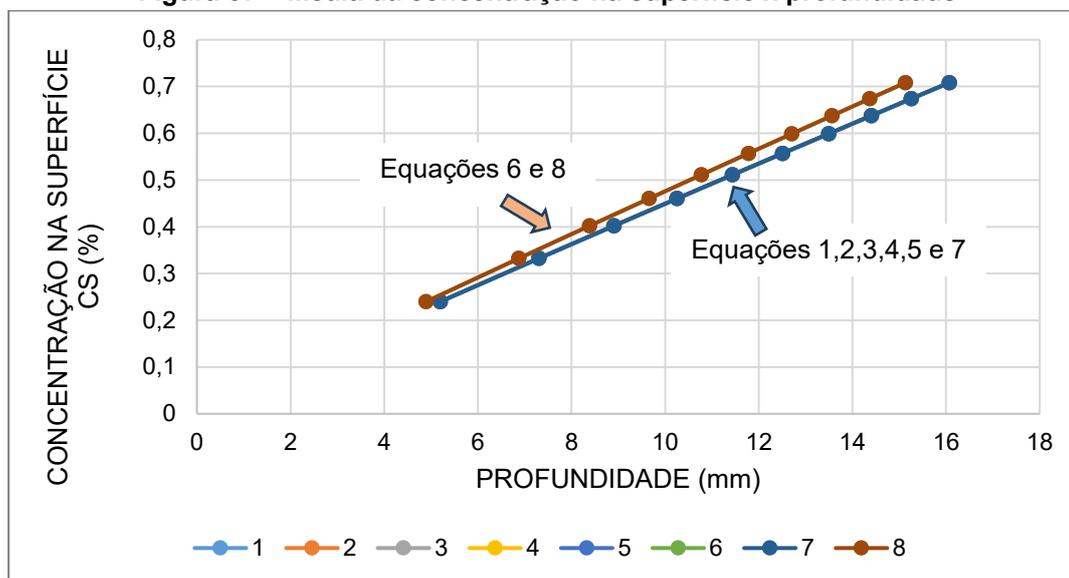
	SIM 1	SIM 2	SIM 3	SIM 4	SIM 5	SIM 6	SIM 7	SIM 8	SIM 9	MÉDIA
1	1,1673 6641	1,1673 66401	1,1673 6641	1,1673 6641	1,1673 66401	1,1673 6641	1,1673 6641	1,1673 66401	1,1673 6641	1,1673 6641
2	1,1673 66409	1,1673 66425	1,1673 66409	1,1673 66409	1,1673 664	1,1673 66409	1,1673 66409	1,1673 664	1,1673 66409	1,1673 66409
3	1,1673 66409	1,1673 664	1,1673 66409	1,1673 66409	1,1673 664	1,1673 66409	1,1673 66409	1,1673 664	1,1673 66409	1,1673 66409
4	1,1673 6641	1,1673 66401	1,1673 6641	1,1673 6641	1,1673 66401	1,1673 6641	1,1673 6641	1,1673 66401	1,1673 6641	1,1673 6641
5	1,1673 65792	1,1673 65783	1,1673 65792	1,1673 65792	1,1673 65783	1,1673 65792	1,1673 65792	1,1673 65783	1,1673 65792	1,1673 65792
6	1,3521 87224	1,3067 43179	1,3521 87224	1,3138 49755	1,3067 43179	1,3222 61193	1,3222 61193	1,3067 43179	1,3222 61193	1,3222 61193
7	1,1652 48001	1,1589 75853	1,1652 48001	1,1652 48001	1,1589 75853	1,1652 48001	1,1652 48001	1,1589 75853	1,1652 48001	1,1652 48001
8	1,3162 56301	1,3522 15928	1,3522 15963	1,3162 56301	1,3522 15928	1,3522 15963	1,3162 56301	1,3522 15963	1,3522 15963	1,3522 15928

Na Tabela 27 as equações de 1-8 são numeradas conforme a Tabela 21 e 22:

1. STOKES/EINSTEIN,
2. LC1Cor1- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 1,
3. LC1Cor2- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 2,
4. REC1Cor1 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho 1 Correção 1,
5. REC1Cor2 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho 1 Correção 2,
6. C2S1 - Caminho 2, sugestão 1,
7. C2S2 - Caminho 2 ,sugestão 2,
8. C2S3 - Caminho 2, sugestão 3.

Após encerrada a definição da difusão e tortuosidade devidos as equações sugeridas na Tabela 21 a simulação continuou para encontrar outros parâmetros devido ao tempo de 10 anos que sugere a Etapa 4, ou seja: a definição da difusão profundidade de penetração do íon cloreto, a concentração do íon cloreto na superfície, a concentração do íon cloreto.

A Figura 57 apresenta a média da concentração na superfície em relação a profundidade para o tempo de 10 anos, obtida pelas 8 equações conforme determinadas na Tabela 21.

Figura 57 – Média da concentração na superfície x profundidade

Fonte: Autoria própria (2023)

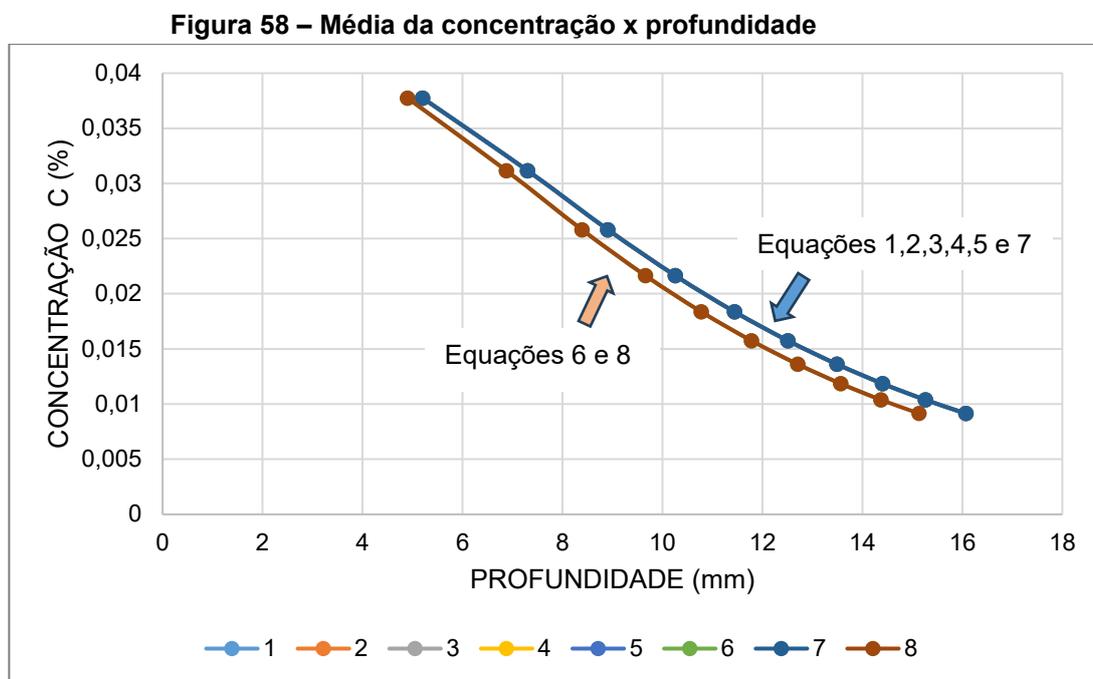
Nas Figuras 57, 58, 59, 60, 61 e 63 as equações de 1-8 são numeradas conforme a Tabela 21 e 22:

- 1- STOKES/EINSTEIN,
- 2- LC1Cor1- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 1,
- 3- LC1Cor2- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 2,
- 4- REC1Cor1 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho 1 Correção 1,
- 5- REC1Cor2 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho1 Correção 2,
- 6- C2S1 - Caminho 2, sugestão 1,
- 7- C2S2 - Caminho 2 ,sugestão 2,
- 8- C2S3 - Caminho 2, sugestão 3.

Na Figura 57 as concentrações do íon cloreto atingem a mesma profundidade final em todas as equações de 1-8 , ou seja, aumentam ao longo do tempo na medida que a concentração na superfície aumenta. Apenas nas equações 6 (C2S1) e 8 (C2S3) as profundidades foram maiores. As equações 2,3,4,5 e 7 apresentaram valores concordantes com a referência, equação 1)

Os valores da concentração na superfície apresentados na Figura 58, apresentam valores com variações decimais. As maiores variações ocorreram nas simulações das equações 6 (C2S1) e 8 (C2S3) com valores coincidentes para efeitos da representação linear superior

A Figura 58 apresenta a média da concentração em relação a profundidade para o tempo de 10 anos, obtida pelas 8 equações definidas e apresentadas na Tabela 21.

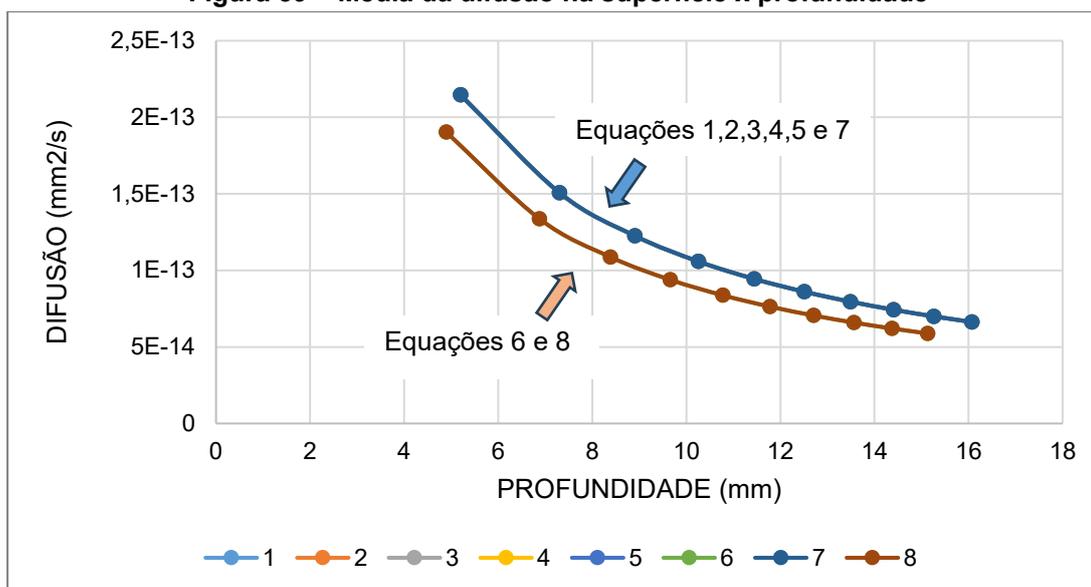


Fonte: Autoria própria (2023)

Os valores da concentração do íon cloreto apresentados na Figura 58, resultaram com variações decimais. O comportamento da concentração vai diminuindo e a profundidade vai aumentando. As menores variações ocorreram nas simulações das equações 6 (C2S1) e 8 (C2S3) com valores coincidentes e representados na curva inferior na Figura 58. Esse fenômeno se deve a tortuosidade da rede porosa ser maior e a difusão mais lenta ocorrida nessas equações.

A Figura 59 apresenta a média da difusão em relação a profundidade para o tempo de 10 anos, obtida pelas 8 equações definidas e apresentadas na Tabela 21.

Figura 59 – Média da difusão na superfície x profundidade



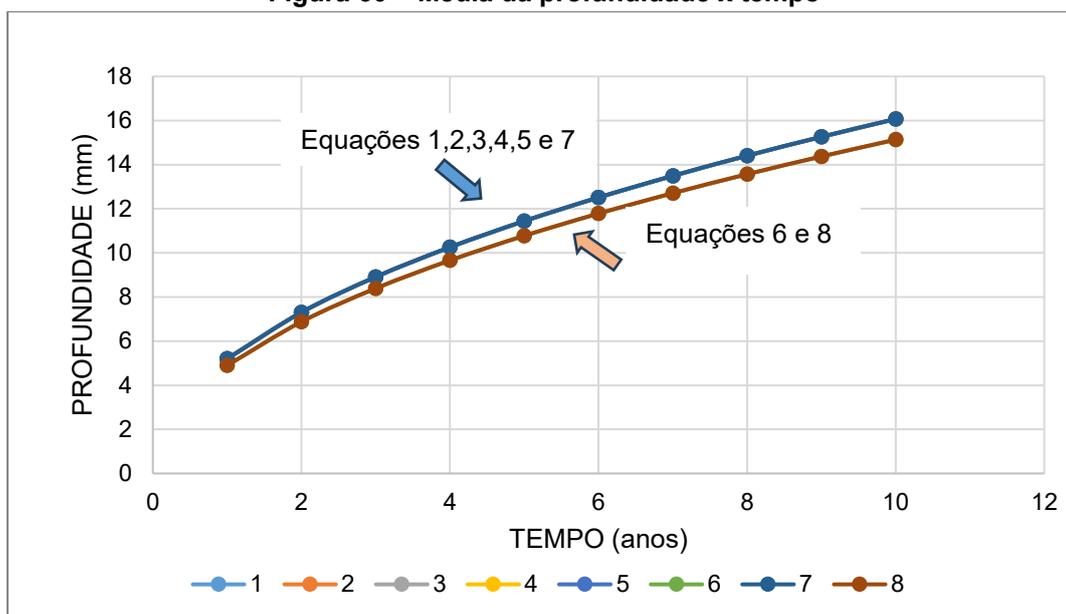
Fonte: Autoria própria (2023)

Os valores da difusão apresentados na Figura 59, apresentam valores com pequenas variações decimais. A curva esperada pela difusão em função do tempo é a que apresenta a Figura 59 onde há a sua diminuição com o tempo.

As menores variações ocorreram nas simulações das equações 6 (C2S1) e 8 (C2S3) com valores coincidentes, curva inferior da Figura 59. Com a utilização das equações 2,3,4,5 e 7 os resultados são coincidentes com a equação de referência, equação 1.

A Figura 60 apresenta a média da profundidade de penetração do íon cloreto para o tempo de 10 anos obtida pelas 8 equações definidas na pesquisa e representadas na Tabela 21.

Figura 60 – Média da profundidade x tempo

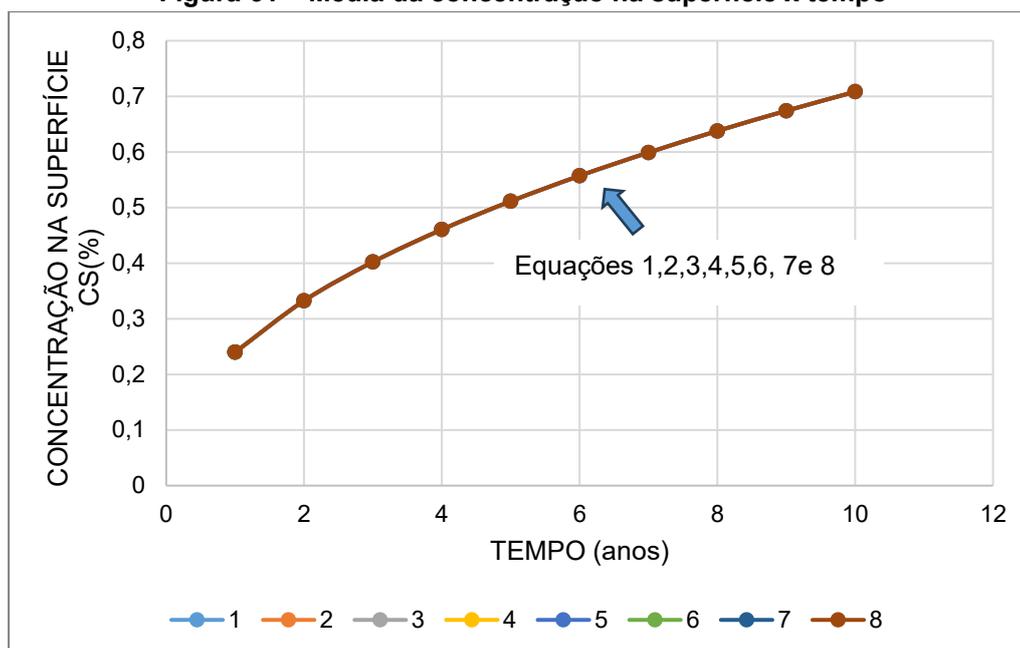


Fonte: Autoria própria (2023)

Os valores da profundidade em relação ao tempo apresentados na Figura 60, apresentam valores com pequenas variações decimais. A profundidade de penetração do íon cloreto aumenta à medida que o tempo aumenta. Assim as equações 2, 3, 4, 5 e 7 apresentaram valores numericamente coincidente com os obtidos com a equação 1 de referência, Stokes-Einstein e representados pela curva superior na Figura 60. As menores variações ocorreram nas simulações das equações 6 (C2S1) e 8 (C2S3) com valores coincidentes e representados da curva inferior da Figura 60.

A Figura 61 apresenta a média da concentração do íon cloreto na superfície em relação ao tempo de 10 anos, obtida pelas 8 equações adotadas na pesquisa e representadas na Tabela 21.

Figura 61 – Média da concentração na superfície x tempo



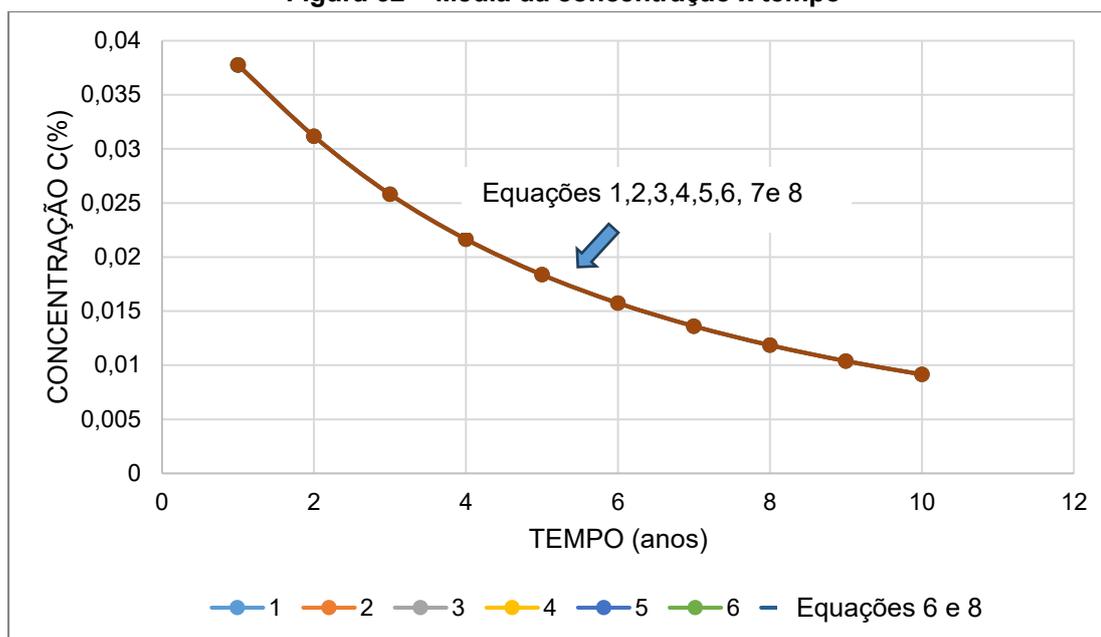
Fonte: Autoria própria (2023)

Os valores da concentração do íon cloreto na superfície apresentados na Figura 61, apresentam valores com pequenas variações decimais, com valores coincidentes para efeitos da representação curva.

Com relação a concentração do íon cloreto na superfície em relação ao tempo o resultado para as equações 1-8 apresentou o mesmo comportamento representado graficamente na Figura 61. Todas as equações apresentaram valores praticamente coincidentes com os valores obtidos com a equação 1, de referência.

A Figura 62 apresenta a média da concentração do íon cloreto em relação ao tempo de 10 anos, obtida pelas 8 equações definidas para a pesquisa e apresentadas na Tabela 21.

Figura 62 – Média da concentração x tempo

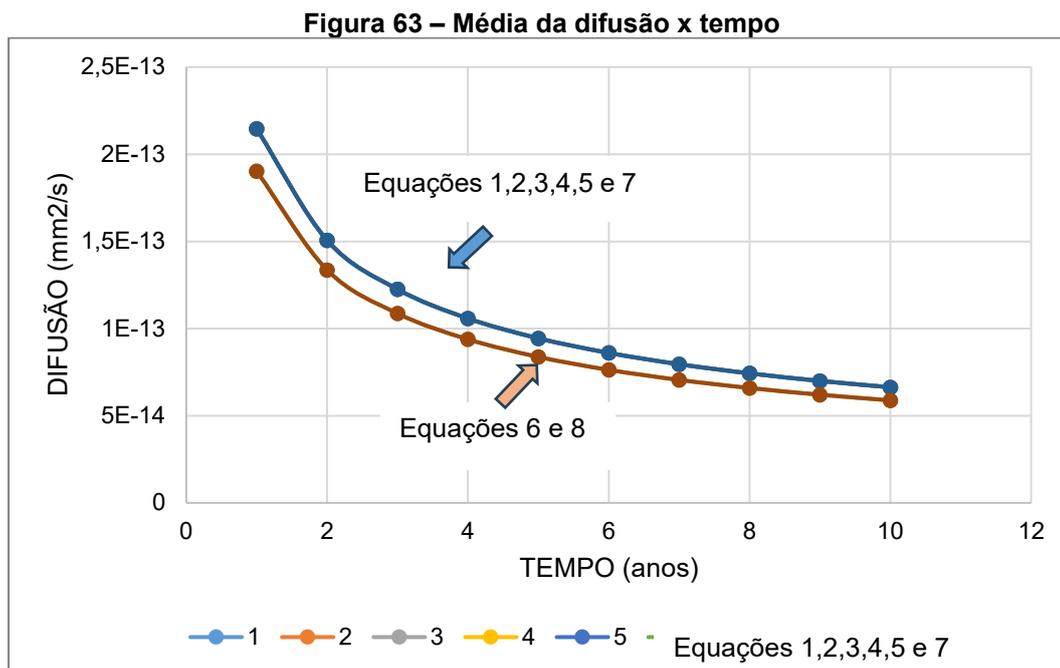


Fonte: Autoria própria (2023)

Os valores da concentração do íon cloreto em relação ao tempo apresentados na Figura 62 apresentaram valores coincidentes com a utilização de todas as equações de 1-8, diminuindo em relação ao tempo.

Os valores da concentração da Figura 63, apresentam valores quase que constantes e apresentando coincidência com relação a representação da curva esperada para esses parâmetros (concentração e tempo).

A Figura 63 apresenta a média da difusão em relação ao tempo de 10 anos, obtida pelas 8 equações da Tabela 22.



Fonte: Autoria própria (2023)

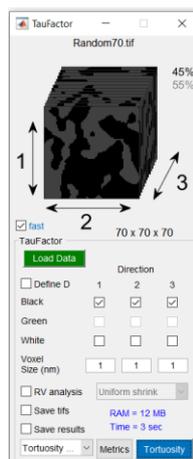
Os valores da concentração apresentados na Figura 63, apresentam valores com pequenas variações decimais. A difusão, apresentada na Figura 63, vai diminuindo na medida que o tempo vai avançando com a utilização das equações de 1-8.

As menores variações para a difusão ocorreram nas simulações das equações 6 (C2S1) e 8 (C2S3) com valores coincidentes e representados na curva inferior, da Figura 63. Esse comportamento pode ser devido a uma lenta difusão devido a um caminho percorrido com tortuosidade maior a rede porosa.

As equações 2, 3, 4, 5 e 7 apresentaram valores maiores para a difusão. O comportamento da difusão com essas equações é devido ao caminho da rede porosa ser menos tortuoso.

Para comparativo da tortuosidade foi usado software TauFactor (COOPER *et al.*, 2016). A Figura 64 apresenta o aplicativo TauFactor mostrando as direções 1, 2 e 3 que coincidem com os eixos x, y, e z do elemento representativo de volume. Foi utilizado esse aplicativo do MATLAB® para obtenção da tortuosidade para figuras usadas na simulação da pesquisa e para figura exemplo do TauFactor. A imagem lida pelo TauFactor possui o tamanho de 70x70x70 voxel.

Figura 64 – Tortuosidade TauFactor



As imagens analisadas pelo TauFactor resultam parâmetros com a escala de resolução 0,001, Tabela 28:

Tabela 28 – Resolução considerada no Taufactor

RESOLUÇÃO	voxel	mícron	m	mm	nanômetro
1	1	1	0,000001	0,001	1000
0,001	1	0,001	0,000000001	0,000001	1
	70	0,07	0,00000007	0,00007	70
	200	0,2	0,0000002	0,0002	200

A Tabela 29 apresenta o valor do fator tortuosidade nas direções 1,2,3, o tamanho do elemento analisado em voxel e a fração do volume poroso e do agregado usando o aplicativo TauFactor (COOPER *et al*, 2016) para o cálculo do fator tortuosidade segundo a equação 149 (EPSTEIN,1989):

$$D_{eff} = D_{in} \frac{\phi}{F_T} \quad (149)$$

Onde:

ϕ = porosidade

D_{in} = coeficiente de difusão intrínseca da fase condutora – poro

D_{eff} = coeficiente de difusão efetiva.

F_T = fator tortuosidade

O fator tortuosidade utilizado no TauFactor é dado pela equação 140:

$$F_T = \tau^2 \quad (140)$$

Onde:

F_T = fator tortuosidade

τ = tortuosidade

Tabela 29 – Resultado TauFactor – comparativo – Resolução 0,001

VOLUME		TORTUOSIDADE	FATOR TORTUOSIDADE
200X200X200 VOXEL	Direção 1	1,795828	3,225
	Direção 2	2,068333	4,278
	Direção 3	1,854454	3,449
70X70X70 VOXEL	Direção 1	1,420563	2,255
	Direção 2	1,316435	1,959
	Direção 3	1,430035	2,497
20X20X20 VOXEL	Direção 1	1,454991	1,809

A Tabela 30 compara a tortuosidade obtida com as equações da Tabela 22 (são as equações representadas por 17-24 na Tabela 31) e submetidas ao movimento Browniano.

As equações 1-9 apresentadas na Tabela 30, são as equações de difusão apresentadas nas pag. 48,49 e 50. As equações 10-16 representadas na Tabela 30, determinaram a tortuosidade pelo TauFactor.

As equações 17-24 apresentadas na Tabela 30, são as equações de difusão numeradas como equações 1-8 conforme a Tabela 21.

Tabela 30– Tortuosidade comparativo

Cálculo/ Método/ modelo		12,47%	14,8%	21,47%	24,5%	27,14%
1	Bruggeman (x = 1,5)	1,68280	1,61226	1,46907	1,42137	1,38545
2	IVERSENeJORGENSEN, 1993(q =2)	1,65849	1,64438	1,60331	1,58430	1,56754
3	SUN et al, 2013 x=0,357	1,74322	1,68206	1,54925	1,50212	1,46558
4	PETERSEN, 1958	1,36941	1,36088	1,33615	1,3248	1,3148
5	DU PLESSIS e MASLIYAH , 1991	1,46767	1,46135	1,44273	1,43498	1,42620
6	MOTA <i>et al.</i> , 2001, x=0,4	1,5164	1,46537	1,36030	1,32485	1,29801
7	WEISSBERG, 1963	1,4286	1,49831	1,33013	1,30509	1,28533
8	BEECKMAN, 1990	1,69458	1,68722	1,66547	1,65521	1,6467
9	COMITI e RENAUD 1989	1,19536	1,19058	1,17677	1,17045	1,16491
10	TauFactor-Direção 1 - 200x200x200voxel		1,796			
11	TauFactor-Direção 2 - 200x200x200voxel		2,068			
12	TauFactor-Direção 3 - 200x200x200voxel		1,854			
13	TauFactor-Direção 1 - 70x70x70 voxel	1,4206				
14	TauFactor-Direção 2 - 70x70x70 voxel	1,316				
15	TauFactor-Direção 3 - 70x70x70 voxel	1,430				
16	TauFactor-Direção 1 - 20x20x20 voxel					1,45499
17	STOKES-EINSTEIN			1,167366		
18	LC1Cor1			1,167366		
19	LC1Cor2			1,167366		
20	REC1Cor1			1,167366		
21	REC1Cor2			1,167366		
22	C2S1			1,322261		
23	C2S2			1,165248		
24	C2S3			1,352216		

Considerando o significado da simbologia adotada na Tabela30 como sendo:

LC1Cor1- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 1,

LC1Cor2- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 2,

REC1Cor1 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho 1 Correção 1,

REC1Cor2 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho1 Correção 2,

C2S1 - Caminho 2, sugestão 1,

C2S2 - Caminho 2 ,sugestão 2,

C2S3 - Caminho 2, sugestão 3.

Os valores das tortuosidades obtidas pelas equações 17-24, conforme a Tabela 30, mesmo sem levar em consideração a porosidade, apresentaram aproximações mais significativas com as equações 1,4,6,7,9, 14.

As equações sugeridas 18,19, 20, 21, 22 e 23, e representadas na Tabela 30, apresentaram os resultados próximos da tortuosidade obtida pela equação de referência (equação 17).

A Tabela 31 mostra a difusão obtida pela equação 149 ($D_{eff} = D_{in}(\phi/F_T)$) para comparativo com a difusão obtida no movimento Browniano devido as equações 1-8, Tabela 21.

Tabela 31 – Difusão comparativo

	EQUAÇÕES SUGERIDAS NA TABELA 22	DIFUSÃO USANDO A EQUAÇÃO ($D_{eff} = D_{in}(\phi/F_T)$)			
		POROSIDADE			
		12,47%	21,47%	24,50%	27,14%
1	2,146079968 x10-13	1,9628976 x10-14	3,3795840 x10-14	3,8565351 x10-14	4,2720964 x10-14
2	2,146079969 x10-13	1,9628976 x10-14	3,3795840 x10-14	3,8565351 x10-14	4,2720964 x10-14
3	2,146079970 x10-13	1,9628976 x10-14	3,3795840 x10-14	3,8565351 x10-14	4,2720964 x10-14
4	2,146080000 x10-13	1,962897 x10-14	3,3795840 x10-14	3,8565351 x10-14	4,2720964 x10-14
5	2,146081104 x10-13	1,9628997 x10-14	3,3795876 x10-14	3,8565491 x10-14	4,2721009 x10-14
6	1,903083000 x10-13	1,5299510 x10-14	2,6451659 x10-14	3,0059182 x10-14	3,3298213 x10-14
7	2,146032000 x10-13	1,9700412 x10-14	3,4918832 x10-14	3,8705701 x10-14	4,2876438 x10-14
8	1,904564000 x10-13	1,4629179 x10-14	2,5187527 x10-14	2,8742171 x10-14	3,1849287 x10-14

Na Tabela 31 as equações de 1-8 são numeradas conforme a Tabela 21 e 22 e significando:

- 1- STOKES/EINSTEIN,
- 2- LC1Cor1- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 1,
- 3- LC1Cor2- LANGEVIN - Caminho 1 Correção 2,
- 4- REC1Cor1 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho 1 Correção 1,
- 5- REC1Cor2 - RELAÇÃO DE EINSTEIN - Caminho 1 Correção 2,
- 6- C2S1 - Caminho 2, sugestão 1,
- 7- C2S2 - Caminho 2 ,sugestão 2,
- 8- C2S3 - Caminho 2, sugestão 3.

Foi utilizada como a difusão intrínseca ($D_{in} = 2,14509032299256 \times 10^{-13}$) a mesma de referência que foi usada no movimento Browniano.

As difusões obtidas na Tabela 31 devido a difusão intrínseca adotada resultaram valores menores que as obtidas com uso das equações 1-8, Tabela 21. O que poderia explicar esse fato seria a porosidade envolvida no processo.

A média das simulações para a difusão (Tabela 29), primeira coluna da esquerda apresentada na Tabela 31, resultaram valores próximos da equação de Stokes Einstein. A variação ocorreu na equação 6 (C2S1) e 8 (C2S3). Mostra que as equações sugeridas podem ser utilizadas pois ainda representam valores de difusão próximos da difusão de referência.

8 CONCLUSÃO

As conclusões da pesquisa primeiramente se referem aos em relação aos objetivos específicos. A modelagem do elemento representativo de volume foi realizada por imagem por trazer resultados com maior rapidez. Com o elemento representativo de volume foi representada também a rede porosa com a utilização do MATLAB®.

O coeficiente de difusão foi determinado com uso da fórmula de Stokes-Einstein que foi considerado como a referência de difusão na pesquisa. Com o movimento Browniano resultou novos valores para o coeficiente de difusão de referência.

Sugestões para equação do coeficiente de difusão foram conseguidas a partir de Stokes-Einstein, Langevin e relação de Einstein apresentados no capítulo de metodologia. Com essas sugestões foram determinados coeficientes de difusão e comparados com a difusão de referência (Stokes-Einstein).

A tortuosidade foi determinada devido ao movimento Browniano tanto com a equação de difusão de referência como com as equações sugeridas.

O perfil da penetração do íon cloreto foi determinado e apresentado nos resultados graficamente. O perfil da concentração na superfície, a concentração do íon cloreto e da difusão no tempo 10 anos foi determinado e representado graficamente.

As simulações foram testadas tanto no poro como no elemento representativo de volume com rotina de programação do MATLAB®.

Quanto ao comportamento do movimento Browniano dentro da rede porosa, foram testados diversos pontos de partidas das partículas para verificar se haveria diferenças para valor do coeficiente de difusão. Foram testados na rede porosa com o início na origem, início em outros pontos da rede porosa a fim de estudar o comportamento do coeficiente de difusão. Foram adotados apenas alguns pontos de início para o movimento Browniano, conforme a Tabela 22.

O resultado das simulações em relação ao ponto de início do movimento Browniano foi que independe do ponto de partida o valor do coeficiente de difusão se aproxima do coeficiente usado como parâmetro de referência. Para o poro o movimento Browniano depende do valor adotado para o deslocamento (passos) para que ele fique no poro.

O comportamento da tortuosidade quando não usada a equação de difusão de referência (Stokes-Einstein) se apresenta em escala muito grande e deve ser feita uma correção. Isso acontece porque o comportamento da difusão se apresenta mais lento. A difusão diminui, e percorre mais caminhos acarretando uma tortuosidade maior. Isso ocorre no caso de utilizar as equações de Langevin e relação de Einstein sem correção.

A conclusão da pesquisa para que a tortuosidade fique com mesma escala numérica ao usar a equação de difusão de Langevin e relação de Einstein é necessário fazer correção. Quando a correção ocorre antes da simulação com o movimento Browniano é recomendado usar o caminho 1 (LC1Cor1, LC1Cor2, REC1Cor1, REC1Cor2).

Para o caso de usar as equações de difusão sugeridas no caminho 2 (C2S1, C2S2 e C2S3) e submeter ao movimento Browniano, a tortuosidade ficará na mesma escala da obtida com a equação de referência.

As pesquisas mostram que quanto maior a porosidade, a tortuosidade diminui como pode ser visto na Tabela 30. A difusão aumenta com aumento da porosidade como apresentado na Tabela 31.

9 SUGESTÕES TRABALHOS FUTUROS

Como sugestão para a continuidade da pesquisa:

- A determinação da difusão e tortuosidade para todas as coordenadas dos poros obtidos para o tamanho do elemento representativo de volume que foi utilizado na pesquisa.
- Automatizar o algoritmo para fazer a sugestão acima.
- Usar equações de difusão intrínseca diferentes no algoritmo do Taufactor, se for possível essa alteração, ou seja, substituir a equação usada como padrão nesse software.
- Criar algoritmo no MATLAB® que possa realizar a visualização da rede porosa com os detalhes das partículas do movimento Browniano em deslocamento real.
- Variar os parâmetros para o cálculo da concentração do íon cloreto.

REFERÊNCIAS

ADDISON, P. S. **Fractals and chaos: an illustrated course**. Bristol, UK: Institute of Physics Publishing. 1^a ed., 1997.

ISBN 9780367806262. <https://doi.org/10.1201/9780367806262>

AGUAYO, M.; YANG, P.; VANCE, K.; SANT, G.; NEITHALATH, N. **Electrically driven chloride ion transport in blended binder concretes: insights from experiments and numerical simulations**. Cement and Concrete Research. 66, 1-10, 2014.

AHMADI, M. M.; MOHAMMADI, S.; HAYATI A. N. **Analytical derivation of tortuosity and permeability of monosized spheres: a volume averaging approach** Phys. Rev. E, 83 (2), Article 026312, 2011.

AL-KHARUSI, A. S.; BLUNT, M. J. **Network extraction from sandstone and carbonate pore space images**. Journal of Petroleum Science and Engineering, Volume 56, Issue 4, Pages 219-231, 2007.

ISSN 0920-4105, <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2006.09.003>.

AL-RAOUSH, R. I., MADHOUN, I. T. **TORT3D: A MATLAB code to compute geometric tortuosity from 3D images of unconsolidated porous média**. Powder Technology, Volume 320, Pages 99-107, 2017.

ISSN 0032-5910. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.06.066>.

AL-RAOUSH, R.I.; WILLSON, C. S. **A Pore-Scale Investigation of a Multiphase Porous Medium System**. Journal of Contaminant Hydrology, 77, 67-89, 2005. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jconhyd.2004.12.001>

ACI - AMERICAN CONCRETE INSTITUTE. Committee 222: **Protection of Metals in Concrete Against Corrosion**. Farmington Hills. American Concrete Institute, 2002.

ACI - AMERICAN CONCRETE INSTITUTE. Committee 318: **Building Code Requirements for Structural Concrete (ACI 318-08)**. Farmington Hills. American Concrete Institute, 2008.

ANDRADE, C. **Calculation of chloride diffusion coefficients in concrete from ionic migration measurements**. Cement and Concrete Research. Vol 2, pp. 724-742, 1993.

ANDRADE, J. J. O. **Contribuição à previsão da vida útil das estruturas de concreto armado atacadas pela corrosão das armaduras: iniciação por cloretos**. Porto Alegre: UFRGS, 2001. Tese (Doutorado em Engenharia), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 278p., 2001.

ANDRADE, C.; KROPP, J. **PRO 19: 2nd International RILEM Workshop on Testing and Modelling the Chloride Ingress into Concrete**. Volume 19 of RILEM proceedings. RILEM publications. RILEM Publications, 2000.

ANDRADE, C.; KROPP, J. (Eds.), **Testing and Modelling Chloride Ingress into Concrete**. Proceedings of the 3rd International RILEM Workshop, Madrid, 2002.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR 6118 – Projeto de estruturas de concreto**. 28.08.2023.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR 12655. Concreto – Preparo, Controle e Recebimento**. Rio de Janeiro, 2015.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR 15575-1 - Edificações Habitacionais – Desempenho Parte 1: Requisitos gerais**. 23.01.2024

ATKINSON, A.; NICKERSON, A. **The Diffusion of ions through water-saturated cement**. Journal of materials science. nº 19, p.3068-3078, 1984.

ÁVILA, N. V. V. de. **Ciências dos materiais**. Volume único. Rio de Janeiro, Fundação Cecierj. 2019.

Avizo, 2017. Thermo Fisher Scientific. Oregon, USA. <https://www.thermofisher.com>

AXELSSON, M.; SVENSSON, S. **3D pore structure characterisation of paper**. Pattern Analysis and Applications, 13(2):159_172, 2010.

BACKEBERG, N. R.; IACOVIELLO, F.; RITTNER, M.; MITCHELL, T. M.; JONES, A. P.; DAY, R.; WHEELER, J.; SHEARING, P. R.; VERMEESCH, P.; STRIOLO, A. **Quantifying the anisotropy and tortuosity of permeable pathways in clay-rich mudstones using models based on x-ray tomography**. Scientific Reports, 7(1):14838, 2017.

BAROGHEL-BOUNY, V.; CAPRA, B.; LAURENS, S. **A durabilidade das armaduras e do concreto de cobrimento**, In: OLLIVER, J.P., VICHOT, A. (ed), **Durabilidade do Concreto: Bases científicas para a formulação de concretos duráveis de acordo como ambiente**. 1 ed. São Paulo: Instituto Brasileiro do Concreto, 2014.

BARRANDE, M.; BOUCHET, R.; DENOYEL, R. **Tortuosity of porous particles**. Anal. Chem. 79 (23), 9115–9121, 2007.

BENTZ, D. P.; CLIFTON, J. R.; SNYDER, K. A. **Predicting Service life of chloride-exposed steel-reinforced concrete**. Concrete International. 42-47, December 1996.

BERROCAL, C.G.; LUNDGREN, K.; LÖFGREN, I. **Corrosion of steel bars embedded in fibre reinforced concrete under chloride attack: state of the art**. Cem Concr Res. 80:69–85, 2016.

BIAN, X. ;KIM, C.; KARNIADAKIS, G.E. **111 years of Brownian motion**. *Soft Matter*,12, 6331, 2016.

BITARAF, M.; MOHAMMADI, S. **Analysis of chloride diffusion in concrete structures for prediction of initiation time of corrosion using a new meshless approach**. *Constr Build Mater*, 22:546–56, 2008.
<https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2006.11.005>.

BOB, C. **Probabilistic assessment of reinforcement corrosion in existing structures**. In: International conference: concrete repair, rehabilitation and protection. Proceedings, Dundee, pp.17-28, 1996.

BODLA, K. K.; GARIMELLA, S. V.; MURTHY, J.Y. **3D Reconstruction and design of porous media from thin sections**. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 73, pp. 250-264, 2014.

BOLLMANN, P. KLEINEBUDDE. **Evaluation of different pre-processing methods of x-ray micro computed tomography images**. *Powder Technology*. 381, 549–550, 2021.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.11.074>.

URL, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591020311335>

BORGHINI,N. **CHAPTER V- Bownian motion**. 2016.

https://www.physik.unibielefeld.de/~borghini/Teaching/Nonequilibrium16/06_06.pdf

BRINKMANN, J.P.; FRONING, D.; REIMER, U.; SCHMIDT, V.; LEHNERT, W.; STOLTEN, D. **3D modeling of one and two component gas flow in fibrous microstructures in fuel cells by using the Lattice-Boltzmann method**. *ECS Trans*. 50:207–219, 2012.

BRITISH STANDARDS INSTITUTION (BSI). BS 8110-1: **Structural use of concrete. Part 1: Code of practice for design and construction**. Londres, British Standards Institution.160p.,1997.

BRUN, E.; VICENTE, J.; TOPIN, F.; OCCELLI, R. **Imorph: A 3D morphological tool to fully analyse all kind of cellular materials**. *Cellular Metals for Structural and Functional Applications*, 2008.

Britannica. The Editors of Encyclopaedia. **Fractal**. *Encyclopedia Britannica*.
<https://www.britannica.com/science/fractal>. Acesso 20 agosto 2022.

BRUGGEMAN, V. D. **Berechnung verschiedener physikalischer konstanten von heterogenen substanzen. i. dielektrizitätskonstanten und leitfähigkeiten der mischkörper aus isotropen substanzen**. *Ann. Phys.*, 416 (7), pp. 636-664, 1935.

BUKOWSKI, B. C., KEIL, F.J., RAVIKOVITCH, P. I.; SASTRE, G; SNURR, R. Q. **Connecting theory and simulation with experiment for the study of diffusion in nanoporous solids**. *Adsorption* 27, 683–760, 2021.

<https://doi.org/10.1007/s10450-021-00314-y>

CAI, J. C.; LUO, L.; YE, R.; ZENG, X. F.; HU, X.Y. **Recent advances on fractal modeling of permeability for fibrous porous media.** *Fractals*. 23(1), 1540006 (9 pages), World Scientific Publishing Company, 2015.
DOI: 10.1142/S0218458X1540006X

CALLISTER Jr., W. D.; RETHWICH, D. G. **Ciência e Engenharia de Materiais Uma Introdução.** 8ª ed. LTC, 2012.

CANSON INFINITY. Acesso em 5 de junho de 2022.
<https://www.canson-infinity.com/pt/o-que-e-resolucao-de-uma-imagem>

CATIPOVIC, M. A.; TYLER, P. M.; TRAPANI, J. G.; CARTER, A. R. **Improving the quantification of Brownian motion.** *Am. J. Phys.* Volume 81, 485–491, 2013.
<https://doi.org/10.1119/1.4803529>

CASCUDO, O. **O controle da corrosão de armaduras em concreto:** inspeção e técnicas eletroquímicas. 1. ed. São Paulo: Pini, 237 p., 1997.

CEB: COMITÉ EURO-INTERNATIONAL DU BÉTON. **Model Code 1990.** London, 1993.

CECEN, A.; WARGO, E.; HANNA, A.; TURNER, D.; KALIDINDI, S.; KUMBUR, E. **3-D microstructure analysis of fuel cell materials: spatial distributions of tortuosity, void size and diffusivity.** *Journal of The Electrochemical Society*, 159(3):B299_B307, 2012.

CHEN, J.; WANG, J.; HE, R.; SHU, H.; FU, C. **Experimental study on effective chloride diffusion coefficient of cement mortar by different electrical accelerated measurements.** *Crystals*.11(3):240, 2021.
<https://doi.org/10.3490/cryst11030240>.

CHEN-WIEGART, Y.-C. K.; DEMIKE, R.; ERDONMEZ, C.; THORNTON, K.; BARNETT, S. A.; WANG, J. **Tortuosity characterization of 3D microstructure at nano-scale for energy storage and conversion materials.** *Journal of Power Sources*, 249:459_356, 2014.

CHEN, Z-W; GAO, Y.; ZHANG, J.; LIU, Q-F; WANG, H-L; ZHENG;J-J. **Numerical modeling of microstructure development and chloride diffusion coefficient of cement paste with ellipsoidal particles.** *Construction and Building Materials*. VOLUME 408, PAGES 133819, 2023.
ISSN 0950-0618. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.133819>

CHIDIAC, S. E.; SHAFIKHANI, M. **Phenomenological model for quantifying concrete chloride diffusion coeficiente.** *Construction and Building Materials*, Volume 224, Pages 773-784, ISSN 0950-0618, 2019.
<https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.07.006>.

CLENNELL, M. B. **Tortuosity: a guide through the maze**. Geological Society, London. Special Publications. 122. 299-454. 10.1144/GSL.SP.1997.122.01.18, 1997.

COMITI, J.; RENAUD, M. **A new model for determining mean structure parameters of bedded beds from pressure drop measurements: application to beds packed with parallelepipedal particles**. Chemical Engineering Science, 44(7):1549_1545, 1989.

COLLEPARDI, M.; MARCIALIS, A.; TURRIZIANI, R. **The kinetics of chloride ions penetration in concrete**, Il Cemento, 67, 157-164, 1970.

COOPER, S. J.; BERTEI, A.; SHEARING, P. R.; KILNER, J. A.; BRANDON, N. P. **TauFactor: An open-source application for calculating tortuosity factors from tomographic data**. SoftwareX, 5, 203–210, 2016. Elsevier BV. Retrieved from <https://doi.org/10.1016%2Fj.softx.2016.09.002>.

COOPER, S. J.; KISHIMOTO, M.; TARIQ, F.; BRADLEY, R. S.; MARQUIS, A. J.; BRANDON, N. P.; KILNER, J. A.; SHEARING, P. R. **Microstructural analysis of an Iscf cathode using in situ tomography and simulation**. ECS Transactions, 57(1):2671_2678, 2013.

COSTA, A. **Permeability-porosity relationship: A reexamination of the Kozeny-Carman equation based on a fractal pore-space geometry assumption**. Geophys. Res. Lett. 33, 87–94, 2006.

COSTA, A.; APPLETON, J. **Chloride penetration into concrete in marine environment – part I: prediction of long term Chloride penetration**. Materials and Structures, 32, 252-259, 1999 a.

COSTA, A., APPLETON, J. **Chloride penetration into concrete in marine environment-Part II: Prediction of long term chloride penetration**. *Mat. Struct.* **32**, 354–359, 1999b. <https://doi.org/10.1007/BF02479627>

CPH - COMISIÓN PERMANENTE DEL HORMIGÓN. EHE 08: **Instrucción de hormigón estructural**. Madrid. Centro de Publicaciones del Ministerio de Fomento de España.804p., 2011.

CRANK, J. **The mathematics of diffusion**. Ed. Oxford University, 1975.

DA SILVA, M.T.Q.S.; CARDOSO, M. R.; VERONESE, C. M. P.; MAZER, W. **Tortuosity: A brief review**. Volume 58, parte 4, pages 1454-1459, 2022. Materials Today: Proceedings.

DA SILVA, M. T. Q; PERRETTO, F.; CARDOSO, M. DO R.; MAZER, W. **Porosity: Some characterization techniques**. Materials Today: Proceedings, 2023. ISSN 2214-7853,<https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.03.716>. colocar no texto

DA SILVA, M. T. Q. S.; MAZER, W. **Diffusion coefficient and tortuosity: Brownian Motion.** *CONTRIBUCIONES A LAS CIENCIAS SOCIALES*, 16(9), 18281–18302. <https://doi.org/10.55905/revconv.16n.9-264>, 2023b.

DESRUES, J.; VIGGIANI, G.; BESUELLE, P. **Advances in X-ray Tomography for Geomaterials.** John Wiley & Sons, volume 118, 2010.

DIAS, R.; TEIXEIRA, J. A.; MOTA, M.; YELSHIN, A. **Tortuosity variation in a low density binary particulate bed.** *Sep. Purif. Technol.*, 51 (2), pp. 180-184, 2006.

DIMAND, R.W. **The case of Brownian motion: a note on Bachelier's contribution.** Published online by Cambridge University Press: 05 January 2009.

DOMINGOS, A. M. F. **Fractais: da geometria à videoarte.** Lisboa: [s.n.], 148 p., 2013.

DOMONE, P.; ILLSTON, J. **Construction materials: Their nature and behaviour.** Edition 4th, 2010. ISBN9781315272436.

DOUILLET, N. Sierpinski-Menger sponge
https://github.com/NicolasDouillet/sierpinski-menger_sponge/releases/tag/v3.0.
Acesso em 20 de abril, 2022.

DUDA, A.; KOZA, Z.; MATYK, M. **Hydraulic tortuosity in arbitrary porous media flow.** *Phys. Rev. E*, Article 036319, 84 (3), 2011.

DuraCrete. Modelling of Degradation. EU-Project (BriteEuRam II) No.BE95-1457. Probabilistic Performance based Durability Design of Concrete Structures[R]. Report, Vol. 4-5, 1998.

DU PLESSIS, J. P.; MASLIYAH, J. H. **Flow through isotropic granular porous media.** *Transport in porous media*, 6(3):207_221, 1991.

ECS - EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION. EN 206-1: **Concrete - Part1: Specification, performance, production and conformity.** Bruxelas. European Committee for Standardization, 70p., 2000.

EHLEN, M. A.; THOMAS, M. D. A.; BENTZ, E. C. **Life-365 Service Life Prediction Model™** Version 2.0. *Concrete International*. 31(5). 41-46, 2009.

EINSTEIN, A. **Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen.** *Ann. Phys. (Leipzig)*, 17(4):549–560, 1905.

ELAKNESWARAN, Y.; IWASA, A.; NAWA, T.; SATO, T.; KURUMISAWA, K. **Ion-cement hydrate interactions govern multi-ionic transport model for cementitious materials.** *Cement and Concrete Research*. 40. 1756-1765, 2010. 10.1016/j.cemconres.2010.08.019.

ENRÍQUEZ-LEÓN, A. J.; SOUZA, T. D. de; OSMARI, P. H.; ARAGÃO, F. T. S.; BRAZ, D.; PEREIRA, A.; NOGUEIRA, L. P. **Caracterização dos vazios de concretos asfálticos a partir da microtomografia computadorizada e da segmentação por machine learning.** 45° Congresso Nacional de Pesquisa e Ensino em Transporte da ANPET, 2020.

EPFL. École Polytechnique Fédérale de Lausanne. **SIMULATING BROWNIAN MOTION.** 2018.
<https://www.epfl.ch/labs/lben/wp-content/uploads/2018/07/Simulating-Brownian-Motion.pdf>

EPSTEIN, N. **On tortuosity and the tortuosity factor in flow and diffusion through porous media.** Chemical Engineering Science, Volume 44, Issue 3, Pages 777-779, 1989.
 ISSN 0009-2509, [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(89\)85053-5](https://doi.org/10.1016/0009-2509(89)85053-5).
 (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250989850535>)

ERDOĞDU, Ş.; KONDRATOVA, I. L.; BREMNER, T. W. **Determination of chloride diffusion coefficient of concrete using open-circuit potential measurements.** Cement and Concrete Research, Volume 45, Issue 4, Pages 603-609, 2004.
 ISSN 0008-8846. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2003.09.024>.

EVSTIGNEEV, M.; KAFFASHNIA, A. **Diffusion coefficient scaling of a free Brownian particle with velocity-dependent damping.** Physical Review E. 107, 064129, 2023. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.107.064129>.

FIB - FÉDÉRATION INTERNATIONALE DU BÉTON (CEB-FIP). **Model Code for Service Life Design.** Lausanne: fib, bulletin 45, 2006.

FERREIRA, R. M. **Probability based durability analysis of concrete structures in marine environments.** PhD thesis, University of Minho, School of Engineering, Department of Civil Engineering, 2004.

FERGUSON, J. C.; PANERAI, F.; BORNER, A.; MANSOUR, N. N. **Puma: the porous microstructure analysis software.** 2018. SoftwareX, 7:81-87.

FIGUEIREDO, E. P. **Efeitos da Carbonatação e de Cloretos no Concreto.** In: ISAIA, Geraldo Cechella (Ed.). Concreto: Ensino, Pesquisa e Realizações. Vol. 2. Cap. 27. São Paulo: IBRACON, p. 829-855, 2005.

FINEGAN, D. P.; COOPER, S. J.; TJADEN, B.; TAIWO, O. O.; GELB, J.; HINDS, G.; BRETT, D. J.; SHEARING, P. R. **Characterising the structural properties of polymer separators for lithium-ion batteries in 3D using phase contrast x-ray microscopy.** Journal of Power Sources, 333:184_192, 2016.

FREDERIKSEN, J. M.; MEJLBRO, L.; POULSEN, E. **The HETEK model of chloride ingress into concrete made simpler by approximations.** Second International RILEM Workshop on Testing and Modelling the Chloride Ingress into Concrete. Editor(s): C. Andrade and J. Kropp. RILEM Publications SARL. 317 – 336, 2000.

FRONING, D.; BRINKMANN, J.; REIMER, U.; SCHMIDT, V.; LEHNERT, W.; STOLTEN, D. **3D analysis, modeling and simulation of transport processes in compressed fibrous microstructures, using the Lattice Boltzmann method.** *Electrochim Acta*, 2013. 110:325–345.

FORNASIER, R. S. **Porosidade e permeabilidade do concreto de alto desempenho com microssilica.** 1995. UFGS- MESTRADO.

FU, J.; THOMAS, H.R.; LI, C. **Tortuosity of porous media: Image analysis and physical simulation.** *Earth-Science Reviews*. 212,104549, 2021.

GAISELMANN, G.; NEUMANN, M.; SCMDIT, V.; PECHO, O.; HOCKER, T. HOLZER, L. **Quantitative relationships between microstructure and effective transport properties based on virtual materials testing.** *AIChE Journal* 60. Iss. 6, pp. 1983–1999, 2014.

GAO, Y.; WU, K.; JIANG, J. **Examination and modeling of fractality for pore-solid structure in cement paste: Starting from the mercury intrusion porosimetry test.** *Constr. Build. Mater.* 124, 237–243, 2016.

GEEKSFORGEEEKS. **What is Dijkstra’s Algorithm?** 2023.

<https://www.geeksforgeeks.org/introduction-to-dijkstras-shortest-path-algorithm/>

GeoDict. 2020. **Math2Market.** Kaiserslautern, Germany. <http://www.geodict.com>.

GENERAL PRINCIPLES ON THE DESIGN OF STRUCTURES FOR DURABILITY. **ISO 13823.** 2008.

GHANBARIAN, B.; HUNT, A. G.; EWING, R. P.; SAHIMI, M. **Tortuosity in porous media: a critical review.** *Soil Sci. Soc. Am. J.* 77 (5), 1461–1477, 2013

GJORV, O. **Projeto de durabilidade de estruturas de concreto em ambientes de severa agressividade.** Oficina de texto, 2015.

GOMES, O. **Processamento e análise de imagens aplicados à caracterização automática de materiais.** 2001. Dissertação de Mestrado. PUC-Rio, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

GOMMES, C. J.; BONS, A.-J.; BLACHER, S.; DUNSMUIR, J. H.; TSOU, A. H. **Practical methods for measuring the tortuosity of porous materials from binary or gray-tone tomographic reconstructions.** *AIChE Journal*, 55(8):2000-2012, 2009.

GOSTOVIC, D.; SMITH, Z. J.; KUNDINGER, D.; JONES, K.; WACHSMAN, E. **Three-dimensional reconstruction of porous Iscf cathodes.** *Electrochemical and Solid-state Letters*, 10(12):B214_B217, 2007.

HAIZHEN, H.; TINGFENG, Z.; NINGJING, T.; XUEQING, M.; YURONG, Z.; LIQIANG, W.; WEI, K. **Similarity analysis of chloride transport behavior in fly ash**

concrete under different environments aiding by machine learning method. Case Studies in Construction Materials, Volume 20, e03270, 2024. ISSN 2214-5095, <https://doi.org/10.1016/j.cscm.2024.e03270>.

HAJIZADEH, A.; FARHADPOUR, Z. **An algorithm for 3D pore space reconstruction from a 2d image using sequential simulation and gradual deformation with the probability perturbation sampler.** Transport in Porous Media. 94(3), pp. 859-881, 2012.

HINKS, T.; CARR, H.; TRUONG-HONG, L.; LAEFER, D. F. **Point cloud data conversion into solid models via point-based voxelization.** Journal of Surveying Engineering. 149(2), pp. 72-83, 2013.

HKBD - HONG KONG BUILDING DEPARTMENT. **Code of practice for precast concrete construction.** Hong Kong. Buildings Department, 85p., 2016.

HOFFMANN, C. M.; ROSSIGNAC, J. R. **A road map to solid modeling.** IEEE Trans Vis. Comput. Graph., 2(1), 3–10, 1996. doi:10.1109/2945.489381.

HOU, D.; JIA, Y.; YU, J.; WANG, P.; LIU, Q. **Transport properties of sulfate and chloride ions confined between calcium silicate hydrate surfaces: a molecular dynamics study.** The Journal of Physical Chemistry C. 122 (49), 28021-28032, 2018. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b07484

HUANG, Z.; SU, X.; Li, Y.; ZHANG, K.; J., Yao. **Stress sensitivity analysis of fractal porous média based on the elasto-plastic thick-walled cylinder model.** *Fractals*, vol. 29, no. 3, 2021. DOI:10.1142/S0218458X21501620.

HU, B.; WANG, J. G. **Fractal microstructure effects on effective gas diffusivity of a nanoporous medium based on pore-scale numerical simulations with lattice Boltzmann method.** American Physical Society. 10.1103/PhysRevE.104.065304
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.104.065304>. Physical Review E, 2021.

HUTZENLAUB, T.; ASTHANA, A.; BECKER, J.; WHEELER, D.; ZENGERLE, R.; THIELE, S. **Fib/sem-based calculation of tortuosity in a porous licoo2 cathode for a li-ion battery.** Electrochemistry Communi-cations, 27:77_80, 2013.

ISHIDA, T.; IQBAL, P. O'Neill; ANH, H. T. L. **Modeling of chloride diffusivity coupled with non-linear binding capacity in sound and cracked concrete.** Cement and Concrete Research, Volume 49, Issue 10, Pages 913-923, 2009. ISSN 0008-8846, <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2009.07.014>.

IVERSEN, N.; JORGENSEN, B.B. **Diffusion coefficients of sulfate and methane in marine sediments.** Geochim. Cosmochim. Acta, 57, 571-578, 1993.

IWAI, H.; SHIKAZONO, N.; MATSUI, T.; TESHIMA, H.; KISHIMOTO, M.; KISHIDA, R.; HAYASHI, D.; MATSUZAKI, K.; KANNO, D.; SAITO, M.; MUROYAMA, H.; EGUCHI, K.; KASAGI, N.; YOSHIDA, H. **Quanti_cation of sofc anode**

microstructure based on dual beam _b-sem technique. Journal of Power Sources, 195(4):955_961, 2010.

JAIN, A.; GENCTURK, B. **multiphysics and multiscale modeling of coupled transport of chloride ions in concrete.** Materials. Vol 14, 2021.

JIANG, Z.; PAN, Y.; WAN-WENDNER, L.; FU, C.; WANG, Y.; LONG, W. **Effects of pore structure and chloride binding capacity on chloride diffusion in limestone cement paste.** Construction and Building Materials, Volume 435, 136854, ISSN 0950-0618, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2024.136854>.
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950061824019962>

JSCE - JAPAN SOCIETY OF CIVIL ENGINEERS Guidelines n° 15: **Standard specifications for concrete structures – Design.** Tóquio. Japan Society Of Civil Engineers. 503p, 2010.

JOHANNESSON. B. **A Theoretical Model Describing Diffusion of a Mixture of Different Types of Ions in Pore Solution of Concrete Coupled to Moisture Transport.** Division of Building Materials. LUND Institute of Technology, 2000.

JORGENSEN, P. S.; HANSEN, K. V.; LARSEN, R.; BOWEN, J. R. **Geometrical characterization of interconnected phase networks in three dimensions.** Journal of Microscopy, 244(1):45_58, 2011.

KACZMAREK, L. D.; ZHAO, Y.; KONIETZKY, H.; WEJRZANOWSKI, T.; MAKSIMCZUK, M. **Numerical approach in recognition of selected features of rock structure from hybrid hydrocarbon reservoir samples based on microtomography.** 2017. Studia Geotechnica et Mechanica, 49(1):13-26, 2017.

KHAN, S.I.; ISLAM, M.S. **An exploration of the generalized Cantor set.** Int. J. Sci. Technol. Res, 2, 50–54, 2013. Available online:
<https://citeseerx.ist.psu.edu/document?repid=rep1&type=pdf&doi=50006f37d8e6c4516f100d780415e2429a7e4295>

KAUFMAN, A. E. **Voxel as a Computational Representation of Geometry.** In The Computational Representation of Geometry. SIGGRAPH '94 Course Notes. 45 pages, 1995.

KHAN, F.; ENZMANN, F.; KERTEN, M.; WIEGMANN, A.; STEINER, K. **3D simulation of the permeability tensor in a soil aggregate on basis of nanotomographic imaging and LBE solver.** J Soils Sediments. 12(1):86–96, 2012.

KHITAB, A.; ANWAR, W.; ARSHAD, M. **Predictive Models of Chloride Penetration in concrete: An Overview.** Journal of Engineering and Applied Sciences. 1. 1-14, 2017.

KHITAB, A. **Modélisation des transferts ioniques dans les milieux poreux saturés: application à la pénétration des chlorures à travers les matériaux cimentaires.** PhD diss., Thèse de doctorat, Toulouse, France, 2005.

KIM, J.; CHOI, Y. C.; CHOI, S. **Fractal characteristics of pore structures in GGBFS-based cement pastes.** *Appl. Surf. Sci.* 428. 304–314, 2018.

KISHIMOTO, M.; IWAI, H.; MIYAWAKI, K.; SAITO, M.; YOSHIDA, H. **Improvement of the sub-gridscale model designed for 3D numerical simulation of solid oxide fuel cell electrodes using an adaptive power index.** *Journal of Power Sources*, 223:268_276, 2013.

KNOTT, G.; MARCHMAN, H.; WALL, D.; LICH, B. **Serial section scanning electron microscopy of adult brain tissue using focused ion beam milling.** *J. Neurosci.* 28, 2959–2964. 2008. 10.1523/JNEUROSCI.3189-07, 2008

KONDRAIVENDHAN, B.; DIVSHOLI, B.S.; TENG, S. **Estimation of strength, permeability and hydraulic diffusivity of pozzolana blended concrete through pore size distribution.** *J. Adv. Concr. Technol.* 11 (9). 230–237, 2013.

KOPONEN, A.; KATAJA, M.; TIMONEN, J. **Tortuous ow in porous media.** *Physical Review. E*, 54(1):406, 1996.

KUBO, R. **Reports on Progress in Physics.** V. 2. 29 255, 1966. DOI 10.1088/0034-4885/29/1/306.

LEIROZ, A. T.; AZEVEDO, L. F. A. **Paraffin deposition in a stagnant fluid layer inside a cavity subjected to a temperature gradient.** *Heat Transfer Engineering*, v. 28, n. 6, p. 567-575, 2007.

LEMONS, D. S.; GYTHIEL, A. **Paul Langevin's 1908 paper "On the Theory of Brownian Motion".** *American Journal of Physics - AMER J PHYS.* 65. 1079-1081, 1997.

LIANG, M. T.; LIN, S. M. **Modeling the transport of multiple corrosive chemicals in concrete structures: Synergetic effect study.** *Cement and Concrete Research*, Volume 33, Issue 12. Pages 1917-1924, 2003. ISSN 0008-8846. [https://doi.org/10.1016/S0008-8846\(03\)00081-4](https://doi.org/10.1016/S0008-8846(03)00081-4).

LI, T.; RAIZEN, M.G. **Brownian motion at short time scales.** *Ann Phys (Berlin)* 525:281–295, 2013.

LI, Y.; LI, B.; ZHANG, L.-Y.; MA, C.; ZHU, J.; LI, M.; PU, H. **Chloride Ion Corrosion Pattern and Mathematical Model for C60 High-Strength Concrete after Freeze-Thawing Cycles.** *Advances in Civil Engineering.* 5524599, 2021.

LIN, G.; LIU, Y.; XIANG, Z. **Numerical modeling for predicting service life of reinforced concrete structures exposed to chloride environments.** *Cem. Concr. Compos.*, 32 (8) pp. 571-579, 2010.

LINDQUIST, W. B.; LEE, S.-M.; COKER, D. A.; JONES, K. W.; SPANNE, P. **Medial axis analysis of void structure in three-dimensional tomographic images of porous media.** *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 101(B4):8297_831, 1996.

LITSTER, S.; EPTING, W.; WARGO, E.; KALIDINDI, S.; KUMBUR, E. **Morphological analyses of polymer electrolyte fuel cell electrodes with nano-scale computed tomography imaging.** Fuel Cells,13(5):935-945, 2013.

LIU; Q.-F.; CAI, Y.; PENG, H.; MENG, Z.; MUNDRA, S.; CASTEL, A. **A numerical study on chloride transport in alkali-activated fly ash/slag concretes.** Cement and Concrete Research, Volume 166,107094, 2023.
ISSN 0008-8846, <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2023.107094>.

LIU, Z.; JIA, Y. **Two Simulation Methods of Brownian Motion.** Journal of Physics: Conference Series 2012. 012015, 2021.DOI:10.1088/1742-6596/2012/1/012015

LIZARAZO, J. M.; CLAISSE, P. **Effect of non-linear membrane potential on the migration of ionic species in concrete.** Electrochimica Acta Volume 54, Issue 10, Pages 2761-2769, 2009.

LOPES, R. C; OLIVEIRA, A. M.; CASCUDO, O. **Modelos preditivos de vida útil de estruturas de concreto sujeitas à iniciação da corrosão de armaduras por cloretos: contribuição ao estado da arte por meio de revisão sistemática da literatura – Parte 2,** 2022. REVISTA MATÉRIA, VOL 27 N. 02.
<https://doi.org/10.1590/1517-7076-RMAT-2022-44823>

LUO, L.; YU, B.; CAI, J.; ZENG, X. **Numerical simulation of tortuosity for uid ow in two-dimensional pore fractal models of porous media.** Fractals, 22(04):1450015, 2014.

MAES, M.; TITTELBOOM, K. V.; BELIE, N. de; ZWAAG, S. V. de; GRUYAERT, E. **Resistance of cracked concrete healed by means of polyurethane against chloride penetration.** Ghent Belgium. Ghent University Magnel Laboratory for Concrete Research, 2013.

MAGALHÃES, T. A. **Análise da penetração de íons cloreto em compósitos cimentícios contendo diferentes teores de escória de alto-forno.** (Dissertação de mestrado). Universidade Federal de Minas Gerais. ENG- Departamento de Engenharia Materiais e da Construção Civil . Programa de Pós-Graduação em Construção Civil, 2019.

MANDELBROT, B.B. **The fractal geometry of nature.** Freeman, New York, 1982.

MATYKA, M.; KHALILI, A.; KOZA, Z. **Tortuosity-porosity relation in porous media flow.** Physical Review E, 78(2):026306, 2008.

MATYKA, M.; KOZA, Z. **How to calculate tortuosity easily?** In AIP Conference Proceedings 4, volume 1453, pages 17_22. AIP, 2012.

MAZER, W. **Metodologia para previsão da penetração de íons cloretos em estruturas de concreto armado utilizando a lógica difusa.** São José dos Campos, 2010, 237f. (Tese de Doutorado)

MAZER, W., LIMA, M. G., MEDEIROS-JUNIOR, R. A., WICKZICK, L. F. S. **Chloride ingress into concrete under different conditions of temperature and marine zones.** Magazine of Concrete Research 73(22), pp. 1180-1188, 2021. <https://doi.org/10.1680/jmacr.19.00451>.

MEHTA, P. K.; MONTEIRO, P. J. M. **Concreto: Microestrutura, Propriedades e Materiais.** 3. ed., 2008. São Paulo: Ibracon.

MEIRA, G. R. **Corrosão de armaduras em estruturas de concreto: Fundamentos, diagnóstico e prevenção.** João Pessoa: Editora IFPB, 127, 2017.

MENG, Q.; ZHANG, Y.; LIN, C-J.; JIANG, L.; CHEN, D. **Modeling of Chloride Distribution in Cement-Based Materials with Neumann Boundary Condition.** Advances in Materials Science and Engineering, 2018. 1-11. 10.1155/2018/8085954.

MLIBRARY University of Michigan Library. Acesso em 4 de junho de 2022. <https://guides.lib.umich.edu/c.php?g=282942&p=1885350>;

MILLER, C. C. **The Stokes-Einstein law for diffusion in solution.** *Proc. R. Soc. Lond.* A106724–749, 1924. <http://doi.org/10.1098/rspa.1924.0100>

MONTES, J.; CUEVAS, F.; CINTAS, J. **Electrical and thermal tortuosity in powder compacts.** Granular Matter, 9(6):401_406, 2007.

MORÁN, J. **On the Link between the Langevin Equation and the Coagulation Kernels of Suspended Nanoparticles.** Fractal Fract. 6, 529, 2022. <https://doi.org/10.3490/fractalfract6090529>

MÖRTERS, P.; PERES, Y. **Brownian motion.** Cambridge University Press, 416 pag., 2010. ISBN 0521760186, 9780521760188.

MOSTINSKY, I. L. **Diffusion coeficiente.** Thermopedia.10.1615 AtoZ.d.diffusion_coefficient, 2011. <https://www.thermopedia.com/content/695/>. Acesso em: 4 de fevereiro de 2022.

MOTA, M.; TEXEIRA, J. A.; BOWEN, W. R.; YELSHIN, A. **Binary spherical mixed beds: Porosity and permeability relationship measurement.** Trans.Filt. Soc. Vol. 1, No.4, 2001.

Mouvement Brownien. **Cours gratuits de physique.** Disponível em: <http://physique.coursgratuits.net/mecanique-statistique/mouvement-brownien.php> Acesso em 10 de março de 2022.

NAKASHIMA, Y.; KAMIYA, S. **Mathematica programs for the analysis of three-dimensional pore connectivity and anisotropic tortuosity of porous rocks using x-ray computed tomography image data.** Journal of Nuclear Science and Technology, 44(9):1233_1247, 2007.

NAKASHIMA, Y.; WATANABE, Y. **Estimate of transport properties of porous media by microfocos x-ray computed tomography and random walk simulation.** *Water Resources Research*, 38(12), 2002.

NEVILLE, A. M. **Propriedades do concreto.** São Paulo, Ed. Pini, 1997.

NEVILLE, A. **Chloride Attack of Reinforcement Concrete an Overview.** *Materials and Structures*, [s. l.], v. 28, p. 63–70, 1995.

NZS - NEW ZEALAND STANDARDS. NZS 3101: **Concrete structures standard—part 1. The design of concrete structures.** Wellington, New Zealand Standard. 309p., 2006.

NICOSAHEDRON. **Sierpinski-Mengersponge.** 2022.
https://github.com/NicolasDouillet/sierpinskimenger_sponge/releases/tag/v3.0.

NILSSON, L.-O. **Models for chloride ingress into concrete—from Collepardi to today.** *Int. J. Modelling, Identification and Control*, 7(2), 2009.

NILSSON, L.-O. **Prediction models for chloride ingress and corrosion initiation in concrete structures.** In *Proceedings of the Nordic Mini Seminar & fib TG 5.5 Meeting*, Goteborg, Sweden, 22–23, 2001.

OLLIVIER, J-P.; TORRENTI, J-M. **A estrutura porosa dos concretos e as propriedades de transporte.** In: OLLIVIER, J-P.; VICHOT, A. (ed.). *Durabilidade do concreto: Bases científicas para formulação de concretos duráveis de acordo com o ambiente.* Ed. Tradução: CASCUDO, Oswaldo; CARASEK, Helena. Cap. 3. São Paulo: IBRACON, p. 41-112, 2014.

OpenLB. 2019. <https://www.openlb.net/>.

OSTADI, H.; RAMA, P.; LIU, Y.; CHEN, R.; ZHANG, X.; JIANG, K. **3D reconstruction of a gas diffusion layer and a microporous layer.** *Journal of Membrane Science*, 351(1-2):69_74, 2010.

PAE, J.; ZHANG, Y.; POH, L. H.; MOON, J. **Three-dimensional transport properties of mortar with a high water-to-cement ratio using X-ray computed tomography.** *Construction and Building Materials*, Volume 281, 122608, 2021. ISSN 0950-0618. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2021.122608>.

PAGE, C. L.; SHORT, N. R.; EL TARRAS, A. **Diffusion of chloride ions in hardened cement pastes.** *Cement and Concrete Research*. 11(3), pp. 495-406, 1981.

PALABOS. 2019. Univeristy of Geneva. Geneva, Switzerland. <https://palabos.unige.ch/>.

PARDO-ALONSO, S.; VICENTE, J.; SOLÓRZANO, E.; RODRIGUEZ-PEREZ, M. Á., & LEHMUS, D. **Geometrical tortuosity 3D calculations in infiltrated aluminium cellular materials.** *Procedia Materials Science*, 4, 145-150, 2014.

PATEL, R. A.; PHUNG, O. T.; SEETHARAM, S. C.; PERKO, J.; JACQUES, D.; NAES, N.; SCHUTTER, G. De; YE, G.; BREUGEL, K. V. **Diffusivity of saturated ordinary portland cement-based materials: a critical review of experimental and analytical modelling approaches.** Cement and Concrete Research, 90, 52-72, 2016.

PEITGEN, H-O; JÜRGENS, H.; SAUPE, D. **Chaos and fractals: new frontiers of Science.** Second edition. 2004. DOI 10.1007/978-0-387-21823-6.

PENG, P.; WANG, L. **Targeted location of microseismic events based on a 3D heterogeneous velocity model in underground mining.** PLOS ONE. 14, 2019. e0212881. 10.1371/journal.pone.0212881.

PENG, S. MARONE, F.; DULTZ, S. **Resolution effect in x-ray microcomputed tomography imaging and small pore's contribution to permeability for a berea sandstone.** Journal of Hydrology, 510:403_411, 2014.

PETERSEN, E.E. **Diffusion in a pore of varying cross section.** AIChE J, 1958. 4:453e5. <https://doi.org/10.1002/aic.690040322>.

PHILIPSE, A.A.P. **Notes on Brownian Motion.** 2011. https://userpages.umbc.edu/~dfrey1/ench630/philipse_notes_on_brownian_motion.pdf

PINHEIRO, J. **Conjunto de Mandelbrot.** Acesso em 6 de junho de 2022. https://www.youtube.com/channel/UCZyFebN0_gF2yy5fhVhIXtA7

PISANI, L. **Simple expression for the tortuosity of porous media.** Transport in Porous Media, 88(2):193_203, 2011.

POSSAN, E.; DEMOLINER, C. **Desempenho, durabilidade e vida útil das n edificações: abordagem geral.** Revista CREA, 2013.

POTTIER, NOËLLE. **Nonequilibrium Statistical Physics Linear Irreversible Processes Chapter 10 Brownian motion: the Langevin model.** 2010. https://beckassets.blob.core.windows.net/product/readingsample/442318/9780199556885_excerpt_001.pdf

POULSEN, E.; MEJLBRO, L. **Diffusion of Chloride in Concrete: Theory and Application.** CRC Press, Architecture - 480 pages, Feb 25, 2010.

PROMENTILLA, M.A.B.; SUGIYAMA, T.; HITOMI, T.; TAKEDA, N. **Quantification of tortuosity in hardened cement pastes using synchrotron-based X-ray computed microtomography.** Cement and ConcretResearch, Volume 49, Issue 6. Pages 548-557, 2009. ISSN 0008-8846, <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2009.03.005>.

PROMENTILLA. M.A.B.; CORTEZ, S.M.; PAPEL, R.A.D.; TABLADA, B.M.; SUGIYAMA, T. **Evaluation of Microstructure and Transport Properties of**

Deteriorated Cementitious Materials from Their X-ray Computed Tomography (CT) Images. Materials (Basel). May 19;9(5):388, 2016.

DOI: 10.3490/ma9050388. PMID: 28773511; PMCID: PMC5503002.

RABBANI, A; AYATOLLAHI, S.; KHARRAT, R.; DASHTI, N. **Estimation of 3-D pore network coordination number of rocks from watershed segmentation of a single 2-D image,** Advances in Water Resources, Volume 94, Pages 264-277, 2016. ISSN 0309-1708. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2016.05.020>.

RABBANI, A; JAMSHIDI, S.; SALEHI, S. **An automated simple algorithm for realistic pore network extraction from micro-tomography images.** Journal of Petroleum Science and Engineering, Volume 123, Pages 164-171, 2014. ISSN 0920-4105, <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2014.08.020>.

RABBANI, A.; BABAEI, M. **Hybrid pore-network and lattice-Boltzmann permeability modelling accelerated by machine learning.** Advances in Water Resources, 126, 116-128, 2019. Algoritmo conectividade

RABBANI, A. Porous_Material_101- Direitos autorais (c), 2020b.

RABBANI, A.; BABAEI, M.; SHAMS, R.; WANG, Y. DA; CHUNG, T. **DeePore: a deep learning workflow for rapid and comprehensive characterization of porous materials.** Advances in Water Resources, 146, 103787, 2020.

ROZENBAUM, O; ROSCOAT, S.R. DU. **Representative elementary volume assessment of three-dimensional X-ray microtomography images of heterogeneous materials: application to limestones,** Phys. Rev. E 89, 053304, 2014.

SAETTA, A.V.; SCHREFLER, B.A.; VITALINI, R.V. **The carbonation of concrete and the mechanism of moisture, heat and carbon dioxide flow through porous materials.** Cement and Concrete Research, v.26, n.10, p.1479-1484, 1993.

SALVO, J. L. DI ; LUCA, G. DE; CIPOLLINA, A.; MICALE, G. **A full-atom multiscale modelling for sodium chloride diffusion in anion exchange membranes.** Journal of Membrane Science, Volume 637, 119646, 2021. ISSN 0376-7388. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2021.119646>.

SAMET, H. **Applications of spatial data structures: Computer graphics, image processing and GIS.** Addison-Wesley, Reading, MA, 1989.

SAN WU, Y.; VAN VLIET, L. J.; FRIJLINK, H. W.; VAN DER VOORT MAARSCHALK, K. **The determination of relative path length as a measure for tortuosity in compacts using image analysis.** European Journal of Pharmaceutical Sciences, 28(5):433_440, 2006.

SAOMOTO, H.; KATAGIRI, J. **Direct comparison of hydraulic tortuosity and electric tortuosity based on _nite element analysis.** Theoretical and Applied Mechanics Letters, 5(5):177_180, 2015.

SARDHARA, T.; AYDIN, R. C.; LI, Y.; PICHÉ, N.; GAUVIN, R.; CYRON, C.J.; RITTER, M. **Training deep neural networks to reconstruct nanoporous structures from fib tomography images using synthetic training data.** *Frontiers in Materials*. 9, 837006, 2022.

ŠAVIJA, B.; LUKOVIC, M.; SCHLANGEN, E. **Lattice modeling of rapid chloride migration in concrete.** *Cement and Concrete Research*. vol 61-62, pp. 49-63, 2014.

SEN, P. **Time-dependent diffusion coefficient as a probe of geometry, Concepts.** *Magn. Reson. A* 23 (1), 1–21, 2004.

SETHIAN, J. A. **A fast marching level set method for monotonically advancing fronts.** *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 93(4):1591_1595, 1996.

SHAFIKHANI, M.; CHIDIAC, S.E. **Quantification of concrete chloride diffusion coefficient—a critical review.** *Cem. Concr. Compos.* 99, 225–250, 2019.

SHANTI, N. O.; CHAN, V. W.; STOCK, S. R.; De CARLO, F.; THORNTON, K.; FABER, K. T. **X-ray micro-computed tomography and tortuosity calculations of percolating pore networks.** *Acta Materialia*, 71:126_135, 2014.

SHE, W.; ZHANG, Y.; JONES, M. R. **Three-dimensional numerical modeling and simulation of the thermal properties of foamed concrete.** *Construction and Building Materials* 50. pp. 421–431, 2014.

SHEARING, P. R.; BRANDON, N.; GELB, J.; BRADLEY, R.; WITHERS, P.; MARQUIS, A.; COOPER, S.; HARRIS, S. **Multi length scale microstructural investigations of a commercially available li-ion Battery electrode.** *Journal of The Electrochemical Society*, 159(7):A1023_A1027, 2012.

SHEN, L.; CHEN, Z. **Critical review of the impact of tortuosity on diffusion.** *Chem. Eng. Sci.* 62 (14), 3748–3755, 2007.

SHERWOOD, T. K.; PIGFORD, R. L.; WILKE, C.R. **Mass Transfer.** McGraw Hill, New York, 1975.

SHI, C.; HU, X.; WANG, X.; WU, Z.; SCHUTTER, G.D. **Effects of chloride ion binding on microstructure of cement pastes.** *J. Mater. Civ. Eng.*, 29 (1), p.04016183, 2016.

SILVA, Marianna Dantas da. **STUDY OF THE REPRESENTATIVE ELEMENTARY VOLUME OF CARBONATE ROCKS AND PORE NETWORK SIMULATION.** Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro. UFRJ, 2019

SILVA, PAULO. Triângulo de Sierpinski.
<https://www.mathworks.com/matlabcentral/answers/2180-plotting-sierpinski-s-triangle> , Acesso em 4 de março de 2022.

SIMPLEWARE. 2019. Synopsys. California, USA. <http://www.simpleware.com>.

SING, K. S. W. **Reporting physisorption data for gas/solid systems with special reference to the determination of surface area and porosity.** IUPAC Commission on Colloid and Surface Chemistry Including Catalysis. Pure and Applied Chemistry, 57, 603-619, 1985.

SING, K. S. W. **The use of nitrogen adsorption for the characterisation of porous materials.** Colloids Surf., A 187, 3-9, 2001.

SOBIESKI, W.; MATYKA, M.; GOLEMBIEWSKI, J.; LIPINSKI, S. **The path tracking method as an alternative for tortuosity determination in granular beds.** Granular Matter, 20(4):72, 2018.

SONG, H. W.; LEE, C.H.; ANN, K. Y. **Factors influencing chloride transport in concrete structures exposed to marine environments.** Cem. Concr. Compos. 30 (2) 113–121, 2008.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2007.09.005>.

SOUZA, V. C. M. de; RIPPER, T. **Patologia, recuperação e reforço de estruturas de concreto.** São Paulo: Pini. 255 p., 1998.

SPIECHOWICZ, J.; MARCHENKO, I.G.; HÄNGGI, P.; ŁUCZKA, J. **Diffusion Coefficient of a Brownian Particle in Equilibrium and Nonequilibrium: Einstein Model and Beyond.** Entropy, 25, 42, 2023.
<https://doi.org/10.3490/e25010042>

STANISH, K. D.; HOOTON, R. D.; THOMAS, M. D. A. **Testing the chloride penetration resistance of concrete: a literature review.** Department of Civil Engineerin. University of Toronto, Toronto, Ontario, Canada. FHWA Contract DTFH61-97-R-00022. Uploaded by 2014.

STENZEL, O.; PECHO, O.; HOLZER, L.; NEUMANN, M.; SCHMIDT, V. **Predicting effective conductivities based on geometric microstructure characteristics.** AIChE Journal, 62(5):1845-1843, 2016.

SUN, Y-M.; LIANG, M-T.; CHANG, T-P. **Time/depth dependent diffusion and chemical reaction model of chloride transportation in concrete.** Appl Math Model, 36: 1114–22, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2011.07.053>

SUN, Z., TANG, X., CHENG, G. **Numerical simulation for tortuosity of porous media.** Microporous and Mesoporous Materials. 173, pp. 37-42, 2013.

SUN, F.; ZIELKE, L.; MARKÖTER, H.; HILGER, A.; ZHOU, D.; MORONI, R.; ZENGERLE, R.; THIELE, S.; BANHART, J.; MANKE, I. **Morphological evolution of electrochemically plated/stripped lithium microstructures investigated by synchrotron x-ray phase contrast tomography.** ACS Nano, 10(8):7990_7997, 2016.

SUN W. C.; ANDRADE, J. E.; RUDNICKI, J. W. **Multiscale method for characterization of porous microstructures and their impact on macroscopic**

e_ective permeability. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 88(12):1260_1279, 2011.

SUN, Z.; TANG, X.; CHENG, G. **Numerical simulation for tortuosity of porous media.** Microporous Mesoporous Mater. 173, 37, 2013.

TAIWO, O. O.; FINEGAN, D. P.; EASTWOOD, D. S.; FIFE, J. L.; BROWN, L. D.; DARR, J. A.; LEE, P. D.; BRETT, D. J.; SHEARING, P. R. **Comparison of three-dimensional analysis and stereological techniques for quantifying lithium-ion battery electrode microstructures.** Journal of Microscopy, 263(3):280_292, 2016.

TARTAKOVSKY, D.; DENTZ, M. **Diffusion in Porous Media: Phenomena and Mechanisms.** Transport in Porous Media. 130. 1-23, 2019. 10.1007/s11242-019-01262-6.

THIBODEAUX, T. W.; SHENG, Q.; THOMPSON, K. E. **Rapid Estimation of Essential Porous Media Properties Using Image-Based Pore-Scale Network Modeling.** Industrial & Engineering Chemistry Research, 54 (16), 4474-4486, 2015. DOI: 10.1021/ie504981k

THOMAS, M. D. A.; BAMFORTH, P.B., **Modelling chloride diffusion in concrete: Effect of flyash and slag.** Cement and Concrete Research, Vol. 29, No. 4, April 1999.

THOVERT, J. F.; SALLES, J.; ADLER, P. M. **Computerized characterization of the geometry of real porous media: their discretization, analysis and interpretation.** Journal of microscopy, 170(1):65-79, 1993.

TJADEN, B.; BRETT, D. J.; SHEARING, P. R. **Tortuosity in electrochemical devices: a review of calculation approaches.** Int. Mater. Rev. 63 (2), 47–67, 2018.

TJADEN, B.; COOPER, S. J.; BRETT, D. J. L.; KRAMER, D.; SHEARING, P.R. **On the origin and application of Bruggeman correlation for analysing transport phenomena in electromechanical systems.** Curr. Opin. Chem. Eng., 12, pp. 44 51, 2016. 10.1016/j.coche.2016.02.006

TRANter, T. G.; KOK, M.D.R.; LAM, M.; GOSTICK, J.T. **Pytrax: A simple and efficient random walk implementation for calculating the directional tortuosity of images.** SoftwareX, Volume 10. 100277, 2019. ISSN 2352 7110, <https://doi.org/10.1016/j.softx.2019.100277>.

TRUC, O. **Prediction of chloride penetration into saturated concrete multi-species approach.** Thesis dissertation. Chalmers University of Technology, 2000.

TRUC, O.; OLLIVIER, J-P.; NILSSON, L-O. **Numerical simulation of multi-species transport through saturated concrete during a migration test — MsDiff code.** Cement and Concrete Research, 30(10), October 2000, Pages 1581–1592, doi:10.1016/S0008-8846(00)00305-7.

UFJF. Acesso em 28 de janeiro de 2023.

<https://www2.ufjf.br/fractalize/2021/05/07/box-counting/>

VACHIER, J., MAZZA, M.G. **Dynamics of sedimenting active Brownian particles**. *Eur. Phys. J. E* 42, 11, 2019. <https://doi.org/10.1140/epje/i2019-11770-6>

VLACK, L. H. V. **Princípios de ciência e tecnologia dos materiais**. São Paulo: Blucher, 1970.

VLAHOS, L.; ISLIKER, H.; KOMINIS, Y.; HIZANIDIS, K. **Normal and Anomalous Diffusion: A Tutorial**. 2008.

arXiv:0805.0419 [nlin.CD]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.0805.0419>

WALLE, W., JANSSEN, H. **A thermal conductivity prediction model for porous building blocks**. [Ein vorhersagemodell für die wärmeleitfähigkeit poröser bausteine]. *Bauphysik*. 38(6). pp. 450-457, 2016.

WALLE, W. V. de, JANSSEN, H. **Validation of a 3D pore scale prediction model for the thermal conductivity of porous building materials**. *Energy Procedia*, 132, 225-230, 2017.

WANSAPURA, J. **KOCH CURVE**

(<https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/55796-koch-curve>), MATLAB Central File Exchange. Acesso abril 12, 2022.

WANG, Y.; LI, L-Y; PAGE, C. L. **Modelling of chloride ingress into concrete from a saline environment**, *Building and Environment*. Volume 40, Issue 12. Pages 1573-1582, 2005. ISSN 0360-1323. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2005.02.001>.

WANG, Y.; MA, C.; LIU, Y.; WANG, D.; LIU, J. **A model for the effective thermal conductivity of moist porous building materials based on fractal theory**, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 125, Pages 387-499, 2018. ISSN 0017-9310, <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.04.063>.

WARGO, E.; KOTAKA, T.; TABUCHI, Y.; KUMBUR, E. **Comparison of focused ion beam versus nano-scale x-ray computed tomography for resolving 3-d microstructures of porous fuel cell materials**. *Journal of Power Sources*, 241:608_618, 2013.

WEERTS, A.; KANDHAI, D.; BOUTEN, W.; SLOOT, P. **Tortuosity of an unsaturated sandy soil estimated using gas diffusion and bulk soil electrical conductivity**. *Soil Science Society of America Journal*, 65(6):1577_1584, 2001.

WEISSBERG, H.L. **Effective diffusion coefficient in porous media**. *J. Appl. Phys.* 24, 2636, 1963.

WEGEN, G.V.D.; POLDER, R.B.; BREUGEL, K.V. **Guideline for service life design of structural concrete: a performance based approach with regard to chloride induced corrosion**. *Heron*, 57, pp. 153–168, 2012.

WILDENSCHILD, D; SHEPPARD, A. P. **X-ray imaging and analysis techniques for quantifying pore-scale structure and processes in subsurface porous medium systems**. *Advances in Water Resources*, Volume 51, Pages 217-246, 2013. ISSN 0309-1708, <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2012.07.018>.

WILSON, J. R.; KOBIRIPHAT, W.; MENDOZA, R.; CHEN, H.-Y.; HILLER, J. M.; MILLER, D. J.; THORNTON, K.; VOORHEES, P. W.; ADLER, S. B.; BARNETT, S. A. **Three-dimensional reconstruction of a solid-oxide fuel-cell anode**. *Nature Materials*, 5(7):541, 2006.

WU, Y.; TAHMASEBI, P.; LIN, C.; ZAHID, M.A.; DONG, C.; GOLAB, A.N.; REN, L. **A comprehensive study on geometric, topological and fractal characterizations of pore systems in low-permeability reservoirs based on SEM, MICP, NMR and X-ray CT experiments** *Mar. Petrol. Geol.*, 103, pp. 12-28, 2019. [10.1016/j.marpetgeo.2019.02.003](https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2019.02.003)

XIAO, B.; ZHANG, X.; WANG, W. E. I.; LONG, G.; CHEN, H.; KANG, H. A. O.; REN, W. E. N. **A fractal model for water flow through unsaturated porous rocks**. *Fractals* 26(2). 1840015, 2018.

XU, P.; YU, B. **Developing a new form of permeability and Kozeny–Carman constant for homogeneous porous media by means of fractal geometry**. *ADV. WATER RESOUR.* 31, 74–81, 2008.

XU, P.; QIU S. X.; CAI, J. C.; LI, C. H.; LIU, H. C. **A novel analytical solution for gas diffusion in multi-scale fuel cell porous media**. *J. Power Sour.* 362:73-79, 2017.

YANG, J.; ZHANG, P. **A concise pore structure model for predicting the effective ion diffusion coefficients of cementitious materials**. *Construction and Building Materials* (IF6.141), 2020. DOI: [10.1016/j.conbuildmat.2020.120321](https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.120321)

YAO, L.; REN, L.; GONG, G.; ZHANG, J. **Simulation of chloride diffusion in concrete based on a new mesoscopic numerical method**. *Hindawi. Advances in Civil Engineering*. 2020. ID 5318106 | <https://doi.org/10.1155/2020/5318106>

YE, H.; FU, C.; JIN, N.; JIN, X. **Performance of reinforced concrete beams corroded under sustained service loads: a comparative study of two accelerated corrosion techniques**. *Constr. Build. Mater.*, 162, 286–297, 2018.

YUAN, Q.; SHI, C.; DE SCHUTTER, G.; AUDENAERT, K.; DENG, D. **Chloride binding of cement-based materials subjected to external chloride environment – a review**. *Constr. Build. Mater.*, 23 (1), pp. 1-13, 2009.

YIO, M.H.N.; WONG, H.S.; BUENFELD, N.R. **Representative elementary volume (REV) of cementitious materials from three-dimensional pore structure analysis**. *Cement and Concrete Research*, Volume 102, Pages 187-202, 2017. ISSN 0008-8846, <https://doi.org/10.1016/j.cemconres>.

YU, B. CHENG, P. **A fractal permeability model for bi-dispersed porous media.** *Int. J. Heat Mass Transfer.* 45, 2983-2993, 2002.

YU, B. M. **Analysis of flow in fractal porous media.** *Applied Mechanics Reviews.* Vol. 61:05081-19, 2008.

ZAMBRANO, M.; TONDI, E.; MANCINI, L.; ARZILLI, F.; LANZAFAME, G.; MATERAZZI, M.; TORRIERI, S. **3D Pore-network quantitative analysis in deformed carbonate grainstones.** *Marine and Petroleum Geology.* Volume 82, Pages 251-264, 2017.
ISSN 0264-8172. <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2017.02.001>.

ZENG, Q.; JIKE, N.; LIU, J.; WANG, Z.; WANG, J. **Fractal analysis of stress-dependent diffusivity of porous cementitious materials.** *Fractals*, 28(06), 2050117, 2020.

ZHANG, X.; KNACKSTEDT, M. A. **Direct simulation of electrical and hydraulic tortuosity in porous solids.** *Geophysical Research Letters*, 22(17):2333_2336, 1995.

ZHANG, P.; CONG, Y.; VOGEL, M.; LIU, Z.; MÜLLER, H. S.; ZHU, Y.; ZHAO, T. **Steel reinforcement corrosion in concrete under combined actions: The role of freeze-thaw cycles, chloride ingress, and surface impregnation.** *Construction and Building Materials.* 148, pp. 113-121, 2017.

ZHANG, C.; LI, X.; CHEN, F.; WANG, X.; ZHENG, J. **Brownian Motion Simulation for Estimating Chloride Diffusivity of Cement Paste.** *Materials* 2023, 16, 2002.
<https://doi.org/10.3490/ma16052002>.

ZHAO, L.; FENG, P. ; CHEN, C.; LIU, Q. ; GENG, G. **A chloride diffusion model for cementitious material with pore-solution viscosity enhancement.** *Journal of Building Engineering*, Volume 91, 109635, 2024.
ISSN 2352-7102, <https://doi.org/10.1016/j.job.2024.109635>.

APÊNDICE A - Algoritmos

O apêndice A apresenta os algoritmos usados na pesquisa

Alguns algoritmos utilizados na pesquisa estão citados a seguir. Lembrando que os parâmetros de quantidade de partículas, número de passos, fórmulas utilizadas podem mudar dependendo da simulação desejada.

Algoritmo para determinação da difusão, tortuosidade, concentração superficial, concentração, profundidade do íon cloreto:

```
% dados iniciais Adaptado de EPFL (2018)

N=      % quantidade de partícula - pode ser 10,7, 5- adaptada para a pesquisa
P=      % P=10000000 - quantidade de passos (deslocamentos)ou outra que
adotar conforme o
tau=    % tau= 2000000000000 % tempo - ou outra que adotar conforme o elemento
d = 1e-6; % raio em metros- d = 1e-6; ou outra que adotar conforme o elemento
eta = 1.0e-3; % viscosidade - eta = 1.0e-3;
kB = 1.38e-23; % constante de Boltzmann - kB = 1.38e-23;
T = 293; % temperatura em Kelvin - T = 293;

% equação da difusão a ser simulada aqui está representada a de Stokes-
Einstein
% aqui pode utilizar STOKES-EINSTEIN ou as equações sugeridas para o caminho
1 e caminho 2 pelo autor (inovação)

Dse= (kB*T)/(6*pi*eta*d) %%% STOKES-EINSTEIN - simulação de referência

%%%%%%%%%%%%
time = 0:tau:(P-1)*tau; % tempo
dimensions = 3; % dimensão 3D
a = 0;
b = 0;
c = 0;

% deslocamento para o movimento Browniano
k = sqrt(2*Dse*tau) % Stokes-Einstein

%%%%%%%%%%%% Adaptado de EPFL (2018)

Npart = { };
for i = 1:N
    s = rng

    Np{i}.dx = a+(k*(randn(1,P)));
    Np{i}.dy = b+(k*(randn(1,P)));
    Np{i}.dz = c+(k*(randn(1,P)));
    Np{i}.x = cumsum(Np{i}.dx);
    Np{i}.y = cumsum(Np{i}.dy);
    Np{i}.z = cumsum(Np{i}.dz);
    Np{i}.drsquared = Np{i}.dx.^2 + Np{i}.dy.^2 + Np{i}.dz.^2
    Np{i}.rsquared = Np{i}.x.^2 + Np{i}.y.^2 + Np{i}.z.^2
    Np{i}.dxdrsquared = Np{i}.dx.^2; % na direção x
    Np{i}.dydrsquared = Np{i}.dy.^2; % na direção y
    Np{i}.dzdrsquared = Np{i}.dz.^2; % na direção z

% calcula a difusão devido o movimento Browniano- Adaptado de EPFL (2018)

Np{i}.D = mean(Np{i}.drsquared)/(2 * dimensions * tau)
```

```

D(i) = Np{i}.D;
Np{i}.standardError = std(Np{i}.drsquared)/(2*dimensions*tau*sqrt(P));
dx(i,:) = Np{i}.dx;
e(i) = Np{i}.standardError;

% calcula a tortuosidade - Autorial própria (2023)
Np{i}.Tort = (Np{i}.drsquared).^(-1);

% calcula a tortuosidade na direção x, y, z - Autorial própria (2023)
Np{i}.TortDX =mean(Np{i}.dxdrsquared).^(-1);%
Np{i}.TortDY =mean(Np{i}.dydrsquared).^(-1);%
Np{i}.TortDZ =mean(Np{i}.dzdrsquared).^(-1);%

% calcula o erro da tortuosidade - Autorial própria(2023)
Np{i}.standardErrorTort = std(Np{i}.drsquared).^(-1);

% calcula o erro da tortuosidade na direção x, y, z- Autorial própria(2023)
Np{i}.standardErrorTortDX = std(Np{i}.dxdrsquared).^(-1);
Np{i}.standardErrorTortDY = std(Np{i}.dydrsquared).^(-1);
Np{i}.standardErrorTortDZ = std(Np{i}.dzdrsquared).^(-1);

% calcula a média da tortuosidade Autorial própria (2023)
Np{i}.Tort=mean(Np{i}.Tort);

% calcula a média da tortuosidade na direção x, y, z - Autorial própria(2023)
Np{i}.TortDX=mean(Np{i}.TortDX);
Np{i}.TortDY=mean(Np{i}.TortDY);
Np{i}.TortDZ=mean(Np{i}.TortDZ);

% tortuosidade para todas as partículas - Autorial própria (2023)
Tort(i)=Np{i}.Tort;

% tortuosidade para direção x,y e z - Autorial própria (2023)
TortDX(i)=Np{i}.TortDX;
TortDY(i)=Np{i}.TortDY;
TortDZ(i)=Np{i}.TortDZ;

dx(i,)= Np{i}.dx;
dy(i,)= Np{i}.dy;
dz(i,)= Np{i}.dz;

ee(i)=Np{i}.standardErrorTort; %
eeDX(i)=Np{i}.standardErrorTortDX;
eeDY(i)=Np{i}.standardErrorTortDY;
eeDZ(i)=Np{i}.standardErrorTortDZ;%

rng(s);
end

% MÉDIA E INCERTEZA DIFUSÃO – Adaptado de EPFL (2018)
averageD =mean(D) % média da difusão
average =mean(e) % média do erro
uncertainty=std(D)/sqrt(N) % incerteza da difusão
figure(1)
clf; % LIMPA PARA OUTRO GRÁFICO
hold on; % plota tudo no mesmo gráfico
plot((averageD*ones(1,N)), 'g-', 'linewidth',2);
plot((averageD+uncertainty)*ones(1,N), 'b-', 'linewidth',1);

```

```

plot((averageD-uncertainty)*ones(1,N), 'm-', 'linewidth',1);
errorbar(D,e, 'ro');
xlabel('número de partículas');
ylabel(' Coeficiente de difusão');
legend ('Média da difusão', 'Média da difusão + incerteza', 'Média da difusão
- incerteza', ' Difusão')
hold off;

%%%%%%%%%
% MÉDIA E INCERTEZA TORTUOSIDADE - Autoria própria (2023)
averageeee =mean(ee);
averageTort =mean(Tort);
uncertaintyTort=std(Tort)/sqrt(N)

% - Autoria própria (2023)
averageTortDX =mean(TortDX)
averageDX =mean(eeDX)
uncertaintyTortDX=std(TortDX)/sqrt(N)

averageTortDY =mean(TortDY)
averageDY =mean(eeDY)
uncertaintyTortDY=std(TortDY)/sqrt(N)

averageTortDZ =mean(TortDZ)
averageDZ =mean(eeDZ)
uncertaintyTortDZ=std(TortDZ)/sqrt(N)

%%%%%%%%%
figure(2)
clf; % LIMPA PARA OUTRO GRÁFICO
hold on; % plota tudo no mesmo gráfico

% Adaptado de EPFL (2018)
plot((averageTort*ones(1,N)), 'g-', 'linewidth',2);
plot((averageTort+uncertaintyTort)*ones(1,N), 'b-', 'linewidth',1);
plot((averageTort-uncertaintyTort)*ones(1,N), 'm-', 'linewidth',1);
errorbar(Tort,ee, 'ro');
xlabel('número de partículas');
ylabel('TORTUOSIDADE');
legend ('Média da Tortuosidade', 'Média da Tortuosidade + incerteza ', 'Média
da Tortuosidade - incerteza', ' Tortuosidade');
hold off;
rng(s);

%%%%%%%%%
% cálculo da concentração e profundidade - Autoria própria (2023)

s = rng; % INÍCIO -garante mesma concentração e profundidade
NT=10;
t=[1 2 3 4 5 6 7 8 9 10];
n=0.47; %%
m=0.51; %%
m11=0.49 %%
averageD %
D2=averageD*3.15e13; % converter de m2/s para mm2/ano
D22=2*(D2^(1/2));

m1=0.245; %

```

```

for i =1:NT
    CS(i)=0.24*(t(i)^n); % certo
    Dtempo(i)=averageD*(t(i)^(-m)); % aqui certo seria o D1 em m2/s
    X(i)=D22*(t(i)^(m11)); % USAR ESSE PARA KB = 1,38E-23
    C(i)=CS(i)*(1-(erf(X(i)/(D22*(t(i)^(m1)))))); % USAR ESSE
end
rng(s);

%%% DADOS EM TABELA - Autoria própria (2023)
TDIFTOR= table([D(1); D(2); D(3); D(4); D(5); D(6); D(7); D(8); D(9); D(10);
average; averageD; uncertainty], ...
[Tort(1); Tort(2); Tort(3); Tort(4); Tort(5); Tort(6); Tort(7); Tort(8);
Tort(9); Tort(10); averageee; averageTort; uncertaintyTort],...
[TortDX(1); TortDX(2); TortDX(3); TortDX(4); TortDX(5); TortDX(6); TortDX(7);
TortDX(8); TortDX(9); TortDX(10);averageDX; averageTortDX;
uncertaintyTortDX], ...
[TortDY(1); TortDY(2); TortDY(3); TortDY(4); TortDY(5); TortDY(6); TortDY(7);
TortDY(8); TortDY(9); TortDY(10); averageDY; averageTortDY;
uncertaintyTortDY], ...
[TortDZ(1); TortDZ(2); TortDZ(3); TortDZ(4); TortDZ(5); TortDZ(6); TortDZ(7);
TortDZ(8); TortDZ(9); TortDZ(10); averageDZ; averageTortDZ;
uncertaintyTortDZ], ...
'VariableNames',{'DIFUSÃO'; 'TORTUOSIDADE'; 'TORTUOSIDADE x'; 'TORTUOSIDADE
y'; 'TORTUOSIDADE z'}, ...
'RowNames',{'1';'2';'3';'4';'5';'6';'7';'8';'9';'10'; 'MÉDIA ERRO'; 'MÉDIA
D'; 'INCERTEZA ERRO'})

%%% DADOS EM TABELA - Autoria própria (2023)
TXCCSD= table([X(1);X(2);X(3);X(4);X(5);X(6);X(7);X(8);X(9);X(10),...
[CS(1);CS(2);CS(3);CS(4);CS(5);CS(6);CS(7);CS(8);CS(9);CS(10)], ...
[C(1);C(2);C(3);C(4);C(5);C(6);C(7);C(8);C(9);C(10)], ...

[Dtempo(1);Dtempo(2);Dtempo(3);Dtempo(4);Dtempo(5);Dtempo(6);Dtempo(7);Dtemp
o(8);Dtempo(9);Dtempo(10)],...
'VariableNames',{'PROFUNDIDADE X'; 'CONCENTRAÇÃO NA SUPERFÍCIE -
CS'; 'CONCENTRAÇÃO C'; 'DIFUSÃO D'}, ...
'RowNames',{'1';'2';'3';'4';'5';'6';'7';'8';'9';'10'});

%%%%%%%%%%%%%%

%elemento representativo - 3D - adaptado de Arash Rabbani(2020b)
%RABBANI, A. Porous_Material_101- Direitos autorais (c) 2020b.

load('A.mat') % Arash Rabbani(2020b) - pode ser outra imagem
A=A(50:70,50:70,50:70); % adaptado de Arash Rabbani(2020b) - tamanho
escolhido pelo autor, pode ser outro tamanho

A=double(A);
S=size(A);
S=permute(S,[2,1,3]);
figure (3);
[X,Y,Z]=meshgrid(1:S(1),1:S(2),1:S(3));
xslice=[1,S(1)];
yslice=[1,S(2)];
zslice=[1,S(3)];
h=slice(X,Y,Z,A,xslice,yslice,zslice);
xlabel('x (micron)');
ylabel('y (micron)');

```

```

xlabel('z (micron)');
axis equal tight

%%%%%% Arash Rabbani(2020b)
B=segment(A);
[Network,Connections]=netcon(B); %extraíndo a rede de conexões

%%%%%%
%calculando centro e tamanho dos poros - Arash Rabbani(2020b)
Res=3 %(micron/pixel)
REG=regionprops(B);
for I=1:max(B(:));
    Centers(I,:)=REG(I).Centroid;
end
Equiv_Rad=( [REG(:).Area].*3./4./pi).^(1/3)*Res;
Property=Equiv_Rad'; % micron

hold on;

figure(4)
isosurface(A);
alpha .3;
axis ([50 70 50 70 50 70])%
axis equal tight
xlabel('x (micron)');
ylabel('y (micron)');
zlabel('z (micron)');
hold off;
hold on;

%% Arash Rabbani(2020b), Rabbani e Babaei (2019)
netvis(Connections,Centers,Property)
figure(5)
axis ([50 70 50 70 50 70])
axis equal tight
xlabel('x (micron)');
ylabel('y (micron)');
zlabel('z (micron)');
hold off;

s= rng;
hold on;
netvis(Connections,Centers,Property)
figure(6)
view(3);
axis ([50 70 50 70 50 70])% adaptado de Arash Rabbani(2020b)
xlabel('x (micron)');
ylabel('y (micron)');
zlabel('z (micron)');
grid on;
hold off;
rng(s);

```

Algoritmo para determinação da curva de Gauss:

```
clear; close all %%Autoria própria (2023) - exemplo de gráfico no MATLAB
%% valores obtidos nas simulações
```

```
TORT1=[1.167366409737470 1.167366400809080 1.167366409737470
1.167366409737710 1.167366400809320 1.167366409737710
1.167366409738030 1.167366400809640 1.167366409738030];
figure(1)
histogram(TORT1)
histfit(TORT1)
xlabel({'TORTUOSIDADE 1'});
ylabel({'FREQUÊNCIA'});

TORT2=[1.167366409737470 1.167366400809080 1.167366409737470
1.167366409737710 1.167366400809320 1.167366409737710
1.167366409738030 1.167366400809640 1.167366409738030];
figure(2)
histfit(TORT2)
xlabel({'TORTUOSIDADE 2'});
ylabel({'FREQUÊNCIA'});

TORT3=[1.167366408555550000 1.167366499627160000 1.167366408555550000
1.167366408555790000 1.167366499627490000 1.167366408555790000
1.167366408556110000 1.167366499627710000 1.167366408556110000];
figure(3)
histfit(TORT3)
xlabel({'TORTUOSIDADE 3'});
ylabel({'FREQUÊNCIA'});

TORT4=[1.167366409737480000 1.167366400809080000 1.167366409737480000
1.167366409737710000 1.167366400809320000 1.167366409737710000
1.167366409738030000 1.167366400809640000 1.167366409738030000];
figure(4)
histfit(TORT4)
xlabel({'TORTUOSIDADE 4'});
ylabel({'FREQUÊNCIA'});
```

Algoritmo para determinação da porosidade

```
% Adaptado de Rabbanni e Salehi (2017) - exemplo -
clear; close all
% porosidade - calculo - IMAGEM 70x70x70
clear; close all; clc;
File_Name='A.jpg';
Resolution=3; % micron/pixel % RESOLUÇÃO ESPACIAL
N=4; % Número de níveis de intensidade na imagem
A=imread(File_Name);
if ndims(A)==3; B=rgb2gray(A); end
level = multithresh(B,N);
C= imquantize(B,level);
RGB1 = label2rgb(B);
imwrite(RGB1,[File_Name(1:end-4) 'Mapa de Profundidade.png']);
P=zeros(size(C));
```

```

for I=1:size(C,1)
    for J=1:size(C,2)
        if C(I,J)==1
            P(I,J)=1;
        end
    end
end
P=1-P;
P=bwmorph(P, 'majority',1);
imwrite(P,[File_Name(1:end-4) 'Segmentação Binária.png']);
Conn=8;
[s1,s2]=size(P);
D=-bwdist(P, 'cityblock');
B=medfilt2(D,[3 3]);
B=watershed(B,Conn);
Pr=zeros(s1,s2);
for I=1:s1
    for J=1:s2
        if P(I,J)==0 && B(I,J)~=0
            Pr(I,J)=1;
        end
    end
end
Pr=bwareaopen(Pr,9,Conn);
[Pr_L,Pr_n]=bwlabel(Pr,Conn);
RGB2 = label2rgb(Pr_L, 'jet', 'white', 'shuffle');
imwrite(RGB2,[File_Name(1:end-4) 'Segmentação de espaço de poros.png']);
V=zeros(Pr_n,1);
for I=1:s1
    for J=1:s2
        if Pr_L(I,J)~=0
            V(Pr_L(I,J))=V(Pr_L(I,J))+1;
        end
    end
end
SP=4*pi*sum(sum(Pr))/(sum(sum(bwperim(Pr,4))))^2;
X=Resolution.*(V./pi).^5; % raios do poro
Porosity=1-mean(P(:))
Average_Pore_radius=mean(X) % micron
Standard_Deviation_of_Pore_radius=std(X) % micron
figure;
subplot(2,3,1); imshow(A); title('Imagem Original SEM');
subplot(2,3,2); imshow(RGB1); title('Mapa de profundidade');
subplot(2,3,3); imshow(P); title('Segmentação binária');
subplot(2,3,4); imshow(RGB2); title('Segmentação de espaço de poros');
annotation('textbox',[0 .9 .1 .1], 'String', [ 'Porosidade = '
num2str(Porosity) ' (fração)']);
subplot(2,3,5:6); hist(X,25); xlabel('Raio do poro (µm)');
ylabel('Frequência'); title('Distribuição do tamanho dos poros');
set(gcf, 'Position' , get(0, 'ScreenSize' ));

```

Algoritmo para modelagem 3D

```
%%% Arash Rabbani(2020b) - 3D

load('A.mat') % Arash Rabbani(2020b)
A=A(1:200,1:200,1:200);

A=double(A);
S=size(A);
S=permute(S,[2,1,3]);
figure (1);
[X,Y,Z]=meshgrid(1:S(1),1:S(2),1:S(3)); % CONTRUIR 3D NESSA MALHA
xslice=[1,S(1)];
yslice=[1,S(2)];
zslice=[1,S(3)];
h=slice(X,Y,Z,A,xslice,yslice,zslice);
xlabel('x');
ylabel('y');
zlabel('z');
title('3D');
axis equal tight

for I=1:6
    h(I).EdgeColor='none';
end
```

Algoritmo para modelagem 2D

```
%% Arash Rabbani(2020b) - 3D
```

```
clear; close all
```

```
x = imread('A.jpg');
figure % figura 1 original
imagesc(x) % figura 1 original com eixos x,y
whos x % não precisa esse comando , só se quiser
```

```
x=mean(x,3); % acredito que a partir daqui os comandos a seguir binarizam
x=double(x);
x=imgaussfilt(x);
%t= imgaussfilt(x,2);
W=x>100;
figure; imagesc(x)% cor azulada... fig 2 com eixos x,y
```

```
y = uint8(-1*(double(x)-255)); % deixa amarela imag fig 3 com eixos x,y
figure; imagesc(y) % fig 3
```

até aqui as figuras acima

```
load('A.mat')
```

```
A=A(1:200,1:200,1:200);
figure
isosurface(A);axis equal tight %espaços vazios do cubo %tortuosidade???)% fig 4
```

```
%plotagem do cubo com a brita (círculos em amarelo) e os espaços vazios
(amarelo)fig 2
```

```
A=double(A);
S=size(A);
S=permute(S,[2,1,3]);
figure;
[X,Y,Z]=meshgrid(1:S(1),1:S(2),1:S(3));
xslice=[1,S(1)];
yslice=[1,S(2)];
zslice=[1,S(3)];
h=slice(X,Y,Z,A,xslice,yslice,zslice); axis equal % FIG 5
```

```
for I=1:6 % 6 lados do cubo
    h(I).EdgeColor='none';
end %%% aqui o cubo está com a brita e os espaços fig 2
```

```
% plotagem do cubo somente os ciculos - iso-surface fig 3
```

```
A=1-A;
S=size(A);
B=ones(S+2);
B(2:end-1,2:end-1,2:end-1)=A;
figure; isosurface(B); axis equal tight %%% aqui o cubo aparece com a brita (
ciculos) %fig 6
```

```

%%%%%%%%%%
A=ovspheres();
vol(A)
L=segment(A);
surf(L)
Res=5; % resolução espacial (micron/pixel)
REG=regionprops(L);
Equiv_Rad=( [REG(:).Area].*3./4./pi).^(1/3)*Res;

% plotando a a distribuição do tamanho dos poros
figure; histogram(Equiv_Rad,20,'Normalization','Probability');
xlabel('RAIO DO PORO (micron)');
ylabel('Probability')
title('Distribuição do tamanho dos poros')

% plotando a distribuição de tamanho de poro ajustada
figure; histfit(Equiv_Rad,20,'lognormal');
xlabel('RAIO DO PORO (micron)');
ylabel('Probability')
title('Distribuição do tamanho dos poros')

% plotando distribuições de tamanho de grãos e poros
L=segment(1-A);
surf(L)
vol(L~=0)
REG=regionprops(L);
Equiv_Rad2=( [REG(:).Area].*3./4./pi).^(1/3)*Res;
figure; histogram(Equiv_Rad,20,'Normalization','Probability');
hold on; histogram(Equiv_Rad2,20,'Normalization','Probability');
xlabel('RAIO DO PORO (micron)');
ylabel('Probability')
title('Distribuição do tamanho dos poros')
legend({'Distribuição do tamanho dos poro','Tamanho dos grãos'})
title('Distribuição do tamanho dos poros e grãos')

```

APÊNDICE B - Coordenada dos poros

O apêndice B apresenta as coordenadas dos poros obtidas nas simulações do elemento representativo de volume com resolução 3.

Para cada tamanho do elemento representativo de volume as Tabelas 32 e 33 apresentam as coordenadas do centro dos poros

Tabela 32 – Coordenadas dos poros - 50-70x50-70x50-70 voxel – resolução 3

ÁREA	COORDENADAS DO CENTRO DO PORO (x,y,z)	CAIXA DELIMITADORA
271	[3.58671586715867, 17.5756457564576, 3.12546125461255]	[0.500000000000000, 10.50000000000000, 0.500000000000000, 7,11,7]
1337	[16.4248317127898, 15.3749715781601, 7.64024945181002]	[8.500000000000000, 4.500000000000000, 0.500000000000000, 13,17,18]
224	[16.2901785714286 ,17.5758928571429, 18.8214285714286]	[12.50000000000000, 9.500000000000000, 14.50000000000000, 7,12,7]
80	[19.21250000000000, 3.787500000000000, 19.86250000000000]	[16.50000000000000, 0.500000000000000, 17.50000000000000, 5,8,4]

Tabela 33 – Coordenadas dos poros - 0-70x0-70x0-70 voxel- resolução 3

ÁREA	COORDENADAS DO CENTRO DO PORO	CAIXA DELIMITADORA
157	[33.7070063694268,22.687898089 1720,2.42675159235669]	[29.5000000000000,15.5000000000 00,0.50000000000000,9,13,6]
310	[33.7774193548387,64.741935483 8710,2.74193548387097]	[26.5000000000000,60.5000000000 00,0.50000000000000,14,9,7]
290	[46.1310454827586,29.106896551 7241,1.75862068965517]	[31.5000000000000,24.5000000000 00,0.50000000000000,23,10,3]
2613	[53.5748182166093,61.086107921 9288,4.9154228857214]	[40.5000000000000,44.5000000000 00,0.50000000000000,30,26,16]
131	[37.3664122137405,48.465648854 9618,4.24427480916031]	[45.5000000000000,44.5000000000 00,0.50000000000000,5,8,9]
1833	[64.8385160938352,9.6863066012 0022,8.02455881069285]	[58.5000000000000,0.5000000000 000,0.50000000000000,12,20,16]
1167	[56.9443016281063,55.998286204 9417,12.2493573264782]	[49.5000000000000,45.5000000000 00,8.50000000000000,20,19,8]
593	[42.9915682967960,68.328836424 9578,16.9730185497471]	[33.5000000000000,64.5000000000 00,9.50000000000000,18,6,15]
8457	[47.3306577213370,29.322511081 8258,17.5588845311729]	[29.5000000000000,9.5000000000 00,2.50000000000000,38,35,36]
145	[6.98620689655172,50.296551724 1379,19.0551724137931]	[2.50000000000000,45.5000000000 00,14.5000000000000,12,8,9]
320	[17.5093750000000,55.443750000 0000,21.4312500000000]	[12.5000000000000,48.5000000000 00,14.5000000000000,11,12,14]
45	[20.0888888888889,45.066666666 6667,19.1333333333333]	[15.5000000000000,42.5000000000 00,13.5000000000000,8,5,10]
132	[59.1363636363636,3.8560606060 6061,20.9318181818182]	[55.5000000000000,0.5000000000 000,17.5000000000000,7,8,8]
3255	[54.5963133640553,54.281105990 7845,25.8279569892473]	[41.5000000000000,42.5000000000 00,17.5000000000000,26,23,18]
140	[69.5142857142857,50.157142857 1429,23.9214285714286]	[68.5000000000000,43.5000000000 00,15.5000000000000,2,12,14]
464	[51.1810454827586,43.484913793 1045,27.5000000000000]	[40.5000000000000,41.5000000000 00,20.5000000000000,22,4,12]
142	[1,63.2183098591549,28.16901408 45070]	[0.50000000000000,49.5000000000 000,18.5000000000000,1,21,21]
154	[43.6103896103896,69.227272727 2727,29.6948051948052]	[38.5000000000000,66.5000000000 00,25.5000000000000,11,4,11]
2549	[10.5527657905061,65.151049623 3817,30.9482149862691]	[2.50000000000000,54.5000000000 00,16.5000000000000,19,16,45]
856	[42.9123831775701,63.918224299 0654,36.0689252336449]	[45.5000000000000,57.5000000000 00,28.5000000000000,17,12,15]
836	[21.6758373205742,66.356459330 1435,40.0059808612440]	[17.5000000000000,58.5000000000 00,31.5000000000000,13,12,19]
25	[65.6400000000000,9.360000000 0000,41]	[64.5000000000000,7.5000000000 00,38.5000000000000,3,4,4]
1869	[46.4269662921458,27.370786516 8549,43.2322097378277]	[37.5000000000000,15.5000000000 00,32.5000000000000,23,24,22]
1582	[50.2515802781290,66.436788874 8420,48.7604298356511]	[41.5000000000000,60.5000000000 00,36.5000000000000,17,10,23]
938	[26.2889125799574,10.288912579 9574,45.1929637526652]	[16.5000000000000,0.5000000000 000,38.5000000000000,18,17,12]
1650	[65.5836363636364,65.163030303 0303,54.3690909090909]	[59.5000000000000,53.5000000000 00,49.5000000000000,11,17,28]
5911	[37.4566418541702,48.647098629 6735,54.5389950938927]	[17.5000000000000,32.5000000000 00,37.5000000000000,38,32,33]
641	[52.8361945477379,3.8377535101 4041,55.3790951638066]	[44.5000000000000,0.5000000000 000,47.5000000000000,13,10,16]

979	[62.7242083758938,6.2053115424 9019,53.6608784474953]	[58.5000000000000,0.500000000000 000,40.500000000000,12,20,23]
23	[1.95652174913043,69.782608695 6522,56.7826086956522]	[0.500000000000000,68.5000000000 000,51.500000000000,4,2,10]
1981	[33.2322059565876,10.660272589 6012,58.2549121655729]	[20.5000000000000,0.500000000000 000,51.500000000000,26,18,12]
298	[28.7181208053691,65.218120805 3691,65.3590604026846]	[22.5000000000000,60.500000000000 00,61.500000000000,14,10,8]
902	[7.56097560975610,5.1308204991 1308,64.9190687361419]	[0.500000000000000,0.500000000000 0000,57.500000000000,18,12,13]
41	[1.80487804878049,68.244902449 0244,65.9512195121951]	[0.500000000000000,63.5000000000 000,62.500000000000,4,7,6]
651	[28.9349477726575,12.970814132 1045,65.9447004608295]	[22.5000000000000,5.500000000000 00,63.500000000000,12,17,7]
582	[49.1202749140894,14.429553264 6048,67.8676975945017]	[33.5000000000000,8.500000000000 00,64.500000000000,16,14,6]
429	[68.6643356643357,28.407925407 9254,66.4895104895105]	[64.5000000000000,16.500000000000 00,60.500000000000,6,29,10]
597	[4.85427135678492,35.765494137 3545,67.7001675041876]	[0.500000000000000,30.5000000000 000,59.500000000000,13,12,11]
1489	[9.16856950973808,22.481531229 0128,66.9825386165212]	[0.500000000000000,13.5000000000 000,57.500000000000,19,16,13]
1116	[9.94265232974910,51.218637992 8315,67.9032258064516]	[0.500000000000000,42.5000000000 000,62.500000000000,24,19,8]
593	[15.4080944350759,8.0252951096 1214,66.8448566610455]	[5.50000000000000,1.500000000000 00,58.500000000000,14,14,12]
459	[23.1805157593123,11.106017191 9771,68.2750716332378]	[20.5000000000000,1.500000000000 00,61.500000000000,9,21,9]
245	[38.2612244897959,27.722448979 5918,68.0244897959184]	[32.5000000000000,23.500000000000 00,64.500000000000,12,8,6]
275	[49.4472727272727,37.767272727 2727,69.0909090909091]	[29.5000000000000,32.500000000000 00,67.500000000000,18,10,3]
1	[55,1,70]	[54.5000000000000,0.500000000000 000,69.500000000000,1,1,1]
224	[65.2901785714286,66.575892857 1429,67.8214285714286]	[61.5000000000000,58.500000000000 00,63.500000000000,7,12,7]
96	[68.2604166666667,52.020833333 3333,69.0104166666667]	[65.5000000000000,46.500000000000 00,66.500000000000,5,11,4]

A Tabela 34 e 35 apresenta o raio dos poros com a resolução 3, ou seja, cada voxel vale 3 microns.

Tabela 34 – Rede porosa – raios dos poros - 50-70x50-70x50-70 voxel- resolução 3

	mícron	mm	m	m	voxel
1	12,0433733	0,012043373	1,20E-05	0,00001204337	4,014458
2	20,5022813	0,020502281	2,05E-05	0,00002050228	6,845094
3	11,3024968	0,011302497	1,13E-05	0,00001130250	3,767499
4	8,01902771	0,008019028	8,02E-06	0,00000801903	2,673009

Tabela 35 – Rede porosa – raios dos poros - 0-70x0-70x0-70 voxel – resolução 3

	mícron	mm	m	m	voxel
1	10,0498	0,010041	1,00E-05	0,0000100498	3,456599
2	12,59541	0,012594	1,25954E-05	0,0000125954	4,19847
3	12,3185	0,012318	1,23185E-05	0,0000123185	4,106166
4	25,63332	0,025632	2,56333E-05	0,0000256333	8,54444
5	9,451821	0,009453	9,45182E-06	0,0000094518	3,150607
6	22,77609	0,022776	2,27761E-05	0,0000227761	7,592031
7	19,59365	0,019593	1,95936E-05	0,0000195936	6,531217
8	15,63543	0,015636	1,56354E-05	0,0000156354	5,211811
9	37,75158	0,037752	3,77516E-05	0,0000377516	12,58386
10	9,777197	0,009777	9,7772E-06	0,0000097772	3,259066
11	12,72941	0,012729	1,27294E-05	0,0000127294	4,243138
12	6,619562	0,006621	6,61956E-06	0,0000066196	2,206521
13	9,47581	0,009477	9,47581E-06	0,0000094758	3,158603
14	27,58092	0,027582	2,75809E-05	0,0000275809	9,193649
15	9,664599	0,009663	9,6635E-06	0,0000096635	3,221166
16	14,4078	0,014409	1,44078E-05	0,0000144078	4,8026
17	9,709298	0,009708	9,7093E-06	0,0000097093	3,236433
18	9,975438	0,009975	9,97544E-06	0,0000099754	3,325146
19	25,42231	0,025422	2,54223E-05	0,0000254223	8,474103
20	17,67053	0,01767	1,76705E-05	0,0000176705	5,890178
21	17,53183	0,017532	1,75318E-05	0,0000175318	5,844942
22	5,441748	0,005442	5,44175E-06	0,0000054417	1,814916
23	22,92423	0,022923	2,29242E-05	0,0000229242	7,641411
24	21,68506	0,021684	2,16851E-05	0,0000216851	7,228352
25	18,21766	0,018219	1,82177E-05	0,0000182177	6,072554
26	21,99141	0,02199	2,19914E-05	0,0000219914	7,330469
27	33,64951	0,033651	3,36495E-05	0,0000336495	11,2165
28	16,0464	0,016047	1,60464E-05	0,0000160464	5,458801
29	18,47932	0,01848	1,84793E-05	0,0000184793	6,159773

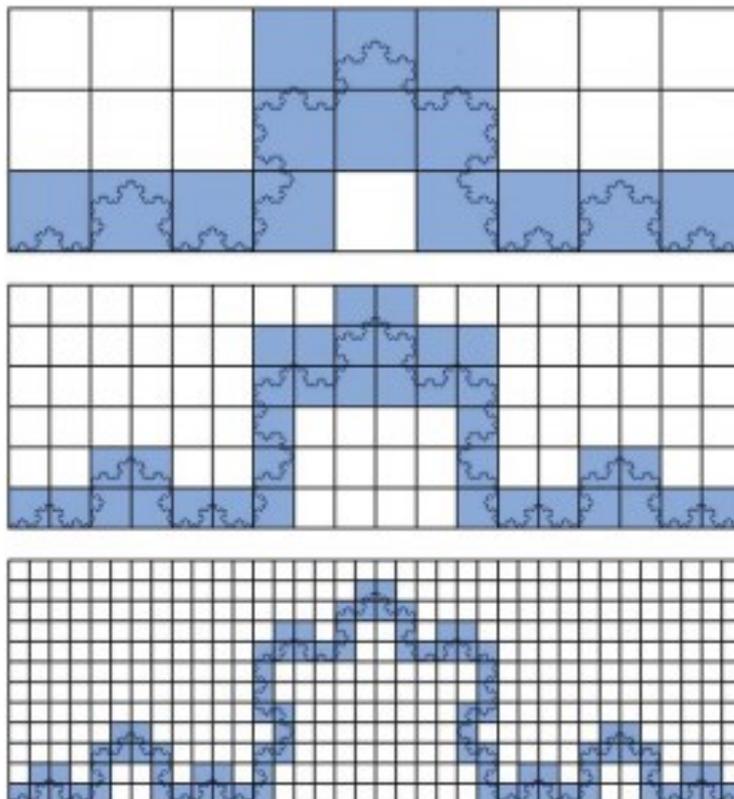
30	5,292583	0,005292	5,29258E-06	0,0000052926	1,764194
31	23,37329	0,023373	2,33733E-05	0,0000233733	7,791097
32	12,43074	0,012432	1,24307E-05	0,0000124307	4,143582
33	17,98155	0,017982	1,79816E-05	0,0000179816	5,993851
45	6,41731	0,006417	6,41731E-06	0,0000064173	2,149103
35	16,12942	0,016128	1,61294E-05	0,0000161294	5,376473
36	15,53815	0,015537	1,55382E-05	0,0000155382	5,179384
37	14,03603	0,014037	1,4036E-05	0,0000140360	4,678675
38	15,67051	0,015672	1,56705E-05	0,0000156705	5,223504
49	21,25152	0,021252	2,12515E-05	0,0000212515	7,083849
40	19,30496	0,019305	1,9304E-05	0,0000193040	6,445654
41	15,63543	0,015636	1,56354E-05	0,0000156354	5,211811
42	13,10288	0,013104	1,31029E-05	0,0000131029	4,367628
43	11,6452	0,011646	1,16452E-05	0,0000116452	3,881745
44	12,10245	0,012102	1,21023E-05	0,0000121023	4,045113
45	1,861051	0,00186	1,86105E-06	0,0000018611	0,62035
46	11,3025	0,011301	1,13025E-05	0,0000113025	3,767499
47	8,521489	0,00852	8,52149E-06	0,0000085215	2,840496

APÊNDICE C - Box-Counting – Dimensão fractal

O apêndice C mostra como é determinado o cálculo da dimensão fractal

A dimensão fractal de uma figura pelo método de box-counting, é feita cobrindo a figura com caixas formando uma malha. O tamanho das caixas pode ser variado. O número de caixas N_c e o seu tamanho determina a dimensão fractal (UFJF, 2023), Figura 65.

Figura 65 – Box-Counting



Fonte: <https://www2.ufjf.br/fractalize/wp-content/uploads/sites/229/2021/05/11P8-276x300.png>

Para cálculo da dimensão fractal conforme a Figura 14 na página 62, os dados das Tabelas 36 são usados como exemplo.

Tabela 36 – Determinação de N_{med}

N_{med}	N_{med}^2	N_{med}^3
1	1	1
2	4	8
3	9	27
4	16	64
5	25	125
6	36	216
7	49	453
8	64	512
9	81	729
10	100	1000
11	121	1331
12	144	1728
13	169	2197
14	196	2744
15	225	3375
16	256	4096
17	289	4913
18	324	5832
19	361	6859
20	400	8000
21	441	9261
22	484	10648
23	529	12167
24	576	13824
25	625	15625
26	676	17576
27	729	19683
28	784	21952
29	841	24389
30	900	27000
31	961	29791

O valor N será: o número de partes divididas de T_{am} (dimensão 1), número de blocos (dimensão 3), Tabela 37, e número de quadrados (dimensão 2), Tabela 38:

Tabela 37 – Dimensão fractal – D3

Fazendo N_{med} igual a $1/T_{am}$	T_{am}	N_{med}^3	N_{med} (significa o número de cubos)	Dimensão Fractal $D = \log(N_{med})/\log(T_{am})$
1	1	1	1 cubo	#DIV/0!
0,5	2	8	8 cubos	3
0,33333333	3	27	27 cubos	3
0,25	4	64	64 cubos	3
0,2	5	125	125 cubos	3
0,16666667	6	216	216 cubos	3
0,14285714	7	453	453 cubos	3
0,125	8	512	512 cubos	3
0,11111111	9	729	729 cubos	3
0,1	10	1000	1000 cubos	3
0,09090909	11	1331	1331 cubos	3
0,08333333	12	1728	1728 cubos	3
0,07692308	13	2197	2197 cubos	3
0,07142857	14	2744	2744 cubos	3
0,06666667	15	3375	3375 cubos	3
0,0625	16	4096	4096 cubos	3
0,05882353	17	4913	4913 cubos	3
0,05555556	18	5832	5832 cubos	3
0,05263158	19	6859	6859 cubos	3
0,05	20	8000	8000 cubos	3
0,04761905	21	9261	9261 cubos	3
0,04545455	22	10648	10648 cubos	3
0,04457826	23	12167	12167 cubos	3
0,04166667	24	13824	13824 cubos	3
0,04	25	15625	15625 cubos	3
0,03846154	26	17576	17576 cubos	3
0,03703704	27	19683	19683 cubos	3
0,03571429	28	21952	21952 cubos	3
0,04548276	29	24389	24389 cubos	3
0,03333333	30	27000	27000 cubos	3
0,03225806	31	29791	29791 cubos	3

Tabela 38 – Dimensão fractal – D2

T_{am}	N_{med}^2	N_{med} (significa o número de quadrados)	D $= \log(N_{med})/\log(T_{am})$
1	1	1 quadrado	#DIV/0!
2	4	4 quadrados	2
3	9	9 quadrados	2
4	16	16 quadrados	2
5	25	25 quadrados	2
6	36	36 quadrados	2
7	49	49 quadrados	2
8	64	64 quadrados	2
10	100	100 quadrados	2
9	81	81 quadrados	2
11	121	121 quadrados	2
12	144	144 quadrados	2
13	169	169 quadrados	2
14	196	196 quadrados	2
15	225	225 quadrados	2
16	256	256 quadrados	2
17	289	289 quadrados	2
18	324	324 quadrados	2
19	361	361 quadrados	2
20	400	400 quadrados	2
21	441	441 quadrados	2
22	484	484 quadrados	2
23	529	529 quadrados	2
24	576	576 quadrados	2
25	625	625 quadrados	2
26	676	676 quadrados	2
27	729	729 quadrados	2
28	784	784 quadrados	2
29	841	841 quadrados	2
30	900	900 quadrados	2
31	961	961 quadrados	2

A Tabela 39 apresenta um exemplo de cálculo com base o que se apresenta na Figura 17 para a dimensão de Hausdorff.

Tabela 39 – Dimensão fractal – D2

Partes	Exemplo			Dimensão
N_{med}	L_0	L_p	T_{am}	DH
1	2	2	1	#DIV/0!
2	2	1	2	1
3	2	0,666667	3	1

Partes	Exemplo			Dimensão
N_{med}	L_0	L_p	T_{am}	DH
1	2	2	1	#DIV/0!
4	2	0,5	2	2
9	2	0,222222	3	2

Partes	Exemplo			Dimensão
N_{med}	L_0	L_p	T_{am}	DH
1	2	2	1	#DIV/0!
8	2	0,25	2	3
27	2	0,074074	3	3

Sendo:

$$N_{med} = T_{am}$$

N_{med} = número de partes que L_0 é dividido

L_0 = comprimento original

L_p = tamanho que fica após o L_0 ser dividido em N_{med} partes

T_{am} = tamanho linear

Exemplo de dimensão de Hausdorff, Figura 66. . colocar???

Figura 66 – Dimensão Hausdorff

	DH1	DH2	DH3
$T_{am} = 1$			
	$N_{med}1$	$N_{med}1$	$N_{med}1$
$T_{am} = 2$			
	$N_{med}2$	$N_{med}4$	$N_{med}8$
$T_{am} = 3$			
	$N_{med}3$	$N_{med}9$	$N_{med}27$

$$N_{med} = T_{am}^{DH}$$

Fonte: Adaptado

(<https://www.vanderbilt.edu/AnS/psychology/cogsci/chaos/workshop/Hausdorff.GIF>)