

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE GENERAL SAN MARTÍN
COMISIÓN NACIONAL DE ENERGÍA ATÓMICA
INSTITUTO DE TECNOLOGÍA
“Prof. Jorge A. Sabato”**

**Caracterización mediante ultrasonido de la anisotropía
elástica y de la textura de los materiales (*)**

por Mg. Diego A. Cowes

Directores

**Dr. J. Ignacio Mieza
Dr. Martín P. Gómez**

(*) Tesis para optar al título de *Doctor en Ciencia y Tecnología, Mención Materiales*

República Argentina

2024

AGRADECIMIENTOS

A mis directores, Ignacio Mieza y Martín Gómez, por el apoyo inagotable durante todo el camino del doctorado.

A Diego Pérez, Andrés Di Donato, Juan Ignacio Drovandi y Juan Mary, por la búsqueda, préstamo y corte de obleas de silicio, en general, raras.

A Federico Villanueva por la mecanización de una parte esencial del equipo y a Daniel Podestá y al ECRI por el aluminio utilizado para la misma.

A Miriam Neyra por prestarme el osciloscopio incontables veces.

A Augusto Bonelli Toro y Sebastián Otero por las probetas de fibra de carbono.

A Sebastián Passanante, Joaquín García y, nuevamente, a Augusto Bonelli Toro como compañeros de oficina que prestaron oídos y consejos en momentos de estancamiento.

A Martín Iofrida y Juan Carricondo por traerme a CNEA.

A Nicolás Núñez y Hernán Sánchez por los innumerables consejos de electrónica y afines.

A Miguel Vicente Álvarez y Vladimir Lucin por la medición de textura por difracción de neutrones.

A Gabriel Juárez por la medición de textura por difracción de rayos-X y a Ricardo Montero por la preparación de las muestras.

A Daniel Arcone por la medición de densidad por picnometría de gases.

A Diego Lionello por la medición, no convencional, de difracción de rayos-X.

A Javier Fava por las muestras de Zircaloy.

A los docentes y al personal administrativo y del Instituto Sabato.

A mi hermana Ana, mi madre Patricia por el apoyo incondicional.

A mi novia Agustina, por su amor y por tratar de entender lo que hago.

RESUMEN

Dado que la propagación de las ondas acústicas depende de las propiedades mecánicas de los materiales, el ultrasonido es una técnica ampliamente utilizada para la determinación de las características elásticas del sólido. Además, la versatilidad del método permite llevar a cabo ensayos en distintas direcciones, lo que resulta particularmente útil para la caracterización de la anisotropía elástica, es decir, la dependencia espacial de la elasticidad. Esta información no es fácilmente accesible con ensayos mecánicos convencionales, pero además el ultrasonido se aplica sin requerir la destrucción de la muestra. El primer objetivo de esta tesis consiste en desarrollar un método ultrasónico para la caracterización de propiedades elásticas, lo que incluye el desarrollo teórico de modelos de mecánica del continuo para la descripción del fenómeno ondulatorio; el diseño, la construcción y la automatización de un dispositivo para propagar ondas en distintas direcciones (goniometría ultrasónica); la optimización y construcción de transductores ultrasónicos adecuados al experimento; y la inversión de las señales ultrasónicas a través de un modelo de optimización implementado en arquitectura de unidades de procesamiento gráfico (GPU). El segundo objetivo del trabajo consiste en abordar modelos de homogeneización elástica que establecen relaciones inyectivas entre las propiedades elásticas efectivas y la distribución de orientaciones cristalinas (textura cristalográfica). Como las longitudes de onda utilizadas en ultrasonido suelen ser mucho más grandes que el tamaño de grano, se muestra que la goniometría ultrasónica sirve para determinar las propiedades elásticas macroscópicas y, por consiguiente, bajo ciertas condiciones, la textura cristalográfica. El trabajo muestra que la determinación de la textura cristalográfica por medio de ultrasonido representa una alternativa de bajo costo a las técnicas convencionales, y que además, gracias a la gran penetración de las ondas elásticas, la información obtenida es representativa del volumen.

Palabras clave: Anisotropía elástica, Ultrasonido, Textura cristalográfica, Homogeneización, Ondas elásticas.

ABSTRACT

Since the propagation of acoustic waves depends on the mechanical properties of the materials in which they travel, ultrasonic techniques are widely used for the determination of the elastic characteristics of the solid. Moreover, the method's versatility permits to perform tests while varying the direction of incidence, which is particularly useful for the characterization of the elastic anisotropy, i.e., the spatial dependence of the elasticity. This information cannot be easily obtained by conventional mechanical testing, moreover, ultrasonic testing can be performed without destroying the sample. The first objective of this thesis consists in developing an ultrasonic method for the characterization of elastic properties, which includes the theoretical development of continuum mechanics for the description of the wave phenomenon; the design, construction, and automation of a device for the propagation of waves at different directions (ultrasonic goniometry); the optimization and construction of adequate ultrasonic transducers for the experiment; and the inversion of ultrasonic signals through an optimization model implemented for the architecture of graphic processing units (GPU). The second aim of this work consists in approaching elastic homogenization models for the establishment of injective relations between effective elastic properties and the crystallite orientation distribution function (crystallographic texture). Since the wavelengths employed in ultrasound tend to be much larger than the grain size, it is shown that ultrasonic goniometry is useful for the determination of the macroscopic elastic properties, and, therefore, under certain conditions, it is also useful for the determination of the crystallographic texture. Finally, this work shows that the ultrasonic method presented here represents a low-cost alternative to conventional techniques, and, moreover, due to the large penetration of elastic waves, the obtained results are representative of the insonified volume.

Keywords: Elastic anisotropy, Ultrasound, Crystallographic texture, Homogenization, Elastic waves.

PRODUCCIÓN

Como fruto de esta tesis, se realizaron presentaciones en congresos, publicaciones en revistas y se obtuvieron distinciones, las cuales se enumeran a continuación.

Publicaciones en revistas

- [1] D. A. Cowes, J. I. Mieza y M. P. Gómez. «Polyvinylidene fluoride transducer shape optimization for the characterization of anisotropic materials». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 156.6 (2024-12), págs. 3943-3953. ISSN: 0001-4966. DOI: [10.1121/10.0034601](https://doi.org/10.1121/10.0034601). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/10.0034601>.

Distinciones

- [1] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Primera mención al premio Jorge Sabato, a los trabajos de desarrollo tecnológico en materiales, por el trabajo: Determinación simultánea de la anisotropía elástica y de la textura cristalográfica por goniometría ultrasónica». En: *XXII Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales, SAM*. Universidad Nacional de Bs. As., Ciudad de Bs. As., 2024.

Presentaciones en congresos

- [1] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Propagación de ondas en sólidos anisotrópicos: predicción de velocidad en policristales». En: *E-GLEA 10, Encuentro Internacional del Grupo Latinoamericano de Emisión Acústica*. Universidad Nacional del Comahue, Neuquén, 2019.
- [2] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Convolución espacial aplicada a la caracterización ultrasónica de propiedades elásticas». En: *V JAAS, Jornadas de Acústica, Audio y Sonido*. Universidad Nacional de Tres de Febrero, Bs. As., 2019.

- [3] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Primera aproximación a la caracterización de textura en aleaciones de Zr por técnicas ultrasónicas». En: *Encuentro de Jóvenes Investigadores en Ciencia y Tecnología de Materiales*. Universidad Nacional de Rosario, Santa Fe, 2019.
- [4] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Escaneo polar ultrasónico: desarrollo e implementación en la caracterización de materiales anisotrópicos». En: *XI Congreso Regional de Ensayos No Destructivos y Estructurales*. Universidad Nacional de Lanús, Bs. As., 2019.
- [5] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Puesta a punto de un método ultrasónico para medir textura: caso aleación de Zr». En: *XV Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía*. Instituto Balseiro, Río Negro, 2019.
- [6] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Caracterización mecánica de materiales compuestos por ultrasonido». En: *XX Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales, SAM*. Mar del Plata, Bs. As., 2022.
- [7] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Caracterización simultánea de la anisotropía elástica y la textura cristalográfica por técnicas ultrasónicas». En: *XLVII Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología Nuclear*. Palacio Balcarce, Ciudad de Bs. As., 2022.
- [8] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Método de espectro angular para simulación de campos ultrasónicos». En: *VII JAAS, Jornadas de Acústica, Audio y Sonido*. Universidad Nacional de Tres de Febrero, Bs. As., 2023.
- [9] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Caracterización de la textura cristalográfica de metales por medio de goniometría ultrasónica». En: *XIV Congreso Regional de Ensayos No Destructivos y Estructurales*. Instituto Nacional de Tecnología Industrial, Bs. As., 2023.
- [10] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Caracterización de la textura cristalográfica por técnicas ultrasónicas: contraste de resultados». En: *XLVIII Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología Nuclear*. Centro Cultural Kirchner, Ciudad de Bs. As., 2023.
- [11] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Determinación simultánea de la anisotropía elástica y de la textura cristalográfica por goniometría ultrasónica». En: *XXII Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales, SAM*. Universidad Nacional de Bs. As., Ciudad de Bs. As., 2024.
- [12] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Optimización de forma y fabricación de transductores ultrasónicos de PVDF». En: *13° Congreso Iberoamericano de Sensores*. Instituto Nacional de Tecnología Industrial, Bs. As., 2024.

Publicaciones en revistas (en preparación)

- [1] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Ultrasonic determination of crystallographic texture by transmitted field fitting». En: *A enviar a Acta Materialia*. 2025.
- [2] D. Cowes, I. Mieza y M. Gómez. «Ultrasonic determination of elastic constants including homogenization methods during inversion». En: *A enviar a Ultrasonics*. 2025.

ÍNDICE GENERAL

Producción	IV
Publicaciones en revistas	IV
Distinciones	IV
Presentaciones en congresos	IV
Publicaciones en revistas (en preparación)	V
Índice de figuras	XI
Índice de Tablas	XIV
Siglas	XVI
Símbolos	XVII
1 Introducción	1
I Medio Homogéneo	5
2 Medios Infinitos (aproximación de onda volumétrica)	6
2.1. Introducción	6
2.2. Mecánica del sólido	7
2.2.1. Tensión	7
2.2.2. Deformación	7
2.2.3. Relaciones constitutivas	8
2.2.4. Ecuación de movimiento	10
2.2.5. Ecuación de Navier	10
2.3. Modelo de onda plana para medios infinitos (MPI)	11
2.3.1. Ecuación de Christoffel	11
2.3.2. Velocidad de grupo	13
2.3.3. Comportamiento viscoelástico	15

2.4.	Goniometría ultrasónica	17
2.4.1.	Señales de goniometría	18
3	Medios Finitos	22
3.1.	Introducción	22
3.2.	Limitaciones de la aproximación de medio infinito	23
3.2.1.	Desventajas asociadas a la parametrización de la velocidad	23
3.2.2.	Desventajas asociadas a la aproximación de medio infinito	24
3.2.3.	Imposibilidad de determinación de la polarización de onda	27
3.3.	Modelo de onda plana para medios finitos (MPF) en inmersión	28
3.3.1.	Sistema de referencia rotado	28
3.3.2.	Ley de Snell generalizada	29
3.3.3.	Ecuación de Christoffel modificada	30
3.3.4.	Placa inmersa en un fluido	32
3.4.	Optimización por simulación de señales	34
3.4.1.	Comparación entre modelos: MPI vs. MPF	36
3.5.	Cálculo numérico en GPU	38
4	Haz finito	42
4.1.	Introducción	42
4.2.	Modelo de haz finito para medios finitos (MHF)	44
4.2.1.	Método de espectro angular	44
4.2.2.	Recepción del campo ultrasónico	45
4.2.3.	Ondas pulsadas (tiempo finito)	46
4.2.4.	Sistema de coordenadas y rotación pasiva	47
4.2.5.	Directividad analítica	48
4.3.	Análisis de modelo de haz finito	49
4.3.1.	Funciones de directividad para los transductores	49
4.3.2.	Visualización de campos	50
4.3.3.	Configuración emisor-receptor	51
4.3.4.	Longitud de receptor	52
4.3.5.	Desplazamiento del receptor	53
4.3.6.	Torcimiento del haz en medios anisótropos	54
4.4.	Procedimiento de optimización	57
4.5.	Resultados y discusión	58
4.5.1.	resultados de la optimización	58
4.5.2.	Construcción y evaluación del transductor fabricado	59
4.6.	Conclusión	61

II Medio heterogéneo	63
5 Textura cristalográfica y métodos de homogeneización	64
5.1. Introducción	64
5.1.1. Notación	65
5.2. Rotaciones y grupos de simetría	66
5.2.1. Grupo de rotación $SO(3)$	66
5.2.2. Estructuras cristalinas y simetría elástica	68
5.3. Textura cristalográfica	70
5.3.1. Función de distribución de orientaciones (ODF)	73
5.3.2. Expansión en series de Fourier	74
5.4. Homogeneización elástica	76
5.4.1. Cotas de orden 0	78
5.4.2. Cotas de orden 1	78
5.4.3. Cotas de orden 2	79
5.4.4. Aproximación Autoconsistente de HS	80
5.4.5. Descomposición armónica	80
5.4.6. Ejemplo	82
6 Determinación de constantes elásticas	84
6.1. Introducción	84
6.2. Método experimental	85
6.2.1. Dispositivo experimental	85
6.2.2. Optimización meta-heurística	88
6.2.3. Homogeneización y longitud de onda	90
6.2.4. Muestreo espacial	91
6.2.5. Unicidad y análisis de sensibilidad	93
6.2.6. Muestras	94
6.3. Resultados	97
6.3.1. Calidad de ajuste	97
6.3.2. Constantes elásticas	98
6.4. Discusión	103
6.5. Conclusiones	106
7 Determinación de textura cristalográfica	108
7.1. Introducción	108
7.2. Marco teórico	109
7.3. Método experimental	111
7.3.1. Optimización	111
7.3.2. Cálculo de Homogeneización	113
7.3.3. Sensibilidad	113
7.3.4. Muestras	114

7.4. Resultados	116
7.4.1. Muestra monocristalina	116
7.4.2. Muestras policristalinas	117
7.4.3. Cuantificación del error	118
7.4.4. Factor de Kearns	119
7.5. Discusión	121
7.5.1. Error por truncamiento y órdenes impares	122
7.5.2. Tensiones residuales	124
7.6. Conclusión	125
8 Trabajo a futuro	127
A Analogía de líneas de transmisión	129
A.0.1. Netlist para LTspice	133
B Simulación de distintos receptores	135
C Funciones de Wigner-D	139
D Transformación de coeficientes	140
E Intervalos de confianza	141
F Incertidumbre en materiales con macro-simetría hexagonal	143
G Conjunto de coeficientes de textura	146
H Tensores de rigidez obtenidos de la literatura	148
I Medición de desorientación en silicio	150
J Resultados de medición de textura	152
Bibliografía	155

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1. Tensor de tensiones	7
2.2. Desplazamiento	8
2.3. Ecuación de Navier	11
2.4. Polarización de modos	12
2.5. Curvas de “slowness”	14
2.6. Superficies de “slowness”	14
2.7. Proyecciones de las superficies de “slowness”	15
2.8. Torcimiento de haz	16
2.9. Técnica de pulso eco en contacto	18
2.10. Goniometría ultrasónica	19
2.11. Señales en goniometría ultrasónica.	20
2.12. Modos de propagación en experimento de goniometría	21
3.1. Algoritmo de optimización en aproximación de medio infinito.	23
3.2. Desventajas asociadas a la parametrización de la velocidad.	24
3.3. Limitaciones del modelo para medios dispersivos.	25
3.4. Visualización de onda guiada con fuga.	26
3.5. Curvas de dispersión.	26
3.6. Distorsión de fase y tiempo en exceso.	27
3.7. Fenómeno de polarización anómala.	28
3.8. Sistema de referencia para incidencia oblicua en placa finita.	29
3.9. Ley de Snell.	31
3.10. Plano de incidencia para placa anisótropa inmersa en un fluido.	33
3.11. Cambio en el recorrido de la onda al introducir la placa.	34
3.12. Optimización con modelo para medios finitos.	35
3.13. Error en la determinación de C_{33}	37
3.14. Efecto del ruido en la señal ultrasónica	37
3.15. Efecto de la frecuencia de muestreo en la señal ultrasónica.	38
3.16. Disminución del error en la determinación de C_{33}	39

3.17. Simetría de reflexión en el plano x_1x_2 en silicio.	41
4.1. Diagrama de un experimento de goniometría ultrasónica.	43
4.2. Coeficiente de transmisión de una placa de acero anisótropa.	48
4.3. Funciones de directividad para dos pistones circulares.	49
4.4. Ancho de la directividad como función de la relación de diámetros.	50
4.5. Simulación de campo ultrasónico en agua en el plano x_1x_3	51
4.6. Campo ultrasónico en el plano x_1x_2 para emisor circular.	52
4.7. Campo ultrasónico en el plano x_1x_2 para rectangular.	53
4.8. Simulación de las señales producidas por un receptor de largo variable. . .	54
4.9. Simulación del espectro de las señales producidas por un receptor de largo variable.	55
4.10. Simulación de las señales producidas por un receptor de desplazamiento variable.	56
4.11. Torcimiento de haz en CFRP.	56
4.12. Resultados del procedimiento de optimización.	58
4.13. Detalles de fabricación del transductor receptor.	60
4.14. Evaluación en acero del receptor construido.	62
5.1. Simetrías elásticas y cristalinas.	71
5.2. Representación de la textura con celdas hexagonales.	72
5.3. Representación tridimensional de la textura.	72
5.4. Figuras de polos para titanio.	73
5.5. Cotas elásticas HS.	83
5.6. Cálculo de cotas elásticas para materiales cúbicos con simetría de muestra cúbica.	83
6.1. Dispositivo experimental.	86
6.2. Soportes cinemáticos.	86
6.3. Detalle del goniómetro.	87
6.4. Diagrama en bloques del equipo.	88
6.5. Algoritmo de optimización de constantes elásticas.	89
6.6. Planos de simetría y modos de propagación.	92
6.7. Análisis de sensibilidad en acero.	94
6.8. Ajuste de señales en silicio.	98
6.9. Detalle del ajuste de señales en silicio.	99
6.10. Ajuste de señales en Zircaloy.	100
6.11. Detalle del ajuste de señales en Zircaloy.	101
6.12. Síntesis de superficies de “slowness” para el modo qL de la probeta Si100 . Las direcciones x_1 , x_2 y x_3 indican el sistema de referencia de la medición ultrasónica. Notar que la proyección que muestra la diferencia tiene una escala diferente.	101

6.13. Resultados Si111	102
6.14. Resultados Zry-a	103
6.15. Resultados Zry-b	104
6.16. Resultados CFRP	105
7.1. Algoritmo de optimización para determinación de la textura cristalográfica.	112
7.2. Análisis de sensibilidad para materiales con micro-simetría cúbica	114
7.3. Análisis de sensibilidad para materiales con micro-simetría hexagonal	114
7.4. Desorientación de la muestra Si111b	117
7.5. Resultados de la muestra Si111b	117
7.6. Resultados SS304	118
7.7. Resultados Zry-b	119
7.8. Resultados Zry-a	120
7.9. Resultados Zn	121
7.10. Efecto de truncamiento a orden 4 en acero.	123
7.11. Efecto de truncamiento a orden 4 en Zircaloy.	124
A.1. Modelo de transductor de Leach.	130
A.2. Modelo de LTspice para un sistema de medición ultrasónico.	130
A.3. Transductor de PVDF en una configuración de pulso-eco.	131
A.4. Transductor de PZT en una configuración de pulso-eco.	131
A.5. Transferencia para receptor de PVDF entre $1e-6$ y $2e-4$ m ²	132
A.6. Transferencia para receptor de PVDF entre $3e-5$ y $1e-3$ m ²	133
A.7. Transferencia para receptor de PVDF entre $1e-3$ y $5e-3$ m ²	134
B.1. Simulación de distintos receptores en acero.	136
B.2. Simulación de distintos receptores en CFRP.	137
B.3. Simulación de distintos receptores en silicio.	138
F.1. Algoritmo para evaluar la incertidumbre macro hexagonal	145
I.1. Configuración experimental para caracterizar la desorientación Si111b por difracción de rayos-X.	151
I.2. Difractograma de rayos-X para silicio monocristalino, luego de encontrar de forma manual y en aproximaciones sucesivas el “offset” en ω	151

ÍNDICE DE TABLAS

3.1. Comparación de tiempo de cómputo para CPU y GPU.	41
4.1. FBE calculado para distintas formas de receptor.	59
5.1. Reducción de tensores de referencia por micro-simetrías.	76
5.2. Reducción de tensores de referencia por macro-simetrías	76
6.1. Detalles de los materiales caracterizados en este capítulo.	95
6.2. Detalles de las muestras caracterizados en este capítulo.	96
6.3. Resultados para la probeta Si100 en GPa.	100
6.4. Resultados para la probeta Si111 en GPa.	102
6.5. Resultados para la probeta Zry-a en GPa.	103
6.6. Resultados para la probeta Zry-b en GPa.	104
6.7. Resultados para la probeta CFRP en GPa.	104
6.8. Comparación de módulo de Young entre los datos provistos por el fabricante y las mediciones ultrasónicas.	105
6.9. Factor de anisotropía de las muestras macroscópicas.	105
6.10. Errores máximos y totales entre ultrasonido y método de comparación. El error total comprende la suma de los valores absolutos de las diferencias.	105
7.1. Detalles de los materiales caracterizados en este capítulo.	115
7.2. Detalles de las muestras caracterizadas en este capítulo.	115
7.3. Error relativo de textura	120
7.4. Factores de Kearns	121
A.1. Propiedades de los materiales utilizados para la simulación.	130
G.1. Cotas de coeficientes de textura calculados a partir de la envolvente convexa.	147
J.1. Coeficientes de textura para la probeta SS304	152
J.2. Coeficientes de textura para la probeta Si111b	152
J.3. Coeficientes de textura para la probeta Zry-a	153

J.4. Coeficientes de textura para la probeta Zry-b	153
J.5. Coeficientes de textura para la probeta Zn	154

SIGLAS

qL	Modo cuasi-longitudinal
qS1	Modo cuasi-transversal rápido
qS2	Modo cuasi-transversal lento
qSV	Modo cuasi-transversal con polarización vertical
qSH	Modo cuasi-transversal con polarización horizontal
SH	Modo transversal con polarización horizontal
ts	Período de muestreo
ToF	Tiempo de vuelo
SME	Error cuadrático medio
CFRP	Polímero reforzado con fibra de carbono
MPI	Modelo de onda plana en medios infinitos
MPF	Modelo de onda plana en medios finitos
MHF	Modelo de haz finito
HS	Hashin-Shtrikman
US	Ultrasonido
CPU	Unidad de procesamiento central
GPU	Unidad de procesamiento gráfico
FBE	Error entre el MHF y el MPF
PVDF	Fluoruro de polivinilideno
FFT	Transformada rápida de Fourier
iFFT	Inversa de la transformada rápida de Fourier
ODF	Función de distribución de orientaciones cristalinas
ND	Difracción de neutrones
XRD	Difracción de rayos X
EBSD	Difracción de electrones retrodispersados
SXRD	Difracción de rayos-X en sincrotrón
RD	Dirección de laminación
TD	Dirección tangencial a la laminación

SÍMBOLOS

c_{ijkl}	Tensor de rigidez en notación de índices
λ_{ijkl}	Tensor de rigidez normalizada
C_{ij}	Tensor de rigidez en notación de Voigt
v	Volumen de interés
ρ	Densidad del sólido
ρ_f	Densidad del fluido
σ_{ij}	Tensor de tensión en notación de índices
σ	Tensor de tensión en notación simbólica
ε_{kl}	Tensor de deformación en notación de índices
ε	Tensor de deformación en notación simbólica
W	Densidad de energía elástica de deformación
u_i	Vector de desplazamiento
U_i	Vector de Amplitud de desplazamiento
n_j	Vector dirección de desplazamiento
ω	Frecuencia angular
λ	Longitud de onda
k	Número de onda
k_i	Vector de onda
c	Velocidad de fase
c_f	Velocidad de fase en el fluido
s_j	Vector de slowness o lentitud de fase
g_j	Vector de velocidad de grupo
Λ_{il}	Tensor de Christoffel
t	Tiempo
$f \cdot d$	Producto frecuencia espesor
θ	Ángulo de incidencia polar
φ	ángulo de incidencia azimutal
α	Ángulo polar entre normal de transductor y normal de placa
β	Ángulo azimutal entre normal de transductor y normal de placa

β_{mi}	Tensor de transformación
d	Espesor de probeta
d^{er}	Distancia emisor receptor
s_i^q	Componente de slowness i para la onda parcial q
$\mathcal{U}_i^q$	Amplitud normalizada de desplazamiento en la dirección i para la onda parcial q
$\mathcal{T}_{ij}^q$	Amplitud normalizada de tensión actuando en la dirección i sobre la cara j para la onda parcial q
R	Coeficiente de reflexión
T	Coeficiente de transmisión
Γ	Transferencia del sistema en ausencia de placa
s^t	Señal obtenida en transmisión
S^t	Espectro de señal obtenida en transmisión
v_i	Velocidad particular
ϕ	Potencial escalar de velocidad particular
Φ	Amplitud del potencial escalar de velocidad particular
ψ_j	Potencial vectorial de velocidad particular
H	Factor de propagación
S^{fb}	Espectro de señal transmitida considerando transductores finitos
S^{pw}	Espectro de señal transmitida considerando ondas planas
l_i	Longitud del transductor receptor en la dirección x_i
of_i	desplazamiento del transductor receptor en la dirección x_i
a	radio de un transductor con superficie circular
s^{sim}	señal transmitida simulada
s^{exp}	señal transmitida experimental
F	Función de costo: error cuadrático medio entre las señales experimentales y las simuladas
$\mathbb{C}$	Tensor de rigidez en notación simbólica
$\tilde{\mathbb{C}}$	Tensor de rigidez monocristalina
$\bar{\mathbb{C}}$	Tensor de rigidez efectiva
$\mathbb{C}^I$	Tensor de rigidez isótropo
$\mathbb{C}^{n\pm}$	Cota de rigidez de orden n
$\mathbb{C}^{Voigt}$	Cota de rigidez de Voigt
$\mathbb{C}^{Reuss}$	Cota de rigidez de Reuss
$\mathbb{C}^{HS\pm}$	Cotas de rigidez de Hashin-Shtrikman
$\mathbb{C}_0$	Tensor de rigidez de comparación
$\mathbb{C}_0^{SC}$	Solución autoconsistente isótropa de Hashin-Shtrikman
$\mathbb{C}_{ap}^{HS}$	Aproximación autoconsistente de Hashin-Shtrikman
l_μ	Micro escala

INTRODUCCIÓN

Las propiedades físicas reflejan la estructura de la materia en la que se observan dichas propiedades. Esto implica que las simetrías estructurales se manifiestan como direcciones para las cuales las propiedades son equivalentes (indistinguibles), pero a la vez implica la existencia de direcciones no equivalentes. Entonces, una propiedad que depende de la dirección se la denomina anisótropa. En materiales cristalinos homogéneos, es decir, monocristales, la red cristalina presenta orden de largo alcance, el cual resulta invariante ante conjuntos de transformaciones (grupos puntuales). Las propiedades observadas en este dominio, por ejemplo, las mecánicas, serán invariantes a estas transformaciones, por lo que manifestarán una anisotropía, determinística, que refleja la estructura cristalina.

Por otro lado, en aplicaciones de ingeniería es común el uso de materiales heterogéneos, es decir, conformados por más de un constituyente con composición o propiedades distintas. La manipulación de los constituyentes permite la conformación de materiales nuevos cuyas propiedades no se observan en los constituyentes por separado. Un caso típico es el de los materiales compuestos (e.g. polímeros reforzados con fibras), donde, mediante el control en la distribución de fibras, se logran adecuar las propiedades mecánicas al tipo de cargas a las que el material estará sometido. De esta manera, el diseño centrado en la anisotropía logra materiales de mucho menor peso que materiales isótropos bajo los mismos requisitos, lo que resulta de particular interés para la industria aeroespacial y la industria de energías renovables, entre otras.

Otro ejemplo de material heterogéneo es el del policristal de un constituyente. Este, al estar compuesto por granos del mismo tipo, manifiesta la heterogeneidad en el hecho de que cada grano posee una orientación distinta a la de los granos contiguos, y por ende las propiedades locales varían de grano a grano. Sin embargo, si el material se analiza en una escala varias veces mayor al tamaño del grano, se observarán propiedades efectivas cuyo valor es independiente de la posición. Estas propiedades, al estar mediadas por la estadística microestructural, presentarán anisotropía estadística. Los métodos de homogeneización elástica, buscan reemplazar al sólido heterogéneo por un sólido homogéneo virtual con propiedades iguales a las del sólido heterogéneo visto desde una escala macroscópica. En general, esto no se puede expresar de forma cerrada, pero mediante criterios energéticos se

pueden definir aproximaciones y cotas de rigidez. Estas se calculan como la combinación de las propiedades del monocristal y la información estadística sobre la distribución de orientaciones cristalinas, también denominada textura cristalográfica.

La propagación de ondas ultrasónicas, al estar determinada por las propiedades mecánicas del sólido, permite el diseño de métodos para la caracterización elástica. En particular, su versatilidad permite la propagación de ondas en distintas direcciones, por lo que es capaz de caracterizar al sólido generalmente anisótropo, lo cual no es fácilmente accesible a través de ensayos mecánicos convencionales. Además, dado que la escala de análisis está relacionada con la longitud de onda, si esta es varias veces mayor que el tamaño del constituyente, por ejemplo, el tamaño de grano, entonces los métodos ultrasónicos serán efectivos para la caracterización de las propiedades efectivas del sólido heterogéneo.

El primer objetivo de esta tesis consiste en desarrollar un método ultrasónico para la caracterización de propiedades elásticas, lo que incluye el desarrollo teórico de modelos de mecánica del continuo para la descripción del fenómeno ondulatorio; el diseño, la construcción y la automatización de un dispositivo para propagar ondas en distintas direcciones (goniometría ultrasónica); la optimización y construcción de transductores ultrasónicos adecuados al experimento; y la inversión de las señales ultrasónicas a través de un modelo de optimización implementado en arquitectura de unidades de procesamiento gráfico (GPU).

El segundo objetivo del trabajo consiste en abordar modelos de homogeneización elástica que establecen relaciones inyectivas entre las propiedades elásticas efectivas y la textura cristalográfica. Como las longitudes de onda utilizadas en ultrasonido suelen ser mucho más grandes que el tamaño de grano, se muestra que la goniometría ultrasónica sirve para determinar las propiedades elásticas macroscópicas y, por consiguiente, bajo ciertas condiciones, la textura cristalográfica. El trabajo muestra que la determinación de la textura cristalográfica por medio de ultrasonido representa una alternativa de bajo costo a las técnicas convencionales, y que, además, gracias a la gran penetración de las ondas elásticas, la información obtenida es representativa del volumen.

La tesis se encuentra dividida en dos partes: La primera parte trata al sólido como un medio homogéneo y a partir de esto se desarrolla el método de goniometría ultrasónica; la segunda parte trata al medio como un sólido heterogéneo en la microescala que se comporta como homogéneo en la macro-escala, ambas escalas relacionadas por medio de la textura cristalográfica y los métodos de homogeneización. Esto sirve para implementar cotas de rigidez durante la inversión de constantes elásticas y para la determinación ultrasónica de la textura cristalográfica.

- En el capítulo 2 se describe la mecánica del continuo bajo las aproximaciones de medio homogéneo, elástico (o visco-elástico), lineal, y anisótropo. Se desarrolla la ecuación de movimiento que se resuelve a través de una onda plana con la ecuación de Christoffel. Esto constituye un modelo de onda plana para medios infinitos (aproximación volumétrica) el cual permite encontrar la velocidad y polarización de

ondas para cualquier dirección en el medio anisótropo. A partir de esto se describen los métodos para determinar propiedades del sólido por ultrasonido, primero los métodos de contacto y luego los métodos por inmersión. Entre estos, se describe la goniometría ultrasónica, que mediante la variación de los ángulos de incidencia permite adquirir los campos ultrasónicos para cualquier dirección.

- En el capítulo 3 se describe el procedimiento para la inversión de constantes elásticas a partir de experimentos de goniometría ultrasónica. Luego se describen las desventajas asociadas a la aproximación volumétrica y a la parametrización de la velocidad, que se evidencian principalmente para muestras con espesores delgados o frecuencias de trabajo bajas. Este hecho justifica el desarrollo de un modelo más sofisticado: el modelo de onda plana para medios finitos, que contempla la existencia de interfases líquido-sólido y por ende se ajusta mejor a los experimentos de goniometría ultrasónica. Se muestra un procedimiento de optimización de constantes elásticas que, en lugar de parametrizar la velocidad, ajusta las señales simuladas a los datos experimentales y, por consiguiente, no acarrea varias de las desventajas anteriores. Por último, se muestra que el inconveniente del modelo para medios finitos es el incremento en el costo computacional, el cual se contrarresta a partir de la implementación en unidades de procesamiento gráfico (GPUs). Se muestra que este desarrollo es de particular relevancia cuando no se supone la simetría elástica de las muestras, es decir, que se las considera triclinicas.
- En el capítulo 4 se muestra que el haz finito generado por transductores comerciales no se ajusta al modelo de onda plana para medios finitos, por lo que se desarrolla el método de espectro angular para la descripción de haces finitos como una descomposición en ondas planas. Este modelo, al ser aún más costoso computacionalmente, no es práctico para la inversión de propiedades del material. Sin embargo, sí resulta útil para la optimización de transductores que asemejan su comportamiento al de onda plana en experimentos de goniometría ultrasónica. Los resultados de la optimización son utilizados para la construcción de dichos transductores.
- El capítulo 5 describe el sólido heterogéneo. Primero se describe el grupo de rotaciones $SO(3)$, que luego se utiliza para estudiar las simetrías elásticas de la materia como la invariancia ante dichas rotaciones. Luego se introduce el sólido policristalino, haciendo hincapié en su descripción estadística a partir de la textura cristalográfica. Se muestra que la función de distribución de orientaciones cristalinas se puede expandir como series de Fourier en bases de Wigner, pero que la expansión en bases tensoriales conlleva una serie de ventajas al describir propiedades físicas de carácter tensorial. Luego se desarrolla el marco teórico de homogeneización elástica cuyo fin es estimar las propiedades efectivas del policristal como una combinación de las propiedades del monocristal y la textura cristalográfica. Se muestra que si bien estas propiedades no se pueden calcular de forma cerrada, sí se pueden acotar

con criterios energéticos. Por último, se describe la descomposición armónica de tensores que posibilita expresar las cotas elásticas de forma compacta y eficiente como función de los coeficientes tensoriales de textura.

- El capítulo 6 reúne los conceptos, métodos y modelos desarrollados en los capítulos anteriores para la aplicación de la goniometría ultrasónica en la caracterización elástica de materiales reales. Se describe el dispositivo experimental desarrollado para esta tesis, y se muestra la implementación de las cotas elásticas para la caracterización mecánica de probetas de metal policristalino, silicio monocristalino, y compuesto de fibra de carbono. Se muestra que los desarrollos de esta tesis permiten caracterizar materiales en un amplio rango de espesores, aun cuando el medio se comporta como dispersivo. Además, no se restringe el tipo de simetría de la muestra, por lo que no se requieren conocimientos a priori de las simetrías macroscópicas.
- El capítulo 7 muestra que los métodos de homogeneización desarrollados en el capítulo 5 pueden ser utilizados para determinar la textura cristalográfica a partir de experimentos ultrasónicos. Se muestra que las expresiones obtenidas a través de la descomposición armónica son relaciones inyectivas, lo que implica que si se conocen las propiedades mecánicas efectivas, también se conocen los coeficientes de textura. A partir de esto se utiliza la goniometría ultrasónica para la determinación de la textura en materiales con simetría cristalina cúbica y hexagonal. Se realizan experimentos en muestras de distintos materiales con distintos espesores y se comparan los resultados con técnicas convencionales de difracción de rayos X y de neutrones.
- En el capítulo 8 se delinean áreas en las que se pueden realizar mejoras a la metodología desarrollada en esta tesis. Se hace énfasis en los pasos necesarios para que la técnica sea aplicable in situ. Además, se sugiere que la implementación de técnicas de aprendizaje automático (“machine learning”) puede ser útil para el reconocimiento de patrones durante el ajuste de las señales experimentales.

Parte I

Medio Homogéneo

MEDIOS INFINITOS (APROXIMACIÓN DE ONDA VOLUMÉTRICA)

2.1. Introducción

En este capítulo se introducen los conceptos físicos que permiten describir el comportamiento elástico del sólido bajo la hipótesis de pequeñas deformaciones. En este contexto, se muestra que la propagación de las ondas elásticas está determinada por las propiedades del medio, y por consiguiente, se pueden diseñar experimentos ultrasónicos cuyo objetivo sea la inferencia de dichas propiedades. Gracias a la versatilidad del ultrasonido, se pueden caracterizar materiales generalmente anisótropos, lo cual no es accesible mediante ensayos mecánicos convencionales.

Primero, en la sección 2.2, se cubre la mecánica del sólido que bajo la aproximación de pequeñas deformaciones en un medio homogéneo, anisótropo, elástico y lineal, permite encontrar las ecuaciones de movimiento en tres dimensiones. Estas ecuaciones se resuelven en la sección 2.3 con una onda plana bajo la aproximación de medio infinito (MPI) dando lugar a la ecuación de Christoffel, que permite encontrar la velocidad y polarización de ondas como función de la dirección de propagación. Este contenido puede encontrarse con mayor profundidad en [1, 2]. En la sección 2.4, se muestra cómo se pueden utilizar las ondas elásticas para caracterizar las propiedades mecánicas. Primero se describen brevemente las técnicas de contacto, cuya desventaja principal reside en la preparación elaborada de probetas. Luego se muestra una técnica que sortea esta problemática mediante la variación de la dirección de incidencia de ondas en una muestra sólida sumergida, comúnmente denominada goniometría ultrasónica, la cual es elegida para este trabajo.

En este capítulo, así como en el capítulo 3 se adopta la convención de Einstein para la suma en índices repetidos.

2.2. Mecánica del sólido

2.2.1. Tensión

De acuerdo a la ley de Cauchy, dado un vector de tracción t_i actuando en una superficie con normal n_j , existe una transformación lineal que relaciona ambos vectores de la forma

$$t_i = \sigma_{ij}n_j, \quad (2.1)$$

donde σ_{ij} es el tensor de tensión de Cauchy, cuyos índices representan, por convención, la normal a la cara donde actúa y la dirección en la que actúa respectivamente, como se muestra en la Fig. 2.1. Para que el momento neto sea nulo, entonces el tensor debe ser simétrico, i.e. $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$.

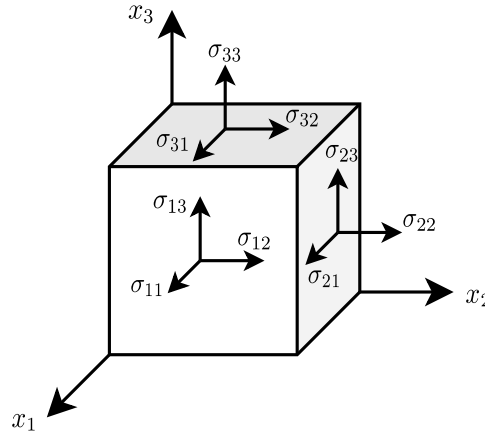


Figura 2.1: Convención para el tensor de tensión en un sistema de coordenadas cartesiano.

2.2.2. Deformación

Un cuerpo elástico elemental sometido a cargas cambia de forma y volumen, como se muestra en la Fig. 2.2. Aquí, el campo de desplazamiento de partículas se define por el vector de desplazamiento u_l . Para desplazamientos pequeños, el desplazamiento se puede linealizar a partir de una serie de Talyor a orden 1 como:

$$u_l(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) \approx u_l(\mathbf{x}) + \frac{\partial u_l(\mathbf{x})}{\partial x_k} \delta x_k = u_l(\mathbf{x}) + \delta u_l, \quad (2.2)$$

donde $u_l(\mathbf{x})$ representa la traslación paralela y δu_l representa la rotación y deformación. Expandiendo el último término

$$\begin{aligned} \delta u_l &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \delta x_k + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \delta x_k \\ &= (\varepsilon_{kl} + \omega_{kl}) \delta x_k, \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde ω_{kl} es el tensor de rotación y ε_{kl} es el tensor de deformación, denominado ley geométrica,

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right). \quad (2.4)$$

Aquí los elementos diagonales $k = l$ representan la deformación normal y los elementos por fuera de la diagonal $k \neq l$ representan la deformación de corte.

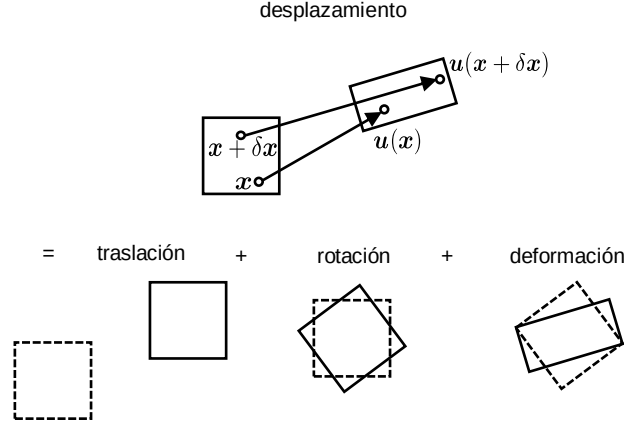


Figura 2.2: Desplazamiento en un cuerpo elemental como la suma de traslación, rotación y deformación.

2.2.3. Relaciones constitutivas

Un cuerpo elástico es aquel cuyo estado de tensión puede determinarse solo a partir del estado de deformación con respecto a una configuración de referencia (elasticidad de Cauchy [3]). En este cuerpo, la variación de la energía interna por unidad de volumen producida por un pequeño cambio en el estado de deformaciones se define como

$$\delta W = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}. \quad (2.5)$$

Si, además, la variación de energía interna ΔW debido a la transformación finita desde el estado A al estado B es independiente del camino de integración,

$$\Delta W = \int_A^B \delta W = W_B - W_A, \quad (2.6)$$

entonces al cuerpo se lo denomina hiperelástico (elasticidad de Green), por lo que los diferenciales son exactos $dW = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}$, lo que permite la definición de la fórmula de Green [4]

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{ij}}. \quad (2.7)$$

Considerando un cuerpo sin tensión ni deformación, la densidad de energía de deformación se puede expandir en series de Taylor como

$$W(\varepsilon) = W(\varepsilon = 0) + \left. \frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{ij}} \right|_{\varepsilon=0} \varepsilon_{kl} + \frac{1}{2!} \left. \frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \right|_{\varepsilon=0} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{ij} + \frac{1}{3!} \left. \frac{\partial^3 W}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{mn}} \right|_{\varepsilon=0} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{mn}. \quad (2.8)$$

Aquí los dos primeros términos (la energía inicial y la dilatación cúbica) son nulos [5] y si además se consideran pequeñas deformaciones (elasticidad lineal) la expansión se reduce

a

$$W = \frac{1}{2} c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{ij}, \quad (2.9)$$

donde c_{ijkl} es un tensor de orden 4, denominado como tensor de rigidez, o tensor de constantes elásticas de segundo orden, definido como

$$c_{ijkl} = \frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}}. \quad (2.10)$$

En principio, este tensor tiene 81 elementos. Debido a que la definición 2.10 no depende del orden de diferenciación, el tensor de rigidez cuenta con simetría mayor, i.e. $c_{ijkl} = c_{klij}$, reduciendo el número de elementos independientes a 45, lo que se conoce como la relación de reciprocidad.

Aplicando la Ec. 2.7 en la Ec. 2.10, se obtiene la relación constitutiva que vincula la tensión y deformación en un medio anisótropo lineal elástico, también denominada como ley de Hooke generalizada,

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (2.11)$$

o la relación inversa,

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad (2.12)$$

donde s_{ijkl} es el tensor de compliancia. Como el volumen elemental se encuentra en reposo, los tensores σ_{ij} y ε_{kl} son simétricos, por lo que tienen solo seis elementos independientes. Por esta condición, el tensor de rigidez posee, además, simetría menor, i.e. $c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{jilk}$, reduciendo el número de elementos independientes a 21. Entonces, el comportamiento elástico del sólido generalmente anisótropo, denominado triclinico, se define por el tensor de rigidez compuesto por 21 constantes elásticas independientes.

Usualmente, el tensor de rigidez c_{ijkl} se representa de forma compacta como una matriz C de 6x6 a través de la notación de Voigt usando las contracciones $11 \rightarrow 1, 22 \rightarrow 2, 33 \rightarrow 3, 23 \rightarrow 4, 13 \rightarrow 5, 12 \rightarrow 6$. Además, al introducir los componentes de deformación de corte como la suma de componentes simétricos $\varepsilon_4 = \varepsilon_{23} + \varepsilon_{32}$, $\varepsilon_5 = \varepsilon_{13} + \varepsilon_{31}$, $\varepsilon_6 = \varepsilon_{12} + \varepsilon_{21}$, se redefine la relación constitutiva 2.11 de forma compacta como

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & \text{sim} & & & C_{55} & C_{56} \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix}. \quad (2.13)$$

Dado un grupo de simetría compuesto por un conjunto de rotaciones, para que un tensor forme parte del grupo de simetría debe permanecer invariante ante sus transformaciones. Esto impone restricciones en las constantes elásticas, lo que resulta en la reducción de elementos independientes. En general, cuanto mayor es el número de elementos de simetría, menor es el número de constantes independientes. El análisis sobre simetrías elásticas se profundiza en el capítulo 5.

2.2.4. Ecuación de movimiento

Dado un sólido tridimensional de volumen v , sometido a fuerzas de volumen (largo alcance) y de superficie, se cumple con la segunda ley de Newton como

$$\int_{sup} t_i dS + \int_{vol} \rho b_i dv = \int_{vol} \rho \ddot{u}_i dv, \quad (2.14)$$

donde $t_i = \sigma_{ij}n_j$ es el vector de tracción y n_j es un vector unitario normal a la superficie, b_i es una fuerza volumétrica por unidad de masa, ρ es la densidad del material y $\ddot{u}_i$ es la aceleración de la partícula. Al aplicar el teorema de Gauss para la integral superficial, se obtiene

$$\int_{vol} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dv + \int_{vol} \rho b_i dv = \int_{vol} \rho \ddot{u}_i dv, \quad (2.15)$$

donde, para un volumen arbitrario, la forma integral desaparece. Si se desprecia el movimiento dinámico, se llega a la ecuación de equilibrio estático

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho b_i = 0. \quad (2.16)$$

Si, por otro lado, se considera el movimiento dinámico y se desprecia la acción de fuerzas volumétricas, se llega a la ecuación de equilibrio dinámico o ecuación de movimiento

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \ddot{u}_i. \quad (2.17)$$

2.2.5. Ecuación de Navier

Combinando la ley geométrica 2.4, las relaciones constitutivas 2.11 y la ecuación de movimiento 2.17 se llega a

$$\frac{1}{2} c_{ijkl} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) = \rho \ddot{u}_i. \quad (2.18)$$

Teniendo en cuenta la simetría del tensor c_{ijkl} , intercambiar el índice k y l reduce la ecuación 2.18 a

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} = \rho \ddot{u}_i, \quad (2.19)$$

denominada ecuación de Navier, la cual representa el movimiento en tres dimensiones para pequeñas deformaciones en un medio homogéneo, anisótropo, elástico y lineal. Para un sólido generalmente anisótropo, la ecuación de Navier está compuesta por tres ecuaciones diferenciales lineales acopladas. Es decir, que el movimiento en una dirección está determinado por el desplazamiento en las tres direcciones. Las relaciones desarrolladas en esta sección se pueden sintetizar por la Fig. 2.3.

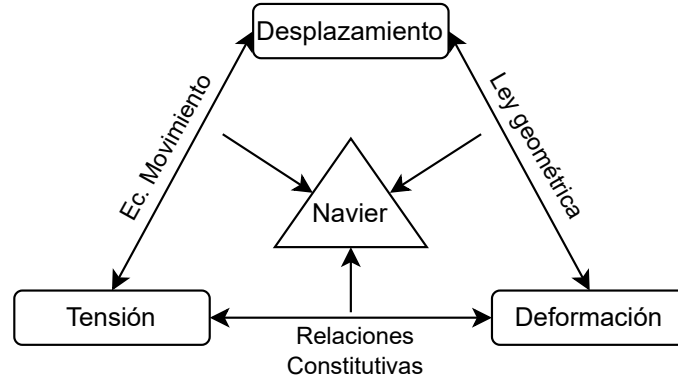


Figura 2.3: Relaciones del sólido anisótropo, homogéneo, elástico y lineal.

2.3. Modelo de onda plana para medios infinitos (MPI)

2.3.1. Ecuación de Christoffel

En medios generalmente anisótropos e infinitos, la ecuación de Navier 2.19, se puede resolver a partir de ondas planas monocromáticas complejas como

$$u_i = U_i \exp(i(kn_j x_j - \omega t)), \quad (2.20)$$

donde k es el número de onda volumétrico (escalar), n_j es la dirección de propagación, ω es la frecuencia angular y U_i es el vector de amplitud de desplazamiento que a su vez define la polarización de la onda. Al sustituir la ecuación 2.20 en la ecuación 2.19 se obtiene la relación

$$\omega^2 U_i = \lambda_{ijkl} k^2 n_k n_j U_l, \quad (2.21)$$

donde $\lambda_{ijkl} = c_{ijkl}/\rho$. Definiendo la velocidad de fase como $c = \omega/k$ y utilizando el operador delta de Kronecker $U_i = U_l \delta_{il}$ se reescribe la ecuación 2.21 como la ecuación característica

$$(\lambda_{ijkl} n_k n_j - c^2 \delta_{il}) U_l = 0. \quad (2.22)$$

Introducir el tensor de segundo orden $\Lambda_{il} = \lambda_{ijkl} n_k n_j$, permite reescribir la ecuación 2.22 en la forma compacta

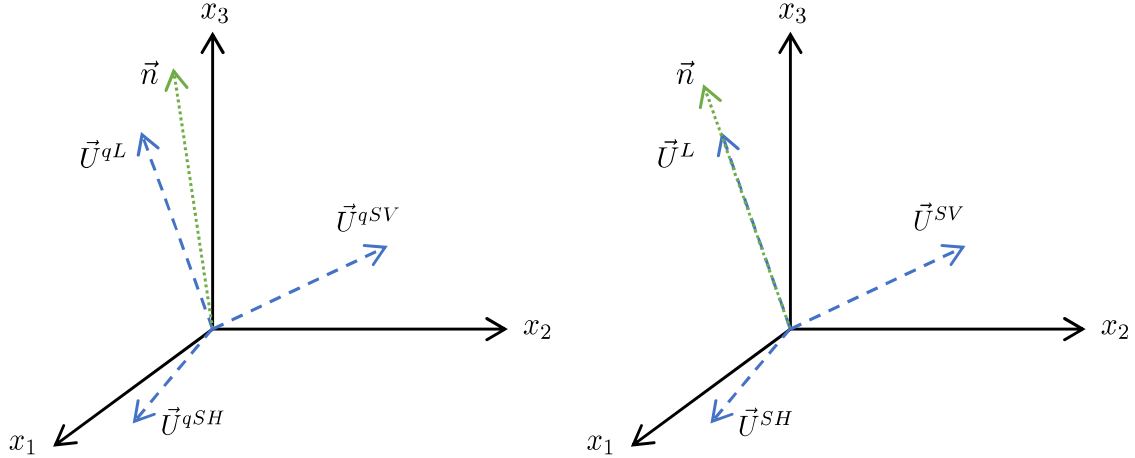
$$(\Lambda_{il} - c^2 \delta_{il}) U_l = 0. \quad (2.23)$$

Tanto la ecuación 2.22 como la 2.23 componen la ecuación de Christoffel, la cual define tres ecuaciones lineales homogéneas para las amplitudes de desplazamiento U_l . Dado que la velocidad de fase c es incógnita, cada una de las ecuaciones constituye un problema de autovalores y autovectores, donde los autovalores son c^2 y los autovectores son los vectores de polarización U_l . Dado que Λ_{il} es simétrico y con elementos reales, los autovalores son reales y los autovectores asociados son ortogonales.

Para resolver la ecuación de Christoffel, primero se definen las propiedades del material (densidad y tensor de rigidez), y se elige la dirección de propagación $\vec{n}$. Para que existan soluciones no triviales a la ecuación 2.23, el determinante debe ser nulo, $|\Lambda_{il} - c^2 \delta_{il}| = 0$, lo

cual forma un polinomio de tercer grado cuyas raíces son las velocidades de propagación c_k^2 con $k = 1, 2, 3$ para la dirección de propagación $\vec{n}$. Reintroducir las velocidades en la ecuación 2.23 permite encontrar las amplitudes de desplazamiento, que a su vez definen la polarización de la onda.

Es decir, que en el sólido generalmente anisótropo se pueden propagar tres tipos de ondas cuyas velocidades son distintas y sus polarizaciones son ortogonales entre sí. La onda cuya polarización es más cercana a la dirección de propagación se la denomina cuasi-longitudinal (qL), mientras que las dos restantes se denominan cuasi-transversales. Estas se pueden distinguir de acuerdo a su velocidad de fase como cuasi-transversal rápida (qS1) y cuasi-transversal lenta (qS2). Otra forma de separarlas es de acuerdo a su polarización con respecto a un plano en particular, por lo general el plano de incidencia de un haz ultrasónico. El modo cuya polarización es principalmente perpendicular al plano se denomina cuasi-transversal horizontal (qSH) y el restante se denomina cuasi-transversal vertical (qSV). Esta condición se muestra en la Fig. 2.4a. Estas categorías no distinguen al modo en todas las direcciones, ya que existen materiales en los que para algunas direcciones el modo rápido se convierte en lento o el modo horizontal se convierte en vertical. Este modelo supone que el medio es infinito, por lo que a las ondas que se propagan en este volumen infinito comúnmente se las denomina como volumétricas.



(a) Polarización de modos en medio generalmente anisótropo. El superíndice q refiere a los modos cuasi o "quasi" en inglés. La polarización de los modos transversales refiere al plano x_2x_3 . (b) Polarización de modos puros en una dirección de simetría en un medio anisótropo. La polarización de los modos transversales refiere al plano x_2x_3 .

Figura 2.4

Por otro lado, cuando el material posee simetrías elásticas, existen direcciones para las cuales las ecuaciones de Navier se desacoplan, es decir, que el movimiento en una dirección es independiente de las otras direcciones. En estos casos surgen modos puros de propagación y se los identifica por su relación con la dirección de propagación $\vec{n}$. Una onda es longitudinal pura (L) si cumple $\vec{u} \times \vec{n} = 0$ y transversal pura (S) si cumple $\vec{u} \cdot \vec{n} = 0$

como se muestra en la Fig. 2.4b. Si el modo longitudinal es puro, entonces, los transversales también; sin embargo, la relación inversa no es necesaria. Los modos puros se observan para direcciones de simetría en materiales anisótropos y para todas las direcciones en materiales isótropos. Además, si la velocidad de los modos transversales es igual, entonces se unifican. En este caso, la polarización del modo transversal se puede dar en cualquier dirección incluida en el plano perpendicular a la polarización de la onda longitudinal.

A partir de un tensor de rigidez se puede resolver la ecuación de Christoffel variando la dirección de propagación $\vec{n}$ para así construir superficies de velocidad o del vector de “slowness” o de lentitud ($\vec{s} = \vec{n}/c$). Aquí, las superficies están construidas en coordenadas esféricas donde la dirección está determinada por el ángulo polar y el ángulo azimutal; y la lentitud está representada por la distancia al origen. Estas superficies permiten observar la anisotropía de la velocidad de ondas en medios sólidos. Las superficies para un corte en $s_2 = x_2/c = 0$ se muestran en las Figs. 2.5a y 2.5b para un acero policristalino y un polímero reforzado por fibras de carbono (CFRP) unidireccional, respectivamente. Los tensores de rigidez correspondientes se dan en el apéndice H. Las tres superficies completas de “slowness” se muestran para el mismo CFRP en la Fig. 2.6. Por último, la superficie de “slowness” pensada como una función en la esfera puede ser representada a partir de una proyección en el plano. Dado que la rigidez tiene simetría antipodal por ser un tensor de orden par, la velocidad presenta la misma simetría. Por esta razón, la proyección de media esfera contiene toda la información. Las proyecciones de igual área de Schmidt para las superficies de “slowness” de CFRP se muestran en la Fig. 2.7, estas últimas generadas con la biblioteca MTEX [6] para MATLAB. Además, se incluyen segmentos negros cuya dirección indica la polarización de onda en cada punto. Por ejemplo, se observa que el modo qS1 tiene polarización horizontal para el plano x_2x_3 y el modo qS2 tiene polarización horizontal para el plano x_1x_3 .

2.3.2. Velocidad de grupo

Como se mostró en la Fig. 2.4a, cuando los modos no son puros, el desplazamiento no está alineado con respecto a la dirección de propagación. Esto genera que la dirección en la que fluye la energía difiera de la dirección del frente de onda. Si uno considera el número de onda k como una constante, a partir del cual se define la velocidad de fase como $c = \omega/k$, entonces la velocidad de grupo, usualmente asociada a la velocidad en la que se propaga la energía elástica, se puede definir como [1]

$$g_j = \frac{\partial \omega}{k \partial n_j} = \frac{\partial c}{\partial n_j}, \quad (2.24)$$

Retomando la ecuación 2.23 con amplitudes normalizadas $U_i U_i = 1$ y considerando la simetría del tensor de rigidez, se obtiene

$$g_j = \frac{\lambda_{ijkl} n_k U_l U_i}{c}, \quad (2.25)$$

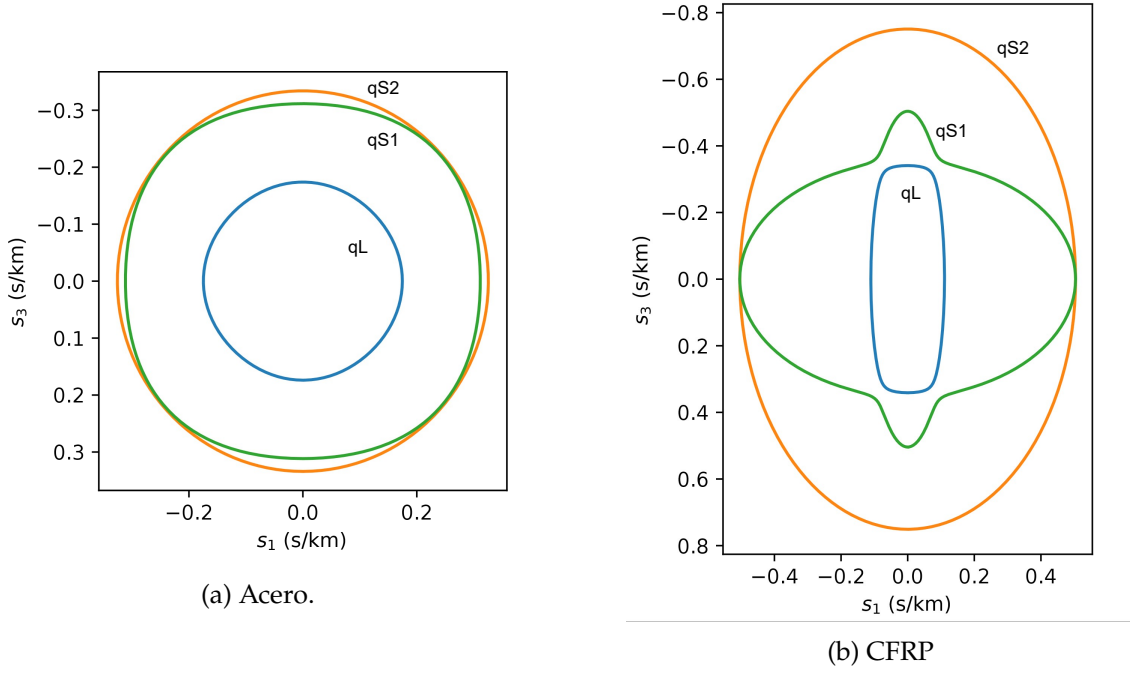


Figura 2.5: Curvas de "slowness" para $s_2 = 0$.

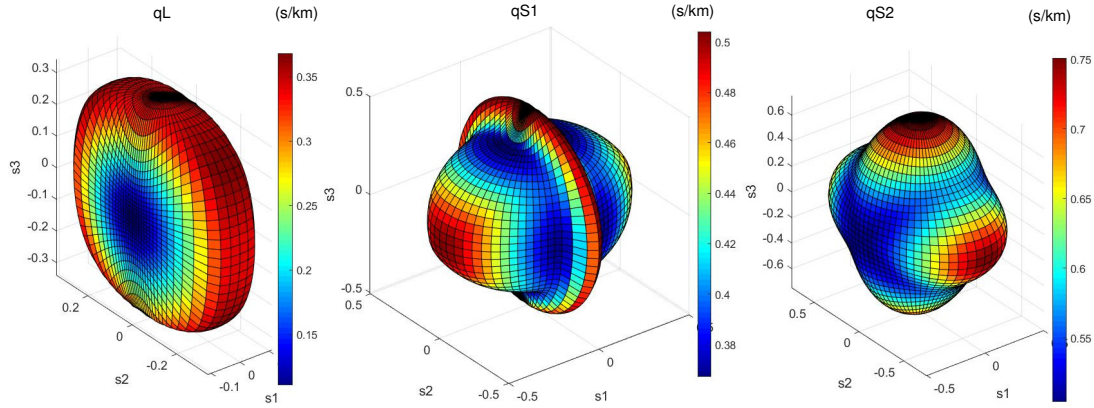


Figura 2.6: Superficies de "slowness" para CFRP.

que al multiplicar por n_j a ambos lados y comparar con la ecuación 2.22, se observa que

$$g_j n_j = c. \quad (2.26)$$

Diferenciado resulta en

$$g_j dn_j + n_j dg_j = dc, \quad (2.27)$$

y por la definición 2.24 se obtiene

$$n_j dg_j = 0. \quad (2.28)$$

Esta ecuación muestra que la dirección de propagación $\vec{n}$ siempre es normal a la superficie de energía de propagación. Por otro lado, si se define el vector de "slowness"

$$s_j = \frac{n_j}{c}, \quad (2.29)$$

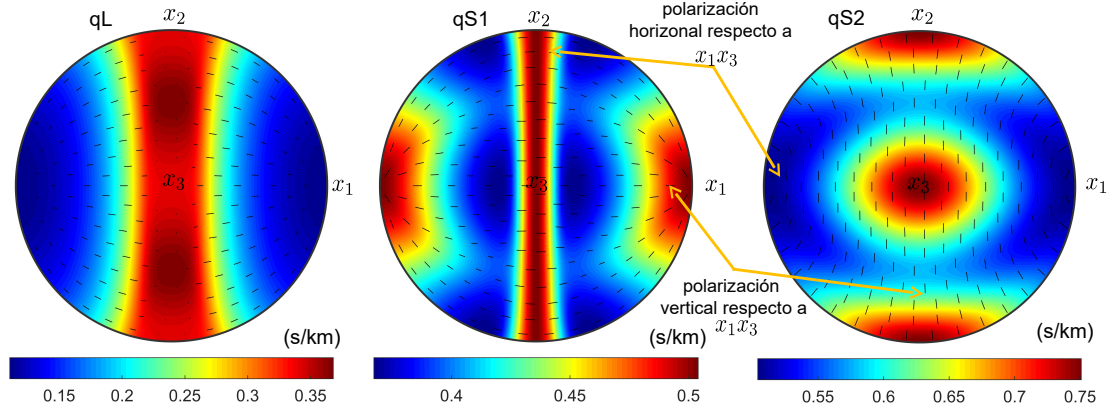


Figura 2.7: Proyecciones de Schmidt de las superficies de “slowness”. Los segmentos negros muestran la polarización de cada modo.

al diferenciarlo resulta en

$$cds_j + s_j dc = dn_j. \quad (2.30)$$

Considerando que por las ecuaciones 2.26 y 2.29 $g_j s_j = 1$, y que por la ecuación 2.27 $dc = n_j dg_j$, al multiplicar por g_j en ambos términos se llega a

$$g_j ds_j = 0. \quad (2.31)$$

Esta relación muestra, en analogía con la ecuación 2.28, que la velocidad de grupo $\vec{g}$ siempre es normal a la superficie de “slowness”. En consecuencia, el ángulo γ entre la velocidad de grupo $\vec{g}$ y la dirección de propagación $\vec{n}$ se define como el ángulo de flujo de potencia y describe el fenómeno de torcimiento de haz que se observa en materiales anisótropos. En estos casos $\vec{n}$ es normal al frente de onda y difiere de $\vec{g}$ que es normal a la superficie de propagación de energía. Este fenómeno no se observa en materiales isotrópicos o para modos puros en materiales anisótropos. Un análisis más detallado del flujo de energía en materiales anisótropos se puede encontrar en [2]. En la Fig. 2.8a, se muestran las superficies de “slowness” para un acero con anisotropía leve, donde se destaca una dirección en la que la normal a la superficie del modo longitudinal coincide con la dirección de propagación. En este caso, no hay torcimiento de haz. Por otro lado, en la Fig. 2.8b se muestran las superficies de “slowness” para CFRP unidireccional con anisotropía marcada. Aquí se destaca una dirección para la cual la normal a la superficie y la dirección de propagación difieren, por lo que la energía fluye con un ángulo γ con respecto a la dirección de propagación, generando el torcimiento de haz. Este fenómeno puede generar errores en la determinación de la velocidad de fase, más detalles con respecto al mismo se dan en el capítulo 4.

2.3.3. Comportamiento viscoelástico

Una descripción más detallada del comportamiento de los sólidos incluye un término de viscosidad, por lo que el comportamiento viscoelástico se puede describir como una

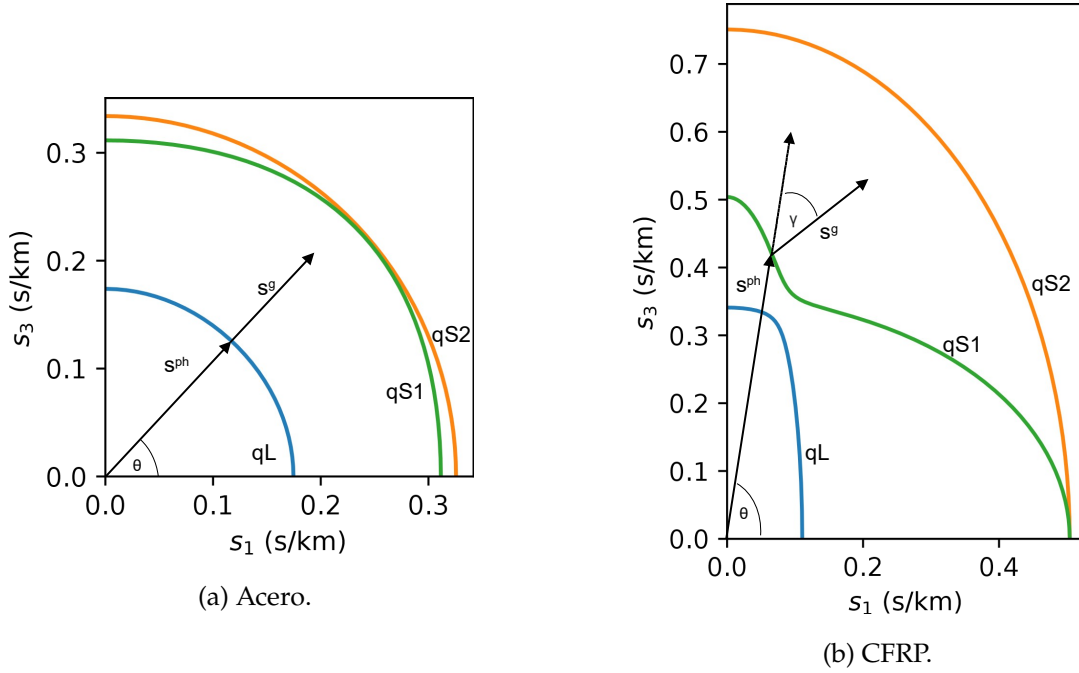


Figura 2.8: Desvío entre la dirección de grupo s^g y la dirección de fase s^{ph} .

combinación lineal entre una respuesta lineal a la deformación y una respuesta lineal a la velocidad de deformación como

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl} + \eta_{ijkl}\frac{d\varepsilon_{kl}}{dt} \quad (2.32)$$

donde η_{ijkl} es el tensor de viscosidad. Si se considera una onda plana similar a 2.20 en donde se reemplaza el número de onda, por $k^{ve} = k + i\hat{k}(\omega)$

$$\begin{aligned} u_i &= U_i \exp(i(k^{ve}n_jx_j - \omega t)) \\ &= U_i \exp(-\hat{k}n_jx_j) \exp(i(kn_jx_j - \omega t)), \end{aligned} \quad (2.33)$$

se observa que el componente complejo atenúa la amplitud como una exponencial decreciente en la distancia, es decir que, en la medida en que la onda viaja en el sólido, la fricción interna disipa energía. En esta aproximación, la parte compleja solo controla la amplitud y la parte real solo controla la velocidad de propagación. Para este tipo de excitación armónica y para frecuencias ultrasónicas cuyos períodos son mucho menores a los tiempos de relajación [7] es posible simplificar la Ec. 2.32 como

$$\sigma_{ij}(\omega) = (c_{ijkl} + i\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^p \hat{c}_{ijkl}(\omega_0))\varepsilon_{kl} \quad (2.34)$$

donde ω_0 es la frecuencia en la que se determina $\hat{c}_{ijkl}$, el tensor asociado al comportamiento viscoso, y p define el tipo de comportamiento en función de la frecuencia. Dependiendo del tipo de material p puede tomar valores de 0, 1 o 2 [8]. En la práctica se observa que no contemplar la componente compleja genera una discrepancia significativa entre los experimentos y la simulación. Sin embargo, una vez incluido este componente, la

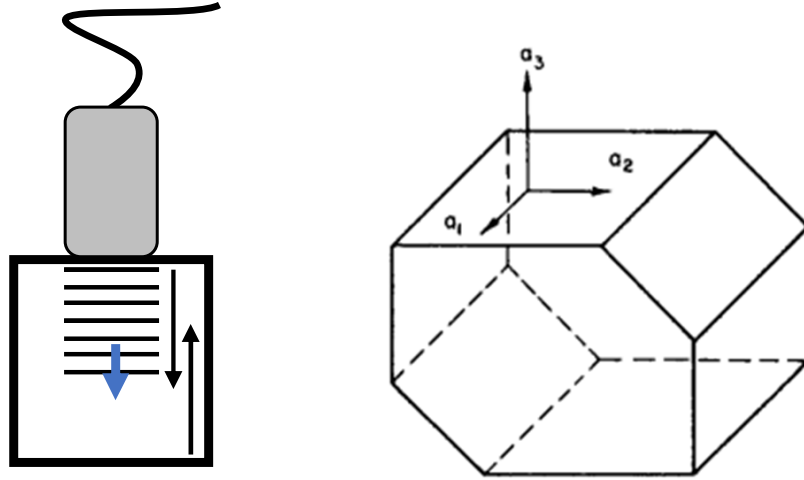
simulación no es muy sensible al valor de los mismos y un valor constante proporcional a las constantes reales puede ser suficiente [9]. Por esta razón, en este trabajo se utiliza $p = 0$ ya que al eliminar la dependencia de ω se simplifica considerablemente el cálculo numérico.

2.4. Goniometría ultrasónica

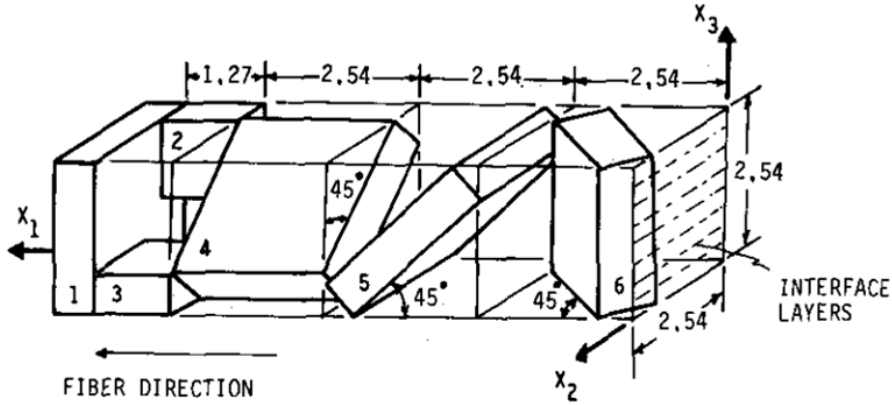
Dado que la velocidad de ondas elásticas está determinada por el tensor de rigidez mediante la ecuación de Christoffel 2.23, es habitual utilizar técnicas de ultrasonido para inferir propiedades elásticas de los materiales. Los primeros métodos desarrollados para este fin consistían en colocar un transductor piezoeléctrico en la superficie de una probeta con caras paralelas y medir el tiempo que tarda un pulso ultrasónico en ir y volver dentro del material (pulso-eco) [10], como se esquematiza en la Fig. 2.9a. La relación entre el tiempo de vuelo (ToF, por “Time of Flight” en inglés) y la distancia de propagación determina la velocidad de la onda. En general, cuando el medio es anisótropo, es necesario medir la velocidad en distintas direcciones, lo que requiere probetas cortadas a distintos ángulos. Cuanto mayor es el número de constantes independientes, mayor es la cantidad de direcciones en que se debe medir para determinar inequívocamente la ecuación de Christoffel. Por ejemplo, un mineral con simetría trigonal ¹ requiere la medición de modos longitudinales y transversales en al menos tres direcciones específicas [11]. El facetado de una probeta para esta caracterización se muestra en la Fig. 2.9b. De forma alternativa, se pueden fabricar un conjunto de probetas, cada una para la medición en una dirección. Por ejemplo, en la Fig. 2.9c se muestran los 6 cortes necesarios para la determinación de las constantes elásticas para CFRP con simetría ortótropa [12]. Las técnicas de contacto tienen la principal desventaja que requieren la preparación de una o más probetas con cortes específicos y/o geometrías complejas. Además, para determinar la cantidad y dirección de cortes se requiere conocer a priori la simetría elástica de la muestra y la orientación de las simetrías en relación con el material base.

El advenimiento de la industria aeroespacial trajo la búsqueda de materiales con mayor rigidez específica, y por consiguiente de mayor anisotropía elástica, como es el caso de los materiales compuestos. Por esta razón fue necesario el desarrollo de técnicas más versátiles que permitieran la propagación de ondas en distintas direcciones sin la necesidad de fabricar una probeta para cada dirección [13]. Con este fin se desarrolló la goniometría ultrasónica, que consiste en colocar una única muestra inmersa en un fluido y entre dos transductores opuestos. El primero emite pulsos ultrasónicos que viajan a través del material y el segundo capta el campo transmitido. La orientación entre la normal a la probeta (con forma de placa) y la normal a los transductores se varía mientras se adquieren y almacenan las señales transmitidas [14]. Este método es el elegido para este trabajo y un esquema del mismo se muestra en la Fig. 2.10. Existen distintas variaciones como,

¹Las simetrías elásticas, sus orígenes y sus consecuencias se describen en el capítulo 5



(a) Esquema de medición de velocidad por pulso-eco en contacto. (b) Facetado en probeta única trigonal tomada de [11].



(c) Cortes varios para material ortótropo, tomada de [12].

Figura 2.9: Técnica de pulso eco por contacto.

por ejemplo, medir el campo reflejado en lugar del transmitido [15]; utilizar un reflector en lugar de un transductor receptor [16]; o realizar barridos lineales de un transductor variando efectivamente el ángulo de propagación [17]; pero el objetivo común es adquirir el campo ultrasónico como función de los ángulos de incidencia.

2.4.1. Señales de goniometría

En la Fig. 2.11 se muestran las señales generadas durante un experimento de goniometría ultrasónica. La Fig. 2.11a muestra un pulso de banda ancha emitido y recibido en ausencia de muestra sólida. La Fig. 2.11b muestra el mismo pulso pero transmitido a través de una muestra de aluminio en incidencia normal ($\varphi = \theta = 0^\circ$). En primer lugar, se observa que el pulso se desplaza hacia la izquierda debido a que la velocidad de propagación en el sólido es mayor que en el fluido. Además, se observa la aparición de réplicas atenuadas del pulso, las cuales se deben a la reflexión-transmisión del pulso en

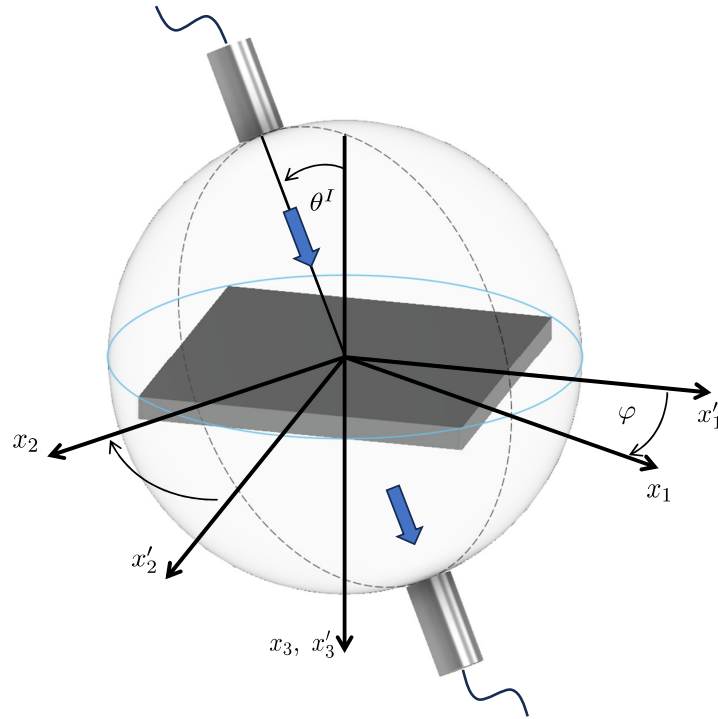


Figura 2.10: Goniometría ultrasónica. Se adoptan coordenadas esféricas donde φ y θ denotan la dirección azimutal y polar respectivamente. Las coordenadas primadas están referidas a las direcciones principales en la muestra.

cada interfase sólido-líquido. La atenuación de los ecos se debe principalmente a que parte de la energía se transmite al fluido en cada reflexión. En la Fig. 2.11c se muestran los pulsos transmitidos a través de una placa de aluminio para un barrido polar ($\varphi = 0$, $\theta = (0-40^\circ)$). Notar que $\theta = 0^\circ$ corresponde con la Fig. 2.11b. Por último, en la Fig. 2.11d, se muestra el valor absoluto del espectro de la señal correspondiente a un barrido polar. La existencia de ecos genera una interferencia similar al fenómeno de “filtro peine” [18].

En este trabajo, un experimento de goniometría ultrasónica consiste en una serie de barridos polares realizados a distintos ángulos azimutales. Dado que el experimento tiene 3 dimensiones (φ , θ , y t) la representación completa en una sola figura no es posible, a diferencia de las superficies de “slowness” de la Fig. 2.6. Los detalles experimentales se dan en el capítulo 6. Un barrido polar para una placa de CFRP unidireccional, pero con los ejes ángulo-tiempo intercambiados se muestra en la Fig. 2.12a. Al compararla con las figuras de “slowness” calculadas por la ecuación de Christoffel de la Fig. 2.12b, se observan ciertas similitudes que permiten identificar los tres modos de propagación qL, qS1, y qS2. Las transiciones de un modo de propagación a otro se denotan como 1^{er} y 2^{do} ángulo crítico como se explica en la sección 3.3.2. En general, para materiales con anisotropía leve, la distinción entre los modos qS1 y qS2 no se observa con tanta claridad.

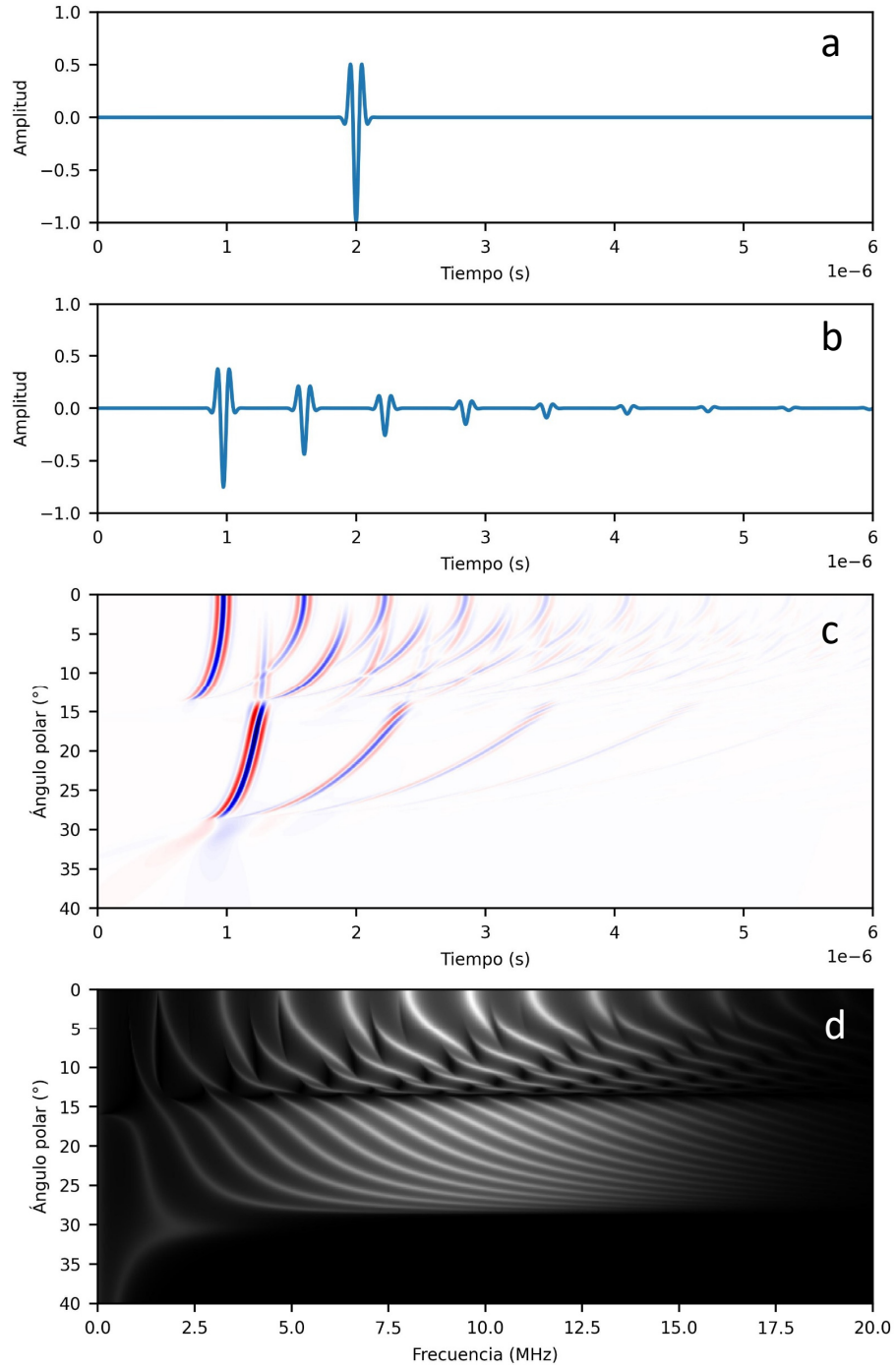
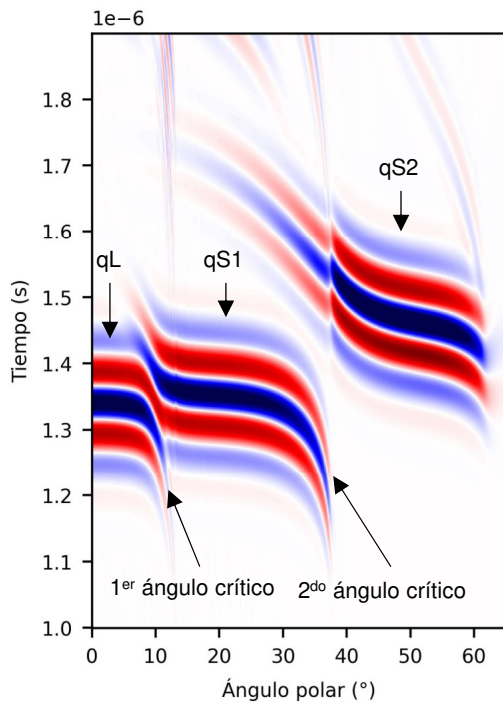
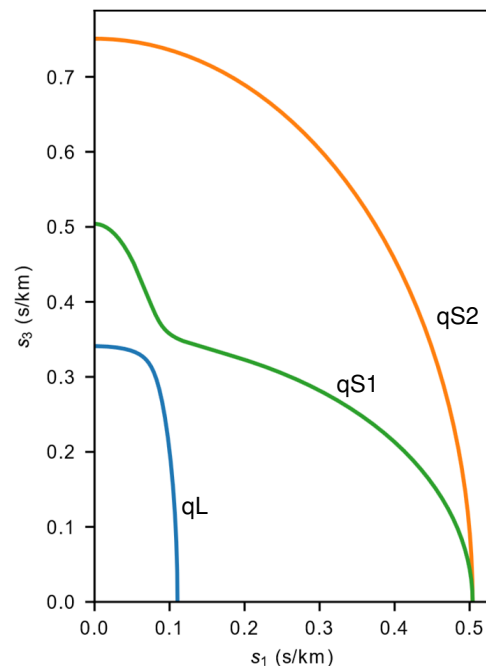


Figura 2.11: Señales en goniometría ultrasónica. (a) pulso sin el sólido; (b) pulso a través del sólido para un ángulo de incidencia; (c) pulsos a través del sólido en un barrido polar; (d) espectro de un barrido polar. Calculado para aluminio con anisotropía débil.



(a) Barrido polar ultrasónico para CFRP.



(b) Curvas de “slowness” para CFRP.

Figura 2.12: Determinación de modos de propagación en experimento de goniometría.

MEDIOS FINITOS

3.1. Introducción

La propagación de ondas en distintas direcciones generalmente se realiza a partir de la incidencia oblicua en un medio de caras paralelas sumergido en un fluido acoplante como es el caso de la goniometría ultrasónica. La ecuación de Christoffel para medios infinitos (MPI) se puede aplicar en estos casos bajo ciertas condiciones, pero existe una serie de limitaciones que hacen que la aproximación volumétrica no describa el experimento ultrasónico de forma adecuada. Esto es de particular relevancia para espesores delgados o frecuencias bajas, cuando el medio comienza a comportarse como guía de ondas. Por lo tanto, estas limitaciones justifican el desarrollo de un modelo de onda plana que contemple la presencia de interfases con el fin de ajustarse mejor a los experimentos.

En la sección 3.2 se describe el proceso de inversión de constantes elásticas que generalmente implica la utilización de algoritmos de optimización. Luego se enumeran una serie de desventajas relacionadas con la aproximación de medio infinito, y la parametrización de velocidades. En la sección 3.3 se muestra el desarrollo del modelo de onda plana para medios finitos (MPF), que implica la generalización de la ley de Snell y la modificación de la ecuación de Christoffel para cumplir con dicha ley en las interfases. Luego se genera un sistema lineal a partir de las condiciones de continuidad en las interfases y se resuelve el sistema para encontrar el coeficiente de transmisión. Este último, convolucionado con el pulso adquirido en ausencia de la placa, sirve para simular las señales de un experimento. Este modelo es aplicable sin importar el espesor de la muestra o la frecuencia de trabajo, es decir, independientemente del grado de dispersión del medio. En la sección 3.4 se muestra la metodología para invertir las constantes elásticas a partir del ajuste de las señales simuladas, sin la necesidad de parametrizar la velocidad. Esto conlleva una serie de ventajas que se enumeran y ejemplifican en la sección 3.4.1. Por último, en la sección 3.5, se muestra que el MPF es más costoso computacionalmente que el MPI, por lo que la implementación del primero en arquitectura de GPU es beneficiosa para las múltiples evaluaciones durante el ajuste. Además, se muestra que esta ventaja es particularmente útil cuando no se restringe la simetría elástica de la muestra, es decir, considerando que

todos los materiales a estudiar presentan, a priori, simetría triclinica.

3.2. Limitaciones de la aproximación de medio infinito

Para encontrar las constantes elásticas es necesario extraer información de las señales adquiridas durante el experimento de goniometría ultrasónica. El método más común consiste en parametrizar la velocidad de fase en función de los ángulos de incidencia para luego invertir las constantes elásticas con la ecuación de Christoffel para medios infinitos 2.23. Esta ecuación no es directamente invertible, por lo que se suele utilizar un algoritmo de optimización que evalúa el error entre un modelo directo y un conjunto de datos experimentales. Este error se utiliza para modificar el tensor de rigidez en aproximaciones sucesivas hasta que se llega a un mínimo global. Un diagrama en bloques de este procedimiento se incluye en la Fig. 3.1. Si bien este método es el más utilizado, por ejemplo en [14, 16, 19-21], tiene una serie de desventajas que se detallan a continuación.

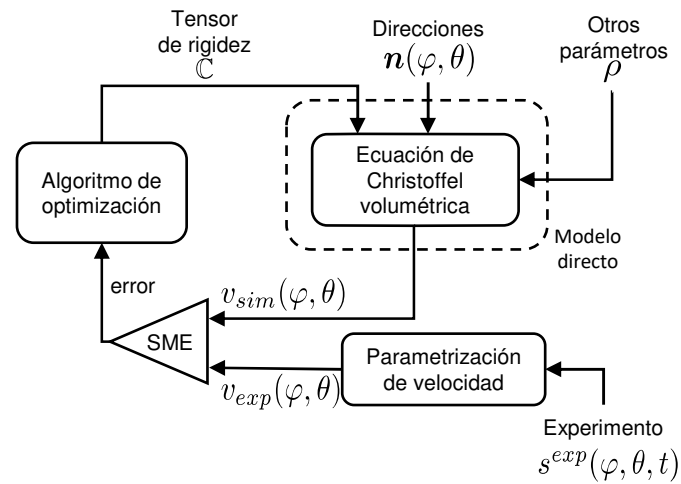


Figura 3.1: Algoritmo de optimización con parametrización de velocidad y aproximación de medio infinito. El ciclo se itera hasta cumplir un criterio de convergencia.

3.2.1. Desventajas asociadas a la parametrización de la velocidad

La velocidad se parametriza a partir del tiempo de vuelo (ToF) del primer pulso, que se determina a partir de un punto característico de la onda, como el máximo, el mínimo o el cruce por cero [22]. En esta sección se utiliza el mínimo de la señal para cada ángulo de incidencia. En la Fig. 3.2a se muestra la simulación¹ de un barrido polar para acero de 2 mm con el ToF superpuesto. En primer lugar, la asignación del ToF al modo de propagación no es trivial, ya que en materiales con anisotropía leve los modos qS1 y qS2 pueden superponerse y no ser distinguibles como en este caso. Además, se observa que este ToF

¹En esta sección se realizan una serie de simulaciones de goniometría ultrasónica calculadas a partir del modelo que se desarrolla en la sección 3.3

(primer pulso) solo diferencia un modo de propagación por ángulo polar, es decir, que el modo transversal para ángulos menores al primer ángulo crítico se descarta. Repitiendo la simulación de barrido polar para acero de 1 mm como se muestra en la Fig. 3.2b se evidencia otro inconveniente. En la medida en que se reduce el espesor disminuye la relación entre la resolución temporal y el tiempo medido, por lo que empeora la exactitud en la determinación de la velocidad. Además, toda la información posterior al primer eco es descartada.

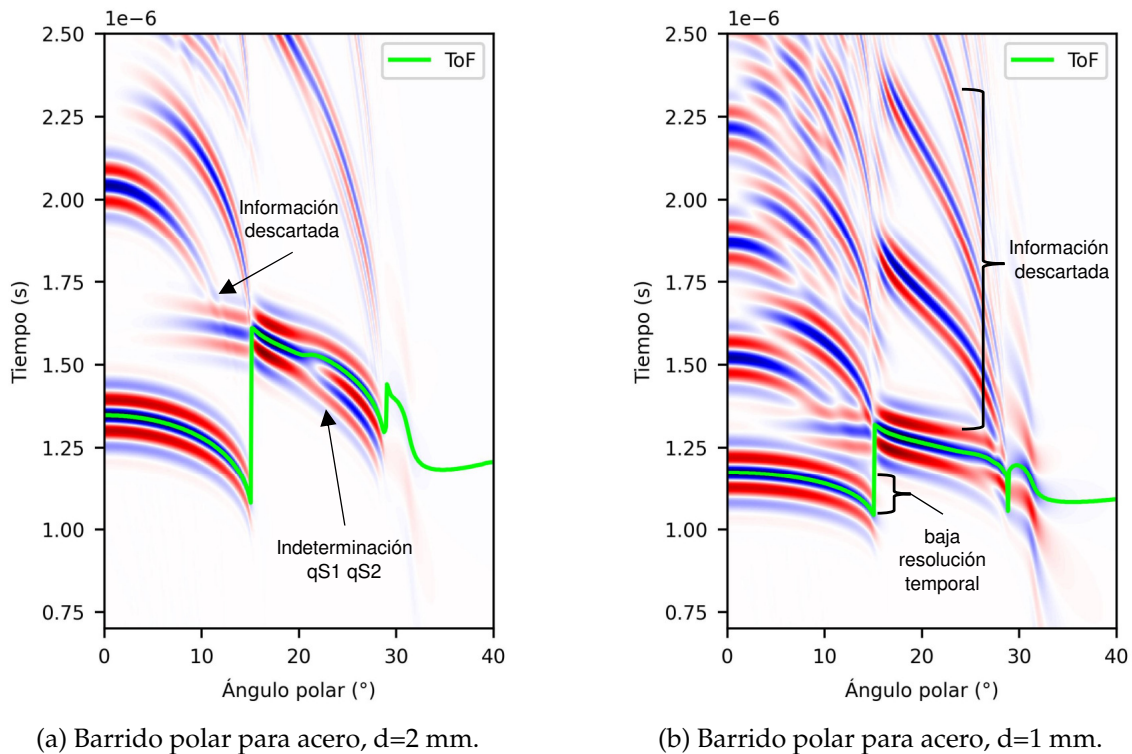
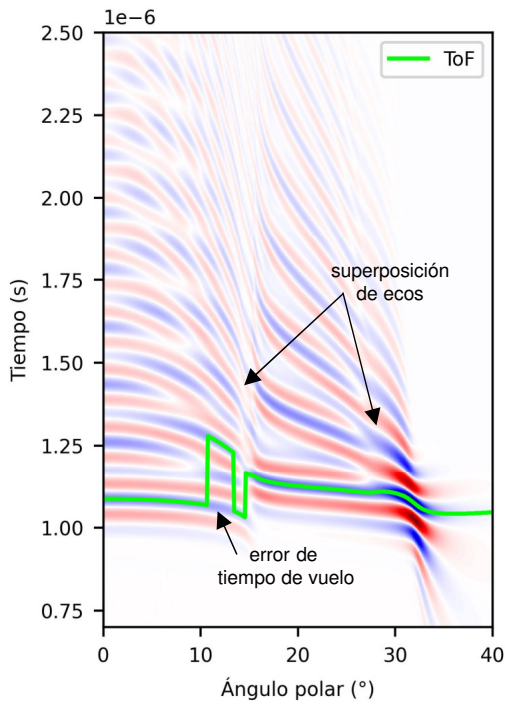


Figura 3.2: Desventajas asociadas a la parametrización de la velocidad. Se destacan la dificultad en la identificación de modos, el desaprovechamiento de gran parte de la señal y la baja resolución en materiales delgados.

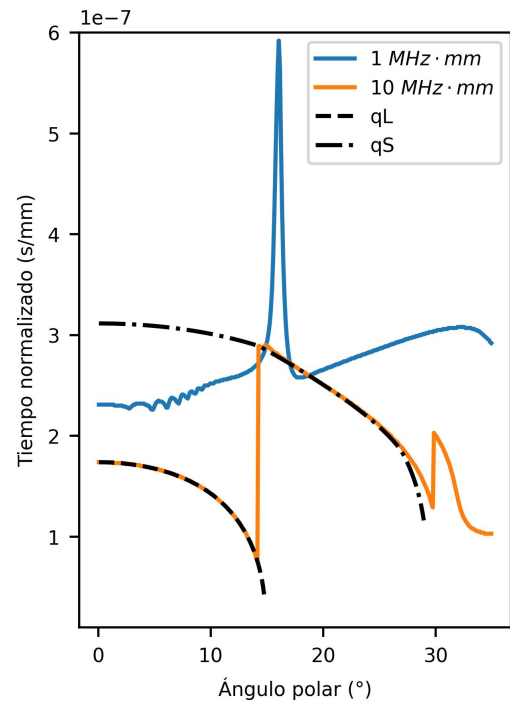
3.2.2. Desventajas asociadas a la aproximación de medio infinito

Utilizar la aproximación de medio infinito (MPI), soslaya la existencia de interfases sólido-líquido que generan ecos. Estos ecos están distanciados en el tiempo que le tarda a la onda en ir y volver dentro del material, y en la medida en que disminuye el espesor se acercan en el tiempo. En la Fig. 3.3a se muestra la síntesis de un barrido polar para una placa de acero de 0.5 mm y se observa que por la delgadez de la placa, los ecos se superponen e interactúan entre ellos. Esta interacción genera una distorsión en la posición de los mínimos que no está contemplada por la ecuación de Christoffel para medios infinitos y además lleva a la determinación incorrecta del ToF en algunos ángulos. De forma equivalente, si en lugar de disminuir el espesor se disminuyera la frecuencia del pulso, se observaría un fenómeno equivalente. Por esta razón, el análisis para este tipo de

efectos se suele llevar a cabo en función del producto frecuencia espesor ($f \cdot d$). Repitiendo la última simulación para distintos $f \cdot d$, y superponiendo el ToF calculado con el MPI, se evidencia que a bajos $f \cdot d$ el medio se aleja de la aproximación volumétrica (medio infinito), como se muestra en la Fig. 3.3b. En general, si el medio es delgado, utilizar frecuencias mayores aminora la desviación. Sin embargo, esto constituye una solución parcial, ya que el carácter homogeneizador de las ondas elásticas solo vale para longitudes de onda varias veces más grandes que el constituyente, concepto que se desarrolla con mayor detalle en el capítulo 6.



(a) Barrido polar en acero $d=0.5$ mm.



(b) ToF a distintos productos $f \cdot d$ superpuestos con el ToF considerando medio infinito (qL , qS).

Figura 3.3: Limitaciones del modelo para medio infinito en espesores delgados y/o frecuencias bajas. La interacción de ecos desplaza la posición de los mínimos generando la incorrecta indeterminación del ToF. En la medida en que disminuye $f \cdot d$ se incrementa el error con respecto a la aproximación de medio infinito.

El medio finito, que da lugar a la presencia de ecos, puede considerarse como una guía de onda, y las ondas que viajan en este medio se suelen denominar como ondas de placa. En estos casos, si solo se considera la velocidad de la onda proyectada en la interfase, entonces el medio resulta dispersivo, es decir que, la velocidad (horizontal) es función de la frecuencia. En esta condición, la propagación se denomina onda guiada con fuga (“leaky guided waves”), ya que si bien el medio se comporta como guía de onda, la energía decae rápidamente porque se transmite al fluido [1]. En la Fig. 3.4 se muestra este fenómeno como una imagen obtenida por estroboscopia ultrasónica [23]. Que el medio se comporte como una guía de onda implica que la aproximación de medio infinito deja

de ser válida. Repitiendo el espectro de un barrido polar y reemplazando el ángulo de

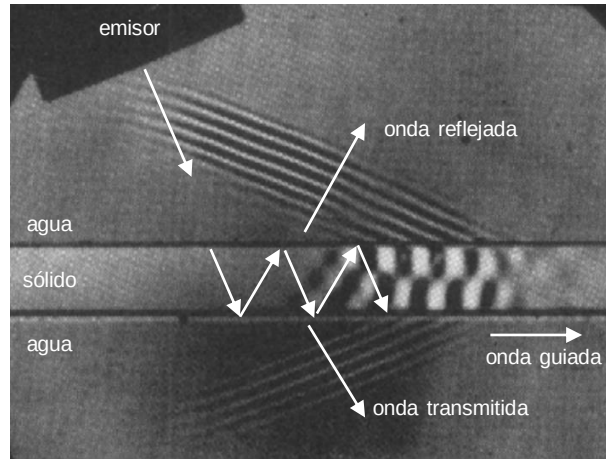
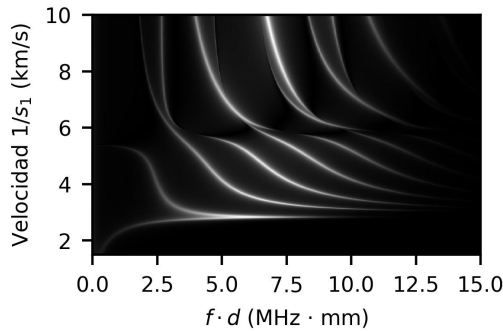
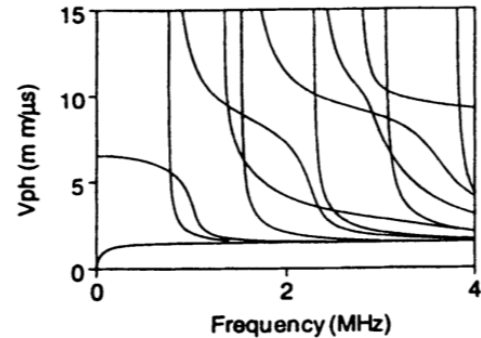


Figura 3.4: Visualización del fenómeno de onda guiada con fuga obtenida por estroboscopia ultrasónica [23].

incidencia por la velocidad de la onda proyectada en la interfase, se obtiene la Fig. 3.5a, que es equivalente a las curvas de dispersión para ondas de placa, como por ejemplo las que se muestran en la Fig. 3.5b obtenida de [24].



(a) Espectro de barrido polar en acero.

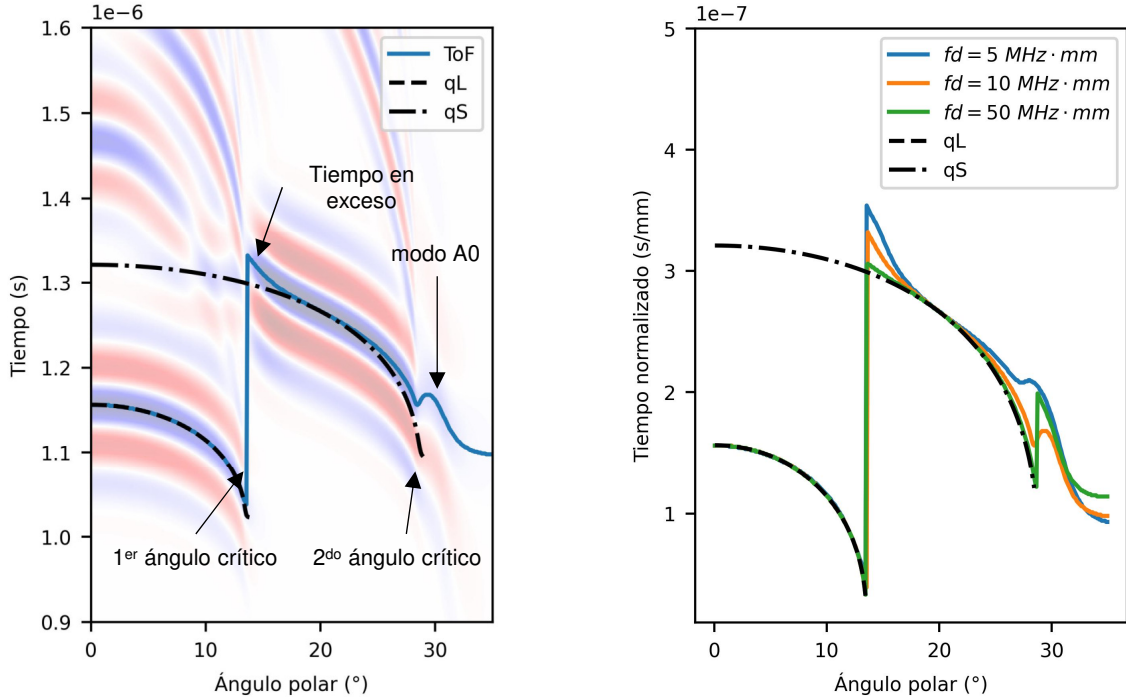


(b) Modos de dispersión obtenida de [24].

Figura 3.5: El espectro de un barrido polar en una placa es equivalente a las relaciones de dispersión que se utilizan para métodos de ondas guiadas.

Por otro lado, en las interfases líquido-sólido, a partir del primer ángulo crítico, el modo longitudinal deja de ser propagativo y pasa a ser evanescente, lo que implica que decae rápidamente desde la interfase. Este fenómeno introduce una distorsión de fase en las ondas transversales propagativas [22]. En la Fig. 3.6a se simula un barrido polar para una placa de aluminio de 1 mm y se superpone a la señal el ToF correspondiente al modelo para medios infinitos. Este fenómeno se observa con mejor detalle en materiales isótropos o casi isótropos, como el aluminio caracterizado por el tensor de rigidez correspondiente que se da en el apéndice H. Aunque los pulsos son distinguibles, para ángulos mayores al primer ángulo crítico se observa un ToF en exceso, el cual corresponde a la onda evanescente mencionada. Para ángulos mayores al segundo ángulo crítico se observa un pico correspondiente al modo A0 de propagación de ondas guiadas que no existe para

medios infinitos. En la Fig. 3.6b se muestra que esta distorsión de fase también depende del producto $f \cdot d$. Este fenómeno surge por la existencia de la interfase líquido-sólida de los experimentos de goniometría ultrasónica que no está contemplada por el modelo de medios infinitos.



(a) Barrido polar en aluminio $d = 1$ mm.

(b) Barrido polar en aluminio a distintos $f \cdot d$.

Figura 3.6: ToF en exceso producto de la distorsión de fase que genera la aparición ondas evanescentes a partir del 1^{er} ángulo crítico. El fenómeno se incrementa en la medida que baja el producto $f \cdot d$ y aumenta la dispersividad del medio.

3.2.3. Imposibilidad de determinación de la polarización de onda

Por otro lado, el MPI, al soslayar la existencia de las interfases con el fluido, no contempla la atenuación de las ondas por la energía transmitida a este medio (fuga). Las constantes elásticas complejas, descritas en la sección 2.3.3, al estar asociadas al comportamiento viscoso del material, influyen en la atenuación de las ondas. Esto implica que para su correcta determinación es necesario contemplar la energía perdida en las interfases.

Además, la información de amplitud se utiliza para determinar la polarización de la onda que, nuevamente, no puede realizarse bajo la aproximación de medio infinito. Dado un conjunto de velocidades, estas pueden ser autovalores de más de un tensor de Christoffel, lo cual se conoce como compañero anómalo, y puede llevar a una incorrecta determinación de las constantes elásticas [25]. Para estos casos, los autovectores, i.e. las amplitudes de desplazamiento, no son iguales, por lo que conocer esta información evitaría este problema. En la práctica, este fenómeno también se puede sortear utilizando cotas en

el espacio de búsqueda que se describen en el capítulo 5. Un caso de polarización anómala se muestra en la Fig. 3.7 para dos tensores diferentes incluidos en el apéndice H.

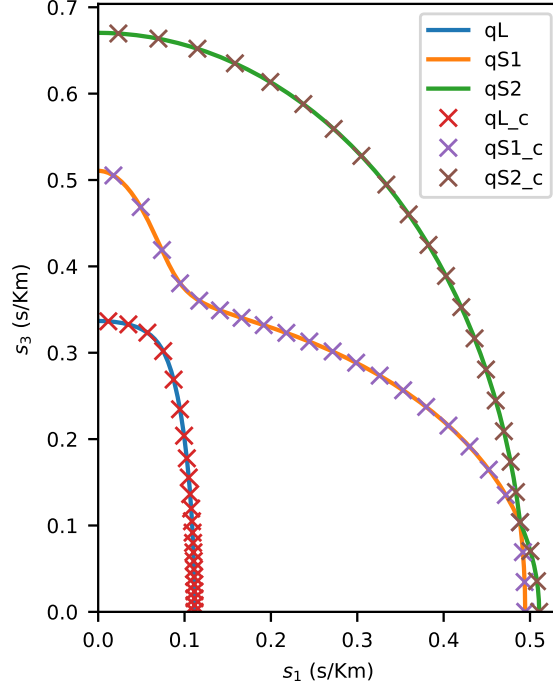


Figura 3.7: Fenómeno de polarización anómala. Dos tensores de rigidez distintos tienen las mismas curvas de “slowness” pero diferente polarización. Las líneas continuas corresponden a un material real, mientras que las cruces corresponden a un compañero anómalo de dicho material.

3.3. Modelo de onda plana para medios finitos (MPF) en inmersión

Debido a las limitaciones del MPI, en este trabajo se optó por la utilización de un modelo de onda plana que contempla la existencia de las interfases líquido-sólido (medio finito) que se ajuste mejor a las señales experimentales de la goniometría ultrasónica. El mismo se basa en la generalización de la ley de Snell, la reformulación de Christoffel para cumplir con la ley de Snell en las interfases y las ecuaciones de continuidad en las interfases. El modelo sigue los lineamientos descritos en [1].

3.3.1. Sistema de referencia rotado

La incidencia oblicua se describe por los ángulos polares θ y azimutales φ como se muestra en la Fig. 3.8. Aquí el transductor superior representa una fuente de ondas planas y el transductor inferior es sensor de las ondas transmitidas. Se adopta un sistema de referencia donde el plano de incidencia siempre está descrito por las direcciones x_1x_3 ,

para obtener independencia de la dirección x_2 y simplificar el cálculo numérico. Esto se logra a través de la rotación pasiva del tensor de rigidez en φ , como

$$c_{mnop} = \beta_{mi}\beta_{nj}\beta_{ok}\beta_{pl}c'_{ijkl}, \quad (3.1)$$

donde β_{ij} es la matriz de transformación cuyas entradas son los cosenos directores entre x_i y x'_j . De esta forma, las coordenadas originales asociadas al material se denotan como x'_1, x'_2, x'_3 y la rigidez del material en estas coordenadas es c'_{ijkl} . Esta rotación es solo una ventaja numérica, por lo que esta nomenclatura solo se mantiene para este capítulo.

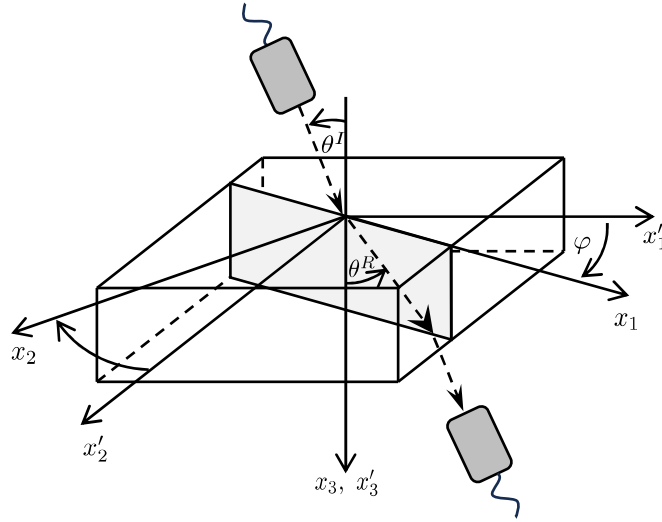


Figura 3.8: Sistema de referencia para incidencia oblicua en placa finita. Rotación pasiva del tensor de rigidez del material. Aquí θ^I es el ángulo polar de incidencia y θ^R es el ángulo polar de refracción.

3.3.2. Ley de Snell generalizada

Cuando una onda que viaja por un medio se encuentra con una interfase, deben cumplirse condiciones de continuidad que en general requieren la aparición de ondas reflejadas y refractadas. Si se considera una onda que viaja en un fluido no viscoso y se encuentra con un medio sólido, debe existir continuidad de desplazamiento y tensión normales a la interfase, en este caso alineada con la dirección x_1 ,

$$\bar{u}_3 = u_3, \quad \bar{\sigma}_{33} = \sigma_{33}. \quad (3.2)$$

Además, dado que el fluido no soporta tensiones de corte entonces

$$\bar{\sigma}_{13} = \sigma_{13} = \bar{\sigma}_{23} = \sigma_{23} = 0. \quad (3.3)$$

En este capítulo las cantidades correspondientes al fluido se describen con la barra, e. g., $\bar{\sigma}_{ij}$. Una consecuencia directa de las condiciones de continuidad es que las ondas reflejadas

y refractadas comparten con la onda incidente la misma proyección en la interfase del vector de onda k_1 ,

$$k^I \sin(\theta^I) = k^R \sin(\theta^R) = k_1, \quad (3.4)$$

o de manera equivalente la misma proyección del vector de “slowness” s_1

$$s^I \sin(\theta^I) = s^R \sin(\theta^R) = s_1, \quad (3.5)$$

donde θ es el ángulo con respecto a la normal, y el superíndice I hace referencia a las ondas incidentes y el superíndice R hace referencia a las ondas reflejadas o refractadas indistintamente. Las ondas reflejadas también cumplen con la misma condición. Esta ecuación es conocida como la ley de Snell generalizada y sus efectos se pueden observar en la Fig. 3.9. Aquí se muestra la ley de Snell generalizada para una interfase agua-CFRP donde una onda incidente desde el agua genera una onda reflejada y dos ondas refractadas transmitidas. La componente horizontal s_1 es común a todas las ondas.

Por otro lado, el ángulo de incidencia θ^I para el cual el ángulo refractado θ^R equivale a 90° , es denominado ángulo crítico y a partir de este la onda refractada deja de propagarse y pasa a ser inhomogénea o evanescente, es decir, que decae exponencialmente desde la interfase. Este tipo de ondas se describe por un componente s_3 complejo. Para el sólido anisótropo, en el que pueden propagar una onda cuasi-longitudinal, y dos cuasi-transversales, pueden existir hasta tres ángulos críticos, cada uno correspondiente con cada modo de propagación. En la Fig. 3.9 el ángulo de incidencia determina el componente común s_1 a partir del cual se muestra qué ondas se propagan en el sólido. En este caso el ángulo de incidencia supera el primer ángulo crítico, y por ende solo se refractan los dos modos transversales.

3.3.3. Ecuación de Christoffel modificada

Para el caso de una onda viajando en un medio líquido e incidente en un medio sólido anisótropo, con un ángulo de incidencia conocido θ^I , no es posible resolver la ecuación de Christoffel 2.23 para las ondas refractadas, ya que la dirección de propagación $\vec{n}$ depende, a través de la ley Snell, de la velocidad de la onda en dicha dirección. Dado que la proyección en la interfase del vector de “slowness” s_1 es común a todas las ondas, es posible reescribir la ecuación 2.20 como

$$u_j = U_j \exp(i\omega(s_1 x_1 + s_3 x_3 - t)), \quad j = 1, 2, 3. \quad (3.6)$$

Gracias a la rotación pasiva de φ en torno a x_3 del sistema de referencia, la ecuación 3.6 es independiente de la dirección x_2 reduciendo la complejidad de las ecuaciones. Esto no implica que el desplazamiento en la dirección x_2 , es decir u_2 , sea nulo, ya que, como se explicó en la sección 2.2.5, las ecuaciones de Navier son acopladas. Al reemplazar la Ec. 3.6 en la ecuación de Navier 2.19, se obtiene la ecuación de Christoffel modificada para interfaces

$$(c_{ijkl}s_k s_j - \rho \delta_{il})U_l = 0, \quad (3.7)$$

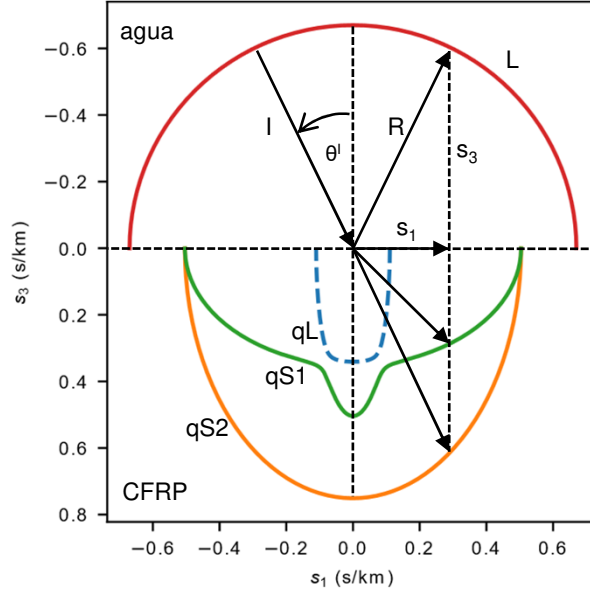


Figura 3.9: Ley de Snell generalizada para una interfase agua-CFRP. El modo qL para el medio sólido se denota con líneas punteadas, dado que para este ángulo polar de incidencia no genera un modo propagativo.

que se puede reescribir como un sistema de ecuaciones

$$K_{ij}(s_3)U_j = 0, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (3.8)$$

Para que existan soluciones no triviales, el determinante de la matriz K_{ij} debe ser igual a cero, lo cual da lugar a un polinomio de sexto grado, cuyas raíces son los componentes verticales de “slowness” s_3^q , donde cada superíndice q hace referencia a una de las 6 ondas refractadas. Para un sólido anisótropo se refractan 3 ondas viajando en el sentido x_3 positivo y 3 viajando en el sentido x_3 negativo. En cada dirección habrá una onda cuasi-longitudinal, y dos cuasi-transversales. De esta forma, la ecuación de Christoffel modificada encuentra el componente refractado vertical s_3^q como función del componente s_1 que a su vez es función del ángulo de incidencia θ^I .

Luego, al reintroducir los componentes s_3^q en la ecuación 3.8, se obtienen las amplitudes de desplazamiento normalizadas como

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_2^q &= \frac{U_2^q}{U_1^q} = \frac{K_{11}(s_3^q)K_{23}(s_3^q) - K_{13}(s_3^q)K_{12}(s_3^q)}{K_{13}(s_3^q)K_{22}(s_3^q) - K_{12}(s_3^q)K_{23}(s_3^q)}, \\ \mathbf{u}_3^q &= \frac{U_3^q}{U_1^q} = \frac{K_{11}(s_3^q)K_{23}(s_3^q) - K_{12}(s_3^q)K_{13}(s_3^q)}{K_{12}(s_3^q)K_{33}(s_3^q) - K_{23}(s_3^q)K_{13}(s_3^q)}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

De manera análoga, las amplitudes normalizadas de tensión se definen reemplazando la Ec. 3.6 en la ley geométrica 2.4 y las relaciones constitutivas 2.11 como

$$\begin{aligned} \tau_{33}^q &= C_{13}s_1 + C_{35}s_3^q + (C_{36}s_1 + C_{34}s_3^q)\mathbf{u}_2^q + (C_{35}s_1 + C_{33}s_3^q)\mathbf{u}_3^q, \\ \tau_{13}^q &= C_{15}s_1 + C_{55}s_3^q + (C_{56}s_1 + C_{45}s_3^q)\mathbf{u}_2^q + (C_{55}s_1 + C_{35}s_3^q)\mathbf{u}_3^q, \\ \tau_{23}^q &= C_{14}s_1 + C_{45}s_3^q + (C_{46}s_1 + C_{44}s_3^q)\mathbf{u}_2^q + (C_{45}s_1 + C_{34}s_3^q)\mathbf{u}_3^q. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Finalmente las soluciones formales para un sólido anisótropo quedan definidas para los desplazamientos como,

$$(u_1, u_2, u_3) = \sum_{q=1}^6 (1, \mathcal{U}_2^q, \mathcal{U}_3^q) U_1^q \exp(i\omega(s_1 x_1 + s_3^q x_3 - t)), \quad (3.11)$$

y para las tensiones como

$$(\sigma_{33}, \sigma_{13}, \sigma_{23}) = \sum_{q=1}^6 i\omega(\mathcal{T}_{33}^q, \mathcal{T}_{13}^q, \mathcal{T}_{23}^q) U_1^q \exp(i\omega(s_1 x_1 + s_3^q x_3 - t)). \quad (3.12)$$

Las ecuaciones de movimiento 2.17 se reducen para un fluido no viscoso, dado que no resiste tensión de corte como

$$\frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} = \rho_f \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial t^2}, \quad (3.13)$$

$$\bar{\sigma}_{ij} = \lambda_f \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (3.14)$$

donde ρ_f y λ_f , son la densidad y la constante de Lamé del fluido, respectivamente. Repitiendo el mismo procedimiento que aquel llevado para sólidos anisótropos, se llegan a las soluciones formales para el fluido,

$$(\bar{u}_1, \bar{u}_3, \bar{\sigma}_{33}) = \sum_{q=1}^2 (1, \bar{\mathcal{U}}_3^q, i\omega \bar{\mathcal{T}}_{33}) \bar{U}_1^q \exp(i\omega(s_1 x_1 + \bar{s}_3^q x_3 - t)), \quad (3.15)$$

donde $\bar{s}_3^q = (-1)^{q+1} \sqrt{\frac{1}{c_f^2} - s_1^2}$, $\bar{\mathcal{U}}^q = \frac{\bar{s}_3^q}{s_1}$ y $\bar{\mathcal{T}}_{33} = \frac{\rho_f}{s_1}$ y c_f es la velocidad de fase en el fluido.

3.3.4. Placa inmersa en un fluido

Cuando se considera un sólido anisótropo inmerso en un fluido no viscoso, entonces existen dos interfases fluido-sólido, caracterizadas por las ecuaciones de continuidad 3.2 y 3.3. En esta configuración existen una onda incidente, una reflejada y una transmitida para el fluido y 6 ondas que viajan dentro del sólido. Si se considera el sistema de referencia representado en la Fig. 3.10, y un campo independiente de la dirección x_2 por la rotación pasiva de la sección 3.3.1, entonces las ecuaciones de continuidad resultan en

$$\bar{u}_3 = u_3, \quad \bar{\sigma}_{33} = \sigma_{33}, \quad \sigma_{13} = \sigma_{33} = 0, \quad \text{en } x_3 = -d/2, d/2. \quad (3.16)$$

Reemplazar las soluciones formales 3.11, 3.12 y 3.15 en las relaciones de continuidad especializadas para las interfases $x_3 = -d/2$ y $x_3 = d/2$, eliminando el factor común

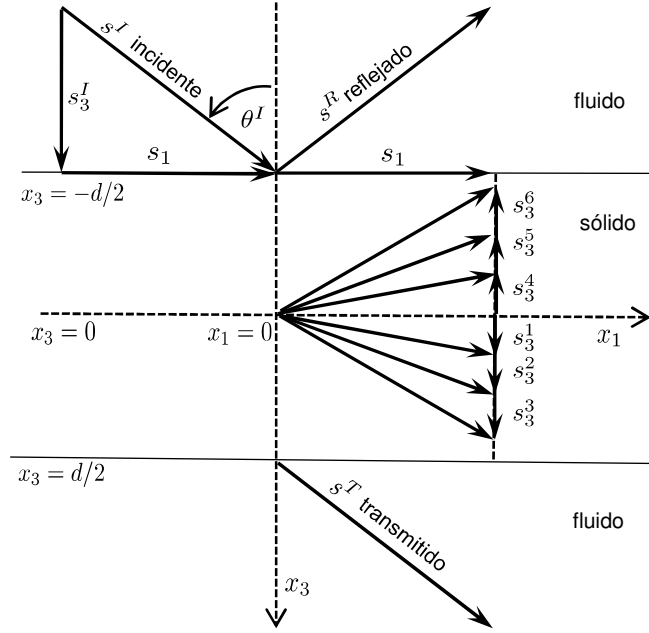


Figura 3.10: Plano de incidencia para placa anisótropa inmersa en un fluido.

$\exp(i\omega(s_1x_1 - t))$, resulta en el sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{bmatrix}
 \mathcal{U}_3^1 E^1 & \mathcal{U}_3^2 E^2 & \mathcal{U}_3^3 E^3 & \mathcal{U}_3^4 E^4 & \mathcal{U}_3^5 E^5 & \mathcal{U}_3^6 E^6 & -\bar{\mathcal{U}}_3^2 & 0 \\
 \mathcal{T}_{33}^1 E^1 & \mathcal{T}_{33}^2 E^2 & \mathcal{T}_{33}^3 E^3 & \mathcal{T}_{33}^4 E^4 & \mathcal{T}_{33}^5 E^5 & \mathcal{T}_{33}^6 E^6 & -\bar{\mathcal{T}}_{33} & 0 \\
 \mathcal{T}_{13}^1 E^1 & \mathcal{T}_{13}^2 E^2 & \mathcal{T}_{13}^3 E^3 & \mathcal{T}_{13}^4 E^4 & \mathcal{T}_{13}^5 E^5 & \mathcal{T}_{13}^6 E^6 & 0 & 0 \\
 \mathcal{T}_{23}^1 E^1 & \mathcal{T}_{23}^2 E^2 & \mathcal{T}_{23}^3 E^3 & \mathcal{T}_{23}^4 E^4 & \mathcal{T}_{23}^5 E^5 & \mathcal{T}_{23}^6 E^6 & 0 & 0 \\
 \mathcal{U}_3^1 \hat{E}^1 & \mathcal{U}_3^2 \hat{E}^2 & \mathcal{U}_3^3 \hat{E}^3 & \mathcal{U}_3^4 \hat{E}^4 & \mathcal{U}_3^5 \hat{E}^5 & \mathcal{U}_3^6 \hat{E}^6 & 0 & -\bar{\mathcal{U}}_3^1 \\
 \mathcal{T}_{33}^1 \hat{E}^1 & \mathcal{T}_{33}^2 \hat{E}^2 & \mathcal{T}_{33}^3 \hat{E}^3 & \mathcal{T}_{33}^4 \hat{E}^4 & \mathcal{T}_{33}^5 \hat{E}^5 & \mathcal{T}_{33}^6 \hat{E}^6 & 0 & -\bar{\mathcal{T}}_{33} \\
 \mathcal{T}_{13}^1 \hat{E}^1 & \mathcal{T}_{13}^2 \hat{E}^2 & \mathcal{T}_{13}^3 \hat{E}^3 & \mathcal{T}_{13}^4 \hat{E}^4 & \mathcal{T}_{13}^5 \hat{E}^5 & \mathcal{T}_{13}^6 \hat{E}^6 & 0 & 0 \\
 \mathcal{T}_{23}^1 \hat{E}^1 & \mathcal{T}_{23}^2 \hat{E}^2 & \mathcal{T}_{23}^3 \hat{E}^3 & \mathcal{T}_{23}^4 \hat{E}^4 & \mathcal{T}_{23}^5 \hat{E}^5 & \mathcal{T}_{23}^6 \hat{E}^6 & 0 & 0
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 U_1^1 \\
 U_1^2 \\
 U_1^3 \\
 U_1^4 \\
 U_1^5 \\
 U_1^6 \\
 \bar{U}_1^R \\
 \bar{U}_1^T
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 \bar{\mathcal{U}}_3^1 \bar{U}_1^I \\
 \bar{\mathcal{T}}_{33} \bar{U}_1^I \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0
 \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

donde $\hat{E}^q = (E^q)^{-1} = \exp(i\omega s_3^q d/2)$.

El sistema puede ser resuelto para el coeficiente de reflexión $R = \bar{U}_1^R / \bar{U}_1^I$ o para el coeficiente de transmisión $T = \bar{U}_1^T / \bar{U}_1^I$. Este último sirve para simular el experimento de goniometría ultrasónica, donde una placa sólida anisótropa se encuentra sumergida en un fluido entre dos transductores, donde uno emite pulsos ultrasónicos que son recibidos por el otro y convertidos en una señal eléctrica. Como el sistema contempla las ecuaciones de continuidad en la interfase y ondas viajando en ambos sentidos, los coeficientes que surgen al resolver el sistema dan lugar a todos los ecos que se generan en el sistema bajo la suposición de onda plana. Si se considera $\bar{U}_e$ como la amplitud de desplazamiento que se genera perpendicular a la cara del emisor, entonces el movimiento en el fluido a la altura del receptor (sin placa interpuesta) es

$$\bar{u}_e = \bar{U}_e \exp(i\omega(s_1 d^{er} \sin(\theta^I) + \bar{s}_3 d^{er} \cos(\theta^I))), \quad (3.18)$$

donde d^{er} es la distancia entre transductores. Este caso se esquematiza en la Fig. 3.11. Teniendo en cuenta que en el fluido la amplitud de desplazamiento en la dirección x_1

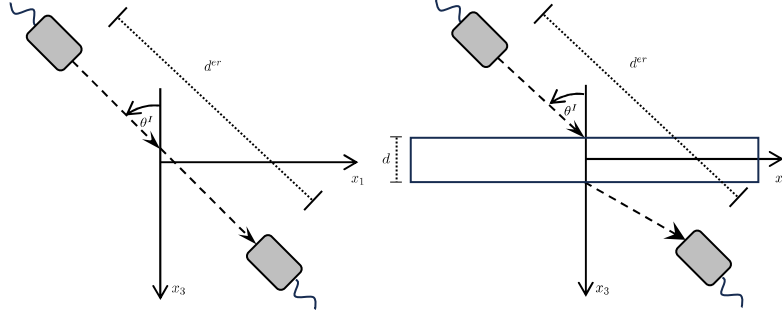


Figura 3.11: Izquierda. Transductores sin placa. Derecha. Transductores con placa. El cambio en el camino al introducir la placa sólida requiere una corrección de fase.

es $\bar{U}_1 = \bar{U}_e \sin(\theta^I)$, entonces el coeficiente de transmisión relaciona los desplazamientos como $T = \bar{U}_1^T / \bar{U}_1^I = \bar{U}_e^T / \bar{U}_e^I$, de forma que el desplazamiento a la altura del receptor introduciendo la placa sólida se puede expresar como

$$\begin{aligned} \bar{u}_e &= \bar{U}_e T \exp(i\omega(s_1 d^{er} \sin(\theta^I) + \bar{s}_3(d^{er} \cos(\theta^I) - d))) \\ &= \bar{U}_e T \exp(i\omega\bar{s}(d^{er} - d \cos(\theta^I))), \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde $\exp(-i\omega\bar{s}d \cos(\theta^I))$ representa una corrección de fase necesaria al introducir el coeficiente de transmisión que depende del ángulo de incidencia polar y $\bar{s} = 1/c_f$. El espectro de la señal adquirida en ausencia de la placa $\Gamma(\omega)$ es proporcional a la amplitud de desplazamiento generada por el emisor como $\Gamma(\omega) \propto \bar{U}_e \exp(i\omega\bar{s}d^{er})$. Entonces, la señal recibida por el receptor se puede reducir a

$$S^T(\omega) = \Gamma(\omega)T(\omega) \exp(-i\omega\bar{s}d \cos(\theta^I)), \quad (3.20)$$

Finalmente, si se recupera la dependencia temporal de las ecuaciones $\exp(-i\omega t)$ y se aplica la transformada de Fourier, entonces se obtiene la señal temporal que recibe el transductor receptor como

$$s^t(t) = \int_{-\infty}^{\infty} S^T(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega. \quad (3.21)$$

Utilizando este análisis, el modelo contempla ondas pulsadas. Además, el modelo supone que los transductores son ideales por lo que emiten y reciben ondas planas. El análisis para transductores reales, de dimensiones finitas, se aborda en el capítulo 4.

3.4. Optimización por simulación de señales

Para evitar las desventajas asociadas a la aproximación de medio infinito (MPI) y la parametrización de la velocidad, mostradas en la sección 3.2, en este trabajo se adopta un método de simulación. Partiendo de un tensor de constantes elásticas, se aplica el

modelo para medios finitos (MPF) 3.3 y se simulan las señales de un experimento. Estas se comparan directamente (sin parametrizar la velocidad) con las señales experimentales y el error entre ellas se utiliza en aproximaciones sucesivas para encontrar un mínimo global que corresponda con las propiedades elásticas, como se muestra en la Fig. 3.12. Las cotas y estimaciones iniciales son definidas a partir de la teoría de homogeneización elástica descrita en el capítulo 5 y la aplicación de esta metodología se realiza en el capítulo 6 sobre señales experimentales adquiridas para materiales reales. Haciendo un resumen

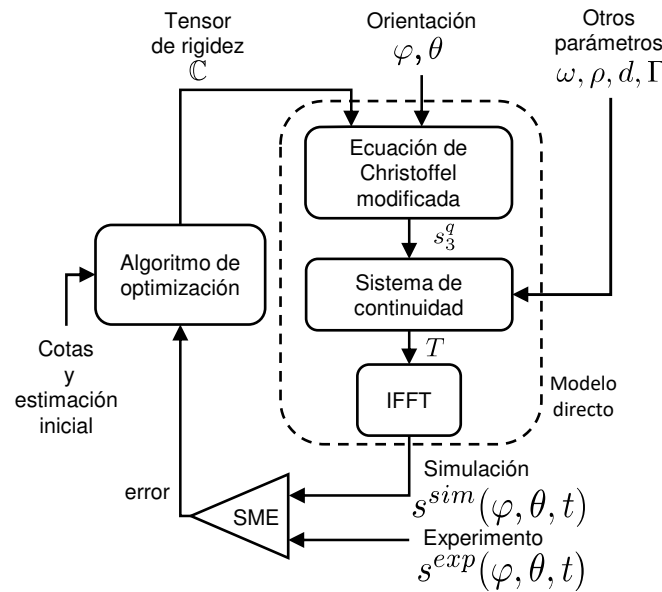


Figura 3.12: Optimización con modelo para medios finitos. En lugar de parametrizar la velocidad, se simula un experimento y se compara con la señal experimental.

del análisis anterior, las principales ventajas de este método son que:

- Se puede aplicar para espesores delgados, aun cuando no se puedan identificar ecos individuales.
- La simulación no distingue entre propagación de tipo volumétrica o de placa, por lo que es igualmente aplicable en espesores gruesos y medianos.
- Se puede aplicar a frecuencias bajas, mejorando el carácter homogeneizador de las ondas.
- Contempla la existencia de ondas evanescentes en el medio sólido.
- Incluye la amplitud de los pulsos, por lo que abarca información de polarización. Por ende no puede incurrir en el error del compañero anómalo y además permite caracterizar los componentes visco-elásticos.
- No requiere parametrizar la velocidad, por lo que todos los ecos son considerados en el ajuste. Esto contrarresta la pérdida de sensibilidad que existe para muestras delgadas.

- No requiere intervención humana para la distinción de modos de propagación.

3.4.1. Comparación entre modelos: MPI vs. MPF

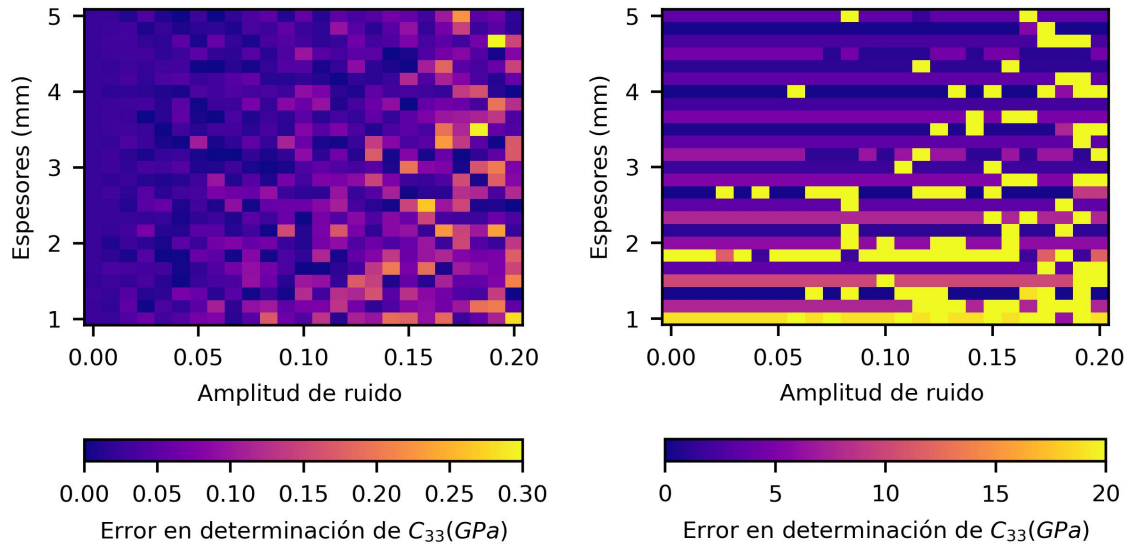
En esta sección se da un ejemplo para comparar dos tipos de ajustes: el MPI por parametrización de la velocidad y el MPF por simulación. El campo ultrasónico normal a la placa ($\theta = \varphi = 0^\circ$), suponiendo simetría ortótropa, depende solo de la constante elástica C_{33} de modo que la ecuación de Navier 2.19 se reduce a

$$C_{33} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} = \rho \ddot{u}_3, \quad (3.22)$$

por lo que la constante se puede determinar parametrizando la velocidad como $C_{33} = \rho c_n^2$ donde c_n es la velocidad medida en la dirección normal a la placa. Se realizó una simulación para acero policristalino cuyo tensor de rigidez se da en el apéndice H, variando el espesor y el nivel de ruido de la señal. Este último consiste en agregar a cada muestra un valor cuya función de densidad de probabilidad sigue una distribución gaussiana centrada en 0. La desviación estándar de la amplitud del ruido se varió entre 0 y 0.2 mientras que la amplitud máxima de la señal fue normalizada en 1. El espesor de la placa se varió entre 1 y 5 mm. Además, se agregó un pequeño error en el ángulo de incidencia para simular una condición experimental más real. El pulso utilizado durante la simulación es una señal de banda ancha con frecuencia central en 10 MHz y espectro con distribución gaussiana. La determinación de C_{33} por simulación se hace ajustando solo el valor de esta constante en el MPF definido en la sección 3.3. El ajuste sigue un esquema similar al de la Fig. 3.12. Los resultados se muestran en la Fig. 3.13a. La determinación de C_{33} por parametrización de velocidad se hace determinando el ToF como la posición temporal en la que se encuentra el mínimo de la señal a partir de la cual se calcula la velocidad normal. El ajuste sigue un esquema similar al de la Fig. 3.1. Los resultados se muestran en la Fig. 3.13b.

El ajuste por simulación del MPF muestra bajos errores, pero que en términos generales crecen con la amplitud de ruido y decrecen con el espesor de la placa. Por otro lado, el método por parametrización de velocidad muestra errores varias veces más altos. En primer lugar, se observa un mal desempeño como función de la amplitud de ruido. Esto se puede explicar debido a que en la medida que crece el ruido es posible que el segundo eco tenga mayor amplitud que el primero, como se muestra en la Fig. 3.14. El ToF, al estar determinado a partir de la ubicación del máximo, en este caso, confunde el segundo eco con el primero, lo que produce un error grande en la determinación de la constante.

Por otro lado, en la Fig. 3.13b, se observa que el error se mantiene para un espesor dado y que varía con el espesor pero de forma no monótona, dando lugar a franjas horizontales. Esto se puede explicar a partir de que la parametrización de velocidad está limitada por la resolución de muestreo de la señal, por consiguiente el ToF solo se puede determinar en pasos discretos. En la Fig. 3.15 se muestra cómo una mayor frecuencia de muestreo puede mejorar la determinación de la ubicación del máximo de la señal. En ambos casos la señal cumple con el teorema de Nyquist. El ajuste por simulación no se ve afectado



(a) Error por ajuste bajo el modelo para medios finitos (MPF). (b) Error por parametrización de velocidad bajo aproximación de medios infinitos (MPI).

Figura 3.13: Error en la determinación de C_{33} como función de la amplitud de ruido y del espesor de la probeta.

por este fenómeno, ya que simula la señal incluyendo el muestreo de la misma. Si la

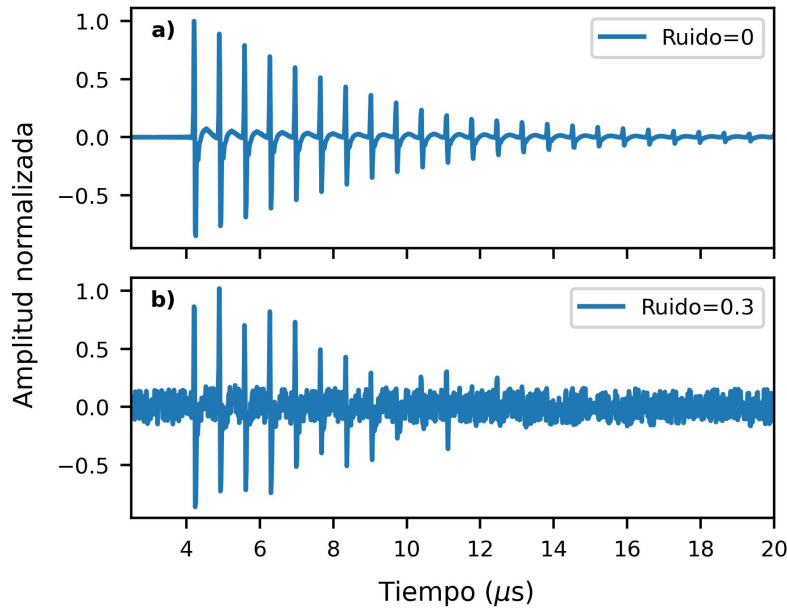


Figura 3.14: Efecto del ruido en la señal ultrasónica. A. Sin ruido. B. con un ruido de amplitud 0.3. El ruido entorpece la determinación del ToF. Este fenómeno no impacta considerablemente el ajuste por simulación.

propiedad buscada, en este caso C_{33} , se puede estimar, entonces esta estimación puede ser utilizada para limitar el rango temporal en el que se busca el ToF, y de esta manera se disminuye el error en la determinación del máximo provocada por la presencia de ruido. Aplicando este paso en la simulación se obtiene el error en la determinación de C_{33} que se

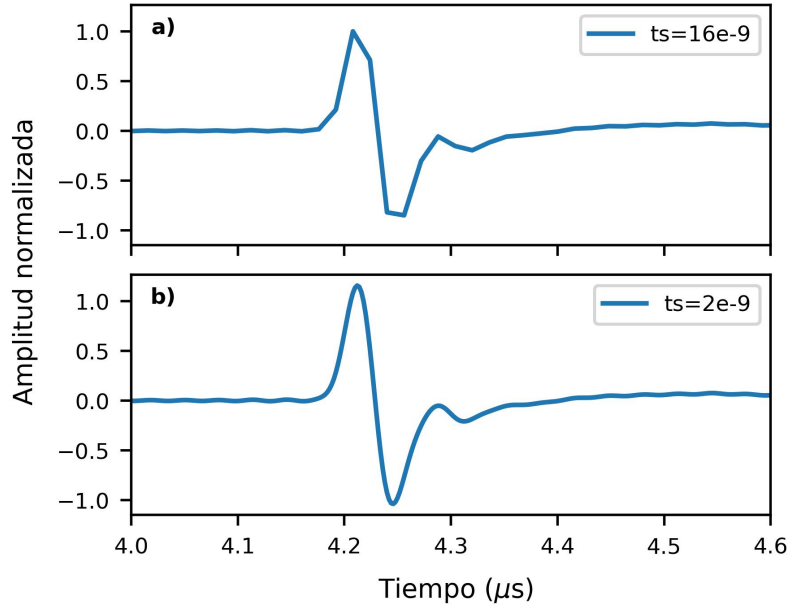


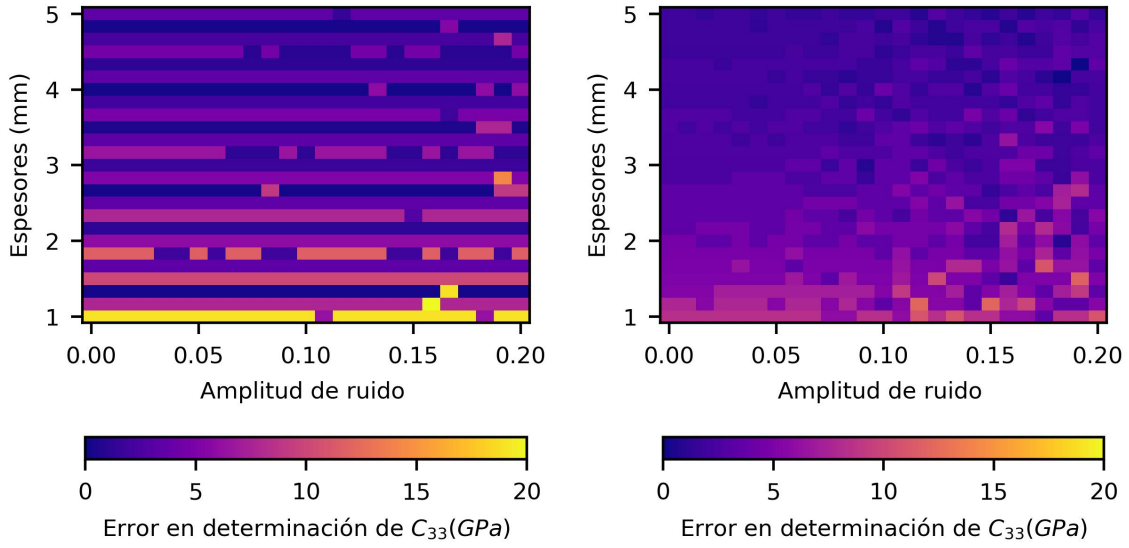
Figura 3.15: Efecto de la frecuencia de muestreo en la señal ultrasónica que repercute en la parametrización de la velocidad. ts es el tiempo entre dos muestras consecutivas. A. $ts=16\text{e-}9$ s. B. $ts=2\text{e-}9$ s. Este fenómeno no impacta considerablemente el ajuste por simulación.

muestra en la Fig. 3.16a. Si además se interpola la señal, entonces es posible disminuir el error introducido por una frecuencia de muestreo baja. Aplicando una interpolación de 10 veces se obtiene el error en la determinación de C_{33} que se muestra en la Fig. 3.16a. A pesar de aplicar estos pasos, la determinación por simulación resulta en menores errores que en la determinación por parametrización de la velocidad, por lo que la primera es la utilizada en este trabajo.

3.5. Cálculo numérico en GPU

La principal desventaja del MPF, desarrollado en la sección 3.3, es que es significativamente más costoso que el MPI, desarrollado en la sección 2.3, y dado que la optimización requiere un gran número de evaluaciones del modelo directo, este costo puede ser prohibitivo. El modelo directo para medios infinitos consiste esencialmente en resolver la ecuación de Christoffel (2.23), cuyos autovalores son las velocidades de propagación.

Por otro lado, la evaluación del modelo directo para medios finitos es más compleja y consiste en los siguientes pasos. Para un ángulo de incidencia azimutal φ se realiza la rotación en el tensor de rigidez con la Ec. 3.1 y para un ángulo de incidencia polar θ se calcula la componente común proyectada en la interfaz s_1 (3.5). Con estos datos se construye la ecuación de Christoffel modificada para interfases (3.8) a partir de la cual surge un polinomio sexto grado cuyas raíces, encontradas por medio del determinante, representan las seis componentes verticales de “slowness” s_3^q de las ondas parciales que viajan dentro del material. Estas raíces son reintroducidas en la ecuación de Christoffel para



(a) Al introducir una estimación de la constante buscada. (b) Al interpolar la señal temporal (10 veces).

Figura 3.16: Disminución del error en la determinación de C_{33} por parametrización de la velocidad con el MPI. Aun aplicando estas correcciones, el error resulta mayor que con la determinación por simulación.

determinar la polarización a partir de las amplitudes de desplazamiento normalizadas $\mathcal{U}_2^q$ y $\mathcal{U}_3^q$ que se calculan con las Ecs. 3.9. Luego, a través de las relaciones constitutivas y la ley geométrica, la Ec. 3.10 se utiliza para encontrar las amplitudes de tensión normalizadas $\mathcal{T}_{33}^q$, $\mathcal{T}_{13}^q$ y $\mathcal{T}_{23}^q$. Estos componentes se utilizan para definir las ecuaciones de desplazamiento (3.11) y tensión (3.12); y, a través de las ecuaciones de continuidad de las dos interfases fluido-sólido (3.2 y 3.3), se construye el sistema de ecuaciones de 8×8 (3.17) para el sólido inmerso. Este sistema se resuelve para el coeficiente de transmisión T , el cual se lleva al dominio del tiempo por medio de la transformada de Fourier (3.21) y representa la simulación de un punto de goniometría ultrasónica.

Un experimento típico consta de 12 puntos en φ por 200 puntos en θ por 256 puntos en ω , y para cada combinación de variables se deben repetir los pasos descritos en esta sección. El cálculo secuencial que se realiza en una unidad central de procesamiento (CPU) resulta lento para esta tarea, por lo que se optó por implementar este cálculo en arquitectura para unidades de procesamiento gráficas (GPU). Esta difiere de la CPU en que consta de un gran número de núcleos, por lo que puede realizar una amplia cantidad de cálculos en paralelo con mayor eficiencia. Como el problema consta de un mismo cálculo repetido un considerable número de veces, es altamente paralelizable lo que implica una reducción considerable del tiempo de cómputo. Se llevó a cabo la implementación en GPU utilizando la biblioteca CuPy [26] que se utiliza de forma similar a la biblioteca NumPy [27] para Python, pero que se ejecuta en GPU. La paralelización del modelo directo se realizó en las variables del experimento φ , θ , ω , es decir que un experimento se computa de manera simultánea, pero luego, durante la optimización, la evaluación de cada tensor se realizó

de forma secuencial. En esta implementación se utilizó una placa Nvidia RTX 3060 con 12 GB de memoria VRAM.

Suponer que el material tiene simetrías reduce la complejidad del cálculo y reduce el tiempo de cómputo. Se estima que por esta razón, en la literatura, cuando se trata de métodos que contemplan las interfases, solo se encuentran trabajos que imponen simetría ortótropa o mayor [8, 28-31].

3.5.0.1. Simetría monoclinica

Si el material posee al menos simetría monoclinica, i.e., simetría de reflexión en el plano de la muestra (x_1x_2), entonces el número de constantes independientes se reduce a 13 y se obtienen ciertas ventajas para el cálculo numérico². En primer lugar, el plano de simetría de reflexión implica que los componentes s_3^q de las tres ondas que viajan en $x_3 > 0$ son opuestos, e iguales en módulo, a los componentes s_3^q de las tres ondas que viajan en $x_3 < 0$. Por esta razón, el polinomio que surge de la Ec. 3.8 se puede expresar como un polinomio de tercer grado cuyas raíces se pueden calcular analíticamente por el método de Cardano [32], el cual resulta varias veces más rápido que el método numérico de autovalores de la matriz compañera aplicado para el polinomio de sexto grado del caso triclinico [33]. Luego, el sistema de continuidad de la Ec. 3.17, presenta simetrías que permiten el cálculo de su determinante por sus cofactores y, por lo tanto, permite expresar el coeficiente de transmisión T de forma analítica a través de la regla de Cramer [34]. Este método es varias veces más rápido que la resolución numérica de la matriz llevada a cabo por la rutina *gesv* de LAPACK [35] ejecutada a través de la biblioteca SciPy para Python [36].

En la Fig. 3.17a se muestra la proyección de la superficie de “slowness” del modo longitudinal calculada para un monocristal de silicio con la dirección $\langle 100 \rangle$ normal al plano de la muestra (x_1x_2), cuyo tensor de rigidez se incluye en el apéndice H. En concordancia con la simetría cristalina cúbica, la superficie de “slowness” presenta, entre otras, simetría de reflexión en el plano x_1x_2 . Dado que el sonido tiene simetría antipodal o centro-simetría, entonces la simetría de reflexión en el plano x_1x_2 también se expresa como un eje de rotación binario (180°) normal al plano, es decir, en la dirección x_3 . En la Fig. 3.17b se repite el cálculo anterior, pero esta vez con la dirección $\langle 111 \rangle$ normal al plano x_1x_2 . En esta orientación se observa que la superficie no se mantiene invariante ante una rotación de 180° en torno a x_3 , por lo que no posee simetría de reflexión en el plano x_1x_2 . Es decir, aunque el material presenta simetría cúbica, si esta no está alineada con los ejes de referencia, entonces se pierde la ventaja computacional de la aproximación de simetría monoclinica. Como no siempre es posible conocer la alineación de los ejes de simetría a priori, uno de los objetivos de este trabajo es evitar la restricción de simetrías elásticas, por lo que se supone a priori que todos los materiales son macroscópicamente triclinicos, como se detalla en el capítulo 6.

²Las simetrías elásticas, sus orígenes y sus consecuencias se describen en el capítulo 5

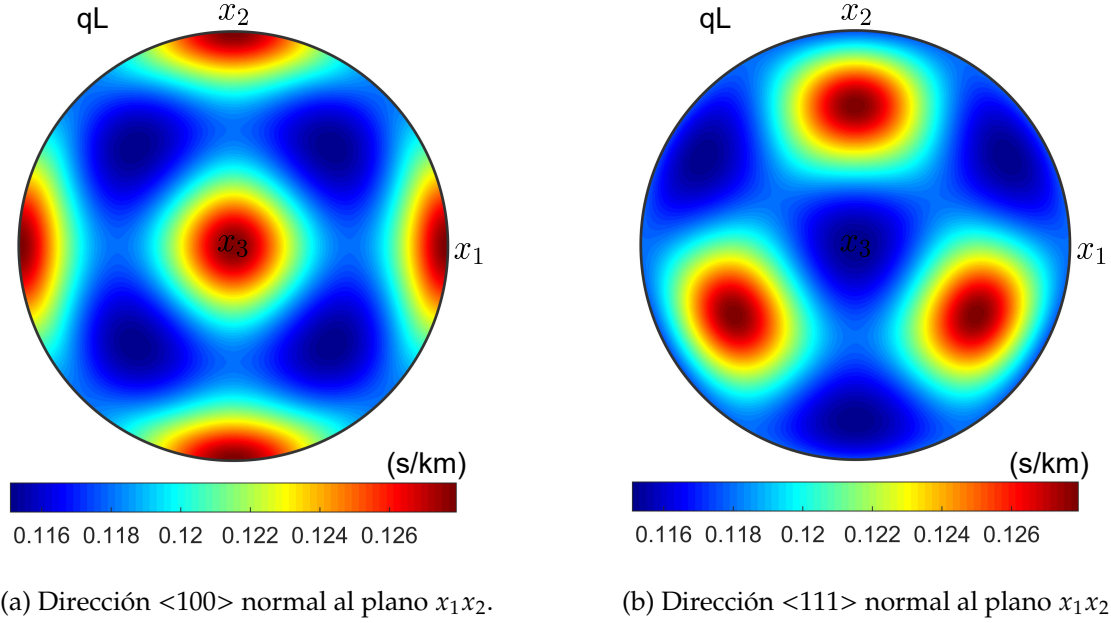


Figura 3.17: Proyección de la superficie de “slowness” para silicio monocristalino. Mientras que la orientación del material en la Fig. 3.17a presenta simetría de reflexión en el plano x_1x_2 , la orientación del material en la Fig. 3.17b no.

3.5.0.2. Tiempo de cómputo

Posteriormente, la inversión de constantes elásticas por medio de un algoritmo de optimización requiere la simulación de alrededor de 5000 experimentos, uno por cada iteración o individuo, por lo que la reducción de tiempo provista por la implementación en GPU resulta crucial para el método. En la Tabla 3.1 se muestra la comparación del tiempo de cómputo entre CPU y GPU. El cálculo corresponde a la simulación de un experimento de 12φ por 200θ por 256ω . Se observa que para el MPI el cálculo en CPU es más rápido. Este se puede deber a que para el cálculo en GPU existe un tiempo fijo que se utiliza para escribir y leer la información desde la CPU y esto puede limitar las ventajas del uso de la GPU. Por otro lado, para el MPF sí se observa una mejora de más de un orden de magnitud. Esto hace que un ajuste que podría tardar más de una hora se reduzca a menos de diez minutos.

Modelo	Simetría elástica	Tiempo de cómputo medio (ms)	
		CPU	GPU
medio infinito (MPI)	monoclínica	2.0	5.0
	triclínica	2.2	6.2
medio finito (MPF)	monoclínica	85.0	9.5
	triclínica	1360.1	95.4

Tabla 3.1: Comparación de tiempo de cómputo para CPU y GPU.

HAZ FINITO

4.1. Introducción

Una dificultad de la goniometría ultrasónica reside en que las ondas en incidencia oblicua viajan dentro del material que actúa como guía de onda, generando el desplazamiento lateral de los ecos sucesivos, como se mostró en la Fig. 3.4. El modelo de onda plana para medios finitos (MPF), desarrollado en la sección 3.3, contempla este fenómeno, pero rara vez se ajusta a los experimentos porque el transductor receptor de dimensiones finitas no alcanza a adquirir toda la energía dispersada, como se esquematiza en la Fig.4.1.

Es decir, que los transductores reales no emiten ni captan ondas planas. Un modelo de haz finito puede utilizarse para simular este fenómeno, pero requiere la integración doble de todos los vectores de onda existentes debido a la dispersión del haz, lo cual incrementa rápidamente la complejidad y tiempo computacional. Dado que el ajuste del modelo a los datos experimentales se hace a partir de un proceso iterativo que requiere numerosas evaluaciones, contar con una configuración experimental que se aproxime suficientemente a la propagación de onda plana evitaría el requisito de un modelo de haz finito, por ende reduciendo considerablemente la cantidad de operaciones.

Una solución parcial, denominada técnica de onda plana sintética [37, 38], consistió en la simulación de un receptor infinito mediante el escaneo lateral del campo y la suma de las señales recibidas. Investigaciones posteriores implementaron el uso de transductores grandes para lograr un mejor acuerdo entre el coeficiente de transmisión medido y la teoría de onda plana sin la necesidad de escanear el campo [28, 39, 40]. Más tarde se incorporó el uso de transductores fabricados a partir de fluoruro de polivinilideno (PVDF) [29, 41], que demostró ser una elección adecuada para esta aplicación.

El PVDF es un polímero piezoeléctrico que posee algunas ventajas sobre elementos cerámicos. En particular, su baja impedancia acústica es cercana a la del agua, por lo que no se requieren capas adaptadoras de impedancia, lo que resulta en pulsos cortos en el tiempo que poseen una excelente resolución temporal, útil en la determinación de tiempos de vuelo. A su vez, su amplio espectro es útil para la medición de coeficientes de reflexión y transmisión en función de la frecuencia. Además, el PVDF se comercializa en láminas

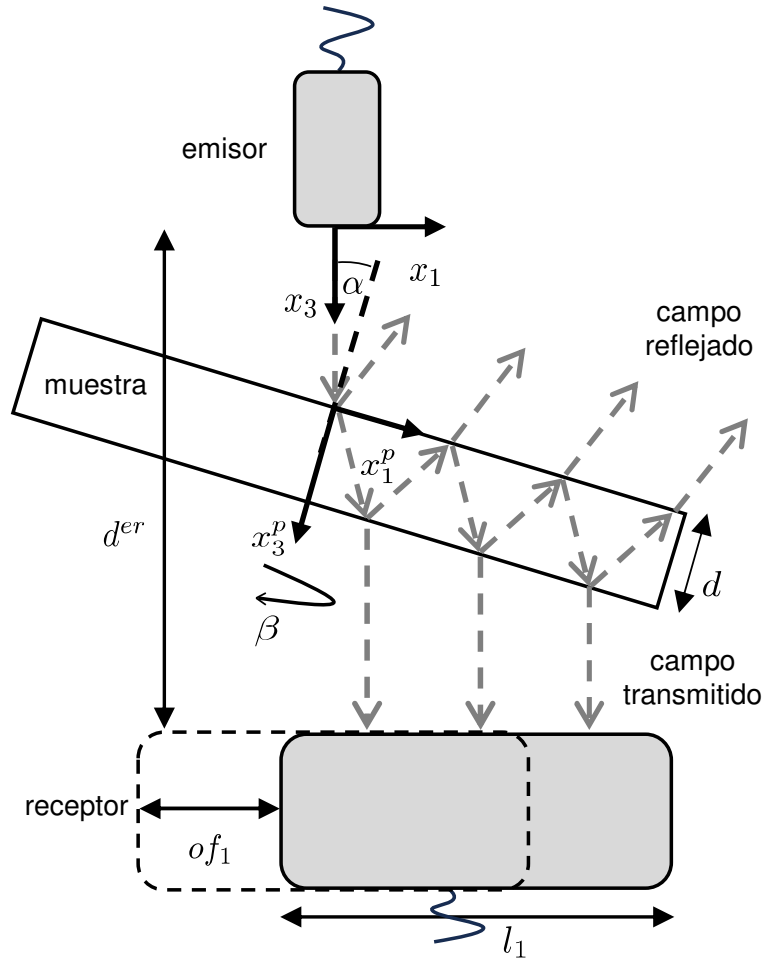


Figura 4.1: Diagrama de un experimento de goniometría ultrasónica. Las flechas con trazo punteado representan el fenómeno de ondas guiadas con fuga. En este caso el receptor tiene dimensiones mayores (l_1) y se encuentra desplazado en of_1 para poder adquirir el campo transmitido.

delgadas, que pueden ser utilizadas para fabricar transductores con formas arbitrarias [42]. Sin embargo, debido a su baja constante dieléctrica, altas pérdidas dieléctricas y bajo acoplamiento electromecánico, la impedancia capacitiva del PVDF domina eléctricamente por sobre la carga acústica [43]. La capacidad, al ser función del área, implica que la respuesta del transductor es altamente dependiente de la superficie del transductor [44]. Por lo tanto, mientras que incrementar la superficie del transductor mejora su aproximación al comportamiento de onda plana, también incrementa su capacidad y reduce su sensibilidad. Más detalles del análisis electromecánico de transductores ultrasónicos se incluyen en el apéndice A.

El objetivo presentado en este capítulo es diseñar un transductor de PVDF de superficie acotada cuya respuesta se asemeje a propagación de onda plana mediante la optimización de su forma y posición. Para este fin se explora el método del espectro angular en la sección 4.2 que sirve para simular campos ultrasónicos en el dominio del tiempo, las frecuencias

y los vectores de onda, así como también es útil para simular señales adquiridas en estos campos por transductores de dimensiones finitas. A este modelo se lo denomina como modelo de haz finito (MHF). La elección de utilizar un emisor pequeño y un receptor grande se fundamenta en la sección 4.3.3. La disminución del error entre propagación MPF y el MHF al aumentar la superficie y el desplazamiento lateral se muestran en las secciones 4.3.4 y 4.3.5. El proceso de optimización y su implementación en GPU se describen en la sección 4.4. Finalmente, el transductor construido se evalúa en comparación con la medición en materiales reales en la sección 4.5.2.

4.2. Modelo de haz finito para medios finitos (MHF)

4.2.1. Método de espectro angular

La velocidad particular de una onda v_i puede ser expresada a través de la descomposición de Helmholtz [45] como

$$v_i = [\nabla\phi]_i + [\nabla \times \psi_j]_i \quad (4.1)$$

donde ϕ es un potencial escalar asociado a una onda longitudinal y ψ_j un potencial vectorial asociado a una onda transversal. Para un medio no viscoso que no resiste deformación de corte, el potencial vectorial se anula y el potencial escalar puede ser descrito como una onda plana de la forma

$$\phi = \Phi \exp(i(k_1x_1 + k_2x_2 + k_3x_3 - \omega t)), \quad (4.2)$$

donde Φ es la amplitud del potencial, k_i es el componente del vector de onda en la dirección x_i , ω es la frecuencia angular, y t es el tiempo. El campo finito en la cara ($x_3 = 0$) de un transductor emisor puede descomponerse en una suma de ondas planas, suprimiendo el término temporal $\exp(-i\omega t)$, como

$$\phi(x_1, x_2, 0) = \frac{1}{4\pi^2} \iint \Phi^e(k_1, k_2) \exp(i(k_1x_1 + k_2x_2)) dk_1 dk_2. \quad (4.3)$$

donde Φ^e es la amplitud del potencial asociado al transductor emisor, que a la vez determina su directividad. Por otro lado, si el transductor actúa como un pistón, se supone el potencial de velocidad en el plano del emisor ($x_3 = 0$) como

$$\phi(x_1, x_2, 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } a^2 \geq x_1^2 + x_2^2 \\ 0 & \text{si } a^2 < x_1^2 + x_2^2, \end{cases} \quad (4.4)$$

considerando un transductor circular de radio a . A partir de esto, la amplitud de potencial de velocidad, o directividad del transductor, se obtiene como

$$\Phi^e(k_1, k_2) = \iint \phi(x_1, x_2, 0) \exp(-i(k_1x_1 + k_2x_2)) dx_1 dx_2. \quad (4.5)$$

Esta descomposición permite el cálculo del campo en un plano paralelo a la cara del transductor a través del factor de propagación $H = \exp(ik_3x_3)$ como

$$\phi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{4\pi^2} \iint \Phi^e(k_1, k_2) \exp(i(k_1x_1 + k_2x_2)) \exp(ik_3x_3) dk_1 dk_2, \quad (4.6)$$

donde, para un medio isótropo, el componente k_3 del vector de onda se obtiene como

$$k_3 = \begin{cases} \sqrt{k^2 - k_1^2 - k_2^2} & \text{si } k^2 \geq k_1^2 + k_2^2 \\ i\sqrt{k_1^2 + k_2^2 - k^2} & \text{si } k^2 < k_1^2 + k_2^2, \end{cases} \quad (4.7)$$

donde $k = \omega/c$ es el número de onda y c es la velocidad del sonido en el fluido. Cuando es real describe ondas propagativas y cuando es imaginario describe ondas inhomogéneas que decaen exponencialmente con la distancia. Por esto, las ondas inhomogéneas solo están presentes en la cercanía del transductor y por consiguiente los componentes imaginarios pueden omitirse en los cálculos [45]. Este procedimiento se denomina Método de Espectro Angular (“ASM” de “Angular Spectrum Method” en inglés), y tiene dos grandes ventajas. Una ventaja del método consiste en que el cálculo se puede implementar a través de la Transformada Rápida de Fourier (FFT), que al ser un algoritmo altamente optimizado es rápido. La Ec. 4.5 puede reescribirse como

$$\Phi^e(k_1, k_2) = FFT\{\phi(x_1, x_2, 0)\}, \quad (4.8)$$

y la Ec. 4.6 puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \phi(x_1, x_2, x_3) &= iFFT\{FFT\{\phi(x_1, x_2, 0)\}H(k_1, k_2, x_3)\} \\ &= iFFT\{\Phi^e(k_1, k_2)H(k_1, k_2, x_3)\}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

La suposición de que el transductor se comporta como un pistón, i.e., el potencial de la velocidad particular es igual para cualquier punto en la cara del transductor, no es un requisito del ASM y diferentes perfiles se pueden incluir en la Ec. 4.3. Modelos de elementos finitos pueden utilizarse para estimar dicho perfil [46, 47], sin embargo, para este trabajo se considera que la aproximación de pistón es suficiente.

4.2.2. Recepción del campo ultrasónico

A través de las relaciones de reciprocidad de Kino-Auld[48-50], la señal generada por un transductor receptor insonificado por este campo puede expresarse como

$$S^{fb}(d^{er}, \omega) = \frac{\rho_f \omega}{8\pi^2 P(\omega)} \iint k_3 \Phi^e(k_1, k_2) \exp(ik_3 d^{er}) \Phi^r(-k_1, -k_2) dk_1 dk_2, \quad (4.10)$$

donde el superíndice fb hace referencia al haz finito (“finite beam” en inglés), d^{er} es la distancia emisor-receptor, ρ_f es la densidad del fluido, P es la potencia eléctrica en los terminales del transductor, y $\Phi^r(-k_1, -k_2)$ es la directividad del receptor obtenida con la Ec. 4.5.

Una segunda ventaja del ASM consiste en que los coeficientes de dispersión en interfaces fluido-sólido son obtenidas usualmente para ondas planas. Por ende, el haz finito descompuesto en ondas planas puede propagarse a través de una interfase con la multiplicación del coeficiente de dispersión. Si una placa sólida anisótropa rotada se coloca entre los dos transductores, el coeficiente de transmisión obtenido al resolver la Ec. 3.15 relaciona el potencial incidente con el potencial transmitido como $\Phi^I(k_1, k_2)T(k'_1, k'_2) = \Phi^T(k_1, k_2)$, donde la rotación de la placa está incluida en los vectores de onda como $(k'_1(kx, ky), k'_2(kx, ky))$, a partir de una rotación pasiva descrita en la sección 4.2.4. Las ondas inhomogéneas que surgen en las interfaces sólido-líquido no son descartadas porque son críticas para el coeficiente T . El campo transmitido en el plano receptor se obtiene como

$$\phi(x_1, x_2, d^{er}) = \frac{1}{4\pi^2} \iint \Phi^e(k_1, k_2) \exp(i(k_1 x_1 + k_2 x_2)) T(k'_1, k'_2) \exp(ik_3 d_{er}) dk_1 dk_2, \quad (4.11)$$

y la señal eléctrica generada por el receptor inmerso en este campo es

$$S^{fb}(d^{er}, \omega) = \frac{\rho_f \omega}{8\pi^2 P(\omega)} \iint k_3 \Phi^e(k_1, k_2) T(k'_1, k'_2) \exp(ik_3 d^{er}) \Phi^r(-k_1, -k_2) dk_1 dk_2. \quad (4.12)$$

Las Ecs. 4.12 y 4.10 representan el Modelo de Haz Finito (MHF) con y sin la presencia de un sólido, respectivamente.

Por otro lado, si el transductor tiende a una superficie infinita, su directividad tiende a una función delta, i.e., solo permanece el componente normal $k_x = k_y = 0$ y se obtiene propagación de onda plana. En este caso la integral doble se reduce a

$$S^{pw}(d^{er}, \omega) = \frac{\rho_f \omega}{8\pi^2 P(\omega)} k_3(0, 0) T'(0, 0) \exp(ik_3(0, 0) d^{er}), \quad (4.13)$$

donde el superíndice pw hace referencia a la onda plana (“plane wave” en inglés), $k_3(0, 0) = k$ y $T'(0, 0) = T(k'_1(0, 0), k'_2(0, 0))$. Considerando $\frac{\rho_f \omega k}{8\pi^2 P(\omega)} = \Gamma(\omega)$ como el módulo de la respuesta al impulso del sistema adquirida en ausencia de la placa, el modelo de onda plana resulta en

$$S^{pw}(d^{er}, \omega) = \Gamma(\omega) T(\omega) \exp(ik d^{er}), \quad (4.14)$$

el cual es equivalente al MPF descrito en la sección 3.3 y la Ec. 3.20. Luego, la diferencia entre modelos se denomina error de haz finito (“FBE” de “finite beam error” en inglés) y se describe como

$$FBE = (|S^{pw}(d^{er}, \omega)| - |S^{fb}(d^{er}, \omega)|)^2. \quad (4.15)$$

Para errores lo suficientemente pequeños, la Ec. 4.14 puede utilizarse en lugar de la Ec. 4.12 evitando la carga numérica de la integral doble, lo cual representa el principal objetivo de este capítulo.

4.2.3. Ondas pulsadas (tiempo finito)

Típicamente, los campos ultrasónicos son finitos tanto en espacio como en tiempo, por lo que el análisis monocromático se expande al comportamiento de banda ancha

recuperando el término temporal $\exp(-i\omega t)$ con una transformada de Fourier adicional del dominio de frecuencias al dominio temporal para el potencial como

$$\phi(x_1, x_2, x_3, t) = \int \phi(x_1, x_2, x_3, \omega) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (4.16)$$

y para la señal recibida como

$$s(d^{er}, t) = \int S(d^{er}, \omega) \exp(-i\omega t) d\omega. \quad (4.17)$$

4.2.4. Sistema de coordenadas y rotación pasiva

En este capítulo se adopta un sistema de coordenadas localizado en la cara del transductor emisor, como se muestra en la Fig. 4.1. De acuerdo a esto, cada rotación de la placa requiere la rotación pasiva de los vectores de onda para el cálculo del coeficiente de transmisión $T(k'_1, k'_2)$, que se describe como

$$\begin{bmatrix} k'_1 \\ k'_2 \\ k'_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\beta) & -\sin(\beta) & 0 \\ \sin(\beta) & \cos(\beta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & 0 & \sin(\alpha) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\alpha) & 0 & \cos(\alpha) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{bmatrix}. \quad (4.18)$$

Esto representa una rotación en torno a un eje perpendicular a la normal a la placa, x_2^p , (rotación polar en α), seguido por una rotación de la placa en torno a su normal x_3^p (rotación azimutal en β). Esta estrategia posibilita el uso de un receptor compacto, ya que el desplazamiento del haz se da predominantemente en la dirección x_1 positiva independientemente del ángulo de rotación azimutal. Otros trabajos adoptan esquemas de rotación diferentes, por ejemplo en [41], por lo que el campo se dispersa en todas las direcciones y por lo que se requieren transductores de mayor superficie y con simetría radial. Es importante destacar que los ángulos de rotación en este capítulo son denominados α y β , en lugar de θ y φ adoptados en el resto de la tesis. Esto se debe a que los últimos hacen referencia al ángulo de incidencia que para un modelo onda plana coincide con los ángulos entre la normal del transductor y la normal de la placa. Para el caso del haz finito, la dispersión de haz hace que para una orientación del transductor existan un rango de ángulos de incidencia, por lo que se adopta esta distinción.

Un sistema de referencia localizado en la superficie de la placa, como aquel utilizado en la sección 3.3.1, requeriría la rotación del campo del potencial, produciendo un paso de muestreo no uniforme e imposibilitando el uso del algoritmo FFT estándar [51]. Por otro lado, la desventaja del sistema de referencia elegido aquí consiste en que para cada rotación, la matriz de autovectores se modifica, por lo que el coeficiente de transmisión debe recalcularse. Sin embargo, para el objetivo de este capítulo esta condición es preferida. El módulo del coeficiente de transmisión para una placa de acero SAE 304 de 1 mm de espesor cuyo tensor de rigidez se incluye en el apéndice H, para una rotación de $\alpha = 20^\circ$ y $\beta = 60^\circ$ a una frecuencia de 10 MHz se muestra en la Fig. 4.2.

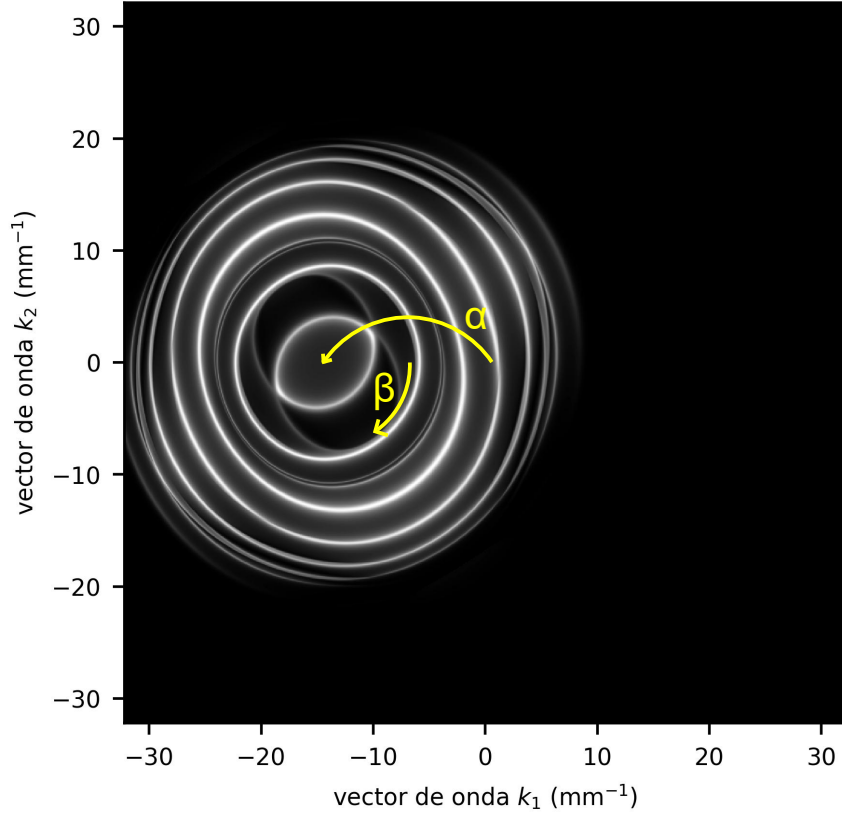


Figura 4.2: Coeficiente de transmisión de una placa de acero anisótropa rotada en $\alpha = 20^\circ$ y $\beta = 60^\circ$ para una frecuencia de 10 MHz. Las flechas muestran el desplazamiento de un punto luego de aplicar la rotación pasiva.

Adicionalmente, la presencia de la placa interrumpe la distancia recorrida en el agua, de modo que factor de propagación $\exp(ik_3x_3)$ en la Ec. 4.12 deviene en $\exp(i\Phi) = \exp(i(k_1d \sin(\alpha) + k_3(d^{er} - d \cos(\alpha))))$, que puede ser derivado con una rotación análoga a la mostrada en la Ec. 4.18.

4.2.5. Directividad analítica

Si bien la FFT mostrada en la Ec. 4.8 es aplicable a un transductor de cualquier forma plana, la Ec. 4.5 puede ser resuelta analíticamente [45] para un transductor circular como

$$\Phi(k_1, k_2) = 2\pi a^2 \phi_0 \frac{J_1\left(a\sqrt{k_1^2 + k_2^2}\right)}{a\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, \quad (4.19)$$

y para un transductor rectangular como,

$$\Phi(k_1, k_2) = l_1 l_2 \phi_0 \frac{\sin(\frac{k_1 l_1}{2}) \sin(\frac{k_2 l_2}{2})}{(\frac{k_1 l_1}{2})(\frac{k_2 l_2}{2})}. \quad (4.20)$$

donde J_1 es la función de Bessel de orden 1, ϕ_0 es un potencial de velocidad conocido, y a , l_1 , l_2 son el radio, longitud y ancho de un transductor, respectivamente. Estas ecuaciones son empleadas en la sección 4.3 cuando se estudia el campo producido por transductores con formas conocidas, mientras que la FFT de la Ec. 4.5 se utiliza en la sección 4.4 durante el procedimiento de optimización de la forma del receptor, cuando la Ec. 4.5 no tiene solución analítica.

4.3. Análisis de modelo de haz finito

4.3.1. Funciones de directividad para los transductores

Revisando la Ec. 4.12 se puede concluir que el MHF se aproxima al MPF solo cuando el producto de las funciones de directividad $\Phi^e \Phi^r$ se aproxima a una función delta de Dirac. De esta manera la integral doble se reduce al coeficiente de transmisión para onda plana, donde solo permanece el componente normal $k_x = k_y = 0$. Las Ecs. 4.19 y 4.20 son funciones de tipo sinc ($\sin(k)/k$) que se vuelven más angostas en la medida que el radio a o las longitudes l_1 o l_2 crecen. Por lo tanto, incrementar la superficie de los transductores hace que el MHF tienda al MPF. Sin embargo, el parámetro clave es el producto de directividades, por lo que una directividad ancha multiplicada por una directividad angosta aún produce un producto de directividades angosto. La Fig. 4.3 muestra la Ec. 4.19 calculada para $k_y = 0$ para dos pistones circulares a una frecuencia de 10 MHz radiando en agua ($c_w = 1490$ m/s), donde la directividad del emisor Φ^e corresponde con un radio de 3 mm y la directividad de receptor Φ^r corresponde a un radio de 10 mm. Como se puede observar, el producto de directividades $\Phi^e \Phi^r$ se aproxima mejor a la directividad del transductor grande.

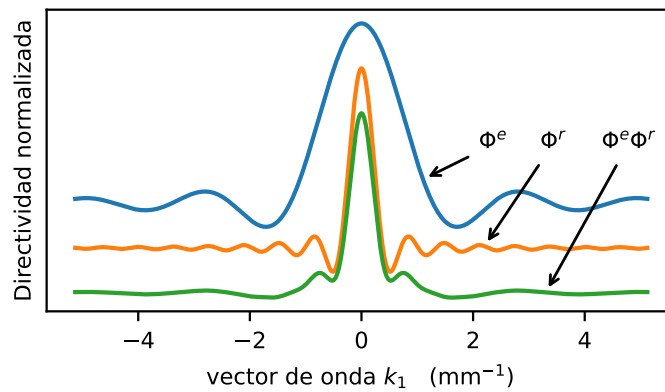


Figura 4.3: Funciones de directividad para dos pistones circulares a 10 MHz en agua. Φ^e corresponde a un radio de 3 mm, y Φ^r corresponde a un radio de 10 mm. $\Phi^e \Phi^r$ es el producto entre directividades. Cada función tiene un cero distinto para mejorar la visualización.

Utilizando el área bajo la curva como un “proxy” para el ancho de la directividad, la Fig. 4.4 muestra la integral del producto de directividades contra la relación de radios

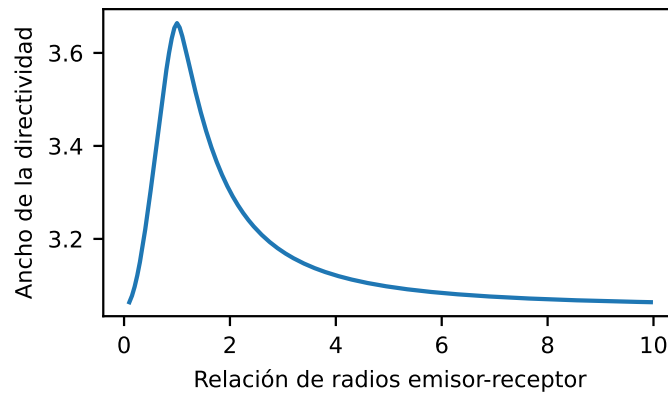


Figura 4.4: Ancho de la directividad como función de la relación de radios emisor-receptor para una superficie total fija.

emisor-receptor. Los cálculos fueron hechos para pistones circulares a 10 MHz radiando en agua para una superficie sumada de 1000 mm^2 . Se puede observar que el máximo ancho de directividad corresponde al caso en el que ambos transductores tienen el mismo diámetro (Relación=1), sugiriendo que, para una superficie sumada fija, es preferible contar con transductores de tamaños disímiles. A su vez, si se tienen transductores de dimensiones distintas, entonces es más efectivo incrementar el tamaño del transductor grande antes que el del transductor pequeño.

4.3.2. Visualización de campos

El coeficiente de transmisión corresponde a la placa de acero calculado en la sección 4.2.4. La señal temporal corresponde a un pulso gaussiano con frecuencia central de 10 MHz. La Fig. 4.5 muestra la expansión lateral del campo que corresponde a los ecos sucesivos generados en las interfases líquido-sólido de la placa sumergida. Cada eco se encuentra desplazado hacia la derecha (x_1 positivo) y retardado por el tiempo que tarda en viajar ida y vuelta dentro del material. Mientras que en este caso los ecos pueden ser claramente separados, para otros ángulos de rotación α u otros espesores, los ecos pueden superponerse en concordancia con la propagación de onda guiada. Alternativamente, si las Ecs. 4.6 y 4.11 no son transformadas al dominio temporal, pueden utilizarse para visualizar la energía incidente en el plano de recepción x_1x_2 ($x_3 = 80 \text{ mm}$). Estas ecuaciones son resueltas y sumadas para todas las frecuencias de interés. Las condiciones son las mismas que para la simulación anterior, pero la Fig. 4.6 se calcula para un emisor circular con radio de 3 mm, mientras que la Fig. 4.7 muestra un emisor rectangular ($l_1 = 20$ y $l_2 = 40 \text{ mm}$). Las figuras superiores (a) e inferiores (b) muestran el campo a la altura del plano de recepción sin y con la presencia de la placa sólida respectivamente. Puede observarse que el campo se expande hacia la derecha en concordancia con el esquema de la Fig. 4.1. Un pequeño desvío del haz en la dirección de x_2 positivas puede observarse, el cual se debe al torcimiento de haz para medios anisótropos descrito en las secciones 2.3.2 y 4.3.6.

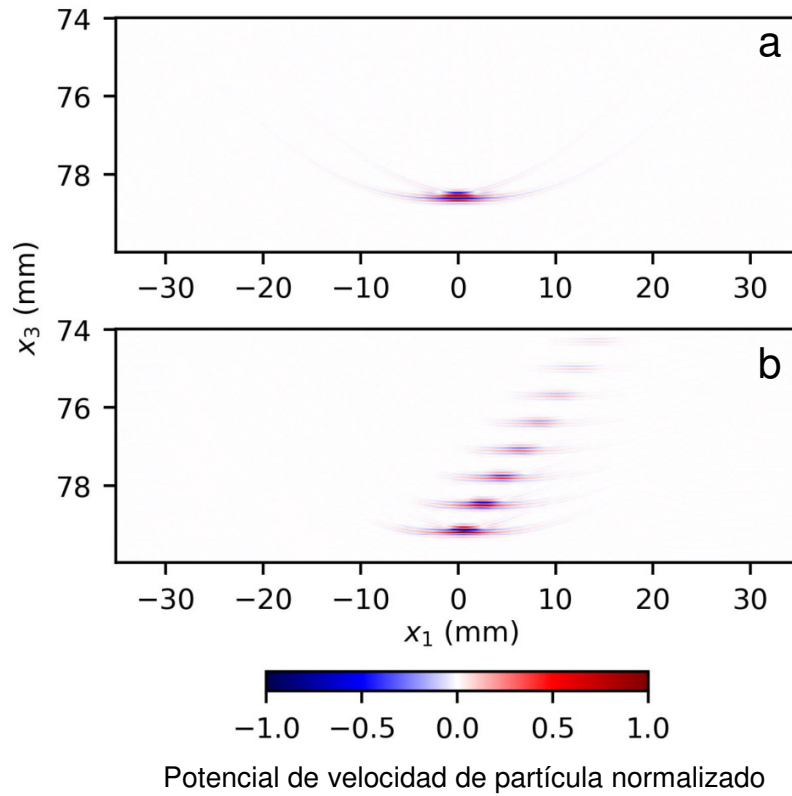


Figura 4.5: Simulación de campo ultrasónico en agua en el plano x_1x_3 para un emisor pulsado de 3 mm de radio. Las figuras, superior (a) e inferior (b), corresponden al caso sin y con la presencia de la placa de acero respectivamente.

4.3.3. Configuración emisor-receptor

Revisitando la Ec. 4.12 puede concluirse que el emisor y receptor son recíprocos y teóricamente sus funciones pueden ser intercambiadas sin modificar la respuesta medida. El concepto físico puede explicarse de dos maneras: un emisor de gran superficie produce un frente de onda plano y alargado, el cual se aproxima a propagación de onda plana. Aquí un receptor pequeño simplemente mide el campo en un punto en el espacio, asumiendo el rol de un hidrófono. En el caso opuesto, un emisor puntual produce un frente de onda esférico, mientras que un receptor de gran superficie es selectivo exclusivamente a los componentes del frente de onda perpendiculares a su superficie, filtrando efectivamente energía en incidencia oblicua. Ambas configuraciones, aunque no produzcan el mismo campo ultrasónico, sí generan las mismas señales recibidas, que idealmente se aproximan al MPF.

Las Figs. 4.6 y 4.7 muestran que el campo correspondiente al emisor grande, producen una distribución de energía más dispersa. Considerando el hecho que la muestra debe ser sujeta por un soporte, este tipo de campo podría interactuar con el mismo, produciendo reflexiones indeseadas o cambios en las condiciones de contorno. En otras palabras, aunque los transductores pueden ser teóricamente intercambiados, el campo localizado

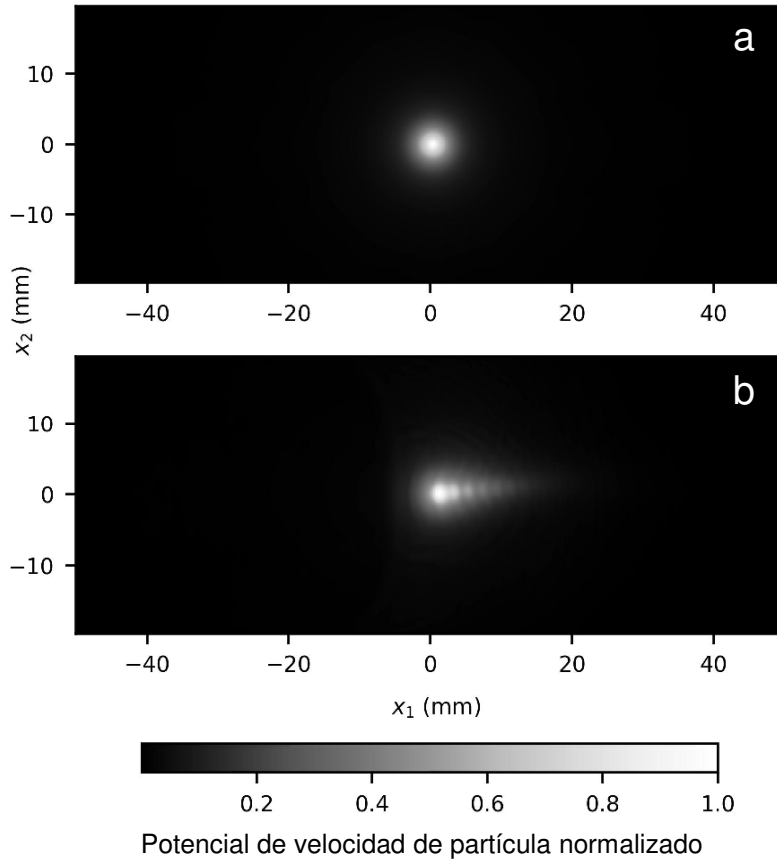


Figura 4.6: Campo ultrasónico en el plano x_1x_2 ($x_3 = 80$ mm) generado por un emisor de 3 mm de radio como la suma de todas las frecuencias de interés. La figura superior (a) y la inferior (b) corresponden a los casos sin y con la presencia de la placa de acero respectivamente.

generado por un emisor pequeño es elegido para disminuir la probabilidad de interacciones indeseadas. Debido a esto, en este trabajo la configuración de transductores consiste en un emisor circular pequeño (3 mm de diámetro) y un receptor de gran superficie de PVDF cuya forma se determina en la sección 4.4.

4.3.4. Longitud de receptor

Luego de que el campo llega al plano de recepción, las relaciones de Auld-Kino son utilizadas para simular las señales generadas por el receptor sometido a dicho campo, lo cual se describe con las Ecs. 4.10 y 4.12. En las Figs. 4.6 y 4.7 se puede observar que el desplazamiento del haz se da principalmente en la dirección x_1 positiva, por lo cual se realizaron cálculos para una longitud l_2 fija de 20 mm y para longitudes l_1 crecientes. El resto de los parámetros se mantienen iguales que en la sección 4.3.2. De acuerdo con el esquema en la Fig. 4.1, las señales en la Fig. 4.8 muestran que cuanto más ancho es el receptor, más ecos son capturados y menor es el FBE.

La periodicidad de estos ecos produce un efecto de filtro peine que puede ser observado

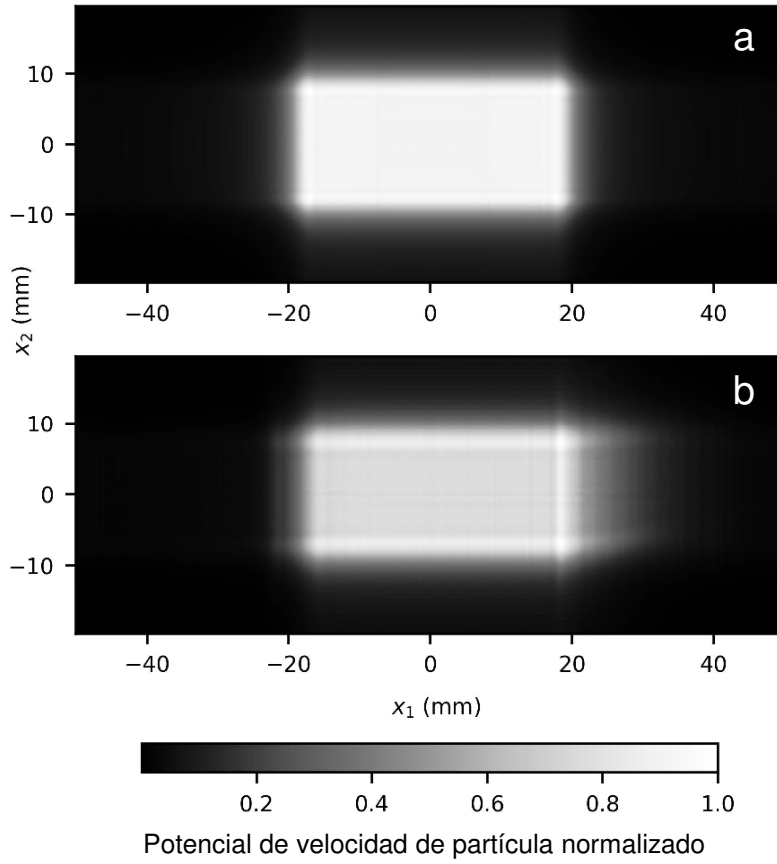


Figura 4.7: Campo ultrasónico en el plano x_1x_2 ($x_3 = 80$ mm) generado por un emisor rectangular ($l_1 = 20$ y $l_2 = 40$ mm) como la suma de todas las frecuencias de interés. La figura superior (a) y la inferior (b) corresponden a los casos sin y con la presencia de la placa de acero respectivamente.

en el dominio de las frecuencias como se mostró en la sección 2.4.1. Debido a esto, el espectro transmitido como función del ángulo de rotación se utiliza frecuentemente para estudiar ondas guiadas y fenómenos de dispersión. Los espectros transmitidos se simularon utilizando la Ec. 4.12 repitiendo las condiciones anteriores pero además variando el ángulo de rotación α entre 0° y 30° . Nuevamente, como se muestra en la Fig. 4.9 cuanto mayor es la dimensión l_1 , menor es el FBE.

4.3.5. Desplazamiento del receptor

Aunque hasta este punto se hizo aparente que el uso de receptores grandes se aproximan mejor al MPF, no se abordó la posición del mismo. Reflejando la sección 4.3.4, se usa la Ec. 4.12 para estudiar la señal recibida por un transductor cuadrado ($l_1 = l_2 = 20$ mm). Aquí, las longitudes se mantienen fijas, pero su desplazamiento en la dirección x_1 se incrementa desde 0 a 15 mm. Los resultados se muestran en la Fig. 4.10. Las señales se asemejan a las observaciones mostradas en [38] donde el campo transmitido se escanea

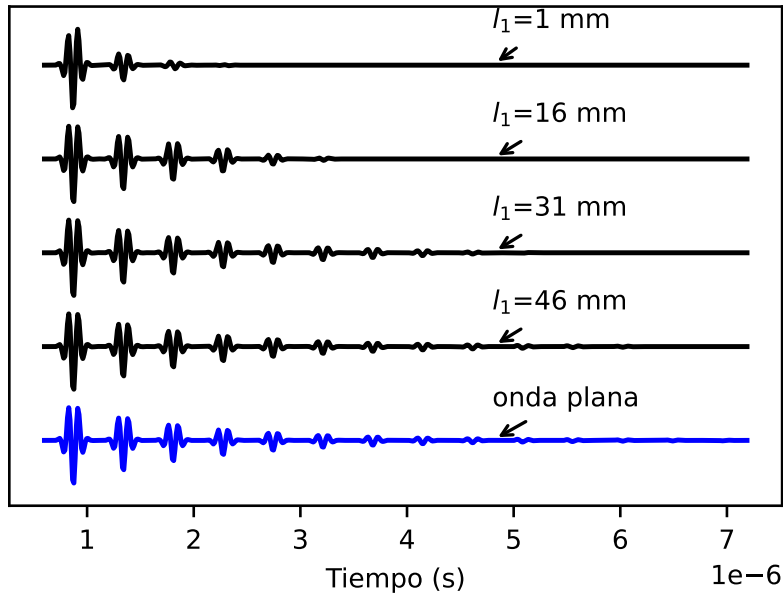


Figura 4.8: Simulación de las señales producidas por un receptor de largo variable l_1 en un campo transmitido a través de una placa de acero. A mayor largo, la señal recibida se aproxima mejor a la onda plana.

mediante el desplazamiento lateral de un transductor convencional. A medida que aumenta el desplazamiento se adquieren más ecos hasta un punto en el que los primeros ecos se empiezan a atenuar. Esto sugiere que hay un desplazamiento óptimo para reducir el FBE.

4.3.6. Torcimiento del haz en medios anisótropos

La propagación de ondas en medios isótropos se caracteriza porque la dirección en que fluye la energía es coincidente con la normal al frente de onda. Esto deja de suceder para medios anisótropos fuera de ejes de simetría, donde se observa el torcimiento de haz, que resulta en la discrepancia entre la velocidad de grupo y la velocidad de fase, como se mencionó en la sección 2.3.2. En medios muy anisótropos, como CFRP unidireccional, pueden existir torcimientos de haz mayores a 50° . Esto se ejemplifica en la Fig 4.11 repitiendo el procedimiento de la sección 4.3.2 pero cambiando el coeficiente de transmisión por uno correspondiente a CFRP unidireccional y con una rotación en $\alpha = 20^\circ$ y $\beta = 60^\circ$. El tensor de rigidez se incluye en el apéndice H. Dado que el plano de incidencia no constituye un plano de simetría, la energía se tuerce notoriamente de la dirección esperada en x_1 hacia la dirección x_2 , lo que implica que para esta dirección un receptor elongado en la dirección x_1 no sería ideal. Sin embargo, como el ángulo de torcimiento depende fuertemente de la rotación, la forma del detector que minimiza el error para todas las rotaciones debe ser buscada. Por esto, el procedimiento de optimización de forma se llevó a cabo para distintos ángulos de rotación y para distintos materiales.

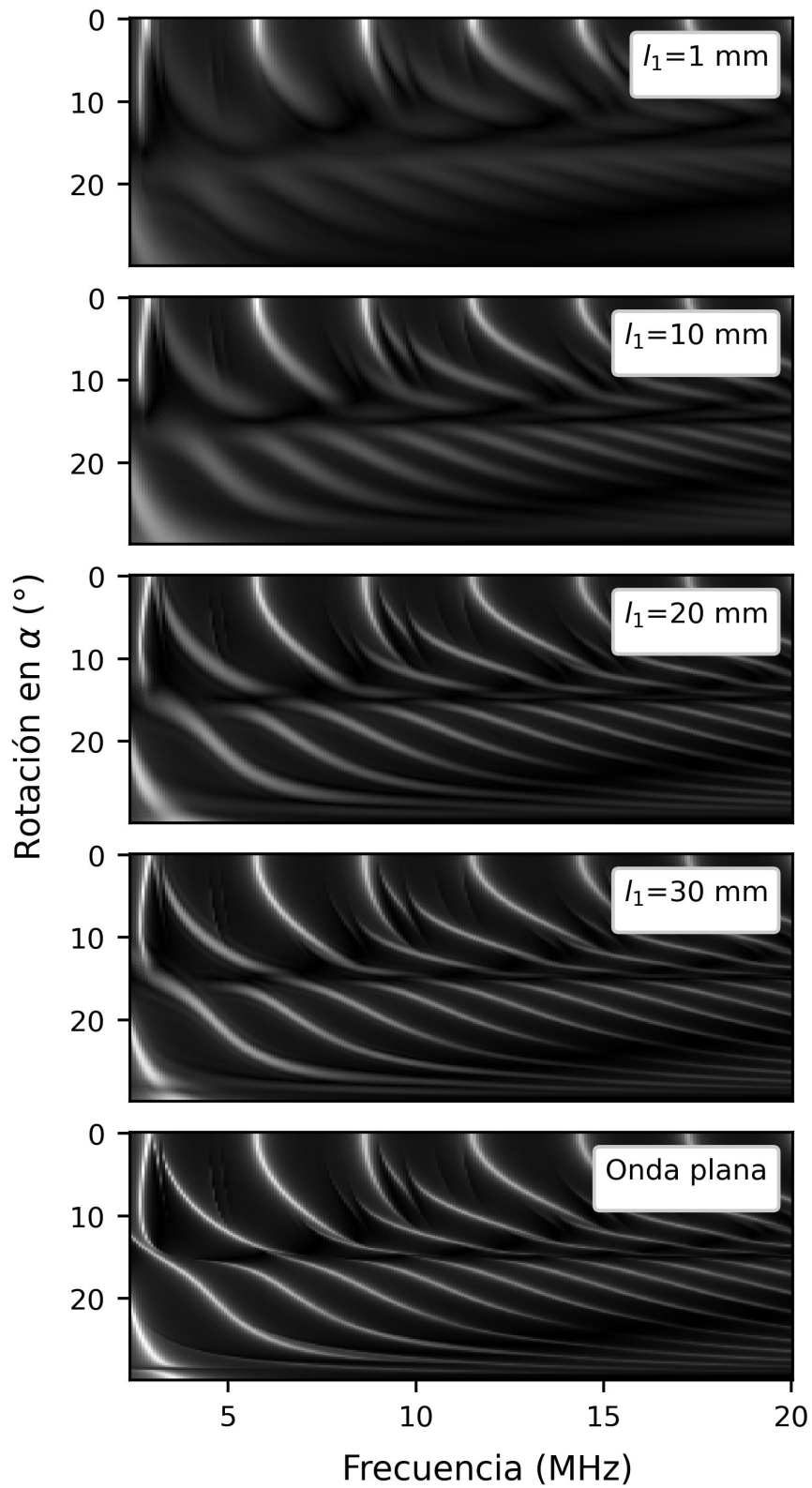


Figura 4.9: Simulación del espectro de las señales producidas por un receptor de largo variable l_1 en un campo transmitido a través de una placa de acero en un rango de ángulos α . A mayor largo el espectro de la señal recibida se aproxima mejor a la onda plana.

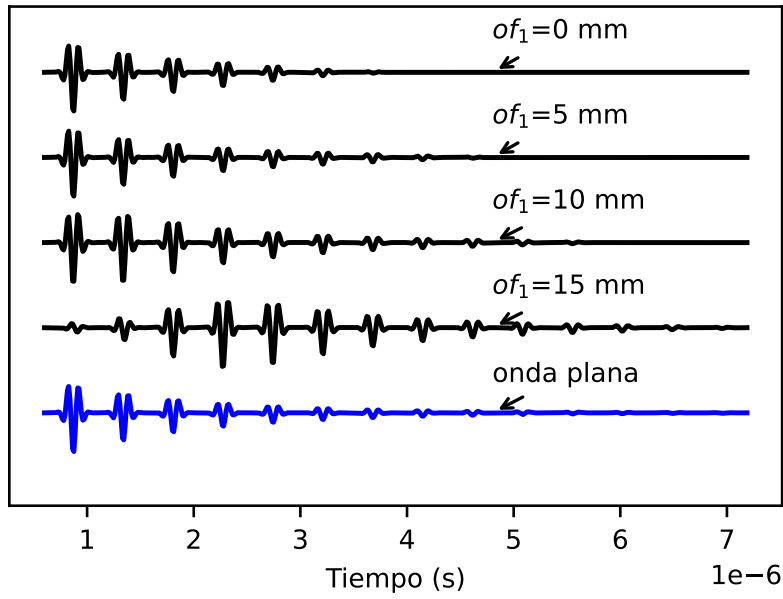


Figura 4.10: Simulación de las señales producidas por un receptor de desplazamiento variable of_1 en un campo transmitido a través de una placa de acero.

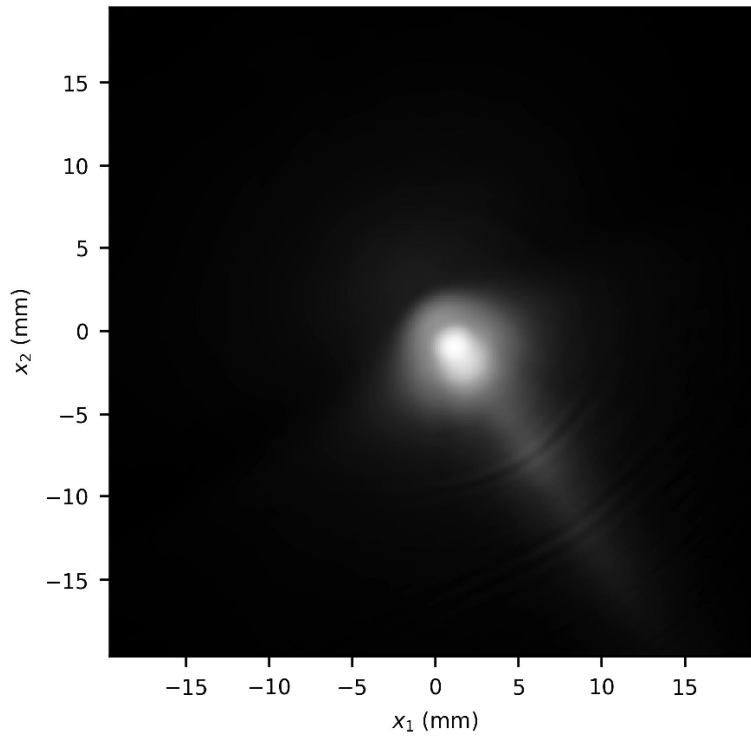


Figura 4.11: Simulación de campo ultrasónico transmitido a través de una placa de CFRP en el plano x_1x_2 ($x_3 = 80$ mm) generado por un emisor de 3 mm de radio como la suma de todas las frecuencias de interés. Los ángulos de rotación ($\alpha = 20^\circ$ and $\beta = 60^\circ$) fueron seleccionados para destacar el fenómeno de torcimiento de haz.

4.4. Procedimiento de optimización

La naturaleza cualitativa de la dispersión del haz en experimentos de goniometría fue cubierta en la sección 4.3, que mostró que incrementar la longitud del receptor (l_1) y el desplazamiento ($o f_1$) disminuye el FBE. El objetivo de esta sección consiste en optimizar su forma y posición mientras se acota su superficie.

Para esto, se implementó un procedimiento de optimización en el que la forma del receptor se varía hasta que se minimiza el error entre el MHF y el MPF. Esto se llevó a cabo con el algoritmo Evolución Diferencial, que es un proceso evolutivo, estocástico y paralelo de búsqueda directa introducido por Storn and Price [52]. Este algoritmo ha mostrado ser efectivo para optimizaciones globales, por lo que se lo eligió entre los distintos algoritmos disponibles en la biblioteca de Python pymoo [53]. Una optimización típica consiste en 40 individuos que evolucionan durante 500 generaciones. El procedimiento de optimización puede resumirse en los pasos siguientes:

1. Se genera al azar una población de 40 individuos.
2. Cada individuo consiste en 10 vértices que definen un polígono cerrado. Este polígono se ajusta con una curva “spline” para suavizar los bordes del polígono. El área encerrada representa la superficie del receptor.
3. La superficie se transforma con la FFT de la Ec. 4.5. para obtener la función de directividad $\Phi^r(-k_1, -k_2)$.
4. El modelo de haz finito se evalúa para cada individuo para una grilla de 9α por 13β rotaciones, $256 k_1$ por $256 k_2$ vectores de onda y 64 frecuencias ω . Como la directividad del emisor y los coeficientes de transmisión son independientes de cada individuo, se calculan previamente y se los recupera de la memoria para cada cálculo de la Ec. 4.12, que consiste principalmente en multiplicación y suma de estos arreglos con la función de directividad de cada individuo.
5. El error entre modelos (FBE) se calcula de acuerdo a la Ec. 4.15.
6. El error es usado por el algoritmo de Evolución Diferencial para introducir variaciones en la forma y generar la población subsecuente. A la vez impone una cota a la superficie del polígono para que se mantenga por debajo de los 700 mm^2 .
7. Al final el individuo con menor error se almacena.

Debido a la gran dimensionalidad del modelo ($\alpha(9), \beta(13), k_1(256), k_2(256), \omega(64)$), aco-
plado al hecho de que cada iteración es similar a la siguiente, la inversión fue implementada en arquitectura de unidades de procesamiento gráficas (GPU) logrando una importante reducción en los tiempos de cálculo, de forma similar a la descripción de la sección 3.5. Para este propósito se utilizó la biblioteca CuPy [54].

El procedimiento de optimización se llevó a cabo para tres materiales de interés: un acero austenítico SAE-304 (SS304), un monocristal de silicio (Si) y un CFRP unidireccional, cuyas matrices de rigidez se incluyen en el apéndice H. Se fijó el espesor de las placas en 1 mm. Debido a la simetría del material, el ángulo β se varió entre -90° y 90° , mientras que el ángulo α se varió entre 0° y 45° , debido a que por encima de este ángulo se transmite poca energía. El coeficiente de transmisión $T(k_1, k_2)$ fue pre-calculado como un arreglo de α por β por k_1 por k_2 por ω y recuperado para cada iteración. La directividad del emisor $\Phi^e(k_1, k_2)$ fue calculada para un pistón circular de 3 mm de radio con un espectro de tipo gaussiana centrada en 10 MHz. El rango de frecuencias durante la optimización se fijó entre 70 kHz y 20 MHz.

4.5. Resultados y discusión

4.5.1. resultados de la optimización

Las formas resultantes se muestran en la Fig. 4.12, donde se incluye el emisor como referencia. Los resultados para el acero austenítico son consistentes con las simulaciones de la sección 4.3.2 ya que la forma es elongada en la dirección x_1 positiva y su centro también está desplazado en la dirección x_1 positiva. El hecho que la forma no sea simétrica con respecto a la dirección x_2 puede estar relacionado con el fenómeno de torcimiento de haz.

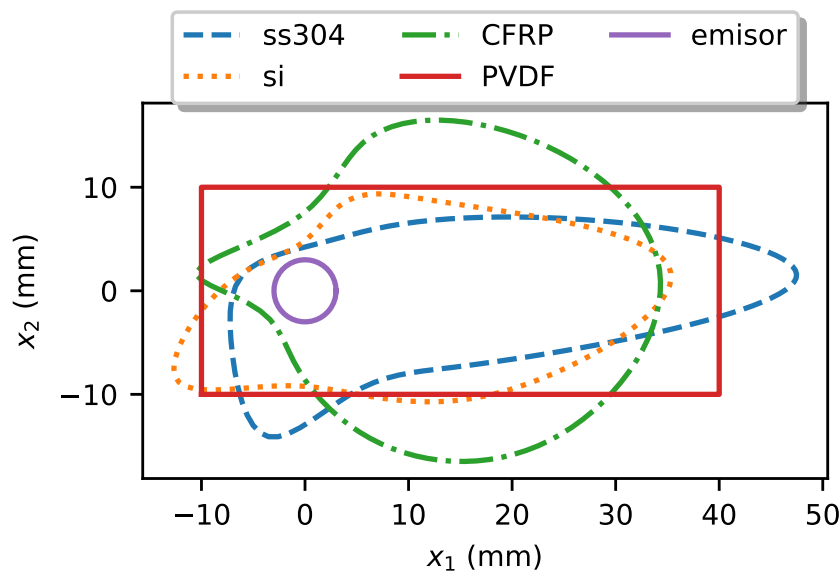


Figura 4.12: Resultados del procedimiento de optimización. “ss304”, “si” y “CFRP”, son las formas optimizadas para acero, silicio y compuesto, respectivamente. “PVDF” es la forma rectangular del receptor construido, y “emisor” representa la forma y posición del transductor emisor.

La forma optimizada para silicio es similar a la del acero, ya que es elongada en la dirección x_1 . Sin embargo, la longitud l_1 es menor, sugiriendo que los ecos decaen más

rápidamente en función de la distancia. Esto puede explicarse por el hecho de que la densidad del silicio es menor que la del acero, por lo que resulta más próxima a la del agua, lo que significa que la energía puede transmitirse al fluido de manera más eficiente.

La forma optimizada para el CFRP presenta algunas diferencias notorias con respecto a las anteriores: primero, la forma es más ancha en la dirección x_2 cerca del centro con un mayor grado de simetría radial, debido a esto, la longitud en x_1 resulta menor. Estas diferencias pueden explicarse por dos fenómenos. Nuevamente, la densidad del CFRP es menor que las anteriores, por lo que se estima que la energía decae más rápido. A su vez, el fenómeno de torcimiento de haz, producto de la anisotropía pronunciada, hace que la energía resulte más dispersa en el espacio, por lo que la simetría radial del receptor debe ser mayor para adquirir este tipo de campo.

El error, o FBE, para las formas de receptor optimizadas, se incluyen en la Tabla 4.1. Además, se calculó el FBE para un receptor con forma rectangular ($l_1 = 50$ mm, $l_2 = 20$ mm y $of_1 = 15$ mm) y para una forma circular con el mismo radio que el emisor ($a = 3$ mm). El menor error se observa en todos los casos para las formas optimizadas, mientras que el error mayor se observa para la forma circular. Las figuras de los espectros realizadas para las distintas formas se incluyen en el apéndice B.

Tabla 4.1: FBE calculado para distintas formas de receptor.

Forma de receptor	Material		
	SS	CFRP	SI
Optimizada	6,84E-10	4,09E-10	7,22E-10
Rectangular	4,04E-09	1,39E-09	4,65E-08
Circular	6,25E-07	8,08E-07	4,22E-07

4.5.2. Construcción y evaluación del transductor fabricado

Dada la discrepancia entre las formas optimizadas, se eligió una forma rectangular con $l_1 = 50$ mm, $l_2 = 20$ mm y $of_1 = 15$ mm como una solución de compromiso, la cual se incluye en la Fig. 4.12. Mientras que esta forma es similar a algunas de las utilizadas en la literatura, por ejemplo en [28, 40], su largo, ancho y desplazamiento son consecuencia de los resultados de la optimización. Al compararla con el transductor de PVDF circular desarrollado en [41], la superficie del transductor fabricado en este trabajo resulta 5 veces menor, por lo que se estima que la sensibilidad es aproximadamente 14 dB mayor. Más detalles con respecto a esto se incluyen en el apéndice A. Una ventaja secundaria de limitar el tamaño del transductor, consiste en la reducción del costo en materiales piezoeléctricos, de sustrato (“backing”), y de carcasa. Además, los transductores pequeños son más fáciles de acomodar dentro del arreglo experimental.

El receptor piezoeléctrico se construyó utilizando una lámina de PVDF de 28 μ m de espesor con electrodos de pintura de plata. Este sensor se colocó en una carcasa de aluminio donde se vertió resina epoxy que sirve como material de soporte. El electrodo

delantero se extendió hasta la carcasa con pintura de plata para proporcionar contacto eléctrico y apantallado a ondas de radiofrecuencia. El electrodo trasero fue conectado con un cable y una pequeña gota de pintura de plata. Por último, una fina capa de resina epoxy se aplicó por sobre la cara delantera para proporcionar protección a la corrosión. Un esquema de la construcción se muestra en la Fig. 4.13.

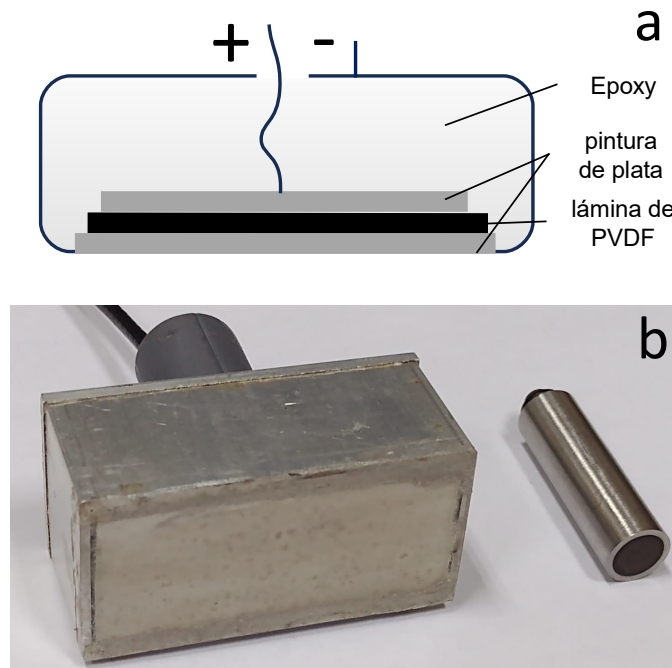


Figura 4.13: (a) Detalles de fabricación del receptor de PVDF (b) Receptor fabricado (izquierda) junto a un emisor comercial (derecha).

Para evaluar el desempeño del transductor fabricado se realizaron mediciones para tres materiales reales y se compararon con el modelo de onda plana. Se midieron señales variando el ángulo polar α a distintos ángulos azimutales β . Se utilizó un emisor de 3 mm de radio y la distancia entre emisor y receptor se fijó en 80 mm. Más detalles del sistema experimental se incluyen en el capítulo 6. La primera muestra es una oblea monocristalina de silicio con un espesor de 0.5 mm utilizada para la microfabricación de semiconductores, cuyas propiedades mecánicas son bien conocidas y se incluyen en el apéndice H. Los resultados de las mediciones se comparan con la simulación de onda plana en la Fig. 4.14 (a, d). La segunda muestra es un acero levemente anisótropo con un espesor de 0.8 mm, y la tercera muestra es una placa de CFRP unidireccional con marcada anisotropía con un espesor de 0.9 mm. Las propiedades de estos dos materiales fueron determinadas por el método para determinación de constantes elásticas presentado en el capítulo 6. La comparación entre la medición y la simulación de onda plana se muestra en la Fig. 4.14 (b, e) para el acero y (c, f) para el compuesto, respectivamente.

La medición de la muestra de silicio, siendo un material con propiedades conocidas, sirve como prueba de que el comportamiento del sistema se aproxima suficientemente a la propagación de onda plana. Los otros materiales, de propiedades a priori desconocidas,

muestran que el modelo de onda plana puede ser ajustado a la medición, por lo que sugieren que el arreglo instrumental es útil para la inversión de constantes elásticas. Aunque la construcción de transductores con forma arbitraria puede ser realizada con láminas de PVDF, encontrar una forma óptima puede ser imposible si las propiedades del material son desconocidas. Para estos casos, incrementar la longitud (l_1) y el desplazamiento (of_1) en la dirección x_1 son buenas reglas generales para la construcción de transductores receptores. El procedimiento de optimización de forma presentado en este capítulo puede ser útil para los casos en los que las propiedades del material son conocidas y se busca determinar su variación frente a un agente de degradación como, por ejemplo, la irradiación en el contexto de evaluación de aptitud para el servicio y ensayos no destructivos [55, 56]. Para el caso presente, la baja discrepancia observada entre el MPF y el MHF significa que se puede asumir propagación de onda plana, y que, por lo tanto, el tiempo de cálculo se reduce considerablemente. Debido a esto, los cálculos de haz finito realizados para una grilla de 2^8 por 2^8 vectores de onda, al asumir propagación de onda plana, se reducen a un solo vector de onda ($k_x = k_y = 0$).

4.6. Conclusión

En este capítulo se mostró el desarrollo teórico para simular campos ultrasónicos transmitidos a través de placas anisótropas sumergidas. Se consideró tanto la finitud espacial como temporal, de forma que este modelo es capaz de simular campos en el dominio del tiempo, y de las frecuencias, así como las señales generadas por un receptor sometido a dichos campos. El sistema de referencia elegido, localizado en la cara del emisor, permite el cálculo del campo para transductores planos con formas arbitrarias a través de una simple FFT, evitando la necesidad de rotar el campo ultrasónico, lo que conlleva ciertas dificultades matemáticas.

El modelo desarrollado se utilizó para mostrar que los transductores infinitos tienden a propagación de onda plana; que cuando se considera una superficie total fija, un par de transductores de dimensiones disímiles es preferido al caso de dimensiones similares; y que por limitaciones prácticas en el soporte de la probeta una configuración de emisor pequeño receptor grande es preferible ante el caso opuesto. Se mostró que en esta configuración la longitud l_1 y el desplazamiento of_1 , ambos en la dirección de desplazamiento del haz, son críticos y pueden manipularse para simular propagación de onda plana.

Se implementó un método de optimización meta-heurístico para encontrar la forma del transductor receptor que mejor se aproxima a la propagación de onda plana con una cota de superficie. Se optimizaron formas para tres materiales diferentes: un acero de anisotropía débil, un monocristal de silicio y un compuesto con anisotropía marcada. La forma obtenida es elongada para el caso del metal y del cerámico y casi circular para el caso del compuesto. La diferencia puede deberse a la diferencia en densidad que determina cuán rápido la energía se fuga al fluido y al fenómeno de torcimiento de haz predominante en la muestra del material compuesto.

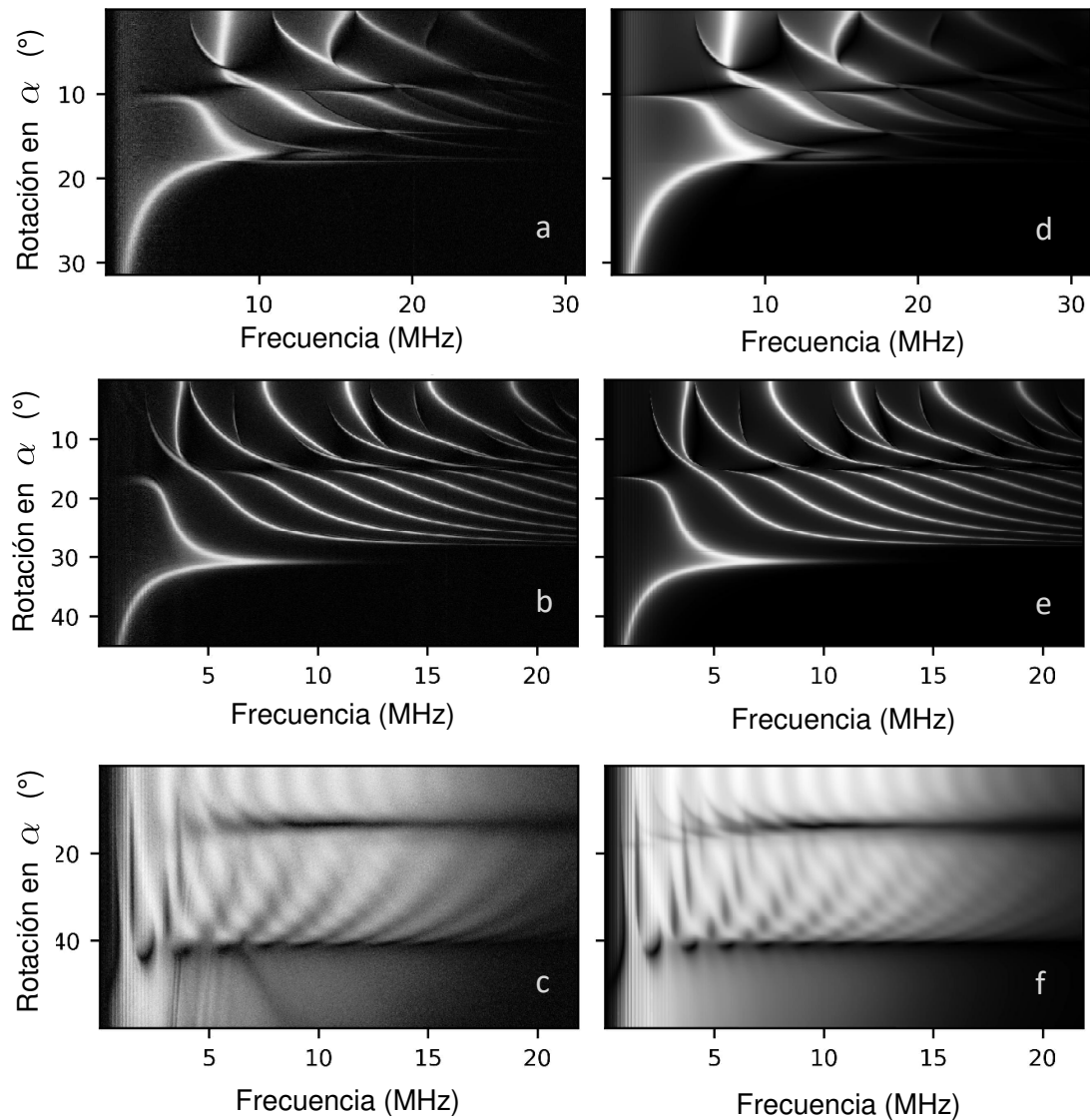


Figura 4.14: Evaluación de desempeño del receptor de PVDF. Comparación de espectros de transmisión entre medición (a, b, c) y simulación de onda plana (d, e, f) para un monocristal de silicio (a, d), acero inoxidable (b, e) y CFRP (c, f).

Por último, se construyó un receptor de PVDF teniendo en cuenta los hallazgos obtenidos. Se realizaron mediciones en tres materiales que fueron comparadas con el modelo de onda plana ajustado. Se observó excelente correspondencia, lo que indica que, utilizando el receptor fabricado, la propagación se asemeja al comportamiento de onda plana, reduciendo significativamente la complejidad y el costo computacional para la inversión de los campos.

Parte II

Medio heterogéneo

TEXTURA CRISTALOGRÁFICA Y MÉTODOS DE HOMOGENEIZACIÓN

5.1. Introducción

La anisotropía en las propiedades físicas refleja la estructura de la materia en la que se observan dichas propiedades. En el caso de materiales cristalinos homogéneos, i.e. monocristales, las transformaciones geométricas que dejan invariante a la red pueden ser utilizadas para estudiar y clasificar las simetrías de las propiedades físicas. Entre estas, la elasticidad es de particular interés para este trabajo.

El material heterogéneo es aquel compuesto por constituyentes denominados fases. En el caso de materiales policristalinos de un constituyente, i.e., cristales con la misma composición y simetría cristalina, cada orientación cristalina en la que existe el cristal se lo considera una fase distinta. En este se distinguen distintas escalas: la microescala l_μ del tamaño más grande de la inhomogeneidad en la que las propiedades oscilan en el espacio, una macroescala l_M significativamente más grande que la microescala y una escala intermedia o mesoescala l_m en la que las propiedades parecen constantes o varían lentamente en el espacio. Es decir que, en la microescala, las propiedades varían de grano a grano de acuerdo a sus orientaciones relativas, pero son constantes (invariantes a la traslación) en la macroescala. Las propiedades macroscópicas, entonces, se denominan propiedades efectivas, y surgen de la combinación de las propiedades del cristal y la información estadística de la microestructura. A la vez, surgen simetrías macroscópicas, también denominadas simetrías estadísticas.

En el caso de la caracterización por ultrasonido, la propagación de ondas estará determinada por las propiedades del sólido en la escala de la longitud de onda. Es decir que, si la longitud de onda λ es significativamente mayor a l_μ , entonces las propiedades determinadas por ultrasonido serán las propiedades efectivas. Si, en lugar de medir, se desea estimar las propiedades efectivas, entonces es necesario aplicar técnicas de homogeneización cuyo objetivo es reemplazar el material heterogéneo por uno homogéneo cuyas propiedades sean las mismas que se observan en la mesoescala. En general, no existen

expresiones en forma cerrada para el sólido homogeneizado, pero es posible calcular cotas y aproximaciones de las propiedades macroscópicas a partir de las propiedades de los constituyentes y la textura cristalográfica.

En este capítulo se aborda la relación entre las propiedades elásticas macroscópicas y la textura cristalográfica. Para esto, en la sección 5.2.1 se describe el grupo de orientaciones $SO(3)$ en el espacio tridimensional. En la sección 5.2.2 se describen las redes de Bravais y cómo su estructura y la invariancia ante las transformaciones en $SO(3)$ sirven para describir y clasificar los grupos y las clases de simetrías elásticas. En la sección 5.3 se introduce el concepto de textura cristalográfica, su descripción como función de densidad de probabilidad en $SO(3)$ y sus expansiones en series de Fourier, tanto en bases de Wigner como en bases tensoriales. En la sección 5.4 se describen los métodos de homogeneización a través del cálculo de cotas elásticas de orden 0, 1 y 2. Además, se describe el proceso de descomposición armónica que posibilita el cálculo del promedio en orientación de tensores como función de los coeficientes de textura cristalográfica. Finalmente, se muestra un ejemplo de homogeneización para un material con simetría cúbica, tanto en la escala microscópica (cristalina) como en la macroscópica (estadística).

5.1.1. Notación

En este capítulo se utiliza notación simbólica siguiendo el trabajo de Lobos Fernández [57] y se abandona la convención de suma de Einstein. Los escalares se representan por caracteres itálicos, e.g. x , y , W . Tensores de primer orden se representan por caracteres latinos en negrita minúscula, e.g. $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$. Tensores de segundo orden se representan por caracteres latinos en negrita mayúscula, e.g. $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, salvo por los tensores de tensión y deformación que se representan por letras griegas en negrita minúscula, i.e. $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\varepsilon}$. Tensores de cuarto orden se designan por letras latinas en negrita de pizarra mayúscula, e.g. $\mathbb{A}$, $\mathbb{B}$. A su vez, tensores de un orden arbitrario r se representan por letras latinas en negrita de pizarra mayúscula como $\mathbb{A}_{\langle r \rangle}$. El producto tensorial se denota por $\otimes$. Una base ortonormal $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3\} = \{\mathbf{b}_i\}$ se utiliza para representar los tensores en un espacio euclidiano tridimensional como $\mathbf{a} = \sum_{i=1}^3 a_i \mathbf{b}_i$, $\mathbf{A} = \sum_{i,j=1}^3 A_{ij} \mathbf{b}_{ij}$, $\mathbb{A} = \sum_{i,j,k,l=1}^3 A_{ijkl} \mathbf{b}_{ijkl}$, donde a_i , A_{ij} y A_{ijkl} representan los elementos tensoriales y donde se utiliza la abreviación $\mathbf{b}_i \otimes \mathbf{b}_j = \mathbf{b}_{ij}$. Un tensor de orden 4 con simetría menor cumple $A_{ijkl} = A_{jikl} = A_{ijlk}$ y uno con simetría mayor cumple $A_{ijkl} = A_{klij}$. Un tensor que no tiene traza, y cumple con ambas simetrías, se denomina armónico y se lo distingue por la comilla como $\mathbb{A}'_{\langle r \rangle}$. La aplicación lineal de un tensor de orden 1 sobre uno de orden 2 se denota como $\mathbf{A}\mathbf{x} = \sum_{i,j=1}^3 A_{ij} x_j \mathbf{b}_i$, mientras que aplicaciones lineales de órdenes mayores se escriben como $\mathbb{A}[\mathbf{B}] = \sum_{i,j,k,l=1}^3 A_{ijkl} B_{kl} \mathbf{b}_{ij}$. La composición de dos tensores de igual orden se simboliza como $\mathbf{AB} = \sum_{i,j,k} A_{ij} B_{jk} \mathbf{b}_{ik}$. El producto escalar se representa como $\mathbb{A}_{\langle r \rangle} \cdot \mathbb{B}_{\langle r \rangle} = \sum_{i_1, \dots, i_r} A_{i_1, \dots, i_r} B_{i_1, \dots, i_r}$. La norma de Frobenius se define como $\|\mathbb{A}_{\langle r \rangle}\| = \sqrt{\mathbb{A}_{\langle r \rangle} \cdot \mathbb{A}_{\langle r \rangle}}$. El producto de Rayleigh se denota como $\mathbf{Q} \star \mathbb{B}_{\langle r \rangle} = \sum_{i_1, \dots, i_r} B_{i_1, \dots, i_r} (\mathbf{Q} \mathbf{b}_{i_1}) \otimes \dots \otimes (\mathbf{Q} \mathbf{b}_{i_r})$, donde si $\mathbf{Q}$ es una rotación, $\mathbf{Q} \star \mathbb{B}_{\langle r \rangle}$ representa la rotación de $\mathbb{B}_{\langle r \rangle}$ en $\mathbf{Q}$. El tensor de

permutación es $\epsilon = \sum_{i,j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \mathbf{b}_{ijk}$ donde ϵ_{ijk} es el símbolo de permutación (símbolo de Levi-Civita). La identidad vectorial es $\mathbf{I} = \sum_{i,j=1}^3 \delta_{ij} \mathbf{b}_{ij}$, donde δ_{ij} es la delta de Kronecker. Los siguientes tensores de orden 4 (entendidos como aplicaciones lineales) representan: $\mathbb{I} = \sum_{i,j,k,l=1}^3 \delta_{ik} \delta_{jl} \mathbf{b}_{ijkl}$ la identidad para tensores de orden 2; $\mathbb{I}^S = \sum_{i,j,k,l=1}^3 \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \mathbf{b}_{ijkl}$ la identidad en tensores de orden 2 simétricos; $\mathbb{P}_1 = \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}$ la identidad en tensores de orden 2 isótropos; $\mathbb{P}_2 = \mathbb{I}^S - \mathbb{P}_1$ la identidad en tensores de orden 2 simétricos y sin traza.

5.2. Rotaciones y grupos de simetría

5.2.1. Grupo de rotación $SO(3)$

$SO(3)$ es el grupo de tensores ortogonales de segundo orden (rotaciones propias) en el espacio tridimensional de tensores de primer orden (vectores reales). El grupo de orientaciones $SO(3)$ se define como

$$SO(3) = \{\mathbf{Q} | \mathbf{Q} \in Orth \wedge \det(\mathbf{Q}) = +1\}, \quad (5.1)$$

donde $Orth$ es el espacio de tensores de orden 2 ortogonales,

$$Orth = \{\mathbf{R} | (\mathbf{R}\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{R}\mathbf{y}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \ \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in V\}, \quad (5.2)$$

en donde V es el espacio euclidiano tridimensional de tensores de primer orden, cuya base ortonormal se toma como $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3\}$. Para todo $\mathbf{R} \in Orth$ $\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^T$ y $\det(\mathbf{R}) = \pm 1$.

La integración invariante sobre $SO(3)$ con variable de integración $\mathbf{Q}$ se define como

$$1 = \int_{SO(3)} 1 d\mathbf{Q}(\mathbf{Q}) = \int_{SO(3)} d\mathbf{Q}(\mathbf{R}_1 \mathbf{Q} \mathbf{R}_2), \quad \forall \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2 \in SO(3). \quad (5.3)$$

donde $d\mathbf{Q}$ representa el volumen elemental que asegura integración invariante sobre $SO(3)$. A partir de aquí $d\mathbf{Q}(\mathbf{Q})$ se abrevia como $d\mathbf{Q}$.

El producto escalar de funciones escalares en $SO(3)$ se define como

$$\langle f_1, f_2 \rangle = \int_{SO(3)} f_1(\mathbf{Q}) f_2^*(\mathbf{Q}) d\mathbf{Q}, \quad (5.4)$$

donde el superíndice (*) denota el conjugado complejo. Una función cuadrado integrable se denota como $f(\mathbf{Q}) \in L^2(SO(3))$.

De aquí en adelante $\mathbf{Q} \in SO(3)$ representa una orientación definida como el tensor de segundo orden

$$\mathbf{Q} = \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij} \mathbf{b}_{ij}, \quad (5.5)$$

tal que un vector $\mathbf{x}$ puede reorientarse a partir de una orientación $\mathbf{Q}$ como

$$\mathbf{y} = \mathbf{Q}\mathbf{x} = \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij} x_j \mathbf{b}_i, \quad (5.6)$$

lo que representa una rotación equivalente a la descrita para los vectores de onda en la ecuación 4.18. A su vez, un tensor de orden 4 se reorienta como

$$\mathbf{Q} \star \tilde{\mathbf{C}} = \sum_{i,j,k,l=1}^3 \tilde{C}_{i,j,k,l} (\mathbf{Q}\mathbf{b}_i) \otimes (\mathbf{Q}\mathbf{b}_j) \otimes (\mathbf{Q}\mathbf{b}_k) \otimes (\mathbf{Q}\mathbf{b}_l), \quad (5.7)$$

que es equivalente a la rotación del tensor de rigidez en la ecuación 3.1.

En este trabajo una orientación $\mathbf{Q}$ se parametriza con un ángulo de rotación $\psi \in [0, \pi]$ en torno a un eje normalizado $\mathbf{n}$ como

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= \mathbf{N}_0 + \mathbf{N}_1 + \mathbf{N}_2, \\ \mathbf{N}_0 &= \cos(\psi)\mathbf{I}, \quad \mathbf{N}_1 = -\sin(\psi)\epsilon[\mathbf{n}], \quad \mathbf{N}_2 = (1 - \cos(\psi))\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Como ejemplo, una rotación de ψ en torno a $\mathbf{b}_3$ se representa en la base $\{\mathbf{b}_i\}$ como

$$\mathbf{Q}(\mathbf{b}_3, \psi) = \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij}^{3,\psi} \mathbf{b}_{ij}, \quad Q_{ij}^{3,\psi} \mathbf{b}_{ij} = \begin{pmatrix} \cos(\psi) & -\sin(\psi) & 0 \\ \sin \psi & \cos(\psi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

Esta parametrización también puede ser utilizada para aplicar una rotación de Euler con la convención de Bunge ($ZX'Z''$) [58] como

$$\mathbf{Q}^{\phi_1 \Phi \phi_2} = \sum_{i,j,k,l=1}^3 Q_{kj}^{3,\phi_2} Q_{lk}^{1,\Phi} Q_{il}^{3,\phi_1} \mathbf{b}_{ij}. \quad (5.10)$$

Para un eje de rotación parametrizado en coordenadas esféricas

$$\mathbf{n} = \sin(\theta) \cos(\phi) \mathbf{b}_1 + \sin(\theta) \sin(\phi) \mathbf{b}_2 + \cos(\theta) \mathbf{b}_3, \quad (5.11)$$

con $\theta \in [0, \pi]$ y $\phi \in [0, 2\pi)$, el volumen elemental se define como

$$d\mathbf{Q} = dn s(\psi) d\psi, \quad \text{con} \quad s(\psi) = \frac{\sin^2(\psi/2)}{2\pi^2}, \quad \text{y} \quad dn = \sin(\theta) d\phi d\theta. \quad (5.12)$$

De forma que la integral en la esfera unitaria es

$$\int_{S_2} 1 dn = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \sin(\theta) d\phi d\theta = 4\pi, \quad (5.13)$$

a partir de la cual se constata la condición de normalización 5.3

$$\int_{SO(3)} 1 d\mathbf{Q} = \int_{\psi=0}^{\pi} \int_{S_2} 1 dn s(\psi) d\psi = 1. \quad (5.14)$$

5.2.2. Estructuras cristalinas y simetría elástica

Los sólidos cristalinos son aquellos en los que los átomos se ordenan de acuerdo a una estructura que se repite en el espacio, y que se define a partir de una red más un motivo. Las redes en el espacio tridimensional pueden ser de 14 tipos diferentes, descritas originalmente por Bravais, las cuales se agrupan en 7 sistemas de red, cada uno caracterizado por una celda primitiva. Cada red o celda primitiva tiene la propiedad de cubrir todo el espacio tridimensional por traslaciones correspondientes a la combinación lineal discreta de los tres vectores de su base $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$, como

$$\mathbf{u} = p\mathbf{a} + q\mathbf{b} + r\mathbf{c}, \text{ con } p, q, r \in \mathbb{Z} \quad (5.15)$$

Los ángulos entre los vectores $\mathbf{b}$ y $\mathbf{c}$, $\mathbf{c}$ y $\mathbf{a}$, $\mathbf{a}$ y $\mathbf{b}$, se denominan α , β , y γ respectivamente. Aparte de la traslación, cualquier tensor ortogonal que transforma una red en ella misma es una transformación de simetría, es decir, que la red puede ser invariante ante la inversión, la reflexión, la rotación y la rotoinversión, estas últimas dos limitadas a ejes de orden 2, 3, 4 y 6. Al combinar estas operaciones se determinan un total de 32 grupos puntuales cristalográficos, que se agrupan en 7 sistemas cristalinos.

De acuerdo al principio de Neumann [59], las propiedades físicas, generalmente descritas por tensores, heredan las simetrías de la materia en donde se observan dichos fenómenos. Sin embargo, es común que la propiedad presente más simetrías que el cristal, de forma que la correspondencia no es bidireccional. En el caso de la elasticidad, representada por el tensor de rigidez monocristalino $\tilde{\mathbb{C}}$, su simetría se puede estudiar a partir de la invariancia ante la acción de los grupos puntuales subgrupo de $SO(3)$ [60]. En este trabajo se definen los grupos de simetría rotacional S^{sym} como la colección de transformaciones $\mathbf{Q}$ para las cuales un tensor, por ejemplo el de rigidez $\tilde{\mathbb{C}}$, permanece invariante,

$$\mathbf{Q} \star \tilde{\mathbb{C}} = \tilde{\mathbb{C}} \quad \forall \mathbf{Q} \in S^{sym} \subset \text{Orth}. \quad (5.16)$$

Para que dicho tensor se mantenga invariante ante las transformaciones de un grupo de simetría, en general, algunas de sus constantes se anulan, mientras que otras se expresan como combinaciones lineales, reduciendo el número de constantes elásticas independientes. Por ejemplo, un material invariante ante el grupo puntual cristalográfico 432, se lo denomina cúbico y se lo describe por un tensor de rigidez, en notación de Voigt, de la forma

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ \text{sim} & & & & c_{44} & 0 \\ & & & & & c_{44} \end{bmatrix}. \quad (5.17)$$

Si consideramos un material con rigidez $\mathbb{C}_1$, al ser rotado, su tensor de rigidez se ve modificado como $\mathbb{C}_2 = \mathbf{Q} \star \mathbb{C}_1$. Los tensores $\mathbb{C}_1$ y $\mathbb{C}_2$ describen, mediando una rotación,

al mismo material. Dado que a partir de la rotación, los elementos de simetría no están alineados con la base, la reducción de elementos cambia, como por ejemplo

$$\mathbb{C}_1 = \begin{bmatrix} 204,6 & 137,7 & 137,7 & 0 & 0 & 0 \\ & 204,6 & 137,7 & 0 & 0 & 0 \\ & & 204,6 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 126,2 & 0 & 0 \\ \text{sim} & & & & 126,2 & 0 \\ & & & & & 126,2 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbb{C}_2 = \mathbf{Q} \star \mathbb{C}_1 = \begin{bmatrix} 206,5 & 135,8 & 135,8 & 0,1 & 12,9 & -0,5 \\ & 206,5 & 135,9 & -12,9 & -0,1 & -0,5 \\ & & 208,3 & 12,9 & -12,83 & 0,9 \\ & & & 124,4 & 0,9 & -0,1 \\ \text{sim} & & & & 124,4 & 0,1 \\ & & & & & 126,2 \end{bmatrix}, \quad (5.18)$$

donde $\mathbb{C}_1$ es la matriz de rigidez, con entradas en GPa, para un monocristal de acero austenítico [61], y $\mathbf{Q}$ es una rotación de $\psi = 0,1$ rad en torno a $\mathbf{b} = (1, 1, 0)$.

Entonces, dos tensores de rigidez $\mathbb{C}_1$ y $\mathbb{C}_2$ son denominados simétricamente equivalentes si existe una rotación $\mathbf{Q} \in S \subset \text{Orth} / S(\mathbb{C}_1) = S(\mathbf{Q} \star \mathbb{C}_2)$, es decir, que mediante una rotación comparten el mismo grupo de simetría. Finalmente, los grupos de simetría de materiales simétricamente equivalentes difieren en general $S(\mathbb{C}_1) \neq S(\mathbb{C}_2)$, pero son conjugados, i.e. iguales mediante una rotación, $S(\mathbb{C}_1) = \mathbf{Q}S(\mathbb{C}_2)\mathbf{Q}^T$. A partir de esto se definen las clases de simetría elástica como la colección de grupos de simetría elástica conjugados [60]. Entonces, los grupos de simetría de $\mathbb{C}_1$ y $\mathbb{C}_2$ difieren, pero pertenecen a la misma clase de simetría elástica.

Dentro de los 32 grupos puntuales de las clases cristalinas, 11 pertenecen a $SO(3)$, en notación de Hermann-Mauguin [62]: 1, 2, 222, 4, 422, 3, 32, 6, 622, 23, 432. Entre estas se observó que los pares (6, 622) y (23, 432), resultan en las mismas restricciones a los tensores de rigidez [63], reduciendo el número de clases de simetría elástica en 9. Más tarde se observó que el par (32, 3) si bien no son parte del mismo grupo de simetría elástica, un tensor $\tilde{\mathbb{C}}$ con simetría 32 mediante una rotación $\mathbf{Q}$ se muestra con simetría 3. Lo mismo sucede para el par (422, 4) [64] reduciendo el número de clases de simetría elástica a 7: triclinico, monoclinico, ortótropo, trigonal, tetragonal, hexagonal, cúbico e isotropo en correspondencia con los 7 sistemas cristalinos. Este último descubrimiento tardó más de 60 años en realizarse porque el ángulo de rotación que transforma un grupo en otro depende de las constantes del material, lo que dificulta su manifestación. Forte [60] demostró a partir de teoría de grupos que las clases de simetría elástica para cualquier tipo de material, aunque no sea cristalino, son 8 (sumando la simetría isotropa). Dado que las transformaciones de $SO(3)$ guardan relación con los planos de simetría, también es posible llegar al mismo resultado por medio de estas operaciones [65], y por lo general permiten una mejor representación visual.

A partir de la parametrización de orientaciones definida en la Ec. 5.8, se pueden definir grupos de simetría elástica $S^i \subset SO(3) \subset \text{Orth}$ con respecto a una base ortonormal

$\{b_1, b_2, b_3\}$ para cantidades tensoriales como

$$\begin{aligned}
 S^{\text{tri}} &= \{S | S = I\} \\
 S^{\text{mon}} &= \{S | S = Q(b_3, i2\pi/2), i \in \{0, 1\}\} \\
 S^{\text{ort}} &= \{S | S = Q(b_i, j2\pi/2), i \in \{1, 2, 3\}, j \in \{0, 1\}\} \\
 S^{\text{tet}} &= \{S | S = Q(b_3, i2\pi/4), i \in \{0, 1, 2, 3\}, \} \\
 S^{\text{trig}} &= \{S | S = Q(b_3, i2\pi/3), i \in \{0, 1, 2\}, \} \\
 S^{\text{hex}} &= \{S | S = Q(b_3, i2\pi/6), i \in \{0, 1, \dots, 5\}, \} \\
 S^{\text{cub}} &= \{S | S = Q(n_i, \psi_i), (n_i, \psi_i) \in S_{nw}^{\text{cub}}\} \\
 S^{\text{iso}} &= \{S | S \in SO(3)\}
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

con

$$\begin{aligned}
 S_{nw}^{\text{cub}} &= \{(b_i, j2\pi/4), i \in \{1, 2, 3\}, j \in \{0, 1, 2, 3\}\} \\
 &\cup \{((b_i + (-1)^k b_j)/\sqrt{2}, \pi), i \neq j, i, j \in \{1, 2, 3\}, k \in \{1, 2\}\} \\
 &\cup \{((b_i + (-1)^l b_j + (-1)^m b_k)/\sqrt{3}, n2\pi/3)j2\pi/4, i \in \{1, 2, 3\}, \\
 &\quad i \neq j \neq k, i, j, k \in \{1, 2, 3\}, l, m, n \in \{1, 2\}\}
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

Los grupos de simetría son denominados, por orden de definición, como triclinico, monoclínico, ortótropo, tetragonal, trigonal, hexagonal, cúbico e isótropo, y en esta lista representan los grupos puntuales 1, 2, 222, 4, 3, 6, 432 y $\infty\infty m$ (isotropía). Notar que cada grupo es representativo de una clase de simetría elástica y que cualquier otro grupo perteneciente a la clase será conjugado del expresado.

En la Fig. 5.1 se muestran los sistemas cristalinos, las matrices de rigidez, los planos de simetría, los sistemas de red y las redes primitivas de Bravais. Notar que no existe una correspondencia directa entre los sistemas de red y los sistemas cristalinos. Esto se debe a que los grupos puntuales del sistema trigonal se pueden asignar tanto a celdas romboédricas como a hexagonales [66]. También es importante remarcar que la isotropía elástica no se corresponde con ningún sistema cristalino.

5.3. Textura cristalográfica

Muchos de los materiales utilizados en ingeniería, y en particular los metálicos, están compuestos por arreglos de cristales que se diferencian entre sus vecinos por la orientación relativa de los ejes cristalinos. Si un cristal es un arreglo periódico de átomos, esta periodicidad se interrumpe en la frontera entre dos cristales formando bordes de grano. En la Fig. 5.2 se muestra una medición de difracción de electrones por retrodispersión (EBSD) para una muestra de titanio obtenida de [68] y procesada con la biblioteca MTEX [6] para MATLAB. En esta figura se puede observar la superficie de la muestra, donde cada celda hexagonal identifica los distintos granos, y la orientación de la celda representa la orientación del cristal en ese contorno. Como se explicó en la sección 5.2.1, una orientación está definida por tres dimensiones, por ejemplo en la parametrización de Euler en la

Sistema cristalino/ clase elástica	Matriz de rigidez $\mathbb{C}$	Planos de simetría	Sistema de red	Red primitiva
Triclínico			Triclínico	
Monoclínico			Monoclínico	
Ortorrómbico			Ortorrómbico	
Tetragonal			Tetragonal	
Trigonal			Romboédrico	
Hexagonal			Hexagonal	
Cúbico			Cúbico	
Isótropo				

Figura 5.1: De izquierda a derecha, sistemas cristalinos o clases elásticas, matrices de rigidez, planos de simetría, sistemas de red y redes primitivas de Bravais. En la matriz de rigidez, los puntos negros son ceros, los azules son constantes independientes, y las cruces son combinación lineal de constantes. Las líneas unen constantes repetidas, los opuestos (puntos blancos) o el doble (puntos circulados) [67].

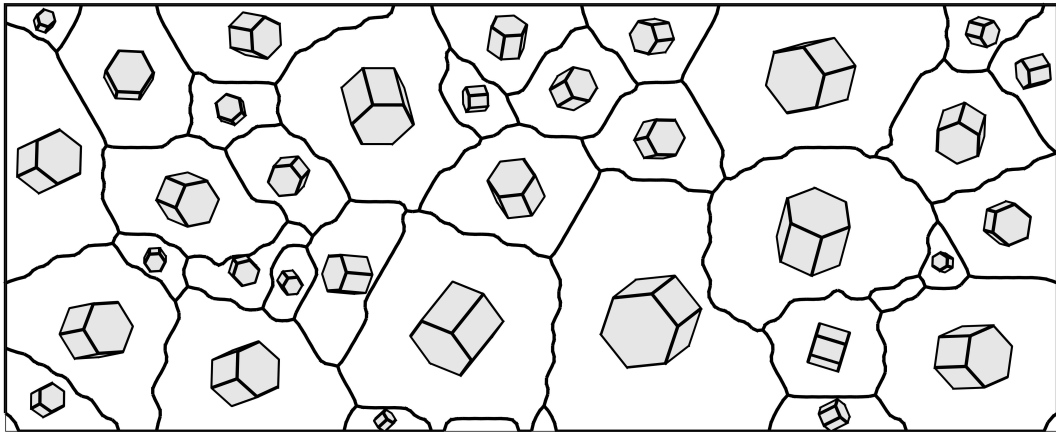


Figura 5.2: Representación de las orientaciones cristalinicas en granos, para una muestra de titanio medida por EBSD.

convención de Bunge, los ángulos ϕ_1, Φ, ϕ_2 que representan 3 rotaciones en torno a $ZX'Z''$ descrita por 5.10. Si el material heterogéneo es aleatorio, entonces posee todas las orientaciones cuya fracción volumétrica relativa se describe estadísticamente con una función de densidad de probabilidad (ODF). A esta descripción se la denomina textura cristalográfica. Esta función al estar definida en $SO(3)$ se puede representar en gráficos tridimensionales como el que se muestra en la Fig. 5.3. Esta figura se obtuvo al ajustar una ODF a la medición de EBSD para titanio con MTEX.

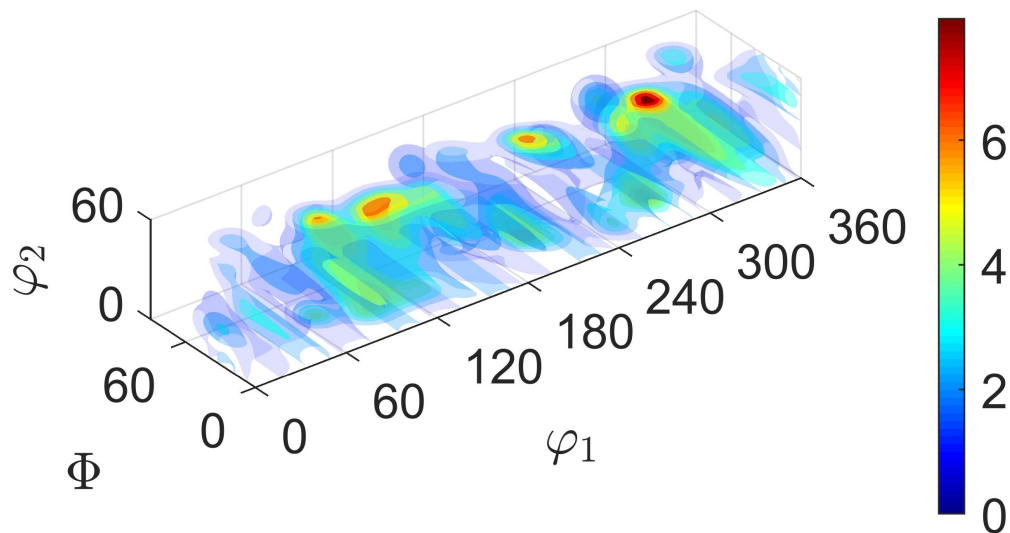


Figura 5.3: Representación tridimensional de la ODF de titanio como función de los ángulos de Euler en la convención de Bunge.

Otra representación posible, aunque no completa, se hace a partir de figuras de polos, como se muestra nuevamente para titanio en la Fig. 5.4. Estas figuras muestran la densidad

de probabilidad para una familia de planos como una función esférica $SO(2)$ representada en el plano por la proyección de Schmidt de igual área. Esta representación es la elegida en este trabajo, ya que guarda relación con las mediciones de goniometría ultrasónica y con la medición de figura de polos por difracción.

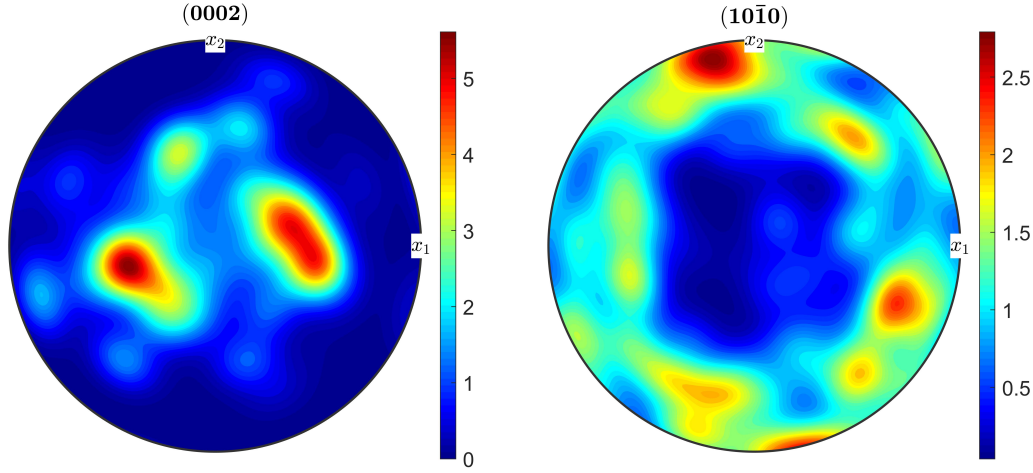


Figura 5.4: Reconstrucción de figuras de polos para la muestra de titanio.

5.3.1. Función de distribución de orientaciones (ODF)

La función de distribución de orientaciones (ODF), es una función de densidad de probabilidad que describe el volumen de material que tiene una orientación Q con respecto al volumen total del policristal, y se define como

$$f(Q)dQ = \frac{dv}{v}. \quad (5.21)$$

Es siempre no negativa

$$f(Q) \geq 0 \quad \forall Q \in SO(3), \quad (5.22)$$

y sigue la normalización

$$\int_{SO(3)} f(Q)dQ = 1. \quad (5.23)$$

El tensor de rigidez de un monocristal alineado con el sistema de referencia cristalino se denota como $\tilde{\mathbb{C}}$, mientras que la rigidez del mismo cristal rotado se denota como $\mathbb{C} = Q \star \tilde{\mathbb{C}}$. En un material macroscópico visto en la escala microscópica, la rigidez en cada posición x , en ejes de la muestra, se denota como $\mathbb{C}(x)$. Si el material es un policristal compuesto por cristales de una sola composición y simetría cristalina S_{micro} , entonces la rigidez del policristal será $\mathbb{C}(Q(x)) = Q(x) \star \tilde{\mathbb{C}}$, ya que en cada posición el cristal tendrá una orientación Q . La rigidez del conjunto, vista en la escala macroscópica, denominada rigidez efectiva, se denota como $\bar{\mathbb{C}}$ y para el material estadísticamente homogéneo no depende de la posición. En general difiere de la rigidez calculada por métodos de homogeneización que se obtiene

a partir de las propiedades del monocristal $\tilde{\mathbb{C}}$ y la distribución de orientaciones $f(\mathbf{Q})$. Una primera aproximación es el promedio en orientaciones $\langle f(\mathbf{Q}), \mathbb{C}(\mathbf{Q}) \rangle = \langle \mathbb{C} \rangle$ como se describe en la sección 5.4, el cual se define como

$$\langle f, \mathbb{C}(\mathbf{Q}) \rangle = \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) \mathbb{C}(\mathbf{Q}) d\mathbf{Q} = \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) (\mathbf{Q} \star \tilde{\mathbb{C}}) d\mathbf{Q}. \quad (5.24)$$

El grupo de simetría microscópico (a partir de aquí micro-simetría) S_{micro} del material, por ejemplo de la rigidez del monocristal $\tilde{\mathbb{C}}$, se ve reflejado en la ODF como

$$\mathbf{S} \star \tilde{\mathbb{C}} = \tilde{\mathbb{C}} \forall \mathbf{S} \in S_{micro} \Rightarrow f(\mathbf{QS}) = f(\mathbf{Q}) \forall \mathbf{S} \in S_{micro}. \quad (5.25)$$

De igual manera, la simetría macroscópica (a partir de aquí macro-simetría) S_{macro} del material, por ejemplo de la rigidez efectiva del policristal $\tilde{\mathbb{C}}$, se refleja en la ODF como

$$\mathbf{S} \star \tilde{\mathbb{C}} = \tilde{\mathbb{C}} \forall \mathbf{S} \in S_{macro} \Rightarrow f(\mathbf{SQ}) = f(\mathbf{Q}) \forall \mathbf{S} \in S_{macro}. \quad (5.26)$$

La macro-simetría es, en general, independiente de la micro-simetría. Es decir que un material con micro-simetría cúbica puede tener macro-simetría isotrópica, o un material con micro-simetría hexagonal puede tener macro-simetría triclínica. Para los materiales estudiados en este trabajo, la micro-simetría depende del material, mientras que la macro-simetría depende de la textura cristalográfica. Por esta razón también se la denomina simetría estadística [58]. En la práctica, la simetría cristalina determina los sistemas de deslizamiento y maclado, por lo que también influye sobre el tipo de texturas se pueden generar durante el conformado termomecánico [69].

5.3.2. Expansión en series de Fourier

Dado que la ODF es cuadrado-integrable, entonces puede ser expresada como una expansión en serie de Fourier. La expansión más utilizada de la ODF se realiza en términos de las funciones complejas de Wigner-D $T_{mn}^l(\mathbf{Q})$ como

$$f(\mathbf{Q}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_{mn}^l T_{mn}^l(\mathbf{Q}), \quad (5.27)$$

donde C_{mn}^l son los coeficientes de Fourier de la expansión. La normalización de las bases de Wigner-D se muestra en el apéndice C, y más detalles de la expansión se pueden ver en [58, 70]. En este trabajo se utiliza, además, una expansión en bases con carácter tensorial, ya que estas siguen las mismas reglas de transformación que las propiedades físicas y por ende presentan ventajas para la descripción de dichas propiedades en términos de la textura cristalográfica. Se siguen los desarrollos presentados en [57, 71].

Un tensor $\mathbb{H}_{\langle\alpha\rangle}$ de orden α , es armónico ($'$) si tiene simetría mayor, menor y no tiene traza, es decir $\mathbb{H}'_{\langle\alpha\rangle}[\mathbf{I}] = \mathbb{O}_{\langle 2-\alpha \rangle}$; y en general tiene $1 + 2\alpha$ componentes independientes. A partir de estos se construye una base ortonormal de tensores armónicos $\mathbb{H}'_{\langle\alpha\rangle\beta} / \mathbb{H}'_{\langle\alpha\rangle\beta} \cdot \mathbb{H}'_{\langle\alpha\rangle\tilde{\beta}} = \delta_{\beta\tilde{\beta}}$

con $\beta = 1, \dots, n'_\alpha \leq 1+2\alpha$. Estos tensores de referencia se utilizan para generar las funciones tensoriales

$$\mathbb{F}'_{\langle\alpha\rangle\beta}(\mathbf{Q}) = \mathbf{Q} \star \mathbb{H}'_{\langle\alpha\rangle\beta} \quad , \quad \|\mathbb{F}'_{\langle\alpha\rangle\beta}(\mathbf{Q})\| = 1, \quad (5.28)$$

que forman un sistema ortogonal con respecto a $SO(3)$. La expansión tensorial de Fourier de la ODF se define con estas funciones como

$$f(\mathbf{Q}) = \sum_{\alpha=0}^{\infty} \sum_{\beta=1}^{n'_\alpha} (1+2\alpha) \mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta} \cdot \mathbb{F}'_{\langle\alpha\rangle\beta}(\mathbf{Q}). \quad (5.29)$$

Los coeficientes tensoriales de textura $\mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta}$ se obtienen como un promedio en orientaciones (equivalente a la Ec. 5.24) de las funciones tensoriales

$$\mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta} = \langle f, \mathbb{F}'_{\langle\alpha\rangle\beta} \rangle = \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) \mathbb{F}'_{\langle\alpha\rangle\beta}(\mathbf{Q}) d\mathbf{Q}. \quad (5.30)$$

Para el orden 0, $\mathbb{H}'_{\langle 0 \rangle} = \mathbb{F}'_{\langle 0 \rangle}(\mathbf{Q}) = \mathbb{V}'_{\langle 0 \rangle} = 1$, y en ausencia de textura (isotropía cristalográfica) los coeficientes de orden mayor se anulan, $f(\mathbf{Q}) = 1$. La norma de los coeficientes está acotada como $\|\mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta}\| \in [0, 1]$, y el estado monocristalino $f(\mathbf{Q}) = \delta(\hat{\mathbf{Q}}, \mathbf{Q})$ maximiza la norma. Una descripción más detallada del espacio de coeficientes de textura se da en el apéndice C. El orden, l , de las bases de Wigner-D, se corresponde directamente con el orden, α , de las bases tensoriales $\mathbb{H}'_{\langle\alpha\rangle\beta}$, por lo que, en el resto de la tesis, cuando se menciona el orden, se refiere a ambas expansiones de forma simultánea. Además, existen relaciones que permiten calcular los coeficientes tensoriales a partir de los tradicionales, y viceversa, las cuales se incluyen en el apéndice D.

Por la Ec. 5.25 los tensores de referencia reflejan la micro-simetría

$$\mathbb{H}'_{\langle\alpha\rangle\beta} = \mathbf{S} \star \mathbb{H}'_{\langle\alpha\rangle\beta} \quad \forall \mathbf{S} \in S_{micro}, \quad (5.31)$$

por la cual se acota el número de tensores de referencia n'_α como se muestra en la Tabla 5.1. Aquí solo se muestran los tensores de orden 2 y 4, ya que son los que influyen en las propiedades elásticas como se describe en la sección 5.4.5.

Por la Ec. 5.26 los coeficientes tensoriales reflejan la macro-simetría

$$\mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta} = \mathbf{S} \star \mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta} \quad \forall \mathbf{S} \in S_{macro}, \quad (5.32)$$

por la cual se acota el número de elementos independientes de cada coeficiente de textura, como se muestra en la Tabla 5.2.

Por ejemplo, una muestra con micro y macro-simetrías (S_{micro} y S_{macro}) cúbicas tendrá un coeficiente de textura tensorial de orden 4 ($\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}$) con un solo elemento independiente (V_{1111}). Por otro lado, una muestra con micro y macro-simetrías ortótropas tendrá 3 coeficientes de textura tensoriales de orden 4 ($\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}$, $\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 2}$, $\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 3}$), cada uno con tres elementos independientes (V_{1111} , V_{1122} , V_{2222}). El principal interés de este trabajo radica en materiales con micro-simetrías cúbica y hexagonal, pero sin macro-simetrías, es decir, S_{macro} triclinica, como se describe en el capítulo 7.

Micro-simetría	Cantidad de tensores de referencia	
S_{micro}	n'_2	n'_4
isótropo	0	0
Cúbico	0	1
Hexagonal	1	1
Tetragonal	1	3
Trigonal	1	3
Ortótropo	2	3
Monoclínico	3	5
Triclínico	5	9

Tabla 5.1: Reducción de tensores de referencia por micro-simetrías S_{micro} .

La ODF expandida en funciones tensoriales es atractiva para la descripción de cantidades físicas, que también son representadas por tensores. De forma que las transformaciones en $SO(3)$ pueden aplicarse tanto a las propiedades físicas como a las bases y coeficientes tensoriales por las Ecs. 5.31 y 5.32.

Macro-simetría	elementos independientes	
S_{macro}	V_{ij}	V_{ijkl}
isótropo	0	0
Cúbico	0	1
Hexagonal	1	1
Tetragonal	1	3
Trigonal	1	3
Ortótropo	2	3
Monoclínico	3	5
Triclínico	5	9

Tabla 5.2: Reducción de elementos independientes de textura por macro-simetrías S_{macro} .

5.4. Homogeneización elástica

Dado un sólido elástico y lineal, la tensión de Cauchy $\sigma = \sigma(x)$ (2.1), la deformación infinitesimal $\varepsilon = \varepsilon(x)$ (2.4), la energía de deformación elástica $W = W(x)$ (2.9), y el tensor de rigidez $\mathbb{C} = \mathbb{C}(x)$ (2.10) se relacionan a través de las expresiones

$$\sigma = \frac{\partial W}{\partial \varepsilon} = \mathbb{C}[\varepsilon], \quad W = \frac{1}{2} \varepsilon \cdot \mathbb{C}[\varepsilon]. \quad (5.33)$$

Un material heterogéneo aleatorio es aquel que surge de un proceso de fabricación estocástico en el que las propiedades entre muestra y muestra pueden variar con cierta

probabilidad. Un material es estadísticamente homogéneo si las funciones estadísticas que describen los procesos estocásticos son invariantes a la traslación. Es decir, que todas las regiones del espacio son similares en cuanto a las propiedades estadísticas de los procesos estocásticos. Estas propiedades hacen que sea significativo el cálculo de promedios volumétricos bajo la hipótesis de ergodicidad, es decir que, el promedio volumétrico de una cantidad física calculada sobre un elemento volumétrico representativo del conjunto es equivalente al promedio volumétrico realizado en el volumen infinito. Este se calcula como

$$\bar{\varepsilon} = \langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{v} \int_v \varepsilon dv, \quad \bar{\sigma} = \langle \sigma \rangle = \frac{1}{v} \int_v \sigma dv, \quad \bar{W} = \langle W \rangle = \frac{1}{v} \int_v W dv = \frac{1}{2} \bar{\varepsilon} \cdot \bar{\mathbb{C}}[\bar{\varepsilon}], \quad (5.34)$$

A partir de estas definiciones se desprende que la rigidez efectiva no es equivalente a su promedio volumétrico $\bar{\mathbb{C}} \neq \langle \mathbb{C} \rangle$. Sin embargo, la rigidez efectiva se puede acotar a través de la energía de deformación como

$$\bar{\varepsilon} \cdot \mathbb{C}^{n-}[\bar{\varepsilon}] \leq \bar{\varepsilon} \cdot \bar{\mathbb{C}}[\bar{\varepsilon}] \leq \bar{\varepsilon} \cdot \mathbb{C}^{n+}[\bar{\varepsilon}] \quad \forall \bar{\varepsilon}, \quad (5.35)$$

que se representan de manera abreviada como

$$\mathbb{C}^{n-} \leq \bar{\mathbb{C}} \leq \mathbb{C}^{n+}, \quad (5.36)$$

donde n hace referencia al orden de la cota, relacionada con el tipo de información estadística que se conoce de la muestra. Las funciones de probabilidad de n -puntual reflejan la cantidad de veces relativa (probabilidad) de que suceda un evento específico en el conjunto. Por ejemplo, la autocorrelación de dos-puntos de la fase i , $S_2^{ii}(x_1, x_2)$ refleja la probabilidad de que la fase i se encuentre en x_1 y en x_2 . Si $x_1 = x_2$, la autocorrelación se simplifica a la probabilidad de un-punto $S_1^i(x_1)$ que refleja la fracción volumétrica de la fase i en x_1 . Es decir, que la textura cristalográfica como se define en la sección 5.3 es una función estadística de un-punto. Cuanto mayor es el orden de la cota, más estrecha resulta. En este trabajo se utilizan cotas de orden 0, 1 y 2.

En la práctica, además de delimitar la energía de deformación, las cotas sirven para calcular límites explícitos para cada constante elástica [72], en notación de Voigt para los elementos diagonales

$$C_{\alpha\alpha}^- \leq \bar{C}_{\alpha\alpha} \leq C_{\alpha\alpha}^+ \quad \alpha = \beta, \quad (5.37)$$

y para los elementos fuera de la diagonal

$$Z_{\alpha\beta}^- \leq \bar{C}_{\alpha\beta} \leq Z_{\alpha\beta}^+ \quad \alpha \neq \beta, \quad (5.38)$$

$$\text{con } Z_{\alpha\beta}^\pm = \frac{1}{2} \left(C_{\alpha\beta}^- + C_{\alpha\beta}^+ \pm \sqrt{(C_{\alpha\alpha}^+ - C_{\alpha\alpha}^-)(C_{\beta\beta}^+ - C_{\beta\beta}^-)} \right).$$

Si las Ecs. 5.37 y 5.38 se cumplen, entonces la energía de deformación está limitada por las cotas $\mathbb{C}^{n\pm}$.

5.4.1. Cotas de orden 0

Las cotas de orden 0 son independientes de la información microestructural, la fracción volumétrica, o la distribución de orientaciones, y por consiguiente abarcan cualquier tipo de microestructura que pudieran generar los componentes del material. Como consecuencia de esto, las cotas de orden 0 son tensores isótropos que se pueden representar con la proyección

$$\mathbb{C}^I = \lambda_1 \mathbb{P}_1 + \lambda_2 \mathbb{P}_2, \quad (5.39)$$

donde $\mathbb{C}^I$ es un tensor de rigidez isótropo, $\mathbb{P}_1 = \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}$ y $\mathbb{P}_2 = \mathbb{I}^S - \mathbb{P}_1$. La cota superior se encuentra como un problema de optimización [73] de la forma

$$\{\lambda_1^{0+}, \lambda_2^{0+}\} = \arg \min_{\lambda_\alpha} \text{tr}(\lambda_1 \mathbb{P}_1 + \lambda_2 \mathbb{P}_2), \quad \text{donde } \mathbb{C}(x) \leq \lambda_1 \mathbb{P}_1 + \lambda_2 \mathbb{P}_2 \quad \forall x \in v, \quad (5.40)$$

es decir, buscando el tensor isótropo con menor traza que acota energéticamente el comportamiento elástico del material en cualquier posición de la forma

$$\bar{\mathbb{C}} \leq \mathbb{C}^{0+} = \lambda_1^{0+} \mathbb{P}_1 + \lambda_2^{0+} \mathbb{P}_2. \quad (5.41)$$

La cota inferior se calcula a partir de la cota superior obtenida para el tensor de compliancia como $\mathbb{C}^{0-} = (\mathbb{S}^{0+})^{-1}$. Esto asegura que las cotas son estrictamente positivas, es decir, que su energía de deformación es siempre mayor a cero [72]. Para el caso de materiales con más de una fase, se calculan los autovalores $\lambda_{1,2}^{0\pm}$ para cada fase y se seleccionan los máximos para las cotas superiores y los mínimos para las cotas inferiores.

Una utilidad secundaria de las cotas de orden 0 es la definición de un factor adimensional de anisotropía (AF) [72] como

$$AF(\mathbb{C}) = \frac{\lambda_1^{0+} \lambda_2^{0+}}{\lambda_1^{0-} \lambda_2^{0-}} \in [1, +\infty). \quad (5.42)$$

Este factor estima cuán anisótropo es un material en una escala donde 1 representa la isotropía. Es análogo al factor de Zener definido para materiales cúbicos [74], pero esta definición es aplicable a cualquier tipo de simetría elástica. Además, puede ser utilizado tanto para materiales monocristalinos como policristalinos. Por ejemplo, para un monocristal de acero 304 el $AF = 3,18$, mientras que si el mismo acero es policristalino y su textura es aleatoria (isótropa), entonces el $AF = 1$.

5.4.2. Cotas de orden 1

Las cotas de primer orden se calculan a partir de información estadística de un punto, es decir, la ODF o la fracción volumétrica de las fases. Se obtienen a través de realizar el promedio volumétrico definido por la Ec. 5.24 como

$$\mathbb{C}^{1+} = \mathbb{C}^{\text{Voigt}} = \langle \mathbb{C} \rangle, \quad \mathbb{C}^{1-} = \mathbb{C}^{\text{Reuss}} = \langle \mathbb{C}^{-1} \rangle^{-1}. \quad (5.43)$$

La cota inferior supone continuidad de tensión y la cota superior continuidad de deformación. Usualmente, se las denomina como cotas de Reuss [75] y Voigt [76] respectivamente. El promedio entre ambas cotas da un valor útil para realizar estimaciones denominado promedio de Voigt-Reuss-Hill [77].

Si la rigidez local se define como la rigidez monocristalina transformada $\mathbb{C}(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}(\mathbf{x}) \star \tilde{\mathbb{C}}$, entonces el promedio volumétrico se puede calcular, a través de la ODF, como el promedio en orientaciones definido en 5.24

$$\langle \mathbb{C} \rangle = \frac{1}{v} \int_v \mathbb{C}(\mathbf{x}) dv = \langle f, \mathbb{C}(\mathbf{Q}) \rangle = \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) \mathbb{C}(\mathbf{Q}) d\mathbf{Q}. \quad (5.44)$$

Este promedio se calcula a partir de la expansión tensorial de Fourier de la textura 5.3.2 y de la descomposición armónica, como se describe en la sección 5.4.5.

Si se trata de un material con más de una fase, entonces las cotas se definen como el promedio pesado por la fracción volumétrica

$$\langle \mathbb{C} \rangle_{\text{multi}} = \sum_{p=1}^m \frac{v_p}{v} \langle \mathbb{C} \rangle_p \quad (5.45)$$

5.4.3. Cotas de orden 2

Hashin y Shtrikman (HS) introdujeron principios variacionales que involucran al tensor de polarización [78], permitiendo la definición de cotas de un orden mayor. La tensión local se puede redefinir a partir de un material constante de comparación $\mathbb{C}_0$ y una tensión de polarización $\hat{\boldsymbol{\tau}}$ dependiente de la posición como

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbb{C}_0[\boldsymbol{\varepsilon}] + \hat{\boldsymbol{\tau}} \quad \text{con} \quad \hat{\boldsymbol{\tau}} = (\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}_0)[\boldsymbol{\varepsilon}]. \quad (5.46)$$

Suponiendo ausencia de orden de largo alcance, polarización de tensión constante, y estadística de dos puntos elipsoidal, la energía de deformación efectiva se puede reformular como

$$W^{\text{HS}} = \frac{1}{2} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbb{C}_0[\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}] + \frac{1}{2} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \langle \boldsymbol{\tau} \rangle, \quad \text{donde} \quad \langle \boldsymbol{\tau} \rangle = (\langle \mathbb{L} \rangle_v^{-1} - \mathbb{P}_0^{-1})[\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}]. \quad (5.47)$$

Aquí $\mathbb{P}_0$ es el tensor de polarización que, si se supone estadística de 2 puntos isotropa y se utiliza un material de comparación $\mathbb{C}_0$ isotropo, se define de forma cerrada como

$$\mathbb{P}_0 = \frac{1}{c_1 + 2c_2} \mathbb{P}_1 + \frac{2}{5c_2} \frac{c_1 + 3c_2}{c_1 + 2c_2} \mathbb{P}_2, \quad (5.48)$$

donde c_1 y c_2 son los autovalores asociados al material isotropo de comparación ($\mathbb{C}_0 = c_1 \mathbb{P}_1 + c_2 \mathbb{P}_2$). Por otro lado, el operador $\mathbb{L}$ se define como

$$\mathbb{L}(\mathbf{x}) = [\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}_0 + \mathbb{P}_0^{-1}]^{-1} = \mathbf{Q}(\mathbf{x}) \star \tilde{\mathbb{L}}, \quad \tilde{\mathbb{L}} = [\tilde{\mathbb{C}} - \mathbb{C}_0 + \mathbb{P}_0^{-1}]^{-1}. \quad (5.49)$$

El promedio volumétrico de $\mathbb{L}$ nuevamente se calcula como el promedio en orientaciones a través de la descomposición armónica que se muestra en la sección 5.4.5. Las expresiones

de Hashin-Shtrikman para la energía de deformación y para la rigidez quedan entonces definidas [57, 79] como

$$W^{\text{HS}} = \frac{1}{2} \bar{\varepsilon} \cdot \mathbb{C}^{\text{HS}}[\bar{\varepsilon}], \quad \mathbb{C}^{\text{HS}} = \mathbb{C}_0 - \mathbb{P}_0^{-1} + \langle \mathbb{L} \rangle^{-1}. \quad (5.50)$$

Finalmente, utilizando las cotas de orden 0 como material de comparación isótropo, se definen las cotas de Hashin-Shtrikman como

$$\mathbb{C}^{2-} = \mathbb{C}^{\text{HS}-}|_{\mathbb{C}_0=\mathbb{C}^{0-}}, \quad \mathbb{C}^{2+} = \mathbb{C}^{\text{HS}+}|_{\mathbb{C}_0=\mathbb{C}^{0+}}. \quad (5.51)$$

5.4.4. Aproximación Autoconsistente de HS

En problemas de optimización, frecuentemente es útil contar con una aproximación puntual, en lugar de un dominio acotado. Con este fin se define la aproximación de rigidez efectiva basada en la solución autoconsistente. Para esto, primero se calcula la solución autoconsistente buscando un tensor isótropo que sea igual a la expresión HS evaluada con dicho tensor considerando isotropía cristalina ($f(\mathbf{Q}) = 1$)

$$\mathbb{C}_0^{\text{SC}} = \mathbb{C}^{\text{HS}}|_{f(\mathbf{Q})=1, \mathbb{C}_0=\mathbb{C}^{\text{HS}}}. \quad (5.52)$$

Luego, el tensor autoconsistente $\mathbb{C}_0^{\text{SC}}$ se utiliza como material de comparación en la expresión de HS, e introduciendo información microestructural se llega a la aproximación efectiva basada en la solución autoconsistente,

$$\mathbb{C}_{\text{app}}^{\text{HS}} = \mathbb{C}^{\text{HS}}|_{\mathbb{C}_0=\mathbb{C}_0^{\text{SC}}}. \quad (5.53)$$

Esta solución es análoga al promedio de Voigt-Reuss-Hill, pero considerando cotas de segundo orden. Además, tiene la ventaja de que, una vez calculado el tensor de comparación, la Ec. 5.53 solo requiere un promedio volumétrico en $\mathbb{L}$, mientras que la aproximación de Hill requiere dos promedios volumétricos (en $\mathbb{C}$ y $\mathbb{C}^{-1}$).

5.4.5. Descomposición armónica

Como se mostró en las Ecs. 5.44 y 5.50, tanto las cotas de primer orden como las de segundo orden se calculan a partir del promedio volumétrico que, mediante la ODF, se expresa como un promedio en orientaciones. Para poder expresar el promedio en orientaciones en función de la expansión en serie de Fourier descrita en la sección 5.3.2, es necesario introducir la descomposición armónica de tensores.

Un tensor, por ejemplo el tensor de rigidez $\tilde{\mathbb{C}}$, se puede descomponer en tensores irreducibles bajo la acción de elementos de $SO(3)$ [60, 80] como

$$\tilde{\mathbb{C}} = \sum_{\alpha=0}^r \sum_{\gamma=1}^{n_{r\alpha}} \mathbb{J}_{\langle r+\alpha \rangle \gamma} \left[\tilde{\mathbb{H}}'_{\langle \alpha \rangle \gamma} \right] = \text{hd}(\tilde{\mathbb{H}}'_{\langle \alpha \rangle \gamma}), \quad (5.54)$$

donde r es el orden del tensor, en este caso 4, $\mathbb{J}_{\langle r+\alpha \rangle \gamma}$ son tensores isótropos y $\tilde{\mathbb{H}}'_{\langle \alpha \rangle \gamma}$ son tensores armónicos que surgen de la descomposición de $\tilde{\mathbb{C}}$ [81]. Debido a la isotropía de los tensores $\mathbb{J}_{\langle r+\alpha \rangle \gamma}$, una rotación $\mathbf{Q}$ se transmite solo a las partes armónicas, como,

$$\mathbb{C} = \mathbf{Q} \star \tilde{\mathbb{C}} = \text{hd}(\mathbf{Q} \star \tilde{\mathbb{H}}'_{\langle \alpha \rangle \gamma}). \quad (5.55)$$

Esta descomposición también puede expresarse en términos de las bases armónicas $\mathbb{H}'_{\langle \alpha \rangle \beta}$ utilizadas en la expansión de textura 5.28 a partir de las funciones $\tilde{h}_{\alpha\gamma\beta}$ como

$$\mathbb{C}(\mathbf{Q}) = \mathbf{Q} \star \tilde{\mathbb{C}} = \text{hd} \left(\sum_{\beta=1}^{n'_\alpha} \tilde{h}_{\alpha\gamma\beta} \mathbf{Q} \star \mathbb{H}'_{\langle \alpha \rangle \beta} \right), \quad (5.56)$$

con

$$\tilde{\mathbb{H}}'_{\langle \alpha \rangle \gamma} = \sum_{\beta=1}^{n'_\alpha} \tilde{h}_{\alpha\gamma\beta} \mathbb{H}'_{\langle \alpha \rangle \beta}.$$

Por consiguiente, retomando las funciones tensoriales $\mathbb{F}'_{\langle \alpha \rangle \beta}(\mathbf{Q}) = \mathbf{Q} \star \mathbb{H}'_{\langle \alpha \rangle \beta}$ definidas en 5.3.2, el promedio en orientaciones 5.24 también se transfiere a la parte armónica a través de los coeficientes tensoriales $\mathbb{V}'_{\langle \alpha \rangle \beta} = \langle f, \mathbb{F}'_{\langle \alpha \rangle \beta} \rangle = \langle f, \mathbf{Q} \star \mathbb{H}'_{\langle \alpha \rangle \beta} \rangle$ como

$$\begin{aligned} \langle f, \mathbb{C} \rangle &= \text{hd} \left(\sum_{\beta=1}^{n'_\alpha} \tilde{h}_{\alpha\gamma\beta} \langle f, \mathbf{Q} \star \mathbb{H}'_{\langle \alpha \rangle \beta} \rangle \right) \\ &= \text{hd} \left(\sum_{\beta=1}^{n'_\alpha} \tilde{h}_{\alpha\gamma\beta} \mathbb{V}'_{\langle \alpha \rangle \beta} \right). \end{aligned} \quad (5.57)$$

De forma que el promedio en orientaciones del tensor $\mathbb{C}$ queda definido como una combinación lineal de las funciones $\tilde{h}_{\alpha\gamma\beta}$ que reflejan las propiedades del monocristal, y los coeficientes de textura $\mathbb{V}'_{\langle \alpha \rangle \beta}$ que describen la distribución de los cristales. Para un tensor con simetría menor y mayor de orden 4, como es el caso de $\mathbb{C}$, el promedio en orientaciones solo depende de coeficientes de textura de orden 2 y 4 y se expresa de forma explícita como

$$\langle f, \mathbb{C} \rangle = \text{hd} \left(\tilde{h}_{11}, \tilde{h}_{12}, \sum_{\beta=1}^{n'_2} \tilde{h}_{21\beta} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle \beta}, \sum_{\beta=1}^{n'_2} \tilde{h}_{22\beta} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle \beta}, \sum_{\beta=1}^{n'_4} \tilde{h}_{41\beta} \mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle \beta} \right), \quad (5.58)$$

Esta relación no implica que coeficientes de orden 1 y 3 no existen, sino que, por la simetría menor y mayor de $\mathbb{C}$, no influyen en el promedio en orientaciones de esta cantidad. Además, por ser un tensor de orden 4, los coeficientes de orden mayor ($\alpha > 4$) tampoco influyen en el promedio en orientaciones. El promedio en orientaciones para el tensor $\mathbb{C}^{-1}$, necesario para el cálculo de la cota de Reuss, y el tensor $\mathbb{L}$, necesario para las cotas HS, se calculan de forma análoga a la Ec. 5.58, ya que ambos presentan el mismo orden y las mismas simetrías que $\mathbb{C}$. A partir de esto se concluye que, considerando las aproximaciones descritas en

la sección 5.4.3, las cotas HS (de orden 2) se pueden expresar de forma explícita como función de la información microestructural de 1-punto.

Estas expresiones compactas y cerradas permiten el cálculo eficiente de las cotas elásticas, lo que representa una ventaja al abordar problemas inversos como se muestra en el capítulo 7. Más detalles de esta metodología, introducida por Lobos Fernández et al., se encuentran en [57, 81, 82].

5.4.6. Ejemplo

En la literatura es usual encontrar gráficos de cotas de rigidez para materiales compuestos, como el ejemplo que se muestra en la Fig. 5.5 para un material con dos fases isótropas, una base de carburo de tungsteno con distintas fracciones volumétricas de cobalto, extraída de [83]. Se observa que cuando el material es puro, es decir, fracciones de 0 o 1, dado que el material es homogéneo, las cotas coinciden. Para cualquier otra fracción, las cotas difieren y se observa que los puntos experimentales se encuentran entre las cotas, tanto de orden 1 como de orden 2.

En el marco teórico de Lobos Fernández et al. [84], cada orientación puede considerarse como una fase distinta, por lo que la representación de las cotas en función de un número infinito de fases no es trivial. Sin embargo, por la extensión de las simetrías 5.31 y 5.32 la rigidez de un material con macro y micro simetrías cúbicas depende de un coeficiente tensorial de textura de orden 4 ($\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}$) con un solo elemento independiente (V_{1111}), ver tablas ??, por lo que este caso es útil para visualizar las cotas como función de una sola variable. Las cotas de orden 1 y 2, junto con la aproximación efectiva de HS, se calcularon para acero inoxidable, cuyo tensor de rigidez $\tilde{\mathbb{C}}$ se obtuvo de [85]. La constante homogeneizada C_{44} como función de la variable V_{1111} se muestra en la Fig. 5.6. Las cotas representadas aquí para un policristal texturado son similares a las cotas calculadas para materiales bifásicos en función de la fracción volumétrica. Por ende, la Fig. 5.6 muestra la transición desde un estado homogéneo monocristalino ($V_{1111} = 0,36$) hacia materiales heterogéneos pero con macro-simetría cúbica. El punto $V_{1111} = 0$ representa la isotropía macroscópica ($f(Q) = 1$) que es subgrupo de la simetría cúbica.

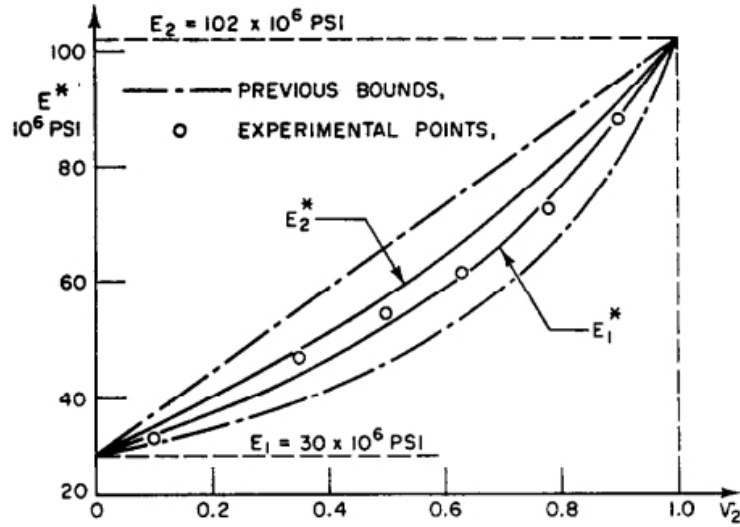


Figura 5.5: Cotas elásticas para el módulo de Young E en un material compuesto por dos fases isotrópicas de carburo de tungsteno con distintas fracciones volumétricas de cobalto, extraída de [83]. Las cotas HS se distinguen por los nombre E_1^* y E_2^*

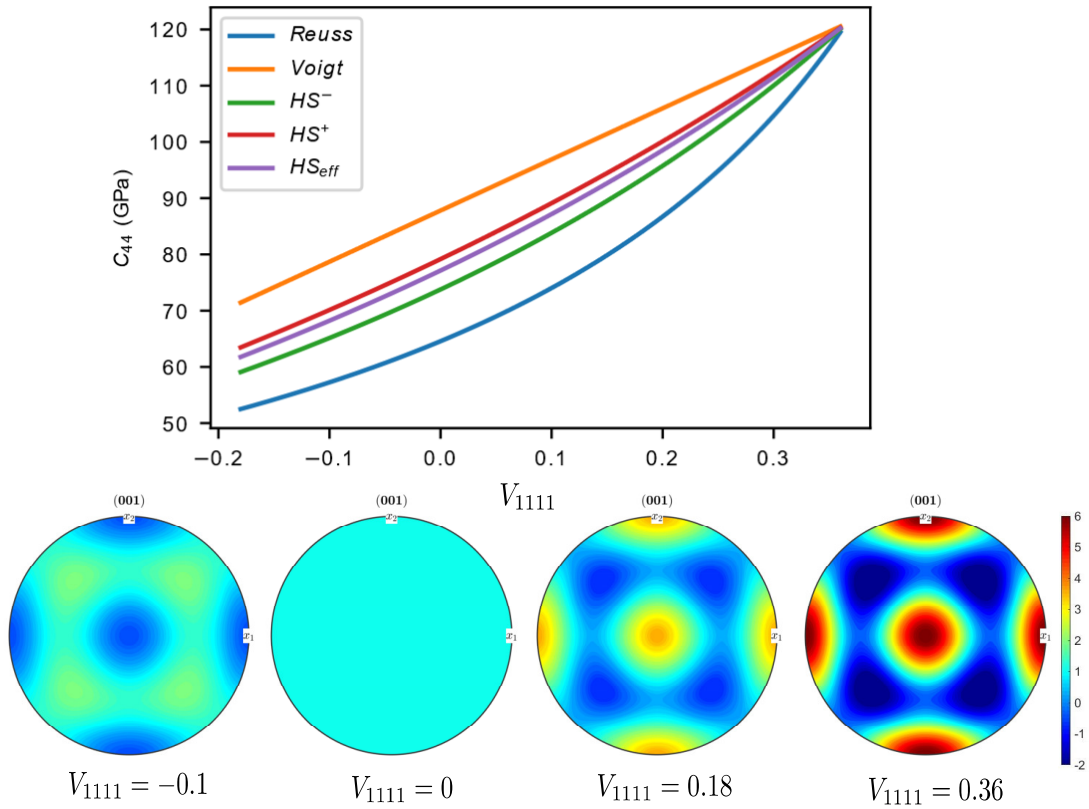


Figura 5.6: Superior: cotas elásticas para el componente C_{44} para un acero con macro y micro simetrías cúbicas, como función del único componente de textura independiente V_{1111} para $\alpha \leq 4$. La figura se asemeja a la representación clásica de cotas HS. Inferior: figuras de polos (001) hasta orden 4 generadas para distintos valores de V_{1111} que muestran la macro-simetría cúbica y la transición desde un estado monocristalino ($V_{1111} = 0,36$) hacia un material heterogéneo.

DETERMINACIÓN DE CONSTANTES ELÁSTICAS

6.1. Introducción

Como se explicó en el capítulo 2, el acoplamiento entre las propiedades mecánicas y el fenómeno de propagación de ondas permite la inferencia de constantes elásticas a partir de campos ultrasónicos. Dado que las ondas pueden propagarse fácilmente en distintas direcciones, técnicas como la goniometría ultrasónica permiten recuperar el tensor de constantes elásticas completo, y, por consiguiente, permiten caracterizar la anisotropía mecánica. Esto constituye una gran ventaja frente a ensayos convencionales, ya que, además de ser destructivos, requieren la fabricación de distintas muestras cortadas en diferentes direcciones.

De acuerdo con el contenido del capítulo 3 los experimentos de goniometría ultrasónica se describen mejor por un modelo para medios finitos (MPF) que por un modelo para medios infinitos (MPI), principalmente para productos $f \cdot d$ bajos para los cuales el medio se comporta como una guía de onda. La desventaja del MPF es que es computacionalmente más costoso, particularmente cuando se consideran medios sin macro-simetrías. Tal vez por esta razón, en la literatura se observa que los trabajos que utilizan este tipo de modelos restringen la macro-simetría a ortótropa o mayor, como por ejemplo en [8, 28, 30]. Esto, además de limitar el rango de aplicación, implica que se deben conocer a priori las macro-simetrías de la muestra y que las mismas deben alinearse con el sistema de medición. En este trabajo, la implementación en arquitectura para GPU del modelo directo busca compensar el costo computacional del MPF, lo que permite evitar la imposición de macro-simetrías elásticas.

Conforme con lo ilustrado en el capítulo 4, la refracción y la aparición de ecos durante los experimentos de goniometría ultrasónica generan el desplazamiento del haz, el cual no puede ser adquirido completamente por transductores convencionales de dimensiones finitas. Modelos de haces finitos contemplan esta situación, pero, o son computacionalmente costosos, o realizan aproximaciones groseras para la inversión de las señales, como en [17, 86-88]. La utilización de transductores de mayor superficie puede suplir esta discrepancia [29, 39, 41]. En este trabajo se utilizó un modelo de haz finito basado en el método de

espectro angular para la optimización de forma y posición de transductores ultrasónicos, con el objetivo de que su comportamiento se aproxime a la propagación de onda plana.

Otra limitación, observada en la literatura, reside en los parámetros utilizados durante la inversión de las señales ultrasónicas. En general, se observa que la estimación inicial de las constantes elásticas surge de datos previos [21, 89], mientras que para las cotas del espacio de búsqueda se utilizan porcentajes por encima y por debajo de la estimación inicial [31]. Este espacio de búsqueda no es óptimo, ya que puede incluir resultados inexistentes y excluir resultados posibles. Por otro lado, como se explicó en el capítulo 5, el comportamiento macroscópico de los materiales heterogéneos está determinado por las propiedades y la información estadística microestructural de los constituyentes. A partir de métodos de homogeneización se pueden definir cotas elásticas que restringen los valores posibles de las constantes elásticas. Las cotas de orden 0, en particular, delimitan los valores que pueden tomar las constantes de un material, independientemente de la información estadística, y por esta razón son de gran utilidad para restringir el espacio de búsqueda durante el proceso de optimización. Además, las aproximaciones a la rigidez efectiva, como por ejemplo la aproximación autoconsistente de HS 5.53, son útiles como estimaciones para iniciar la búsqueda.

En este capítulo se muestra la integración de los capítulos anteriores en una implementación de goniometría ultrasónica que permite medir probetas en un amplio rango de espesores y frecuencias sin suponer la macro-simetría elástica de la muestra. Además, el uso de transductores dedicados y la implementación en GPU del modelo directo permiten reducir la duración del proceso de inversión de resultados. También se muestran los detalles experimentales que, gracias a la automatización del procedimiento, permiten realizar un ensayo de goniometría ultrasónica en menos de 2 minutos. Para probar el método, se realizaron mediciones de goniometría ultrasónica en distintos materiales, para los cuales se calcularon cotas y estimaciones iniciales que fueron empleadas durante la inversión del tensor de rigidez. Los resultados fueron contrastados con mediciones de difracción de rayos X (XRD) y difracción de neutrones (ND), que a través de los métodos desarrollados en el capítulo 5, sirven para estimar las propiedades elásticas macroscópicas.

6.2. Método experimental

6.2.1. Dispositivo experimental

La goniometría ultrasónica, adoptada en este trabajo, se llevó a cabo en un dispositivo diseñado y construido especialmente para este fin. El dispositivo se muestra en la Fig. 6.1 y consta de una estructura realizada en perfiles de aluminio, un goniómetro, dos transductores ultrasónicos y una cuba de acrílico para contener agua, la cual tiene dos aberturas laterales por las cuales ingresan las caras activas de los transductores. Estos últimos se encuentran vinculados a la estructura a través de soportes cinemáticos que permiten el desplazamiento lineal en dos dimensiones y la rotación en dos dimensiones,

cuyo fin es alinear los transductores con los ejes de rotación y con la normal a la probeta, como se muestra en la Fig. 6.2. La cara frontal de los transductores está en contacto con el

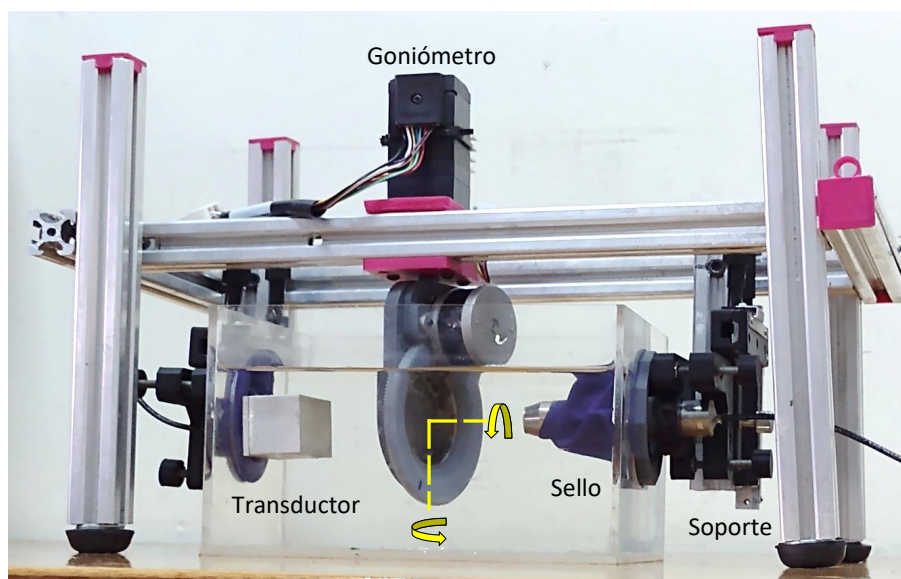


Figura 6.1: Dispositivo experimental para mediciones de goniometría ultrasónica.

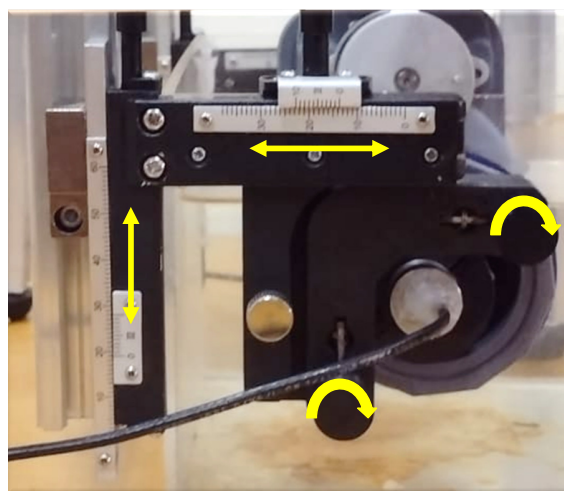


Figura 6.2: Soportes cinemáticos para transductores ultrasónicos. Tienen 4 grados de libertad, 2 lineales y 2 rotacionales.

agua, mientras que la parte posterior se encuentra sujeta a los soportes. Se fabricaron sellos de látex para contener el agua sin restringir el movimiento de los transductores. Estos últimos también fueron diseñados y construidos específicamente para esta aplicación, como se explica en el capítulo 4.

El goniómetro, que se muestra en el centro de la Fig. 6.1 y se detalla en la Fig. 6.3, se encarga de sostener la probeta y hacerla rotar en las direcciones polar y azimutal. La rotación polar la realiza el motor superior que, gracias a una reducción armónica, tiene alta resolución ($0.00072^\circ/\text{pulso}$) y bajo “backlash” (0.05°). La rotación azimutal se realiza con un motor y un rodamiento asociados mediante un engranaje recto. La probeta se vincula

al goniómetro a través del anillo interior del rodamiento. El control en la posición de la probeta debe ser muy preciso, pero a la vez el dispositivo debe sostener la probeta sin interferir con el campo ultrasónico. Por la complejidad de esta tarea, el diseño de esta pieza requirió un gran número de iteraciones que se fabricaron en distintos materiales. Los prototipos se realizaron con impresión 3D y el diseño final se llevó a cabo en aluminio por mecanizado CNC por el grupo de mecánica de fractura del Centro Atómico Constituyentes, CNEA. El rodamiento, al estar en contacto con el agua, es susceptible a la corrosión, por lo que se optó por adquirir un rodamiento fabricado íntegramente en circonia.

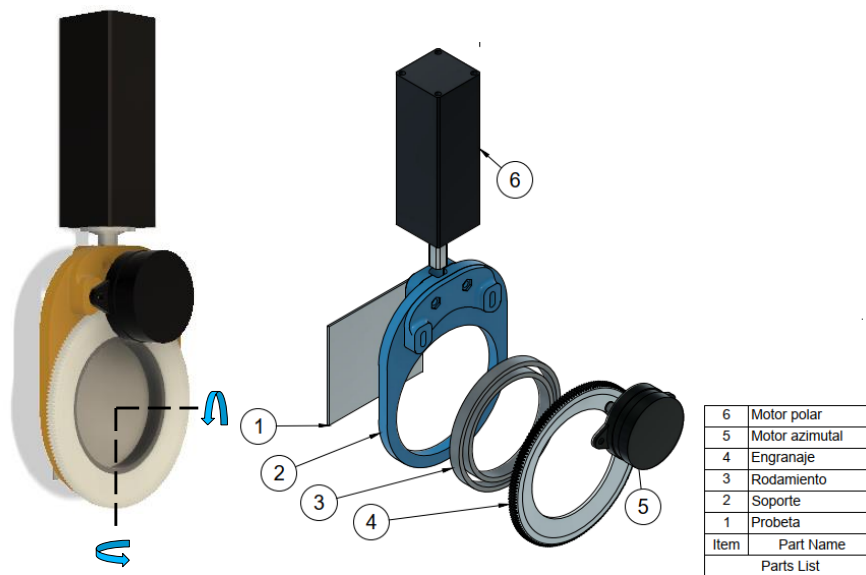


Figura 6.3: Detalle de diseño del goniómetro ultrasónico.

El control del movimiento se realiza por medio de un microcontrolador programado con el software GRBL [90] que se controla mediante código-G. Esto dota al dispositivo de la capacidad de realizar distintos recorridos de acuerdo al objetivo del experimento. La generación y amplificación de los pulsos ultrasónicos se realiza con un equipo de ultrasonido TecScan UTPR-50 que fue provisto por el OIEA para esta tesis en el marco del Proyecto Nacional de Cooperación Técnica con el Organismo Internacional de Energía Atómica ARG/0/017 “Building General Capacity in Nuclear Science and Applications in National Strategic Areas” [91]. La digitalización de la señal se lleva a cabo con un osciloscopio PicoScope 4227, que cuenta con un ancho de banda de 100 MHz y una resolución vertical de 12 bits. Este fue automatizado a través de su API para Python [92]. La integración de todo el sistema hace que no se requiera intervención humana y, por lo tanto, permite realizar un experimento de goniometría ultrasónica en menos de dos minutos, un tiempo significativamente menor que, por ejemplo, una medición de XRD para caracterizar la textura. La Fig. 6.4 muestra un diagrama en bloques del conexionado de los equipos que permite la automatización del experimento.

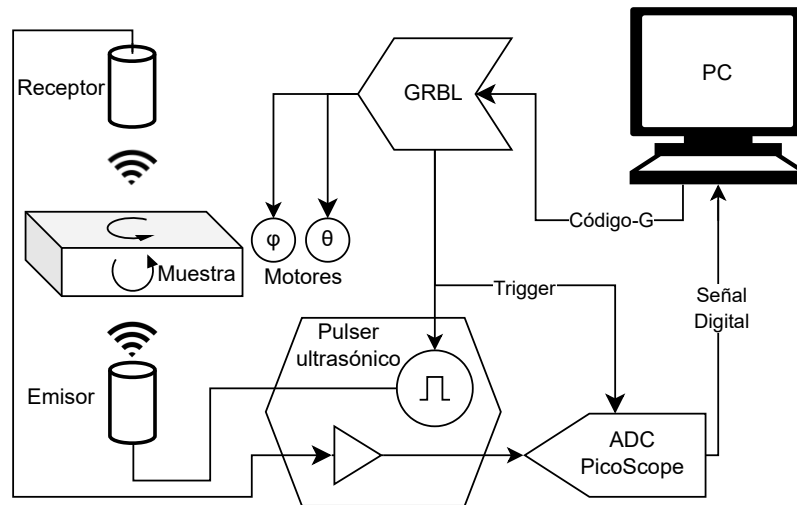


Figura 6.4: Diagrama en bloques del equipo. La integración de las partes permitió la automatización de las mediciones.

6.2.2. Optimización meta-heurística

Dado que las ecuaciones que relacionan los campos ultrasónicos transmitidos con las constantes elásticas no son analíticamente invertibles, se requiere un ajuste mediante el cual se varían las entradas (constantes elásticas) de un modelo directo (MPF) hasta minimizar la función objetivo (error entre el experimento y la simulación). En la Fig. 6.5 se vuelve a mostrar el esquema de optimización que se describió en el capítulo 3, pero esta vez se incluyen las cotas y la estimación inicial que se describen en la sección 6.2.6.2.

Las optimizaciones basadas en el gradiente son útiles cuando la función objetivo es diferenciable, por lo que las derivadas de la función guían los pasos de búsqueda hacia el mínimo. Cuando el problema es no lineal, no diferenciable o no continuo, existen alternativas meta-heurísticas que implementan un grupo de reglas que intentan llevar el objetivo hacia el mínimo global. Mientras que estos métodos no garantizan dicho mínimo, no requieren información de la función objetivo más allá de sus entradas y salidas. Muchos de estos algoritmos están basados en estrategias evolutivas en las que se genera una población donde cada individuo representa una solución admisible. El error de los individuos se utiliza para la generación de la población subsiguiente que, agregando algún grado de estocasticidad, resulta en una buena exploración del espacio de búsqueda y una mejor probabilidad de éxito. Entre estos, la estrategia evolutiva de adaptación de matriz de covarianza (CMA-ES) [93] es un algoritmo evolutivo que ha demostrado ser efectivo para optimizaciones globales [94] por lo que fue elegido entre los algoritmos disponibles en la biblioteca de optimización pymoo [53].

Si bien es común que el ajuste se realice con el espectro de las señales, como por

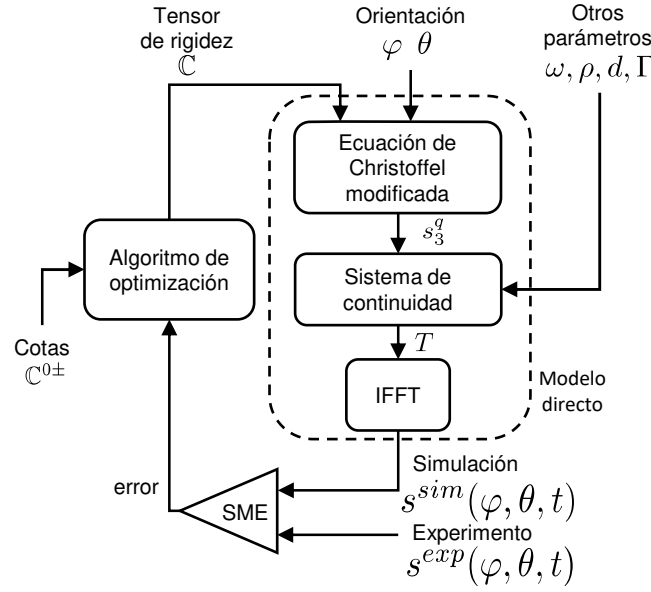


Figura 6.5: Optimización de constantes elásticas. El algoritmo de optimización evalúa el error entre la simulación y el experimento para realizar modificaciones en el tensor de rigidez.

ejemplo en [8, 28, 88], en este trabajo se decidió calcular el error con las señales temporales. Esta decisión, si bien trae aparejado el incremento del cómputo por la iFFT de la Ec. 3.21, se basó en la observación empírica de una mejor convergencia en este dominio. Entonces, se eligió como función objetivo el error cuadrático medio (SME) de la forma

$$F(C_{ij}) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (s_i^{sim}(C_{ij}) - s_i^{exp})^2, \quad (6.1)$$

donde s^{sim} y s^{exp} son las señales calculadas y las experimentales respectivamente, el subíndice i recorre todas las combinaciones de las variables φ, θ, t , y N es el número total de puntos adquiridos. Durante la inversión se ajusta un factor de proporcionalidad τ para definir el comportamiento viscoelástico. La parte imaginaria del tensor de rigidez se aproxima con una fracción de la parte real con la forma

$$C_{ij}^{ve} = C_{ij} + i\hat{C}_{ij} \approx C_{ij} + i\tau C_{ij}, \quad (6.2)$$

donde C_{ij} y $\hat{C}_{ij}$ son la parte real e imaginaria de la matriz de viscoelasticidad C_{ij}^{ve} , respectivamente. Esta decisión está basada en la observación de que la simulación se aproxima mejor al experimento introduciendo la parte imaginaria, pero que una vez introducida, la simulación es relativamente insensible a su magnitud [9] como se mencionó en la sección 2.3.3. Por lo tanto, ajustar cada componente de la parte imaginaria no es crítico para el objetivo de este trabajo. El factor τ es un número adimensional que se permite variar entre $1e-3$ y $5e-2$, rango determinado de forma empírica.

Dada la complejidad del modelo directo (MPF), no es posible calcular la propagación de errores, es decir, que no se puede estimar la influencia de los defectos de la medición

(incertidumbre en el muestreo, errores de posición, ruido, entre otros) en la exactitud de los resultados. Por esta razón, se optó por estimar los intervalos de confianza a partir del método de comparación con la matriz de covarianza descrito en el apéndice E.

6.2.3. Homogeneización y longitud de onda

El modelo ultrasónico de onda plana para medios finitos (MPF) descrito en la sección 3.3 requiere que el medio pueda ser considerado homogéneo. Los métodos de homogeneización de la sección 5.4 requieren la misma suposición. Para que esto se cumpla, la longitud de onda debe ser varias veces más grande que la longitud más grande de los constituyentes.

Por ejemplo, en aceros inoxidables laminados la longitud de onda de una onda transversal a 10 MHz es de alrededor de $300\ \mu\text{m}$, mientras que el tamaño de grano promedio en chapas laminadas es de $35\ \mu\text{m}$ [95], es decir que a esta frecuencia hay una relación cercana a 10, que resulta suficiente. En materiales compuestos unidireccionales el medio se puede considerar homogéneo hasta una frecuencia de alrededor de 50 MHz [96], debido a que el diámetro de la fibra es del orden del μm . Cuando se trata de compuestos de tipo “cross-ply” (láminas unidireccionales apiladas en distintas direcciones) el tamaño de la inhomogeneidad es del espesor de cada lámina, por lo que la frecuencia para la cual el medio deja de considerarse homogéneo es considerablemente más baja. Cuando el material no resulta homogéneo para las condiciones experimentales, se requieren modelos más sofisticados para la descripción del movimiento que abarquen la dispersión por granos [97] en el caso cristalino o la aparición de ondas de Floquet [98] en el caso de compuestos multicapas.

Por otro lado, como se mostró en la sección 3.2.2, la aproximación de medio infinito pierde validez para productos $f \cdot d$ bajos. Si, por ejemplo, se cuenta con una probeta delgada, incrementar la frecuencia serviría para mantener la aproximación de medio infinito, pero se contrapondría con la aproximación de medio homogéneo. Por esta razón, implementar el MPF, desarrollado en la sección 3.3, al ser válido en productos $f \cdot d$ bajos, permite mantener la condición de homogeneidad para un rango más amplio de condiciones.

Por otra parte, la divergencia del haz finito tiene dos componentes, uno relacionado con la dispersión al interactuar con la placa sólida y otro relacionado con la difracción propia del transductor. Esta última es inversamente proporcional a la frecuencia, es decir, que a medida que baja la frecuencia, incrementa la difracción del haz, que se expresa como vectores de onda no perpendiculares a la cara del transductor, como describen las Ecs. 4.19 y 4.20 en la sección 4.2.5. Este fenómeno impone un límite de bajas frecuencias. Dado que los transductores utilizados en este trabajo se diseñaron contemplando este fenómeno, como se mostró en el capítulo 4, no hace falta profundizar el análisis.

Los transductores ultrasónicos en general poseen una respuesta en frecuencia de tipo gaussiana que atenúa las frecuencias por fuera de la banda de interés, evitando la pérdida de homogeneización a altas frecuencias y la pérdida de onda plana por difracción a bajas

frecuencias. La frecuencia central de los transductores utilizados es de 10 MHz. Además, se utilizó un filtro pasa-bajo y uno pasa-alto, con frecuencias de corte en 25 y 1 MHz respectivamente, para atenuar aún más las frecuencias por fuera de la banda de interés.

6.2.4. Muestreo espacial

Tanto la rigidez como los campos ultrasónicos son propiedades direccionales, por lo que deben ser muestreadas de manera coherente con su dependencia de la orientación. El goniómetro ultrasónico desarrollado en este trabajo permite la rotación polar y azimutal de una muestra inmersa ubicada entre un par de transductores ultrasónicos. La estrategia de adquisición elegida consiste en realizar escaneos polares a distintos ángulos azimutales, lo que constituye una grilla esférica de puntos de muestreo. El paso de la grilla es crítico para limitar el tiempo experimental y de inversión, pero debe ser lo suficientemente chico para muestrear correctamente el campo como función de la orientación. Las ecuaciones de Navier (2.19), son tres ecuaciones lineales acopladas, donde, para un sólido generalmente anisótropo, el desplazamiento en una dirección depende de las otras y viceversa. Esto hace que, por ejemplo, un haz incidente en el plano x_1x_3 genere desplazamiento en las tres direcciones y que, por lo tanto, existan los tres modos de propagación.

Si, por otro lado, el material presenta macro-simetrías elásticas, la reducción de constantes elásticas puede significar el desacople de las ecuaciones de Navier para algunos planos de incidencia. Por ejemplo, un material con macro-simetría ortótropa contiene tres planos de simetría correspondientes a las direcciones principales. Para este caso, las ecuaciones de Navier en el plano x_1x_3 resultan en

$$\begin{aligned} C_{11} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + C_{55} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2} + (C_{13} + C_{55}) \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} &= \rho \ddot{u}_1 \\ C_{66} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + C_{44} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3^2} &= \rho \ddot{u}_2 \\ (C_{13} + C_{55}) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_3} + C_{55} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1^2} + C_{33} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} &= \rho \ddot{u}_3 \end{aligned} \quad (6.3)$$

donde se observa que el movimiento en la dirección x_2 se desacopla de los movimientos en las direcciones x_1 y x_3 por lo que el modo horizontal se vuelve puro. En este caso, si existe un haz incidente en el plano x_1x_3 solo se refractarán los modos qL y qSV, mientras que el modo SH, por tener polarización en la dirección x_2 , no será excitado. Entonces, el campo generado por un haz incidiendo en el plano x_1x_3 depende solo de las constantes elásticas C_{11} , C_{13} , C_{55} y C_{33} . De manera equivalente, el campo generado por un haz incidiendo en el plano de simetría x_2x_3 depende solo de las constantes C_{22} , C_{23} , C_{44} y C_{23} . Para otros planos, las ecuaciones de Navier están acopladas, el modo SH se vuelve qSH y el campo depende de las 9 constantes elásticas de un material ortótropo, es decir, de las ya mencionadas, más C_{12} y C_{66} . Este fenómeno se ejemplifica en la Fig. 6.6, donde se muestra una simulación de escaneos polares en CFRP para 3 ángulos azimutales $\varphi=0, 45$ y 90° . Aquí se muestra que el modo SH no aparece en los planos de simetría, mientras que el modo qSH sí

existe en un plano de no simetría. De esta forma se facilita la inversión en cada plano, ya

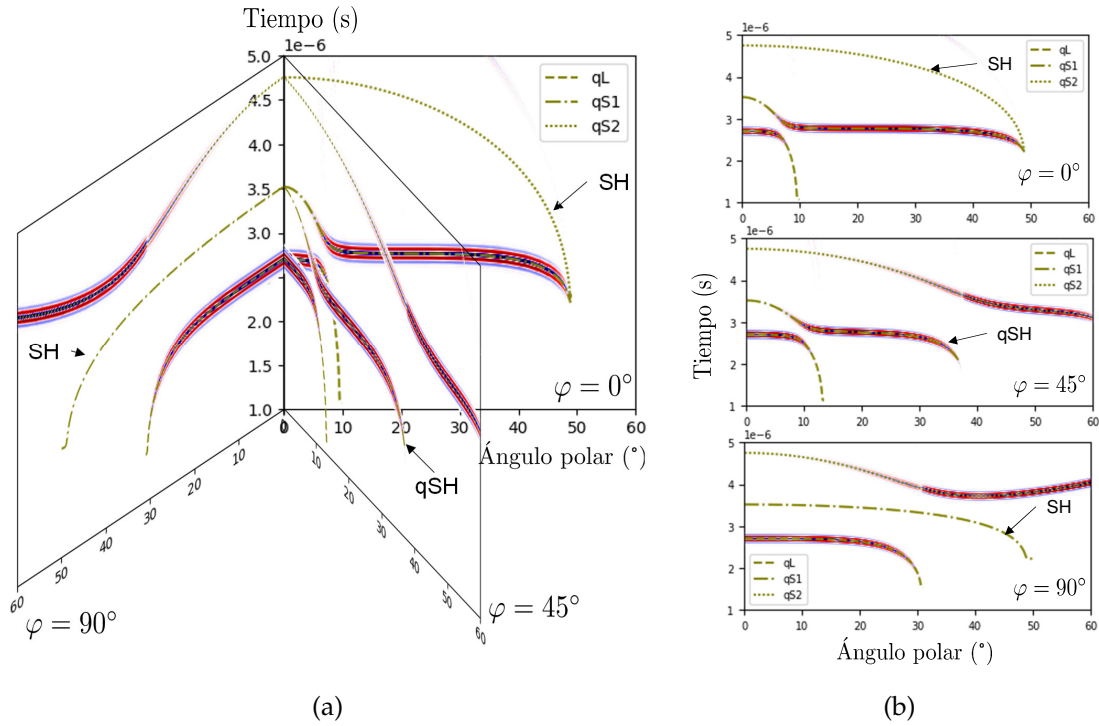


Figura 6.6: Escaneos polares en CFRP para 3 ángulos azimutales $\varphi=0, 45$ y 90° . Las líneas punteadas muestran los modos posibles, y se muestra que en los planos de simetría, el movimiento horizontal no es excitado.

que se trata de un problema de dimensiones reducidas. De acuerdo a Aristegui [21], se necesitan 3 planos para un material ortótropo, 4 planos para un material monoclinico y 8 planos para un material triclínico. Sin embargo, este procedimiento presenta una serie de desventajas: requiere conocer a priori la macro-simetría elástica del material; requiere conocer dónde se ubican los planos de simetría; y requiere poder alinear de forma precisa los planos de simetría con los ejes del experimento. Si, por otro lado, se considera que todos los materiales estudiados presentan macro-simetría triclínica, entonces no es requisito conocer y alinear las direcciones de simetría, en el caso de que existieran.

Un enfoque diferente fue propuesto por Lan et al. [99], en la cual las superficies de velocidad proyectadas en el dominio de los armónicos esféricos sirven para determinar a partir de qué orden se puede despreciar la energía remanente. Este orden determina la frecuencia espacial de muestreo mínima en analogía con el teorema de Nyquist-Shannon para señales temporales. Siguiendo el trabajo de Lan, se tomó el corte en el orden 6, para el cual se requiere muestrear en 12 planos azimutales.

La dirección polar requiere una mayor densidad de muestras, ya que el ángulo de incidencia difiere del ángulo de refracción de acuerdo a la Ley de Snell. Dado que los escaneos polares se hacen durante movimiento continuo, incrementar el número de puntos no incrementa el tiempo de medición, aunque sí el de inversión. Se eligió utilizar 300 puntos polares para cada plano azimutal.

Además, se introdujo una rotación azimutal inicial de aproximadamente 10° con respecto a una dirección principal de la muestra (la dirección de laminación o la dirección de las fibras en el caso de compuestos) para cada experimento. Como las direcciones principales dependen de un subgrupo de constantes elásticas, alinear estos ejes con los ejes del experimento puede simplificar el proceso de inversión. Dado que en este trabajo se busca caracterizar el material sin imponer restricciones de macro-simetría, esta rotación inicial impide explotar las simetrías de la muestra.

6.2.5. Unicidad y análisis de sensibilidad

Como se mencionó en la sección 3.2.3, la ecuación de Christoffel es única para un material dado, siempre y cuando se incluyan tanto los autovalores (velocidad de fase) como los autovectores (polarización). Si la polarización no es contemplada, existe la posibilidad de encontrar un compañero de polarización anómala. La optimización por simulación, descrita en la sección 3.4, incluye esta información, por lo que esta indeterminación no ocurre. Por otro lado, si un material presenta una macro-simetría tal que todos los planos de incidencia son planos de simetría, entonces nunca se puede estimular el modo SH y, por lo tanto, se pierde la información que compete a las constantes elásticas relacionadas con el movimiento horizontal. Esto sucede solo para materiales con macro-simetría hexagonal cuyo eje de simetría está alineado con la dirección x_3 . La ecuación de Navier para este material se desacopla en

$$\begin{aligned} C_{11} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + C_{44} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2} + (C_{13} + C_{44}) \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} &= \rho \ddot{u}_1 \\ \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + C_{44} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3^2} &= \rho \ddot{u}_2 \\ (C_{13} + C_{44}) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_3} + C_{44} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1^2} + C_{33} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} &= \rho \ddot{u}_3 \end{aligned} \quad (6.4)$$

Por lo tanto, la constante C_{12} no puede ser determinada. Para determinar esta constante, se requiere agregar una medición que pueda generar movimiento SH, por ejemplo, con un transductor de contacto transversal [21]. También, para materiales con macro-simetría isotrópica, al poseer solo planos de simetría, si no se supone isotropía durante la inversión, C_{12} puede tomar valores erróneos y aparentar macro-simetría hexagonal. Para cualquier otro caso, la goniometría ultrasónica posee unicidad con el tensor de rigidez y no requiere mediciones suplementarias.

Se realizó una estimación de la sensibilidad del método a partir de la variación del error absoluto medio que hay entre las señales temporales de la simulación de un experimento para un material dado y la simulación repetida para el mismo material, pero aumentando el valor de una constante elástica a la vez. Primero se efectuó el proceso para una placa de acero 304 con espesor de 1 mm partiendo de la isotropía y se varió cada constante en pasos hasta llegar a 10 GPa. El error absoluto medio como función de variar cada constante por separado se muestra en la Fig. 6.7a. En líneas generales se observa que el método

es sensible a la variación de todas las constantes, pero algunas influyen más que otras. En particular, se destaca la sensibilidad ante C_{35} y la poca sensibilidad a C_{12} y C_{22} . Estos resultados no deben tomarse como guías generales, ya que dependen de qué material se parte para el análisis.

Abordando el caso particular del material con macro-simetría hexagonal alineada con la dirección, x_3 se repitió el mismo análisis para un material 304 partiendo de la isotropía pero imponiendo macro-simetría hexagonal en la variación de las constantes. El resultado del proceso se incluye en la Fig. 6.7b, y como se esperaba, el experimento no es sensible a cambios en la constante C_{12} .

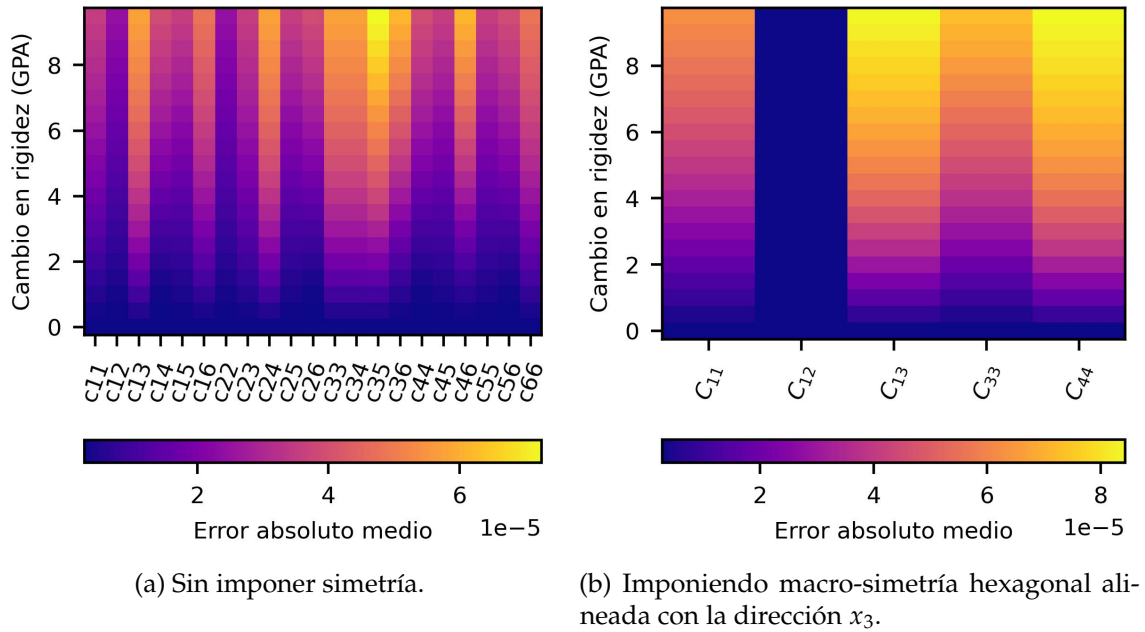


Figura 6.7: Análisis de sensibilidad para una placa de acero 304. Se muestra la variación generada al modificar una constante elástica a la vez.

6.2.6. Muestras

6.2.6.1. Selección de muestras

El objetivo presentado en este capítulo consiste en invertir las constantes elásticas de una variedad de materiales con distintas microestructuras y espesores, sin restringir la macro-simetría de la muestra. Los materiales seleccionados se describen en la Tabla 6.1, donde se detalla la densidad medida por picnometría de gases y balanza de precisión, las cotas de orden 0, $\mathbb{C}^{\pm 0}$, el factor de anisotropía AF calculado por la Eq. 5.42, y las fuentes bibliográficas de dónde se tomaron las propiedades elásticas de los constituyentes de cada material. Las muestras de dichos materiales se describen en la Tabla 6.2, donde se detalla el espesor medido con micrómetro digital y el método de comparación de resultados. Todas las muestras tienen una superficie capaz de incluir un círculo de al menos 40 mm de diámetro.

El primer material, que se considera de referencia, es silicio monocristalino utilizado para la microfabricación de semiconductores. La elección de este material se fundamenta en que al ser monocristalino, es homogéneo, y, por lo tanto, no trae asociada la incertidumbre propia de los métodos de homogeneización. Es decir, que las propiedades buscadas son directamente contrastables con los datos de la literatura. Se seleccionaron dos probetas para dos fines distintos. En primer lugar, se eligió una oblea con orientación $\langle 100 \rangle$ y con un espesor de $280 \mu\text{m}$. Este espesor implica que el medio es dispersivo para la frecuencia de trabajo, y, dado que la aproximación volumétrica no es aplicable, enfatiza la necesidad de utilizar el MPF (3.3). En segundo lugar, se eligió una oblea con un espesor de 1 mm pero con orientación $\langle 111 \rangle$. Como se explicó en la sección 3.5.0.1, la dirección cristalina $\langle 111 \rangle$ de la celda cúbica es normal a la cara de la oblea, lo que implica que el plano de la probeta (x_1x_2) no es un plano de simetría de reflexión. Esto hace que la aproximación de macro-simetría monoclinica no sea aplicable y por ende enfatiza la necesidad de utilizar el cálculo sin simetrías, como se explicó en la sección 3.5.

Como segundo material se eligieron chapas laminadas de Zircaloy-4 con dos espesores, de 5 y 1.3 mm respectivamente. El objetivo de esta elección es medir un material policristalino, pero de un constituyente, de uso en ingeniería. La justificación de utilizar dos espesores es para mostrar que el método es aplicable en un amplio rango de espesores, es decir, que el MPF es útil tanto para espesores delgados como gruesos.

Como tercer, y último, material, se eligió una lámina de CFRP unidireccional. Este material se destaca por dos características: en primer lugar está compuesto por dos constituyentes muy disímiles, lo que implica que el espacio de búsqueda es significativamente más grande que en los casos anteriores; en segundo lugar, todas las fibras son paralelas, es decir, que tienen una orientación única, lo que incrementa la anisotropía del conjunto. En particular, se utilizó un pre-impregnado de fibras de alto módulo con matriz de resina de éster de cianato. Este tipo de material es elegido en la industria aeroespacial por su buena estabilidad térmica y alta rigidez.

Tabla 6.1: Detalles de los materiales caracterizados en este capítulo.

Material	Densidad (g/cm^3)	$\mathbb{C}^{\pm 0}$ (Gpa)		AF (monocristal)	Fuentes
		$\lambda_{1,2}^{0-}$	$\lambda_{1,2}^{0+}$		
Silicio	2.33	{294, 102}	{294, 159}	9.4	[100]
Zircaloy-4	6.50	{285, 64}	{301, 98}	8.8	[101]
Resina de éster de cianato HexPly 954-3	1.19	{14, 2}	{14, 2}	1	[102]
Fibras de carbono Toray M55J	1.98	{25, 6}	{577, 355}	1456.7	[103, 104]
Resina + Fibras de carbono	1.45	{14, 2}	{577, 355}	2844.5	-

6.2.6.2. Estrategia de cotas

La inversión de propiedades mecánicas a partir de mediciones ultrasónicas debe llevarse a cabo restringiendo los valores posibles que pueden adoptar las constantes elásticas. Esto, sumado a una estimación inicial para la matriz de rigidez, ayuda a la

Tabla 6.2: Detalles de las muestras caracterizados en este capítulo.

Nombre de probeta	Material	Espesor (mm)	Comparación
Si<100>	Silicio <100>	0.28	Literatura
Si<111>	Silicio <111>	1.00	Literatura
Zry-a	Zircaloy-4	1.33	XRD
Zry-b	Zircaloy-4	5.00	ND
CFRP	Resina + Fibras de carbono	0.85	Fabricante

convergencia durante la optimización [89]. Un método común es buscar un material de referencia en la literatura y establecer las cotas como una proporción de dicho valor, por ejemplo, 10 % por debajo y 10 % por arriba [96]. Este tipo de cotas no son óptimas, ya que no aseguran que el material medido esté incluido en el intervalo, y tampoco aseguran que no existan materiales irreales dentro del espacio de búsqueda. Las estrategias utilizadas en este trabajo hacen uso de los métodos de homogeneización descritos en la sección 5.4, principalmente las cotas de orden 0, las cuales resultan en el espacio de búsqueda completo, es decir, acotan energéticamente todas las expresiones posibles del material como combinación de los constituyentes. Las cotas de orden 0 están incluidas para los materiales bajo estudio en la Tabla 6.1. El factor de anisotropía incluido aquí permite estimar cuán grande es el espacio de búsqueda abarcado por las cotas de orden 0.

Un material policristalino de un constituyente puede pensarse como un agregado de monocristales siguiendo una función de distribución de orientaciones. Por lo tanto, la rigidez efectiva, $\bar{C}$, depende de las constantes elásticas del monocristal, $\tilde{C}$, y de la ODF. Si no se supone información estadística de la microestructura, las cotas de orden 0, $\mathbb{C}^{\pm 0}$, definen el espacio que puede tomar la rigidez efectiva ante cualquier textura cristalográfica real. La estimación inicial se toma como la aproximación autoconsistente isótropa de HS 5.53, bajo la hipótesis de que el estado isótropo se encuentra más cerca de la solución que una estimación inicial con una textura marcada.

Para los casos del monocristal de silicio, las cotas se calculan de forma idéntica que para el caso policristalino. Un monocristal puede ser considerado como un policristal con una textura particularmente marcada, en la que todos los granos tienen la misma orientación. Nuevamente, la estimación inicial se toma como la aproximación autoconsistente isótropa de HS 5.53. El motivo de esto es evaluar la robustez del método para converger a un estado lejano de la estimación inicial isótropa.

Para la muestra de CFRP, por ser un material de dos constituyentes, se utilizan las cotas de orden 0 inferiores del material con autovalores más chicos ($\lambda_{1,2}^{0-}$), es decir, la resina, y las cotas de orden 0 superiores del material con autovalores más grandes ($\lambda_{1,2}^{0+}$), es decir, las fibras. Debido a la gran disimilitud entre ambas, el espacio de búsqueda es muy amplio y, quizás, por esto se observó que con la estimación inicial isótropa no se logra la convergencia durante la inversión. Por lo tanto, se requirió implementar una inversión en dos pasos. Durante la primera, se restringe la macro-simetría a hexagonal, con la dirección

de simetría alineada en el sentido de las fibras y se utiliza una estimación inicial tomada de la literatura [104]. En esta inversión, además, se ajusta un parámetro que representa la rotación azimutal inicial. El resultado de la primera inversión se utiliza como estimación inicial de una segunda inversión. En esta, no se restringe la macro-simetría del material, es decir, que se toman las cotas de orden 0 incluidas en la Tabla 6.1.

6.2.6.3. Métodos de comparación

Los resultados de la muestra **Zry-b** se corroboraron a partir de mediciones de difracción de neutrones (ND) realizadas en el Centro Australiano de Dispersión de Neutrones (ANSTO). Mientras que para la muestra **Zry-a**, por ser más delgada y no llegar al volumen mínimo para la ND, se realizó por difracción de rayos X (XRD) en el Laboratorio de Materiales de la Fabricación de Aleaciones Especiales, del Departamento de Tecnología de Aleaciones de Circonio, en el Centro Atómico Ezeiza de la Comisión Nacional de Energía Atómica. Los detalles metodológicos de las técnicas de difracción se detallan en [105, 106].

Las figuras de polos medidas por XRD y ND fueron procesadas mediante la biblioteca MTEX [6] para calcular las ODFs, a partir de las cuales se extrajeron los coeficientes de Fourier tradicionales C_{lmm} hasta el orden 4. Estos coeficientes fueron transformados a coeficientes tensoriales con la Ec. D.2 los cuales fueron utilizados junto al tensor de referencia del monocristal $\tilde{C}$ en la aproximación efectiva $\mathbb{C}_{app}^{HS}$ de la Ec. 5.53 para calcular las propiedades homogeneizadas de estas muestras. La probeta de silicio fue comparada directamente con los valores de la literatura, ya que al ser monocristalina es homogénea, por lo que no requiere el procedimiento de homogeneización. Por último, los resultados para la probeta de CFRP solo fueron contrastados con los datos del fabricante, ya que al no ser cristalinas, los métodos de difracción no son aplicables directamente.

6.3. Resultados

6.3.1. Calidad de ajuste

El proceso de optimización ajusta el MPF a los datos experimentales, mediante la variación de las entradas al modelo, que son, en este caso, las constantes elásticas. La calidad del ajuste se puede estimar, de forma cualitativa, observando las señales experimentales, las señales ajustadas y la diferencia entre ambas. Un experimento de goniometría ultrasónica consta de escaneos polares a 12 ángulos azimutales distintos. En la Fig. 6.8 se muestra el ajuste de un solo escaneo polar en la probeta de silicio de 280 μm , que es la de menor espesor. La Fig. 6.9 muestra el detalle de las señales para tres ángulos polares. Notar que el origen de abscisas ($t = 0$ s) no tiene sentido físico ni relación con el tiempo de emisión del pulso.

Las Figs. 6.10 y 6.11 muestran la misma comparación, pero para el caso del Zircaloy (**Zry-b**) que se trata de la probeta de mayor espesor. En general, se observa que el modelo ajustado describe bien el experimento, ya que la diferencia es una señal de baja amplitud.

Se observa que parte de las diferencias, principalmente las líneas horizontales dispersas, corresponden al ruido presente en la medición, el cual no existe en la simulación. Además, se destaca que el ajuste resulta adecuado tanto para las muestras gruesas, para las cuales los ecos son distinguibles, como para las muestras delgadas, donde los ecos se superponen, imposibilitando la parametrización de la velocidad de fase.

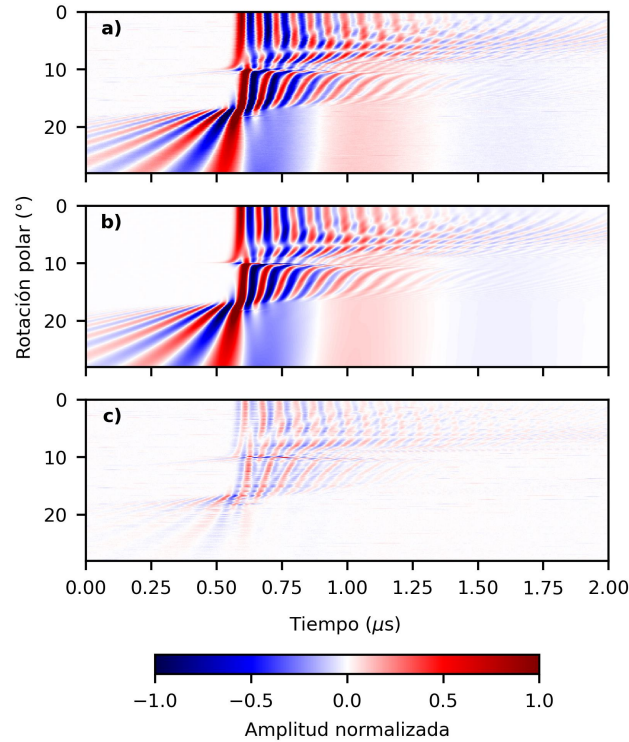


Figura 6.8: Detalle del ajuste para probeta de silicio. a) Medición. b) Ajuste. c) Diferencia entre medición y ajuste.

6.3.2. Constantes elásticas

Dado que los intervalos de confianza se calculan a partir del ajuste del modelo a las señales experimentales, los mismos se obtienen en el sistema de referencia de la muestra, en la orientación en que fue medida. Y, si bien un tensor puede ser rotado en el espacio, la rotación de la matriz compuesta por los intervalos de confianza no tiene sentido físico. Por lo tanto, los resultados se muestran en la orientación en la que se realizaron los experimentos ultrasónicos. Es decir, que los resultados de comparación se rotan para coincidir con la medición ultrasónica.

Los resultados para la probeta $\text{Si}\langle 100 \rangle$ se incluyen en la Tabla 6.3, y las síntesis de las superficies de “slowness” para el modo qL se muestran en la Fig. 6.12. Se observa un excelente acuerdo con los valores extraídos de la literatura. Este resultado es importante por tres razones. Primero, muestra que el método es capaz de encontrar un material cuya microestructura difiere considerablemente de la condición de isotropía, que es la estimación inicial del ajuste. Por otro lado, al tratarse de un monocristal, es un material

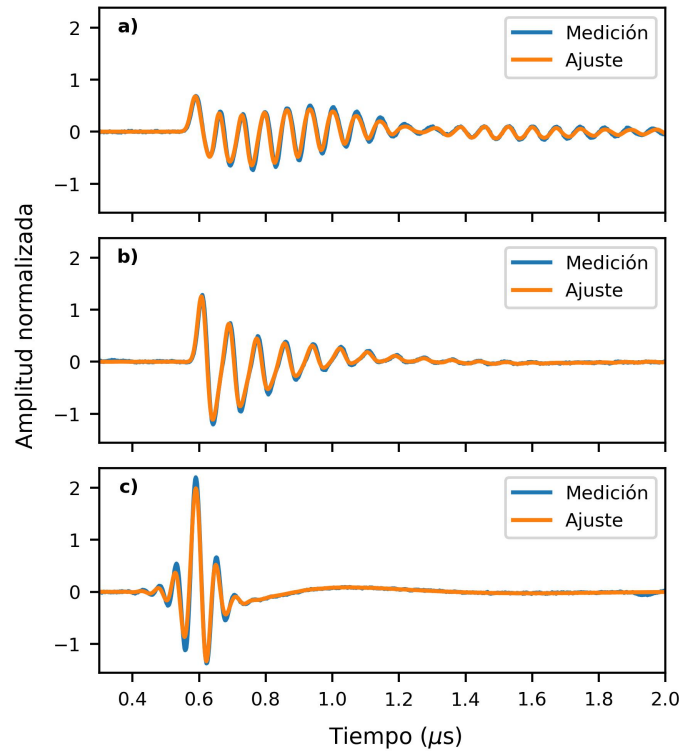


Figura 6.9: Detalle del ajuste para probeta de silicio a distintos ángulos polares. a) $\theta=10^\circ$. b) $\theta=20^\circ$. c) $\theta=30^\circ$. Por el espesor de la probeta ($280\ \mu\text{m}$) se destaca la superposición de ecos.

homogéneo, tanto en la micro como en la macroescala. Es decir, que al no requerir homogeneización, el tensor de comparación describe mejor la realidad que los resultados obtenidos por medio de la difracción. Por último, el bajo espesor de esta muestra ($d=0.28\ \text{mm}$), confirma que aun cuando los ecos no son distinguibles, el MPF y el ajuste por simulación siguen siendo aplicables, mientras que el MPF y el ajuste por parametrización de velocidades resultarían inviables.

Los resultados para la probeta **Si<111>** se incluyen en la Tabla 6.4, y las síntesis de las superficies de “slowness” para el modo qL se muestran en la Fig. 6.15. Estos resultados confirman que, como el monocristal tiene orientación <111>, el método es útil aun cuando el plano (x_1x_2) no es un plano de simetría de reflexión, es decir, sin limitar la anisotropía a casos monoclinicos.

La Tabla 6.5 muestra los resultados obtenidos para la probeta de Zircaloy más delgada (**Zry-a**), y las síntesis de las superficies de “slowness” para el modo qL se muestran en la Fig. 6.14. Se observa que, en general, los resultados del ultrasonido son similares a los obtenidos por XRD y la homogeneización de Hashin-Shtrikman. La excepción es la constante C_{33} para la cual se observa un error de 4.4 GPa. El error total, definido como la suma de los valores absolutos de las diferencias, y el error máximo, definido como el valor máximo del valor absoluto de la diferencia, se incluyen en la Tabla 6.10.

Los resultados para la probeta de Zircaloy gruesa (**Zry-b**), se incluyen en la Tabla 6.6,

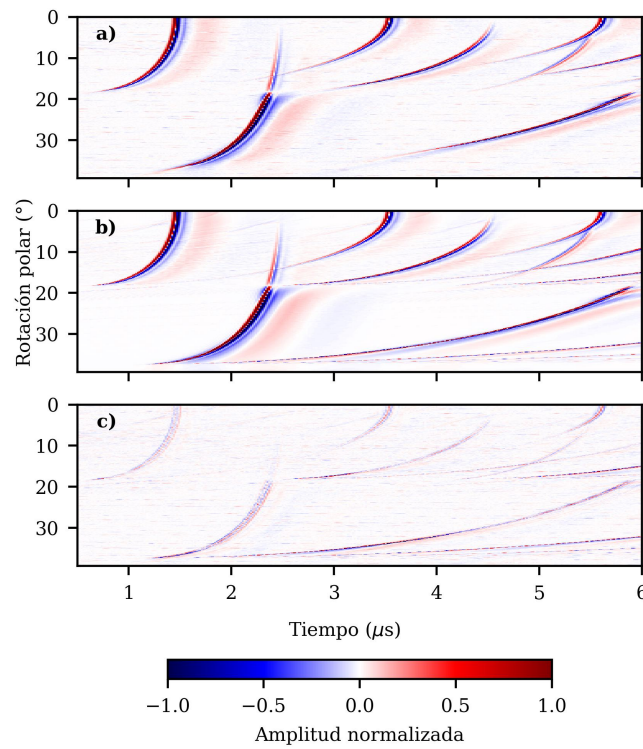


Figura 6.10: Detalle del ajuste para probeta de Zircaloy (**Zry-b**). A. Medición. B. Ajuste. C. Diferencia entre medición y ajuste.

$\begin{bmatrix} 191,6 & 38,8 & 64,2 & 0,3 & -1,5 & -9,2 \\ & 190,6 & 64,0 & 0,3 & -0,5 & 10,0 \\ & & 166,0 & 0,0 & 0,5 & 0,0 \\ & & & 79,5 & 0,1 & -0,1 \\ & & & & \text{sim} & 79,5 & 0,0 \\ & & & & & & 54,9 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 190,7 & 38,9 & 63,9 & 0,0 & 0,0 & -9,5 \\ & 190,7 & 63,9 & 0,0 & 0,0 & 9,5 \\ & & 165,6 & 0,0 & 0,0 & 0,0 \\ & & & 79,5 & 0,0 & 0,0 \\ & & & & \text{sim} & 79,5 & 0,0 \\ & & & & & & 54,4 \end{bmatrix}$
(a) Ultrasonido.	(b) Literatura.
$\begin{bmatrix} 1,1 & 0,9 & 0,8 & 1,2 & 1,1 & 0,4 \\ & 1,2 & 0,9 & 1,4 & 1,0 & 0,4 \\ & & 0,6 & 0,8 & 0,6 & 0,5 \\ & & & 0,4 & 0,3 & 0,5 \\ & & & & \text{sim} & 0,3 & 0,4 \\ & & & & & & 0,3 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0,9 & -0,1 & 0,3 & 0,3 & -1,5 & 0,3 \\ & -0,2 & 0,0 & 0,3 & -0,5 & 0,5 \\ & & 0,3 & 0,0 & 0,5 & 0,0 \\ & & & 0,0 & 0,1 & -0,1 \\ & & & & \text{sim} & 0,0 & 0,0 \\ & & & & & & 0,5 \end{bmatrix}$
(c) Intervalo de confianza.	(d) Diferencia.

Tabla 6.3: Resultados para la probeta **Si<100>** en GPa.

y las síntesis de las superficies de “slowness” para el modo qL se muestran en la Fig. 6.15. Esta vez, el método de comparación es la difracción de neutrones. Se observa un mejor acuerdo entre las dos técnicas, ya que el error máximo es de 1.1 GPa. Esta puede deberse a que la difracción de neutrones es una técnica que, al ser de transmisión, es más comparable al ultrasonido que la difracción de rayos X, al menos en lo que refiere

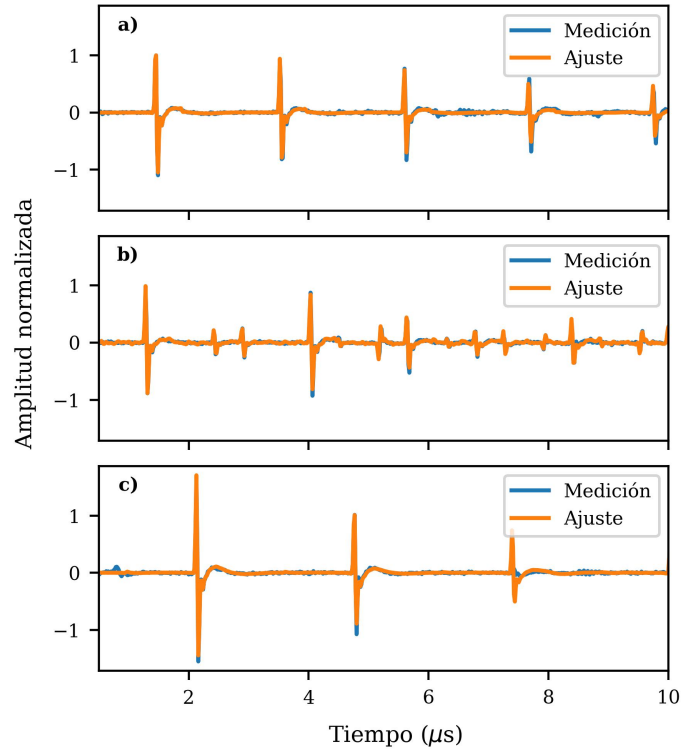


Figura 6.11: Detalle del ajuste para probeta de Zircaloy (**Zry-b**) a distintos ángulos polares. a) $\theta=10^\circ$. b) $\theta=20^\circ$. c) $\theta=30^\circ$. Por el espesor de la probeta (5 mm) se destaca la separación de ecos.

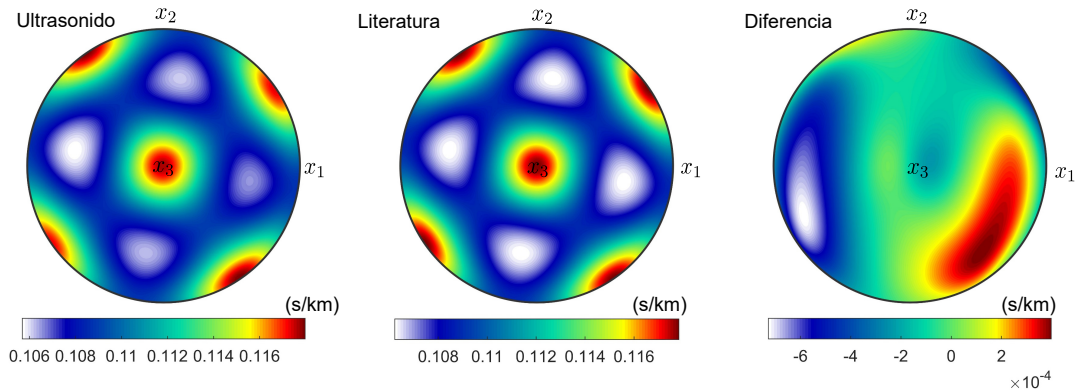


Figura 6.12: Síntesis de superficies de “slowness” para el modo qL de la probeta **Si<100>**. Las direcciones x_1 , x_2 y x_3 indican el sistema de referencia de la medición ultrasónica. Notar que la proyección que muestra la diferencia tiene una escala diferente.

a propiedades elásticas. Esta técnica, al ser superficial, no provee información de todo el espesor.

Por otro lado, al tratarse de un método geométrico, es importante destacar que la exactitud del mismo depende de que la geometría de placa sea buena. En particular, se observa que la probeta de **Zry-b** presenta una leve falta de paralelismo, mientras que la probeta **Zry-a** presenta un leve radio de curvatura. La muestra de silicio, al tratarse de un

193,6	54,2	45,2	-13,1	-0,9	0,2	194,3	54,4	44,8	-13,5	-1,2	-0,0
	194,3	44,5	13,4	1,4	0,5		194,3	44,8	13,5	1,2	0,0
		203,2	0,9	0,5	0,4			203,8	0,0	0,0	-0,0
			60,0	0,2	1,2				60,4	0,0	1,2
		sim		60,3	-13,4			sim		60,4	-13,5
					69,5						70,0

(a) Ultrasonido.

(b) Literatura.

1,1	0,7	0,6	0,7	0,8	0,5	-0,7	-0,2	0,4	0,3	0,3	0,2
	1,0	0,6	0,8	0,8	0,5		-0,0	-0,3	-0,0	0,2	0,5
		0,4	0,6	0,6	0,5			-0,6	0,9	0,5	0,4
			0,2	0,2	0,3				-0,4	0,2	-0,0
		sim		0,2	0,2			sim		-0,1	0,0
					0,2						-0,5

(c) Intervalo de confianza.

(d) Diferencia.

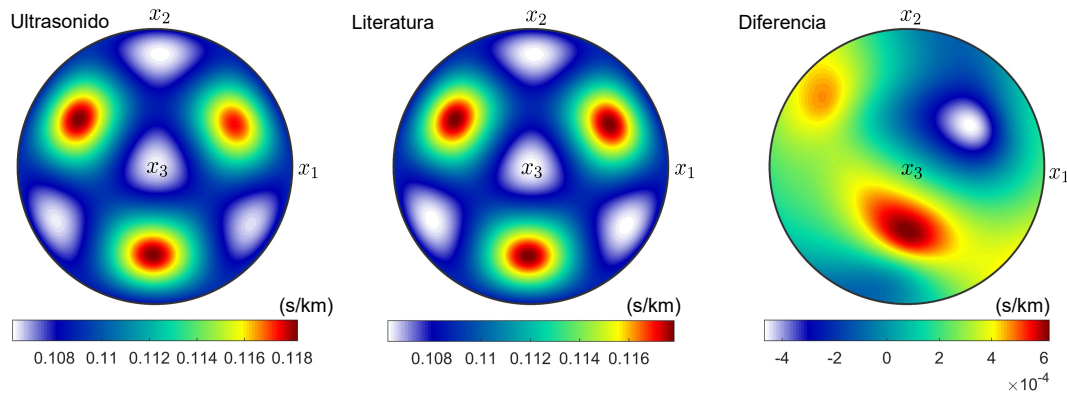
Tabla 6.4: Resultados para la probeta **Si<111>** en GPa.

Figura 6.13: Síntesis de superficies de “slowness” para el modo qL de la probeta **Si<111>**. las direcciones x_1 , x_2 y x_3 indican el sistema de referencia de la medición ultrasónica. Notar que la proyección que muestra la diferencia tiene una escala diferente.

dispositivo para la microfabricación, no presenta ninguno de estos defectos, por lo que se aproxima mejor a los requisitos geométricos del modelo. Estas consideraciones pueden servir para explicar por qué se observa un menor error para las probetas de silicio que para las de Zircaloy, como se observa en la Tabla 6.10.

El resultado para la probeta de CFRP unidireccional se incluye en la Tabla 6.7 y las síntesis de las superficies de “slowness” para los modos qL, qS1 y qS2 se muestran en la Fig. 6.15. Como se mencionó en la sección 6.2.6, no es posible calcular el tensor de rigidez a partir de mediciones de difracción, por lo que no se cuenta con un tensor de comparación. Sin embargo, el fabricante de las fibras provee como especificación técnica el módulo de Young medido a partir de ensayos de tracción [107] y de flexión [108]. El valor reportado por esta norma es comparable al módulo de Young calculado a partir del tensor de rigidez obtenido por ultrasonido. Este cálculo se realizó con el paquete MTEX [6] y el resultado se

$$\begin{bmatrix} 142,1 & 70,5 & 70,6 & -0,0 & -0,3 & 0,1 \\ & 142,5 & 71,1 & -0,0 & -0,2 & 0,4 \\ & & 151,1 & -0,0 & -0,1 & 0,2 \\ & & & 36,2 & 0,3 & -0,1 \\ & & & & \text{sim} & 35,1 & -0,0 \\ & & & & & & 35,7 \end{bmatrix}$$

(a) Ultrasonido.

$$\begin{bmatrix} 144,1 & 71,6 & 69,7 & -0,0 & -0,0 & -0,1 \\ & 143,2 & 70,6 & -0,0 & -0,0 & -0,1 \\ & & 146,7 & 0,1 & 0,1 & 0,2 \\ & & & 35,4 & 0,2 & -0,0 \\ & & & & \text{sim} & 34,7 & -0,0 \\ & & & & & & 36,0 \end{bmatrix}$$

(b) Difracción de rayos X.

$$\begin{bmatrix} 0,8 & 0,6 & 0,4 & 0,4 & 0,4 & 0,2 \\ & 0,4 & 0,2 & 0,4 & 0,4 & 0,2 \\ & & 0,2 & 0,4 & 0,3 & 0,2 \\ & & & 0,0 & 0,0 & 0,2 \\ & & & & \text{sim} & 0,1 & 0,2 \\ & & & & & & 0,3 \end{bmatrix}$$

(c) Intervalo de confianza.

$$\begin{bmatrix} -1,9 & -1,1 & 0,8 & -0,0 & -0,2 & 0,3 \\ & -0,7 & 0,5 & 0,0 & -0,2 & 0,5 \\ & & 4,4 & -0,1 & -0,2 & 0,0 \\ & & & 0,7 & 0,1 & -0,0 \\ & & & & \text{sim} & 0,5 & 0,0 \\ & & & & & & -0,3 \end{bmatrix}$$

(d) Diferencia.

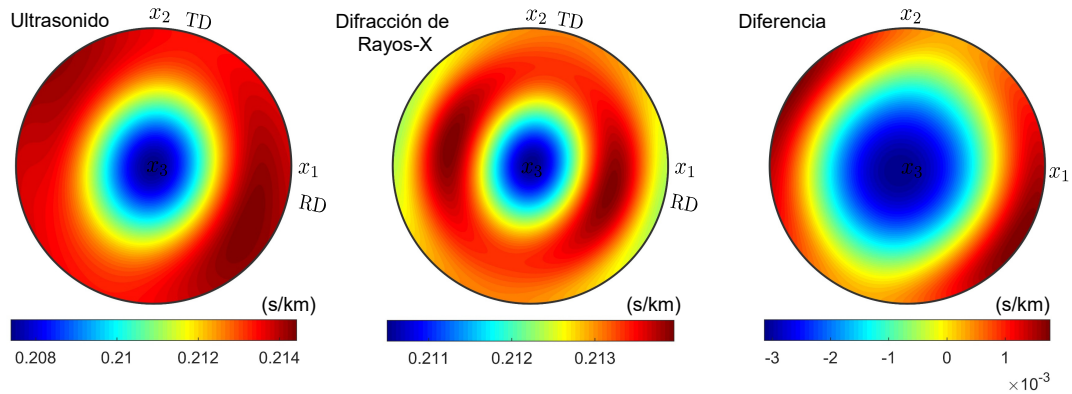
Tabla 6.5: Resultados para la probeta **Zry-a** en GPa.

Figura 6.14: Síntesis de superficies de “slowness” para el modo qL de la probeta **Zry-a**. RD y TD representan las direcciones de laminación y tangencial, respectivamente, mientras que las direcciones x_1 , x_2 y x_3 indican el sistema de referencia de la medición ultrasónica. Notar que la proyección que muestra la diferencia tiene una escala diferente.

incluye en la Tabla 6.8. Para la dirección de las fibras, el módulo calculado por ultrasonido se encuentra entre el tensil y el flexural reportado por el fabricante, siendo más cercano al último. Para la dirección perpendicular, el error es menor a la décima. Por lo tanto, se observa un buen acuerdo con los valores provistos por el fabricante.

Por último, en la Tabla 6.9, se incluye el factor de anisotropía calculado para las propiedades macroscópicas a partir de las mediciones ultrasónicas y la Ec. 5.42.

6.4. Discusión

Se observó un buen acuerdo entre los resultados encontrados por la técnica ultrasónica y los resultados obtenidos a través de las técnicas de difracción y la homogeneización

$$\begin{bmatrix} 143,9 & 71,3 & 71,3 & 0,4 & 0,1 & -0,2 \\ & 141,9 & 69,3 & 0,2 & 0,3 & 0,4 \\ & & 148,6 & 0,5 & 0,2 & -0,1 \\ & & & 35,0 & -0,4 & -0,1 \\ & & & & \text{sim} & 38,1 & -0,1 \\ & & & & & & 34,9 \end{bmatrix}$$

(a) Ultrasonido.

$$\begin{bmatrix} 142,8 & 70,9 & 72,0 & 0,0 & -0,0 & -0,4 \\ & 142,2 & 69,7 & -0,1 & -0,0 & 0,3 \\ & & 147,7 & 0,2 & 0,0 & -0,3 \\ & & & 34,5 & -0,4 & -0,0 \\ & & & & \text{sim} & 37,5 & 0,1 \\ & & & & & & 34,8 \end{bmatrix}$$

(b) Difracción de rayos X.

$$\begin{bmatrix} 0,4 & 0,4 & 0,2 & 0,4 & 0,2 & 0,3 \\ & 0,8 & 0,4 & 0,2 & 0,2 & 0,3 \\ & & 0,1 & 0,2 & 0,2 & 0,3 \\ & & & 0,1 & 0,1 & 0,2 \\ & & & & \text{sim} & 0,1 & 0,1 \\ & & & & & & 0,2 \end{bmatrix}$$

(c) Intervalo de confianza.

$$\begin{bmatrix} 1,1 & 0,4 & -0,7 & 0,4 & 0,1 & 0,2 \\ & -0,3 & -0,4 & 0,3 & 0,3 & 0,0 \\ & & 1,0 & 0,3 & 0,2 & 0,2 \\ & & & 0,5 & -0,0 & -0,1 \\ & & & & \text{sim} & 0,6 & -0,1 \\ & & & & & & 0,1 \end{bmatrix}$$

(d) Diferencia.

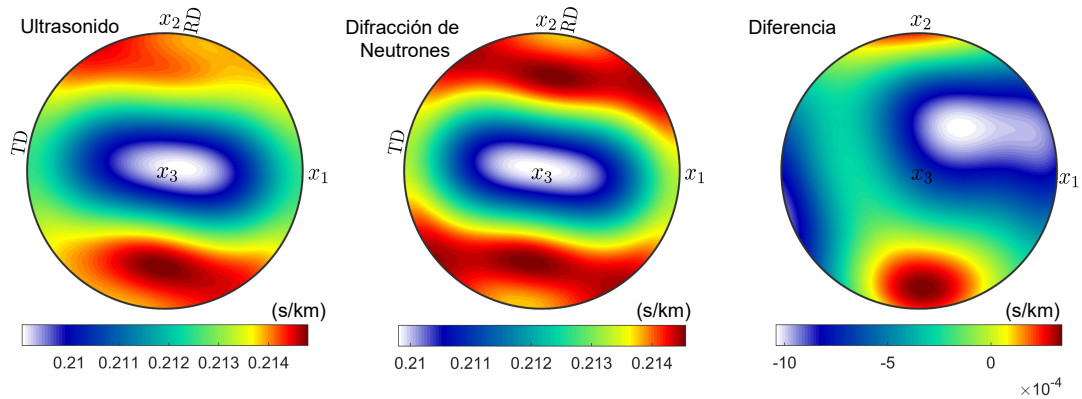
 Tabla 6.6: Resultados para la probeta **Zry-b** en GPa.


Figura 6.15: Síntesis de superficies de “slowness” para el modo qL de la probeta **Zry-b**. RD y TD representan las direcciones de laminación y tangencial, respectivamente, mientras que las direcciones x_1 , x_2 y x_3 indican el sistema de referencia de la medición ultrasónica. Notar que la proyección que muestra la diferencia tiene una escala diferente.

$$\begin{bmatrix} 254,7 & 14,9 & 3,8 & -0,29 & 0,6 & -53,3 \\ & 9,9 & 5,0 & -0,1 & 0,0 & -3,4 \\ & & 9,2 & -0,1 & 0,0 & 0,2 \\ & & & 2,1 & -0,6 & 0,1 \\ & & & & \text{sim} & 4,6 & -0,1 \\ & & & & & & 16,3 \end{bmatrix}$$

(a) Ultrasonido.

$$\begin{bmatrix} 13,7 & 5,0 & 1,0 & 1,3 & 1,0 & 4,3 \\ & 0,9 & 0,2 & 0,1 & 0,2 & 1,1 \\ & & 0,10 & 0,1 & 0,1 & 0,4 \\ & & & 0,1 & 0,2 & 0,3 \\ & & & & \text{sim} & 0,1 & 0,2 \\ & & & & & & 1,4 \end{bmatrix}$$

(b) Intervalo de confianza.

 Tabla 6.7: Resultados para la probeta **CFRP** en GPa.

elástica. En general, el método demostró ser aplicable sin la restricción y/o explotación de la macro-simetría de la muestra. Por ejemplo, en el caso de la oblea de silicio, considerar

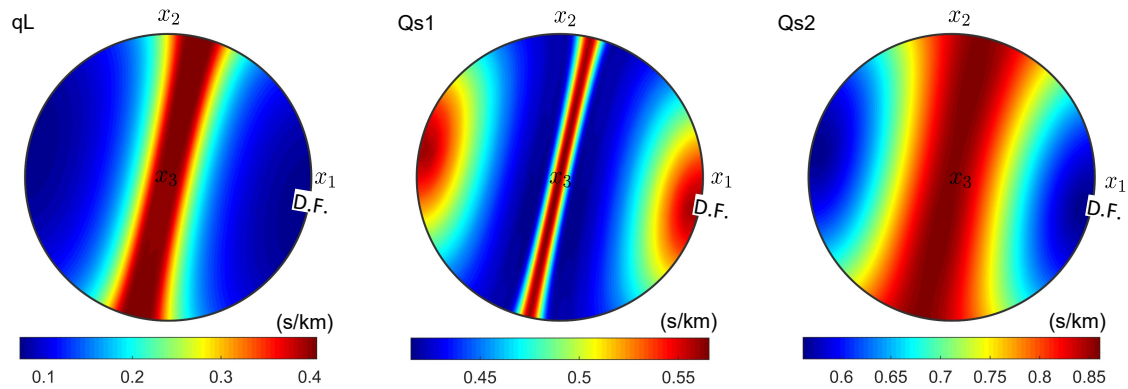


Figura 6.16: Síntesis de superficies de “slowness” de la probeta **CFRP** para los modos qL, qS1 y qS2 a partir de los resultados obtenidos por ultrasonido. D.F. representa la dirección de las fibras, mientras que las direcciones x_1 , x_2 y x_3 indican el sistema de referencia de la medición ultrasónica. Notar que la proyección que muestra la diferencia tiene una escala diferente.

Tabla 6.8: Comparación de módulo de Young entre los datos provistos por el fabricante y las mediciones ultrasónicas.

Módulo de Young (GPa)			
Dirección	Fabricante	Ultrasonido	
paralela a las fibras	Tensil [107]	338	276.7
	Flexural [108]	274	
perpendicular a las fibras	Tensil [107]	6.2	6.2
perpendicular al plano	-	-	6.3

Tabla 6.9: Factor de anisotropía de las muestras macroscópicas.

	Si<100>/Si<111>	Zry-a	Zry-b	CFRP
Factor de anisotropía AF	1.61	1.20	1.18	1931.69

Tabla 6.10: Errores máximos y totales entre ultrasonido y método de comparación. El error total comprende la suma de los valores absolutos de las diferencias.

	Si<100>	Si<111>	Zry-a	Zry-b
Error máximo (GPa)	1.5	0.9	4.4	1.1
Error total (GPa)	6.4	6.8	12.5	7.4

que la muestra tiene macro-simetría triclinica, permite caracterizar al material independientemente de su orientación con respecto al sistema de referencia del experimento, es decir, que no requiere conocer las direcciones de simetría. Además, suponer que el plano de la muestra (x_1x_2) no es un plano de simetría, posibilita la medición de materiales sin estas características, como es el caso de la oblea de silicio con orientación <111>. Y, aunque

el costo computacional sea significativamente mayor comparado con la aproximación monoclinica, la implementación del modelo directo en GPU disminuye el tiempo de cómputo compensando la penalidad.

A su vez, se mostró que el MPF es efectivo tanto para materiales “gruesos” como para materiales “delgados”, cubriendo un rango de espesores de aproximadamente 20 veces (4,95 mm/0,28 mm), es decir, que se ajusta a los experimentos, independientemente del grado de dispersión. Sumado a esto, se observó que el comportamiento de los transductores, desarrollados para esta tesis en el capítulo 4, se aproxima considerablemente al modelo de onda plana, ya que el error entre los ajustes y los experimentos tiene poca energía, como se mostró en la sección 6.3.1. Un riesgo de la optimización indirecta consiste en que el ajuste puede converger a un mínimo local, pero no global, es decir, que puede no corresponder con el resultado buscado. La utilización de las cotas de orden 0 tiene la ventaja de limitar el espacio de búsqueda al dominio definido por todos los materiales posibles que pueden surgir de la combinación de constituyentes y, en el caso de los materiales policristalinos, la aproximación isótropa es una buena estimación inicial, considerando que las texturas muy marcadas son, en general, menos probables. Utilizando estas condiciones iniciales, los ajustes realizados en este trabajo para los materiales cristalinos no presentan problemas en la convergencia. Aun así, la convergencia no está garantizada, y pueden existir casos en los que el método no llegue al resultado correcto.

El caso particular de la muestra **CFRP**, por su gran grado de anisotropía ($AF=1931.6$), mostró que la convergencia se dificulta para estos casos, por lo que resultó necesario un ajuste en dos etapas, utilizando datos de la literatura y restricciones de la macro-simetría. Aun así, el método permite que durante la medición no se requiera la alineación precisa de la probeta con el sistema de referencia experimental, y, durante la segunda etapa, se volvieron a utilizar las cotas de orden 0, eliminando las restricciones de simetría.

Por último, el único caso de indeterminación en la goniometría ultrasónica, materiales en los que todos los planos azimutales son planos de simetría, no fue observado entre las probetas estudiadas. La probeta **Zry-a**, siendo la más isótropa ($AF=1.18$), tiene la anisotropía suficiente como para no incurrir en dicha indeterminación.

6.5. Conclusiones

Se desarrolló un método para la caracterización elástica de materiales. Se construyó un equipo que permite el barrido de los ángulos de incidencia de pulsos ultrasónicos propagándose a través de una probeta anisótropa de caras paralelas. La automatización del procedimiento permite la medición de un material en menos de 2 minutos. La incidencia oblicua tiene como consecuencia la dispersión lateral de la energía, asociada al fenómeno de onda guiada con fuga o "leaky guided waves". Se desarrollaron transductores optimizados para este contexto, cuyo fin es asemejarse al comportamiento de onda plana. La aproximación de ondas volumétricas no describe de forma correcta el experimento de goniometría ultrasónica, por lo que se optó por implementar un modelo de onda

plana para medios finitos (MPF). Este modelo puede simular las señales experimentales, independientemente de la dispersividad del medio, es decir, que es aplicable tanto en medios delgados y bajas frecuencias como en medios gruesos y altas frecuencias.

Además, se evita la suposición de macro-simetrías elásticas, por lo que se pueden caracterizar materiales triclinicos, pero además, en el caso de mayores simetrías, no se requiere la alineación de las direcciones de simetría con el sistema de referencia experimental, evitando una posible fuente de errores. Esto trajo asociado un incremento en el costo computacional que se compensó con la implementación del modelo en arquitectura de GPU. Este paso fue indispensable para la inversión de resultados que implica la evaluación del modelo directo en alrededor de 5000 veces.

Los métodos de homogeneización se emplearon para la definición de cotas elásticas de orden 0 y aproximaciones iniciales durante el proceso de optimización, las cuales son necesarias para disminuir la probabilidad de converger a resultados erróneos. Se caracterizaron materiales monocristalinos, policristalinos de un constituyente, y compuestos de dos constituyentes. Se observó un buen ajuste durante la optimización y un buen acuerdo de los resultados al compararlo con técnicas convencionales.

DETERMINACIÓN DE TEXTURA CRISTALOGRÁFICA

7.1. Introducción

La textura cristalográfica, definida como la función de probabilidad de densidad de orientaciones cristalográficas en un agregado cristalino, es un parámetro crítico para el diseño, fabricación y diagnóstico de materiales de uso en ingeniería. Determina parcialmente propiedades fundamentales de los materiales, como la rigidez, resistencia, plasticidad, susceptibilidad magnética, reactividad química y conductividad térmica [58]; debido a esto, durante la fabricación, incide en la formabilidad, la estirabilidad, la soldabilidad, entre otros [109]; y luego, durante la vida en servicio, controla mecanismos de degradación como el crecimiento por irradiación, la corrosión nodular, la corrosión bajo tensión y la probabilidad de precipitación de hidruros [110]. La determinación ultrasónica de la textura ha sido ampliamente estudiada en las últimas tres décadas debido a su gran penetración y bajo costo. A diferencia de técnicas tradicionales de laboratorio, como difracción de rayos-X (XRD) y difracción de electrones retrodispersados (EBSD), las ondas ultrasónicas viajan a través del material proporcionando información microestructural promediada en el volumen. Esto hace que los métodos ultrasónicos sean comparables con técnicas exclusivas de grandes instalaciones como difracción de neutrones (ND) y difracción de rayos-X en sincrotrón (SXRD), pero con mayor disponibilidad y menor costo. Además, el método suele ser rápido, no destructivo, no requiere la preparación exhaustiva de las muestras y, en algunas implementaciones, puede ser aplicado in situ en un contexto industrial [99].

La base del método consiste en que la anisotropía mecánica del monocristal, al ser combinada con la distribución de orientaciones de cristales, produce una rigidez dependiente de la dirección, única para la muestra policristalina. La velocidad de ondas, dependiente de la dirección, permite la inferencia del tensor de rigidez para el agregado y, por consiguiente, provee información acerca de la textura cristalográfica. Los primeros trabajos se centraron en chapas de aceros laminadas, en las cuales, mediante el uso de

transductores acusto-electro-magnéticos (EMAT), se propagaban modos guiados cuasi no dispersivos en diferentes direcciones. Relaciones explícitas entre la velocidad de estos modos con las constantes elásticas y relaciones explícitas entre las constantes elásticas y los coeficientes de textura a partir del promedio de orientación permiten la inversión de los coeficientes de textura. Sayers definió las relaciones textura-rigidez para materiales con micro-simetría cúbica [111] y hexagonal [112] utilizando la cota de primer orden superior (Voigt); posteriormente, estas relaciones, pero para el promedio de Voigt-Reuss-Hill, fueron implementadas para materiales con micro-simetría cúbica [113] y hexagonal [114]. La desventaja de estos métodos consiste en que se realizan muchas aproximaciones para encontrar las relaciones explícitas, una de las más destacadas es la suposición de macro-simetría ortótropa que reduce el número de constantes y coeficientes independientes. Además, el uso de ondas guiadas restringe la aplicación a placas delgadas que pueden propagar estos modos. Posteriormente, Lan et al. [99, 115, 116] desarrollaron un método en el cual las velocidades del monocristal y del policristal se descomponen en armónicos esféricos y se relacionan a través de los coeficientes de textura, también definidos en este dominio. La relación entre velocidades y coeficientes de textura surge de un promedio volumétrico, y aunque no definido explícitamente, dan resultados similares al promedio de Voigt. Este método no restringe la macro-simetría, pero requiere la parametrización de ondas volumétricas, por lo que no es aplicable en medios dispersivos. Recientemente, Rossin et al. [117] desarrollaron un método para la inversión de coeficientes de textura para espectroscopía resonante ultrasónica (RUS) mediante el uso de las cotas de segundo orden de Hashin-Shtrikman en la forma tensorial implementada por Lobos et. al. [84]. Estas cotas son más estrechas que los promedios de primer orden. Sin embargo, los experimentos de RUS requieren la preparación meticulosa de una muestra paralelepípeda con dimensiones específicas para la determinación de las frecuencias de resonancia.

El objetivo presentado en este capítulo consiste en extender la aplicabilidad de la determinación ultrasónica de la textura cristalográfica a partir del desarrollo de un método que no imponga ni espesor ni macro-simetría, pero que además sea aplicable sin preparaciones exhaustivas de probetas. Para esto se utilizó el ensayo de goniometría ultrasónica desarrollado en el capítulo 6. El procedimiento de optimización se modificó para incluir la aproximación efectiva de Hashin-Shtrikman, de forma que los coeficientes de textura se varían hasta minimizar el error entre experimento y simulación. Además, como un subproducto del ajuste, se obtiene la rigidez efectiva. Se realizaron ensayos en materiales con micro-simetría cúbica y hexagonal variando en espesores desde 0.5 a 5 mm. Los resultados fueron comparados con XRD y ND, y se observó buen acuerdo entre las técnicas, inclusive para muestras con anisotropía débil.

7.2. Marco teórico

Retomando la descomposición armónica de la sección 5.4.5, el promedio en orientaciones del tensor de rigidez, o promedio de Voigt, puede descomponerse a partir de los

coeficientes tensoriales de textura como

$$\mathbb{C}^{\text{Voigt}} = \langle f, \mathbb{C} \rangle = \text{hd}(\tilde{h}_{I1}, \tilde{h}_{I2}, \sum_{\beta=1}^{n'_2} \tilde{h}_{21\beta} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle \beta}, \sum_{\beta=1}^{n'_2} \tilde{h}_{22\beta} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle \beta}, \sum_{\beta=1}^{n'_4} \tilde{h}_{41\beta} \mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle \beta}), \quad (7.1)$$

donde $\tilde{h}_{\alpha\gamma\beta}$ depende de la rigidez del monocristal $\tilde{\mathbb{C}}$ y los coeficientes tensoriales de textura $\mathbb{V}'_{\langle \alpha \rangle \beta}$ describen la información microestructural de orden 1. Esta descomposición muestra que, como la rigidez es un tensor de orden 4, el promedio es independiente de coeficientes de orden mayor a 4; y que por la simetría mayor del tensor de rigidez, el promedio es independiente de coeficientes de textura de orden 1 y 3. Si además el material presenta micro-simetría, esta se extiende a los coeficientes de textura, reduciendo el número de coeficientes independientes de acuerdo a la Ec. 5.31 como se muestra en la Tabla 5.1. Entonces, para un material con micro-simetría hexagonal con $n'_2 = n'_4 = 1$, la expresión 7.1 se reduce a

$$\mathbb{C}^{\text{Voigt}} = \langle f, \mathbb{C}^{\text{hex}} \rangle = \text{hd}(\tilde{h}_{I1}, \tilde{h}_{I2}, \tilde{h}_{211} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}, \tilde{h}_{221} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}, \tilde{h}_{411} \mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}), \quad (7.2)$$

por lo que, para este caso, las sumatorias en β desaparecen. La Ec. 7.2 implica que si se conoce el promedio volumétrico de un tensor de rigidez y se le aplica la descomposición armónica, entonces los coeficientes tensoriales de textura $\mathbb{V}_{\langle 2 \rangle 1}$ y $\mathbb{V}_{\langle 4 \rangle 1}$ se pueden invertir simplemente con la división de las funciones $\tilde{h}_{\alpha\gamma\beta}$. Dado que la descomposición armónica es única para un tensor dado [60], entonces el promedio volumétrico para un material con micro-simetría hexagonal es único para un conjunto de coeficientes $\mathbb{V}_{\langle 2 \rangle 1}$ y $\mathbb{V}_{\langle 4 \rangle 1}$, y viceversa. Es decir, que se trata de una relación inyectiva. Para un material con micro-simetría cúbica con $n'_2 = 0$ y $n'_4 = 1$, la Ec. 7.1, deja de depender de los coeficientes $\mathbb{V}_{\langle 2 \rangle 1}$ y sigue siendo inyectiva. Para el resto de las micro-simetrías, $n'_2 \geq 2 \vee n'_4 \geq 2$ por lo que la inyectividad se pierde. Lo mismo sucede si el material presenta más de un constituyente.

Si no se supone macro-simetría, el tensor $\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}$ depende de 9 componentes independientes, como

$$\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1} = \begin{bmatrix} V_{1111} & V_{1122} & \hat{V}_{1133} & V_{1123} & V_{1113} & V_{1112} \\ & V_{2222} & \hat{V}_{2233} & V_{2223} & \hat{V}_{2213} & V_{2212} \\ & & \hat{V}_{3333} & \hat{V}_{3323} & \hat{V}_{3313} & \hat{V}_{3312} \\ & & & \hat{V}_{2323} & \hat{V}_{2313} & V_{1223} \\ & \text{sim} & & & \hat{V}_{1313} & \hat{V}_{1312} \\ & & & & & \hat{V}_{1212} \end{bmatrix}, \quad (7.3)$$

donde $\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}$ es $\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}$ en notación de Voigt, y los componentes ($\hat{V}$) son combinación lineal de los otros. De igual manera $\mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}$ tiene 5 componentes independientes [84], como

$$\mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1} = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ & V_{22} & V_{23} \\ \text{sim} & & \hat{V}_{33} \end{bmatrix}. \quad (7.4)$$

Por otro lado, la expresión de HS (5.50) depende de la misma información microestructural que la Ec. 7.1, y para un material con micro-simetría hexagonal se expresa como

$$\mathbb{C}^{HS} = \mathbb{C}_0 - \mathbb{P}_0^{-1} + \langle \mathbb{L} \rangle^{-1}, \quad \langle f, \mathbb{L} \rangle = \text{hd}(\tilde{h}_{11}, \tilde{h}_{12}, \tilde{h}_{211} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}, \tilde{h}_{221} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}, \tilde{h}_{411} \mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}), \quad (7.5)$$

Aquí el promedio en orientaciones se hace sobre el tensor $\mathbb{L}$ donde $\tilde{h}_{\alpha\gamma\beta}$ depende de la rigidez del monocristal $\tilde{\mathbb{C}}$, del material de comparación $\mathbb{C}_0$ y el tensor de polarización $\mathbb{P}_0$ (5.48), todos independientes de la ODF. Nuevamente, si se conoce el tensor $\mathbb{C}^{HS}$, entonces se pueden obtener los coeficientes $\mathbb{V}_{\langle 2 \rangle 1}$ y $\mathbb{V}_{\langle 4 \rangle 1}$, a través de la descomposición armónica y la división por $\tilde{h}_{\alpha\gamma\beta}$. Por ende, la expresión de HS también cuenta con inyectividad para materiales con micro-simetría hexagonal y cúbica, tanto para las cotas $\mathbb{C}^{HS\pm}$ (5.51) como para la aproximación basada en la solución autoconsistente $\mathbb{C}_{app}^{HS}$ (5.53).

Como el objetivo de este capítulo consiste en invertir la textura cristalográfica a partir de la transmisión de ondas ultrasónicas, y considerando que la propagación de las mismas depende del tensor de rigidez efectivo $\tilde{\mathbb{C}}$, que en general difiere del promedio en orientación $\bar{\mathbb{C}} \neq \langle \mathbb{C} \rangle$, entonces es preferible utilizar la aproximación efectiva $\mathbb{C}_{app}^{HS}$, ya que es más cercana que las cotas de primer y segundo orden ($|\bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}_{app}^{HS}| \leq |\bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}^{2\pm}| \leq |\bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}^{1\pm}|$). La Ec. 7.5, entonces, permite invertir la textura cristalográfica a partir de la caracterización elástica por métodos ultrasónicos con mayor exactitud que las cotas de orden 1 ampliamente utilizadas en la literatura.

Por último, como se describió en la sección 3.2.3, la ecuación de Christoffel, si incluye información de polarización, también es inyectiva. Sin embargo, como se mostró en la sección 6.2.5, la goniometría ultrasónica presenta incertidumbre para materiales con macro-simetría hexagonal alineada con el eje x_3 . En estos casos no se pueden excitar modos transversales horizontales (SH) y, por consiguiente, no se puede determinar la constante C_{12} . Sin embargo, al incluir la información de textura se observó empíricamente que esta indeterminación desaparece. Es decir, que para un material dado, no existirían dos texturas diferentes que resulten en tensores de rigidez, donde todas las constantes, salvo C_{12} , sean idénticas. Por ende, incluir la información de textura eliminaría la incertidumbre para este tipo de macro-simetría. Un análisis más profundo de esto se incluye en el apéndice F.

7.3. Método experimental

7.3.1. Optimización

Siguiendo el método utilizado en el capítulo 6, la textura cristalográfica se invierte a partir de los experimentos de goniometría ultrasónica utilizando un algoritmo de optimización meta-heurística. El diagrama de la optimización para textura se muestra en la Fig. 7.1. El modelo directo ahora integra la aproximación efectiva de HS (5.53) de forma que la entrada son coeficientes de textura, mientras que la salida sigue siendo la simulación del experimento. Además de los parámetros experimentales, también resulta necesario

introducir el tensor de rigidez del monocristal, el cual se obtiene de la literatura. El modelo de onda plana incluye los pasos detallados en la sección 3.5 y su implementación en GPU. Las cotas, antes de rigidez, ahora son dadas por la envolvente convexa de coeficientes de textura descrita en el apéndice G. La estimación inicial en este caso es la ausencia de textura ($V_{\langle 2 \rangle ij} = V_{\langle 4 \rangle ijkl} = 0$) correspondiente a la isotropía elástica.

La textura podría calcularse como un problema de dos pasos, primero optimizando las constantes elásticas, como se describió en el capítulo 6, para luego aplicar la inversión de la Ec. 7.5, como se describió en la sección 7.2. Sin embargo, acoplar ambos pasos, incluyendo la homogeneización dentro del modelo de optimización, tiene como ventaja que el espacio de búsqueda de las constantes elásticas se restringe aún más. Esto se debe a que el campo ultrasónico optimizado solo puede ser producto de un tensor de rigidez que surge de la combinación entre las propiedades monocristalinas $\tilde{\mathbb{C}}$ y la información estadística $\mathbb{V}_{\langle \alpha \rangle \beta}$. Esta relación es más estricta que las cotas de orden 0 empleadas en el capítulo 6, ya que estas limitan el espacio que puede tomar cada constante de forma independiente. En cambio, la homogeneización, tanto de orden 1 como de orden 2, impone, además, relaciones entre ellas.

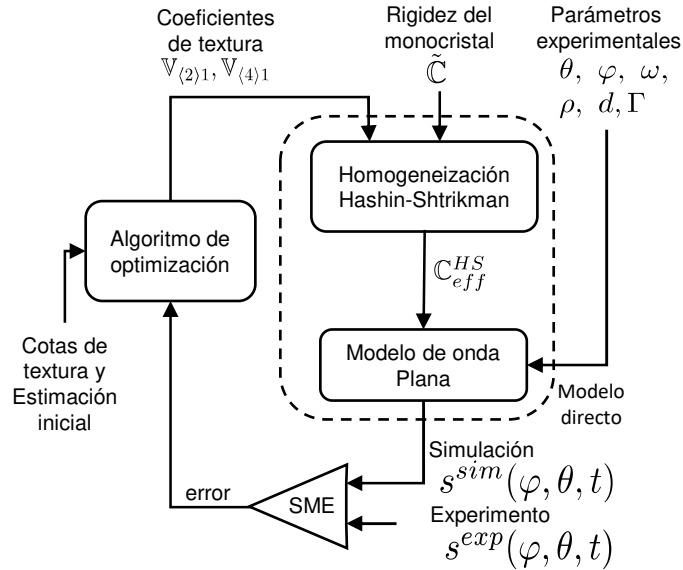


Figura 7.1: Optimización de textura cristalográfica. El modelo directo ahora incluye la homogeneización elástica.

La función objetivo queda definida, igual que en el capítulo 6, por la Ec. 6.1, y los intervalos de confianza se obtienen por el método de la matriz de covarianza descrito en el Apéndice E.

7.3.2. Cálculo de Homogeneización

La homogeneización de rigidez consiste en utilizar propiedades monocristalinas $\tilde{\mathbb{C}}$, obtenidas de la literatura, y la información estadística $\mathbb{V}_{\langle\alpha\rangle\beta}$ para encontrar una aproximación de las propiedades macroscópicas efectivas $\bar{\mathbb{C}}$. Primero se utiliza $\tilde{\mathbb{C}}$ para calcular la solución auto-consistente isótropa $\mathbb{C}_0^{iso}$ (5.52). Esta solución se utiliza como material de comparación en la Ec. 5.53 y al introducir coeficientes de textura $\mathbb{V}_{\langle\alpha\rangle\beta}$ se genera la aproximación efectiva $\mathbb{C}_{app}^{HS}$.

La implementación de este cálculo se realizó modificando el repositorio de GitHub de Rossin [118], el cual es una traducción a Python del código escrito para Wolfram Mathematica por Lobos [84]. En este trabajo se introdujeron dos modificaciones. Primero se agregó la micro-simetría cristalina hexagonal que no estaba implementada en el repositorio de Python. En segundo lugar, como la aproximación de HS 5.4.4 tiene parámetros que solo dependen de propiedades del monocristal, estos se calculan una sola vez y se guardan. Luego, para cada nuevo individuo, el conjunto de coeficientes de textura se usa solo para calcular el promedio en orientaciones de la Ec. 7.5. Esto ahorra una cantidad considerable de tiempo, ya que se reduce el número de operaciones redundantes. El procedimiento de homogeneización solo tarda 0.2 ms por individuo en una CPU de 6 núcleos y 3.5 GHz. Un ajuste típico requiere la evaluación de alrededor de 5000 individuos.

7.3.3. Sensibilidad

La sensibilidad del método depende de cuán anisótropa es la rigidez del monocristal, la cual puede ser cuantificada por el factor de anisotropía $AF(\tilde{\mathbb{C}})$ definido por la Ec. 5.42. Se realizó un análisis de sensibilidad del modelo directo ante la variación de cada uno de los coeficientes de textura independientes para distintos materiales, partiendo de la condición de isotropía ($\mathbb{V}_{\langle\alpha\rangle\beta}=0$). Para esto, la variación del modelo se cuantificó como el error cuadrático medio entre dos conjuntos de señales simuladas: uno en la condición de referencia (isotropía) y otro después de variar un coeficiente de textura. En la Fig. 7.2a se muestra el análisis para un acero 304, cuyo factor de anisotropía es $AF = 3,18$. En general, se observa que el experimento es sensible a la variación de todos los coeficientes. Por otro lado, el tungsteno, con un $AF = 1,008$, representa un caso particular cuya micro-simetría cúbica es casi isótropa [119], y por ende la rigidez macroscópica $\bar{\mathbb{C}}$ es cuasi-isótropa para cualquier textura. El análisis para ese material se muestra en la Fig. 7.2b. En primera instancia se observa que la sensibilidad no es tan uniforme como el caso anterior, pero el resultado más significativo es que la escala del error absoluto medio está dos órdenes de magnitud por debajo del caso del acero. Se concluye que cuanto mayor sea la anisotropía del monocristal mejor será la sensibilidad del método para invertir la textura a partir de la elasticidad.

Por último, se realizó el análisis de sensibilidad para el caso del zinc, cuyo $AF = 18,9$. Dado que su micro-simetría es hexagonal, el análisis incluye además los coeficientes de

orden 2. Los resultados se muestran en la Fig. 7.3 y se observa una sensibilidad cercana a la del acero.

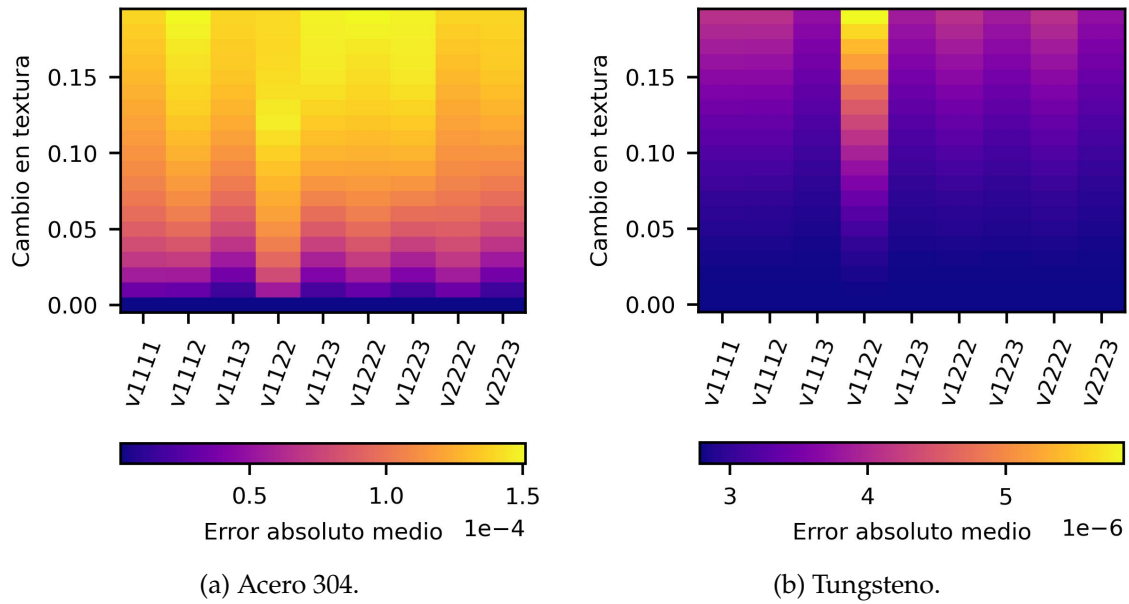


Figura 7.2: Análisis de sensibilidad ultrasónica para materiales con micro-simetría cúbica frente a cambios individuales de los coeficientes de textura. La isotropía monocristalina del tungsteno disminuye la sensibilidad del método.

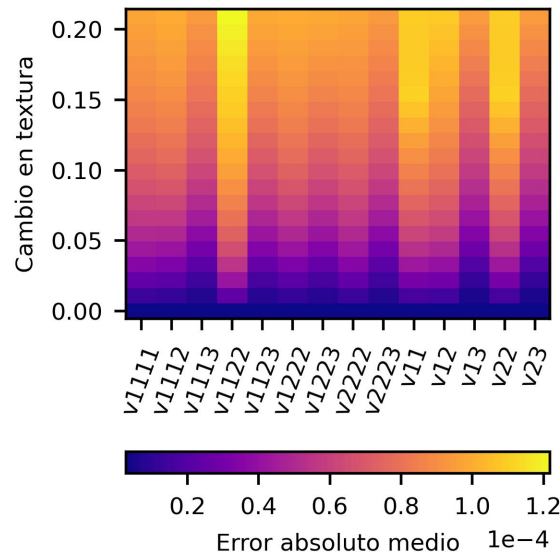


Figura 7.3: Análisis de sensibilidad ultrasónica para zinc con micro-simetría hexagonal frente a cambios individuales de los coeficientes de textura.

7.3.4. Muestras

Se eligieron muestras para estudiar distintos elementos, simetrías cristalinas y espesores. Nuevamente, se eligió una oblea de silicio monocristalina con orientación $\langle 111 \rangle$ como

material sin simetría de reflexión en el plano x_1x_2 . Esta oblea, diferente de las utilizadas en el capítulo 6, se caracteriza por tener una desorientación de la dirección $\langle 111 \rangle$ con respecto a la normal de la muestra. El resto de los materiales son metales policristalinos, con micro-simetría cúbica o hexagonal, de un solo constituyente y un par de caras paralelas como producto de laminación. No se realizó ningún tipo de pulido o preparación de muestra más allá de un corte para que la probeta entre en el goniómetro ultrasónico. Los detalles de los materiales se incluyen en la Tabla 7.1, mientras que los detalles de las muestras se incluyen en la Tabla 7.2. Las muestras **Zry-a** y **Zry-b** sí son las mismas que se caracterizaron en el capítulo 6. La columna “Tensor monocristal ($\tilde{C}$)”, indica de dónde se obtuvieron las constantes elásticas del monocristal, utilizadas para el cálculo del AF y, más adelante, para la inversión de la textura. Todas las muestras tienen una superficie capaz de incluir un círculo de al menos 40 mm de diámetro. Nuevamente, la densidad se determinó por picnometría de gases y el espesor se determinó con micrómetro digital.

Tabla 7.1: Detalles de los materiales caracterizados en este capítulo.

Material	Micro-simetría	Densidad (g/cm ³)	AF (monocristal)	Tensor monocristal ($\tilde{C}$)
Acero 304	cúbica	7.93	3.18	[85]
Zircaloy 4	hexagonal	6.50	1.61	[101]
Zinc	hexagonal	7.18	18.91	[120]
Silicio	cúbica	2.33	9.4	[100]

Tabla 7.2: Detalles de las muestras caracterizadas en este capítulo.

Nombre de probeta	Material	Espesor (mm)	Técnica de comparación
SS304	Acero 304	4.94	ND
Zry-b	Zircaloy 4	5.00	ND
Zry-a	Zircaloy 4	1.33	XRD
Zn	Zinc	0.82	XRD
Si$\langle 111 \rangle$-b	Silicio	0.53	XRD

7.3.4.1. Técnicas de validación

Los resultados obtenidos por ultrasonido fueron comparados con técnicas convencionales. Al igual que en el capítulo 6 las muestras delgadas ($d < 5$ mm) fueron medidas por XRD en el Laboratorio de material de fabricación de aleaciones especiales, del Departamento de Tecnología de Aleaciones de Circonio, en el Centro Atómico Ezeiza de la Comisión Nacional de Energía Atómica. Las muestras gruesas fueron medidas por ND en el Centro Australiano de Dispersión de Neutrones (ANSTO). Esta decisión fue motivada por el hecho de que el haz de neutrones requiere un espesor mínimo que las muestras

delgadas no cumplen. Las desventajas de la técnica de XRD son principalmente su poca penetración, del orden del micrón, por lo que la información solo es representativa de la capa superficial. Además, por la misma razón, es sensible a la deformación y rayas de pulido, por lo que se requiere el ataque químico de la superficie. Los detalles metodológicos de las técnicas de difracción se detallan en [105, 106].

Las figuras de polos medidas por XRD y ND fueron procesadas mediante la biblioteca MTEX [6] para calcular las ODFs, a partir de las cuales se extrajeron los coeficientes de Fourier tradicionales C_{lmn} (Ec. C.2) hasta el orden 4. Las figuras de polos truncadas fueron reconstruidas a partir de estos coeficientes. El truncamiento se realizó para poder comparar los resultados de difracción con los resultados ultrasónicos que están limitados hasta el orden 4. Más detalles de esto se dan en la sección 7.5.

Los coeficientes de textura tensoriales $V'_{\langle\alpha\rangle\beta}$ obtenidos a partir del método ultrasónico fueron traducidos a los coeficientes tradicionales C_{lmn} a partir de la Ec. D.1 del apéndice G, y posteriormente fueron utilizados en MTEX para generar las mismas figuras de polos que antes.

Para la muestra **Si<111>b**, al ser monocristalina, la caracterización de su orientación no se realizó por la medición de textura convencional, sino que se llevaron a cabo experimentos de DRX en configuración de haz paralelo en el laboratorio de rayos X del Departamento de Física de la Materia Condensada en el Centro Atómico Constituyentes de la Comisión Nacional de Energía Atómica. Los detalles del experimento se incluyen en el Apéndice I.

7.4. Resultados

7.4.1. Muestra monocristalina

El silicio monocristalino, en un principio, se incluyó como material de referencia para validar el método, en analogía con el capítulo 6. Sin embargo, la medición ultrasónica mostró que en una oblea en particular, denominada **Si<111>b**, el monocristal se encuentra desorientado con respecto a las direcciones principales, y por ende se la seleccionó para evaluar la capacidad del método ultrasónico para determinar una desorientación pequeña. En la Fig. 7.4 se muestra la figura de polos (111), donde, partiendo de la orientación de referencia, la desorientación se puede describir como una rotación de 4.2° con respecto a la dirección x_2 y una rotación de -3.2° con respecto a x'_3 . De esta manera la dirección <111> se encuentra desorientada con respecto a la normal de la oblea, mientras que la dirección <110> se encuentra desorientada con respecto al “flat” o corte que tendría que indicar dicha dirección.

Esta desorientación fue contrastada por un experimento de DRX en el cual se encontró que la rotación con respecto a x_2 es de 3.91° , es decir, que el método ultrasónico determinó la desorientación con un error de 0.29° . En la Fig. 7.5 se muestra la figura de polos obtenida por ultrasonido en comparación con la recreada a partir de un monocristal ideal y la rotación medida por DRX. Notar que las mediciones ultrasónicas se realizaron con

una rotación azimutal adicional para evitar que las direcciones de simetría coincidan con el sistema de referencia del experimento, como se explicó en el capítulo 6. La Fig. 7.5 muestra los resultados en el sistema de referencia de medición ultrasónica, es decir, con la rotación azimutal adicional.

Esta muestra, al estar desorientada, no tiene ninguna dirección de simetría alineada con el sistema de referencia de la medición. Su caracterización, entonces, solo es posible presuponiendo que la muestra es triclinica, resaltando la utilidad del desarrollo mostrado en el capítulo 3.

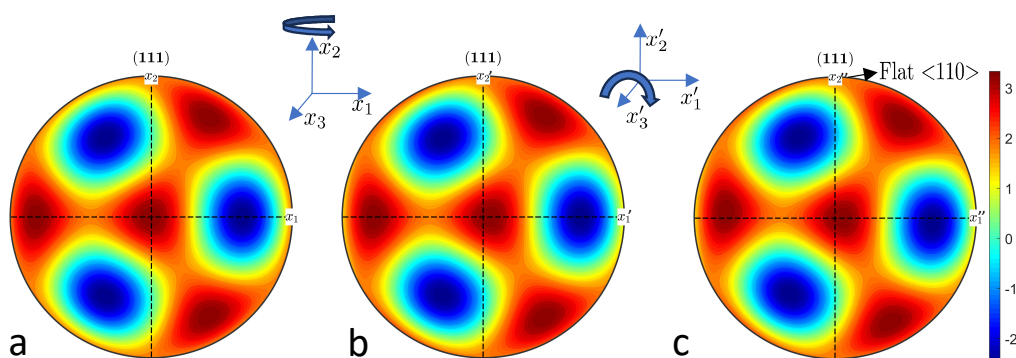


Figura 7.4: Desorientación de la muestra **Si<111>b** observada por ultrasonido. Partiendo de la orientación de referencia (a), la desorientación se puede describir como una rotación de 4.2° con respecto a la dirección x_2 (b) y una rotación de -3.2° con respecto a x'_3 (c).

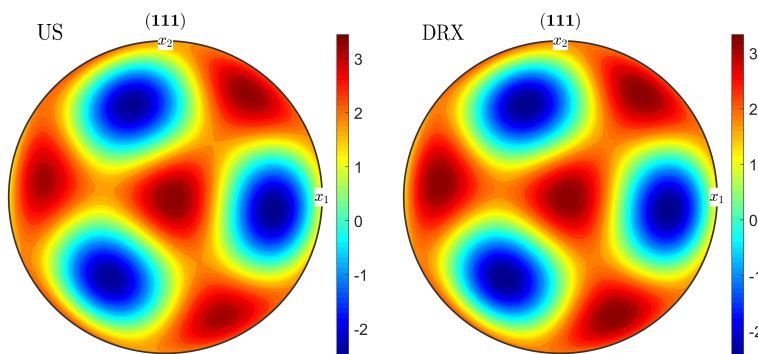


Figura 7.5: Figuras de polos (111) para la probeta **Si<111>b** obtenida por ultrasonido (US) y reconstruida a partir de la medición de DRX.

7.4.2. Muestras policristalinas

Los resultados obtenidos para las muestras policristalinas, **SS304**, **Zry-b**, **Zry-a** y **Zn**, se muestran en las Figs. 7.6, 7.7, 7.8 y 7.9, respectivamente. Nuevamente, se evitó alinear las direcciones principales de las muestras con el sistema de referencia de la medición ultrasónica, buscando probar la flexibilidad del método. Por consiguiente, las mediciones de comparación se rotaron para coincidir con las mediciones ultrasónicas. Aun así, las direcciones principales, RD, TD, se señalan en las figuras.

En general, se observa un buen acuerdo entre el método ultrasónico y la medición de comparación. En particular, las figuras de polos obtenidas por ND presentan una gran similitud con sus contrapartes ultrasónicas. Por otro lado, las mediciones de la muestra **Zry-a** muestran buena similitud en la distribución, pero difieren considerablemente en las intensidades, como se aprecia en la escala de colores. Por último, para la muestra **Zn** se observa un fenómeno similar. Los coeficientes de textura, y sus intervalos de confianza, se incluyen en el Apéndice G.

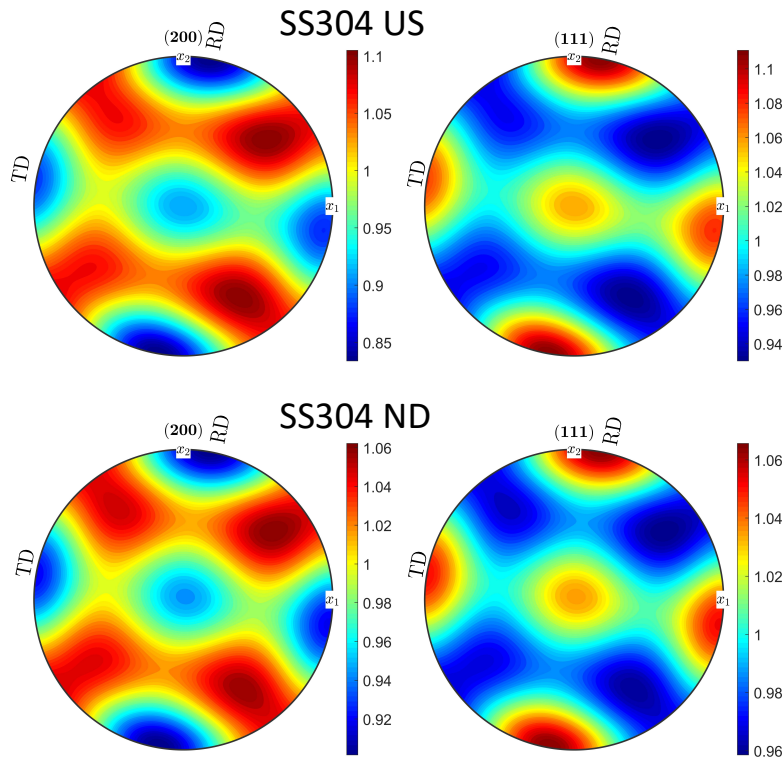


Figura 7.6: Figuras de polos (200) y (111) para la probeta **SS304** por método ultrasónico (US) y por difracción de neutrones (ND). RD y TD representan las direcciones de laminación y tangencial respectivamente, mientras que x_1 , x_2 , y x_3 son el sistema de referencia de la medición.

7.4.3. Cuantificación del error

Para cuantificar el error relativo (ER) entre dos funciones de textura se utilizó la función “calcError” de MTEX. La misma define dicho error como

$$ER_f = \text{norm}(f1 - f2) / \text{norm}(f2), \quad (7.6)$$

donde la función **norm** se define para una ODF como

$$\text{norm}(f) = \sqrt{\int f(Q)^2 dQ}, \quad (7.7)$$

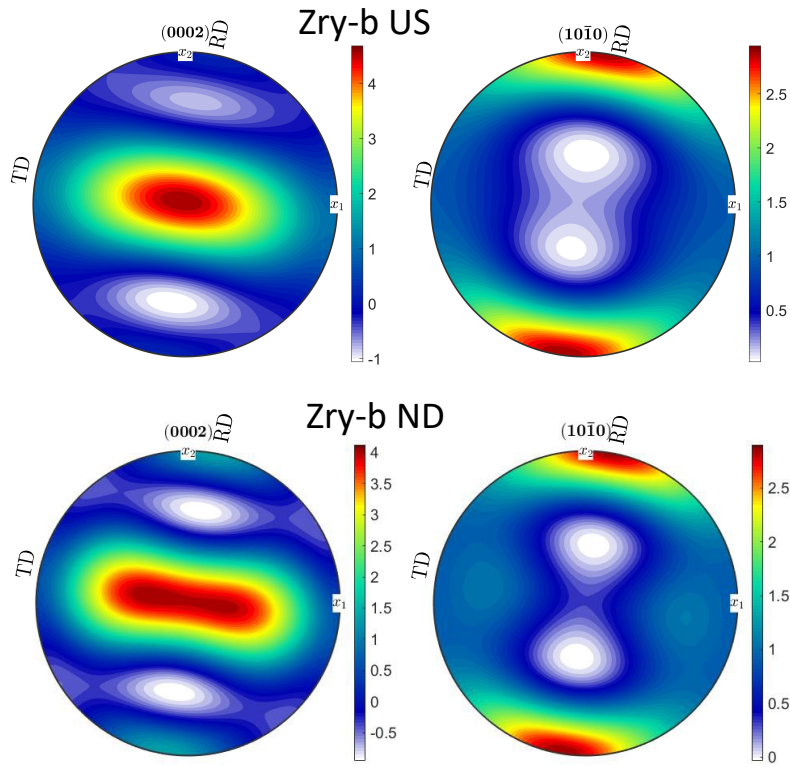


Figura 7.7: Figuras de polos (0002) y (10 $\bar{1}$ 0) para la probeta **Zry-b** por método ultrasónico (US) y por difracción de neutrones (ND). RD y TD representan las direcciones de laminación y tangencial respectivamente, mientras que x_1 , x_2 , y x_3 son el sistema de referencia de la medición.

pero se calcula a partir de los coeficientes de textura, en este caso hasta orden $l=4$, como

$$\text{norm} = \sqrt{\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_{mn}^l C_{mn}^{l*}}. \quad (7.8)$$

En esta definición, las bases de Wigner-D utilizadas para el cálculo de los coeficientes de textura siguen la normalización $L_2 = 1$, que difiere de la normalización utilizada en el resto de la tesis. Esta decisión se tomó para mantener la convención utilizada en MTEX, facilitando la comparación con otros trabajos. La normalización utilizada para estas bases se discute con mayor detalle en el apéndice C.

La Tabla 7.3, muestra el error entre métodos para las distintas muestras. Nuevamente, y en concordancia con las figuras de polos, se observa un menor error contra las mediciones de ND que contra las de DRX. Para la probeta **Si<111>b** también se observa un bajo error, el cual puede no ser preciso, ya que la textura no se midió, sino que solo se estimó a partir de la desorientación medida por DRX.

7.4.4. Factor de Kearns

La anisotropía en la expansión térmica, observada en materiales con micro-simetría hexagonal, es de particular importancia para el caso del circonio y del hafnio en la industria

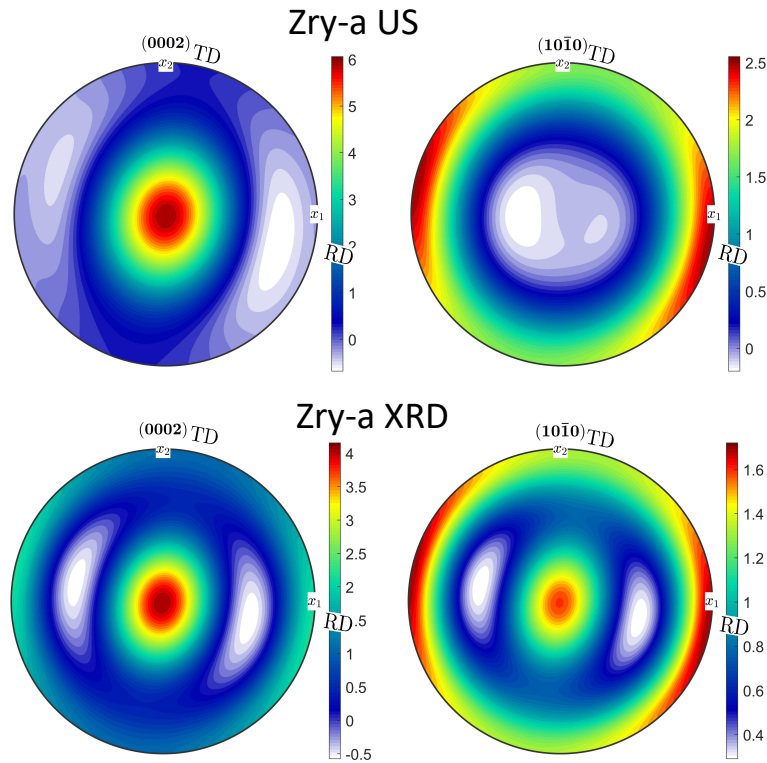


Figura 7.8: Figuras de polos (0002) y $(10\bar{1}0)$ para la probeta **Zry-a** por método ultrasónico (US) y por difracción de neutrones (ND). RD y TD representan las direcciones de laminación y tangencial respectivamente, mientras que x_1 , x_2 , y x_3 son el sistema de referencia de la medición.

Tabla 7.3: Error relativo entre las mediciones de textura por ultrasonido y las mediciones de textura obtenidas por métodos de comparación

Probeta	Error	Método de comparación
Zry-a	0.67	XRD
Zry-b	0.23	ND
Zn	0.48	XRD
SS304	0.03	ND
Si<111>b	0.04	XRD

nuclear, por lo que motivó el modelo de expansión térmica de Kearns y la definición de los factores de Kearns [121]. Estos últimos definen las fracciones volumétricas de planos basales orientados en tres direcciones ortogonales, y como dependen de coeficientes de orden 2, pueden ser calculados a partir de métodos ultrasónicos [122]. Los factores de Kearns calculados en MTEX para las probetas medidas se incluyen en la Tabla 7.4 y la para la dirección de laminación (RD), la dirección tangencial (TD) y la dirección normal. Solo se observa un buen acuerdo para la probeta **Zry-b**, contrastada con ND. Sin embargo, la medición ultrasónica incluye un valor negativo, el cual no tiene significado físico. Aun así, el error absoluto es menor a la décima en cualquier dirección. El factor de Kearns

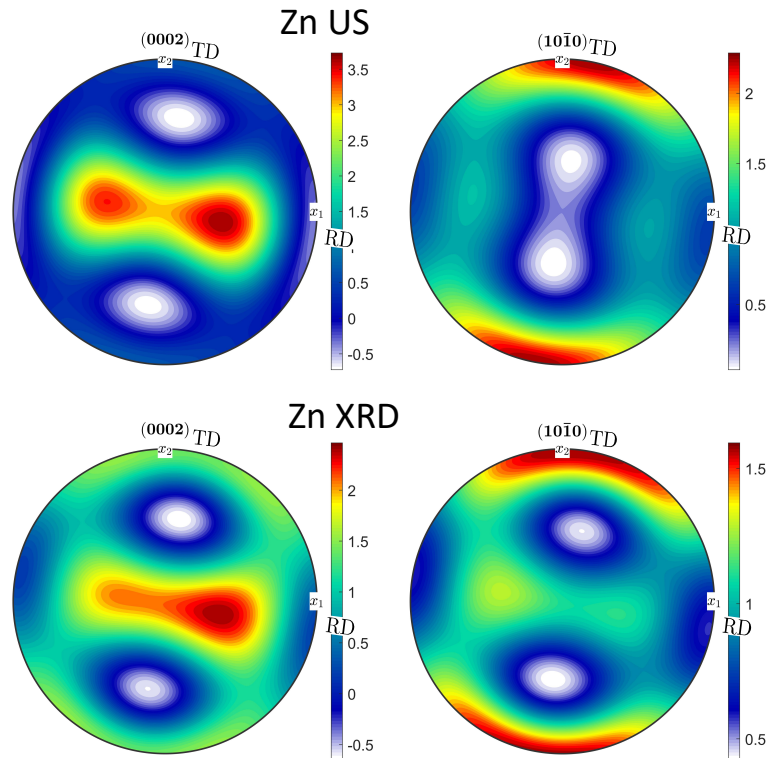


Figura 7.9: Figuras de polos (0002) y $(10\bar{1}0)$ para la probeta **Zn** por método ultrasónico (US) y por difracción de neutrones (ND). RD y TD representan las direcciones de laminación y tangencial respectivamente, mientras que x_1 , x_2 , y x_3 son el sistema de referencia de la medición.

para las otras dos muestras presenta un acuerdo débil, coherente con la discrepancia en intensidades observadas en las figuras de polos.

Tabla 7.4: Factores de Kearns. Notar que la suma de las tres direcciones debe ser 1, y en los casos en que esto no sucede se debe a un error por redondeo.

	Zry-a		Zry-b		Zn	
Dirección	US	DRX	US	ND	US	DRX
RD	0.02	0.29	-0.01	0.07	0.31	0.35
TD	0.19	0.29	0.34	0.32	0.12	0.27
Normal	0.79	0.42	0.66	0.61	0.57	0.38

7.5. Discusión

Se observó un buen acuerdo entre los resultados obtenidos por ultrasonido y los obtenidos por técnicas de difracción, demostrando que el método desarrollado para la determinación ultrasónica de la textura cristalográfica es efectivo. Al comparar la técnica con trabajos de determinación directa de la textura, como los de Sayers [112], Hirao [113], Li [114], o Lan [99], la principal desventaja es que el método presentado aquí requiere la

inversión indirecta de resultados, lo que resulta computacionalmente más costoso. Sin embargo, dado que se utilizó un ajuste por simulación, se evitan las desventajas asociadas a la parametrización de velocidades, como se explicó en el capítulo 3. Principalmente, al no imponer modos de propagación, el método permite la medición de probetas en un amplio rango de espesores y frecuencias sin importar la dispersividad del medio. Tampoco se restringe la macro-simetría elástica de la muestra, por lo que además de poder caracterizar materiales generalmente anisótropos, tampoco requiere la alineación precisa de probetas con mayor simetría. Además, la utilización de la homogeneización elástica, basada en cotas de segundo orden, es más precisa que las cotas de primer orden utilizadas en estos trabajos.

Al comparar la técnica con el trabajo de Rossin et al. [117], se observa que la principal ventaja reside en que, para la goniometría ultrasónica, las probetas solo requieren un par de caras paralelas, mientras que las utilizadas en los experimentos de RUS deben ser paralelepípedos rectangulares cuya fabricación es mucho más laboriosa. Por otro lado, de acuerdo con el autor, el tiempo de ajuste de un resultado dura entre 24 y 48 horas en una CPU de 8 núcleos, mientras que en este trabajo solo demora alrededor de 7 minutos. Esto se debe, en parte, al desarrollo de los transductores optimizados para tener una respuesta que se aproxima al comportamiento de onda plana, como se mostró en el capítulo 4. Esto simplifica el modelo directo cuya implementación en GPU, además, reduce considerablemente el tiempo de cómputo, como se mostró en el capítulo 3. Esto, sumado al hecho de que un experimento tarda menos de 2 minutos, como se describió en el capítulo 6, hace que la técnica sea competitiva con técnicas de laboratorio. Por ejemplo, un experimento de textura por XRD demora alrededor de una hora.

La inclusión del método de homogeneización dentro del modelo directo reduce el espacio de búsqueda durante la optimización, por lo que se observó que, comparado con la inversión de constantes elásticas, la inversión de la textura requiere menos evaluaciones. En el capítulo 6, las probetas **Zry-a** y **Zry-b** requirieron 5825 y 5960 evaluaciones del modelo directo, mientras que en este capítulo el número se redujo a 3466 y 4771 respectivamente. Además, se observó que la inclusión de la homogeneización en el ajuste elimina la indeterminación de la goniometría ultrasónica para materiales con macro-simetría hexagonal. Dado que el tensor de rigidez se calcula dentro del modelo directo, el ajuste determina de manera simultánea la textura y las propiedades elásticas. Por las ventajas mencionadas, incluir la homogeneización en el ajuste es recomendable, aun cuando el objetivo único sea determinar las constantes elásticas.

7.5.1. Error por truncamiento y órdenes impares

La simetría mayor del tensor de rigidez implica que la propiedad es centro-simétrica, por lo que no depende de coeficientes de textura de orden impar y que, por ende, no se pueden invertir. Esto también sucede en técnicas de difracción (XRD, ND, etc.) que presentan la misma simetría [123], lo cual puede generar la aparición de valores erróneos

o “fantasmas” (“ghosts”) durante la reconstrucción de la ODF. En general, estos defectos pueden ser mitigados con métodos de estimación del orden impar [124]. Como las figuras de polos son independientes de coeficientes de orden impar, son la representación de textura elegida en este trabajo.

Por otro lado, dado que la rigidez es un tensor de orden 4, los coeficientes recuperables son aquellos de orden menor o igual a 4 ($\alpha \leq 4$) como se observa en la descomposición armónica de la Ec. 7.5. En muchos casos, estos coeficientes son suficientes para describir razonablemente bien la textura, sin embargo, existen casos particulares donde la energía se concentra en órdenes mayores y las figuras generadas con los coeficientes truncados a orden 4 difieren considerablemente de las figuras completas [99]. En general, el truncamiento genera el achatamiento o “suavizado” de los picos, pero también puede generar la aparición de errores en torno a texturas fuertes [116, 125]. En las Figs. 7.10 y 7.11 se muestran los errores por truncamiento de las probetas **SS304-b** y **Zry-b** respectivamente. En estas figuras, la potencia se calcula para cada orden como la suma del cuadrado de todos los coeficientes tradicionales de Fourier con normalización $L_2 = 1$, mediante la función “plotFourier” de MTEX. Se observa que para el caso de la primera, la textura es suave (potencia ≈ 0.015), y que está principalmente centrada en el orden 6. Es decir, que para este caso particular, la textura truncada al orden 4 difiere significativamente de la completa. Para el caso de la probeta **Zry-b**, la potencia decrece exponencialmente con el orden, por lo que la textura obtenida por ultrasonido es más parecida a la textura completa.

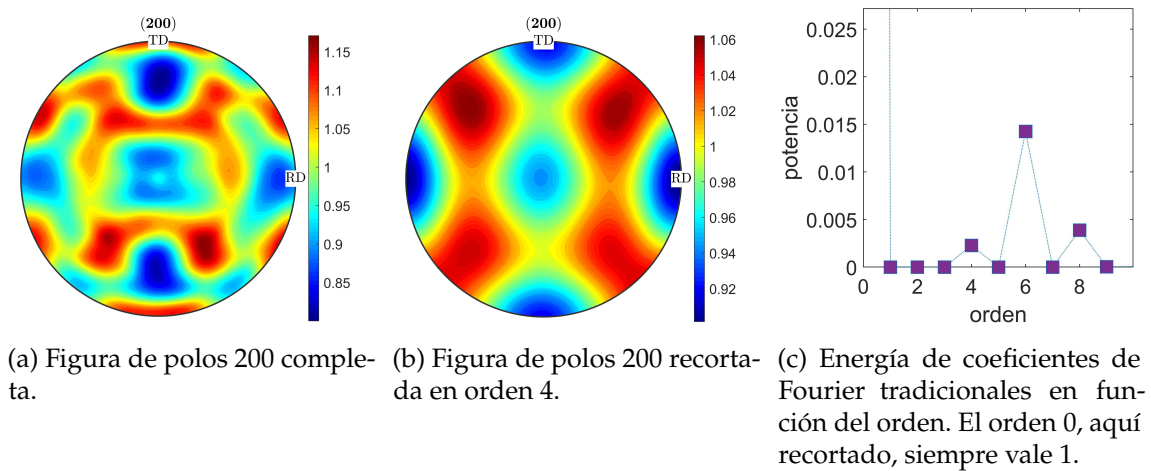


Figura 7.10: Efecto de truncamiento a orden 4 en probeta **SS304-b** medida por ND.

Más allá de la representación visual y sus posibles defectos por truncamiento, los coeficientes de textura obtenidos por ultrasonido son útiles para el cálculo de cantidades físicas que se describen con tensores de orden 2 o 4, como pueden ser, además de las propiedades elásticas, la anisotropía magnetocristalina y el estado de saturación magnética [126, 127], pérdidas por histéresis [128], la susceptibilidad magnética, la conductividad eléctrica, la conductividad térmica, y la expansión térmica [129].

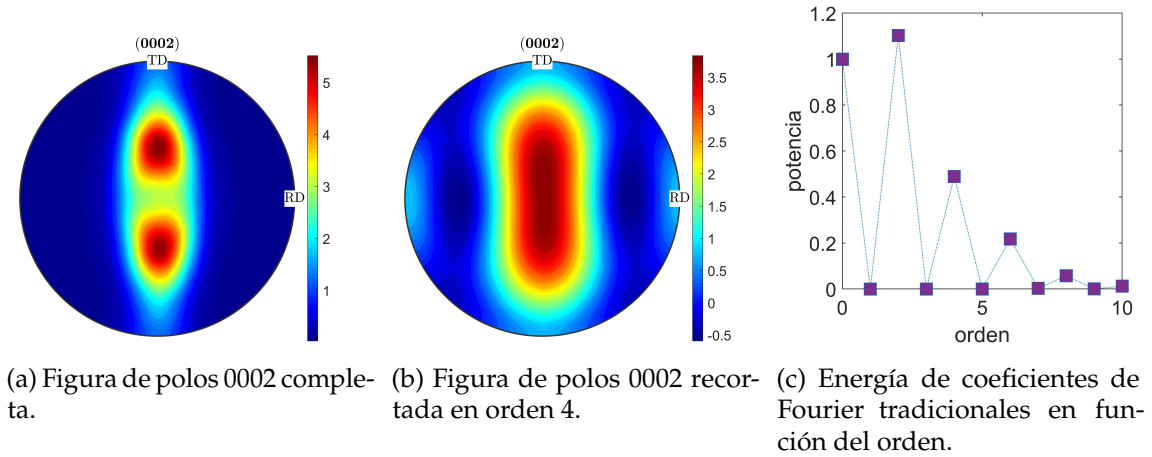


Figura 7.11: Efecto de truncamiento a orden 4 en probeta **Zry-b** medida por ND.

7.5.2. Tensiones residuales

Retomando la expansión de Taylor de la energía de deformación (Ec. 2.8), la aproximación de pequeñas deformaciones (aproximación lineal) permite despreciar términos de orden mayor a 2, por lo que la relación constitutiva utilizada en este trabajo se define a partir del tensor de constantes elásticas de segundo orden (descritas por el tensor de orden 4 c_{ijkl}). Si, por otro lado, las deformaciones son considerables, es posible contemplar un orden mayor en la expansión mediante la inclusión del tensor de constantes elásticas de tercer orden, descritas por el tensor de orden 6 c_{ijklmn} . Este está compuesto, para un material macro-triclínico, por 56 elementos independientes [5], para un material macro-hexagonal por 12 y para un material macro-cúbico por 6 [130]. Incluir constantes elásticas de tercer orden permite estudiar el efecto acusto-elástico, es decir, la variación de la velocidad y polarización de ondas ante la presencia de tensiones estáticas. Una de sus principales aplicaciones es la determinación de tensiones residuales en el sólido, como por ejemplo [131-133].

Dado que el fenómeno acusto-elástico depende de un tensor de sexto orden, entonces las expresiones de homogeneización, definidas a partir de la textura cristalográfica como las Ecs. 7.2 y 7.5, deben incluir coeficientes de textura de orden 6 [134]. Para un material con micro-simetría cúbica se suma un coeficiente de textura con 13 elementos independientes, mientras que para un material con micro-simetría hexagonal se suman 3 coeficientes de textura con 13 elementos independientes cada uno. Es decir que, en teoría, la dependencia de los campos ultrasónicos ante la presencia de tensiones estáticas, o grandes deformaciones, puede ser utilizada para invertir la textura cristalográfica hasta un orden mayor. Sin embargo, en la práctica esto no es fácilmente aplicable, ya que, si la magnitud de las tensiones aplicadas es pequeña, entonces las constantes elásticas de tercer orden no influyen en la propagación de ondas. Además, las constantes elásticas de tercer orden para monocristales no son tan fáciles de encontrar en la literatura como las de segundo orden. Por último, dada la gran dimensionalidad del problema, la inversión

de los resultados puede resultar desafiante.

Algunos trabajos estudiaron la determinación ultrasónica de la textura cristalográfica y del estado de tensiones residuales, que bajo ciertas suposiciones pueden ser encontradas de forma independiente. Por ejemplo, realizando aproximaciones sobre la macro-simetría de la muestra, el tipo de tensiones y los modos de propagación de las ondas, es posible separar la anisotropía producida por la textura cristalina de la producida por tensiones residuales [135-137]. Dado que la influencia de las tensiones residuales suele ser pequeña (típicamente menor al 0.1 % [138]), en este trabajo se desprecia el efecto de las mismas en la propagación de ondas. Es posible que en algunos materiales, por ejemplo, en metales fabricados por manufactura aditiva, el efecto de las tensiones residuales no sea despreciable [117]. Es posible, también, que el mejor acuerdo observado con la ND que con la DRX se deba a que las placas gruesas se suelen laminar en caliente, mientras que las placas delgadas se terminan de laminar en frío, y por ende presentan un mayor estado de tensiones residuales. Estas tensiones, de ser suficientes, podrían empeorar la precisión del método. La otra causa que puede explicar esta discrepancia es que, tanto la ND como el ultrasonido son técnicas en transmisión, por lo que proveen información representativa del volumen, mientras que la DRX, al ser una técnica superficial, solo sirve para caracterizar el estado de la superficie.

7.6. Conclusión

Se desarrolló un método para la caracterización de la textura cristalográfica por métodos ultrasónicos. La goniometría ultrasónica consiste en la transmisión de ondas acústicas en distintas direcciones a través del sólido. En general, esta técnica es utilizada para la caracterización de la anisotropía elástica. Sin embargo, el empleo de métodos de homogeneización permitió relacionar las propiedades elásticas efectivas con la información estadística de la microestructura. Las aproximaciones y cotas elásticas de segundo orden posibilitan el cálculo de las propiedades elásticas efectivas a través de funciones que dependen del monocristal y coeficientes tensoriales de textura. Para el caso particular de materiales policristalinos de un constituyente con micro-simetría hexagonal o cúbica, se observó que las expresiones son inyectivas, por lo que al caracterizar las propiedades elásticas efectivas, se determinan, de forma simultánea, los coeficientes de textura involucrados en el cálculo.

La implementación particular del método logró superar algunas de las limitaciones observadas en la literatura: no se restringe la macro-simetría elástica, por lo que es posible caracterizar texturas sin simetrías; no se requiere un modo de propagación específico, por lo que se pueden caracterizar materiales en un amplio rango de espesores y frecuencias; y no se requiere una preparación exhaustiva de la muestra. Además, la automatización del experimento, el desarrollo de transductores dedicados y la implementación del modelo directo en GPU permitieron obtener resultados en menos de 10 minutos, lo que resulta competitivo frente a otras implementaciones de la técnica.

Se realizaron mediciones en materiales con micro-simetría cúbica y hexagonal y los resultados fueron contrastados con técnicas convencionales de difracción, de neutrones para las probetas gruesas y de rayos X para las probetas delgadas. Se observó un buen acuerdo de los resultados, demostrando que la técnica puede constituir una alternativa de bajo costo para la determinación de textura. Y, si bien la textura obtenida está limitada a los coeficientes de orden 2 y 4, la técnica se destaca por obtener resultados representativos del volumen.

TRABAJO A FUTURO

La flexibilidad de los métodos ultrasónicos hace que sea común su aplicación en líneas de producción, por lo que un objetivo futuro es desarrollar la técnica para que pueda ser aplicado en este contexto, y no se limite al uso en laboratorio. Para esto se requieren una serie de modificaciones. En primer lugar, la implementación actual realiza los barridos angulares moviendo la probeta, mientras que los transductores permanecen estáticos. Si se desean medir componentes grandes, como por ejemplo chapas laminadas enteras, entonces sería más conveniente dejar la muestra estática y mover los transductores. En este contexto, también sería útil desarrollar un método que no requiera acceso a ambas caras de la muestra, ya que si la misma se encuentra apoyada, el acceso de una cara se dificulta. Existen métodos que logran esto colocando los transductores en una misma cara de la muestra, como por ejemplo la microscopía acústica de foco lineal [139], o el escaneo lineal de transductores focalizados [88]. Si bien en estas técnicas la medición se realiza en reflexión, dado que las ondas reverberan dentro del material, las señales obtenidas siguen siendo representativas del volumen de interés. Sin embargo, la dificultad de estas metodologías está asociada a que los transductores focalizados no se ajustan directamente al modelo de onda plana, como el desarrollado en el capítulo 3, sino que requieren estrategias más sofisticadas como la desarrollada en el capítulo 4, por lo que el costo computacional del modelo directo puede hacer que la optimización de los resultados demore más tiempo. Existen otros métodos que, realizando algunas aproximaciones, pueden reducir este costo, como por ejemplo el modelo puntual para transductores complejos [140] o el método del haz gaussiano [141]. Por otro lado, los experimentos desarrollados en esta tesis se realizaron bajo inmersión en medio líquido, lo cual puede dificultar la aplicación en un ambiente industrial. Una alternativa viable puede ser la de la inmersión localizada, la cual genera un entorno de inmersión limitado a la zona cercana a los traductores, como por ejemplo en [142]. En general, la inmersión líquida se utiliza porque el agua representa un medio con una impedancia acústica cercana a la de los transductores y el sólido, mientras que la impedancia del aire resulta tan distinta que la transmisión de energía al medio aéreo es pequeña. Existen transductores diseñados para su uso con acoplamiento en aire que, mediante el uso de capas adaptadoras de impedancia, logran disminuir la discrepancia,

como los que se muestran en [17, 143, 144]. Además, sería útil adaptar el modelo a otras geometrías, como por ejemplo la cilíndrica, lo que permitiría aplicar el método a tubos. Esto es de particular interés en la industria nuclear, donde el parámetro de la textura es ampliamente estudiado durante la fabricación de tubos de aleaciones base circonio.

Por otro lado, de acuerdo a lo explicado en la sección 7.5.2, las tensiones residuales tienen influencia en la propagación de las ondas acústicas y por consiguiente, los métodos ultrasónicos podrían ser utilizados para determinarlas, idealmente, de forma independiente de la textura cristalográfica. Profundizar los conocimientos en esta área serviría para perfeccionar la técnica en investigaciones futuras.

En este trabajo, la inversión de los resultados se abordó por métodos de optimización meta-heurísticos, que en general requieren una gran cantidad de evaluaciones para llegar al mínimo global. El uso de cotas y estimaciones iniciales sirvió para limitar el espacio de búsqueda con el fin de facilitar la convergencia del ajuste. En este problema, como trabajo a futuro, sería interesante implementar técnicas de “machine learning” y redes neuronales. En particular, la disciplina denominada “physics-informed machine learning” es prometedora para problemas inversos que pueden ser definidos con leyes físicas [145]. El reconocimiento de patrones en las señales experimentales podría acelerar el proceso de inversión, reduciendo el número total de evaluaciones del modelo directo. En la literatura existen trabajos con este objetivo, pero en su mayoría son aplicados en experimentos de RUS [146-148]. Sería útil aplicar este tipo de técnicas a los experimentos de goniometría ultrasónica o afines.

ANALOGÍA DE LÍNEAS DE TRANSMISIÓN

El comportamiento electromecánico de los transductores ultrasónicos puede ser modelado por la analogía de líneas de transmisión desarrollada por Leach en [149]. Para ello, la parte piezoeléctrica se modela por fuentes controladas de tensión y corriente, mientras que la parte acústica se modela por líneas de transmisión. Este modelo puede incluir las distintas capas de un transductor ultrasónico, como el sustrato (“backing”), los electrodos, las capas adaptadoras de impedancia o las placas de protección (‘wear plates’). Además, dado que la línea de transmisión se describe con las ecuaciones del telegrafista, se puede simular una onda unidimensional viajando por distintos medios. Se pueden implementar modificaciones del modelo para incluir pérdidas del medio [150], o difracción del haz en medios isótropos [151], pero, para el objetivo de este trabajo, el modelo sin difracción y sin pérdidas resulta suficiente. El circuito análogo para un transductor es representado en la Fig. A.1. Aquí, E es el conector eléctrico, y B y F son las conexiones para la cara trasera y delantera de la línea de transmisión que corresponde con la capa piezoeléctrica. En este circuito de analogía de impedancias, la tensión es análoga a la fuerza y la corriente es análoga a la velocidad de partícula. Por lo tanto, la línea de transmisión se caracteriza por una inductancia serie por unidad de longitud $L = \rho A$, y por una capacidad paralelo por unidad de longitud $C = 1/(A\rho v^2)$, donde ρ es la densidad, v es la velocidad de fase y A es la superficie de la sección transversal del haz acústico. Luego, la impedancia característica es $Z_0 = (L/C)^{1/2}$, y el retardo de tiempo es $Td = d/v$, donde d es el espesor de la capa. Para la parte eléctrica, la capacidad del piezoeléctrico es $C_0 = \epsilon^s A_p/d$, y la constante de piezoelectricidad es $h = e_{33}/\epsilon^s$, donde ϵ^s es la permitividad bajo deformación constante, A_p es la superficie del piezoeléctrico que puede o no ser igual a A y e_{33} es el coeficiente piezoeléctrico de tensión. Por último, R_1 y C_1 son valores constantes de 1 k Ω y 1 F respectivamente, los cuales son independientes de las propiedades del piezoeléctrico.

Por consiguiente, un sistema ultrasónico puede ser modelado añadiendo una fuente eléctrica, capas traseras y delanteras al transductor y un medio de propagación. Un segundo transductor se puede emplear para recibir la onda viajera, que se observa como una señal de tensión en la resistencia de carga. Para simular un sistema de pulso-eco, los parámetros de ambos transductores se eligen con valores idénticos. Este sistema,

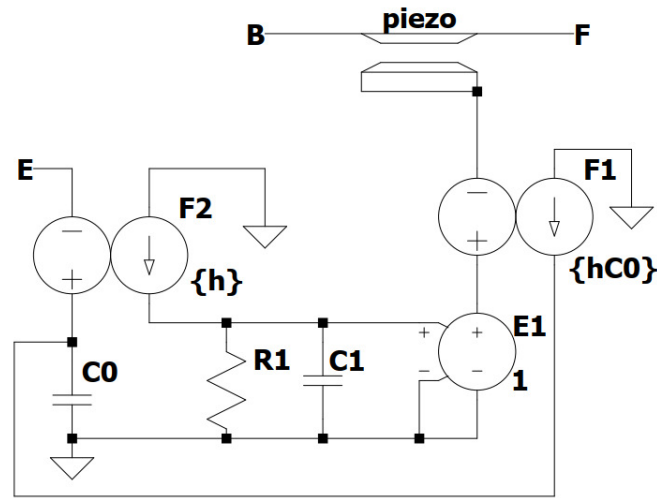


Figura A.1: Modelo de transductor de Leach.

simulado en LTspice, se muestra en la Fig. A.2. El modelo del transductor se redujo a un sub-circuito que solo muestra los puertos de conexión. La “netlist” necesaria para ejecutar esta simulación en LTspice se incluye en A.0.1, y las propiedades de los materiales se muestran en la Tabla A.1.

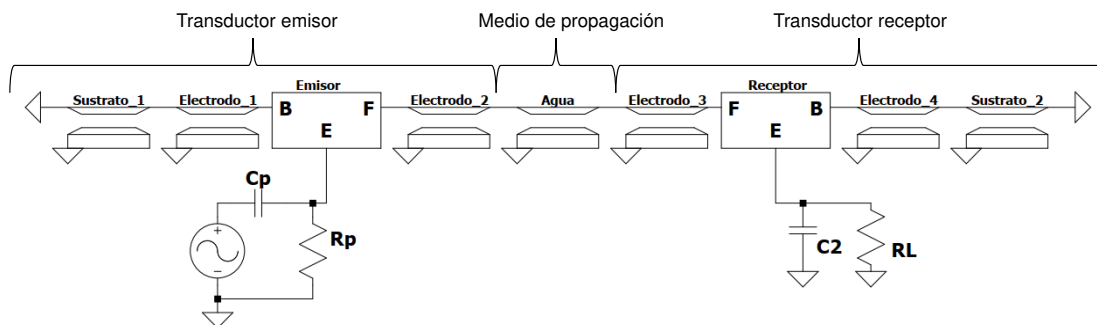


Figura A.2: Modelo de LTspice para un sistema de medición ultrasónico.

Tabla A.1: Propiedades de los materiales utilizados para la simulación.

Material	densidad (kg/m ³)	velocidad del sonido (m/s)	permitividad relativa ϵ^s/ϵ^0	coeficiente piezoeléctrico e_{33} (C/m ²)
PVDF	1780	2200	11	-0.16
PZT	7500	4600	635	15.1
Epoxy	1170	2554	-	-
Agua	998	1490	-	-
Electrodos de pintura de plata	2500	1800	-	-

Se simuló en LTspice un transductor de PVDF de 3 mm de radio y 28 μm de espesor trabajando en pulso-eco. La señal temporal y su espectro se muestran en la Fig. A.3. La misma simulación se repitió para un transductor cerámico de titanato de circonio y plomo (PZT) con un espesor de 260 μm y con el mismo radio, cuyos resultados se muestran en la Fig. A.4. El desacoplamiento de impedancias entre el PZT y el agua es mayor que entre el

PVDF y el agua. Esto genera un efecto de resonancia para el transductor de PZT, que resulta en un ancho de banda reducido en comparación con el traductor de PVDF. Cargar el sustrato de epoxy con polvos de metales pesados, como tungsteno, y utilizar capas de adaptación de impedancia pueden reducir parcialmente este efecto, pero requieren de procesos de fabricación con mayor complejidad [152]. La disminución del ancho de banda deviene en la pérdida de información durante la adquisición de espectros de transmisión o reflexión, y en la pérdida de exactitud de la determinación de tiempos de vuelo. Por estas razones, PVDF es el material preferido para el objetivo de este trabajo.

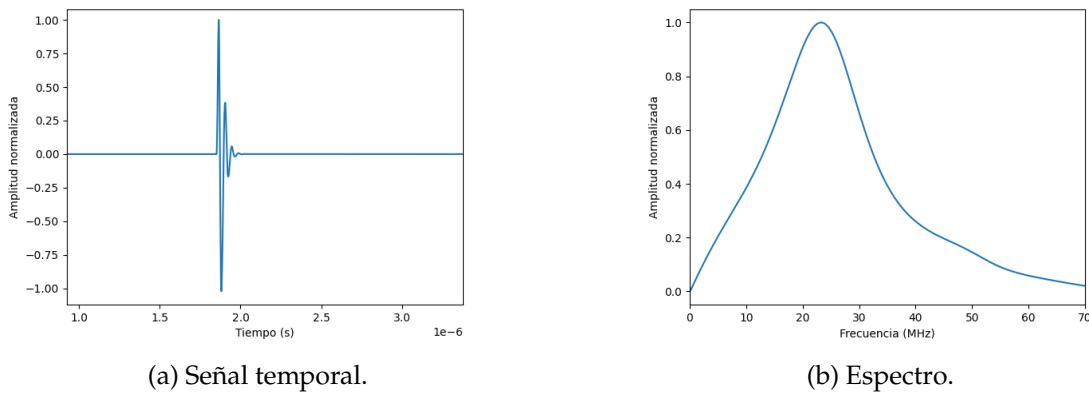


Figura A.3: Transductor de PVDF en una configuración de pulso-eco.

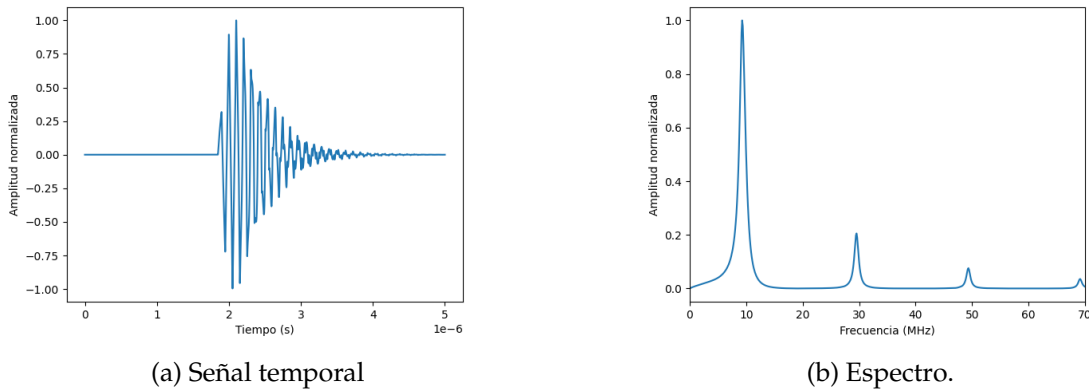


Figura A.4: Transductor de PZT en una configuración de pulso-eco.

Una limitación conocida de los transductores de PVDF es que, debido a su bajo acoplamiento piezoeléctrico, la pérdida por inserción de un transductor de PVDF es mayor a la de su equivalente cerámico. Además, la impedancia de la capacidad domina sobre la resistencia de radiación vista por la fuente [42-44], y, dado que la capacidad es directamente proporcional a la superficie, este parámetro influye de manera relevante sobre la respuesta del transductor. Para un transductor de PVDF en una configuración de pulso-eco, existe una superficie óptima que resulta de la interacción entre la impedancia de la fuente y la impedancia del transductor [44]. Se realizó una simulación para un

transductor de PVDF de 28 μm de espesor en configuración pulso-eco, con una capacidad de pulsador de $C_p = 1 \text{ nF}$, una resistencia de amortiguamiento de $R_p = 500 \Omega$, y una resistencia de carga de $R_l = 50 \Omega$, mientras que en simultáneo se varió la superficie del transductor. Los resultados se muestran en la Fig. A.5, donde se ve que la transferencia máxima coincide con una superficie de aproximadamente $7 \times 10^{-5} \text{ m}^2$.

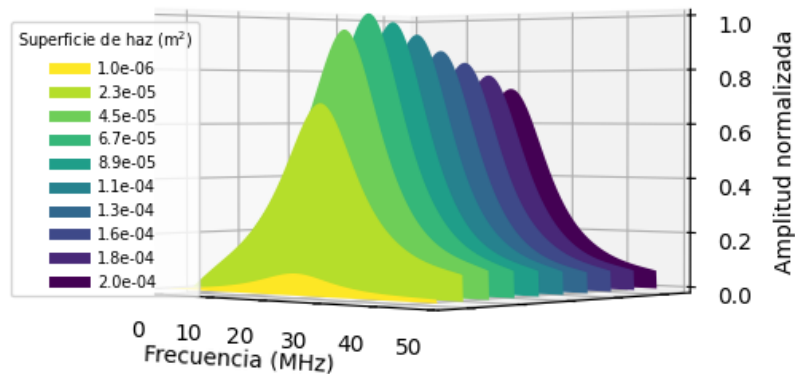


Figura A.5: Respuesta de un transductor de PVDF en pulso-eco para superficies entre 1×10^{-6} y $2 \times 10^{-4} \text{ m}^2$.

Por otro lado, en una configuración de transmisión, donde la superficie del emisor es menor que la superficie del receptor, el área del haz A es igual al área del emisor A_p . Luego, el receptor solo es insonificado por el haz en una porción de su superficie. La porción remanente, como no interactúa acústicamente con el sistema, se la considera como una capacidad en paralelo, la cual se denomina como C_2 en la Fig. A.2. Se realizó una simulación para un sistema en transmisión con un emisor de PVDF con radio fijo en 3 mm, pero para un receptor de PVDF con superficie variable. Los resultados se muestran en la Fig. A.6, donde se observa que para esta configuración, la transferencia del sistema decrece de manera monótona con la superficie del receptor. Por lo tanto, mientras que el PVDF tiene varias ventajas sobre los transductores cerámicos en técnicas ultrasónicas de inmersión, la superficie del transductor debe ser tomada en cuenta para limitar la penalidad de sensibilidad.

Finalmente, se construyó un transductor receptor con una superficie de $1 \times 10^{-3} \text{ m}^2$. Al compararlo con el transductor desarrollado en [41], con una superficie de $5 \times 10^{-3} \text{ m}^2$, la restricción elegida aquí tiene una ventaja en ganancia de aproximadamente 5 veces o

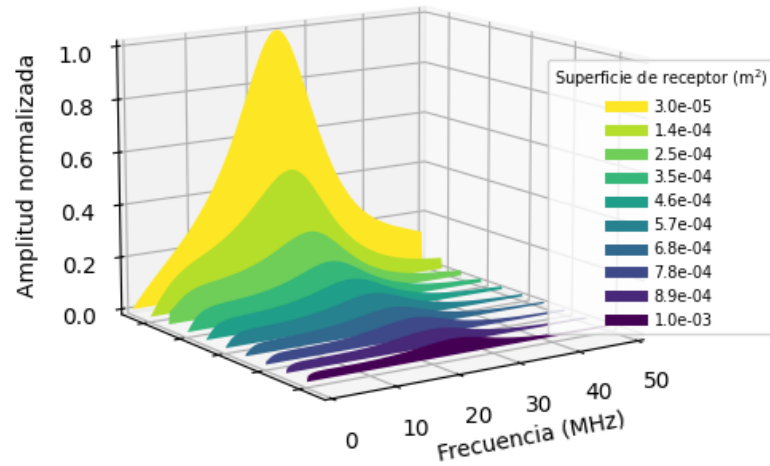


Figura A.6: Respuesta en configuración de transmisión para receptores de PVDF con superficies entre $3\text{e-}5$ y $1\text{e-}3 \text{ m}^2$.

14 dB. Esto se muestra en la Fig. A.7, donde la simulación se realiza para superficies de recepción, variando entre $1\text{e-}3$ y $5\text{e-}3 \text{ m}^2$.

A.0.1. Netlist para LTspice

```
V5 N009 0 PULSE(200 0 0 5e-9 0e-9 100e-6)
Rp N010 0 500
Cp N010 N009 1n
T$Backing_1 0 0 N001 0 Td=Tde Z0=Ze
T$Water N004 0 N005 0 Td=Tdw Z0=Zw
T$Electrode_4 N008 0 N007 0 Td=Tds Z0=Zs
C2 N011 0 0
T$Electrode_1 N001 0 N002 0 Td=Tds Z0=Zs
T$Electrode_2 N003 0 N004 0 Td=Tds Z0=Zs
T$Electrode_3 N005 0 N006 0 Td=Tds Z0=Zs
T$Backing_2 N008 0 0 0 Td=Tde Z0=Ze
XEmitter N010 N002 N003 transducer params:
+Transducer h=h C0=C0 hC0=hC0 Tdp=Tdp Zp=Zp
XReceiver N011 N007 N006 transducer params:
+Transducer h=h C0=C0 hC0=hC0 Tdp=Tdp Zp=Zp
```

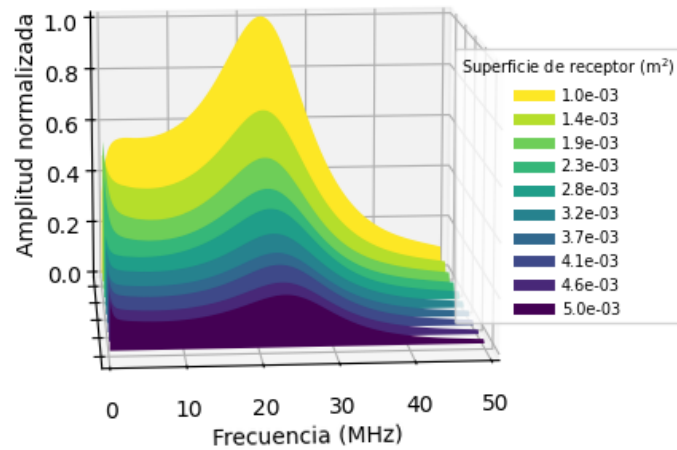


Figura A.7: Respuesta en configuración de transmisión para receptores de PVDF con superficies entre $1\text{e-}3$ y $5\text{e-}3\text{ m}^2$.

```
RL N011 0 50
```

```
* block symbol definitions
```

```
.subckt transducer E B F
```

```
C0 N004 0 {C0}
```

```
C1 N003 0 1
```

```
R1 N003 0 1k
```

```
F1 0 N004 V1 {hC0}
```

```
E1 N002 0 N003 0 1
```

```
F2 0 N003 V2 {h}
```

```
V1 N002 N001 0
```

```
V2 N004 E 0
```

```
T$piezo B N001 F N001 Td={Td} Z0={Zp}
```

```
.ends transducer
```

```
.tran 0 30e-6 25e-6
```

```
.param h=-1.6e9 C0=3.47e-10 hC0=-0.57 Zp=391 Ze=242
```

```
+Zw=149 Zs=414 Tdp=1.27e-8 Tde=2.27e-5 Tdw=2.7e-5 Tds=8.88e-9
```

```
.backanno
```

```
.end
```

SIMULACIÓN DE DISTINTOS RECEPTORES

Se realizó la simulación del MHF para receptores con formas circular pequeña, rectangular, y optimizadas, y su comparación con respecto al MPF se incluyen en las Figs. [B.1](#), [B.2](#) y [B.3](#), Para las muestras de acero, CFRP y silicio, respectivamente. Mientras que el error es diferente para cada forma, la respuesta para la forma rectangular, la forma optimizada y el MPF son casi indistinguibles a simple vista.

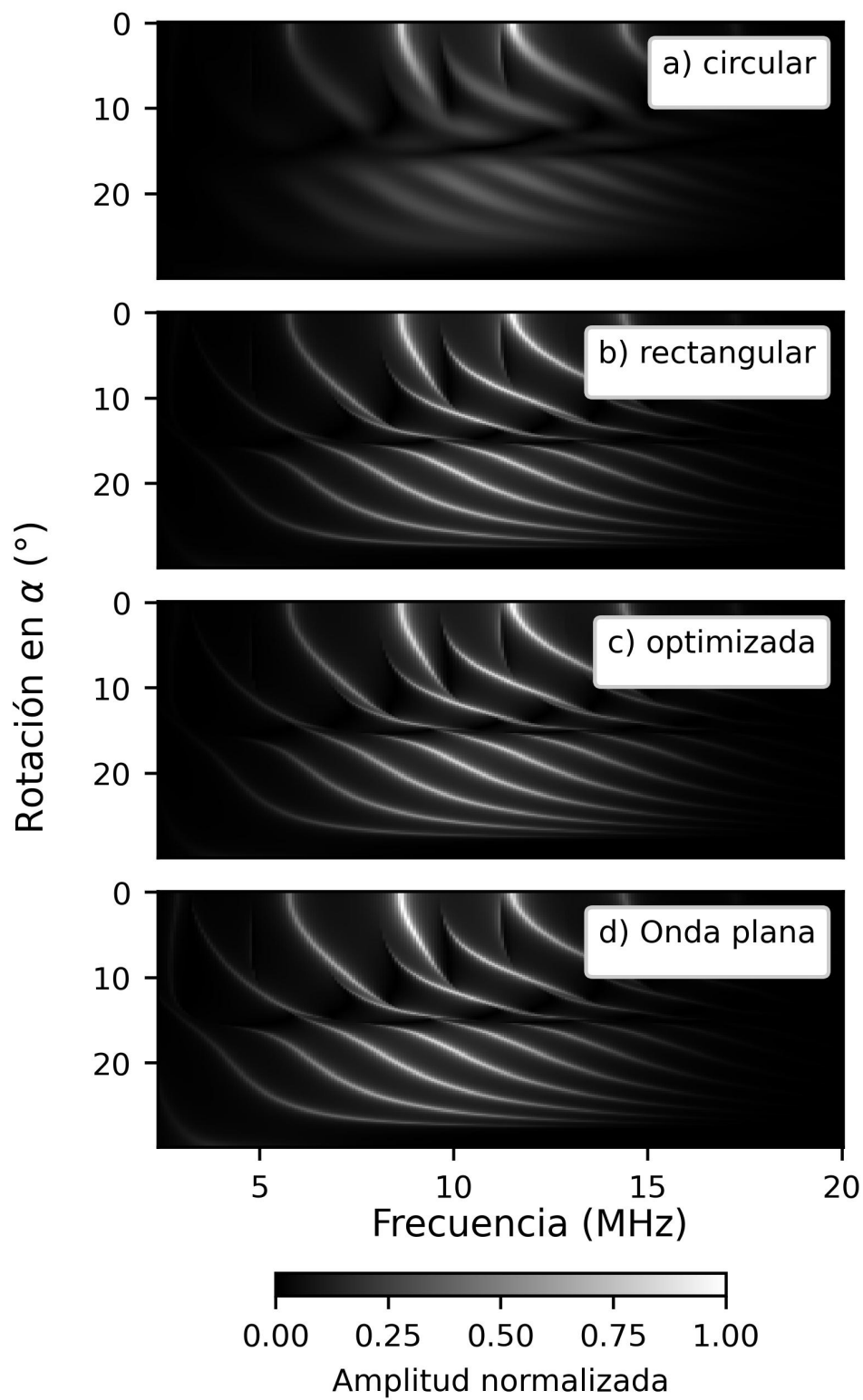


Figura B.1: Simulación del MHF en acero para las distintas formas de receptor comparadas con el MPF.

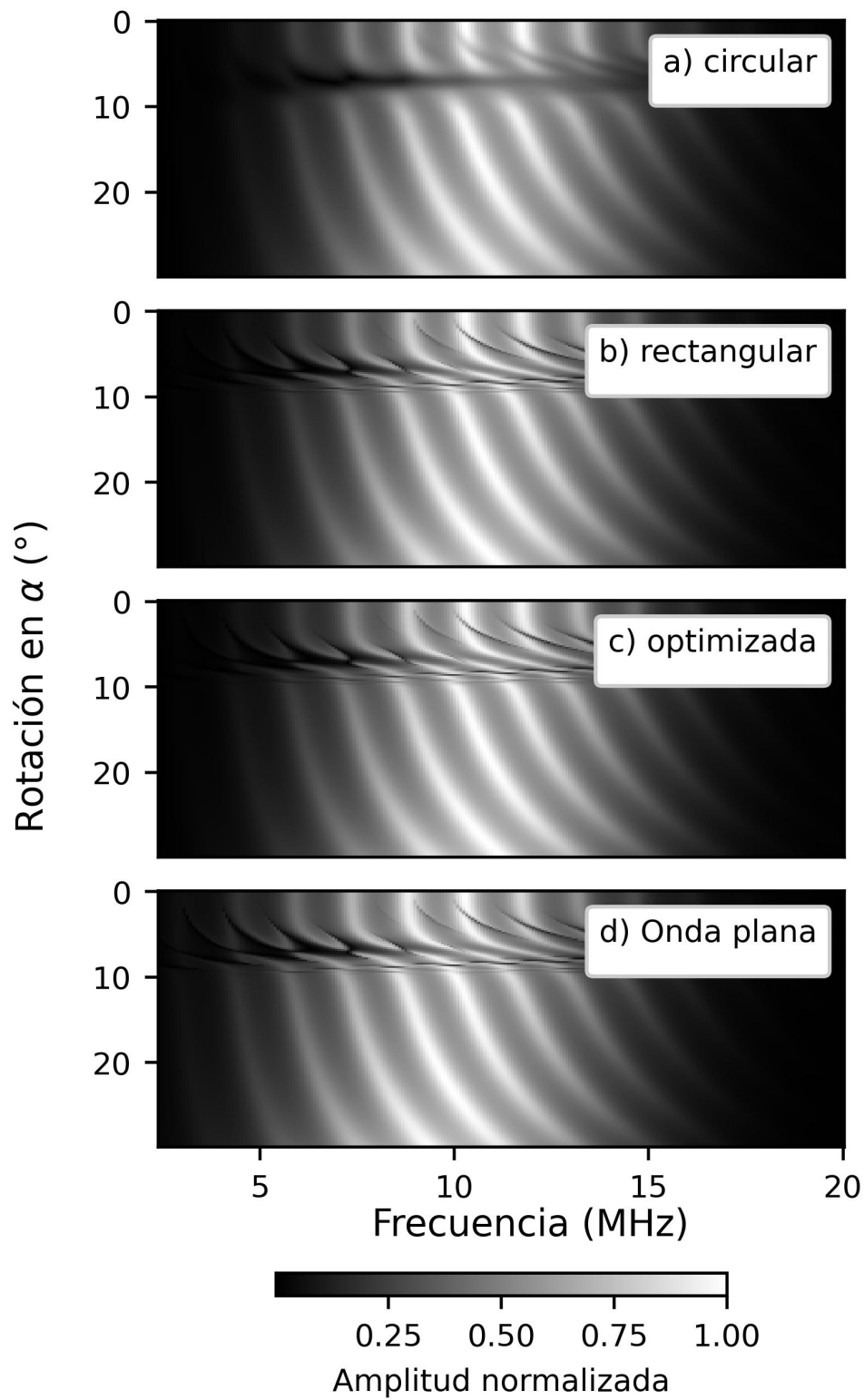


Figura B.2: Simulación del MHF en CFRP para las distintas formas de receptor comparadas con el MPF.

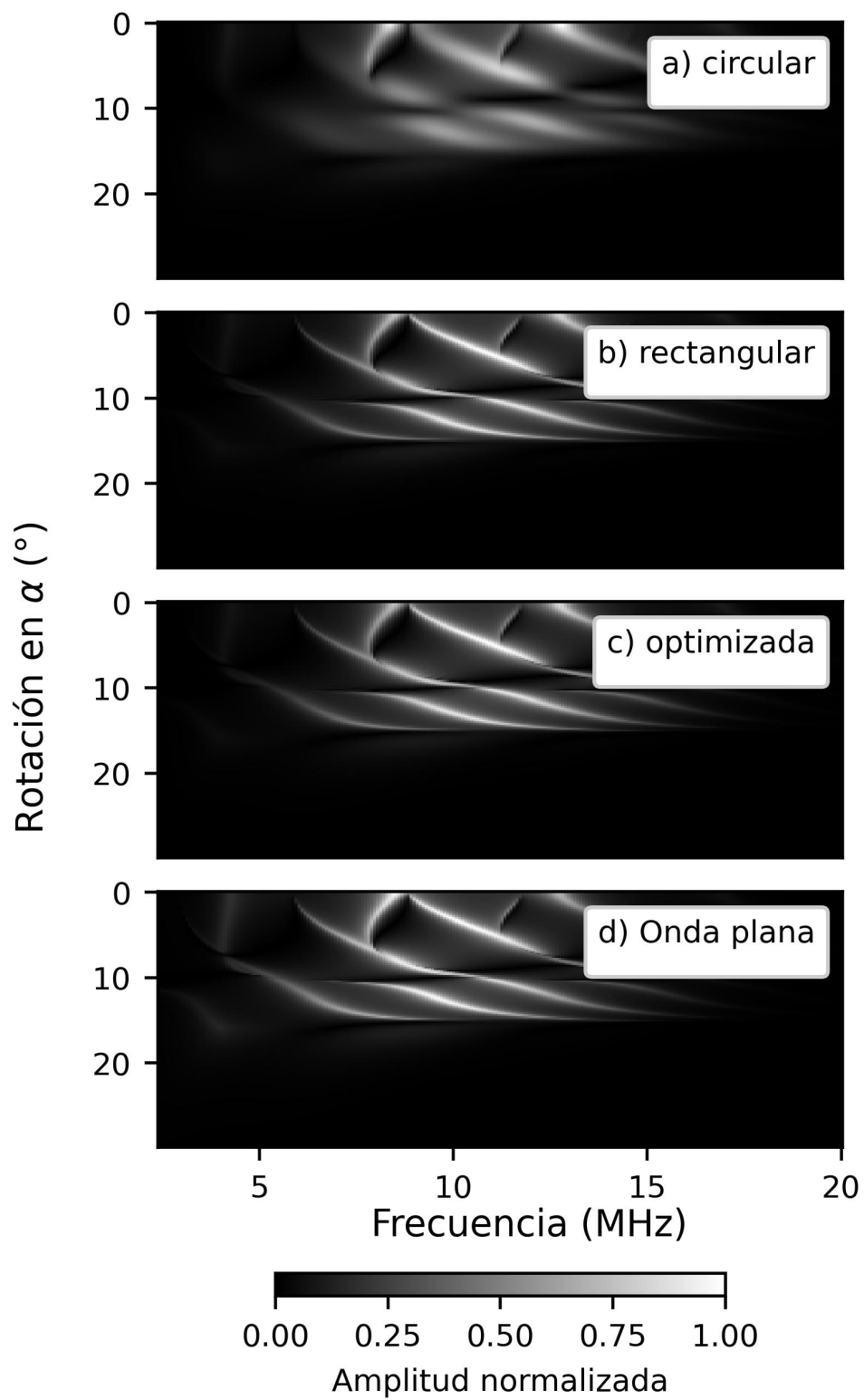


Figura B.3: Simulación del MHF en silicio para las distintas formas de receptor comparadas con el MPF.

FUNCIONES DE WIGNER-D

La expansión de la ODF en series de Fourier tradicional se realiza a partir de bases de Wigner-D, $T_{mn}^l(Q)$, como

$$f(Q) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_{mn}^l T_{mn}^l(Q). \quad (C.1)$$

La normalización utilizada para estas bases en esta tesis, que es coincidente con el trabajo de Lobos [84] y con MTEX hasta la versión 5.8 es

$$T_{mn}^l(Q(\alpha, \beta, \gamma)) = \exp(-in\gamma) t_{mn}^l(\cos(\beta)) \exp(-im\alpha), \quad (C.2)$$

de forma que la norma euclidiana de las bases es $L_2 = \sqrt{2l+1}$. Aquí, α , β y γ son los ángulos de rotación en la convención de Matthies (ZYZ') [153]. A partir de la versión 5.9 de MTEX, y en la función “calcError” de todas las versiones, las bases tienen norma $L_2 = 1$, de forma que

$$T_{mn}^l(Q(\alpha, \beta, \gamma)) = \sqrt{2l+1} \exp(-in\gamma) t_{mn}^l(\cos(\beta)) \exp(-im\alpha), \quad (C.3)$$

donde,

$$t_{mn}^l(x) = (-1)^{l-m+\min\{0,n\}+\min\{0,m\}} \frac{1}{2^l} \left(\frac{(l+m)!}{(l+n)!(l-n)!(l-m)!} \right)^{1/2} (1-x)^{\frac{n-m}{2}} (1-x)^{-\frac{n+m}{2}} \frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}} ((1-x)^{l-n} (1+x)^{l+n}). \quad (C.4)$$

Más detalles de las funciones Wigner-D se dan en [84, 154].

TRANSFORMACIÓN DE COEFICIENTES

Dado que los coeficientes C_{mn}^l son ampliamente utilizados para la descripción de la textura cristalográfica, es importante contar con relaciones que permitan traducir los unos a los otros. Los coeficientes C_{mn}^l se definen a partir de los coeficientes tensoriales $\mathbb{V}'_{\langle l \rangle \beta}$ como

$$C_{mn}^l = (1 + 2l) \langle f, T_{mn}^{*l} \rangle = (1 + 2l) \sum_{\beta=1}^{\eta'_l} \mathbb{V}'_{\langle l \rangle \beta} \cdot \langle \mathbb{F}'_{\langle l \rangle \beta}, T_{mn}^{*l} \rangle, \quad (\text{D.1})$$

y de forma inversa

$$\mathbb{V}'_{\langle \alpha \rangle \beta} = \langle f, \mathbb{F}'_{\langle \alpha \rangle \beta} \rangle = \sum_{m,n=-\alpha}^{\alpha} C_{mn}^{\alpha} \langle T_{mn}^{\alpha}, \mathbb{F}'_{\langle \alpha \rangle \beta} \rangle. \quad (\text{D.2})$$

INTERVALOS DE CONFIANZA

Dada la función objetivo a minimizar durante las inversiones de resultados,

$$F(\mathbf{c}^{opt}) = \sum_{n=1}^{N_p} f(\mathbf{c}^{opt}, n) = \sum_{n=1}^{N_p} (s_n^{exp} - s_n^{sim}(\mathbf{c}^{opt}))^2, \quad (\text{E.1})$$

donde N_p es el número de puntos de medición, s^{exp} es la señal experimental y s^{sim} es la señal simulada para optimizar el vector de constantes $\mathbf{c}^{opt}$ de longitud N_c . Este último puede considerarse como la suma de un vector de constantes verdaderas $\mathbf{c}$ y un vector de errores de optimización $\mathbf{r}$, como $(\mathbf{c}^{opt} = \mathbf{c} + \mathbf{r})$. Es decir que para $\mathbf{c}$, el error es nulo

$$f(\mathbf{c}, n) = 0. \quad (\text{E.2})$$

El error en la optimización se puede linealizar a primer orden como

$$e_n = f(\mathbf{c}^{opt}, n) = f(\mathbf{c}, n) + \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \right)_n \cdot \mathbf{r}, \quad (\text{E.3})$$

y, considerando $\mathbf{e}$ como el vector de errores e_n , entonces $\mathbf{r}$ se puede aproximar como

$$\mathbf{r} = \left(\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \right)^T \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \right) \right)^{-1} \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \right)^T \cdot \mathbf{e}. \quad (\text{E.4})$$

A partir de esto, asumiendo que las variables aleatorias e_n siguen una distribución normal de media nula y de igual varianza, se puede estimar la matriz de covarianza de las constantes optimizadas [155] como

$$\mathbf{\Omega} = \frac{\mathbf{e}^T \cdot \mathbf{e}}{N_p - N_c} \left(\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \right)^T \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \right) \right)^{-1}. \quad (\text{E.5})$$

donde los cocientes $(C_i^{opt} - C_i)/\sqrt{\Omega_{ii}}$ son variables aleatorias que se considera que siguen una distribución t de Student [156]. A partir de esta, se define la cantidad t para la cual la probabilidad de que la variable optimizada C_i se encuentre acotada por el intervalo de confianza sea de $1 - \alpha$ como

$$c_i^{opt} - I(c_i) \leq c_i \leq c_i^{opt} + I(c_i) \quad \text{donde} \quad I(c_i) = t\sqrt{\Omega_{ii}}. \quad (\text{E.6})$$

Este intervalo de confianza, aunque no toma en cuenta la influencia de errores sistemáticos en el experimento, constituyen una buena estimación de la calidad del ajuste. La matriz de covarianza sirve para analizar cuán rápido empeora el error al modificar las variables optimizadas; a menor variación, más confiable es el resultado. La inclusión de errores sistemáticos no se puede realizar de forma sencilla en las ecuaciones, ya que, debido a la complejidad del modelo, la propagación de los mismos resulta impracticable [156]. Los errores sistemáticos incluyen incertidumbre en la posición durante los barridos, “jitter” temporal en la digitalización de las muestras, errores de paralelismo en las muestras gruesas y curvaturas en las muestras delgadas, entre otros.

INCERTIDUMBRE EN MATERIALES CON MACRO-SIMETRÍA HEXAGONAL

Como se mencionó en el capítulo 6, la ecuación de Christoffel es inyectiva, es decir, que si se conoce las velocidades y polarizaciones de onda para un número suficiente de direcciones, es posible invertir el tensor de constantes elásticas de manera inequívoca. Sin embargo, en experimentos de incidencia oblicua en inmersión, como la goniometría ultrasónica, cuando el plano de incidencia coincide con un plano de simetría del material, no se pueden propagar modos con polarización horizontal (SH). En general, existen otros planos que no son de simetría y sirven para suplir esta falta de información. Sin embargo, existe un caso en particular, el del material con macro-simetría hexagonal con el eje de simetría alineado con la dirección normal a la placa (x_3), para el cual todos los planos de incidencia son planos de simetría. En estos casos se pueden determinar las constantes C_{11} , C_{13} , C_{33} y C_{44} , pero no la constante C_{12} .

Por otro lado, al incluir el modelo de homogeneización en el ajuste, como se mostró en el capítulo 7, introduce restricciones que limitan el espacio de búsqueda y, en principio, eliminan la incertidumbre para esta macro-simetría.

Retomando la Ec. 7.2, si el material posee micro-simetría hexagonal, el promedio en orientaciones se calcula a partir de la descomposición armónica y los coeficientes tensoriales de textura como

$$\mathbb{C}^{\text{Voigt}} = \langle f, \mathbb{C}^{\text{hex}} \rangle = \text{hd}(\tilde{h}_{11}, \tilde{h}_{12}, \tilde{h}_{211} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}, \tilde{h}_{221} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}, \tilde{h}_{411} \mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}). \quad (\text{F.1})$$

Si además, el material cuenta con macro-simetría hexagonal, entonces los coeficientes de textura $\mathbb{V}_{\langle 2 \rangle 1}$ y $\mathbb{V}_{\langle 4 \rangle 1}$ solo poseen un elemento independiente cada uno: V_{11} y V_{1111} respectivamente. En estos casos, las constantes elásticas macroscópicas ($\mathbb{C}^{\text{Voigt}}$) se pueden expresar como combinación lineal de las constantes elásticas microscópicas ($\tilde{\mathbb{C}}$) y los elementos independientes de textura. Se observa que todas las constantes describen una ecuación de un plano de la forma

$$C_n^{\text{Voigt}} = a_n V_{11} + b_n V_{1111} + c_n, \quad (\text{F.2})$$

donde a , b y c son combinación lineal de las constantes microscópicas $\tilde{C}$, y n recorre las 5 constantes macroscópicas independientes con $n = 5$ correspondiente a C_{12}^{Voigt} . Esta expresión permite realizar el sistema de ecuaciones relacionando dos constantes (n y $n + 1$) como

$$\begin{bmatrix} a_n & b_n \\ a_{n+1} & b_{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_{11} \\ V_{1111} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_n \\ c_{n+1} \end{bmatrix}. \quad (\text{F.3})$$

A partir de esto se desprende que si el sistema de ecuaciones es compatible determinado, entonces dos constantes elásticas macroscópicas alcanzan para determinar V_{11} y V_{1111} , y dado que las relaciones son inyectivas, se determinan todas las constantes elásticas macroscópicas incluyendo C_{12}^{Voigt} . Las cuatro constantes determinables $n = [1 - 4]$ permiten la conformación de 6 sistemas de ecuaciones. La compatibilidad se establece con el determinante de la matriz de la izquierda en el sistema de ecuaciones. Si el determinante es nulo, entonces el sistema no es compatible determinado. La combinación de los 6 determinantes muestra que existen dos casos en los que todos los sistemas no son compatibles determinados simultáneamente, cuando se cumplen las siguientes relaciones entre las constantes microscópicas:

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{44} &= \frac{\tilde{C}_{11}}{4} - \frac{\tilde{C}_{13}}{2} + \frac{\tilde{C}_{33}}{4} \\ &\quad \vee \\ \tilde{C}_{33} &= \tilde{C}_{11} + \tilde{C}_{12} - \tilde{C}_{13} \quad \wedge \quad \tilde{C}_{44} = \frac{\tilde{C}_{11}}{2} - \frac{3\tilde{C}_{12}}{3} + \tilde{C}_{13}. \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

Es decir, que si las constantes microscópicas no cumplen con esa relación, solo bastan dos constantes macroscópicas para determinar V_{11} y V_{1111} , y por ende el resultado es independiente de C_{12}^{Voigt} .

Sin embargo, la mayoría de los resultados obtenidos en la tesis se basaron en la homogeneización HS por lo que las propiedades efectivas se optimizaron a partir de la descomposición armónica expresada en la Ec. 7.5 y repetida aquí como

$$\mathbb{C}^{\text{HS}} = \mathbb{C}_0 - \mathbb{P}_0^{-1} + \langle \mathbb{L} \rangle^{-1}, \quad \langle f, \mathbb{L} \rangle = \text{hd}(\tilde{h}_{11}, \tilde{h}_{12}, \tilde{h}_{211} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}, \tilde{h}_{221} \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}, \tilde{h}_{411} \mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle 1}). \quad (\text{F.5})$$

Dado que se utiliza el inverso del promedio en orientaciones ($\langle \mathbb{L} \rangle^{-1}$), las ecuaciones dejan de ser lineales y el análisis anterior no es aplicable. Se utilizó un abordaje empírico para determinar la independencia de los resultados de la constante macroscópica C_{12}^{HS} . Partiendo de un material caracterizado por su tensor de rigidez ($\tilde{C}$), se realizó un proceso de optimización sin incluir los campos ultrasónicos. En este se buscó determinar los coeficientes V_{11} y V_{1111} sin utilizar la constante C_{12}^{HS} . Si la optimización llega al resultado deseado (determinado por los coeficientes de referencia), entonces se asume que no existen dos texturas hexagonales que generen dos materiales con todas las constantes iguales, salvo en C_{12}^{HS} . Si esto se cumple, entonces la incertidumbre mencionada no afecta los resultados. Un esquema de la optimización se muestra en la Fig. F.1. Dado que no se simulan los campos ultrasónicos, el ajuste es rápido y por consiguiente se pudieron realizar 10 millones de combinaciones V_{11} y V_{1111} por material para abarcar una gran cantidad de texturas. No se encontró ninguna ambigüedad para los materiales utilizados en esta tesis.

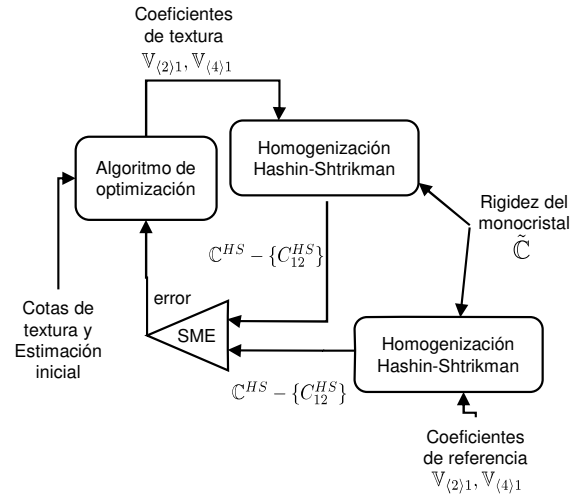


Figura F.1: Proceso para determinar la existencia de ambigüedad en C_{12}^{HS} . Si la optimización no converge al valor de los coeficientes de referencia, entonces la incertidumbre en C_{12}^{HS} podría entorpecer los resultados.

Para materiales con micro-simetría cúbica se puede realizar un análisis similar tanto con las ecuaciones lineales de la Ec. 7.2 como la optimización necesaria para la Ec. 7.5. Dado que en este caso la homogeneización solo depende de un coeficiente de textura (V_{1111}), entonces es más fácil demostrar que la incertidumbre tampoco existe para materiales con micro-simetría cúbica cuando se incluye la homogeneización elástica en la optimización.

CONJUNTO DE COEFICIENTES DE TEXTURA

El conjunto de todos los coeficientes de textura se puede expresar con la notación

$$[[\mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta}]] = (\mathbb{V}'_{\langle 1 \rangle 1}, \dots, \mathbb{V}'_{\langle 2 \rangle 1}, \dots). \quad (\text{G.1})$$

Una primera aproximación para delimitar dicho conjunto se realiza a través de la cota en la norma de Frobenius como

$$\mathcal{N} = \{[[\mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta}]] \mid \|\mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta}\| \leq 1 \ \forall \alpha, \beta\}. \quad (\text{G.2})$$

Sin embargo, existe un conjunto más acotado que surge de la proyección de 5.30

$$\mathcal{V} = \{[[\mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta}]] \mid \mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta} = \langle f, \mathbb{F}'_{\langle\alpha\rangle\beta} \rangle\}, \quad (\text{G.3})$$

pero que no es útil para delimitar los valores que pueden tomar los coeficientes. Sin embargo, este conjunto es formalmente equivalente a la envolvente convexa donde cualquier microestructura existente puede ser representada como una combinación lineal de estados monocristalinos como

$$\hat{\mathcal{V}} = \left\{ [[\mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta}]] \mid \mathbb{V}'_{\langle\alpha\rangle\beta} = \sum_{\gamma=1}^{\infty} \omega_{\gamma} \mathbb{F}'_{\langle\alpha\rangle\beta}(\hat{\mathcal{Q}}_{\gamma}), \ \omega_{\gamma} \geq 0 \ \forall \gamma, \ \sum_{\gamma=1}^{\infty} \omega_{\gamma} = 1 \right\}. \quad (\text{G.4})$$

Esta última definición, si bien requiere una sumatoria infinita, puede ser aproximada a partir del cálculo de un número grande de monocristales orientados al azar, que contenga una gran porción del volumen descrito por $\hat{\mathcal{V}}$. Es decir, que se calculan los coeficientes de, por ejemplo, 10000 monocristales, cada cual orientado al azar. Luego, dada una textura cristalográfica, se analiza si está o no está incluida en el conjunto a través de un problema de programación lineal que permite determinar si dicha textura se puede expresar como una combinación lineal de estados monocristalinos que forman la envolvente convexa. A esta aproximación se la denomina como $\check{\mathcal{V}}$. De esta forma los conjuntos se ordenan de menor a mayor volumen como $\check{\mathcal{V}} \subset \hat{\mathcal{V}} = \mathcal{V} \subset \mathcal{N}$. Dado que analizar si cada textura cristalográfica está incluida en la envolvente convexa es relativamente costoso computacionalmente, en este trabajo se utilizó un método alternativo. Una vez calculados los 10000 estados monocristalinos se buscó el mínimo y el máximo de cada elemento de textura. Estos

Tabla G.1: Cotas de coeficientes de textura calculados a partir de la envolvente convexa.

Elementos independientes de textura	Micro-simetría			
	cúbica		hexagonal	
	min	max	min	max
V_{1111}	-0.2434	0.3651	-0.2049	0.4777
V_{1112}	-0.2557	0.2554	-0.3145	0.3151
V_{1113}	-0.2550	0.2548	-0.3153	0.3151
V_{1122}	-0.1826	0.2738	-0.2390	0.2838
V_{1123}	-0.2278	0.2257	-0.1920	0.1920
V_{1222}	-0.2554	0.2544	-0.3155	0.3150
V_{1223}	-0.2270	0.2271	-0.1918	0.1920
V_{2222}	-0.2434	0.3651	-0.2049	0.4777
V_{2223}	-0.2537	0.2555	-0.3151	0.3154
V_{11}	-	-	-0.8163	0.4082
V_{12}	-	-	-0.6123	0.6122
V_{13}	-	-	-0.6123	0.6123
V_{22}	-	-	-0.8163	0.4082
V_{23}	-	-	-0.6122	0.6122

definen dos cotas que se pueden utilizar en los problemas de optimización, como el mostrado en la sección 7.3.1. Estas cotas se incluyen en la Tabla G.1.

Por otro lado, es posible introducir la operación de simetrización,

$$\text{gs}^{\text{sim}}(\tilde{\mathbb{D}}_{\langle r \rangle}) = \frac{1}{n^{\text{sim}}} \sum_{\alpha=1}^{n^{\text{sim}}} Q_{\alpha} \star \tilde{\mathbb{D}}_{\langle r \rangle}, \quad Q_{\alpha} \in S^{\text{sim}} \forall \alpha, \quad (\text{G.5})$$

a partir de la cual es posible transformar un tensor $\tilde{\mathbb{D}}_{\langle r \rangle}$ en otro nuevo con simetría S^{sim} . Con esta operación es posible imponer macro-simetría a la envolvente convexa de la forma

$$\hat{\mathcal{V}}^{\text{sim}} = \left\{ [[\mathbb{V}'_{\langle \alpha \rangle \beta}]] \mid \mathbb{V}'_{\langle \alpha \rangle \beta} = \sum_{\gamma=1}^{\infty} \omega_{\gamma} \text{gs}^{\text{sim}}(\mathbb{F}'_{\langle \alpha \rangle \beta}(\hat{Q}_{\gamma})), \omega_{\gamma} \geq 0 \forall \gamma, \sum_{\gamma=1}^{\infty} \omega_{\gamma} = 1 \right\}. \quad (\text{G.6})$$

Si bien en este trabajo los resultados no asumen simetrías macroscópicas, y se considera que las muestras son triclinicas, este resultado se utiliza en casos particulares, como en el ejemplo de la sección 5.4.6, o durante el análisis de la indeterminación para la macro-simetría hexagonal del apéndice F. Más detalles sobre los conjuntos de textura se pueden encontrar en [57, 84].

TENSORES DE RIGIDEZ OBTENIDOS DE LA LITERATURA

En esta sección se incluyen los tensores de rigidez obtenidos de la literatura utilizados durante la tesis para realizar simulaciones de experimentos. Todos se dan en notación de Voigt y con unidades en GPa. Acero inoxidable 304, $\rho = 7,81 \text{ g/cm}^3$. [157]

$$\begin{bmatrix} 259,0 & 107,0 & 112,8 & 0 & 0 & 0 \\ & 269,1 & 101,6 & 0 & 0 & 0 \\ & & 261,3 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{sim} & & 70,8 & 0 & 0 \\ & & & & 81,4 & 0 \\ & & & & & 74,5 \end{bmatrix}. \quad (\text{H.1})$$

Fibra de carbono unidireccional, $\rho = 1,6 \text{ g/cm}^3$ [1].

$$\begin{bmatrix} 155,43 & 3,72 & 3,72 & 0 & 0 & 0 \\ & 16,34 & 4,96 & 0 & 0 & 0 \\ & & 16,34 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{sim} & & 3,37 & 0 & 0 \\ & & & & 7,48 & 0 \\ & & & & & 7,48 \end{bmatrix}. \quad (\text{H.2})$$

Monocristal de silicio con la micro y macro simetría cúbica alineada con el sistema de referencia, $\rho = 2,23 \text{ g/cm}^3$ [100].

$$\begin{bmatrix} 165,7 & 64 & 64 & 0 & 0 & 0 \\ & 165,7 & 64 & 0 & 0 & 0 \\ & & 165,7 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{sim} & & 79,6 & 0 & 0 \\ & & & & 79,6 & 0 \\ & & & & & 79,6 \end{bmatrix}. \quad (\text{H.3})$$

Fibra de carbono unidireccional seguida por su compañero anómalo, $\rho = 1,528 \text{ g/cm}^3$ [96].

$$\begin{bmatrix} 122,72 & 6,56 & 6,56 & 0 & 0 & 0 \\ & 13,47 & 6,55 & 0 & 0 & 0 \\ & & 13,47 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{sim} & & 3,40 & 0 & 0 \\ & & & & 5,86 & 0 \\ & & & & & 6,25 \end{bmatrix}. \quad (\text{H.4})$$

$$\begin{bmatrix} 122,72 & -19,07 & 6,56 & 0 & 0 & 0 \\ & 13,47 & -13,35 & 0 & 0 & 0 \\ & & 13,47 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{sim} & & 3,40 & 0 & 0 \\ & & & & 5,86 & 0 \\ & & & & & 6,25 \end{bmatrix}. \quad (\text{H.5})$$

Aluminio policristalino isótropo, $\rho = 2,7$ [96]

$$\begin{bmatrix} 110,5 & 58,50 & 58,50 & 0 & 0 & 0 \\ & 110,5 & 58,50 & 0 & 0 & 0 \\ & & 110,5 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{sim} & & 26,00 & 0 & 0 \\ & & & & 26,00 & 0 \\ & & & & & 26,00 \end{bmatrix}. \quad (\text{H.6})$$

MEDICIÓN DE DESORIENTACIÓN EN SILICIO

En el capítulo 7 las mediciones ultrasónicas de la oblea de silicio con orientación $\langle 111 \rangle$ mostraron que el monocristal se encuentra desorientado con respecto al sistema de referencia de la oblea, es decir, con respecto a la normal, que debiera corresponder con la dirección $\langle 111 \rangle$, y con respecto al corte o “flat” que debiera corresponder con la dirección $\langle 110 \rangle$. Para corroborar la desorientación observada con el método ultrasónico, se realizó una medición por difracción de rayos-X. La medición de textura convencional, con pasos discretos de alrededor 5° , no resulta útil para muestras monocristalinas, ya que al realizar pasos discretos, es muy probable que el cristal no se encuentre en condición de difracción para estos puntos. Por esta razón, se realizó una medición manual con la configuración de haz paralelo como se esquematiza en la Fig. I.1. En esta configuración, si se fija el ángulo 2θ para que difracten los planos de interés, en este caso los (111), se puede barrer el ángulo ω hasta encontrar el máximo de cuentas. La diferencia de ángulos (“offset”), $\omega_{of} = \theta - \omega$, corresponde con la desorientación de la familia de planos con respecto a la dirección x_2 .

Para la muestra **Si $\langle 111 \rangle$ b**, primero se alineó la dirección $\langle 110 \rangle$ con la dirección x_2 , siguiendo la desorientación azimutal obtenida por ultrasonido. Luego se realizaron una serie de barridos en 2θ y en ω en aproximaciones sucesivas buscando maximizar la cantidad de cuentas. Finalmente, se observó que esto ocurrió para un “offset” $\omega_{of} = 3,909^\circ$, es decir, que el cristal se encuentra desorientado por una rotación de esa magnitud en torno a la dirección $\langle 110 \rangle$. Esta rotación, polar, es cercana a la encontrada por ultrasonido de $4,2^\circ$. Por otro lado, dado que la difracción en el monocristal es muy selectiva a la orientación, se deduce que al haber observado difracción, entonces el ángulo azimutal medido por ultrasonido es suficientemente preciso. Idealmente, este procedimiento debiera realizarse con una cuna de Euler, pudiendo barrer ambos ángulos de forma simultánea. En la Fig. I.2, se muestra el difractograma obtenido para el ω_{of} encontrado. La gran cantidad de cuentas corresponde a que la muestra es monocristalina.

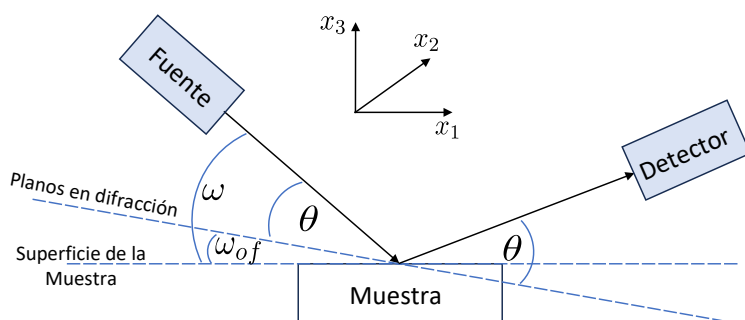


Figura I.1: Configuración experimental para caracterizar la desorientación $\text{Si}\langle 111 \rangle \mathbf{b}$ por difracción de rayos-X.

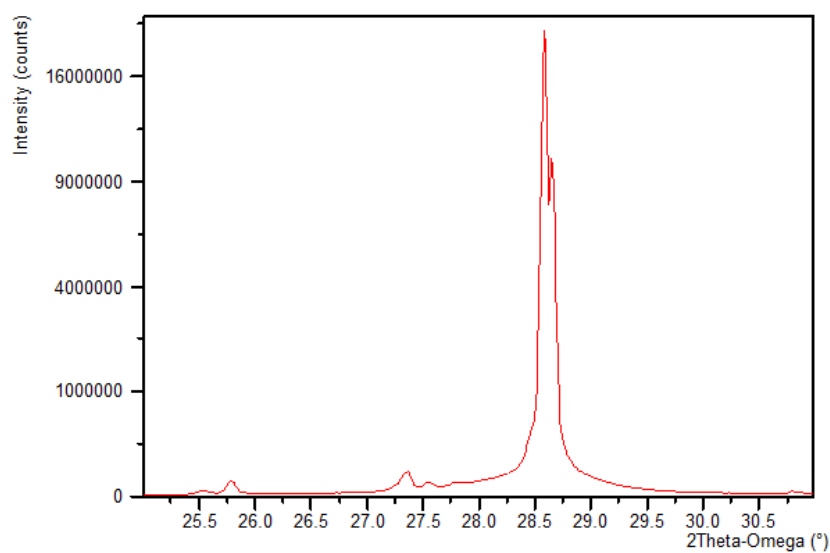


Figura I.2: Difractograma de rayos-X para silicio monocristalino, luego de encontrar de forma manual y en aproximaciones sucesivas el "offset" en ω .

RESULTADOS DE MEDICIÓN DE TEXTURA

Tabla J.1: Coeficientes de textura para la probeta **SS304**

Elementos de textura	ND	US	Confianza	Error
V_{1111}	-4.5×10^{-3}	-6.4×10^{-3}	2.1×10^{-3}	-1.9×10^{-3}
V_{1112}	2.9×10^{-3}	4.7×10^{-3}	2.4×10^{-3}	1.8×10^{-3}
V_{1113}	-2.0×10^{-4}	-9.0×10^{-4}	2.2×10^{-3}	-7.0×10^{-4}
V_{1122}	3.3×10^{-3}	4.9×10^{-3}	2.6×10^{-3}	1.7×10^{-3}
V_{1123}	2.0×10^{-4}	5.0×10^{-4}	2.2×10^{-3}	3.0×10^{-4}
V_{1222}	-3.0×10^{-3}	-5.2×10^{-3}	2.3×10^{-3}	-2.2×10^{-3}
V_{1223}	4.0×10^{-4}	9.0×10^{-4}	2.4×10^{-3}	5.0×10^{-4}
V_{2222}	-5.8×10^{-3}	-9.5×10^{-3}	1.9×10^{-3}	-3.7×10^{-3}
V_{2223}	1.0×10^{-4}	-5.0×10^{-4}	2.7×10^{-3}	-6.0×10^{-4}

Tabla J.2: Coeficientes de textura para la probeta **Si<111>b**

Elementos de textura	XRD	US	Confianza	Error
V_{1111}	-3.3×10^{-2}	-2.8×10^{-2}	3.7×10^{-3}	5.3×10^{-3}
V_{1112}	-1.7×10^{-2}	-1.6×10^{-2}	1.5×10^{-3}	1.5×10^{-3}
V_{1113}	2.3×10^{-1}	2.3×10^{-1}	4.3×10^{-3}	-1.7×10^{-3}
V_{1122}	-5.6×10^{-2}	-6.7×10^{-2}	1.4×10^{-3}	-1.2×10^{-2}
V_{1123}	-7.5×10^{-2}	-7.9×10^{-2}	4.7×10^{-3}	-3.4×10^{-3}
V_{1222}	9.7×10^{-3}	8.7×10^{-3}	1.8×10^{-3}	-9.6×10^{-4}
V_{1223}	-1.9×10^{-1}	-1.8×10^{-1}	2.5×10^{-3}	6.6×10^{-3}
V_{2222}	-9.4×10^{-2}	-8.6×10^{-2}	2.7×10^{-3}	7.6×10^{-3}
V_{2223}	7.1×10^{-2}	6.9×10^{-2}	4.8×10^{-3}	-1.8×10^{-3}

Tabla J.3: Coeficientes de textura para la probeta **Zry-a**

Elementos de textura	XRD	US	Confianza	Error
V_{1111}	7.7×10^{-2}	5.4×10^{-2}	3.7×10^{-3}	-2.3×10^{-2}
V_{1112}	-6.3×10^{-3}	-6.1×10^{-3}	3.8×10^{-3}	2.5×10^{-4}
V_{1113}	2.3×10^{-3}	-3.6×10^{-3}	4.9×10^{-3}	-5.9×10^{-3}
V_{1122}	1.5×10^{-2}	6.6×10^{-3}	3.4×10^{-3}	-8.6×10^{-3}
V_{1123}	1.1×10^{-3}	1.3×10^{-3}	5.2×10^{-3}	2.6×10^{-4}
V_{1222}	-4.7×10^{-3}	-2.8×10^{-4}	3.6×10^{-3}	4.4×10^{-3}
V_{1223}	6.1×10^{-4}	-4.0×10^{-4}	4.9×10^{-3}	-1.0×10^{-3}
V_{2222}	2.5×10^{-2}	2.1×10^{-2}	3.5×10^{-3}	-4.3×10^{-3}
V_{2223}	2.8×10^{-3}	8.7×10^{-4}	5.9×10^{-3}	-1.9×10^{-3}
V_{11}	5.2×10^{-2}	3.7×10^{-1}	6.5×10^{-3}	3.1×10^{-1}
V_{12}	2.2×10^{-4}	-4.7×10^{-2}	6.9×10^{-3}	-4.8×10^{-2}
V_{13}	2.3×10^{-3}	1.3×10^{-2}	6.1×10^{-2}	1.1×10^{-2}
V_{22}	5.4×10^{-2}	1.9×10^{-1}	9.4×10^{-3}	1.3×10^{-1}
V_{23}	4.0×10^{-3}	1.9×10^{-2}	5.0×10^{-2}	1.5×10^{-2}

Tabla J.4: Coeficientes de textura para la probeta **Zry-b**

Elementos de textura	ND	US	Confianza	Error
V_{1111}	-1.7×10^{-2}	-1.0×10^{-3}	2.4×10^{-3}	1.6×10^{-2}
V_{1112}	-1.3×10^{-2}	-6.5×10^{-3}	2.6×10^{-3}	6.0×10^{-3}
V_{1113}	-8.8×10^{-5}	-2.9×10^{-3}	1.6×10^{-3}	-2.8×10^{-3}
V_{1122}	-2.4×10^{-2}	-1.3×10^{-2}	2.4×10^{-3}	1.2×10^{-2}
V_{1123}	1.3×10^{-3}	-2.0×10^{-3}	2.0×10^{-3}	-3.3×10^{-3}
V_{1222}	3.3×10^{-2}	2.0×10^{-2}	2.6×10^{-3}	-1.3×10^{-2}
V_{1223}	-7.4×10^{-4}	2.2×10^{-3}	1.8×10^{-3}	2.9×10^{-3}
V_{2222}	1.2×10^{-1}	8.9×10^{-2}	2.9×10^{-3}	-2.9×10^{-2}
V_{2223}	-8.0×10^{-3}	-4.7×10^{-3}	2.2×10^{-3}	3.3×10^{-3}
V_{11}	2.1×10^{-2}	-2.5×10^{-3}	9.3×10^{-3}	-2.4×10^{-2}
V_{12}	4.8×10^{-2}	5.4×10^{-2}	6.3×10^{-3}	5.7×10^{-3}
V_{13}	2.2×10^{-3}	1.5×10^{-2}	1.5×10^{-2}	1.2×10^{-2}
V_{22}	3.2×10^{-1}	4.1×10^{-1}	5.4×10^{-3}	9.1×10^{-2}
V_{23}	-1.3×10^{-2}	-3.0×10^{-2}	2.1×10^{-2}	-1.8×10^{-2}

Tabla J.5: Coeficientes de textura para la probeta **Zn**

Elementos de textura	XRD	US	Confianza	Error
V_{1111}	-4.1×10^{-2}	-5.8×10^{-2}	3.4×10^{-3}	-1.8×10^{-2}
V_{1112}	2.0×10^{-2}	1.1×10^{-2}	3.0×10^{-3}	-8.8×10^{-3}
V_{1113}	1.8×10^{-3}	-3.7×10^{-3}	5.2×10^{-3}	-5.5×10^{-3}
V_{1122}	1.6×10^{-2}	4.5×10^{-3}	3.2×10^{-3}	-1.2×10^{-2}
V_{1123}	-8.2×10^{-4}	1.9×10^{-4}	4.5×10^{-3}	1.0×10^{-3}
V_{1222}	-2.5×10^{-3}	1.1×10^{-2}	3.1×10^{-3}	1.3×10^{-2}
V_{1223}	-3.1×10^{-4}	-1.9×10^{-4}	4.0×10^{-3}	1.2×10^{-4}
V_{2222}	4.9×10^{-2}	6.4×10^{-2}	3.4×10^{-3}	1.5×10^{-2}
V_{2223}	7.8×10^{-3}	1.5×10^{-4}	4.2×10^{-3}	-7.7×10^{-3}
V_{11}	-1.9×10^{-2}	3.5×10^{-2}	1.1×10^{-3}	5.4×10^{-2}
V_{12}	1.5×10^{-2}	3.9×10^{-2}	1.0×10^{-3}	2.4×10^{-2}
V_{13}	-3.1×10^{-2}	-1.3×10^{-2}	4.9×10^{-3}	1.9×10^{-2}
V_{22}	7.9×10^{-2}	2.5×10^{-1}	1.2×10^{-3}	1.8×10^{-1}
V_{23}	1.4×10^{-2}	4.4×10^{-3}	4.4×10^{-3}	-1.0×10^{-2}

BIBLIOGRAFÍA

- [1] A. H. Nayfeh. *Wave propagation in layered anisotropic media: With application to composites*. Elsevier, 1995 (vid. págs. 6, 13, 25, 28, 148).
- [2] D. Chimenti, S. Rokhlin y P. Nagy. *Physical Ultrasonics of Composites*. New York, NY: Oxford University Press, 2011-03 (vid. págs. 6, 15).
- [3] R. W. Ogden. *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover Civil and Mechanical Engineering. Mineola, NY: Dover Publications, 1997-07 (vid. pág. 8).
- [4] P. Vannucci. *Anisotropic Elasticity*. 1.^a ed. Lecture notes in applied and computational mechanics. Singapore, Singapore: Springer, 2017-07 (vid. pág. 8).
- [5] R. F. S. Hearmon. «Third-order' elastic coefficients». En: *Acta Crystallographica* 6.4 (1953-04), págs. 331-340. ISSN: 0365-110X. DOI: 10.1107/s0365110x53000909. URL: <http://dx.doi.org/10.1107/S0365110X53000909> (vid. págs. 8, 124).
- [6] F. Bachmann, R. Hielscher y H. Schaeben. «Texture Analysis with MTEX – Free and Open Source Software Toolbox». En: *Solid State Phenomena* 160 (2010-02), págs. 63-68. ISSN: 1662-9779. DOI: 10.4028/www.scientific.net/ssp.160.63. URL: <http://dx.doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.160.63> (vid. págs. 13, 70, 97, 102, 116).
- [7] M. Deschamps y B. Hosten. «The effects of viscoelasticity on the reflection and transmission of ultrasonic waves by an orthotropic plate». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 91.4 (1992-04), págs. 2007-2015. ISSN: 1520-8524. DOI: 10.1121/1.403685. URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.403685> (vid. pág. 16).
- [8] N. Leymarie et al. «Identification of complex stiffness tensor from waveform reconstruction». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 111.3 (2002-03), págs. 1232-1244. DOI: 10.1121/1.1451072. URL: <https://doi.org/10.1121/1.1451072> (vid. págs. 16, 40, 84, 89).

- [9] B. Hosten y M. Castaings. «Comments on the ultrasonic estimation of the viscoelastic properties of anisotropic materials». En: *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 39.6 (2008-06), págs. 1054-1058. ISSN: 1359-835X. DOI: [10.1016/j.compositesa.2008.02.013](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2008.02.013). URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compositesa.2008.02.013> (vid. págs. 17, 89).
- [10] E. P. Papadakis. «Ultrasonic Phase Velocity by the Pulse-Echo-Overlap Method Incorporating Diffraction Phase Corrections». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 42.5 (1967-11), págs. 1045-1051. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.1910688](https://doi.org/10.1121/1.1910688). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.1910688> (vid. pág. 17).
- [11] R. Truell, C. Elbaum y B. Chick. *Ultrasonic Methods in Solid State Physics*. Academic Press, 1969. ISBN: 9780127014500. URL: <https://books.google.com.ar/books?id=CeoyAAAAMAAJ> (vid. págs. 17, 18).
- [12] R. D. Kriz y W. W. Stinchcomb. «Elastic moduli of transversely isotropic graphite fibers and their composites: Equations used to calculate the complete set of elastic transversely isotropic properties for unidirectional fiber-reinforced materials having transversely isotropic fibers are experimentally verified by using improved ultrasonic techniques». En: *Experimental Mechanics* 19.2 (1979-02), págs. 41-49. ISSN: 1741-2765. DOI: [10.1007/bf02324524](https://doi.org/10.1007/bf02324524). URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BF02324524> (vid. págs. 17, 18).
- [13] S. I. Rokhlin y W. Wang. «Ultrasonic Evaluation of in-Plane and out-of-Plane Elastic Properties of Composite Materials». En: *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*. Springer US, 1989, págs. 1489-1496. ISBN: 9781461308171. DOI: [10.1007/978-1-4613-0817-1_187](https://doi.org/10.1007/978-1-4613-0817-1_187). URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4613-0817-1_187 (vid. pág. 17).
- [14] M. Markham. «Measurement of the elastic constants of fibre composites by ultrasonics». En: *Composites* 1.3 (1970-03), págs. 145-149. ISSN: 0010-4361. DOI: [10.1016/0010-4361\(70\)90477-5](https://doi.org/10.1016/0010-4361(70)90477-5). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0010-4361\(70\)90477-5](http://dx.doi.org/10.1016/0010-4361(70)90477-5) (vid. págs. 17, 23).
- [15] D. E. Chimenti y A. H. Nayfeh. «Leaky Lamb waves in fibrous composite laminates». En: *Journal of Applied Physics* 58.12 (1985-12), págs. 4531-4538. ISSN: 1089-7550. DOI: [10.1063/1.336268](https://doi.org/10.1063/1.336268). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.336268> (vid. pág. 18).
- [16] S. I. Rokhlin y W. Wang. «Double through-transmission bulk wave method for ultrasonic phase velocity measurement and determination of elastic constants of composite materials». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 91.6 (1992-06), págs. 3303-3312. DOI: [10.1121/1.402847](https://doi.org/10.1121/1.402847). URL: <https://doi.org/10.1121/1.402847> (vid. págs. 18, 23).

- [17] A. Safaeinili, O. Lobkis y D. Chimenti. «Quantitative materials characterization using air-coupled leaky Lamb waves». En: *Ultrasonics* 34.2-5 (1996-06), págs. 393-396. ISSN: 0041-624X. DOI: [10.1016/0041-624x\(96\)00056-x](https://doi.org/10.1016/0041-624x(96)00056-x). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0041-624x\(96\)00056-x](http://dx.doi.org/10.1016/0041-624x(96)00056-x) (vid. págs. 18, 84, 128).
- [18] *Comb filter* - Wikipedia — [en.wikipedia.org](https://en.wikipedia.org/wiki/Comb_filter). https://en.wikipedia.org/wiki/Comb_filter. [Accessed 28-03-2024] (vid. pág. 19).
- [19] B. Hosten, M. Deschamps y B. R. Tittmann. «Inhomogeneous wave generation and propagation in lossy anisotropic solids. Application to the characterization of viscoelastic composite materials». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 82.5 (1987-11), págs. 1763-1770. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.395170](https://doi.org/10.1121/1.395170). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.395170> (vid. pág. 23).
- [20] Y. C. Chu y S. I. Rokhlin. «A method for determination of elastic constants of a unidirectional lamina from ultrasonic bulk velocity measurements on [0/90] cross-ply composites». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 96.1 (1994-07), págs. 342-352. DOI: [10.1121/1.410484](https://doi.org/10.1121/1.410484). URL: <https://doi.org/10.1121/1.410484> (vid. pág. 23).
- [21] C. Aristégui y S. Baste. «Optimal recovery of the elasticity tensor of general anisotropic materials from ultrasonic velocity data». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 101.2 (1997-02), págs. 813-833. DOI: [10.1121/1.418040](https://doi.org/10.1121/1.418040). URL: <https://doi.org/10.1121/1.418040> (vid. págs. 23, 85, 92, 93).
- [22] L. Wang, A. I. Lavrentyev y S. I. Rokhlin. «Beam and phase effects in angle-beam-through-transmission method of ultrasonic velocity measurement». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 113.3 (2003-02), págs. 1551-1559. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.1548151](https://doi.org/10.1121/1.1548151). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.1548151> (vid. págs. 23, 26).
- [23] B. Courouble y J. Moufle. «Evaluation of ultrasonic techniques by visualization of ultrasound in water and in transparent solids». En: *Ultrasonics International; Butterworth Heinemann: Oxford, UK* 91 (1991), págs. 135-138 (vid. págs. 25, 26).
- [24] B. Pavlakovic et al. «Disperse: A General Purpose Program for Creating Dispersion Curves». En: *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*. Springer US, 1997, págs. 185-192. ISBN: 9781461559474. DOI: [10.1007/978-1-4615-5947-4_24](https://doi.org/10.1007/978-1-4615-5947-4_24). URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4615-5947-4_24 (vid. pág. 26).
- [25] K. Helbig y J. M. Carcione. «Anomalous polarization in anisotropic media». En: *European Journal of Mechanics - A/Solids* 28.4 (2009-07), págs. 704-711. ISSN: 0997-7538. DOI: [10.1016/j.euromechsol.2009.02.010](https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2009.02.010). URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.euromechsol.2009.02.010> (vid. pág. 27).

- [26] R. Okuta et al. «CuPy: A NumPy-Compatible Library for NVIDIA GPU Calculations». En: *Proceedings of Workshop on Machine Learning Systems (LearningSys) in The Thirty-first Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS)*. 2017. URL: http://learningsys.org/nips17/assets/papers/paper_16.pdf (vid. pág. 39).
- [27] C. R. Harris et al. «Array programming with NumPy». En: *Nature* 585 (2020), págs. 357-362. DOI: [10.1038/s41586-020-2649-2](https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2) (vid. pág. 39).
- [28] M. Castaings, B. Hosten y T. Kundu. «Inversion of ultrasonic, plane-wave transmission data in composite plates to infer viscoelastic material properties». En: *NDT and E International* 33.6 (2000-09), págs. 377-392. DOI: [10.1016/S0963-8695\(00\)00004-9](https://doi.org/10.1016/S0963-8695(00)00004-9). URL: [https://doi.org/10.1016/S0963-8695\(00\)00004-9](https://doi.org/10.1016/S0963-8695(00)00004-9) (vid. págs. 40, 42, 59, 84, 89).
- [29] P. Puthillath, C. Krishnamurthy y K. Balasubramaniam. «Hybrid inversion of elastic moduli of composite plates from ultrasonic transmission spectra using PVDF plane wave sensor». En: *Composites Part B: Engineering* 41.1 (2010-01), págs. 8-16. DOI: [10.1016/j.compositesb.2009.09.005](https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2009.09.005). URL: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2009.09.005> (vid. págs. 40, 42, 84).
- [30] N. Alaoui-Ismaïli, P. Guy y B. Chassignole. «Experimental determination of the complex stiffness tensor and Euler angles in anisotropic media using ultrasonic waves». En: *AIP Conference Proceedings*. AIP Publishing LLC, 2014. DOI: [10.1063/1.4864921](https://doi.org/10.1063/1.4864921). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4864921> (vid. págs. 40, 84).
- [31] A. Martens et al. «Characterization of the orthotropic viscoelastic tensor of composites using the Ultrasonic Polar Scan». En: *Composite Structures* 230 (2019-12), pág. 111499. DOI: [10.1016/j.compstruct.2019.111499](https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2019.111499). URL: <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2019.111499> (vid. págs. 40, 85).
- [32] B. L. van der Waerden. *Algebra: I*. 8.^a ed. Heidelberger Taschenbücher. Berlin, Germany: Springer, 1966-01 (vid. pág. 40).
- [33] R. A. Horn y C. R. Johnson. *Matrix Analysis*. Cambridge, England: Cambridge University Press, 1985-12 (vid. pág. 40).
- [34] T. M. Apostol. *Calculus - Tomo 2 / 2b*. Reverte Ediciones, 1996-05 (vid. pág. 40).
- [35] LAPACK: *gesv: factor and solve* — [netlib.org. https://www.netlib.org/lapack/explore-html/d8/da6/group_{_}{_}gesv.html#details](https://www.netlib.org/lapack/explore-html/d8/da6/group_{_}{_}gesv.html#details). [Accessed 15-04-2024] (vid. pág. 40).
- [36] P. Virtanen et al. «SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python». En: *Nature Methods* 17 (2020), págs. 261-272. DOI: [10.1038/s41592-019-0686-2](https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2) (vid. pág. 40).

- [37] B. Hosten y M. Castaings. «Transfer matrix of multilayered absorbing and anisotropic media. Measurements and simulations of ultrasonic wave propagation through composite materials». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 94.3 (1993-09), págs. 1488-1495. DOI: 10.1121/1.408152. URL: <https://doi.org/10.1121/1.408152> (vid. pág. 42).
- [38] J. Jocker y D. Smeulders. «Minimization of finite beam effects in the determination of reflection and transmission coefficients of an elastic layer». En: *Ultrasonics* 46.1 (2007-03), págs. 42-50. DOI: 10.1016/j.ultras.2006.10.001. URL: <https://doi.org/10.1016/j.ultras.2006.10.001> (vid. págs. 42, 53).
- [39] Y. Bouzidi y D. R. Schmitt. «A large ultrasonic bounded acoustic pulse transducer for acoustic transmission goniometry: Modeling and calibration». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 119.1 (2006-01), págs. 54-64. DOI: 10.1121/1.2133683. URL: <https://doi.org/10.1121/1.2133683> (vid. págs. 42, 84).
- [40] P. Cawley y B. Hosten. «The use of large ultrasonic transducers to improve transmission coefficient measurements on viscoelastic anisotropic plates». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 101.3 (1997-03), págs. 1373-1379. DOI: 10.1121/1.418103. URL: <https://doi.org/10.1121/1.418103> (vid. págs. 42, 59).
- [41] J. Adamowski, F. Buiochi y R. Higuti. «Ultrasonic material characterization using large-aperture PVDF receivers». En: *Ultrasonics* 50.2 (2010-02), págs. 110-115. ISSN: 0041-624X. DOI: 10.1016/j.ultras.2009.09.018. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ultras.2009.09.018> (vid. págs. 42, 47, 59, 84, 132).
- [42] L. Brown. «Design considerations for piezoelectric polymer ultrasound transducers». En: *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control* 47.6 (2000-11), págs. 1377-1396. DOI: 10.1109/58.883527. URL: <https://doi.org/10.1109/58.883527> (vid. págs. 43, 131).
- [43] R. Swartz y J. Plummer. «On the Generation of High-Frequency Acoustic Energy with Polyvinylidene Fluoride». En: *IEEE Transactions on Sonics and Ultrasonics* 27.6 (1980-11), págs. 295-302. DOI: 10.1109/t-su.1980.31193. URL: <https://doi.org/10.1109/t-su.1980.31193> (vid. págs. 43, 131).
- [44] M. Sherar. «The design and fabrication of high frequency poly(vinylidene fluoride) transducers». En: *Ultrasonic Imaging* 11.2 (1989-04), págs. 75-94. DOI: 10.1016/0161-7346(89)90001-1. URL: [https://doi.org/10.1016/0161-7346\(89\)90001-1](https://doi.org/10.1016/0161-7346(89)90001-1) (vid. págs. 43, 131).
- [45] L. W. Schmerr y S.-J. Song. *Ultrasonic Nondestructive Evaluation Systems*. Springer US, 2007. DOI: 10.1007/978-0-387-49063-2. URL: <https://doi.org/10.1007/978-0-387-49063-2> (vid. págs. 44, 45, 48).

- [46] M. Aanes et al. «Beam diffraction effects in sound transmission of a fluid-embedded viscoelastic plate at normal incidence». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 140.1 (2016-07), EL67-EL72. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.4954893](https://doi.org/10.1121/1.4954893). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.4954893> (vid. pág. 45).
- [47] E. N. Mosland, P. Lunde y J. Kocbach. «Finite element-based diffraction correction for piezoelectric transducers accounting for diffraction at transmission, propagation, and reception». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 154.4 (2023-10), págs. 2177-2190. ISSN: 0001-4966. DOI: [10.1121/10.0021305](https://doi.org/10.1121/10.0021305). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/10.0021305> (vid. pág. 45).
- [48] B. Auld. «General electromechanical reciprocity relations applied to the calculation of elastic wave scattering coefficients». En: *Wave Motion* 1.1 (1979-01), págs. 3-10. DOI: [10.1016/0165-2125\(79\)90020-9](https://doi.org/10.1016/0165-2125(79)90020-9). URL: [https://doi.org/10.1016/0165-2125\(79\)90020-9](https://doi.org/10.1016/0165-2125(79)90020-9) (vid. pág. 45).
- [49] G. S. Kino. «The application of reciprocity theory to scattering of acoustic waves by flaws». En: *Journal of Applied Physics* 49.6 (1978-06), págs. 3190-3199. DOI: [10.1063/1.325312](https://doi.org/10.1063/1.325312). URL: <https://doi.org/10.1063/1.325312> (vid. pág. 45).
- [50] A. Atalar. «A fast method of calculating diffraction loss between two facing transducers». En: *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control* 35.5 (1988-09), págs. 612-618. ISSN: 0885-3010. DOI: [10.1109/58.8039](https://doi.org/10.1109/58.8039). URL: <http://dx.doi.org/10.1109/58.8039> (vid. pág. 45).
- [51] C. Potel et al. «Deviation of a monochromatic Lamb wave beam in anisotropic multilayered media: asymptotic analysis, numerical and experimental results». En: *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control* 52.6 (2005-06), págs. 987-1001. ISSN: 0885-3010. DOI: [10.1109/tuffc.2005.1504021](https://doi.org/10.1109/tuffc.2005.1504021). URL: <http://dx.doi.org/10.1109/tuffc.2005.1504021> (vid. pág. 47).
- [52] R. Storn y K. Price. «Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces». En: *Journal of Global Optimization* 11.4 (1997), págs. 341-359. DOI: [10.1023/a:1008202821328](https://doi.org/10.1023/a:1008202821328). URL: <https://doi.org/10.1023/a:1008202821328> (vid. pág. 57).
- [53] J. Blank y K. Deb. «pymoo: Multi-Objective Optimization in Python». En: *IEEE Access* 8 (2020), págs. 89497-89509 (vid. págs. 57, 88).
- [54] R. Okuta et al. «CuPy: A NumPy-Compatible Library for NVIDIA GPU Calculations». En: *Proceedings of Workshop on Machine Learning Systems (LearningSys) in The Thirty-first Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS)*. 2017. URL: http://learningsys.org/nips17/assets/papers/paper%5C_16.pdf (vid. pág. 57).

- [55] G. Singh et al. «Evaluating the irradiation effects on the elastic properties of miniature monolithic SiC tubular specimens». En: *Journal of Nuclear Materials* 499 (2018-02), págs. 107-110. ISSN: 0022-3115. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2017.10.060](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2017.10.060). URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2017.10.060> (vid. pág. 61).
- [56] J. L. Straalsund y C. K. Day. «Effect of Neutron Irradiation on the Elastic Constants of Type-304 Stainless Steel». En: *Nuclear Technology* 20.1 (1973-10), págs. 27-34. ISSN: 1943-7471. DOI: [10.13182/nt73-2](https://doi.org/10.13182/nt73-2). URL: <http://dx.doi.org/10.13182/NT73-2> (vid. pág. 61).
- [57] M. Lobos Fernández. *Homogenization and materials design of mechanical properties of textured materials based on zeroth-, first- and second-order bounds of linear behavior*. Schriftenreihe Kontinuumsmechanik im Maschinenbau / Karlsruher Institut fuer Technologie, Institut fuer Technische Mechanik - Bereich Kontinuumsmechanik. KIT Scientific Publishing, 2018. ISBN: 9783731507703. URL: <https://books.google.com.ar/books?id=acxjDwAAQBAJ> (vid. págs. 65, 74, 80, 82, 147).
- [58] H. J. Bunge. *Texture Analysis in Materials Science*. Elsevier, 1982. DOI: [10.1016/c2013-0-11769-2](https://doi.org/10.1016/c2013-0-11769-2). URL: <https://doi.org/10.1016/c2013-0-11769-2> (vid. págs. 67, 74, 108).
- [59] F. Neumann y O. Meyer. *Vorlesungen über die Theorie der Elasticität der festen Körper und des Lichtäthers*. Vorlesungen über mathematische Physik / Neumann. B.G. Teubner, 1885. URL: <https://books.google.com.ar/books?id=lmUSAAAIAAJ> (vid. pág. 68).
- [60] S. Forte y M. Vianello. «Symmetry classes for elasticity tensors». En: *Journal of Elasticity* 43.2 (1996-05), págs. 81-108. ISSN: 1573-2681. DOI: [10.1007/bf00042505](https://doi.org/10.1007/bf00042505). URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BF00042505> (vid. págs. 68, 69, 80, 110).
- [61] N. Jia et al. «Micromechanical behavior and texture evolution of duplex stainless steel studied by neutron diffraction and self-consistent modeling». En: *Acta Materialia* 56.4 (2008-02), págs. 782-793. ISSN: 1359-6454. DOI: [10.1016/j.actamat.2007.10.040](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.10.040). URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2007.10.040> (vid. pág. 69).
- [62] D. E. Sands. *Introduction to Crystallography*. Dover Books on Chemistry. Mineola, NY: Dover Publications, 1994-01 (vid. pág. 69).
- [63] A. Love. *A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity*. Dover Books on Engineering Series. Dover Publications, 1944. ISBN: 9780486601748. URL: https://books.google.com.ar/books?id=z8rCbeD_MrYC (vid. pág. 69).
- [64] A. G. Khaktevich. «The elastic constants of crystals». En: *Kristallografiya* 6 (1961), págs. 700-703 (vid. pág. 69).

- [65] P. Chadwick, M. Vianello y S. C. Cowin. «A new proof that the number of linear elastic symmetries is eight». En: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 49.11 (2001-11), págs. 2471-2492. ISSN: 0022-5096. DOI: [10.1016/S0022-5096\(01\)00064-3](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(01)00064-3). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/S0022-5096\(01\)00064-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-5096(01)00064-3) (vid. pág. 69).
- [66] M. Nespolo, M. I. Aroyo y B. Souvignier. «Crystallographic shelves: space-group hierarchy explained». En: *Journal of Applied Crystallography* 51.5 (2018-09), págs. 1481-1491. ISSN: 1600-5767. DOI: [10.1107/S1600576718012724](https://doi.org/10.1107/S1600576718012724). URL: <http://dx.doi.org/10.1107/S1600576718012724> (vid. pág. 70).
- [67] J. F. Nye. *Physical properties of crystals*. Oxford science publications. London, England: Oxford University Press, 1985-05 (vid. pág. 71).
- [68] `mtex/data/EBSD/titanium.txt at develop · mtex-toolbox/mtex — github.com`. <https://github.com/mtex-toolbox/mtex/blob/develop/data/EBSD/titanium.txt>. [Accessed 08-04-2024] (vid. pág. 70).
- [69] U. Kocks, C. Tomé y H. Wenk. *Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties*. Cambridge University Press, 2000. ISBN: 9780521794206. URL: <https://books.google.com.ar/books?id=vkyU9KZBTioC> (vid. pág. 74).
- [70] R.-J. Roe. «Description of Crystallite Orientation in Polycrystalline Materials. III. General Solution to Pole Figure Inversion». En: *Journal of Applied Physics* 36.6 (1965-06), págs. 2024-2031. ISSN: 1089-7550. DOI: [10.1063/1.1714396](https://doi.org/10.1063/1.1714396). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1714396> (vid. pág. 74).
- [71] M. Guidi, B. L. Adams y E. T. Onat. «Tensorial Representation of the Orientation Distribution Function in Cubic Polycrystals». En: *Texture, Stress, and Microstructure* 19.3 (1992-01), págs. 147-167. ISSN: 1687-5400. DOI: [10.1155/tsm.19.147](https://doi.org/10.1155/tsm.19.147). URL: <http://dx.doi.org/10.1155/TSM.19.147> (vid. pág. 74).
- [72] M. Lobos y T. Böhlke. «On optimal zeroth-order bounds of linear elastic properties of multiphase materials and application in materials design». En: *International Journal of Solids and Structures* 84 (2016-05), págs. 40-48. ISSN: 0020-7683. DOI: [10.1016/j.ijsolstr.2015.12.015](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2015.12.015). URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2015.12.015> (vid. págs. 77, 78).
- [73] J. Nadeau y M. Ferrari. «On optimal zeroth-order bounds with application to Hashin–Shtrikman bounds and anisotropy parameters». En: *International Journal of Solids and Structures* 38.44–45 (2001-11), págs. 7945-7965. ISSN: 0020-7683. DOI: [10.1016/S0020-7683\(00\)00393-0](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(00)00393-0). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/S0020-7683\(00\)00393-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0020-7683(00)00393-0) (vid. pág. 78).
- [74] C. Zener. *Elasticity and anelasticity of metals*. 1956 (vid. pág. 78).

- [75] A. Reuss. «Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle.» En: *ZAMM - Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 9.1 (1929), págs. 49-58. DOI: [10.1002/zamm.19290090104](https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104). URL: <https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104> (vid. pág. 79).
- [76] W. Voigt. *Lehrbuch der Kristallphysik*. 1966. DOI: [10.1007/978-3-663-15884-4](https://doi.org/10.1007/978-3-663-15884-4). URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-663-15884-4> (vid. pág. 79).
- [77] R. Hill. «Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles». En: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11.5 (1963-09), págs. 357-372. DOI: [10.1016/0022-5096\(63\)90036-x](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90036-x). URL: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90036-x](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90036-x) (vid. pág. 79).
- [78] Z. Hashin y S. Shtrikman. «A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals». En: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 10.4 (1962-10), págs. 343-352. DOI: [10.1016/0022-5096\(62\)90005-4](https://doi.org/10.1016/0022-5096(62)90005-4). URL: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(62\)90005-4](https://doi.org/10.1016/0022-5096(62)90005-4) (vid. pág. 79).
- [79] L. Walpole. «On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems—II». En: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 14.5 (1966-09), págs. 289-301. ISSN: 0022-5096. DOI: [10.1016/0022-5096\(66\)90025-1](http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096(66)90025-1). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096\(66\)90025-1](http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096(66)90025-1) (vid. pág. 80).
- [80] J. Jerphagnon, D. Chemla y R. Bonneville. «The description of the physical properties of condensed matter using irreducible tensors». En: *Advances in Physics* 27.4 (1978-07), págs. 609-650. ISSN: 1460-6976. DOI: [10.1080/00018737800101454](http://dx.doi.org/10.1080/00018737800101454). URL: <http://dx.doi.org/10.1080/00018737800101454> (vid. pág. 80).
- [81] M. Lobos, T. Yuzbasioglu y T. Böhlke. «Homogenization and Materials Design of Anisotropic Multiphase Linear Elastic Materials Using Central Model Functions». En: *Journal of Elasticity* 128.1 (2017-01), págs. 17-60. ISSN: 1573-2681. DOI: [10.1007/s10659-016-9615-0](http://dx.doi.org/10.1007/s10659-016-9615-0). URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s10659-016-9615-0> (vid. págs. 81, 82).
- [82] M. Lobos Fernández. *Homogenization and materials design of mechanical properties of textured materials based on zeroth-, first- and second-order bounds of linear behavior*. en. Schriftenreihe Kontinuumsmechanik im Maschinenbau. Karlsruhe, Germany: KIT Scientific Publishing, 2018-07 (vid. pág. 82).
- [83] Z. Hashin y S. Shtrikman. «A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials». En: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11.2 (1963-03), págs. 127-140. ISSN: 0022-5096. DOI: [10.1016/0022-5096\(63\)90060-7](http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096(63)90060-7). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90060-7](http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096(63)90060-7) (vid. págs. 82, 83).

- [84] M. L. Fernández y T. Böhlke. «Representation of Hashin–Shtrikman Bounds in Terms of Texture Coefficients for Arbitrarily Anisotropic Polycrystalline Materials». En: *Journal of Elasticity* 134.1 (2018-05), págs. 1-38. DOI: [10.1007/s10659-018-9679-0](https://doi.org/10.1007/s10659-018-9679-0). URL: <https://doi.org/10.1007/s10659-018-9679-0> (vid. págs. 82, 109, 110, 113, 139, 147).
- [85] H. Ledbetter. «Predicted monocrystal elastic constants of 304-type stainless steel». En: *Physica B+C* 128.1 (1985-01), págs. 1-4. ISSN: 0378-4363. DOI: [10.1016/0378-4363\(85\)90076-2](https://doi.org/10.1016/0378-4363(85)90076-2). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0378-4363\(85\)90076-2](http://dx.doi.org/10.1016/0378-4363(85)90076-2) (vid. págs. 82, 115).
- [86] L. Wang. «Determination of elastic constants of composites by time-resolved acoustic microscopy». En: *Ultrasonics* 37.4 (1999-04), págs. 283-289. ISSN: 0041-624X. DOI: [10.1016/S0041-624X\(98\)00067-5](https://doi.org/10.1016/S0041-624X(98)00067-5). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/S0041-624X\(98\)00067-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0041-624X(98)00067-5) (vid. pág. 84).
- [87] O. I. Lobkis, D. E. Chimenti y H. Zhang. «In-plane elastic property characterization in composite plates». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 107.4 (2000-04), págs. 1852-1858. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.428465](https://doi.org/10.1121/1.428465). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.428465> (vid. pág. 84).
- [88] D. Fei y D. E. Chimenti. «Single-scan elastic property estimation in plates». En: *Acoustics Research Letters Online* 2.1 (2001-01), págs. 49-54. ISSN: 1529-7853. DOI: [10.1121/1.1353376](https://doi.org/10.1121/1.1353376). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.1353376> (vid. págs. 84, 89, 127).
- [89] J.-Y. Kim y S. I. Rokhlin. «Determination of elastic constants of generally anisotropic inclined lamellar structure using line-focus acoustic microscopy». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 126.6 (2009-12), págs. 2998-3007. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.3245032](https://doi.org/10.1121/1.3245032). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.3245032> (vid. págs. 85, 96).
- [90] GitHub - grbl/grbl: An open source, embedded, high performance g-code-parser and CNC milling controller written in optimized C that will run on a straight Arduino — [github.com](https://github.com/grbl/grbl). <https://github.com/grbl/grbl>. [Accessed 21-03-2024] (vid. pág. 87).
- [91] Building General Capacity in Nuclear Science and Applications in National Strategic Areas | IAEA — [iaea.org](https://www.iaea.org/projects/tc/arg0018). <https://www.iaea.org/projects/tc/arg0018>. [Accessed 15-04-2024] (vid. pág. 87).
- [92] GitHub - picotech/picosdk-python-wrappers: A set of Python bindings and examples for PicoScope® oscilloscope and PicoLog® data logger products. — [github.com](https://github.com/picotech/picosdk-python-wrappers). <https://github.com/picotech/picosdk-python-wrappers>. [Accessed 16-04-2024] (vid. pág. 87).

- [93] N. Hansen y A. Ostermeier. «Adapting arbitrary normal mutation distributions in evolution strategies: the covariance matrix adaptation». En: *Proceedings of IEEE International Conference on Evolutionary Computation*. ICEC-96. IEEE. DOI: [10.1109/icec.1996.542381](https://doi.org/10.1109/icec.1996.542381). URL: <http://dx.doi.org/10.1109/ICEC.1996.542381> (vid. pág. 88).
- [94] A. Auger y N. Hansen. «Performance Evaluation of an Advanced Local Search Evolutionary Algorithm». En: *2005 IEEE Congress on Evolutionary Computation*. IEEE. DOI: [10.1109/cec.2005.1554903](https://doi.org/10.1109/cec.2005.1554903). URL: <http://dx.doi.org/10.1109/CEC.2005.1554903> (vid. pág. 88).
- [95] J. Li et al. «Superior strength and ductility of 316L stainless steel with heterogeneous lamella structure». En: *Journal of Materials Science* 53.14 (2018-04), págs. 10442-10456. ISSN: 1573-4803. DOI: [10.1007/s10853-018-2322-4](https://doi.org/10.1007/s10853-018-2322-4). URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s10853-018-2322-4> (vid. pág. 90).
- [96] Martens, Arvid. «Visco-elastic material characterization by means of the ultrasonic polar scan». Tesis doct. 2020, XL, 272 (vid. págs. 90, 96, 149).
- [97] G. Sha. «A simultaneous non-destructive characterisation method for grain size and single-crystal elastic constants of cubic polycrystals from ultrasonic measurements». En: *Insight - Non-Destructive Testing and Condition Monitoring* 60.4 (2018-04), págs. 190-193. DOI: [10.1784/insi.2018.60.4.190](https://doi.org/10.1784/insi.2018.60.4.190). URL: <https://doi.org/10.1784/insi.2018.60.4.190> (vid. pág. 90).
- [98] L. Wang y S. I. Rokhlin. «Floquet wave ultrasonic method for determination of single ply moduli in multidirectional composites». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 112.3 (2002-09), págs. 916-924. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.1498854](https://doi.org/10.1121/1.1498854). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.1498854> (vid. pág. 90).
- [99] B. Lan et al. «Direct volumetric measurement of crystallographic texture using acoustic waves». En: *Acta Materialia* 159 (2018-10), págs. 384-394. DOI: [10.1016/j.actamat.2018.08.037](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.08.037). URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.08.037> (vid. págs. 92, 108, 109, 121, 123).
- [100] J. J. Hall. «Electronic Effects in the Elastic Constants of n-Type Silicon». En: *Physical Review* 161.3 (1967-09), págs. 756-761. ISSN: 0031-899X. DOI: [10.1103/physrev.161.756](https://doi.org/10.1103/physrev.161.756). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.161.756> (vid. págs. 95, 115, 148).
- [101] E. S. Fisher y C. J. Renken. «Single-Crystal Elastic Moduli and the hcp $\rightarrow$ bcc Transformation in Ti, Zr, and Hf». En: *Physical Review* 135.2A (1964-07), A482-A494. ISSN: 0031-899X. DOI: [10.1103/physrev.135.a482](https://doi.org/10.1103/physrev.135.a482). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.135.A482> (vid. págs. 95, 115).
- [102] Hexcel. *HexPly 954-3 datasheet*. media.knowde.com/image/upload/v1598875502/production/Collateral/181638/HexPly_9543_US_Technical_Data_Sheet.pdf. [Accessed 05-12-2024] (vid. pág. 95).

- [103] Toray. *M55j datasheet*. <https://www.toraycma.com/wp-content/uploads/M55J-Technical-Data-Sheet-1.pdf>. [Accessed 05-12-2024] (vid. pág. 95).
- [104] G. Dean y P. Turner. «The elastic properties of carbon fibres and their composites». En: *Composites* 4.4 (1973-07), págs. 174-180. ISSN: 0010-4361. DOI: 10.1016/0010-4361(73)90109-2. URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0010-4361\(73\)90109-2](http://dx.doi.org/10.1016/0010-4361(73)90109-2) (vid. págs. 95, 97).
- [105] C. P. Juárez G. and Buioli et al. «Evolución de la textura cristalina en los procesos de fabricación de combustibles y componentes internos de reactores nucleares de potencia». En: *Ciencia e Investigación* (2019-11), págs. 5-32 (vid. págs. 97, 116).
- [106] Juárez, Gabriel. «Estudio microestructural de la zona de transición de deformación plástica en tubos de Zircaloy-4 y afines». Tesis doct. 2023 (vid. págs. 97, 116).
- [107] *Standard Test Method for Tensile Properties of Polymer Matrix Composite Materials*. Standard. ASTM International, 2000-04 (vid. págs. 102, 105).
- [108] *Standard Test Methods for Flexural Properties of Unreinforced and Reinforced Plastics and Electrical Insulating Materials*. Standard. ASTM International, 2000-01 (vid. págs. 102, 105).
- [109] R. Sowerby y W. Johnson. «A review of texture and anisotropy in relation to metal forming». En: *Materials Science and Engineering* 20 (1975-01), págs. 101-111. DOI: 10.1016/0025-5416(75)90138-x. URL: [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(75\)90138-x](https://doi.org/10.1016/0025-5416(75)90138-x) (vid. pág. 108).
- [110] K. L. Murty e I. Charit. «Texture development and anisotropic deformation of zircaloys». En: *Progress in Nuclear Energy* 48.4 (2006-05), págs. 325-359. DOI: 10.1016/j.pnucene.2005.09.011. URL: <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2005.09.011> (vid. pág. 108).
- [111] C. M. Sayers. «Ultrasonic velocities in anisotropic polycrystalline aggregates». En: *Journal of Physics D: Applied Physics* 15.11 (1982-11), págs. 2157-2167. DOI: 10.1088/0022-3727/15/11/011. URL: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/15/11/011> (vid. pág. 109).
- [112] C. M. Sayers. «Angular dependent ultrasonic wave velocities in aggregates of hexagonal crystals». En: *Ultrasonics* 24.5 (1986-09), págs. 289-291. DOI: 10.1016/0041-624x(86)90107-1. URL: [https://doi.org/10.1016/0041-624x\(86\)90107-1](https://doi.org/10.1016/0041-624x(86)90107-1) (vid. págs. 109, 121).
- [113] M. Hirao, K. Aoki y H. Fukuoka. «Texture of polycrystalline metals characterized by ultrasonic velocity measurements». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 81.5 (1987-05), págs. 1434-1440. DOI: 10.1121/1.394495. URL: <https://doi.org/10.1121/1.394495> (vid. págs. 109, 121).

- [114] Y. Li y R. B. Thompson. «Relations between elastic constants C_{ij} and texture parameters for hexagonal materials». En: *Journal of Applied Physics* 67.5 (1990-03), págs. 2663-2665. DOI: [10.1063/1.345479](https://doi.org/10.1063/1.345479). URL: <https://doi.org/10.1063/1.345479> (vid. págs. 109, 121).
- [115] B. Lan, M. J. Lowe y F. P. Dunne. «A spherical harmonic approach for the determination of HCP texture from ultrasound: A solution to the inverse problem». En: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 83 (2015-10), págs. 179-198. DOI: [10.1016/j.jmps.2015.06.014](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2015.06.014). URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2015.06.014> (vid. pág. 109).
- [116] B. Lan, M. J. Lowe y F. P. Dunne. «A generalized spherical harmonic deconvolution to obtain texture of cubic materials from ultrasonic wave speed». En: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 83 (2015-10), págs. 221-242. DOI: [10.1016/j.jmps.2015.06.012](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2015.06.012). URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2015.06.012> (vid. págs. 109, 123).
- [117] J. Rossin et al. «Bayesian inference of elastic constants and texture coefficients in additively manufactured cobalt-nickel superalloys using resonant ultrasound spectroscopy». En: *Acta Materialia* 220 (2021-11), pág. 117287. DOI: [10.1016/j.actamat.2021.117287](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117287). URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117287> (vid. págs. 109, 122, 125).
- [118] J. Rossin. *GitHub - jrossin/texture-RUS: Inverse determination of texture from resonant frequencies (gathered by RUS) by pairing with the inverse solving python package SMCPy* — *github.com*. <https://github.com/jrossin/texture-RUS>. [Accessed 15-Feb-2023] (vid. pág. 113).
- [119] R. Lowrie y A. M. Gonas. «Single-Crystal Elastic Properties of Tungsten from 24° to 1800°C». En: *Journal of Applied Physics* 38.11 (1967-10), págs. 4505-4509. ISSN: 1089-7550. DOI: [10.1063/1.1709158](https://doi.org/10.1063/1.1709158). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1709158> (vid. pág. 113).
- [120] G. Alers y J. Neighbours. «The elastic constants of zinc between 4.2° and 670°K». En: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 7.1 (1958-10), págs. 58-64. ISSN: 0022-3697. DOI: [10.1016/0022-3697\(58\)90180-x](https://doi.org/10.1016/0022-3697(58)90180-x). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697\(58\)90180-x](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697(58)90180-x) (vid. pág. 115).
- [121] J. Kearns. «Report WAPD-TM-472». En: *Bettis Atomic Power Laboratory, West Mifflin, PA, USA* (1965) (vid. pág. 120).
- [122] A. J. Anderson, R. B. Thompson y C. S. Cook. «Ultrasonic measurement of the Kearns texture factors in zircaloy, zirconium, and titanium». En: *Metallurgical and Materials Transactions A* 30.8 (1999-08), págs. 1981-1988. ISSN: 1543-1940. DOI: [10.1007/s11661-999-0008-x](https://doi.org/10.1007/s11661-999-0008-x). URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s11661-999-0008-x> (vid. pág. 120).

- [123] H. Bunge. «Three-dimensional texture analysis». En: *International Materials Reviews* 32.1 (1987-01), págs. 265-291. ISSN: 1743-2804. DOI: [10.1179/imr.1987.32.1.265](https://doi.org/10.1179/imr.1987.32.1.265). URL: <http://dx.doi.org/10.1179/imr.1987.32.1.265> (vid. pág. 122).
- [124] H. Bunge y C. Esling. «Determination of the odd part of the texture function». En: *Journal de Physique Lettres* 40.23 (1979), págs. 627-628. ISSN: 0302-072X. DOI: [10.1051/jphyslet:019790040023062700](https://doi.org/10.1051/jphyslet:019790040023062700). URL: <http://dx.doi.org/10.1051/jphyslet:019790040023062700> (vid. pág. 123).
- [125] O. Engler y V. Randle. *Introduction to Texture Analysis: Macrotexture, Microtexture, and Orientation Mapping, Second Edition*. 2009-11. DOI: [10.1201/9781420063660](https://doi.org/10.1201/9781420063660). URL: <http://dx.doi.org/10.1201/9781420063660> (vid. pág. 123).
- [126] H. J. Bunge. «Texture and Magnetic Properties». En: *Textures and Microstructures* 11.2-4 (1989-01), págs. 75-91. ISSN: 1029-4961. DOI: [10.1155/tsm.11.75](https://doi.org/10.1155/tsm.11.75). URL: <http://dx.doi.org/10.1155/TSM.11.75> (vid. pág. 123).
- [127] W. Wu et al. «Effects of punching process on crystal orientations, magnetic and mechanical properties in non-oriented silicon steel». En: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 444 (2017-12), págs. 211-217. ISSN: 0304-8853. DOI: [10.1016/j.jmmm.2017.07.003](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.07.003). URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.07.003> (vid. pág. 123).
- [128] W. B. Hutchinson y J. G. Swift. «Anisotropy in Some Soft Magnetic Materials». En: *Texture* 1.2 (1972-01), págs. 117-123. ISSN: 0371-6554. DOI: [10.1155/tsm.1.117](https://doi.org/10.1155/tsm.1.117). URL: <http://dx.doi.org/10.1155/TSM.1.117> (vid. pág. 123).
- [129] D. Mainprice, G. E. Lloyd y M. Casey. «Individual orientation measurements in quartz polycrystals: advantages and limitations for texture and petrophysical property determinations». En: *Journal of Structural Geology* 15.9-10 (1993), págs. 1169-1187 (vid. pág. 123).
- [130] S. Bhagavantam y D. Suryanarayana. «Crystal symmetry and physical properties: application of group theory». En: *Acta Crystallographica* 2.1 (1949-03), págs. 21-26. ISSN: 0365-110X. DOI: [10.1107/s0365110x49000047](https://doi.org/10.1107/s0365110x49000047). URL: <http://dx.doi.org/10.1107/S0365110X49000047> (vid. pág. 124).
- [131] R. B. King y C. M. Fortunko. «Determination of in-plane residual stress states in plates using horizontally polarized shear waves». En: *Journal of Applied Physics* 54.6 (1983-06), págs. 3027-3035. ISSN: 1089-7550. DOI: [10.1063/1.332506](https://doi.org/10.1063/1.332506). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.332506> (vid. pág. 124).
- [132] C.-S. Man y W. Y. Lu. «Towards an acoustoelastic theory for measurement of residual stress». En: *Journal of Elasticity* 17.2 (1987), págs. 159-182. ISSN: 1573-2681. DOI: [10.1007/bf00043022](https://doi.org/10.1007/bf00043022). URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BF00043022> (vid. pág. 124).

- [133] A. D. Degtyar, W. Huang y S. I. Rokhlin. «Wave propagation in stressed composites». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 104.4 (1998-10), págs. 2192-2199. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.423732](https://doi.org/10.1121/1.423732). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.423732> (vid. pág. 124).
- [134] G. C. Johnson. «Acoustoelastic Response of a Polycrystalline Aggregate With Orthotropic Texture». En: *Journal of Applied Mechanics* 52.3 (1985-09), págs. 659-663. ISSN: 1528-9036. DOI: [10.1115/1.3169117](https://doi.org/10.1115/1.3169117). URL: <http://dx.doi.org/10.1115/1.3169117> (vid. pág. 124).
- [135] R. B. Thompson, S. S. Lee y J. F. Smith. «Angular dependence of ultrasonic wave propagation in a stressed, orthorhombic continuum: Theory and application to the measurement of stress and texture». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 80.3 (1986-09), págs. 921-931. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.393915](https://doi.org/10.1121/1.393915). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.393915> (vid. pág. 125).
- [136] C. M. Sayers et al. «Texture and stress determination in metals by using ultrasonic Rayleigh waves and neutron diffraction». En: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 320.1554 (1986-11), págs. 187-200. ISSN: 2054-0272. DOI: [10.1098/rsta.1986.0110](https://doi.org/10.1098/rsta.1986.0110). URL: <http://dx.doi.org/10.1098/rsta.1986.0110> (vid. pág. 125).
- [137] P. P. Delsanto, R. B. Mignogna y A. V. Clark. «Ultrasonic texture and stress measurements in anisotropic polycrystalline aggregates». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 87.1 (1990-01), págs. 215-224. ISSN: 1520-8524. DOI: [10.1121/1.399288](https://doi.org/10.1121/1.399288). URL: <http://dx.doi.org/10.1121/1.399288> (vid. pág. 125).
- [138] A. D. Degtyar y S. I. Rokhlin. «Absolute stress determination in orthotropic materials from angular dependences of ultrasonic velocities». En: *Journal of Applied Physics* 78.3 (1995-08), págs. 1547-1556. ISSN: 1089-7550. DOI: [10.1063/1.360248](https://doi.org/10.1063/1.360248). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.360248> (vid. pág. 125).
- [139] J.-i. Kushibiki, Y. Matsumoto y N. Chubachi. «Material Characterization by Acoustic Line-focus Beam». En: *Acoustical Imaging*. Springer US, 1984, págs. 193-202. ISBN: 9781461327790. DOI: [10.1007/978-1-4613-2779-0_17](https://doi.org/10.1007/978-1-4613-2779-0_17). URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4613-2779-0_17 (vid. pág. 127).
- [140] S. Zeroug, F. E. Stanke y R. Burridge. «A complex-transducer-point model for finite emitting and receiving ultrasonic transducers». En: *Wave Motion* 24.1 (1996-08), págs. 21-40. ISSN: 0165-2125. DOI: [10.1016/0165-2125\(96\)00004-2](https://doi.org/10.1016/0165-2125(96)00004-2). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0165-2125\(96\)00004-2](http://dx.doi.org/10.1016/0165-2125(96)00004-2) (vid. pág. 127).
- [141] O. I. Lobkis, A. Safaeinili y D. E. Chimenti. «Precision ultrasonic reflection studies in fluid-coupled plates». En: *The Journal of the Acoustical Society of America* 99.5 (1996-05), págs. 2727-2736. DOI: [10.1121/1.414874](https://doi.org/10.1121/1.414874). URL: <https://doi.org/10.1121/1.414874> (vid. pág. 127).

- [142] H. Taheri et al. «Fast Ultrasonic Imaging with Total Focusing Method (TFM) for Inspection of Additively Manufactured Polymer Composite Component». En: *ASNT 27th Annual Research Symposium Proceedings*. ASNT RS 2018. ASNT, 2018-10, págs. 212-220. DOI: [10.32548/rs.2018.009](https://doi.org/10.32548/rs.2018.009). URL: <http://dx.doi.org/10.32548/RS.2018.009> (vid. pág. 127).
- [143] M. Castaings y B. Hosten. «Air-coupled measurement of plane wave, ultrasonic plate transmission for characterising anisotropic, viscoelastic materials». En: *Ultrasonics* 38.1-8 (2000-03), págs. 781-786. ISSN: 0041-624X. DOI: [10.1016/S0041-624X\(99\)00036-0](https://doi.org/10.1016/S0041-624X(99)00036-0). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/S0041-624X\(99\)00036-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0041-624X(99)00036-0) (vid. pág. 128).
- [144] O. I. Lobkis y D. E. Chimenti. «Anisotropic Materials Characterization Using Air-Coupled Ultrasound». En: *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*. Springer US, 1997, págs. 1375-1382. ISBN: 9781461559474. DOI: [10.1007/978-1-4615-5947-4_179](https://doi.org/10.1007/978-1-4615-5947-4_179). URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4615-5947-4_179 (vid. pág. 128).
- [145] G. E. Karniadakis et al. «Physics-informed machine learning». En: *Nat. Rev. Phys.* 3.6 (2021-05), págs. 422-440 (vid. pág. 128).
- [146] H. Fukuda et al. «Deep-learning-assisted resonant ultrasound spectroscopy for cubic solids». En: *Phys. Rev. Appl.* 20.3 (2023-09) (vid. pág. 128).
- [147] W. Yang et al. «Deep learning model as an inversion tool for resonant ultrasound spectroscopy of piezoelectric materials». En: *Appl. Phys. Lett.* 120.18 (2022-05) (vid. pág. 128).
- [148] R. Wang et al. «Elastic constant estimation for low-Q materials using convolutional neural network based resonant ultrasound spectroscopy». En: *Nondestruct. Test. Eval.* (2024-03), págs. 1-15 (vid. pág. 128).
- [149] W. Leach. «Controlled-source analogous circuits and SPICE models for piezoelectric transducers». En: *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control* 41.1 (1994-01), págs. 60-66. ISSN: 0885-3010. DOI: [10.1109/58.265821](https://doi.org/10.1109/58.265821). URL: <http://dx.doi.org/10.1109/58.265821> (vid. pág. 129).
- [150] J. van Deventer, T. Lofqvist y J. Delsing. «PSpice simulation of ultrasonic systems». En: *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control* 47.4 (2000-07), págs. 1014-1024. ISSN: 0885-3010. DOI: [10.1109/58.852085](https://doi.org/10.1109/58.852085). URL: <http://dx.doi.org/10.1109/58.852085> (vid. pág. 129).
- [151] J. Johansson y P.-E. Martinsson. «Incorporation of diffraction effects in simulations of ultrasonic systems using PSpice models». En: *2001 IEEE Ultrasonics Symposium. Proceedings. An International Symposium (Cat. No.01CH37263)*. Vol. 1. ULTSYM-01. IEEE, págs. 405-410. DOI: [10.1109/ultsym.2001.991650](https://doi.org/10.1109/ultsym.2001.991650). URL: <http://dx.doi.org/10.1109/ULTSYM.2001.991650> (vid. pág. 129).

-
- [152] G. Low y R. Jones. «Design and construction of short pulse ultrasonic probes for non-destructive testing». En: *Ultrasonics* 22.2 (1984-03), págs. 85-95. ISSN: 0041-624X. DOI: [10.1016/0041-624X\(84\)90026-X](https://doi.org/10.1016/0041-624X(84)90026-X). URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0041-624X\(84\)90026-X](http://dx.doi.org/10.1016/0041-624X(84)90026-X) (vid. pág. 131).
- [153] S. Matthies, G. W. Vinel y K. Helming. *Standard Distributions in Texture Analysis Volume 1*. De Gruyter, 1987 (vid. pág. 139).
- [154] *Wigner-D functions | MTEX — fabianbartl.github.io*. <https://fabianbartl.github.io/mtex-toolbox/WignerFunctions.html>. [Accessed 07-11-2024] (vid. pág. 139).
- [155] A. Gourdin y M. Boumahrat. *Méthodes numériques appliquées*. Technique et Documentation, 1989 (vid. pág. 141).
- [156] B. Audoin, S. Baste y B. Castagnède. «Estimation de l'intervalle de confiance des constantes d'élasticité identifiées à partir des vitesses de propagation ultrasonores». En: *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série 2, Mécanique, Physique, Chimie, Sciences de l'univers, Sciences de la Terre* 312.7 (1991), págs. 679-686 (vid. págs. 141, 142).
- [157] B. Lan et al. «Rapid measurement of volumetric texture using resonant ultrasound spectroscopy». En: *Scripta Materialia* 157 (2018-12), págs. 44-48. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2018.07.029](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2018.07.029). URL: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2018.07.029> (vid. pág. 148).