

# INTEGRACIÓN DEL MODELO VISCO-PLÁSTICO AUTOCONSISTENTE CON LEYES BAJO IRRADIACIÓN DE CREEP Y CRECIMIENTO EN EL CÓDIGO DE ELEMENTOS FINITOS CODE ASTER

## INTEGRATION OF THE SELF-CONSISTENT VISCO-PLASTIC MODEL WITH LAWS UNDER CREEP IRRADIATION AND GROWTH IN THE FINITE ELEMENT CODE ASTER

**Fabrizio Aguzzi<sup>a</sup>, Javier Signorelli<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>*Instituto de Física Rosario (IFIR), CONICET-UNR, 27 de Febrero 210 bis, (2000)  
Rosario, Argentina, aguzzi@ifir-conicet.gov.ar*

<sup>b</sup>*Universidad Nacional de Rosario, Av. Pellegrini 250, (2000) Rosario, Argentina signorelli@ifir-  
conicet.gov.ar*

**Palabras clave:** Creep y Crecimiento bajo irradiación, Material Policristalino, Anisotropía, Microestructura, UserMATERial (UMAT), Elementos Finitos.

**Resumen.** Se presenta la integración del modelo policristalino viscoplastico autoconsistente (VPSC) en el marco de elementos finitos (FE), usando el software Code Aster. Este modelo incorpora las leyes de creep y crecimiento bajo irradiación en un cristal simple. En cada punto de integración de los elementos finitos se define un sistema de coordenadas local, considerando un policristal con textura inicial. La interfaz VPSC-FE, construida con la subrutina UMAT, permite la comunicación entre escalas meso y macroscópica; aunque el modelo VPSC solo resuelve la deformación viscoplastica para un estado de tensiones, la interfaz incorpora la deformación elástica macroscópica. La integración resultante simula la respuesta mecánica de un cuarto de tubo de revestimiento de Zircaloy-2, primero bajo presión interna y luego solo a tracción bajo irradiación, evaluando efectos de textura y precisión respecto al modelo VPSC independiente.

**Keywords:** Creep and Irradiation Growth, Polycrystalline Material, Anisotropy, Microstructure, UserMATERial (UMAT), Finite Elements.

**Abstract.** The integration of the self-consistent viscoplastic polycrystalline (VPSC) model into the finite element (FE) framework using the Code Aster software is presented. This model incorporates creep and growth laws under irradiation in a single crystal. A local coordinate system is defined at each integration point of the finite elements, considering a polycrystal with initial texture. The VPSC-FE interface, built with the UMAT subroutine, enables communication between meso and macroscopic scales; although the VPSC model only resolves viscoplastic deformation for a stress state, the interface incorporates macroscopic elastic deformation. The resulting integration simulates the mechanical response of a quarter Zircaloy-2 cladding tube, first under internal pressure and then under uniaxial tension during irradiation, evaluating texture effects and accuracy with respect to the standalone VPSC model.

## 1 INTRODUCCIÓN

Las pastillas combustibles se alojan dentro del tubo de revestimiento o vaina, el cual, en condiciones operativas, está expuesto a altas dosis de irradiación. Este ambiente induce cambios dimensionales anisotrópicos en materiales de base de zirconio debido a creep y crecimiento bajo irradiación [Fidleris \(1988\)](#), [Causey et al. \(1988\)](#).

Modelar con precisión estos fenómenos es crucial para garantizar la seguridad del reactor. Entre las diversas estrategias de modelización, una alternativa clásica es el uso de ecuaciones de diseño basadas en modelos constitutivos empíricos que describen la respuesta global del material como un continuo [Franklin et al. \(1983\)](#), [Chung \(2016\)](#). Sin embargo, estos modelos están limitado a los rangos específicos de variables como tensión, temperatura y flujo, para los cuales se ajustaron las ecuaciones. Esto limita su aplicabilidad fuera de esos rangos, impidiendo su extrapolación a otros escenarios operativos o materiales, además de omitir la correlación entre los efectos microestructurales y la respuesta del componente a escala macroscópica.

Para superar estas limitaciones, se han desarrollado modelos policristalinos [Lebensohn y Tomé \(1993\)](#), que permiten abordar el problema en distintos niveles (micro-meso-macro). Estos modelos incorporan explícitamente la textura del material y rastrean la evolución de la microestructura bajo irradiación. El modelo Visco Plastic Self Consistent (VPSC) utilizado en este trabajo resuelve únicamente la tasa de deformación viscoplástica para un estado de tensiones dado, sin calcular la tasa de deformación elástica del policristal. No obstante, siguiendo los lineamientos de [Segurado et al. \(2012\)](#), se desarrolló una interfaz que permite calcular la componente elástica de la tasa de deformación y conectarla con el código de elementos finitos Code Aster.

Este trabajo se organiza de la siguiente manera: en la sección 2 se describen los modelos y la formulación correspondiente tanto a nivel de cristal simple como de policristal, además de detallarse el desarrollo de la interfaz VPSC-FE. En la sección 3...

## 2 DESCRIPCION DE LOS MODELOS

### 2.1 Modelo Cristalográfico de Creep y Crecimiento bajo irradiación

El modelo reacción-difusión se discute en detalle en [Patra et al. \(2017\)](#), [Barashev et al. \(2015\)](#) y [Golubov et al. \(2011\)](#). En adelante, las principales características y suposiciones del modelo serán desarrollados.

El flujo neutrónico producto de la fisión nuclear genera una reacción en cadena que afecta a la estructura cristalina del material, creando defectos puntuales como vacancias, intersticios y clústeres intersticiales. Estos defectos migran en la red cristalina y pueden ser atrapados por dislocaciones, bordes de grano o interfases (sumideros) presentes en el interior del material [Brailsford \(1972\)](#). El modelo reacción-difusión utiliza cuatro direcciones cristalográficas para describir las deformaciones y los vectores de Burgers de las dislocaciones: tres direcciones basales compactas,  $j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ , y una dirección en el eje-c,  $j \equiv \mathbf{c}$ . El promedio de las concentraciones de vacancias e intersticios en el medio efectivo son denotados por  $c_v$  y  $c_i$ , respectivamente, y se asume que la difusión es isotrópica. El modelo asume que igual número de clústeres de átomos auto intersticiales (SIA) son generados a lo largo de cada dirección basal  $j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ , las concentraciones individuales de cada dirección se denotan  $c_{ic}^j$ . La difusión de los clústeres de SIA es unidireccional a lo largo de las direcciones basales  $j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ . Por otro lado, las dislocaciones lineales son proyectados a lo largo de las direcciones  $j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c}$ , y los lazos de dislocaciones formados en los planos prismáticos y basales poseen vectores de Burger  $j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  y  $\mathbf{c}$  respectivamente. Los defectos puntuales y de

clústeres de SIA son atrapados por dislocaciones que actúan como sumidero (con densidad  $\rho^j$ ), esto conduce al trepado de las dislocaciones lineales y a la formación de lazos de dislocaciones tanto del tipo de intersticial y como de vacancias. Los clústeres intersticiales tienen vectores de Burger en el plano basal y la difusión ocurre unidireccionalmente, estos clústeres solo interactúan con dislocaciones que poseen el mismo vector de Burger, es decir  $j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ .

Los lazos de dislocaciones del tipo intersticial (con número de densidad,  $N_i^j$ , y radio medio,  $r_i^j$ ) y los lazos de dislocaciones del tipo de vacancias (con número de densidad,  $N_v^j$ , y radio medio,  $r_v^j$ ) nuclea y crecen sobre los planos prismáticos y basales, aunque el modelo favorece la captura neta de intersticios en los lazos de dislocaciones formados en los planos prismático y la captura neta de las vacancias en los lazos de dislocaciones formados en los planos basales. El resultado del trepado de los lazos de dislocaciones y de las dislocaciones de línea contribuyen al crecimiento positivo de las deformaciones,  $\varepsilon_{crec}^{a_1}, \varepsilon_{crec}^{a_2}, \varepsilon_{crec}^{a_3}$ , a lo largo de las direcciones prismáticas y crecimiento negativo  $\varepsilon_{crec}^c$  a lo largo de la dirección basal. Además, la radiación induce defectos que también son absorbidos por los bordes de grano (GBs) Singh et al. (2002).

Bajo la suposición de estado estacionario, la tasa de deformación cristalográfica a lo largo de las direcciones prismáticas y basales asociadas con el trepado de las dislocaciones lineales y los lazos de dislocaciones viene dado por Patra et al. (2017):

$$\dot{\varepsilon}_{climb}^j = G_{NRT}(1 - f_r)f_{ic} \left( \frac{1}{3} - \frac{\rho^j}{\sum_j \rho^j + \sum_j \sum_m k_m^{j2}} \right); j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3; m \equiv \mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}' \quad (1)$$

$$\dot{\varepsilon}_{climb}^j = -G_{NRT}(1 - f_r)f_{ic} \left( \frac{\rho^j}{\sum_j \rho^j + \sum_j \sum_m k_m^{j2}} \right); j \equiv \mathbf{c}; m \equiv \mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}' \quad (2)$$

donde,  $G_{NRT}$  es la tasa de producción de defectos de Norgett-Robinson-Torrens (NRT) Norgett et al. (1975) para vacancias e intersticios,  $f_r$  es la fracción de defectos puntuales que recombinan durante la reacción en cadena, y  $f_{ic}$  es la fracción de intersticiales que forman clústeres. Por otro lado,  $k_m^{j2}$  es la fuerza de absorción de los bordes de grano (GBs) para los defectos puntuales (el superíndice  $j$  indica la dirección del vector de Burger, y el subíndice  $m$  indica la dirección de los ejes principales del grano considerado de forma elipsoidal) definido como Patra et al. (2017)

$$k_m^{j2} = (\hat{\mathbf{m}} \cdot \hat{\mathbf{j}}) \frac{1/R_m^2}{\sum_m 1/R_m^2} \frac{1}{R_m^2} \frac{3\beta_m^2(\beta_m \coth(\beta_m) - 1)}{\beta_m^2 - 3(\beta_m \coth(\beta_m) - 1)},$$

$$\beta_m = \sqrt{\sum_j \rho^j R_m}; j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c}; m \equiv \mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}' \quad (3)$$

donde,  $R_m$  es la longitud del  $m^{th}$  semi eje del grano elipsoidal.

Aquí,  $\rho^j$  es la densidad total de dislocaciones con vectores de Burger a lo largo de la dirección cristalográfica  $\mathbf{j}$ ,  $\rho^j$  esta dada como la suma de la densidad de las dislocaciones lineales, la densidad de los lazos de dislocaciones intersticial por área (número de lazos por unidad de volumen multiplicado por la circunferencia) y la densidad de lazos por vacancias por área, es decir

$$\rho^j = \rho_d^j + 2\pi r_i^j N_i^j + 2\pi r_v^j N_v^j \quad (4)$$

Por otro lado, existe una contribución adicional a la deformación por crecimiento asociado con el efecto de la captura de los defectos en los bordes de grano

$$\dot{\varepsilon}_{GB}^j = -G_{NRT}(1 - f_r)f_{ic} \frac{\sum_m k_m^{j2}}{\sum_j \rho^j + \sum_j \sum_m k_m^{j2}}; j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c}; m \equiv \mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}' \quad (5)$$

La tasa de deformación cristalográfica total debido al crecimiento bajo irradiación está dada como

$$\dot{\varepsilon}_{crec}^j = \dot{\varepsilon}_{climb}^j + \dot{\varepsilon}_{GB}^j; j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c} \quad (6)$$

El tensor de la tasa de deformación ‘macroscópica’ asociada con el crecimiento por irradiación  $\dot{\varepsilon}^{(crec)}$ , se obtiene proyectando la tasa de la deformación cristalográfica  $\dot{\varepsilon}_{crec}^j$  a lo largo de los ejes principales del cristal, es decir

$$\dot{\varepsilon}_{kl}^{(crec)} = \sum_j \dot{\varepsilon}_{crec}^j b_k^j b_l^j; j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c}; k, l \equiv \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \quad (7)$$

donde,  $b_k^j$  y  $b_l^j$  son las componentes de  $\mathbf{b}^j$  a lo largo de la  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{l}$  dirección de los ejes del cristal, respectivamente.

La presencia de tensiones externas puede conducir a creep en los granos, en adición al crecimiento bajo irradiación. Sin embargo, el crecimiento de un grano puede verse limitado por un grano vecino generando tensiones internas incluso en ausencia de tensiones externas aplicadas. Estas tensiones internas pueden inducir al creep, por lo tanto, es esencial tener en cuenta creep a nivel del conjunto de policristales. En este trabajo se utiliza un modelo cristalográfico de creep bajo irradiación inspirado en Ehrlich (1981) utilizado para describir la deformación por creep y swelling de aceros bajo irradiación, pero omitiendo el termino de swelling en este caso.

Esta ley de creep bajo irradiación asume que la tasa de deformación por creep tiene una dependencia lineal con la tensión aplicada y la tasa de la dosis de irradiación

$$\dot{\varepsilon}^{creep} = B_0 \sigma \frac{d\phi}{dt} \quad (8)$$

donde,  $\sigma$  es la tensión efectiva,  $B_0$  es el creep compliance por irradiación y  $\frac{d\phi}{dt}$  es la tasa de dosis de irradiación (en  $dpa^{-1}$ ). En el marco de la plasticidad cristalina se asume una ley para representar la tasa de cizallamiento asociada al nivel de los sistemas de deslizamiento

$$\dot{\gamma}_{creep}^j = B \frac{\rho_d^j}{\rho_{ref}} \tau^j \frac{d\phi}{dt} \quad (9)$$

donde,  $\tau^j$  es la tensión de corte resuelta sobre el sistema de deslizamiento  $j$ ,  $B$  es el creep compliance cristalográfico bajo irradiación, y  $\rho_{ref}$  es una densidad de referencia de dislocaciones lineales.

La tasa de tensión de corte cristalográfica está en función de la tensión de corte resuelta  $\tau^j$ , y de la densidad lineal de dislocaciones  $\rho_d^j$  que deslizan sobre el sistema  $j$ . Únicamente las dislocaciones lineales glissile son activadas por la tensión de corte resuelta  $\tau^j$  y no así los lazos de dislocaciones sessile.

## 2.2 Modelo Policristalino

En este trabajo se utiliza el modelo policristalino visco plástico auto consistente (VPSC) desarrollado por Lebensohn y Tomé (1993), que tiene implementado las ecuaciones constitutivas de creep y crecimiento bajo irradiación a nivel del grano discutidos anteriormente, teniendo en cuenta la textura, la interacción inter granular y la forma del grano.

Dentro de VPSC, el agregado (policristal) es representado por un conjunto discreto de cristales con orientaciones individuales (granos), a las que se le asigna una fracción de volumen

para reproducir la textura medida. La respuesta y propiedades del agregado se obtienen promediando la respuesta y propiedades de los granos constituyentes individuales. El modelo VPSC permite seguir la evolución incremental del estado de tensiones, deformaciones, las orientaciones de los cristales, la actividad de los sistemas de deslizamiento de cada grano, densidad de dislocaciones de cada sistema de deslizamiento, etc.

El modelo de VPSC trata a cada grano como una inclusión elipsoidal embebida en un medio efectivo visco plástico, ambos, inclusión y medio poseen propiedades anisotrópicas. El medio efectivo representa el entorno promedio visto por cada grano.

Cuando se somete el medio efectivo a tensión, deformación o irradiación, ocurre una interacción entre el medio efectivo y el grano (inclusión embebida), generando tensiones locales entre el medio y la inclusión. Las tensiones, que resultan de resolver las ecuaciones de equilibrio, son uniformes dentro de la inclusión, pero se desvían respecto de la tensión promedio del medio dependiendo de las propiedades relativas y de la tendencia de deformación entre el medio y la inclusión.

El deslizamiento y el trepado de las dislocaciones inducen deformaciones plásticas de cizallamiento y no resultan dilataciones volumétricas. Se denota  $\mathbf{n}^s$  a la normal al plano de deslizamiento, y  $\mathbf{b}^s$  a la dirección de corte (vector de Burger) sobre el sistema de deslizamiento  $s$ . La tensión de corte resuelta sobre el plano de corte y a lo largo de la dirección de corte asociado con el tensor de tensiones  $\sigma_{ij}^c$  que actúa sobre el grano está dado por

$$\tau^s = b_i^s n_j^s \sigma_{ij}^c = m_{ij}^s \sigma_{ij}^c \quad (10)$$

donde, el tensor de Schmid  $m_{ij}^s = \frac{1}{2}(b_i^s n_j^s + b_j^s n_i^s)$ , proyecta la tensión aplicada sobre el plano de corte a lo largo de la dirección de corte.

La tasa del tensor de deformaciones asociado con la tasa de tensión de corte debido a creep bajo irradiación,  $\dot{\gamma}_{creep}^s$  (ver Ec. (9)) en el sistema  $s$  es

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{(creep)} = \sum_s m_{ij}^s \dot{\gamma}_{creep}^s \quad (11)$$

Agregando las contribuciones debidas a creep y al crecimiento bajo irradiación (ver Ec. (7) y (11)), la tasa de deformación total en el grano es

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^{(crec)} + \dot{\epsilon}_{ij}^{(creep)} \quad (12)$$

Para la respuesta del medio efectivo (policristal), se usa la linealización tangente

$$\bar{\dot{\epsilon}}_{ij} = \bar{M}_{ijkl} \bar{\sigma}_{kl} + \bar{\dot{\epsilon}}_{ij}^0 \quad (13)$$

donde,  $\bar{\dot{\epsilon}}_{ij}$  y  $\bar{\sigma}_{kl}$  son las magnitudes promedio (macroscópica), y  $\bar{M}_{ijkl}$  y  $\bar{\dot{\epsilon}}_{ij}^0$  son el creep compliance macroscópico y la tasa de deformación macroscópica debida al crecimiento, respectivamente.

El crecimiento bajo irradiación del policristal puede ocurrir en ausencia de tensiones externas aplicadas, pero como se mencionó anteriormente, las tensiones internas en los granos son inducidas por el crecimiento bajo irradiación de los granos. La resolución de la interacción entre el medio efectivo y la inclusión conduce a una “ecuación de interacción” que relaciona la tensión y la tasa de deformación de la inclusión con la tensión y la tasa de deformación promedio del medio efectivo a través de un tensor de interacción  $\tilde{M}$

$$(\dot{\epsilon}_{ij} - \bar{\dot{\epsilon}}_{ij}) = -\tilde{M}_{ijkl} (\sigma_{kl} - \bar{\sigma}_{kl}) \quad (14)$$

donde,

$$\tilde{M}_{ijkl} = (I - S)_{ijmn}^{-1} S_{mnpq} \bar{M}_{pqkl} \quad (15)$$

donde  $\mathbf{S}$  es el tensor visco plástico de Eshelby. La Ec. (14) indica que la tensión y la tasa de deformación entre la inclusión y el medio efectivo difieren.

El módulo macroscópico  $\bar{M}_{ijkl}$  y  $\bar{\varepsilon}_{ij}^0$  son desconocidos a priori, y deben ser calculados de manera autoconsistente mediante la condición de que la tensión y la tasa de deformación promediada sobre todos los granos debe ser igual a la tensión y a la tasa de deformación del medio efectivo, es decir

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \langle \varepsilon_{ij}^c \rangle; \bar{\sigma}_{kl} = \langle \sigma_{kl}^c \rangle \quad (16)$$

El modelo policristalino auto consistente descrito anteriormente ha sido utilizado por [Tomé et al. \(1996\)](#), [Turner et al. \(1999\)](#), [Turner y Tomé \(1993\)](#) y [Tomé et al. \(1993\)](#) para modelar el creep y crecimiento bajo irradiación para policristales con estructura hexagonal. La diferencia con el presente trabajo es que, en los trabajos mencionados anteriormente, el creep y crecimiento bajo irradiación se asumen constantes y no evolucionan con la irradiación.

### 2.3 Interfaz VPSC-FE

En este trabajo, la respuesta constitutiva del material en el software de elemento finito (FE) [Code Aster](#) es provisto por VPSC, donde cada punto de integración de Gauss de la malla es un agregado policristalino con su respectiva textura asociada.

VPSC resuelve las condiciones de borde locales impuestas por la interfaz entre VPSC y FE (referido como Interfaz VPSC-FE desde ahora) y comunica a FE el estado deformado del punto de Gauss (tensión y deformación), que posteriormente FE resuelve el equilibrio global de la deformación de la malla. Otros autores han realizado e implementado la interfaz VPSC-FE con el software de elementos finitos ABAQUS a través del uso de una subrutina de usuario UMAT (User MATerial) [Segurado et al. \(2012\)](#), [Knezevic et al. \(2013\)](#), [Patra et al. \(2017\)](#). Además, otro Software de elementos finitos BISON fue utilizado para la implementación de VPSC-FE [Liu et al. \(2015\)](#). En este trabajo se siguen los lineamientos de [Segurado et al. \(2012\)](#) para la interfaz VPSC-FE, cabe aclarar que VPSC Stand Alone (VPSC-SA) únicamente resuelve el estado de deformación visco plástica correspondiente al estado de tensiones (o viceversa) y no calcula la deformación elástica. La interfaz VPSC-FE tiene en cuenta la componente de deformación elástica macroscópica además de la componente visco plástica, note también que VPSC calcula la respuesta del agregado en el sistema de coordenadas local (material), que luego se rota el estado de tensiones y la matriz tangente requerida al sistema de coordenadas global (nivel del componente) para los cálculos de FE.

Se propone una descomposición aditiva del incremento de deformación  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$ , en una componente elástica  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^e$ , y una componente visco plástica  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$  tal que,  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^e + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$ . El incremento de la tensión,  $\Delta \boldsymbol{\sigma}$ , que corresponde al incremento de la deformación  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$  puede ser utilizado para estimar la componente de deformación elástica, es decir,  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^e = \mathbf{C}^{-1} : \Delta \boldsymbol{\sigma}$ , donde  $\mathbf{C}$  es el tensor de rigidez del agregado policristalino calculado por VPSC al comienzo de cada incremento de deformación. El incremento de deformación visco plástica,  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$  depende del estado de tensiones  $\boldsymbol{\sigma}$  (y no del incremento de tensión  $\Delta \boldsymbol{\sigma}$ ) y de la evolución de variables internas del modelo constitutivo, es decir, de las orientaciones de los cristales, morfología de los granos y de la ley de endurecimiento de cada grano.

El código FE llama a la interfaz VPSC-FE con una estimación del incremento de deformación,  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{FE}$ , un incremento temporal  $\Delta t$  y un incremento debido a rotación rígida  $\Delta \mathbf{R}_{FE}$  [Nolan et al. \(2022\)](#). La interfaz VPSC-FE rota las magnitudes de tensión y deformación para calcular en el sistema de coordenadas local (donde se representa la textura del material) y luego

utilizar el esquema iterativo de Newton-Raphson, es decir

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^* = \mathbf{R}^{t+\Delta t} \Delta \boldsymbol{\varepsilon} (\mathbf{R}^{t+\Delta t})^T \quad (17)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \mathbf{R}^{t+\Delta t} \boldsymbol{\sigma} (\mathbf{R}^{t+\Delta t})^T \quad (18)$$

donde el tensor de rotación se define  $\mathbf{R}^{t+\Delta t} = \Delta \mathbf{R}_{FE} \cdot \mathbf{R}^t$ , aquí  $\mathbf{R}^t$  es la rotación total al final del instante  $t$ . En adelante el símbolo “\*” denota las magnitudes expresadas en el sistema local.

Partiendo que la deformación total se acomoda elásticamente, se calcula el estado de tensión de prueba correspondiente

$$\Delta \boldsymbol{\sigma}^* = \mathbf{C} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{e*} \quad (19)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{t+\Delta t*} = \boldsymbol{\sigma}^{t*} + \Delta \boldsymbol{\sigma}^* \quad (20)$$

dado que  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{e*} = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^* - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{vp*}$ , reemplazando en Ec. (19) y luego en Ec. (20)

$$\boldsymbol{\sigma}^{t+\Delta t*} = \boldsymbol{\sigma}^{t*} + \mathbf{C} : (\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^* - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{vp*}) \quad (21)$$

donde los superíndices refieren al respectivo incremento de tiempo. VPSC es llamado con el estado de tensiones  $\boldsymbol{\sigma}^{t+\Delta t*}$  para calcular la correspondiente tasa de deformación visco plástica  $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp*}$ , además, la interfaz VPSC-FE calcula el residuo entre  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^*$  y  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{FE}^*$  es decir

$$\mathbf{X}(\Delta \boldsymbol{\sigma}^*) = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^* - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{FE}^* = \mathbf{C}^{-1} : \Delta \boldsymbol{\sigma}^* + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp*} \Delta t - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{FE}^* \quad (22)$$

Si el criterio de convergencia (descrito en la siguiente ecuación) no es satisfecho en la iteración  $k$ , el incremento de la tensión de prueba para la iteración  $k + 1$  es calculado como

$$(\Delta \boldsymbol{\sigma}^*)_{k+1} = (\Delta \boldsymbol{\sigma}^*)_k - \mathbf{J}_{NR}^{*-1}((\Delta \boldsymbol{\sigma}^*)_k) : \mathbf{X}((\Delta \boldsymbol{\sigma}^*)_k) \quad (23)$$

donde,  $\mathbf{J}_{NR}$  es el jacobiano del método de Newton Raphson y está dado por

$$\mathbf{J}_{NR}^*(\Delta \boldsymbol{\sigma}^*) = \frac{\partial \mathbf{X}(\Delta \boldsymbol{\sigma}^*)}{\partial (\Delta \boldsymbol{\sigma}^*)} = \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{M} \Delta t \quad (24)$$

donde,  $\mathbf{M}$  es el módulo tangente visco plástico calculado por VPSC como parte de los cálculos auto consistentes.

Nótese que FE calcula todas las magnitudes en el sistema de coordenadas global, por lo que la interfaz VPSC-FE rota el estado de tensiones  $\boldsymbol{\sigma}^{t+\Delta t*}$  y la matriz tangente consistente requerida por FE  $\mathbf{C}^{*tg} = \mathbf{J}_{NR}^{-1*}$ , para el calculo del incremento de deformación para el siguiente paso de tiempo, es decir

$$\boldsymbol{\sigma}^{t+\Delta t} = (\mathbf{R}^{t+\Delta t})^T \boldsymbol{\sigma}^{t+\Delta t*} \mathbf{R}^{t+\Delta t} \quad (25)$$

$$\mathbf{C}^{tg} = (\mathbf{R}^{t+\Delta t})^T \mathbf{C}^{*tg} \mathbf{R}^{t+\Delta t} \quad (26)$$

El algoritmo para la interfaz entre VPSC y FE se resume en la [Figura 1](#).

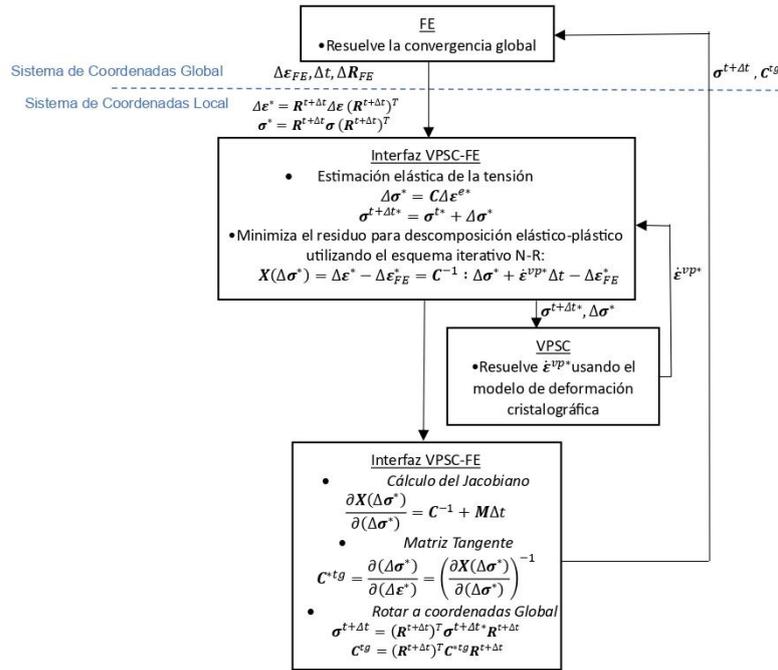


Figura 1: Algoritmo de la interfaz entre VPSC y el código FE.

### 3 DETALLES DE LA SIMULACIÓN

#### 3.1 Configuración de la simulación

La Figura 2 muestra la geometría y malla de un cuarto de tubo de revestimiento. El tubo de revestimiento tiene diámetro exterior de  $9.5 \text{ mm}$  y diámetro interior  $8.357 \text{ mm}$  con longitud  $38 \text{ mm}$ . El tubo dentro de la grilla espaciadora constituye el elemento combustible y representan la configuración de celda unitaria que se repite cada  $38 \text{ mm}$ . La geometría fue mallada con 50 elementos hexaédricos de 8 puntos de integración cada elemento, 10 elementos axiales y 5 elementos circunferenciales. Como condiciones de borde mecánicas, se utilizaron restricciones axisimétricas tal que las aristas paralelas al eje axial del tubo están restringidas en las direcciones  $X$  e  $Y$ , respectivamente. Un extremo del tubo está restringido a lo largo de la dirección axial  $Z$ , mientras que el otro extremo se deja libre para permitir el crecimiento axial, además, se restringen en todos los grados de libertad en cuatro nodos en la mitad de la circunferencia correspondiente al extremo que posee restricción en  $Z$  para evitar rotaciones de cuerpo rígido (véase la Figura 2).

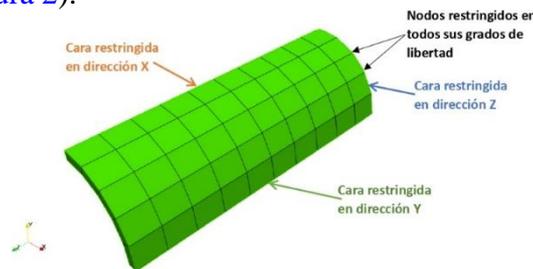


Figura 2: Malla y condiciones de Borde para un cuarto de tubo de Revestimiento.

### 3.2 Textura representativa del Tubo de Revestimiento

Las simulaciones por elementos finitos requieren de mucho recurso computacional, particularmente cuando los cálculos para la respuesta del material se efectúan a nivel del grano mediante VPSC. Una estrategia para minimizar el costo computacional es representar la textura utilizando el mínimo número de orientaciones cristalográficas (granos) que predigan la misma respuesta mecánica del agregado que se obtendría si se utilizara el total de las orientaciones medidas. En consecuencia, se toma la textura reducida de Liu et al. (2014) (véase la Figura 3), considerando que los factores de Kern sean los mismos que los factores de Kern de la textura completa.

Los factores de Kern se definen como el promedio de la proyección de los ejes-c (cosenos directores) de los granos que definen el policristal, es decir

$$F_i = \sum_g w^g (r_i^g)^2 \quad (27)$$

donde,  $w^g$  es el peso y  $r_i^g$  es el coseno director del eje-c de la  $i^{th}$  componente de la  $g^{th}$  orientación. El uso de reducción de textura y la evaluación de la respuesta del policristal en condiciones de creep bajo irradiación, fueron discutidos en detalles en Lhuillier y Tome (1995). Los factores de Kern para la respectiva textura son  $F_{tang} = 0.4244$ ,  $F_{rad} = 0.5472$  y  $F_{axial} = 0.0284$ .

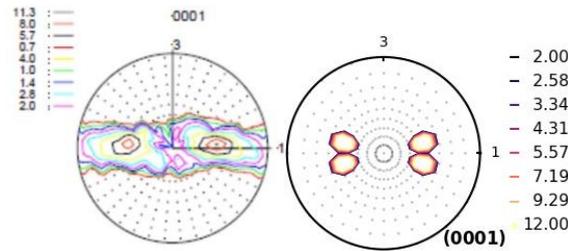


Figura 3: Representación de la textura del tubo de revestimiento utilizando diferentes números de orientaciones, la imagen de la izquierda es representada por 1944 granos (imagen tomada de Liu et al. (2014)), la imagen de la derecha es representada por 4 granos (textura reducida). La dirección 1 representa la Dirección Tangencial, la dirección 2 representa la dirección Radial, mientras que la dirección 3 representa la dirección Axial.

### 3.3 Caso de Referencia

Para validar el acople de la interfaz VPSC-FE, se simula creep y crecimiento bajo irradiación al cuarto de tubo de revestimiento mostrado en la sección 3.1 y se utiliza la textura reducida mencionada en la sección 3.2. Los parámetros materiales utilizados fueron tomados de Patra et al. (2017) dados en la Tabla 1.

Parámetros	Valor	Significado
$C_{11}, C_{22}, C_{33}, C_{12}, C_{13}, C_{23}, C_{44}, C_{55}, C_{66}$	143.5, 143.5, 164.9, 72.5, 65.4, 65.4, 32.1, 32.1, 35.5	Constantes Elásticas en GPa. Valores tomados de Simmons y Wang (1971) y Kocks et al. (2000)
$f_r$	0.97	Fracción de defectos puntuales que recombinan durante la cascada
$f_{ic}$	0.13	Fracción de intersticiales que forman clústeres
$B$	$5.0 \times 10^{-5} \text{ Mpa} \cdot \text{dpa}^{-1}$	Cte Creep Compliant Cristalografico
$\rho_{ref}$	$2.26 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$	Factor de peso para densidad de

		dislocaciones lineales en el modelo de Creep
$b^j, j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	$3.0 \times 10^{-10} \text{ m}$	Magnitud del vector de Burger a lo largo de la dirección prismática
$b^j, j \equiv \mathbf{c}$	$5.0 \times 10^{-10} \text{ m}$	Magnitud del vector de Burger a lo largo de la dirección basal

Tabla 1: Parámetros para el modelo para Zircaloy-2.

El tubo fue irradiado a una tasa de  $10^{-7} \text{ dpa} \cdot \text{s}^{-1}$  hasta alcanzar  $20 \text{ dpa}$  en 480 pasos de tiempo, con una presión interna lo suficientemente “pequeña” para correr el programa y considerar carga externa nula, de esta manera es posible observar el fenómeno de crecimiento bajo irradiación solamente.

En la [Figura 4](#) se muestra la distribución espacial de las deformaciones luego de  $20 \text{ dpa}$ , las imágenes mostradas, de izquierda a derecha, corresponden a direcciones Radial, Tangencial y Axial del tubo de revestimiento.

La concentración de deformaciones cerca del medio de la circunferencia del extremo derecho del tubo se debe a los 4 nodos que tienen restringidos todos sus grados de libertad. Se observa una distribución homogénea a lo largo de la circunferencia y longitud del tubo, como era de esperarse dadas las condiciones bajo irradiación, la simetría del tubo y la ausencia de cargas externas. El tubo exhibe deformación por crecimiento negativo a lo largo de las direcciones Radial y Tangencial, mientras exhibe deformación por crecimiento positivo a lo largo de la dirección Axial, esto es una consecuencia de la textura del tubo el cual ha sido laminado a lo largo de la dirección Axial.

Con fines comparativos, se toma un punto de Gauss del medio de la longitud Axial de la malla del tubo y se compara la evolución temporal de las deformaciones predichas por VPSC-FE (Finite Element) y VPSC-SA (Stand Alone) (véase la [Figura 5 \(a\)](#)), donde se muestra la evolución de deformaciones Radial, Tangencial y Axial como función de la dosis de irradiación para el punto de Gauss seleccionado comparado con VPSC-SA. No hay cargas Axiales aplicadas en este caso. Se observa que ambas predicciones (tanto VPSC-FE como VPSC-SA) muestran buena concordancia.

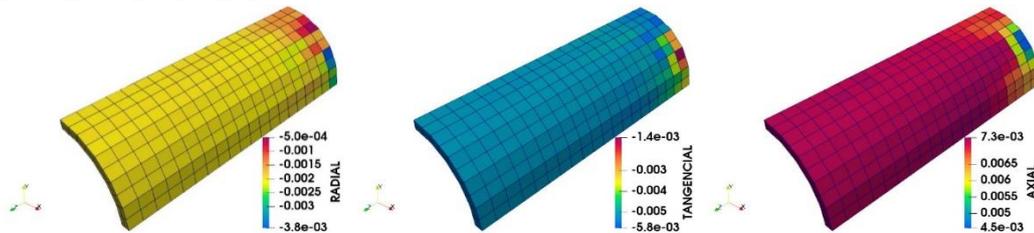


Figura 4: Distribución de deformaciones en Puntos de Gauss: Radial (izquierda), Tangencial (centro) y Axial (derecha) del tubo de revestimiento luego de irradiar 20 dpa.

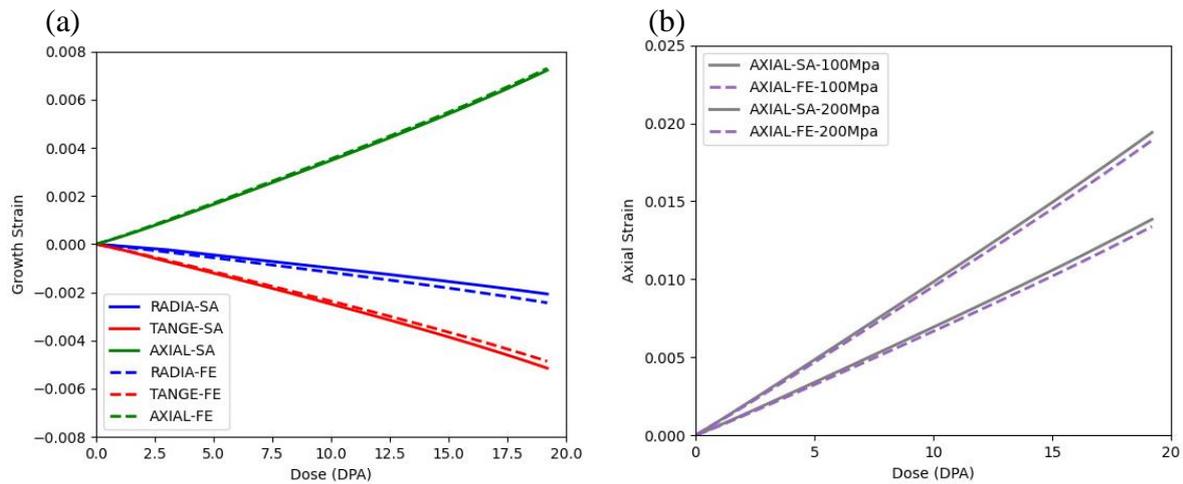


Figura 5: (a) Evolución de deformación por crecimiento bajo irradiación (En ausencia de cargas aplicadas), SA refiere a las predicciones de VPSC-Stand Alone mientras que FE refiere a las predicciones de VPSC-Finite Element. (b) Evolución de deformación Axial por creep bajo irradiación para 100Mpa y 200Mpa de carga aplicada respectivamente, SA refiere a las predicciones de VPSC-Stand Alone mientras que FE refiere a las predicciones de VPSC-Finite Element.

Para verificar la predicción de creep bajo irradiación, se realiza una comparación similar entre las predicciones vistas anteriormente de VPSC-FE y VPSC-SA, pero con la aplicación de distintas cargas Axiales. Se muestran en la [Figura 5 \(b\)](#) la comparación de la deformación Axial entre VPSC-FE (mismo punto de Gauss que el caso anterior) y VPSC-SA para las cargas axiales de 100Mpa y 200Mpa, respectivamente. Dado que la componente de deformación debido a crecimiento bajo irradiación no depende de la tensión aplicada, la deformación resultante luego de aplicar una carga Axial será debido a la componente de creep bajo irradiación.

Figura 6: Evolución de deformación Axial por creep bajo irradiación para 100Mpa y 200Mpa de carga aplicada respectivamente, SA refiere a las predicciones de VPSC-Stand Alone mientras que FE refiere a las predicciones de VPSC-Finite Element.

### 3.4 Efecto de la Textura en Crecimiento Bajo irradiación

En la [Figura 6 \(a\)](#), en el marco de FE, se compara las predicciones de las deformaciones debido a crecimiento bajo irradiación para el material Zrly-2 (utilizando la textura reducida presentada en la sección 3.2) y para un material de textura aleatoria con 200 granos (véase la [Figura 6 \(b\)](#)) por policristal (punto de integración). Se utilizan los mismos parámetros de la [Tabla 1](#) para esta simulación.

Como era de esperarse, el material con textura de orientaciones aleatorias muestra deformación por crecimiento bajo irradiación nulo (excepto por la imperfección de las desviaciones numéricas asociadas a la distribución aleatoria), dado que el crecimiento individual de los granos se anula entre si a nivel del agregado. El material texturado (Zrly-2), en cambio, exhibe una deformación positiva por crecimiento bajo irradiación a lo largo de la dirección Axial y deformación negativa a lo largo de las direcciones Radial y Tangencial.

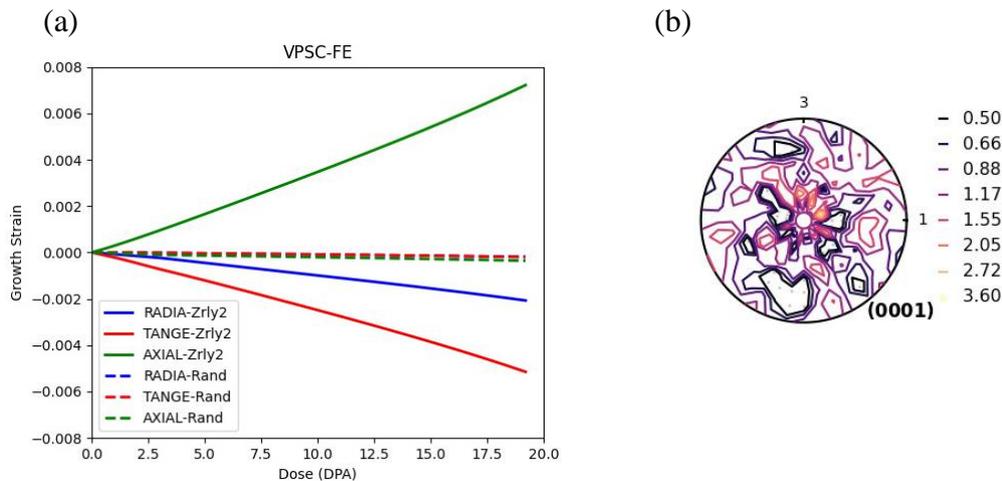


Figura 6: (a): Comparación de la predicción de deformación por crecimiento bajo irradiación para material con textura Zrly-2 vs material con textura aleatoria (Rand), ambas situaciones en FE. (b): distribución aleatoria de 200 granos (material sin textura).

### 3.5 Efecto de la Textura en Creep Bajo irradiación

En este ensayo se predice la deformación axial como función de la carga axial aplicada para dosis de irradiación hasta 20 *dpa*, en la Figura 7 se muestra la evolución de la deformación axial para un material con textura reducida de tubo de revestimiento (sección 3.2) y para un material con textura de distribución aleatoria (véase Figura 6 (b)).

Puede observarse que la deformación Axial aumenta con la aplicación de carga Axial en ambos materiales, esto es debido solamente a la contribución de creep bajo irradiación, dado que el fenómeno de crecimiento bajo irradiación no depende de la tensión aplicada. El modelo presentado de creep bajo irradiación (ver Ec. (9)) manifiesta un aumento lineal en función de la tensión de corte resuelta sobre los planos de deslizamiento.

Para la misma carga aplicada en ambos materiales, el material con textura de tubo de revestimiento presenta mayor deformación Axial respecto al material con textura aleatoria. Esto se debe a que posee mayor cantidad de planos prismáticos orientados en dirección Axial lo que favorece a mayor deformación en esa dirección.

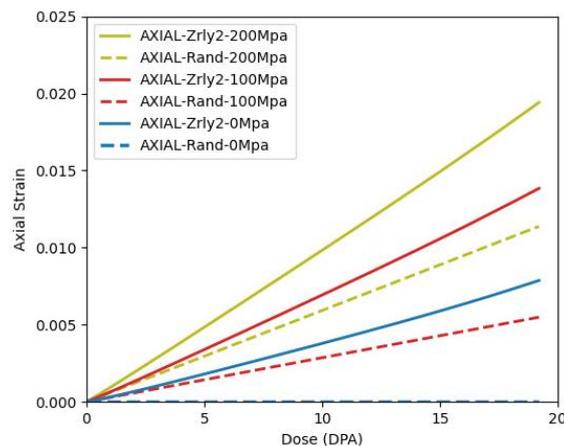


Figura 7: Efecto de carga Axial sobre la deformación Axial bajo irradiación para un material con textura de tubo de revestimiento (Zrly2) y para un material con textura de distribución aleatoria (Rand). Las líneas solidas representan la deformación para Zrly2, mientras que las líneas discontinuas representan la deformación para la textura Rand.

## 4 CONCLUSIONES

En este trabajo se logró la conexión de un marco de plasticidad policristalina que permite modelar los fenómenos de creep y crecimiento bajo irradiación con el código de elementos finitos Code Aster. Para ello, se desarrolló una interfaz VPSC-FE que permite calcular la deformación dependiente de la microestructura y la textura para cada punto de integración de la malla de FE.

Se verificó la funcionalidad de la interfaz entre VPSC-FE y Code Aster, mediante casos sencillos y se compararon los resultados de VPSC-FE y VPSC-SA. Además, se realizaron dos casos de demostración para remarcar el impacto y la importancia del efecto de la textura tanto para el fenómeno de crecimiento como para el fenómeno de creep bajo irradiación.

## AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se realizó gracias al código VPSC8 provisto por Carlos Tomé y a la supervisión y asesoramiento del director de mi tesis Javier Signorelli.

## REFERENCIAS

- Barashev A.V., Golubov S., and Stoller R.E., Theoretical investigation of microstructure evolution and deformation of zirconium under neutron irradiation.  
*J. Nucl. Mater.* 461 (2015), pp. 85–94.
- BISON Code Documentation, Idaho National Laboratory (July 2020)
- Brailsford A. D. y Bullough R., The rate theory of swelling due to void growth in irradiated metals.  
*J. Nucl. Mater.*, 44, 1972, pp. 121-135.
- Causey A.R., Woo C.H., Holt R.A., The effect of intergranular stress on the texture dependence of irradiation growth in zirconium alloys.  
*J. Nucl. Mater.* 159, 1988, pp. 225-236
- Code Aster Open Source, General FEA Software.
- Chung I., 2016, A study on the constitutive model of irradiated austenitic stainless steel for the functionality analysis of nuclear internals.  
*J Mech Sci Technol* 30, 1573-1580.
- Ehrlich, K., Irradiation creep and interrelation with swelling in austenitic stainless steels.  
*J. Nucl. Mater.* 100 (1–3) (1981), 149–166.
- Fidleris V., 1998. The irradiation creep and growth phenomena.  
*J. Nucl. Mater.* 159, 22-42.
- Franklin D.G., Lucas G.E., Bement A.L, Creep of zirconium alloys in nuclear reactors.  
*STP 815, ASTM, Philadelphia, PA, 1983.*
- Golubov S.I., Barashev A.V., and Stoller R.E., On the origin of radiation growth of hcp crystals.  
*ORNL/TM-2011/473, Oak Ridge, TN, ORNL/TM-2011/473, Oak Ridge National Laboratory, 2011.*
- Knezevic M., et al. 2013. Integration of self-consistent polycrystal plasticity with dislocation density based hardening laws within an implicit finite element framework: application to low-symmetry metals.  
*J. Mech. Phys. Solids* 61 (10), 2034-2046.
- Kocks, U.F., Tomé, C., Wenk, H.-R., 2000. Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties.  
*Cambridge University Press.*

- Lebensohn, R.A., Tomé, C.N., A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals: application to zirconium alloys.  
*Acta Metall. Mater.* (1993) 41(9),2611-2624.
- Lhuillier D., Tomé C, 1995. Modeling of irradiation and thermal creep of pressure tubes: 1. Texture reduction and interpolation.  
*Atomic Energy of Canada Ltd., COG-94-232 RC-1222.*
- Liu W., Montgomery R., Tomé C., Stanek C., Hales J. 2014. Demonstration of Atomistically-informed Multiscale Zr Alloy Deformation Models in Peregrine for Normal and Accident Scenarios.  
*CASL-U-2014-201-000*
- Liu W., Montgomery R., Tomé C., Stanek C., Hales J. 2015. VPSC implementation in the BISON-CASL code for modeling large deformation problems. In ANS MC2015 *Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercomputing in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method, Nashville, TN. Pp. 1-15.*
- Nolan D.R., Lally C., McGarry J.P., Understanding the deformation gradient in Abaqus and key guidelines for anisotropic hyperelastic user material subroutines (UMATs).  
*journal of the mechanical behavior of biomedical materials* 126 (2022) 104940.
- Norgett, M.J., Robinson, M.T., Torrens, I.M., 1975. A proposed method of calculating displacement dose rates.  
*Nucl. Eng. Des.* 33 (1), 50–54.
- Patra A., Tomé C. y Golubov S., Crystal plasticity modeling of irradiation growth in Zircaloy-2.  
*Philosophical Magazine*, 2017.
- Patra A., Tomé C. 2017. Finite element simulation of gap opening between cladding tube and spacer grid in a fuel rod assembly using crystallographic models of irradiation growth and creep.  
*Nuclear Engineering and Design* 315 (2017) 155-169.
- Segurado J., Lebensohn R.A, Llorca J., Tomé C. 2012. Multiscale modeling of plasticity based on embedding the viscoplastic self-consistent formulation in implicit finite elements.  
*Int. J. Plast.* 28 (1), 124-140.
- Simmons G., Wang H., 1971. Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties.  
*Cambridge University Press.*
- Singh, B.N., Eldrup, M., Zinkle, S.J., Golubov, S.I., 2002. On grain-size-dependent void swelling in pure copper irradiated with fission neutrons.  
*Philos. Mag. A* 82 (6),1137–1158.
- Tomé, C.N et al., 1996. Role of internal stresses in the transient of irradiation growth of Zircaloy-2.  
*J. Nucl. Mater.* 227 (3), 237-250.
- Tomé, C.N., So, C.B., Woo, C.H., 1993. Self-consistent calculation of steady-state creep and growth in textured zirconium.  
*Philos. Mag. A* 67 (4), 917–930.
- Turner, P.A., Tomé, C.N., 1993. Self-consistent modeling of visco-elastic polycrystals: application to irradiation creep and growth.  
*J. Mech. Phys. Solids* 41 (7), 1191–1211.
- Turner, P.A., Tomé, C.N., Christodoulou, N., Woo, C.H., 1999. A self-consistent model for polycrystals undergoing simultaneous irradiation and thermal creep. *Philos.Mag. A* 79 (10), 2505–2524.