

INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas o estudo da propagação de ondas ultrassônicas em sólidos tem se intensificado muito. O motivo pelo qual isso tem ocorrido é que esse assunto é de suma importância na avaliação não destrutiva da segurança e da integridade de estruturas através da detecção de trincas, da medição das tensões e das mudanças microestruturais causadas por fadiga, corrosão, irradiação, etc.

Há muitos séculos os mecanismos da acústica, ecos e ondas sonoras têm fascinado vários cientistas famosos, tais como Aristóteles, Leonardo da Vinci, Galileu Galilei, Sir Isaac Newton e Leonhard Euler, entre outros. Em 1877, Lorde Rayleigh publicou um estudo que descrevia o som com uma equação matemática em “A teoria do som”. Anos mais tarde, os irmãos Jacques e Pierre Curie descobriram o efeito piezoelétrico, no qual um potencial elétrico aplicado a um cristal de quartzo gera uma pressão mecânica, descoberta essa que antecede o aparecimento dos raios-X estudados por Conrad Roentgen em 1895.

Com as invenções do diodo e triodo, a amplificação eletrônica melhorou sensivelmente, tornando possível o aparecimento de um dispositivo de ultrassom de alta frequência, denominado hidrofone, pelos cientistas Paul Langevin e Constantin Chilowsky em 1915. O hidrofone é um transdutor de som para eletricidade que permite o envio e o recebimento de sinais de som na água e outros líquidos. Fatores como o desastre do navio transatlântico Titanic e a I guerra mundial motivaram o aparecimento do sonar (*Sound Navigation and Ranging*) e do Radar (*Radio Detection and Ranging*) para localização de submarinos e detecção de aeronaves.

A possibilidade da aplicação do ultrassom na medição de tensões decorre da alteração da velocidade das ondas ultrassônicas na presença de um estado de tensões com deformações elásticas, fenômeno conhecido como efeito acustoelástico. Ele se origina da elasticidade não linear, onde o potencial interatômico não é mais uma função parabólica da distância interatômica. Uma teoria de acustoelasticidade requer a inclusão dos termos de ordem superior (cúbica) na expansão polinomial da tensão em função da própria deformação e, por conseguinte, das constantes elásticas de terceira ordem do material. A acustoelasticidade fornece uma maneira única e atrativa de medir tensões de uma forma não destrutiva. Embora muitas outras técnicas detectem as tensões superficiais, a acustoelasticidade pode determinar

não apenas as tensões superficiais, mas também as tensões no interior de materiais sólidos, isto é, a tensão média ao longo do caminho percorrido pela onda ultrassônica. A única alternativa à acustoelasticidade é a técnica de difração de nêutrons, a qual é raramente acessível e limitada a estudos em laboratórios.

Os materiais estruturais, como o aço e o alumínio, apresentam muitas vezes uma pequena anisotropia decorrente de seu processo de fabricação, tais como laminação, forjamento e extrusão. A anisotropia resultante causa mudanças na velocidade das ondas ultrassônicas que são da mesma ordem de grandeza das causadas pela presença de tensões mecânicas. É usualmente aceito que os efeitos de anisotropia induzidos pela textura nas mudanças de velocidade das ondas ultrassônicas devam ser separados a priori daquelas provocadas pelas tensões para que a teoria da acustoelasticidade possa ser aplicada convenientemente para determinar as tensões atuantes. O problema de separar os efeitos da textura e das tensões sobre as mudanças de velocidades das ondas é uma das principais dificuldades na avaliação prática de tensões por ultrassom.

O estudo da propagação de ondas ultrassônicas em meios homogêneos, anisotrópicos e livre de tensões conduz a um problema de autovalor linear representado pela equação de Christoffel. Entretanto quando um meio está submetido a um estado de tensões, o estudo das equações de movimento conduz a um problema de autovalor não linear, devido à interdependência entre as constantes elásticas efetivas do material e as tensões atuantes, dado pela equação de Christoffel generalizada. A solução desta equação mostra que quando uma onda volumétrica se propaga ao longo de uma das direções de ortotropia de um sólido coincidente com a direção de uma das tensões principais atuantes, sua velocidade longitudinal de propagação se altera e duas ondas cisalhantes se formam e se propagam em direções ortogonais entre si e com diferentes velocidades. Este efeito, conhecido como birrefringência acústica é muito similar ao observado na fotoelasticidade e indica que a presença das tensões tornou o material acusticamente anisotrópico.

Neste trabalho utilizou-se a teoria acustoelástica de Man e Lu (1987) para formulação da equação de Christoffel generalizada e o método de Degtyar e Rohklin (1995) para a sua resolução, no caso particular de materiais ortotrópicos submetidos a estados planos de tensões residuais e/ou aplicadas. A formulação de Man e Lu é baseada na teoria da elasticidade linear com tensões iniciais (Man, 1998; Destrade e Odgen, 2011; Shams et al, 2011) e utiliza a

configuração deformada do material como a única configuração de referência para descrição da propagação de ondas ultrassônicas elásticas no material. Desta forma, a teoria de Man e Lu evita, ao contrário da abordagem mais usual da acustoelasticidade, a necessidade de se conhecer a resposta do material em seu estado *natural* livre de tensões e deformações, ou seja, a necessidade de se ter um corpo de prova de referência, livre de tensões e deformações de fabricação. Desta forma, a teoria pode ser aplicada para determinar tensões residuais e aplicadas em materiais com histórico de carregamento dinâmico, incluindo deformações plásticas. Esta é, sem dúvida, uma importante vantagem de natureza teórica e prática da teoria de Man e Lu.

O método de solução proposto por Degtyar e Rokhlin (1995, 1996, 1997) consiste em que as tensões em um material anisotrópico e suas respectivas constantes elásticas podem ser encontradas simultaneamente dependendo da inversão da equação de Christoffel generalizada, utilizando como dados de entrada as velocidades de ondas ultrassônicas propagadas no material com diferentes ângulos de incidência.

Por outro lado, a medição experimental das tensões por ultrassom, apesar dos avanços alcançados, apresenta ainda muitas dificuldades de natureza teórica e prática. A principal dificuldade teórica está no fato de as influências serem da mesma ordem de magnitude da textura do material e da tensão atuante sobre a velocidade de propagação das ondas ultrassônicas. As dificuldades de natureza prática envolvem a obtenção de um valor de referência do material no seu estado natural livre de tensões, a escolha do tipo e da frequência da onda ultrassônica a ser utilizada, a escolha do acoplante para colocação do transdutor, a influência da temperatura, a determinação das constantes acustoelásticas, o protocolo experimental para coleta de dados, entre outros. Como discutido anteriormente, a teoria de Man e Lu (1987) não requer a obtenção de um valor de referência do material no seu estado natural livre de tensões e deformações, o que, sem dúvida, é uma importante vantagem de natureza teórica e prática desta teoria.

Existem algumas técnicas e métodos experimentais que utilizam a acustoelasticidade para a determinação de tensões em meios elásticos isotrópicos e anisotrópicos, como, por exemplo:

- Birrefringência acústica:

Baseada na diferença normalizada das velocidades de duas ondas cisalhantes de incidência normal que se propagam ao longo de uma mesma região, porém polarizadas em direções ortogonais entre si. Se o material for isotrópico, tais ondas ultrassônicas se propagarão com a mesma velocidade, caso contrário, isso não ocorrerá.

- Método baseado na dependência angular das velocidades das ondas ultrassônicas:

Utiliza otimização por mínimos quadrados para a reconstrução da tensão absoluta e das constantes elásticas a partir da equação de Christoffel generalizada, usando como dados de entrada as velocidades e os ângulos de refração de ondas ultrassônicas propagadas com incidência oblíqua. Método proposto por Degtyar e Rokhlin (1995, 1996, 1997), a ser abordado no capítulo 2.

Objetivo Geral

Esta dissertação tem por objetivo geral desenvolver um algoritmo numérico para solução da equação de Christoffel generalizada em meios ortotrópicos visando à medição das tensões atuantes (residuais e aplicadas) em componentes metálicos. Com isto, espera-se disponibilizar uma nova ferramenta de cálculo para suporte às atividades experimentais de medição de tensões por ultrassom no país, mais especificamente, no laboratório de ultrassom do Instituto de Engenharia Nuclear (IEN).

Objetivos Específicos

- Introduzir a teoria de Man e Lu (1987) para descrição do fenômeno da propagação de ondas ultrassônicas volumétricas e planas em sólidos ortotrópicos sob tensões residuais e aplicadas (equação de Christoffel generalizada);
- Desenvolver e implementar um algoritmo numérico, baseado no método de Degtyar e Rokhlin (1995, 1996, 1997), para resolução do problema de autovalor não linear (equação de Christoffel generalizada) associado à propagação de ondas ultrassônicas em sólidos ortotrópicos sujeitos a um estado plano de tensões;

- Descrever o programa em linguagem Fortran desenvolvido e utilizado nas simulações numéricas;
- Investigar brevemente as condições de estabilidade e precisão do algoritmo desenvolvido;
- Realizar simulações numéricas de interesse experimental com o algoritmo desenvolvido.

Organização do trabalho

No **Capítulo 1 – Revisão Bibliográfica** – introduz-se a teoria de acustoelasticidade proposta por Man e Lu (1987) para descrição da propagação de ondas ultrassônicas volumétricas em sólidos ortotrópicos sob tensão, a qual conduz ao problema de autovalor não linear dado pela equação de Christoffel generalizada. A influência da textura sobre a velocidade das ondas ultrassônicas é também discutida aqui.

No **Capítulo 2 – Metodologia e Materiais** – apresenta-se o método proposto por Degtyar e Rokhlin (1995, 1996, 1997) para solução inversa da equação de Christoffel generalizada, particularizada para o caso de ondas elásticas planas propagando-se em sólidos ortotrópicos submetidos a estados planos de tensões. A simetria ortotrópica é de particular interesse em materiais estruturais. Em seguida, discutem-se o fluxograma utilizado para construção do algoritmo de inversão e o método de Levenberg-Marquardt (Gavin, 2011) empregado para solução do problema de mínimos quadrados não linear. O programa fonte escrito em linguagem Fortran é apresentado no item seguinte. A utilização da biblioteca matemática IMSL (*International Mathematics and Statistics Library*) da empresa *Visual Numerics®* é aqui abordada.

Ainda neste Capítulo 2 discute-se a geração de velocidades sintéticas de ondas ultrassônicas utilizadas neste trabalho para verificação do algoritmo numérico desenvolvido. Apresenta-se o material (alumínio) utilizado como referência de um material real utilizado na prática, cujos dados estão disponíveis na literatura.

No **Capítulo 3 – Resultados e Discussões** – apresentam-se algumas aplicações numéricas de interesse experimental. Estas aplicações foram divididas em três grupos e tem por objetivo estudar diversas influências sobre o desempenho do algoritmo na determinação

das constantes elásticas dependente das tensões, e das próprias tensões atuantes. O primeiro grupo de aplicações investiga a influência do número de ondas ultrassônicas necessárias para o funcionamento eficiente e eficaz do algoritmo; o segundo grupo discute a estabilidade e precisão do algoritmo numérico desenvolvido; o terceiro e último grupo investiga a influência das incertezas experimentais na determinação das velocidades das ondas ultrassônicas propagadas no material.

No **Capítulo 4 – Conclusões** – apresenta-se um resumo das principais conclusões oriundas das aplicações discutidas no capítulo anterior.

Finalmente, no **Capítulo 5 – Sugestões para Estudos Posteriores** – são propostos alguns temas para investigação posterior.

1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

1.1 Propagação de ondas ultrassônicas em sólidos ortotrópicos sob tensão

A teoria da propagação de ondas em materiais sob tensão tem uma longa história que começa nos tempos de Cauchy (1829), engenheiro e matemático francês que fez alguns avanços na formulação das equações básicas. Desde então, numerosos trabalhos, teóricos e experimentais, foram publicados sobre o assunto. Um breve histórico sobre o desenvolvimento da acustoelasticidade (isto é, do efeito das tensões sobre as velocidades das ondas ultrassônicas) será apresentado nos parágrafos seguintes.

A moderna teoria da acustoelasticidade foi desenvolvida em Hughes e Kelly em 1953, que utilizaram a teoria não linear da elasticidade formulada por Murnaghan (1951) para determinar, por meio da medição das velocidades de ondas ultrassônicas, as constantes elásticas de terceira ordem de três materiais, poliestireno, ferro e vidro pìrex.

A teoria de Hughes and Kelly foi estendida para materiais com simetria arbitrária por Toupin e Berstein (1961) e Thurston e Brugger (1964) nos anos 60. Neste enfoque, o efeito acustoelástico é estudado no contexto de pequenos deslocamentos superpostos a uma deformação finita de um material elástico. Três configurações exercem um papel primordial na teoria: uma configuração *natural*, livre de tensões, uma configuração inicialmente tensionada e deformada, e a configuração corrente. O material é assumido como hiperelástico, e é a deformação elástica do estado natural livre de tensões para a configuração inicial que dá origem às tensões nesta última configuração (denominadas tensões iniciais). De modo a capturar o efeito das tensões iniciais sobre as velocidades das ondas ultrassônicas, superpostas à configuração inicial, mostrou-se necessário levar em conta os efeitos de segunda ordem da deformação inicial, ou seja, considerar a não linearidade da equação constitutiva. Assim, além do tensor de quarta ordem das constantes elásticas da teoria clássica da elasticidade, a teoria considera um tensor de sexta-ordem com constantes elásticas de terceira ordem. Esta teoria tem sido aplicada desde então para a determinação de tensões aplicadas em sólidos elásticos deformados e, apesar da hipótese de hiperelasticidade, tem sido também aplicada para determinação de tensões residuais. Como as tensões residuais frequentemente surgem como consequência de deformações plásticas não homogêneas, a utilização de uma teoria puramente hiperelástica como base teórica para a medição acustoelástica de tensões residuais

é questionável. Pao et al. (1984) levantaram uma outra objeção, qual seja a de que para um problema genuíno de tensões residuais, o estado *natural* é desconhecido. Paroni e Man (2000) acrescentaram a observação de que um estado *natural* possa até mesmo não existir para alguns materiais. Apesar destas objeções, a abordagem descrita acima, dominou a literatura sobre acustoelasticidade até o início dos anos 80.

A medição de tensões residuais por ultrassom continua sendo um dos principais temas de pesquisa em acustoelasticidade. Três problemas, porém, têm dificultado o avanço desta tecnologia. Primeiro, o efeito acustoelástico é pequeno, tipicamente da ordem de 0,001% por MPa de tensão aplicada, para metais, o que requer uma grande precisão na condução de experimentos. Em segundo lugar, os processos de fabricação de materiais estruturais, geralmente agregados policristalinos, induzem uma orientação preferencial dos grãos cristalinos, denominada textura, que afeta a acustoelasticidade. A textura provoca de fato uma pequena anisotropia no material. Esta anisotropia provoca alterações nas velocidades das ondas ultrassônicas que são da mesma ordem de grandeza, ou mesmo de ordem superior, àquelas provocadas pelas tensões. O terceiro principal problema da acustoelasticidade é a influência de deformações plásticas localizadas no material. Este problema é causado também pelo processamento do material e está intimamente relacionado às tensões residuais. De fato, as tensões residuais são uma manifestação de deformações plásticas localizadas. Os agregados cristalinos deformados não têm as mesmas propriedades acustoelásticas que os dos agregados cristalinos elásticos. Até o momento, poucas pesquisas têm sido conduzidas para desenvolver uma teoria acustoplástica.

Em 1987, Man e Lu propuseram uma nova abordagem teórica para a acustoelasticidade baseada na teoria da elasticidade linear com tensões iniciais. Nela, a configuração inicial sob tensão serve como a única configuração de referência para descrição das deformações. Além disto, nenhuma hipótese é feita sobre a existência de uma configuração *natural* para o material policristalino, e não é necessário conhecer a origem das tensões iniciais (elas podem surgir, por exemplo, de deformações plásticas anteriores, não homogêneas). Na formulação de Man e Lu as propriedades elásticas do material sob tensão são incluídas no tensor de elasticidade incremental, o qual depende da história de carregamento, aquecimento, etc. experimentada pelo material inteiro. Além disto, as equações constitutivas são derivadas sem qualquer referência à origem das tensões residuais ou aplicadas, e não precisam postular a existência de um função de energia potencial de deformação para as deformações elásticas incrementais,

devidas à propagação das ondas ultrassônicas, e assim, a teoria não se restringe a materiais hiperelásticos.

Em 1996, Man e Paroni, introduziram um primeiro modelo micromecânico simples, expressando o tensor de elasticidade incremental em função da tensão inicial, das funções de distribuição de orientação (ODF), que descrevem matematicamente a textura na configuração inicial, e das constantes elásticas de segunda e terceira ordens de um cristal único. Em 2000, Paroni e Man revisaram a teoria anterior e, para materiais ortotrópicos, derivaram um conjunto completo de fórmulas para todos os componentes do tensor de elasticidade incremental. A utilização conjunta de conceitos da engenharia mecânica (elasticidade não linear) em conjunto com conceitos da ciência dos materiais (funções de distribuição de orientação) surge como uma nova abordagem a ser explorada no estudo da acustoelasticidade.

Nesta dissertação utilizou-se a teoria acustoelástica de Man e Lu (1987) para formulação da equação de Christoffel generalizada que descreve a propagação de ondas ultrassônicas em materiais submetidos a tensões residuais e aplicadas, e o método de Degtyar e Rohklin (1995) para a sua resolução, no caso particular de materiais ortotrópicos submetidos a um estado plano de tensões (residuais ou aplicadas). As equações pertinentes à teoria acustoelástica de Man e Lu serão apresentadas e discutidas na seção 1.2. Antes, porém, será feita uma breve revisão de alguns conceitos básicos da teoria da elasticidade de interesse para este trabalho.

1.1.1 Equações constitutivas para materiais ortotrópicos

Dá-se o nome de isotrópicos aos materiais cujas propriedades não variam quando analisadas em diferentes direções. Devido ao seu processo de fabricação, os materiais têm uma tendência a que suas propriedades variem em função das direções escolhidas. Tais materiais são denominados anisotrópicos. Existem também materiais cujas propriedades variam em relação a três eixos de simetria ortogonais entre si, os quais são denominados ortotrópicos. Estes últimos serão os materiais abordados especificamente neste estudo, devido à sua grande aplicação industrial (utilizados em placas, chapas, tubulações de paredes finas, por exemplo) e por englobarem o caso de materiais isotrópicos.

A estrutura cristalina de um metal, sua liga, laminação e/ou tensões às quais esteja submetido, estão estreitamente relacionadas ao seu grau de anisotropia.

Dado um volume de controle em um material anisotrópico, vide figura 1, atuando nas faces deste elemento com lados paralelos aos eixos 1, 2, 3 de um sistema de coordenadas cartesiano, tem-se nove componentes do tensor das tensões σ_{ij} (grandeza tensorial de segunda ordem).

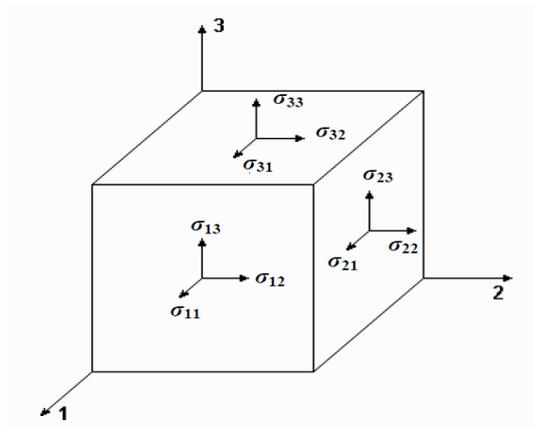


Figura 1.1. Elemento de controle e componentes do tensor de tensões

As tensões longitudinais $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$ são aplicadas nas direções normais às faces do elemento nas direções 1, 2 e 3 respectivamente, enquanto as de cisalhamento são aplicadas nestas faces conforme indicado na figura 1. Pode-se, então, representar o tensor das tensões na forma matricial da seguinte forma (Chung, 1966):

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

Caso o elemento de controle esteja em equilíbrio, a soma dos momentos que agem sobre ele é nula, o que conduz a:

$$\sigma_{21} = \sigma_{12} ; \quad \sigma_{31} = \sigma_{13} ; \quad \sigma_{32} = \sigma_{23} \quad (1.2)$$

Como discutido em Ortega et al (2011), se o estado de carregamento é dinâmico, essas equações devem ser substituídas por equações de movimento. Este é o caso gerado por uma fonte ultrassônica. A ação da força aplicada não é transmitida instantaneamente a todas as partes do corpo, mas as ondas de tensão e deformação se propagam com velocidades finitas a partir da região carregada, produzindo pequenos deslocamentos temporais $u = (u_1, u_2, u_3)$. Em sólidos elásticos infinitos ou semi-infinitos, basta acrescentar as forças de inércia às equações de equilíbrio. Assim, as equações de movimento em notação indicial ficam (Rose, 1999).

$$\sigma_{ij,j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (i, j = 1, 3) \quad (1.3)$$

onde ρ é a densidade do meio e $\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}$ é a aceleração. Na notação indicial, o índice repetido j indica adição com respeito a ele, e a vírgula indica a derivada de cada elemento do tensor em relação à coordenada X_j ($\sigma_{ij,j} \equiv \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial X_j}$). O índice livre i indica que no modo expandido, o tensor (1.3) corresponde a um sistema de três equações.

Para pequenos deslocamentos, a relação entre a deformação e a tensão é dada pela lei de Hooke generalizada (Boeri, 2006):

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} S_{kl} \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3) \quad (1.4)$$

ou

$$S_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3), \quad (1.5)$$

onde C_{ijkl} é o tensor de constantes elásticas do material, s_{ijkl} , o tensor das constantes de flexibilidade e S_{ij} , o tensor das deformações. Nas relações (1.4) e (1.5) há seis constantes independentes no tensor de tensão, e mais seis no tensor de deformação. No tensor C_{ijkl} há $3^4 = 81$ constantes, entretanto, o tensor das constantes elásticas é simétrico. A simetria dos tensores de tensão e de deformação reduz o número de constantes elásticas para 36

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (1.6)$$

$$S_{ij} = S_{ji}$$

Utilizando-se a notação reduzida de Voigt (Jones, 1998) para os tensores de tensão e de deformação, de acordo com a tabela 1, tem-se que:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

Tabela 1: Notações tensorial e reduzida para tensões e deformações (Jones, 1998)

Tensões		Deformações	
<i>Notação Tensorial</i>	<i>Notação Reduzida</i>	<i>Notação Tensorial</i>	<i>Notação Reduzida</i>

Logo,

$$\sigma_i = C_{ij} S_j \quad (i, j = 1, 2, 3, \dots, 6) \quad (1.8)$$

$$S_i = s_{ij} \sigma_j \quad (i, j = 1, 2, 3, \dots, 6).$$

Como $C_{ij} = C_{ji}$ e $s_{ij} = s_{ji}$, isto é, as matrizes das constantes elásticas e de compliância são simétricas, os estados de tensão e de deformação em um elemento infinitesimal podem ser descritos por vetores com seis componentes respectivamente. As matrizes de das constantes elásticas e de compliância que expressam a relação tensão-deformação possuem cada uma, 21 termos independentes.

No caso de materiais ortotrópicos, o número de constantes elásticas se reduz a nove, pois existem três planos de simetria do material, mutuamente ortogonais, que levam vários termos da matriz das constantes elásticas a se relacionarem.

Portanto, as relações tensão-deformação em materiais ortotrópicos se reduzem a (NYE, 1993):

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{bmatrix} \quad (1.9)$$

Importantes observações feitas em Boeri (2006), com respeito à relação tensão-deformação:

1. Não há interação entre as tensões cisalhantes $\sigma_{23}, \sigma_{31}, \sigma_{12}$, e as deformações normais S_1, S_2, S_3 , isto é, uma tensão cisalhante atuando no plano normal do material produz somente deformação cisalhante.
2. Não há interação entre tensão cisalhante e deformação cisalhante em planos diferentes, isto é, uma tensão cisalhante atuando no plano principal produz uma deformação cisalhante somente neste plano.

Observação:

A tensão de cisalhamento relaciona-se com a força aplicada paralelamente a uma superfície, com o objetivo de causar o deslizamento de planos paralelos, uns em relação aos outros.

1.2 Teoria acustoelástica de Man e Lu

Efeito acustoelástico é o nome dado à influência do estado de tensões (ou, de forma equivalente, do estado de deformações) sobre a velocidade de propagação de ondas elásticas ultrassônicas. Tal relação pode ser descrita, como no trabalho pioneiro de Hughes e Kelly (1953) sobre esta influência em materiais isotrópicos, por

$$V^2 = V_0^2 + K \sigma \quad (1.10)$$

onde V_0 é a velocidade da onda no material livre de tensões, σ é a tensão e K um parâmetro dependente do material denominado de constante acustoelástica. Assim sendo, V_0 pode ser considerado o estado de referência, por ser função das constantes elásticas no 'estado natural' (sem tensão).

As deformações elásticas exercem um efeito pequeno na propagação da onda; as diferenças das velocidades abaixo do limite elástico ($\frac{\Delta V}{V_0}$, onde V_0 é a velocidade em um corpo livre de deformações) são da ordem de 10^{-3} . Esta diferença de velocidade é proporcional à tensão média na região por onde a onda se propaga.

1.2.1 A equação de Christoffel generalizada

Na abordagem proposta por Man e Lu (1987), a configuração pré-tensionada (antes da propagação da onda) é a única configuração de referência e a tensão inicial é incluída na equação constitutiva diretamente:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^0 + C_{ijkl} \varepsilon_{kl} + \mu_{i,k} \sigma_{kj}^0, \quad (1.11)$$

onde σ_{ij} é o primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff, σ_{ij}^0 é o tensor de tensão de Cauchy referente às tensões estáticas iniciais (residuais e aplicadas), ε_{kl} é o tensor de deformações elásticas devido à propagação das ondas, $\mu_{i,k}$ é o gradiente de deslocamento e C_{ijkl} é o tensor de ordem das constantes elásticas dependentes da tensão. A equação (1.11) estabelece a relação entre as tensões e os deslocamentos que aparecem com a propagação das ondas no material tensionado. A utilização de um único sistema de coordenadas associado à

configuração deformada inicial torna a relação (1.11) aplicável tanto ao caso de tensões residuais quanto ao de tensões aplicadas.

A equação de equilíbrio dinâmico para pequenas deformações elásticas superpostas ao estado inicial pré-tensionado é

$$\sigma_{ij,j} = \rho \frac{\partial^2 \mu_i}{\partial t^2}, \quad (1.12)$$

onde μ_i é o vetor de deslocamento, ρ a densidade do material e t , a dimensão tempo. Substituindo a equação (1.11) na equação (1.12) e assumindo que o material e as tensões locais são homogêneas, a equação (1.12) pode ser reescrita como

$$\left(\mathbb{C}_{ijkl} + \sigma_{jl}^0 \delta_{ik} \right) \mu_{k,jl} = \rho \frac{\partial^2 \mu_i}{\partial t^2}, \quad (1.13)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker.

A equação (1.13) pode ser resolvida considerando-se uma solução na forma de onda plana para o vetor deslocamento, assumindo que o material e estado de tensões sejam localmente homogêneos,

$$\mu_k = A P_k \exp \left[i K \left(n_s x_s - V_p t \right) \right] \quad (1.14)$$

onde A é a amplitude da onda, P_k o vetor deslocamento unitário, K o número de onda, V_p a velocidade de fase da onda, n_s a normal à frente de onda, e x_s é o vetor de posição. Substituindo a equação (1.14) na equação de equilíbrio (1.13) obtém-se a denominada equação de Christoffel generalizada,

$$\left[\mathbb{C}_{ijkl} n_i n_l + \mathbb{C}_{il}^0 n_i n_l - \rho V_p^2 \delta_{jk} \right] P_k = 0 \quad (1.15)$$

A equação (1.15) foi derivada originalmente Tokuoka e Iwashimizu (1968) e usada por King e Fortunko (1983) e Thompson et al.(1986). Man e Lu (1987) estenderam a sua aplicabilidade a tipos gerais de carregamento, incluindo deformações plásticas.

Em materiais anisotrópicos, a equação (1.15) é uma equação polinomial de terceira ordem em relação ao quadrado da velocidade da onda ultrassônica V_p . Solucionando-se esta equação, obtém-se a velocidade da onda ultrassônica quase longitudinal e as duas velocidades de onda quase transversais e suas respectivas direções de propagação. A equação (1.15) se diferencia da equação de Christoffel em um meio livre de tensões pelo surgimento de termo $\sigma_{il} n_i n_l$, nos elementos de sua diagonal, e no uso de constantes elásticas dependentes da tensão C_{ijkl} no lugar das constantes elásticas C_{ijkl}^0 relativas ao material livre de tensões.

O problema que esta dissertação aborda é um problema inverso: dado um material ortotrópico sujeito a um estado plano de tensões, obter as constantes elásticas dependentes da tensão C_{ijkl} e as tensões σ_{il} a partir da dependência angular da velocidade das ondas ultrassônicas. Para o processo de inversão foi utilizado o método de Degtyar e Rohklin que será discutido no Capítulo 2.

1.3 Influência da textura sobre a velocidade das ondas ultrassônicas

A textura cristalográfica é a distribuição de orientações de um cristal em um material policristalino, essa distribuição de orientação é uma consequência das condições de formação policristalina (Figuras 1.2 e 1.3). Processos tais como forjamento, laminação ou conformação são responsáveis pelas direções preferenciais dos cristais. Esses materiais se distinguem por sua forma, tamanho e orientações dos grãos (caracterizando a sua textura). A textura, assim como a tensão, também é responsável pela anisotropia do material.

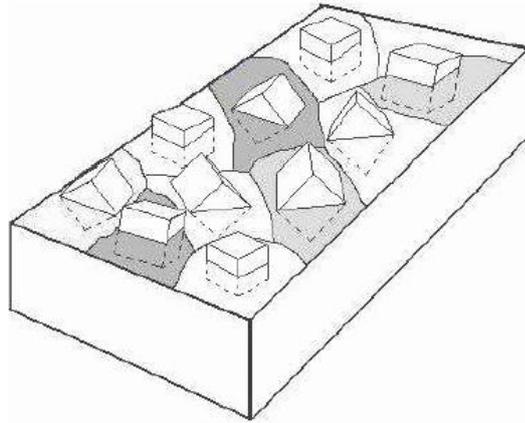


Figura 1.2. Distribuição aleatória dos cristais sem textura

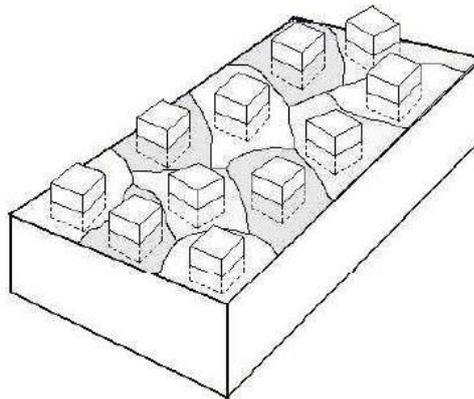


Figura 1.3. Distribuição não aleatória dos cristais com textura

A figura 1.4 abaixo apresenta a variação da velocidade da onda ultrassônica em função do ângulo de sua propagação em um material livre de tensão. Observa-se que a curva encontrada tem uma forma simétrica, ocorrendo então a maior influência da textura sobre a velocidade da onda a um ângulo de propagação de 45° . Entretanto, quando o material é tensionado, a tensão remove essa simetria. Em particular, a variação de velocidade a 0° e a 90° (isto é nos eixos de simetria) está relacionada agora com as direções da tensão aplicada e da propagação da onda, Ortega et al. (2011)

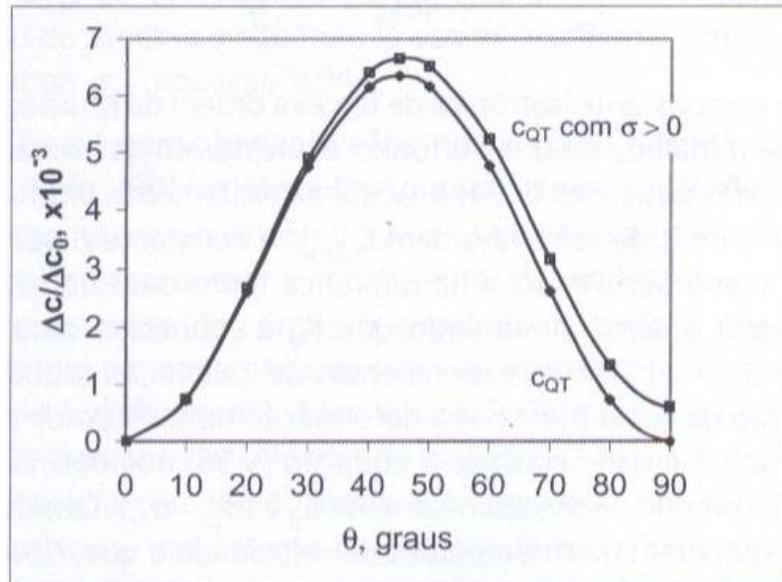


Figura 1.4. Efeito da textura e da tensão em ondas ultrassônicas (C_{QT} é a velocidade quase transversal) (Thompson et al, 1986)

2 METODOLOGIA E MATERIAIS

2.1 Considerações iniciais

Nesta seção é descrito o método proposto por Degtyar e Rokhlin (1995, 1996, 1997) para determinação das tensões em materiais ortotrópicos sujeitos a um estado plano de tensões, no qual as tensões são determinadas explorando a dependência angular da velocidade das ondas ultrassônicas (longitudinais e cisalhantes). Tal método utiliza a técnica de otimização por mínimos quadrados para a reconstrução simultânea das constantes elásticas dependentes da tensão e as próprias tensões atuantes,

$$\min_{c_{ijkl}, \sigma_{ij} \in R^n} \frac{1}{2} \sum_i^m (v^e - v^c)^2 \quad (2.1)$$

onde n é número de parâmetros a serem encontrados, m é o número de dados de velocidades em diferentes direções, v^e é a velocidade de fase experimental e v^c velocidade de fase calculada. As constantes elásticas dependentes da tensão e as tensões são as variáveis desconhecidas num espaço multidimensional n . No processo de inversão, as constantes elásticas C_{ijkl} e as tensões são consideradas independentes, embora na realidade C_{ijkl} dependa das tensões. Assim, é preciso confirmar que o processo de iterações converge para os valores corretos.

2.2 Método de Degtyar e Rokhlin para determinação das constantes elásticas e das tensões absolutas

Existem dois casos a serem estudados, de acordo com a abordagem proposta por Degtyar e Rokhlin. No primeiro caso, a tensão principal atua na direção de um dos eixos que definem o plano de simetria 1-2 do material [figura 2.1(a)] e a propagação das ondas de incidência oblíqua se dá nos planos de simetria 1-3 e 2-3, que são ortogonais ao plano de tensão 1-2. O segundo caso, é o estado geral do estado plano de tensão, isto é, quando as direções das tensões principais se desviam dos eixos de simetria do material [figura 2.1 (b)]. Neste caso, as ondas são propagadas e polarizadas no plano de tensão (plano de simetria 1-2). As velocidades das ondas ultrassônicas num plano de simetria (por exemplo, plano 1-3) são afetadas por ambas as componentes de tensão (atuante no plano 1-3) e (atuando ortogonalmente ao plano 1-3). Entretanto, os resultados obtidos por Degtyar e Rokhlin

mostraram que a componente ortogonal de tensão não afeta o valor da componente de tensão reconstruído a partir das velocidades das ondas ultrassônicas no plano 1-3. Por esta razão, e sem limitação de generalidade, nas deduções abaixo, foi considerada apenas a componente (nesta situação, denominada tensão *absoluta*).

2.2.1 Tensões principais ao longo dos eixos de simetria ortotrópica. Propagação das ondas ultrassônicas em plano perpendicular ao plano de tensões

No primeiro caso, para avaliar as tensões no plano 1-2, propagam-se ondas no plano de simetria 1-3 (ou 2-3) admitindo-se, por hipótese, que a componente da tensão cisalhante σ_{12} seja nula [ver fig. 2.1 (a)].

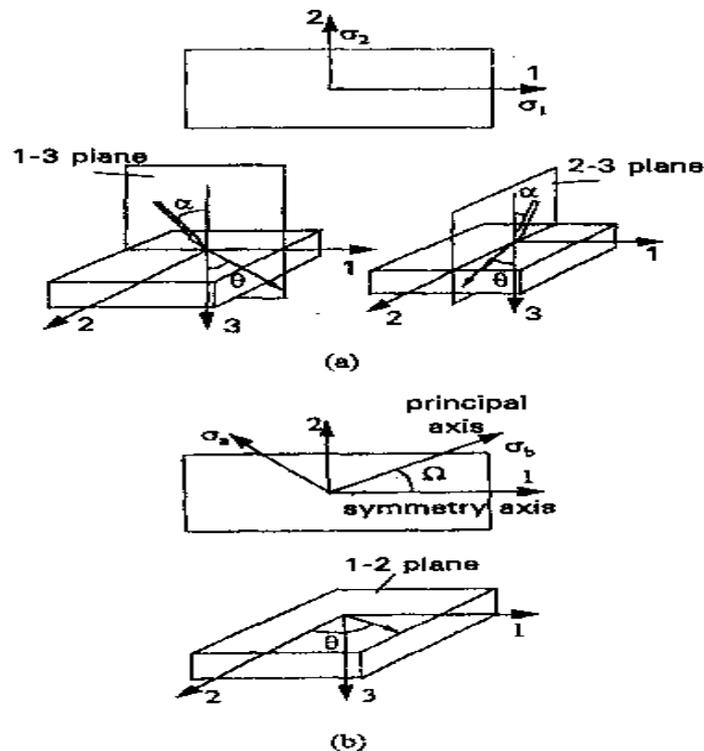


Figura 2.1. Orientação do plano de propagação das ondas em relação ao plano das tensões. (a) Planos de propagação da onda (planos de simetria 1-3 e 2-3) são ortogonais ao plano das tensões principais (plano de simetria 1-2). (b) Os planos de propagação das ondas e de atuação das tensões coincidem. A direção de propagação está com um ângulo θ , as tensões principais estão fora do eixo de simetria com um ângulo Ω .

Nesta situação, quando as direções principais de tensão coincidem com os eixos de simetria dos materiais ortotrópicos, não há mudança no grau de simetria do material e o

número de constantes elásticas C_{ijkl} no sólido tensionado é igual ao de constantes elásticas de segunda ordem C_{ijkl}^0 para o material livre de tensões. Usando a notação matricial para as constantes elásticas, tem-se que:

(2.2)

Para propagação no plano de simetria 1-3, a equação de Christoffel (1.15) tem a seguinte forma:

(2.3)

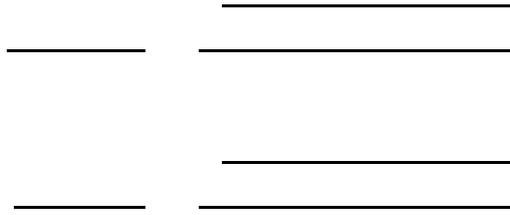
onde,

$$\begin{matrix} ; & ; \\ ; & ; \end{matrix}$$

sendo

$$;$$

θ é o ângulo entre a direção de propagação e o eixo de simetria 3 [fig. 2.1 (a)] e G_{ij} é denominado tensor acustoelástico. A equação (2.3) pode ser facilmente desacoplada, o que permite a obtenção de soluções analíticas para as velocidades das ondas ultrassônicas:



onde,

QL = Quase Longitudinal,

QT = Quase Transversal.

É evidente que as velocidades de onda QT e QL só dependem de cinco parâmetros no plano de simetria 1-3, a saber, σ_{11} e σ_{11} . O mesmo acontece com o plano de simetria 2-3, só que as constantes elásticas envolvidas e a componente da tensão são agora σ_{22} e σ_{22} . As fórmulas para as velocidades de onda QT e QL nesse último plano são obtidas permutando-se os índices 1 e 2.

2.2.2 Tensões principais fora dos eixos de simetria ortotrópica. Propagação das ondas ultrassônicas no plano de tensões

O segundo caso a ser considerado (que não foi objeto direto de nossos estudos e pode ser estudado posteriormente) é aquele em que as direções das tensões principais correspondentes a um estado plano de tensões arbitrário atuante no plano de simetria 1-2 não estão alinhadas com as direções de simetria do material neste plano 1-2 [figura 2.2 (b)]. Neste caso, σ_{11} , σ_{22} e σ_{12} são as únicas componentes de tensão não nulas e a simetria do material é reduz-se a monoclinica. A matriz das constantes elásticas dependentes da tensão tem então a seguinte forma:

(2.6)

são constantes elásticas efetivas que dependem unicamente da componente da tensão cisalhante σ_{12} . Por outro lado se σ_{12} for diferente de zero, então a solução da equação de Christoffel não pode ser representada na forma das equações (2.4) e (2.5), pois a componente cisalhante da tensão altera a simetria do material tornando o plano 1-3 assimétrico. Chu, Degtyar e Rohklin (1994) destacam haver encontrado um problema de instabilidade para a reconstrução em planos assimétricos. Seus cálculos mostraram que mesmo uma reduzida dispersão nos dados de velocidade desestabiliza o processo de inversão, o que indica que ainda são necessárias novas pesquisas para a construção de um algoritmo estável para esses casos.

Esta dificuldade pode ser suplantada se em vez de considerar a propagação de ondas em planos ortogonais ao plano de tensões, forem propagadas ondas no próprio plano de tensões [figura 2.1(b)] uma vez que ele continua sendo um plano de simetria e a equação de Christoffel generalizada (equação 1.15) pode ser novamente desacoplada. As soluções para as velocidades quase longitudinal e quase transversal têm agora a seguinte forma:

$$\begin{array}{c}
 \text{---} \\
 \text{---} \\
 \text{---} \\
 \text{---}
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 \text{---} \\
 \text{---} \\
 \text{---} \\
 \text{---}
 \end{array}
 \tag{2.7}$$

onde

;

O processo de inversão descrito anteriormente, pode ser utilizado também no espaço das incógnitas para encontrar a diferença das tensões normais e a tensão cisalhante. O processo de inversão mostrou-se novamente estável. Para uma tensão uniaxial, aplicada num ângulo Ω em relação ao eixo 1 (ângulo desconhecido), então os valores desta tensão e o ângulo Ω podem ser obtidos por:

(2.9)

2.3 Fluxograma para a construção do algoritmo de inversão

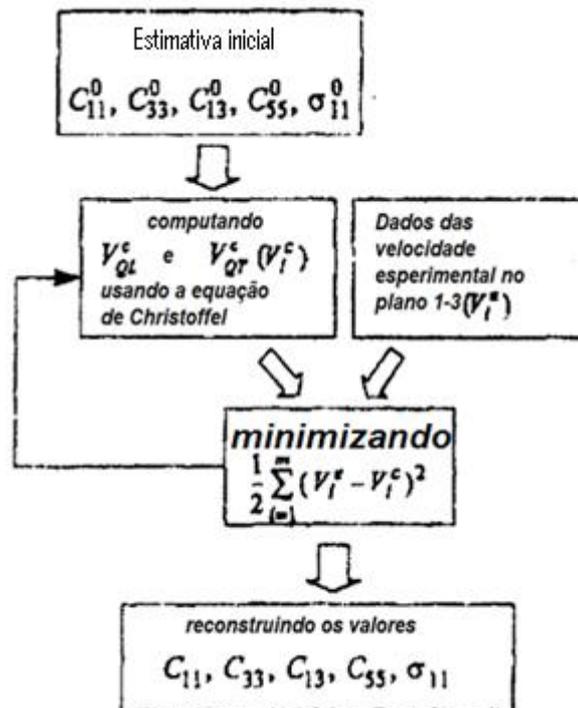


Figura 2.2. Fluxograma do algoritmo de inversão

Como discutido anteriormente, a partir da medição da dependência angular da velocidade da onda ultrassônica, pode-se determinar os cinco parâmetros desconhecido para cada plano de simetria separadamente. O fluxograma para o procedimento de inversão é apresentado na figura 2.2 para o plano de simetria 1-3. As quatro constantes elásticas

e a componente da tensão σ_{11} formam um espaço de dimensão cinco, no qual tais parâmetros são inicialmente desconhecidos. Selecionando um conjunto de palpites iniciais para esses parâmetros (por exemplo, os valores das constantes elásticas correspondentes ao estado livre de tensões), as velocidades QL e QT são calculadas e os parâmetros desconhecidos são determinados pela minimização da soma dos quadrados das diferenças entre as velocidades experimental e calculada em diferentes ângulos de propagação (equação 2.1).

Quando a reconstrução dos dados das velocidades se dá em ambos os planos 1-3 e 2-3, ambas as tensões σ_{11} , σ_{22} e sete das nove tensões dependentes das constantes elásticas (exceto) podem ser encontradas.

2.4 Método de Levenberg-Marquardt para problemas de ajuste de curva não linear por mínimos quadrados

É o método padrão para resolver problemas de mínimos quadrados não lineares. Tais problemas surgem quando queremos ajustar uma função parametrizada a um conjunto de dados, minimizando a soma dos quadrados dos erros entre os pontos já obtidos e os da função dada. O ajuste da curva pelo método de Levenberg-Marquardt é uma combinação de dois métodos de minimização, a saber, gradiente de máxima descida e o método de Gauss-Newton. O primeiro método é baseado no fato das várias variáveis das funções definidas serem diferenciáveis na vizinhança do ponto. A soma dos quadrados dos erros é reduzida pela atualização dos parâmetros na direção de maior redução do objetivo. Esse tipo de abordagem é usado quando os parâmetros estão longe do valor ideal. Já o segundo método de Gauss-Newton tem por hipótese que o mínimo da soma dos quadrados dos erros pertence a uma função quadrática local e é empregado quando os parâmetros estão próximos dos valores críticos (Lourakis, 2005; Gavin, 2011).

Para ajustar a função (valores reais) ao conjunto de pontos dos dados (valores atribuídos), onde:
 $t =$ Variável independente
 $p =$ Vetor de n parâmetros

Como já foi dito nesse trabalho, o método de Levenberg-Marquardt é um algoritmo de atualizações de parâmetros que varia entre o método do gradiente de máxima descida e o método de Gauss-Newton.

(2.10)

onde: W é a matriz diagonal,

j é a matriz jacobiana,

j^T é a transposta de j , e

h é a perturbação que move os parâmetros na direção mais íngreme de descida.

Observação: pequenos valores do parâmetro λ resultam de atualizações do algoritmo de Gauss-Newton, e grandes valores de λ resultam de uma atualização do gradiente de máxima descida.

Os dois consistem na atualização dos pontos da função objetivo, onde se tem que escolher a partir do mesmo uma direção e o tamanho do passo a ser dado em busca de um mínimo local ou com determinadas restrições, o mínimo global. Distante do ponto crítico da função, o método do gradiente de máxima descida fornece um progresso constante e convergente. À medida que a solução se aproxima de mínimo, o método de Levenberg-Marquardt muda de enfoque para o método de Gauss-Newton, acelerando a convergência para o mínimo local.

(2.11)

2.5 Programa em FORTRAN para solução do problema de mínimos quadrados não linear

A implementação foi realizada usando o compilador Fortran 90 e a subrotina UNLSF, que resolve problemas não lineares sem restrições, e que se encontra disponível na biblioteca numérica IMSL da *Visual Numerics*®. As bibliotecas IMSL (C, C# e F90MP) são um amplo conjunto de subrotinas que fornecem os módulos necessários para a construção de sua aplicação de análise de dados. Estas subrotinas liberam o desenvolvedor de grande parte do trabalho de programação. As subrotinas são extremamente confiáveis, amplamente testadas e

otimizadas, acelerando os trabalhos e reduzindo os custos de desenvolvimento. Elas incorporam mais de 30 anos de experiência da *Visual Numerics*® em contínuo desenvolvimento e aprimoramento. São disponíveis em diferentes tipos de plataformas. As bibliotecas IMSL podem reduzir em mais de 95% o trabalho de programação.

A biblioteca IMSL Fortran 90 MP tem sido usada por profissionais técnicos nas áreas de engenharia, pesquisa, educação, finanças e negócios. Seus usuários podem se aproveitar da tecnologia de processadores vetoriais de alto desempenho, paralelismo por memória compartilhada e distribuída. A F90MP inclui uma nova geração de algoritmos otimizados para multiprocessamento, além de todo o acervo de subrotinas, construídas em mais de 35 anos, baseadas em Fortran 77 com compatibilidade total com o Fortran 90.

Para que o programa seja executado adequadamente é necessário que seja salvo um arquivo texto (.dat) com as velocidades geradas, que em nosso caso serão sintéticas (falaremos na geração das mesmas no próximo capítulo) ou velocidades experimentais. E outro arquivo também (.dat) com os respectivos ângulos na mesma pasta onde o programa está armazenado.

2.5.1 Uso da Biblioteca IMSL

É necessário inicialmente carregar a biblioteca. Segue abaixo o caminho e a linha de comando que deve ser introduzido na janela do Fortran 90.

Obs. Compile primeiro o programa.

Caminho:

Project > settings > link

Linha de comando:

Troque kernel32.lib por

SSTATD.LIB SSTATS.LIB SMATHD.LIB SMATHS.LIB SF90MP.LIB e tecla em OK

Recompile e execute o programa.

O UNLSF é uma subrotina baseada na subrotina LDMIF do conjunto de subrotinas de minimização MINPACK, desenvolvida por Moré et al (1980). Os problemas de mínimos quadrados não lineares são resolvidos com uma versão modificada do método de Levenberg-Marquardt. O problema é estruturado como se segue:

$$- \quad - \quad (2.12)$$

em que $m \geq n$, $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, onde as (x) são as componentes da função $F(x)$. A partir do ponto atual, o algoritmo usa o conceito de região de confiança:

$$(2.13)$$

sujeito a μ_c , para obter um novo ponto x_n , o qual é calculado a partir da equação abaixo:

$$(2.14)$$

onde $\mu_c = 0$, se $d_c \geq \|(J(x_c)^T J(x_c))^{-1} J(x_c)^T F(x_c)\|_2$ e $\mu_c > 0$, de outro modo. $F(x_c)$ e $J(x_c)$ são os valores da função e da matriz jacobiana avaliados no ponto corrente. Este procedimento é repetido até que os critérios de parada sejam satisfeitos.

Para cálculos em precisão simples da matriz jacobiana é usado o método de diferença finita, se tais cálculos não forem precisos o algoritmo pode não convergir para o ponto crítico da função objetivo. Nesses casos, é recomendada pelos desenvolvedores dessa ferramenta a utilização de alta precisão aritmética. Se por outro lado a matriz jacobiana puder ser facilmente fornecida, deve-se usar a subrotina UNLSJ.

É útil salientar que tais subrotinas são chamadas de modulares, o que significa que seus códigos fontes não podem ser visualizados, o que dificulta bastante a adaptação do problema proposto ao algoritmo já existente, mas os produtores do mesmo tentam minimizar tal situação com comentários e uma subrotina chamada UMACH que fornece informações sobre determinados erros de execução e orientam o usuário em como contorná-los. Seguem abaixo tais comentários como descritos pelos desenvolvedores das respectivas subrotinas.

2.5.2 Comentários sobre o programa fonte para solução do problema inverso de interesse

Apresentam-se nesta seção alguns comentários sobre o programa fonte para solução do problema inverso de interesse. A listagem do programa encontra-se no apêndice A2.

Subrotina DUNLSF (da Biblioteca IMSL) e seus argumentos.

CALL DUNLSF (CHRISTOFFEL, M, N, XGUESS, XSCALE, FSCALE, IPARAM, RPARAM, X, FVEC, FJAC, LDFJAC)

CHRISTOFFEL – Subrotina fornecida pelo usuário para avaliar a função do problema de mínimos quadrados. Utilize CALL CHRISTOFFEL (M, N, X, F), onde:

M – dimensão de F, números de funções (dados de entrada do usuário)

N – dimensão de X, números de parâmetros (dados de entrada do usuário).

Observação: N tem que ser menor ou igual a M, para que um sistema possa ter solução (o número de funções tem que ser maior ou igual ao número de variáveis envolvidas).

X – vetor de dimensão de N que em cada ponto que a função é avaliada. Contém assim as soluções aproximadas. Nesta aplicação, a primeira componente desse vetor será a solução da equação de Christoffel com as estimativas iniciais, XGUESS.

XGUESS – vetor com dimensão N contendo os valores da estimativa inicial (nesta aplicação, os componentes deste vetor são as quatro primeiras constantes elásticas e a tensão no plano escolhido).

XSCALE – vetor de dimensão N, contendo a diagonal da matriz que redimensiona (altera a magnitude) as variáveis. Ele é usado para redimensionar o gradiente e a distância entre dois pontos. Os valores de XSCALE são pré-definidos internamente. Veja IPARAM (6) no comentário 4.

Valor pré-definido: XSCALE = 1,0.

FSCALE – vetor de dimensão M, contendo a diagonal da matriz de redimensionamento para as funções. Utilizado para alterar a magnitude do gradiente. Na ausência de outras informações, defina todos os seus valores iguais a 1,0.

Valor pré-definido: FSCALE = 1,0.

IPARAM – vetor de parâmetros com 6 componentes. (Entrada / Saída).

Anule IPARAM (1) para trabalhar com os valores pré-definidos de IPARAM e RPARAM.

Veja comentário 3.

Valor pré-definido: IPARAM = 0.

RPARAM – vetor de parâmetros com 7 componentes. (Entrada / Saída)

Veja o comentário 3.

FVEC – vetor de tamanho M contendo os resíduos da solução aproximada. (Saída)

FJAC – matriz M por N contendo a matriz Jacobiana aproximada por diferença finita na solução aproximada (Saída).

LDFJAC – Maior dimensão da matriz FJAC, exatamente como especificado na declaração, dimensão do programa de chamada. (Entrada).

Valor pré-definido: LDFJAC = tamanho (FJAC, 1).

Comentário 1 – Código de Erros (vide Tabela 2.1)

Tabela 2.1. Informações de erros

Tipo	Código	
3	1	Ambas as reduções relativas à função atual ou prevista são menores ou iguais à tolerância relativa à convergência da função.
3	2	As iterações parecem estar convergindo para um ponto que não é crítico.
4	3	Número máximo de iterações excedido.
3	6	Cinco etapas consecutivas foram tomadas com o comprimento máximo do passo.
2	7	Escala de tolerância ao passo satisfeita, o ponto atual pode ser uma solução aproximada local, ou o algoritmo evolui de forma muito lenta, longe de uma solução, ou o passo escolhido é muito grande.

Comentário 2 – o primeiro critério de parada para a subrotina UNLSF ocorre quando a norma da função é menor do que o valor absoluto da tolerância pré-estabelecida (RPARAM (4)). O segundo critério de parada ocorre quando a norma do gradiente (sujeito a um fator escala) é menor do que a tolerância pré-estabelecida (RPARAM (1)). O terceiro critério de parada para UNLSF ocorre quando a escala de distância entre os dois últimos passos é menor do que a tolerância de passo (RPARAM (2)).

Comentário 3 – caso se deseje manter os parâmetros pré-definidos para UNLSF, então anule IPARAM (1) e chame a subrotina UNLSF. Caso contrário, então os seguintes passos devem ser tomados antes de chamar UNLSF:

- a) CALL U4LSF (IPARAM, RPARAM)
- b) Introduza os novos valores para os componentes de IPARAM e RPARAM que se deseja alterar.

Observe que ao chamar a subrotina CALL U4LSF, valores pré-definidos serão associados aos componentes dos vetores IPARAM e RPARAM, de modo que somente os componentes que se deseja alterar devem ser modificados.

Observe a lista dos parâmetros e seus valores pré-definidos.

IPARAM — Vetor inteiro com 6 componentes.

IPARAM(1) = *Flag* (sinal) de inicialização.

IPARAM(2) = Números de dígitos válidos na função .

Valor pré-definido: Depende da precisão interna da maquina.

IPARAM(3) = Número máximo de iterações .

Valor pré-definido: 100.

IPARAM(4) = Número máximo de avaliações da função objetivo.

Valor pré-definido: 400.

IPARAM(5) = Número máximo de avaliações da matriz jacobiana.

Valor pré-definido: Não usar na UNLSF.

IPARAM(6) = Variável interna que dimensiona o *flag*.

If IPARAM(6) = 1, então os parâmetros de XSCALE serão fornecidos internamente.

Valor pré-definido: 1.

RPARAM — Vetor de valor real com 7 componentes .

RPARAM(1) = Tolerância ao valor do gradiente redimensionado.

A *i*-ésima componente do gradiente redimensionado no ponto *x* é calculada como:

$$\frac{|g_i| * \max(|x_i|, 1/s_i)}{\|F(x)\|_2^2}$$

onde:

$$g_i = \left(J(x)^T F(x) \right)_i * (f_s)_i^2$$

J(x) é a Jacobiana, *s* = XSCALE e *f_s* = FSCALE.

Valor pré-definido: $\sqrt{\varepsilon}, \sqrt[3]{\varepsilon}$, em precisão dupla, onde ε é a precisão interna da máquina.

RPARAM(2) = Tolerância ao valor do passo redimensionado (STEPPTL). A *i*-ésima componente do passo redimensionado entre dois pontos *x* e *y* é calculada como:

$$\frac{|x_i - y_i|}{\max(|x_i|, 1/s_i)}$$

onde *s* = XSCALE.

Valor pré-definido: $\varepsilon^{2/3}$, onde ε é a precisão interna da máquina.

RPARAM(3) = Tolerância relativa ao valor da função.

Valor pré-definido: máx. ($10^{-10}, \varepsilon^{2/3}$), máx. ($10^{-20}, \varepsilon^{2/3}$) em precisão dupla, onde ε é a precisão da máquina.

RPARAM(4) = Tolerância absoluta ao valor da função.

Valor pré-definido: máx. $(10^{-20}, \epsilon^2)$, máx. $(10^{-40}, \epsilon^2)$ em precisão dupla, onde ϵ é a precisão da máquina.

RPARAM(5) = Pseudo-tolerância para convergência.

Valor pré-definido: 100ϵ onde ϵ é a precisão interna da máquina.

RPARAM(6) = Valor máximo permitido para o passo.

Valor pré-definido: $1000 \max(\epsilon_1, \epsilon_2)$ onde:

$$\epsilon_1 = \sqrt{\sum_{i=1}^n (\epsilon_i t_i)^2}$$

$\epsilon_2 = \|s\|_2$, $s = XSCALE$, and $t = XGUESS$.

RPARAM (7) = Tamanho inicial do raio da região de confiança.

Valor pré-definido: baseado no passo inicial de Cauchy redimensionado.

Os usuários que optarem por utilizar precisão dupla devem chamar a subrotina DU4LSF e declarar o vetor RPARAM em precisão dupla.

Comentário 4 – Os usuários que desejarem substituir os atributos pré-definidos de impressão e/ou critérios de interrupção associados com as mensagens de erro desenvolvidas para esta subrotina devem consultar a seção “tratamento de erro” (*error handling*) referida no comentário 1.

2.6 Geração de dados sintéticos

Para validar a técnica sugerida por Degtyar e Rokhlin (1995, 1996, 1997) e verificar o processo de inversão do algoritmo, foram utilizados dados sintéticos de velocidades. Para sua geração, assumiu-se que os materiais são hiperelásticos, que as suas constantes elásticas de segunda e terceira ordem são conhecidas e que as tensões resultam de deformações elásticas. Tais limitações no estado de deformação só são necessárias para a geração de dados de velocidade sintéticos, pois, como já mencionado, no processo de determinação das tensões experimentais ou simuladas pelo método de Man e Lu não é necessária a hipótese de hiperelasticidade do material.

2.6.1 Solução direta da equação de Christoffel

O movimento da onda é considerado como um estado infinitesimal de tensão que é sobreposto a um estado de tensão estático e finito. Em um sistema de coordenadas cartesiano retangular, seja X o vetor de posição de um ponto no estado sem deformação (estado *natural*) e w o vetor de deslocamento estático. O vetor de posição de um ponto no estado deformado estático (*estado inicial*) é $x = X + w$. O vetor de posição de um ponto no estado deformado final (dinâmico mais estático) é $x' = x + u$, onde u é o vetor deslocamento dependente do tempo devido à propagação da onda. As deformações são medidas em relação à configuração inicial (descrição Lagrangeana), enquanto as tensões são referidas à configuração deformada (descrição Euclidiana).

A equação de equilíbrio no estado deformado estático (*estado inicial*) e a equação de movimento dinâmico no estado final são respectivamente:

$$(a) \text{ ———— } , \quad (b) \text{ ———— } \text{ ———— } \quad (2.15)$$

O tensor de tensão de Cauchy no estado estático deformado é:

$$\text{—————} \quad (2.16)$$

onde e é a energia de deformação e e_0 e e são as densidades nos estados com deformação e sem deformação, respectivamente. A densidade da energia de deformação pode ser expressa por:

$$\text{—} \quad \text{—} \quad (2.17)$$

onde ϵ é o tensor de deformação Lagrangeano, λ e μ são as constantes elásticas de segunda ordem e ν e ν_0 são as constantes elásticas de terceira ordem.

Para se obter o tensor das tensões no estado dinâmico final basta considerar a expansão de Taylor de primeira ordem do estado de tensão estático (2.16) e negligenciar os termos de segunda ordem e superiores no gradiente de deslocamento:

A relação entre as densidades nos estados com e sem tensão é:

(2.23)

As constantes elásticas dependentes da tensão são dadas então por:

(2.24)

Nas expressões anteriores foram consideradas as seguintes propriedades de simetria (Landolt-Börnstein, 1979),

(2.25)

2.7 Material de referência: alumínio texturizado

Os dados disponibilizados Degtyar, Rohklin (1995, 1996, 1997) para o alumínio serão usados para a verificação do algoritmo proposto. Trata-se de um alumínio texturizado com uma anisotropia de 1%. CONSTANTES DE 2ª ORDEM. As constantes elásticas de 3ª ordem foram obtidas de Landolt-Börnstein, (1979) para alumínio isotrópico. As constantes elásticas dependentes da tensão foram calculadas por aqueles autores usando diretamente as equações (2.20) e (2.21) e, alternativamente, as fórmulas contidas na equação

(2.24), para uma amostra deste material submetido a uma tensão uniaxial (absoluta) de 100 MPa. Os resultados encontrados para as constantes elásticas dependentes da tensão seguindo as duas rotas foram idênticos, como esperado, até a 5ª casa decimal:

109,09 GPa; 106,75 GPa; 54,55 GPa; 28,86 GPa;

para σ igual a 100 MPa ($= 0,10$ GPa).

Conhecidas a tensão absoluta atuante (σ) e as constantes elásticas dependentes da tensão (λ , μ), as velocidades das ondas de incidência oblíqua propagadas no plano de simetria 1-3 foram então calculadas resolvendo a equação de Christoffel generalizada para as velocidades de fase das ondas ultrassônicas (isto é, resolvendo-se o problema direto em acustoelasticidade).

Encontra-se no apêndice A1 o programa fonte em Fortran para gerar as velocidades sintéticas de ondas de incidência oblíqua, conhecidas a tensão absoluta atuante e as constantes elásticas dependentes da tensão de um material ortotrópico [em realidade, trabalha-se diretamente com os correspondentes ângulos de refração das ondas de incidência oblíqua, obtidos aplicando a Lei de Snell (Rose, 1999)].

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Como mencionado anteriormente, o objetivo geral desta dissertação é que a ferramenta computacional construída seja útil na prática experimental. Assim, procurou-se desenvolver e apresentar nesta dissertação algumas simulações computacionais que, além de verificar a robustez do algoritmo numérico implementado, tivessem um interesse imediato para os pesquisadores experimentais.

3.1 Estudo da influência do número de ondas ultrassônicas utilizadas na estimativa das constantes elásticas e das tensões atuantes

Na principal publicação que serviu de base para o algoritmo proposto, Man e Lu (1987), foram utilizados 20 ângulos diferentes para as ondas quase longitudinais e 25 para as ondas quase transversais, logo serão necessárias 45 medições experimentais de velocidades para que o mesmo seja usado, tornando assim praticamente inviável a sua aplicação em campo. Foram então desenvolvidas algumas versões do programa básico, considerando diferentes números de ondas de incidência oblíqua (5, 6, 16, 20 iterações). Seguem abaixo as considerações sobre os resultados obtidos no plano 1-3.

A próxima tabela foi construída para o alumínio com os valores reais das constantes elásticas e a tensão muito próxima de zero, para avaliar a convergência e precisão. Todos valores em GPa no plano 1-3.

Tabela 3.1. Valores reconstruídos das constantes elásticas e tensão

Nº de ângulos	Nº de iterações					
Valores reais	--	109,09	106,75	54,55	28,86	0,10
5	10	109,09	106,74	54,55	28,86	0,10
6	6	109,91	106,75	54,80	28,72	0,10
16	5	109,08	106,75	54,54	28,86	0,10
20	5	109,09	106,75	54,55	28,85	0,10

3.2 Estabilidade e precisão do algoritmo numérico

Para o estudo da estabilidade e precisão do algoritmo considerou-se um desvio de + ou - 20% nos valores dos parâmetros envolvidos e observou-se a reconstrução destes mesmos valores pelo algoritmo desenvolvido. Os gráficos a seguir foram elaborados considerando conjuntos de 5 e 20 ondas de incidência oblíqua, e analisando-se os valores reconstruídos de C_{11} (por ser a constante elástica de maior magnitude) e de σ_{11} (tensão atuante) em relação ao número de iterações no plano 1-3 para convergência dos resultados.

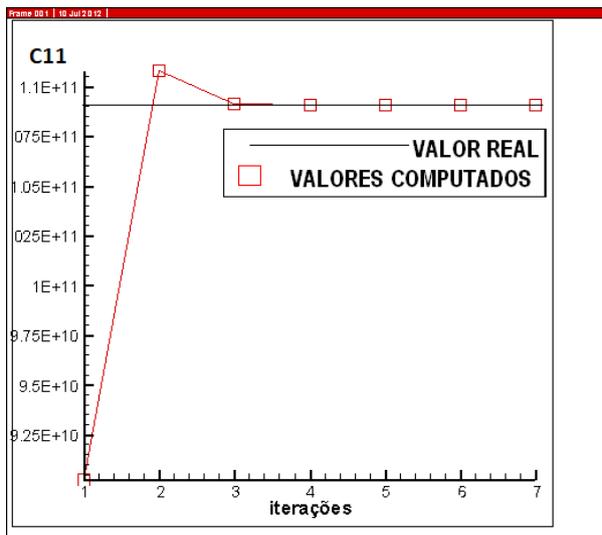


Figura (a)

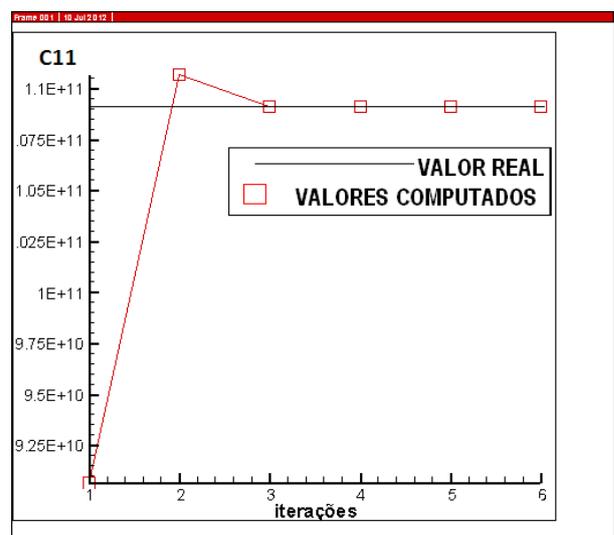


Figura (b)

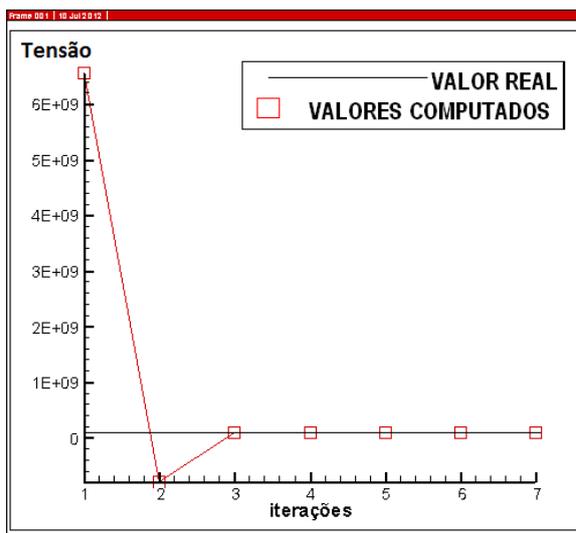


Figura (c)

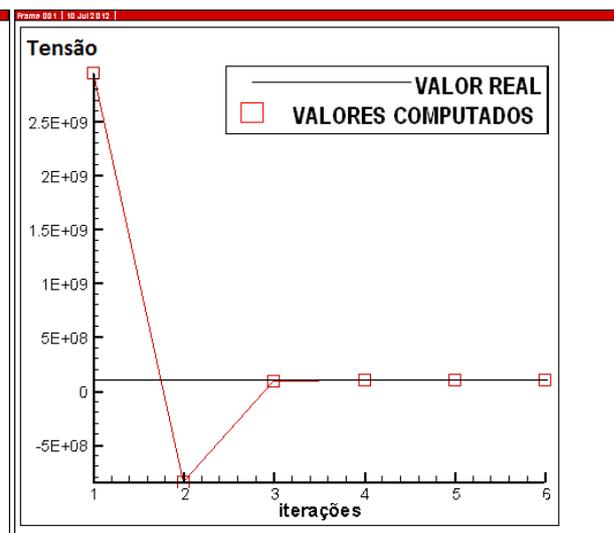


Figura (d)

Figura 3.1. Gráficos com menos 20% de desvio na constante elástica C_{11} e na tensão σ_{11} . As figuras (a) e (c) se referem aos gráficos feitos a partir de algoritmos com 5 ângulos de refração, enquanto as figuras (b) e (d) são referentes a algoritmos com 20 ângulos de refração.

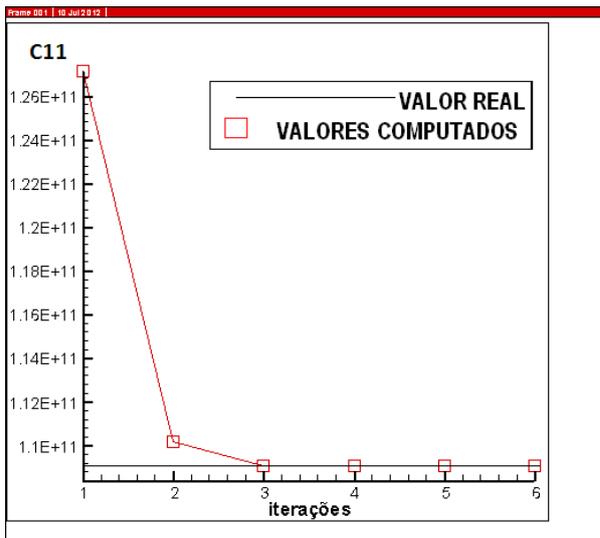


Figura (e)

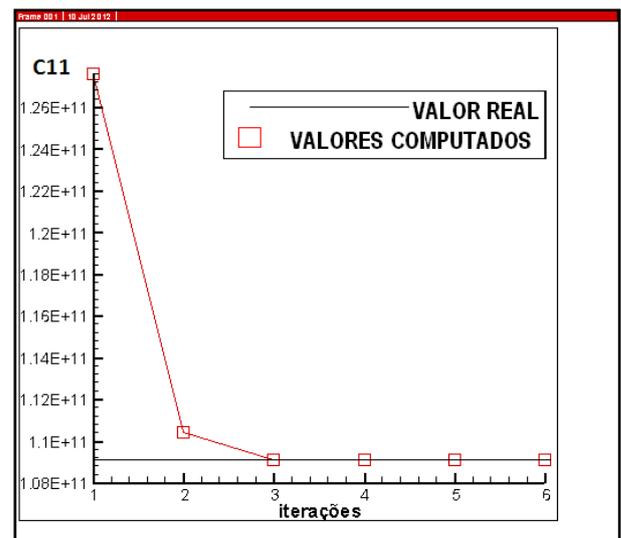


Figura (f)

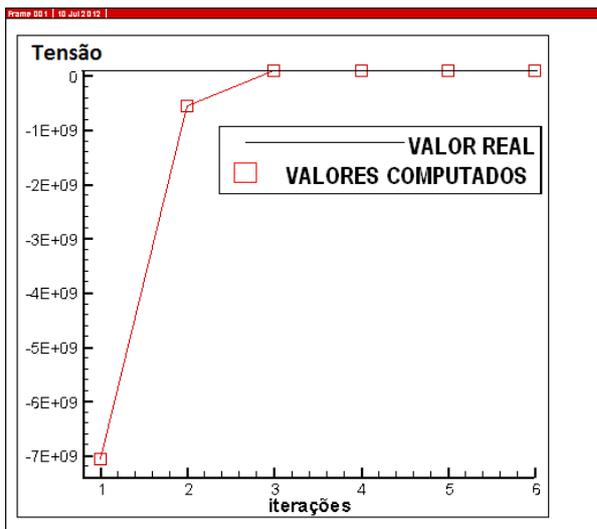


Figura (g)

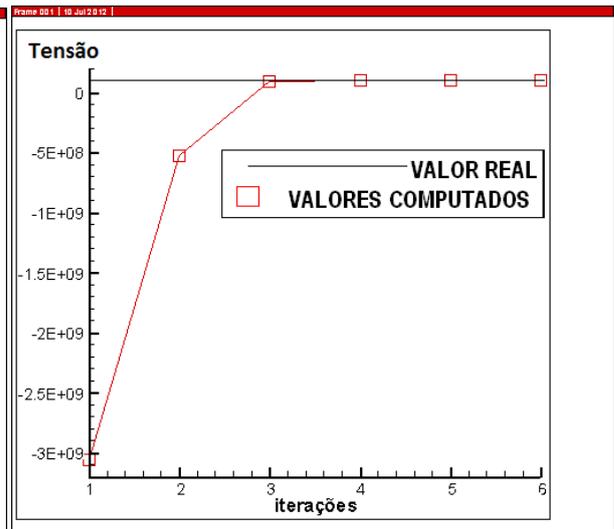


Figura (h)

Figura 3.2. Gráficos com mais 20% de desvio na constante elástica e na tensão . As figuras (e) e (g) se referem aos gráficos feitos a partir de algoritmos com 5 ângulos de refração, enquanto as figuras (f) e (h) são referentes a algoritmos com 20 ângulos de refração.

3.3 Influência do erro das medidas experimentais das velocidades das ondas ultrassônicas na estimativa das constantes elásticas e das tensões atuantes

Como a ferramenta criada tem o intuito de ser usada experimentalmente e a mesma depende da precisão dos dados da velocidade que por sua vez depende da medida da espessura do material. Erros nas medidas das velocidades podem acontecer, por isso segue abaixo o estudo da dispersão dos dados da velocidade e suas implicações nos resultados dos parâmetros envolvidos. Como já discutido com colaboradores (como os pesquisadores do laboratório de ultrassom do Instituto de Engenharia Nuclear), a mesma pode chegar a 1% (valores em GPa).

Tabela 3.2. Estudo da influência da dispersão dos dados experimentais

Dispersão					
Dados reais	109,09	106,75	54,55	28,86	0,10
-0.5%	108,00	105,68	54,00	28,57	0,099
+0.5%	110,18	107,82	55,09	29,14	0,101
-0.1%	106,91	104,62	53,464	28,285	0,0980
+0.1%	111,28	108,89	55,646	29,440	0,102

4 CONCLUSÕES

Antes das considerações finais, deve-se mencionar que este trabalho teve por finalidade implementar um algoritmo numérico para solução do problema inverso em acustoelasticidade e a obtenção das tensões atuantes (residuais e aplicadas) em materiais ortotrópicos. É claro que foi feito o estudo do comportamento dos demais parâmetros (constantes elásticas), pois fazem parte do processo. Como já mencionado, a primeira preocupação é que o algoritmo construído possa ser usado experimentalmente e que seja prático. Nas publicações tomadas como base para a pesquisa, o número de ângulos usados para o processo de reconstrução da tensão foi de 45, sendo 25 para as ondas quase longitudinais e 20 para as ondas quase transversais, o que dificulta muito a sua aplicação prática, já que para tal é necessária a medição experimental de 45 velocidades de ondas que incidem com 45 ângulos de incidência diferentes, o que torna praticamente impossível a sua aplicação prática. Existem transdutores nos quais é possível mudar os ângulos de incidência das ondas ultrassônicas emitidas em relação ao plano do material, mas a quantidade de ângulos dos mesmos não chega nem perto os números mencionados acima. Uma alternativa seria utilizar um tanque de imersão e assim, ao invés de mudar a angulação do transdutor, poder-se-ia girar o corpo de prova examinado, o que mesmo assim, tornaria o trabalho muito penoso, se fosse necessária a obtenção de resultados em vários ângulos. Por esse motivo a primeira aplicação feita nesta dissertação foi verificar a possibilidade de utilizar um número menor de medições experimentais para reconstrução das variáveis de interesse, o que está naturalmente, associado com o número de equações empregadas na solução do problema inverso.

Pode-se ver na tabela 3.1 que ao se usar o limite mínimo de equações (que é igual ao número de parâmetros de interesse, nesse caso 5, correspondente às quatro constantes elásticas e a tensão no plano 1-3), observa-se que os valores são reconstruídos de maneira satisfatória. O que diferencia um pouco é a quantidade de iterações necessárias para convergência do algoritmo. No caso de se trabalhar com apenas 5 equações (relativas a por exemplo, uma onda de incidência normal e quatro ondas de incidência oblíquas) foram necessárias 10 iterações para convergência do algoritmo, e para número maior de equações apenas 5 iterações. Este resultado não inviabiliza a utilização do número mínimo de equações (portanto, um número mínimo de medições experimentais) uma vez que o custo computacional é praticamente irrisório em todos os casos examinados.

Para a solução do problema inverso discutido nesta dissertação precisa-se de valores de referência para as estimativas iniciais dos parâmetros de interesse (constantes elásticas dependentes da tensão e da própria tensão). Uma alternativa para estimativa destes valores é considerar experimentos com corpos de prova livre de tensão para ter uma boa aproximação inicial das constantes elásticas de interesse. Para ter uma noção da influência desta estimativa inicial no processo de reconstrução dos parâmetros de interesse, considerou-se uma perturbação nos parâmetros dos dados de entrada, com um desvio de 20% para mais e para menos em relação aos dados reais. Foram gerados gráficos com respeito à constante elástica (que é a constante elástica de maior influência, pois está associada à direção da tensão aplicada) e da própria tensão. Analisando tais gráficos, percebe-se que essas perturbações não afetam de modo significativo a precisão na reconstrução dos parâmetros, só alterando o número de iterações, o que já dissemos não ser um problema maior para sua utilização.

Outro erro de caráter experimental pode ocorrer na mensuração das velocidades ultrassônicas, pois para determinar essas velocidades é necessário medir o caminho percorrido pela onda, além do tempo de percurso das ondas. Em geral, a precisão das medidas de distância percorrida pelas ondas é inferior àquela obtida para determinação do tempo de percurso das ondas, o que aumenta a incerteza no cálculo final das velocidades das ondas ultrassônicas. Tais incertezas podem ser da ordem de até 1%. Foram então aplicadas perturbações de 0,5% e de 1% nos dados de entrada das velocidades experimentais. Os resultados mostram que as velocidades experimentais devem ser obtidas da forma mais precisa possível, já que afetam diretamente a reconstrução do valor da tensão, principalmente. Observou-se também que se essa incerteza for de até 1%, as diferenças entre os valores reais e os computados são da ordem de 10^{-2} , as quais, para o caso da tensão medida em GPa, não são de maior relevância.

Concluiu-se então que em relação ao custo/benefício, o algoritmo com 5 ângulos de incidência pode ser usado de modo satisfatório para obtenção das tensões, e que se deve ser bastante cauteloso na obtenção das velocidades experimentais, já que as mesmas foram responsáveis pelas maiores diferenças entre os parâmetros reais e os determinados computacionalmente.

5. SUGESTÕES PARA ESTUDO POSTERIOR

Para estudos futuros, sugere-se a criação do algoritmo para obtenção das tensões atuantes fora do eixo de simetria do material. O mesmo só não foi incluído nesse trabalho pela falta de dados sintéticos ou experimentais para validá-lo. A construção do algoritmo não deve acarretar grandes esforços, já que basta acrescentar os quatro parâmetros restantes, aumentar o número de ângulos e, por consequência, o número de equações, pois o número de mínimo de velocidades experimentais deve ser 9, visto que esse é a nova quantidade de parâmetros de interesse (6 constantes elásticas e 3 tensões). E ao final do processamento, basta inserir as equações (2.8) e (2.9) para a reconstrução da tensão resultante e de sua direção, conforme discutido no item 2.2.2.

Outra investigação de interesse diz respeito à influência do grau de anisotropia (ortotropia) no desempenho do algoritmo de inversão. Isto pode ser feito utilizando dados de materiais disponíveis na literatura, preferencialmente, ou até mesmo dados sintéticos.

Por último, sugere-se aproveitar o algoritmo implementado para levantar gráficos (superfícies) que relacionem a variação da velocidade da onda ultrassônica propagada em diferentes direções num material ortotrópico pré-tensionado (estudo do efeito acustoelástico).

REFERÊNCIAS

- BOERI, D. V. *Caracterização de materiais compostos por ultrassom*. Dissertação de mestrado. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2006.
- CAUCHY, A. –L. Sur l'équilibre et le mouvement intérieur des corps considérés comme des masses continues. *Ex. de Math.*, v. 4, p. 293 – 219, 1829. Reimpressão: *Oeuvres Complètes d' Augustin Cauchy*, p. 342 – 369, S. II. t. IX, Gauthier-Villars, Paris, 1891.
- CHUNG, T.J. *Applied Continuum Mechanics*. Cambridge University Press, USA, 1996.
- CHU, Y. C.; DEGTYAR, A. D.; ROKHLIN, S. I. On the determination of orthotropic material moduli from ultrasonic velocity data in non-symmetry planes. *Journal of Acoustical Society of America*, v.95 n. 6, p. 3191 – 3203, 1994.
- DEGTYAR, A. D.; ROKHLIN, S. I. Absolute stress determination in orthotropic materials from angular dependences of ultrasonic velocities. *Journal of Applied Physics*, v. 78, n. 3, p. 1547 – 1556, 1995.
- DEGTYAR, A. D.; ROKHLIN, S. I. Absolute determination of elastic constants and stresses from ultrasonic group velocity data. *Review of Progress in QNDE*, eds. D. O. Thompson e D. E. Chimenti, v.15, p. 1660-1668, 1996.
- DEGTYAR, A. D.; ROKHLIN, S. I. New method for determination of applied and residual stresses in anisotropic materials from ultrasonic velocity measurement. *Materials and Evaluation*, p. 1162 – 1168, 1997.
- DESTRADE, M.; OGDEN, R. On stress-dependence elastic moduli and wave speeds. *IMA Journal of Applied Mathematics*, Advance Access published March 30, 2012.
- GAVIN, H. The Levenberg-Marquardt method for nonlinear least squares curve-fitting problems. *Department of Civil and Environmental Engineering*, Duke University, 2011.
- HUGHES, D. S.; KELLY, J. L. Second-order elastic deformation of solids. *Physics Review*, Vol. 92, No. 5, p. 1145 – 1149, 1953.
- IMSL (International Mathematics and Statistics Library) Fortran subroutines for Mathematical Applications. <http://www.math.yorku.ca/Who/Faculty/Stauffer/IMSL-manuals/MATH.pdf>
- JONES, R. M. *Mechanics of composite materials*. Taylor and Francis, 2nd edition, New York, 1998.
- KING, R. B.; FORTUNKO, C. M. Determination of in-plane residual stress in plates using horizontally polarized shear waves. *Journal of Applied Physics*, v.54, n. 6, p. 1339 – 1354, 1983.
- LANDOLT-BÖRSTEIN, *Numerical data and functional relationships in science and technology*, v. III/11, Springer-Verlag, New York, 1979.

LOURAKIS, M.I.A. A brief description of the Levenberg-Marquardt algorithm implemented by Levmar. *Technical report*. Institute of Computer Science, Foundation for Research and Technology – Hellas, 2005.

MADSEN K.; NIELSEN, N.B.; TINGLEFF, O. Methods for nonlinear least squares problems. *Technical report. Informatics and Mathematical Modeling*. Technical University of Denmark, 2004.

MAN, C. –S. Hartig's law and linear elasticity with initial stresses. *Inverse Problems*, v. 14, p. 313 – 319, 1998.

MAN, C. -S.; LU, W, Y. Towards an acoustoelastic theory for measurement of residual stresses. *Journal of Elasticity*, v. 17, p.159 – 182, 1987.

MAN, C. –S.; PARONI, R. On the separation of stress-induced and texture-induced birefringence in acoustoelasticity. *Journal of Elasticity*, v. 45, p. 91 – 116, 1996.

MORE; JORGE; GARBOW, B.; HILLSTROM, K. *User guide for MINPACK-1*. Argonne National Labs Report ANL-80-74, Argonne, Illinois, 1980.

MURNAGHAN, F.D. *Finite deformation of an elastic solid*. John Wiley, New York, 1951.

NYE, J. F. *Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices*. Oxford University Press, New York, 1993.

ORTEGA, L. P. C.; BITTENCOURT, M. S. Q.; LAMY, C. A.; PAYÃO FILHO, J. C.; GONÇALVES FILHO, O. J. A. *Introdução à avaliação de tensões por ultrassom*. Editora Virtual Científica, Rio de Janeiro, 2011.

PAO, Y. –H.; SACHSE, W.; FUKUOKA, H. Acoustoelasticity and ultrasonic measurements of residual stresses. In *Physics Acoustics*, Eds. W. P. Mason e R. N. Thurston, v. XVII, p. 61 – 143, Academic Press, Orlando, 1984.

PARONI, R.; MAN, C. –S. Two micromechanical models in acoustoelasticity: a comparative study. *Journal of Elasticity*, v. 59, p. 1243 -1 73, 2000.

RAYLEIGH, 3rd BARON (STRUTT, J. W.). *Theory of Sound vol. I*. Macmillan, 1877, 1894. Reimpressão: Cambridge University Press, 2011, [ISBN 978-1-108-03220-9](#).

RAYLEIGH, 3rd BARON (STRUTT, J. W.). *Theory of Sound vol. II*. Macmillan, 1878, 1896. Reimpressão: Cambridge University Press, 2011, [ISBN 978-1-108-03221-6](#).

RICCI, M. C.; TAVARES, A. G. S. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Engenharia e Tecnologia Espacial, Mecânica Espacial e Controle, 2005.

ROSE J. L. *Ultrasonic Waves in Solid Media*. Cambridge University Press, UK, 1999.

SHAMS, M.; DESTRADE, M.; OGDEN, R.W. Initial stresses in elastic solids: constitutive laws and acoustoelasticity, *Wave Motion*, v. 48, p. 552 – 567, 2011.

SOUZA, M. J. F. *Departamento de Computação, Instituto de Ciências Exatas e Biológicas, Universidade Federal de Ouro Preto, 35400-000 Ouro Preto, MG, Brasil.*

THOMPSON, R. B.; LEE, S. S.; SMITH, J. F. Angular dependence of ultrasonic wave propagation in a stressed, orthorhombic continuum: theory and application to the measurement of stress and texture. *Journal of Acoustical Society of America*, v.80, p. 921 – 931, 1986.

THURSTON R. N.; BRUGGER, K. Third-order elastic constants and the velocity of small amplitude elastic waves in homogeneously stressed media. *Phys. Rev. A* 133, p. 1604 – 1610, 1961.

TIMOSHENKO, S.; GOODIER J. N. *Theory of Elasticity*. 3rd edition. McGraw Hill Book Company, 1970.

TOUPIN, R. A.; BERSTEIN, B. Sound waves in deformed perfectly elastic materials. Acoustoelastic effect. *Journal of Acoustical Society of America*, v.33, p. 216 – 225, 1961

APÊNDICE A.1 Listagem do programa fonte para solução do problema inverso

Algoritmo para geração das velocidades sintéticas de 5 ondas com incidência oblíqua, sendo 3 ondas quase transversais (ângulos na faixa de 30⁰ a 70⁰) e 2 ondas quase longitudinais (ângulos de incidência na faixa de 0⁰ a 60⁰).

PROGRAM velocidades_experimentais

! Este algoritmo foi feito para simular as velocidades quase longitudinais e as velocidades quase transversais por meio direto, ou seja, os dados de entrada serão as constantes elásticas e a tensão uniaxial reais, nos planos paralelos aos eixos de simetria do material.

! aplicado a fórmula de Christoffel generalizada.

IMPLICIT NONE

REAL(8):: X, F, G11, G33, G13, den, alfa, senoteta, cosenoteta

INTEGER i, j

PARAMETER PI = 3.141592653589793115997963D+00

DIMENSION X(5), G11(5), G33(5), G13(5), alfa(5), senoteta(5), cosenoteta(5), F(5)

OPEN(8, FILE= 'angulos.out')

OPEN(9, FILE='solucoesgerais1.dat')

OPEN(10, FILE='velocidadessinteticas.dat')

WRITE(9,*)'*****'

WRITE(9,*)'PLANO DO ALUMÍNIO ISOTRÓPICO SOB TENSÃO UNI AXIAL -
PLANO DE SIMETRIA 1-3'

WRITE(9,*)'*****'

WRITE(9,*)'*****'

WRITE(9,*)'DENSIDADE DO MATERIAL = 2.7000D+03'

WRITE(9,*)'*****'

WRITE(9,*)'*****'

WRITE(9,*)'CONSTANTES ELÁSTICAS EFETIVAS (PALPITE INICIAL)'

WRITE(9,*)'C11= 109.09D+11 C33 = 106.75D+11 C13 = 54.550D+10 C55 =
28.860D+10'

WRITE(9,*)'TENSÃO RESIDUAL E APLICADA, SIGMA 11 (INITIAL GUESS)'

WRITE(9,*)'SIGMA11 = 100.00D+6'

```

WRITE(9,*)'*****'
DATA den/2.7000D+03/
DATA X/ 1.0909D+11, 1.0675D+11, 5.4550D+10, 2.8860D+10, 1.0000D+08/
! Lendo os ângulos no arquivo
READ(8,400) alfa
400 FORMAT(1PD28.10)
      DO i=1, 5
          WRITE(*,100) alfa(i)
          100 FORMAT(1PD28.10)
      END DO

pause

! cálculo dos senos e dos cossenos dos ângulos de refração
      DO i= 1, 5

! transforma os ângulos de refração de graus para radianos
          Alfa(i)= DBLE(((alfa(i))*pi)/1.80D+02)
          senoteta(i)= DSIN(alfa(i))
          cosenoteta(i)= DCOS(alfa(i))
      END DO
          WRITE(*,*) senoteta

pause

! Começo dos cálculos das velocidades, a partir dos dados das quatro constantes de
elasticidade, a tensão no plano em questão

! E os ângulos de refração da onda ultrassonica no plano, para descobrirmos suas velocidades
quase longitutinais e a quase transversais

      DO i= 1, 5
          G11(i) = X(1)*dbble(senoteta(i))**2 + X(4)*dbble(cosenoteta(i))**2
          G33(i) = X(4)*dbble(senoteta(i))**2 + X(2)*dbble(cosenoteta(i))**2
          G13(i) = (X(3) + X(4))*dbble(senoteta(i)*cosenoteta(i))
          !G22 = c66i*(SIN(teta(i)))**2 + c44i*(COS(teta(i)))**2
      END DO

      DO i=1, 5
          WRITE(*,*) 'G11 = ', i, G11(i)
          WRITE(*,*) 'G33 = ', i, G33(i)
          WRITE(*,*) 'G13 = ', i, G13(i)

```

```

END DO
pause
DO i= 1, 2
    F(i) = Dsqrt(dble(0.2D+01 * (G11(i) + G33(i)) / den) + 0.2D+01 *
Dsqrt(dble(G11(i) ** 2 - 0.2D+1 * G11(i)&
    * G33(i)+ G33(i) ** 2 + 0.4D+01 * G13(i) ** 2)) / dble(den) + dble(0.4D+01 *
X(5) * senoteta(i)** 2 / den))/ 0.2D+01
!
    DO j= 3, 5
        F(j) = Dsqrt(dble(0.2D+01 * (G11(j) + G33(j)) / den) - 0.2D1 *
Dsqrt(dble(G11(j) ** 2 - 0.2D+01 * G11(j)&
    * G33(j)+ G33(j) ** 2 + 0.4D+01 * G13(j) ** 2)) / dble(den) + dble(0.4D+01 *
X(5) * senoteta(j)** 2 / den))/ 0.2D+01
    END DO
END DO
DO i=1, 5
    WRITE(*,500) F(i)
    500 FORMAT(1PD28.10)
END DO
DO i=1, 5
    WRITE(9,600) F(i)
    600 FORMAT(1PD28.10)
END DO
DO i=1, 5
    WRITE(10,700) F(i)
    700 FORMAT(1PD28.10)
END DO
CLOSE(8)
CLOSE(9)
CLOSE(10)
END PROGRAM

```

APÊNDICE A.2 Listagem do programa fonte para solução do problema inverso

Algoritmo para solução da equação de Christoffel generalizada (problema inverso), considerando as velocidades sintéticas (apêndice A.1) e de seus respectivos ângulos de refração, e das aproximações (palpites) iniciais para as constantes elásticas dependentes da tensão e as próprias tensões.

```
PROGRAM equacaodechristoffel
```

```
! Abaixo o comando para carregar a biblioteca
```

```
! SSTATD.LIB SSTATS.LIB SMATHD.LIB SMATHS.LIB SF90MP.LIB
```

```
INTEGER LDFJAC, M, N, i, IPARAM(6), NOUT
```

```
PARAMETER (LDFJAC=5, M=5, N=5)
```

```
PARAMETER pi = 3.141592653589793115997963D+00
```

```
REAL(8):: FJAC(LDFJAC,N), FSCALE(M), FVEC(M), RPARAM(7),&
```

```
    X(N), XGUESS(N), XSCALE(N), den, alfa, senoteta, cosenoteta, VE, tinicio, tfim
```

```
DIMENSION alfa(5), senoteta(5), cosenoteta(5), VE(5), G11(5), G33(5), G13(5)
```

```
COMMON den, senoteta, cosenoteta, VE
```

```
EXTERNAL CHRISTOFFEL, UMACH, DUNLSF, DU4LSF
```

```
OPEN(9, FILE='angulos.out')
```

```
OPEN(10, FILE='velocidadessinteticas.dat')
```

```
OPEN(11, FILE='solucoesgerais.out', FORM='formatted')
```

```
call CPU_TIME (tinicio)
```

```
WRITE(11,*)'*****'
```

```
WRITE(11,*)'PLANO DO ALUMÍNIO ISOTRÓPICO SOB TENSÃO UNI AXIAL -  
PLANO DE SIMETRIA 1-3'
```

```
WRITE(11,*)'*****'
```

```
WRITE(11,*)'*****'
```

```
WRITE(11,*)'DENSIDADE DO MATERIAL = 2.7000D+03'
```

```
WRITE(11,*)'*****'
```

```
WRITE(11,*)'*****'
```

```
WRITE(11,*)'CONSTANTES ELÁSTICAS EFETIVAS (PALPITE INICIAL)'
```

```

WRITE(11,*)C11= 109.09D+09   C33 = 106.75D+09   C13 = 54.550D+08   C55 =
28.860D+08'
WRITE(11,*)'TENSÃO RESIDUAL E APLICADA, SIGMA 11 (INITIAL GUESS)'
WRITE(11,*)'SIGMA11 = 10.000D+05'
WRITE(11,*)'*****'
WRITE(11,*)'*****'
WRITE(11,*)'PROPAGAÇÕES E VELOCIDADES DAS ONDAS QUASELOGITUTINAIS
Vql E QUAETRANSVERSAIS Vqt!'
WRITE(11,*)          (VALORES MENSURADOS)'
WRITE(11,*)'*****'
DATA den/2.7000D+03/
DATA XGUESS/ 1.0009D+11, 1.0075D+11, 5.0000D+10, 2.8000D+10, 5.0000D+06/
DATA XSCALE/5*1.0D+00/, FSCALE/5*1.0D+00/
! lendo o arquivo com os ângulos de refração
WRITE(*,*)'      Ângulos de refração'
DO i=1, 5
    READ(9,400) alfa(i)
400 FORMAT(1PD28.10)
    WRITE(*,100) alfa(i)
100 FORMAT(1PD28.10)
END DO
pause
! lendo o arquivo com as velocidades sintéticas
WRITE(*,*)'      velocidades sintéticas'
DO i=1, 5
    READ(10,500) VE(i)
500 FORMAT(1PD28.10)
    WRITE(*,300) VE(i)
300 FORMAT(1PD28.10)
END DO

WRITE(11,*)' Os 2 primeiros ângulos de refração são das ondas Ql e os 3 ultimas são Qt'
WRITE(11,*)' As 2 primeiras velocidades são relativas as Ql e as 3 ultimas são Qt'
WRITE(11,*)' angulos de refracao          velocidades'

```

```

DO i=1, 5
  WRITE(11,*) alfa(i) , VE(i)
END DO
PAUSE

      DO i= 1, 5
! transforma os ângulos de refração de graus para radianos
      alfa(i)= DBLE(((alfa(i))*pi)/1.80D+02)
      senoteta(i)= DSIN(alfa(i))
      cosenoteta(i)= DCOS(alfa(i))
      END DO

! Relaxe o primeiro critério de parada chamando DU4LSF e aplicando um fator de escala 10
! na função de tolerância absoluta (absolute function tolerance).
!

CALL DU4LSF (IPARAM, RPARAM)
CALL DUNLSF (CHRISTOFFEL, M, N, XGUESS, XSCALE, FSCALE, IPARAM,&
  RPARAM, X, FVEC, FJAC, LDFJAC)
DO i=1,5
  IPARAM(3)=i
END DO
pause
!
!   Imprimindo valores
!

DO i= 1,7
  WRITE(*,*)' valores do RPARAM', i,'=', RPARAM (i)
END DO
DO i= 1,6
  WRITE(*,*)' valores do IPARAM', i,'=', IPARAM (i)
END DO
WRITE(*,*)'numero de interações=', IPARAM(3)
WRITE(*,*)'O número de avaliações da função=', IPARAM(4)

```

```

WRITE(*,*)' a solução avaliada na função=',FVEC
WRITE(*,*)' Os parâmetros são'
WRITE(*,*)' C11=', X(1)
WRITE(*,*)' C33=', X(2)
WRITE(*,*)' C13=', X(3)
WRITE(*,*)' C55=', X(4)
WRITE(*,534) X(5)
534 FORMAT('SIGMA11=',1PD10.2)
DO i= 1,7
    WRITE(11,*)' valores do RPARAM', i,'=', RPARAM (i)
END DO
DO i= 1,6
    WRITE(11,*)' valores do IPARAM', i,'=', IPARAM (i)
END DO
WRITE(11,*)'numero de interações=', IPARAM(3)
WRITE(11,*)' Os parâmetros são'
WRITE(11,*)' C11=', X(1)
WRITE(11,*)' C33=', X(2)
WRITE(11,*)' C13=', X(3)
WRITE(11,*)' C55=', X(4)
WRITE(11,554), X(5)
554 FORMAT('SIGMA11=',1PD10.2)

CALL UMACH (2, NOUT)

CLOSE(11)
CLOSE(10)
call CPU_TIME (tfim)
write (*,*)' O tempo gasto é de',(tfim-tinicio)/3.6d3,'s'
write (11,*)' O tempo gasto é de',(tfim-tinicio)/3.6d3,'s'
pause
END

```

SUBROUTINE CHRISTOFFEL (M, N, X, F)

INTEGER M, N, i, j

REAL(8):: X(N), F(M), den, senoteta, cosenoteta, VE, G11, G33, G13

COMMON den, senoteta, cosenoteta, VE

DIMENSION senoteta(5), cosenoteta(5), VE(5), G11(5), G33(5), G13(5)

WRITE(*,*) X

pause

DO i= 1, 5

G11(i) = X(1)*dble(senoteta(i))**2 + X(4)*dble(cosenoteta(i))**2

G33(i) = X(4)*dble(senoteta(i))**2 + X(2)*dble(cosenoteta(i))**2

G13(i)= (X(3) + X(4))*dble(senoteta(i)*cosenoteta(i))

!G22 = c66i*(SIN(teta(i)))**2 + c44i*(COS(teta(i)))**2

END DO

!

DO i= 1, 2

F(i) = (Dsqrtdble(0.2D+01 * (G11(i) + G33(i)) / den) + 0.2D+01 *
Dsqrtdble(G11(i) ** 2 - 0.2D+01 * G11(i)&
* G33(i)+ G33(i) ** 2 + 0.4D+01 * G13(i) ** 2)) / dble(den) + dble(0.4D+01 *
X(5) * senoteta(i)** 2 / den))/ 0.2D+01)- dble(VE(i))

DO j= 3, 5

!

F(j) = (Dsqrtdble(0.2D+01 * (G11(j) + G33(j)) / den) - 0.2D+01 *
Dsqrtdble(G11(j) ** 2 - 0.2D+01 * G11(j)&
* G33(j)+ G33(j) ** 2 + 0.4D+01 * G13(j) ** 2)) / dble(den) + dble(0.4D+01 *
X(5) * senoteta(j)** 2 / den))/ 0.2D+01)- dble(VE(j))

END DO

END DO

DO i=1, 5

WRITE(11,700) F(i)

700 FORMAT(1PD28.10)

END DO

RETURN

END