

ALGORITMO DE RETORNO MAPEADO PARA PLASTICIDAD Y CREEP ACOPLADOS

Víctor D. Fachinotti, Alejandro E. Albanesi, Alberto Cardona

Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC), Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC), Universidad Nacional del Litoral (UNL)/ Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Predio CCT-CONICET Santa Fe, Ruta 168, Paraje El Pozo, 3000 Santa Fe, Argentina, vfachino@intec.unl.edu.ar, aalbanes@santafe-conicet.gov.ar, acardona@intec.unl.edu.ar, <http://www.cimec.org.ar>

Palabras clave: retorno mapeado, plasticidad, creep.

Resumen. Asumiendo pequeñas deformaciones, vale la descomposición aditiva de la deformación en una parte elástica (reversible) y otra inelástica (irreversible). La deformación inelástica consta de una parte plástica, que aparece rápidamente al aplicar la carga, y de una parte viscosa o de creep, que se desarrolla lentamente. Usualmente, se supone que ambas componentes se presentan en paralelo conformando la deformación viscoplástica, de acuerdo al modelo reológico de Bingham-Norton.

El modelo anterior asume que la recuperación por creep es despreciable. Si ese no fuera el caso, se hace necesario diferenciar entre la deformación plástica (instantánea) y el creep (lento) actuando esta vez en serie, dando lugar a sendos términos de la deformación inelástica. Ambos fenómenos están acoplados, impidiendo definir explícitamente una tensión de prueba a partir de la cual determinar si se ha producido o no incremento de la deformación plástica frente a un incremento de carga dado. Definimos entonces un estado de prueba asumiendo incremento plástico nulo, que difiere del estado elástico de prueba clásico (Simo y Hughes, *Computational Inelasticity*, Springer-Verlag, 1998) por admitir incremento de creep. La ecuación constitutiva para la tasa de creep da lugar a una ecuación escalar no lineal, generalmente sin solución analítica cerrada, para el incremento de creep. Resuelta ésta numéricamente, queda explícito el estado de prueba, del que se pueden deducir dos alternativas: 1) no se produjo incremento de la deformación plástica (en cuyo caso el estado de prueba es efectivamente la solución buscada); 2) debió producirse incremento de la deformación plástica, y por consiguiente la tensión no debe superar el valor instantáneo de fluencia. En este último caso, la condición de consistencia plástica y la ecuación constitutiva de la tasa de creep dan lugar a un sistema de dos ecuaciones escalares no lineales, generalmente sin solución analítica cerrada, con los incrementos de deformación plástica y de creep como incógnitas. Una vez resueltas (numéricamente), queda completamente determinado el nuevo estado de tensiones y deformaciones frente al incremento de carga dado.

Finalmente, se muestra su aplicación al modelado de Zircaloy-4, material usado en la vaina de barras de combustible nuclear.

1 INTRODUCCIÓN

En el pasado hemos desarrollado modelos plásticos y viscoplásticos (Huespe et al., 2000; Fachinotti, 2001; Fachinotti y Cardona, 2003) destinados específicamente a la representación del acero bajo las condiciones de colada continua. Estos modelos están basados en el modelo reológico de Bingham-Norton (Lemaître y Chaboche, 1994). En ellos, la deformación por creep es insoluble de la deformación plástica, conformando la deformación viscoplástica que a la sazón constituye la totalidad de la deformación inelástica. Estos modelos son capaces de cubrir la inmensa mayoría de comportamientos observados en metales a altas temperaturas.

Modelos alternativos distinguen la deformación por creep de la plástica, dando lugar a sendos términos de la deformación inelástica. Entre los pocos ejemplos aplicados a la colada continua de metales podemos citar a Bohemer et al. (1993) y los trabajos a que hacen referencia.

En el modelado de las barras de combustible nuclear usadas en centrales argentinas, Soba y Denis (2008) proponen modelos para los dos materiales involucrados (U_2O en el pellet, Zircaloy-4 en la vaina) donde el creep es tratado separadamente de la deformación plástica.

En pos de modelar barras combustibles usando los modelos propuestos por Soba y Denis (2008), desarrollamos en este trabajo un algoritmo de retorno mapeado para integrar la evolución de la deformación por creep y la deformación plástica.

2 COMPORTAMIENTO DE LOS MATERIALES DE UNA BARRA COMBUSTIBLE

2.1 Caracterización unidimensional

Consideremos la barra estudiada por Soba y Denis (2008), compuesta de un pellet de U_2O en una vaina de Zircaloy-4. Los modelos del comportamiento unidimensional de ambos materiales se detallan a continuación.

En la pastilla de U_2O , la evolución de la deformación por creep ε^{cr} puede calcularse en términos de la tensión σ y la temperatura (absoluta) T usando la expresión:

$$\dot{\varepsilon}^{cr} = \left[\frac{(a_1 + a_2 \dot{f})}{(a_3 + D)g^2} \exp \frac{-Q_1 R}{T} + a_7 \dot{f} \exp \frac{Q_3}{RT} \right] \sigma + \left[\frac{(a_1 + a_8 \dot{f})}{a_6 + D} \exp \frac{Q_2}{RT} \right] \sigma^{4.5} \quad (1)$$

donde a_i es constante, Q_i es la energía de activación, R es la constante universal de los gases, \dot{f} es la tasa de fisión, g es el tamaño de grano y D el porcentaje de la densidad teórica.

En la vaina de Zircaloy-4, la tasa de deformación por creep puede calcularse en términos del creep instantáneo ε^{cr} la tensión σ y la temperatura (absoluta) T usando la expresión:

$$\dot{\varepsilon}^{cr} = \frac{1}{\varepsilon^{cr}} \left[2k\phi \exp \frac{-Q_4}{RT} (\sigma + b \exp c\sigma) \right]^2 \quad (2)$$

donde k, b, c son constantes, Q_4 es la energía de activación, R es la constante universal de los gases y ϕ es el flujo neutrónico.

2.2 Caracterización tridimensional

Suponiendo que las deformaciones se mantienen pequeñas, vale la descomposición aditiva de la deformación total ε en un término elástico (reversible) ε^{el} y otro inelástico (irreversible) ε^{in} , es decir:

$$\varepsilon = \varepsilon^{el} + \varepsilon^{in} \quad (3)$$

A su vez, la deformación inelástica se supone compuesta de un término plástico instantáneo $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}}$ y otro por creep $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{cr}}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{in}} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{cr}} \quad (4)$$

Conocidas las componentes de la deformación, la tensión de Cauchy queda determinada por la ley de Hooke

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \text{dev}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} - \boldsymbol{\varepsilon}^0) + \kappa \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} - \boldsymbol{\varepsilon}^0)\mathbf{I} \quad (5)$$

donde el primero y el segundo término del lado derecho definen el desviador ($\mathbf{s} = \text{dev } \boldsymbol{\sigma}$) y la parte hidrostática o esférica de la tensión, respectivamente, μ es el módulo de corte, κ es el módulo de compresibilidad, ambas propiedades de cada material, \mathbf{I} es el tensor identidad de segundo rango, y $\boldsymbol{\varepsilon}^0$ engloba la deformación térmica $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}$ junto a otras formas propias de barras combustibles como las deformaciones por hinchamiento $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{sw}}$ y por densificación $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{d}}$ en el pellet, y el crecimiento por irradiación $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ig}}$ en la vaina, o sea:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^0 = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{sw}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{d}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ig}} \quad (6)$$

Cabe remarcar que $\boldsymbol{\varepsilon}^0$ no es en general isotrópico. Soba y Denis (2008) consideran isotrópicos los tensores $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{sw}}$, $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{d}}$ (presentes sólo en el pellet) y $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}$, y no isotrópico al tensor $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ig}}$ (presente sólo en la vaina).

2.3 Evolución de la deformación inelástica

Las componentes de deformación inelástica evolucionan siguiendo sus propias reglas de flujo, que supondremos asociativas, y por ende definidas por la ley de la normalidad, como es común en el estudio de deformación de metales.

La deformación plástica evoluciona según la ley

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{pl}} = \lambda \mathbf{n} \quad (7)$$

donde \mathbf{n} es un vector unitario en la dirección de $\mathbf{s} = \text{dev } \boldsymbol{\sigma}$ y λ es el parámetro de consistencia plástica que satisface las condiciones de Kuhn-Tucker:

$$\lambda \geq 0, \quad f \leq 0, \quad \lambda \dot{f} = 0 \quad (8)$$

donde f es la función de fluencia definida aquí según el criterio de Von Mises:

$$f = \sigma_{\text{eq}} - \sigma_Y - R \quad (9)$$

donde $\sigma_{\text{eq}} = \sqrt{3/2} \|\mathbf{s}\|$ es la tensión equivalente de Von Mises y $\sigma_Y + R$ es la tensión de fluencia, suma de la tensión inicial de fluencia σ_Y y el término de endurecimiento isotrópico $R = R(\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{eq}}^{\text{pl}})$, función de la deformación plástica equivalente acumulada hasta el instante t :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{eq}}^{\text{pl}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \int_0^t \|\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{pl}}\| d\tau \quad (10)$$

Por su parte, la ley de evolución de la deformación por creep en un espacio tridimensional generaliza las leyes unidimensionales (1) y (2) para el pellet y la vaina, respectivamente, mediante la expresión:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{cr}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{cr}} \mathbf{n} \quad (11)$$

Esta generalización requiere asimilar las medidas σ y ε^{cr} en las ecuaciones unidimensionales (1) y (2) con la tensión equivalente σ_{eq} y la deformación por creep equivalente $\varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}}$ acumulada hasta el instante t :

$$\varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \int_0^t \|\dot{\varepsilon}^{\text{cr}}\| d\tau \quad (12)$$

3 ALGORITMO DE RETORNO MAPEADO

Conocidas las deformaciones $\varepsilon_n^{\text{pl}}$, $\varepsilon_{\text{eq}_n}^{\text{pl}}$, $\varepsilon_n^{\text{cr}}$ y $\varepsilon_{\text{eq}_n}^{\text{cr}}$ al instante t_n , sus valores al instante $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ sea aproximados usando el esquema de integración temporal implícito de Euler hacia atrás:

$$\varepsilon_{n+1}^{\text{pl}} = \varepsilon_n^{\text{pl}} + \lambda_{n+1} \mathbf{n}_{n+1} \Delta t \quad (13)$$

$$\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}} = \varepsilon_{\text{eq}_n}^{\text{pl}} + \sqrt{\frac{2}{3}} \lambda_{n+1} \Delta t \quad (14)$$

$$\varepsilon_{n+1}^{\text{cr}} = \varepsilon_n^{\text{cr}} + \sqrt{\frac{3}{2}} \dot{\varepsilon}_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{cr}} \mathbf{n}_{n+1} \Delta t \quad (15)$$

$$\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{cr}} = \varepsilon_{\text{eq}_n}^{\text{cr}} + \dot{\varepsilon}_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{cr}} \Delta t \quad (16)$$

donde el subíndice refiere al instante de evaluación. Nótese que los incrementos de deformación inelástica son puramente desviadores.

La tensión desviadora al instante t resulta

$$\mathbf{s}_{n+1} = \|\mathbf{s}_{n+1}\| \mathbf{n}_{n+1} = 2\mu \text{dev}(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_{n+1}^{\text{in}} - \varepsilon_{n+1}^0) \quad (17)$$

Se define el estado de prueba como aquél que se obtendría congelando la deformación plástica en el paso de tiempo $[t_n, t_{n+1}]$, es decir, suponiendo $\lambda_{n+1} = 0$ de forma que $\varepsilon_{n+1}^{\text{pl}} = \varepsilon_n^{\text{pl}}$ y $\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}} = \varepsilon_{\text{eq}_n}^{\text{pl}}$. Sean $\varepsilon^{\text{cr,pr}}$ la deformación de creep y $\varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr,pr}}$ la deformación de creep equivalente acumulada hasta el instante t asociadas al estado de prueba. El desviador de tensiones de prueba resulta

$$\begin{aligned} \mathbf{s}^{\text{pr}} &= 2\mu \text{dev}(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n^{\text{pl}} - \varepsilon^{\text{cr,pr}} - \varepsilon_{n+1}^0) \\ &= 2\mu \text{dev}(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n^{\text{pl}} - \varepsilon_n^{\text{cr}} - \varepsilon_{n+1}^0) - 2\mu (\varepsilon^{\text{cr,pr}} - \varepsilon_n^{\text{cr}}) \\ &= \mathbf{s}^{\text{el}} - \sqrt{6}\mu \dot{\varepsilon}_{\text{eq}}^{\text{cr,pr}} \Delta t \mathbf{n}_{n+1} \end{aligned} \quad (18)$$

donde \mathbf{s}^{el} es el estado ficticio resultante de asumir que el incremento de deformación en el paso de tiempo $[t_n, t_{n+1}]$ ha sido completamente elástico. Nótese que \mathbf{s}_{n+1} , \mathbf{s}^{pr} y \mathbf{s}^{el} son colineales, esto es:

$$\mathbf{n}_{n+1} = \frac{\mathbf{s}_{n+1}}{\|\mathbf{s}_{n+1}\|} = \frac{\mathbf{s}^{\text{pr}}}{\|\mathbf{s}^{\text{pr}}\|} = \frac{\mathbf{s}^{\text{el}}}{\|\mathbf{s}^{\text{el}}\|} \quad (19)$$

Luego, la ecuación (18) toma la forma escalar:

$$\sigma_{\text{eq}}^{\text{pr}} = \sigma_{\text{eq}}^{\text{el}} - 3\mu \dot{\varepsilon}_{\text{eq}}^{\text{cr,pr}} \Delta t \quad (20)$$

Observando las leyes (1) y (2) que definen el creep en el pellet y la vaina, respectivamente, vemos que la tasa de deformación por creep depende en general de la tensión equivalente σ_{eq} y de la deformación por creep equivalente acumulada ε_{eq}^{cr} , o sea:

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{cr} = g(\sigma_{eq}, \varepsilon_{eq}^{cr}) \quad (21)$$

Ahora, la ecuación (16) da lugar a la siguiente ecuación escalar no lineal para la incógnita $\varepsilon_{eq_{n+1}}^{cr,pr}$:

$$F_1(\varepsilon_{eq}^{cr,pr}) = \varepsilon_{eq}^{cr,pr} - \varepsilon_{eq_n}^{cr} - g(\sigma_{eq}^{el} - 3\mu(\varepsilon_{eq}^{cr,pr} - \varepsilon_{eq_n}^{cr}), \varepsilon_{eq}^{cr,pr})\Delta t = 0 \quad (22)$$

Conocida $\varepsilon_{eq}^{cr,pr}$, calculamos σ_{eq}^{pr} usando la ecuación (20) y luego:

$$f^{pr} \equiv f(\sigma_{eq}^{pr}) = \sigma_{eq}^{pr} - \sigma_Y - R(\varepsilon_{eq_n}^{pl}) \quad (23)$$

Dado que la tensión de fluencia es convexa en el espacio de desviadores de tensión, puede probarse que

$$f_{n+1} \equiv f(\sigma_{eq_{n+1}}) \leq f^{pr} \quad (24)$$

En base al signo de f^{pr} , podemos distinguir los dos casos descritos a continuación.

3.1 Paso sin incremento plástico

Si $f^{pr} < 0$ entonces $f_{n+1} < 0$, es decir que no se produce incremento de la deformación plástica en el paso $[t_n, t_{n+1}]$ (esto es, $\lambda_{n+1} = 0$), en cuyo caso el estado de prueba es la solución buscada:

$$\mathbf{s}_{n+1} \equiv \mathbf{s}^{pr} \quad (25)$$

$$\varepsilon_{eq_{n+1}}^{cr} \equiv \varepsilon_{eq}^{cr,pr} \quad (26)$$

$$\varepsilon_{n+1}^{cr} = \varepsilon_n^{cr} + \sqrt{\frac{3}{2}}(\varepsilon_{eq}^{cr,pr} - \varepsilon_{eq_n}^{cr}) \quad (27)$$

$$\varepsilon_{n+1}^{pl} = \varepsilon_n^{pl} \quad (28)$$

$$\varepsilon_{eq_{n+1}}^{pl} \equiv \varepsilon_{eq_n}^{pl} \quad (29)$$

3.2 Paso con incremento plástico

Si $f_{n+1}^{pr} \geq 0$, entonces necesariamente $f_{n+1} = 0$, o sea

$$\sigma_{eq_{n+1}} = \sigma_Y + R(\varepsilon_{eq_{n+1}}^{pl}) \quad (30)$$

Rescribamos la ecuación (17) como

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_{n+1} &= 2\mu \operatorname{dev}(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_{n+1}^{pl} - \varepsilon_{n+1}^{cr} - \varepsilon_{n+1}^0) \\ &= 2\mu \operatorname{dev}(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n^{pl} - \varepsilon_n^{cr} - \varepsilon_{n+1}^0) - 2\mu(\varepsilon_{n+1}^{pl} - \varepsilon_n^{pl}) \\ &\quad - 2\mu(\varepsilon_{n+1}^{cr} - \varepsilon_n^{cr}) = \mathbf{s}^{el} - 2\mu\lambda_{n+1}\Delta t \mathbf{n}_{n+1} - \sqrt{6}\mu\varepsilon_{eq}^{cr}\Delta t \mathbf{n}_{n+1} \end{aligned} \quad (31)$$

Luego, en virtud de la co-linealidad de \mathbf{s}_{n+1} y \mathbf{s}^{el} , resulta:

$$\sigma_{\text{eq}_{n+1}} = \sigma_{\text{eq}}^{\text{el}} - 3\mu \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}} \Delta t - \sqrt{6}\mu \lambda_{n+1} \Delta t \quad (32)$$

Igualando las ecuaciones (30) y (32), llegamos a

$$\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{cr}} = \varepsilon_{\text{eq}_n}^{\text{cr}} + \varepsilon_{\text{eq}_n}^{\text{pl}} - \varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}} + \frac{1}{3\mu} \left[\sigma_{\text{eq}}^{\text{el}} - \sigma_Y - R(\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}}) \right] = \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}}(\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}}) \quad (33)$$

Ahora la ecuación (16) proporciona una ecuación escalar no lineal con $\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}}$ como única incógnita:

$$F_2(\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}}) = \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}}(\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}}) - \varepsilon_{\text{eq}_n}^{\text{cr}} - g(\sigma_Y + R(\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}}), \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}}(\varepsilon_{\text{eq}_{n+1}}^{\text{pl}})) \Delta t = 0 \quad (34)$$

3.3 Linealización

En adelante, eliminaremos los subíndices que denotan evaluación en el instante actual t_{n+1} para simplificar la notación. Debemos calcular

$$\frac{\partial s_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \|\mathbf{s}\| \frac{\partial n_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} + \frac{\partial \|\mathbf{s}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} n_{ij} \quad (35)$$

El primer término del lado derecho puede calcularse como

$$\frac{\partial n_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{kl}} \left(\frac{s_{ij}^{\text{el}}}{\|\mathbf{s}^{\text{el}}\|} \right) = \frac{1}{\|\mathbf{s}^{\text{el}}\|} \frac{\partial s_{ij}^{\text{el}}}{\partial \varepsilon_{kl}} - \frac{n_{ij}}{\|\mathbf{s}^{\text{el}}\|} \frac{\partial \|\mathbf{s}^{\text{el}}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (36)$$

Resta aquí calcular

$$\frac{\partial s_{ij}^{\text{el}}}{\partial \varepsilon_{kl}} = 2\mu \left[\frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right] = 2\mu I_{ijkl}^{\text{dev}} \quad (37)$$

$$\frac{\partial \|\mathbf{s}^{\text{el}}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} = n_{ij} \frac{\partial s_{ij}^{\text{el}}}{\partial \varepsilon_{kl}} = 2\mu I_{ijkl}^{\text{dev}} n_{ij} = 2\mu n_{kl} \quad (38)$$

Finalmente, la ecuación (36) puede escribirse como

$$\frac{\partial n_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{kl}} \left(\frac{s_{ij}^{\text{el}}}{\|\mathbf{s}^{\text{el}}\|} \right) = \frac{2\mu}{\|\mathbf{s}^{\text{el}}\|} (I_{ijkl}^{\text{dev}} - n_{ij} n_{kl}) \quad (39)$$

Para el cálculo del segundo término del lado derecho de la ecuación (35), falta calcular la derivada de $\|\mathbf{s}\|$ con respecto a las componentes ε_{kl} de deformación, para lo cual debemos distinguir nuevamente si se ha producido o no incremento de la deformación plástica en el paso de tiempo considerado.

3.3.1 Paso sin incremento plástico

Si $f^{\text{pr}} < 0$, resulta $\|\mathbf{s}\| \equiv \|\mathbf{s}^{\text{pr}}\|$, así que

$$\frac{\partial \|\mathbf{s}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} \equiv \frac{\partial \|\mathbf{s}^{\text{pr}}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial \|\mathbf{s}^{\text{el}}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} - \sqrt{6}\mu \frac{\partial \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}}}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (40)$$

Aquí resta calcular

$$\frac{\partial \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial g}{\partial \varepsilon_{kl}} \Delta t = \left[\left(\frac{\partial g}{\partial \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}}} - 3\mu \frac{\partial g}{\partial \sigma_{\text{eq}}} \right) \frac{\partial \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{cr}}}{\partial \varepsilon_{kl}} + \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\partial g}{\partial \sigma_{\text{eq}}} \frac{\partial \|\mathbf{s}^{\text{el}}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} \right] \Delta t \quad (41)$$

de donde

$$\frac{\partial \varepsilon_{eq}^{cr}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \theta \frac{\partial \|s^{el}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (42)$$

con

$$\theta = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\partial g}{\partial \sigma_{eq}} \Delta t \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \varepsilon_{eq}^{cr}} \Delta t + 3\mu \frac{\partial g}{\partial \sigma_{eq}} \Delta t \right)^{-1} \quad (43)$$

Finalmente, la ecuación (40) toma la forma

$$\frac{\partial \|s\|}{\partial \varepsilon_{kl}} = (1 - \sqrt{6}\mu\theta) \frac{\partial \|s^{el}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} = 2\mu\theta_1 n_{kl} \quad (44)$$

con

$$\theta_1 = 1 - \sqrt{6}\mu\theta = \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \varepsilon_{eq}^{cr}} \Delta t \right) \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \varepsilon_{eq}^{cr}} \Delta t + 3\mu \frac{\partial g}{\partial \sigma_{eq}} \Delta t \right)^{-1} \quad (45)$$

3.3.2 Paso con incremento plástico

Si $f^{pr} \geq 0$, resulta $\sigma_{eq} = \sigma_Y + R(\varepsilon_{eq}^{pl})$, así que

$$\frac{\partial \|s\|}{\partial \varepsilon_{kl}} \equiv \sqrt{\frac{2}{3}} R' \frac{\partial \varepsilon_{eq}^{pl}}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (46)$$

donde $R' = dR/d\varepsilon_{eq}^{pl}$.

Por otro lado, de la ecuación (33), resulta

$$\frac{\partial \varepsilon_{eq}^{cr}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{1}{\sqrt{6}\mu} \frac{\partial \|s^{el}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} - \left(1 + \frac{R'}{3\mu} \right) \frac{\partial \varepsilon_{eq}^{pl}}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (47)$$

A su vez, de la ecuación (34) se obtiene

$$\frac{\partial \varepsilon_{eq}^{cr}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial g}{\partial \sigma_{eq}} R' \Delta t \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \varepsilon_{eq}^{cr}} \Delta t \right)^{-1} \frac{\partial \varepsilon_{eq}^{pl}}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (48)$$

Después de igualar las ecuaciones (47) y (48), se despeja

$$\frac{\partial \varepsilon_{eq}^{pl}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{1}{\sqrt{6}\mu} \left[1 + \frac{R'}{3\mu} + \frac{\partial g}{\partial \sigma_{eq}} R' \Delta t \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \varepsilon_{eq}^{cr}} \Delta t \right)^{-1} \right]^{-1} \frac{\partial \|s^{el}\|}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (49)$$

Introduciendo ésta en la ecuación (38), llegamos a

$$\frac{\partial \|s\|}{\partial \varepsilon_{kl}} \equiv 2\mu\theta_2 n_{kl} \quad (50)$$

con

$$\theta_2 = \frac{R'}{3\mu} \left[1 + \frac{R'}{3\mu} + \frac{\partial g}{\partial \sigma_{eq}} R' \Delta t \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \varepsilon_{eq}^{cr}} \Delta t \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (51)$$

3.3.3 Expresión general

En síntesis, la ecuación (35) resulta

$$\frac{\partial s_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = 2\mu \frac{\|s\|}{\|s^{el}\|} (I_{ijkl}^{dev} - n_{ij}n_{kl}) + 2\mu\theta n_{ij}n_{kl} \quad (52)$$

donde

$$\theta = \begin{cases} \theta_1 & \text{si } f^{pr} < 0 \\ \theta_2 & \text{si } f^{pr} \geq 0 \end{cases} \quad (53)$$

Nótese que en ausencia de creep, esto es $g \equiv 0$, tenemos

$$\frac{\partial s_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = 2\mu\theta I_{ijkl}^{dev} - 2\mu\bar{\theta} n_{ij}n_{kl} \quad (54)$$

con

$$\begin{cases} \theta = 1, & \bar{\theta} = 0, & \text{si } f^{pr} < 0 \\ \theta = \frac{\|s\|}{\|s^{el}\|}, & \bar{\theta} = \theta - 1 + \left(1 + \frac{R'}{3\mu}\right)^{-1}, & \text{si } f^{pr} \geq 0 \end{cases} \quad (55)$$

Puede comprobarse que esta expresión es concordante con la dada por Simo y Hughes (1998) para materiales elasto-plásticos.

Constantes materiales	$k = 5.12 \times 10^{-29}$ $b = 725.2$ $c = 4.967 \times 10^{-8}$
Energía de activación	$Q_4 = 10000 \text{ J/mol}$
Flujo neutrónico	$\phi = 5 \times 10^{15} \text{ n/(m}^2\text{s)}$
Módulo de corte	$\mu = 8.840 \times 10^{10} (1 - 1.0915 \times 10^{-4}T)$
Módulo de compresibilidad	$\kappa = 2.161 \times 10^{11} (1 - 1.0915 \times 10^{-4}T)$
Tensión de fluencia	$\sigma_Y = 200\text{MPa}$

Tabla 1: Datos para caracterizar el comportamiento mecánico del Zircaloy-4.

4 APLICACIÓN

El algoritmo de retorno mapeado propuesto ha sido integrado a un código de elementos finitos. En esta aplicación en particular, se usan elementos hexaédricos trilineales Q1. Como ejemplo, estudiaremos una barra de Zircaloy-4 de $L = 1 \text{ m}$ fija por un extremo y sujeta en el extremo opuesto a un estiramiento $d = 0.05L$, impuesto a diferentes tasas. La deformación total impuesta es entonces del 5%, valor aceptado como límite máximo de validez de la teoría de pequeñas deformaciones (Lemaître y Chaboche, 1994). Se supone que no existe otra fuente de deformación, esto es $\varepsilon^0 = \mathbf{0}$.

Las propiedades del material son aquéllas utilizadas en el código de análisis de barras de combustible nuclear FRAPCON-3 (Berna et al., 1997; Lanning et al., 1997; Gelhood et al., 2011). Cabe aclarar que adoptamos un valor constante para la tensión de fluencia, dentro del rango de variación reportado para el Zircaloy-4 (Gelhood et al., 2011); aunque la tensión de fluencia del Zircaloy-4 depende de la temperatura, no encontramos en la bibliografía consultada datos para definir correctamente tal variación, pues la fórmula proporcionada por Soba y Denis (2008) da tensiones de fluencia que disminuyen desde 37.1KPa a 300 K a 5.8 KPa a 1000K, esto es, 3 a 4 órdenes de magnitud por debajo de los valores aceptados

usualmente.

Consideraremos cuatro tasas decrecientes de deformación tales que el alargamiento total se alcance en una hora ($\dot{\epsilon} = 2.78 \times 10^{-4} \text{s}^{-1}$), un día ($\dot{\epsilon} = 1.16 \times 10^{-5} \text{s}^{-1}$), una semana ($\dot{\epsilon} = 1.65 \times 10^{-6} \text{s}^{-1}$) y un mes ($\dot{\epsilon} = 3.86 \times 10^{-7} \text{s}^{-1}$).

La Figura 1 muestra a la izquierda que a temperatura ambiente ($T = 300 \text{ K}$), el creep máximo, correspondiente a la menor tasa de deformación, es un orden de magnitud menor que la deformación total. En consecuencia, el creep tiene una influencia despreciable sobre la tensión a temperatura ambiente, aún para bajas tasas de deformación, como se observa en la Figura 1 a la derecha.

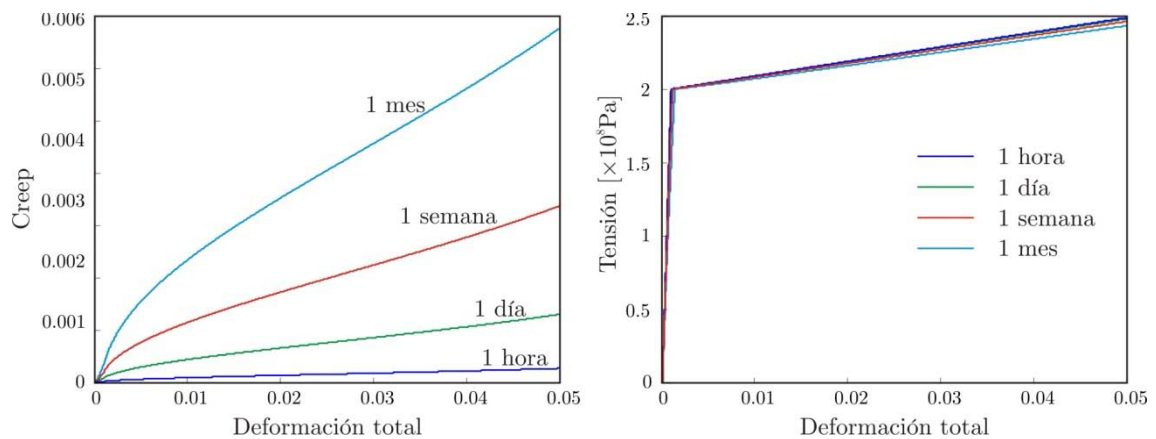


Figura 1: Creep y tensión vs. deformación total en una barra estirada de Zircaloy-4 a 300 K, cuando el alargamiento total se alcanza en distintos períodos de tiempo.

A $T = 1000 \text{ K}$ (Figura 2 a la izquierda), el creep representa prácticamente la totalidad de la deformación a la menor tasa de deformación, y su magnitud respecto de la deformación total es considerable, excepto para la mayor tasa de deformación. La consecuencia sobre la tensión se evidencia a la derecha de la Figura 2.

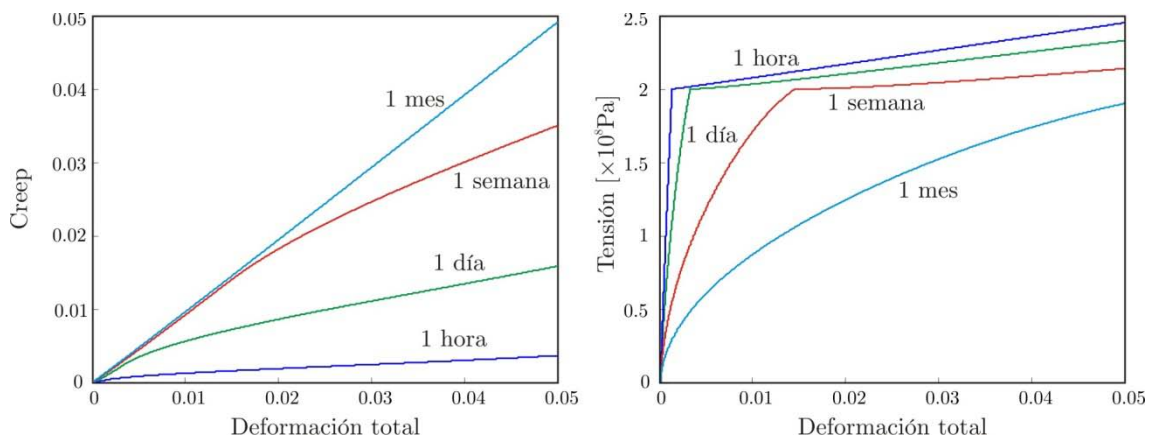


Figura 2: Creep y tensión vs. deformación total en una barra estirada de Zircaloy-4 a 1000 K, cuando el alargamiento total se alcanza en distintos períodos de tiempo.

5 CONCLUSIONES

En este trabajo se ha propuesto un algoritmo de retorno mapeado para materiales donde el creep y la deformación plástica se tratan por separado.

Se ha estudiado específicamente el comportamiento del Zircaloy-4 en busca de determinar la influencia del creep sobre el comportamiento del material a distintas temperaturas y tasas

de deformación propias de las condiciones de operación de una barra de combustible nuclear.

Si bien necesitamos mayor número de pruebas adoptando otras leyes de comportamiento disponibles en la literatura (Allison et al., 1993), los estudios realizados demuestran influencia despreciable del creep a temperatura ambiente. A alta temperatura, el creep representa una fracción considerable de la deformación total, con el consiguiente efecto sobre las tensiones.

6 APÉNDICE

6.1 Solución de ecuaciones escalares acotadas

Describimos aquí la técnica de regula-falsi aplicada a la solución de la ecuación escalar no lineal $F(a) = 0$. Supongamos que existen escalares a_1 y a_2 que acotan la solución en el paso $[t_n, t_{n+1}]$, o sea $a_1 < a < a_2$, y que además se verifica que $F(a_1)F(a_2) < 0$.

El procedimiento es el siguiente:

- 1) Cálculo $a_i = a_2 - \frac{a_2 - a_1}{F(a_2) - F(a_1)} F(a_2)$.

- 2) Si $|F(a_i)| < \text{tolerancia}$, entonces $a = a_i$ es la solución buscada, y finaliza aquí el cálculo.

- 3) En caso contrario, distinguimos dos casos:

- a) si $F(a_1)F(a_i) < 0$, se adopta $a_2 = a_i$ y se vuelve a 1).

- b) si $F(a_2)F(a_i) < 0$, se adopta $a_1 = a_i$ y se vuelve a 1).

A notar:

- Como las ecuaciones (22) y (34) que nos interesa resolver tienen dimensiones de deformación, se considera aceptable fijar $\text{tolerancia} \approx 10^{-9}$ a 10^{-8} .
- En cuanto a las cotas iniciales para $\varepsilon_{\text{eq}n+1}^i$ ($i = \text{cr}, \text{pl}$) para las ecuaciones (22) y (34), la opción más simple es adoptar $a_1 = \varepsilon_{\text{eq}n}^i$. Esta elección es conservadora, pudiendo definirse un intervalo de búsqueda más acotado, con lo que se llegará a la solución en menos iteraciones.
- En las ecuaciones (22) y (34), cuando la incógnita aparece con exponente menor que 1, como es el caso cuando se usa la ley (2) para la vaina, la adopción de $a_1 = 0$ conduce a una singularidad. En este caso, definimos a_1 usando el siguiente algoritmo:
 - 1) Suponemos $N = 1$.
 - 2) Calculamos $a_1 = \alpha^{-N} a_2$, con $\alpha > 1$ real (típicamente, $1.5 \leq \alpha \leq 10$).
 - 3) Si $F(a_1)F(a_2) < 0$, adoptamos a_1 como límite inferior del intervalo de búsqueda, y finaliza el cálculo.
 - 4) Si $F(a_1)F(a_2) > 0$, incrementamos $N \leftarrow N + 1$ y volvemos a 2).

Nótese que una vez determinado $a_1 = \alpha^{-N} a_2$, si $N > 1$ el intervalo de búsqueda puede acotarse definiendo $a_2 = \alpha a_1$.
- El mismo procedimiento resulta útil para acotar el intervalo de búsqueda cuando $|F(a_1)|$ y $|F(a_2)|$ difieren en varios órdenes de magnitud. Un procedimiento similar puede usarse para determinar a_2 tal que $F(a_1)F(a_2) < 0$ para a_1 dado.

REFERENCIAS

Allison, C.M., Berna, G.A., y otros, SCDAP/RELAP5/MOD3.1 Code Manual Volume IV: MATPRO - A library of materials properties for light-water-reactor accident analysis,

- NUREG/CR-6150, EGG-2720, 1993.
- Berna, G.A., Beyer, C.E., Davis, K.L., y Lanning, D.D., FRAPCON-3: A Computer Code for the Calculation of Steady-State, Thermal-Mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup, NUREG/CR-6534, Vol. 2, PNNL-11513, Dic. 1997.
- Bohmer, J.R., Fett, F.N., y Funk G., Analysis of high-temperature behaviour of solidified material within a continuous casting machine, *Comp. Struct.*, 47:683-698, 1993.
- Fachinotti, V.D., Modelado numérico de fenómenos termomecánicos en la solidificación y enfriamiento de aceros obtenidos por colada continua, Tesis doctoral, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Universidad Nacional del Litoral, 2001.
- Fachinotti, V.D., Cardona, A., Constitutive models of steel under continuous casting conditions, *J. Mat. Processing Tech.*, 135:30-43, 2003.
- Geelhood, K.J., Luscher, W.G., y Beyer, C.E., FRAPCON-3.4: A Computer Code for the Calculation of Steady-State Thermal-Mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup, NUREG/CR-7022, Vol. 1, PNNL-19418, Vol. 1, 2011.
- Huespe, A.E., Cardona, A., y Fachinotti, V.D., Visco-plastic constitutive models of steel at high temperature, *J. Mat. Processing Tech.*, 102:143-152, 2000.
- Lanning, D.D., Beyer, C.E., y Berna, G.A., FRAPCON-3: Integral Assessment, NUREG/CR-6534, Vol. 3, PNNL-11513, Dic. 1997.
- Lemaître, J., Chaboche, J.-L., *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge University Press, 1994.
- Simo, J.C., Hughes, T.J.R., *Computational Inelasticity*. Springer-Verlag, 1998.
- Soba, A., Denis, A., Simulation with DIONISIO 1.0 of thermal and mechanical pellet-cladding interaction in nuclear fuel rods. *Journal of Nuclear Materials*, 374: 32-43, 2008.