

OPTIMIZACIÓN DEL CÁLCULO DE PROPIEDADES TERMOMECAÑICAS DE INTERNOS DE REACTOR UTILIZANDO EL CÓDIGO TEG V.0.1

OPTIMIZATION IN THE CALCULUS OF THERMOMECHANICAL PROPERTIES OF REACTOR INTERNALS USING THE CODE TEG V.0.1

Iván Rozee^a, Juan E. Ramos Nervi^b y Javier Signorelli^c

^a*Instituto Sabato, Universidad Nacional de San Martín, Calle 25 de Mayo 1650, San Martín, Buenos Aires, Argentina, ivanrozee@gmail.com*

^b*División Materiales y Micromecánica, Nucleoeléctrica Argentina S.A., Av. del Libertador 6343, Capital Federal, Argentina, jnervi@na-sa.com.ar*

^c*Instituto de Física de Rosario, Universidad Nacional de Rosario, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Bv 27 de Febrero 210bis, Rosario, Santa Fe, Argentina, signorelli@ifir-conicet.gov.ar*

Palabras clave: Tensor de Hill, Policristales, Inhomogeneidad.

Resumen. El código TEG v.0.1 (desarrollado por Nucleoeléctrica Argentina S.A.) vincula las propiedades del cristal simple con propiedades macroscópicas homogeneizadas termoelásticas y viscoelásticas lineales de sólidos policristalinos, utilizando información microestructural como la textura cristalográfica y morfológica. Estas propiedades se obtienen por métodos de homogeneización como el autoconsistente (P. Ponte Castañeda y J. Willis, *J. Mech. Phys. Solids*. 43(12),1919-1951 (1995)). El paso limitante respecto al costo computacional, es el cómputo del tensor microestructural de Hill efectivo, que involucra el cálculo de una integral doble. En este trabajo se computa una de las integrales como el cociente de funciones polinómicas, utilizando la metodología propuesta por Masson (R. Masson, *Int. J. Solids Struct.* 45,757-769 (2008)). De esta forma se reduce drásticamente el tiempo de cómputo total de dichas propiedades.

Keywords: Hill Tensor, Polycrystals, Inclusions.

Abstract. The TEG v.0.1 code (developed by Nucleoeléctrica Argentina S.A.) links the simple crystal properties with polycrystalline solids homogenous macroscopic lineal thermoelastic and viscoelastic properties, using microstructural information such as crystallographic and morphological texture. These properties are obtained by means of homogenization methods such as self-consistent (P. Ponte Castañeda y J Willis, *J. Mech. Phys. Solids*. 43 (12), 1919-1951 (1995)). The rate-limiting step as regards computational cost is the computation of Hill's microstructural effective tensor, where the calculation of a double integral is involved. In this work one of the integrals is computed as the quotient of polynomial functions, using the methodology proposed by Masson (R. Masson, *Int. J. Solids Struct.* 45,757- 769 (2008)). This way total computation time of the properties is drastically reduced.

1. INTRODUCCIÓN

El comportamiento mecánico de sólidos policristalinos puede verse influenciado significativamente por las propiedades del cristal simple y la textura cristalográfica del agregado. Los códigos policristalinos vinculan estas variables microestructurales con las propiedades macroscópicas efectivas. Para ello se utilizan los métodos de homogeneización como el autoconsistente que es exacto a segundo orden y permite conectar ambas escalas. En particular, el código TEG v.0.1 utiliza el esquema de homogeneización autoconsistente propuesto por Willis (1981) o por Hashin y Shtrikman (1963). A partir de información estadística microestructural parcial, el código calcula las propiedades termoelásticas homogeneizadas de sólidos policristalinos anisótropos. Estas propiedades se utilizan en códigos que consideran la geometría real de las piezas utilizando, por ejemplo, teoría de elementos finitos. De esta forma se conecta información de cambio microestructural con propiedades macroscópicas de internos de reactor.

El costo computacional asociado al código TEG v.0.1 se vé principalmente influenciado por el cómputo del tensor de Hill (1965) efectivo $\tilde{\mathbb{P}}$. El objetivo del presente trabajo es implementar una optimización en el cálculo de este tensor, utilizando la metodología de Masson (2008).

2. DEFINICIÓN DEL PROBLEMA

2.1. Tensor de Hill

Considere un cuerpo elástico uniforme infinito con constantes elásticas indicadas por el tensor de cuarto orden \mathbb{C} . Si el cuerpo posee una inclusión o inhomogeneidad elipsoidal Ω , y se somete al cuerpo a una deformación remota ε , la deformación resultante en la inhomogeneidad es $\varepsilon_{ij}^0 = \mathbb{P}_{ijkl} \varepsilon_{kl}$, donde \mathbb{P} denota el tensor de cuarto orden de Hill (\mathbb{P}_{ijkl} sus componentes en un sistema de coordenadas cartesianas). El tensor \mathbb{P} de Hill muestra tanto simetría menor $\mathbb{P}_{ijkl} = \mathbb{P}_{jikl} = \mathbb{P}_{ijlk}$ como mayor $\mathbb{P}_{ijkl} = \mathbb{P}_{klij}$.

El tensor de Hill efectivo $\tilde{\mathbb{P}}$ es un tensor microestructural. Este se detalla en Willis (1977),

$$\tilde{\mathbb{P}} = \frac{1}{4\pi \det \mathbf{Z}} \int_{|\tilde{\xi}|=1} \tilde{\mathbb{H}}(\xi) |\mathbf{Z}^{-1} \tilde{\xi}|^{-3} dS, \quad (1)$$

donde \mathbf{Z} es el tensor de segundo orden simétrico que caracteriza la distribución de las inhomogeneidades correlacionada con las relaciones de aspecto de las mismas, $\tilde{\mathbb{H}}_{ijkl}(\xi) = \tilde{\mathbf{K}}_{ik}^{-1} \xi_j \xi_l |_{(ij)(kl)}$ con $\tilde{\mathbf{K}}_{ik} = \tilde{\mathbb{C}}_{ijkl} \xi_j \xi_l$, siendo $\tilde{\mathbb{C}}$ el tensor de constantes elásticas $\tilde{\mathbb{C}} = \tilde{\mathbb{S}}^{-1}$.

Dado el sistema de coordenadas ortonormal $\hat{\xi} = \{\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3\}$ (siendo $\hat{\xi}_1 = \sin(\theta)\cos(\phi)$, $\hat{\xi}_2 = \sin(\theta)\sin(\phi)$ y $\hat{\xi}_3 = \cos(\theta)$), la integral (1) en coordenadas esféricas sobre la esfera unitaria caracterizada por el vector posición $\tilde{\xi}$ toma la forma,

$$\tilde{\mathbb{P}} = \frac{1}{4\pi \det \mathbf{Z}} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \tilde{\mathbb{H}}(\theta, \phi) |\mathbf{Z}^{-1} \xi(\theta, \phi)|^{-3} d\theta d\phi. \quad (2)$$

Por analogía matemática del problema elástico con el viscoelástico, el tensor $\tilde{\mathbb{P}}$ también puede ser formulado a partir del tensor de *creep compliance* $\tilde{\mathbb{K}}$.

2.2. Cómputo del tensor de Hill

La expresión (2) se puede discretizar para su integración numérica:

$$\tilde{\mathbb{P}} \approx \frac{1}{4\pi \det \mathbf{Z}} \sum_{N_\phi=1}^{N_{gp_\phi}} \sum_{N_\theta=1}^{N_{gp_\theta}} \tilde{\mathbb{H}}(x_\theta, y_\phi) |\mathbf{Z}^{-1} \xi(x_\theta, y_\phi)|^{-3} \omega_\theta \omega_\phi. \quad (3)$$

Siendo x_θ y y_ϕ los puntos, ω_θ y ω_ϕ los pesos de Gauss, respectivamente. N_{gp_ϕ} y N_{gp_θ} indican la cantidad de puntos utilizados en la integración. En (3), es evidente que el tiempo de cómputo total depende directamente del producto $N_{gp_\theta} * N_{gp_\phi}$ (número de puntos de Gauss total). El costo computacional incrementa mientras mayor sea la cantidad de puntos de Gauss que se requieran para el cómputo. A este método de cálculo se lo denomina método de Gauss.

3. TENSOR DE HILL EXPRESADO COMO UNA INTEGRAL SIMPLE

Partiendo de la integral doble (2), Masson (2008) considera la integral sobre la variable θ como la función $\mathbb{P}(\phi)_{ijkl}$:

$$\mathbb{P}(\phi)_{ijkl} = \frac{1}{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \mathbb{H}(\theta, \phi)_{ijkl} |\mathbf{Z}^{-1} \xi(\theta, \phi)|^{-3} d\theta. \quad (4)$$

Luego, las componentes del tensor de Hill se pueden expresar como:

$$\mathbb{P}_{ijkl} = \frac{1}{2 \det \mathbf{Z}} \int_{\phi=0}^{2\pi} \mathbb{P}(\phi)_{ijkl} d\phi. \quad (5)$$

Las componentes de $\mathbb{P}(\phi)_{ijkl}$ son funciones del ángulo ϕ . Como el integrando $\mathbb{H}(\theta, \phi)_{ijkl}$ es una función racional, tanto el numerador como el denominador son funciones polinómicas dependientes de las variables $(\cos(\theta), \sin(\theta))$. Proponiendo $t = 1/\tan(\theta/2)$ como cambio de variable, la integral se reduce a:

$$\mathbb{P}(\phi)_{ijkl} = \frac{1}{2\pi} \int_{t=0}^{+\infty} \frac{t \mathbf{p}_{ijkl} \left(\frac{t^2-1}{2t} \right)}{(1+t^2) q \left(\frac{t^2-1}{2t} \right)} dt, \quad (6)$$

siendo $q(z)$ y las componentes de $\mathbf{p}_{ijkl}(z)$, las funciones polinómicas de sexto orden cuyos coeficientes (15) y (17) están definidos en el apéndice como función de las relaciones de aspecto de la inhomogeneidad, el ángulo ϕ y el tensor de constantes elásticas de la inhomogeneidad.

Utilizando el teorema de residuos de Cauchy se obtiene la siguiente expresión analítica:

$$\mathbb{P}(\phi)_{ijkl} = \frac{1}{4\pi} \left(\text{Im}g \left(\frac{i \mathbf{p}_{ijkl}(i)}{q(i)} \right) - \sum_{u=1}^{u=3} \text{Re} \left[\left(2 \ln \left(z_u + \sqrt{1+z_u^2} \right) - i\pi \right) \frac{\mathbf{p}_{ijkl}(z_u)}{(1+z_u^2)^{\frac{3}{2}} q'(z_u)} \right] \right) \quad (7)$$

donde q' denota la derivada respecto de z , $z = (z_1, z_2, z_3)$ son las raíces complejas con parte imaginaria positiva de la ecuación $q(z) = 0$; i es el número de Euler.

Finalmente, el cálculo del tensor de Hill se reduce a la siguiente integral:

$$\mathbb{P}_{ijkl} = \frac{1}{8\pi} \int_0^{2\pi} \left(\text{Im}g \left(\frac{i \mathbf{p}_{ijkl}(i)}{q(i)} \right) - \sum_{u=1}^{u=3} \text{Re} \left[\left(2 \ln \left(z_u + \sqrt{1+z_u^2} \right) - i\pi \right) \frac{\mathbf{p}_{ijkl}(z_u)}{(1+z_u^2)^{\frac{3}{2}} q'(z_u)} \right] \right) d\phi. \quad (8)$$

4. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

Se programó una subrutina en lenguaje FORTRAN 90, con el fin de calcular el tensor de Hill a partir de la ecuación (5) de la cual se deriva la siguiente expresión:

$$\mathbb{P}_{ijkl} \approx \frac{1}{2} \sum_{N_\phi=1}^{Ngp_\phi} \mathbb{P}(y_\phi)_{ijkl} \omega_\phi. \quad (9)$$

Siendo y_θ y ω_ϕ los puntos y los pesos de Gauss, respectivamente (los cuales se calculan mediante cuadratura de Gauss-Legendre para los límites de integración establecidos). Contrastando esta última expresión con (3), el número de pasos de iteración para computar la integral (2) se reduce a Ngp_ϕ .

Se consideran las siguientes variables de entrada:

- \mathbb{C} tensor de constantes elásticas, o \mathbb{K} tensor de *creep compliance*.
- Ngp_ϕ , número de puntos de Gauss.
- $(\mathbf{Z}_{11}, \mathbf{Z}_{22}, \mathbf{Z}_{33})$, componentes de la diagonal del tensor \mathbf{Z} .

En la subrutina se calculan las raíces (z_1, z_2, z_3) de la ecuación $q(z) = 0$ por el método de Laguerre (Ralston y Rabinowitz, 1978). Estas raíces se comparan para identificar si el caso es general o degenerado (valores de z_u para los cuales la expresión (7) no es válida). Una vez seleccionado el caso, se utiliza la expresión analítica de $\mathbb{P}(\phi)_{ijkl}$ correspondiente al mismo (véase el capítulo 3,3 de Masson (2008) para las soluciones a los casos degenerados). Este procedimiento se repite Ngp_ϕ veces.

Los ajustes de sensibilidad correspondientes en los parámetros internos de la subrutina del método de Masson (2008) se realizaron contrastando las soluciones obtenidas con las computadas por el método de Gauss (3), y por soluciones analíticas.

5. CASOS DE APLICACIÓN

Los tubos de presión se fabrican a partir de una aleación de Circonio con un contenido de Niobio del 2,5 %. La microestructura está compuesta por una fase mayoritaria cuya cristalografía es HCP (hexagonal compacta). La textura cristalográfica de los tubos surge durante el proceso de fabricación, el cual también genera alargamiento de granos en la dirección axial. Tanto la textura cristalina como la cristalografía de la fase mayoritaria generan que la deformación en servicio de los tubos sea anisótropa (Holt, 2008).

Analizando mediciones estadísticas de la forma de la fase mayoritaria (Bozzano y Miyagasaki, 2018), se obtuvo en promedio el siguiente tensor morfológico:

$$\mathbf{Z}_{ij} = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0,2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Los tensores \mathbb{C} y \mathbb{K} del cristal simple (Kocks et al., 2000) son respectivamente:

$$\mathbb{C}_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 286 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 7 & 95 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 71 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 71 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 64 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 64 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{K}_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,32 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3,2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3,2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Ambos tensores están descriptos en notación de Woo (apéndice 8.3).

6. RESULTADOS

6.1. Comparación entre tiempos de cómputo de $\mathbb{P}(\phi)_{\alpha\beta}$ para cada método

En la Tabla 1 se observa la relación η entre tiempos de cómputo que tarda cada método en computar el tensor $\mathbb{P}(\phi)_{\alpha\beta}$ para las variables microestructurales utilizadas. Siendo $\eta = \frac{t_{Gauss}}{t_{Masson}}$, donde t_{Gauss} representa el tiempo de integración numérica en la variable θ por el método tradicional de integración por Gauss, y t_{Masson} por el método de Masson (2008). $N_{gp\theta}$ es el número de puntos de Gauss para el cual las componentes de la solución obtenida para $N_{gp\theta}$ difieren en menos de $1 \cdot 10^{-4}$ con respecto a la solución obtenida para $N_{gp\theta} - 1$ puntos de Gauss. \mathbf{Z}_{iso} representa un tensor \mathbf{Z} isótropo, correspondiente a una textura morfológica isótropa.

$\mathbb{P}(\phi)_{\alpha\beta}$	t_{Masson}	t_{Gauss}	η	$N_{gp\theta}$
$\mathbb{P}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}_{iso}, \phi)_{\alpha\beta}$	$3 \cdot 10^{-04}$	$8 \cdot 10^{-03}$	27	18
$\mathbb{P}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}_{iso}, \phi)_{\alpha\beta}$	$3 \cdot 10^{-04}$	$1,9 \cdot 10^{-01}$	632	90
$\mathbb{P}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}, \phi)_{\alpha\beta}$	$3 \cdot 10^{-04}$	$1,7 \cdot 10^{-01}$	567	84
$\mathbb{P}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}, \phi)_{\alpha\beta}$	$3 \cdot 10^{-04}$	15,2	50667	806

Tabla 1: Relación η entre tiempos de cómputo tensor $\mathbb{P}(\phi)_{\alpha\beta}$ por ambos métodos para distintos casos.

En el método de Masson se utilizó la misma ecuación (7) para las variables micromecánicas estudiadas, es por este motivo que t_{Masson} fue el mismo en todos los casos. En cambio, en el método de Gauss t_{Gauss} depende de la cantidad de $N_{gp\theta}$ utilizados. Se observa que para una misma propiedad del cristal simple, si \mathbf{Z} es anisótropo, $N_{gp\theta}$ y t_{Gauss} son mayores. Para los casos estudiados, η es siempre mayor que uno, destacando una mayor velocidad de cómputo lograda por el método de Masson. Si el tensor \mathbf{Z} es anisótropo, entonces es el método de Masson es mucho más rápido que el de Gauss.

Las subrutinas fueron ejecutadas en un procesador *Intel CoreTM i3-5157U* y 6 GB de memoria RAM.

6.2. Cómputo de propiedades efectivas para textura cristalina isótropa

Se calcularon los módulos efectivos $\tilde{\mathbb{C}}$ y $\tilde{\mathbb{K}}$ utilizando el código TEG v.0.1, para una textura cristalográfica isótropa T_{iso} (Sobol, 1967), a partir de los tensores \mathbb{P} obtenidos por Gauss y por Masson:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbb{C}}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}_{iso}, T_{iso})_{\alpha\beta} &= \begin{pmatrix} 143,5717 & 71,2043 & 71,2239 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 71,2043 & 143,5757 & 71,2199 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 71,2239 & 71,2199 & 143,5560 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 36,1484 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 36,1955 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 36,1325 \end{pmatrix}, \\
 \tilde{\mathbb{C}}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}, T_{iso})_{\alpha\beta} &= \begin{pmatrix} 142,6771 & 71,8128 & 71,5099 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 71,8128 & 142,8707 & 71,3163 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 71,5099 & 71,3163 & 143,1736 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 36,8665 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 35,3314 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 36,6279 \end{pmatrix}, \\
 \tilde{\mathbb{K}}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}_{iso}, T_{iso})_{uv} &= \begin{pmatrix} 2,1915 & -1,1994 & -0,9911 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ -1,1994 & 2,1496 & -0,9492 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ -0,9911 & -0,9492 & 1,9414 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,2816 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,7475 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,3117 \end{pmatrix}, \\
 \tilde{\mathbb{K}}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}, T_{iso})_{uv} &= \begin{pmatrix} 2,1108 & -1,1904 & -0,9193 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ -1,1904 & 1,9785 & -0,7870 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ -0,9193 & -0,7870 & 1,7074 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,1427 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,7469 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,3651 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}
 \tag{12}$$

6.3. Cómputo de propiedades efectivas para textura cristalina del tubo de presión

Se calcularon los módulos efectivos $\tilde{\mathbb{C}}$ y $\tilde{\mathbb{K}}$ utilizando el código TEG v.0.1, para dos texturas cristalinas anisótropas, correspondientes a ambos extremos del tubo de presión (T_F para el *Front-end* y T_B *Back-end* Signorelli (2016)), a partir de los tensores \mathbb{P} obtenidos por Gauss y por Masson:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbb{C}}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}, T_B)_{\alpha\beta} &= \begin{pmatrix} 143,4080 & 71,4871 & 71,1048 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 71,4871 & 142,8713 & 71,6414 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 71,1048 & 71,6414 & 143,2536 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 37,4325 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 35,4116 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 36,3039 \end{pmatrix}, \\
 \tilde{\mathbb{C}}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}, T_F)_{\alpha\beta} &= \begin{pmatrix} 143,4901 & 71,0436 & 71,4662 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 71,0436 & 143,5413 & 71,4150 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 71,4662 & 71,4150 & 143,1187 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 37,1667 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 35,7059 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 35,6757 \end{pmatrix}, \\
 \tilde{\mathbb{K}}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}, T_B)_{uv} &= \begin{pmatrix} 1,8805 & -0,9177 & -0,9618 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ -0,9177 & 1,7337 & -0,8150 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ -0,9618 & -0,8150 & 1,7778 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,0639 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,8080 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,6449 \end{pmatrix}, \\
 \tilde{\mathbb{K}}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}, T_F)_{uv} &= \begin{pmatrix} 1,8932 & -0,8585 & -1,0337 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ -0,8585 & 1,5688 & -0,7092 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ -1,0337 & -0,7092 & 1,7440 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,0869 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,7064 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 1,8083 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{13}$$

6.4. Comparación entre tiempos de cómputo de propiedades efectivas

En la Tabla 2 se observa la relación η entre tiempos de cómputo que tarda cada método en computar las propiedades efectivas para las variables microestructurales utilizadas. Siendo $Ngpt_{Masson}$ y $Ngpt_{Gauss}$ el número de puntos de Gauss total utilizado en el código para computar una propiedad efectiva, en función del tensor \mathbb{P} computado por el método de Masson o el de Gauss, respectivamente. t_{Gauss} representa el tiempo de cómputo de una propiedad efectiva en función del tensor \mathbb{P} computado por el método de Gauss, y t_{Masson} el tiempo de cómputo de una propiedad efectiva en función del \mathbb{P} obtenido por Masson.

Propiedad efectiva	t_{Masson}	t_{Gauss}	η	$N_{gpt_{Masson}}$	$N_{gpt_{Gauss}}$
$\tilde{\mathbb{C}}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}_{iso}, T_{iso})$	$6,25 \cdot 10^{-02}$	$3,9 \cdot 10^{-01}$	6,24	20	400
$\tilde{\mathbb{C}}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}, T_{iso})$	$1,25 \cdot 10^{-01}$	23,75	190	80	40000
$\tilde{\mathbb{C}}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}, T_B)$	$1,56 \cdot 10^{-01}$	23,82	152,7	80	40000
$\tilde{\mathbb{C}}(\mathbb{C}, \mathbf{Z}, T_F)$	$1,09 \cdot 10^{-01}$	23,78	218	100	40000
$\tilde{\mathbb{K}}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}_{iso}, T_{iso})$	$8,40 \cdot 10^{-02}$	2,44	29	20	1600
$\tilde{\mathbb{K}}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}, T_{iso})$	$1,56 \cdot 10^{-01}$	69,87	447,8	60	57600
$\tilde{\mathbb{K}}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}, T_B)$	$1,56 \cdot 10^{-01}$	61,23	392,5	100	57600
$\tilde{\mathbb{K}}(\mathbb{K}, \mathbf{Z}, T_F)$	$2,03 \cdot 10^{-01}$	61,75	304	80	57600

Tabla 2: Relación η entre tiempos de cómputo de propiedades efectivas para un \mathbb{P} obtenido por ambos métodos.

Para los casos estudiados, el tiempo de cómputo del código TEG v.0.1 disminuye drásticamente al utilizar el método de Masson para el cálculo del tensor \mathbb{P} . De la Tabla 2, se puede observar que la textura cristalina no afecta en mayor medida a η . La variable microestructural que genera mayor aumento en η es el tensor \mathbf{Z} .

El código fue ejecutado en una computadora que posee un procesador *Intel CoreTM i5-5675R* y 4 GB de memoria RAM.

7. CONCLUSIONES

Se consiguió implementar una nueva metodología de cálculo del tensor $\tilde{\mathbb{P}}$, contrastando su velocidad de cálculo con la metodología tradicional por Gauss. La misma fue implementada en el código policristalino TEG v.0.1. Luego se utilizaron el código optimizado y el código original para computar propiedades efectivas para las variables microestructurales y texturas cristalográficas correspondientes a las del tubo de presión. Se pudo observar que esta implementación disminuye el tiempo de cómputo de propiedades efectivas, siendo esta disminución aún mayor si el tensor \mathbf{Z} es anisótropo.

8. APÉNDICE

8.1. Autovalores de Stroh para cuerpos tridimensionales

Siendo el vector \mathbf{x} :

$$\mathbf{x} = \mathbf{n} \cos(\theta) + \mathbf{m} \sin(\theta), \quad (14)$$

$$\text{con } \mathbf{n} = \left(0, 0, \frac{1}{\mathbf{Z}_{33}}\right) \text{ y } \mathbf{m} = \left(\frac{\cos(\phi)}{\mathbf{Z}_{11}}, \frac{\sin(\phi)}{\mathbf{Z}_{22}}, 0\right).$$

Se pueden expresar los siguientes tensores:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{ik} &= \mathbb{C}_{ijkl} n_j n_l = \mathbb{C}_{i3k3} n_3^2, \quad \mathbf{R}_{ik} = \mathbb{C}_{ijkl} n_j m_l = \mathbb{C}_{i3k1} m_1 n_3 + \mathbb{C}_{i3k2} m_2 n_3, \\ \mathbf{T}_{ik} &= \mathbb{C}_{ijkl} m_j m_l = \mathbb{C}_{i1k1} m_1^2 + (\mathbb{C}_{i1k2} + \mathbb{C}_{i2k1}) m_1 m_2 + \mathbb{C}_{i2k2} m_2^2, \\ \mathbf{S}_{ik} &= \mathbf{R}_{ik} + \mathbf{R}_{ik}^T. \end{aligned} \quad (15)$$

Se define q como una función polinómica de sexto grado:

$$q(z) = \sum_{i=0}^{i=6} q_i z^i. \quad (16)$$

Siendo sus coeficientes los autovalores de Stroh:

$$\begin{aligned}
 q_6 &= \epsilon_{mnl} \mathbf{Q}_{m1} \mathbf{Q}_{n2} \mathbf{Q}_{l3}, \quad q_5 = \epsilon_{mnl} (\mathbf{Q}_{m1} (\mathbf{Q}_{n2} \mathbf{S}_{l3} + \mathbf{S}_{n2} \mathbf{Q}_{l3}) + \mathbf{S}_{m1} \mathbf{Q}_{n2} \mathbf{Q}_{l3}), \\
 q_4 &= \epsilon_{mnl} (\mathbf{Q}_{m1} (\mathbf{S}_{n2} \mathbf{S}_{l3} + \mathbf{Q}_{n2} \mathbf{T}_{l3} + \mathbf{T}_{n2} \mathbf{Q}_{l3}) + \mathbf{S}_{m1} (\mathbf{Q}_{n2} \mathbf{S}_{l3} + \mathbf{S}_{n2} \mathbf{Q}_{l3}) + \mathbf{T}_{m1} \mathbf{Q}_{n2} \mathbf{Q}_{l3}), \\
 q_3 &= \epsilon_{mnl} (\mathbf{Q}_{m1} (\mathbf{S}_{n2} \mathbf{T}_{l3} + \mathbf{T}_{n2} \mathbf{S}_{l3}) + \mathbf{S}_{m1} (\mathbf{S}_{n2} \mathbf{S}_{l3} + \mathbf{Q}_{n2} \mathbf{T}_{l3} + \mathbf{T}_{n2} \mathbf{Q}_{l3}) + \mathbf{T}_{m1} (\mathbf{Q}_{n2} \mathbf{S}_{l3} \\
 &\quad + \mathbf{S}_{n2} \mathbf{Q}_{l3})), \\
 q_2 &= \epsilon_{mnl} (\mathbf{Q}_{m1} \mathbf{T}_{n2} \mathbf{T}_{l3} + \mathbf{S}_{m1} (\mathbf{S}_{n2} \mathbf{T}_{l3} + \mathbf{T}_{n2} \mathbf{S}_{l3}) + \mathbf{T}_{m1} (\mathbf{Q}_{n2} \mathbf{T}_{l3} + \mathbf{T}_{n2} \mathbf{Q}_{l3} + \mathbf{S}_{n2} \mathbf{S}_{l3})), \\
 q_1 &= \epsilon_{mnl} (\mathbf{S}_{m1} \mathbf{T}_{n2} \mathbf{T}_{l3} + \mathbf{T}_{m1} (\mathbf{S}_{n2} \mathbf{T}_{l3} + \mathbf{T}_{n2} \mathbf{S}_{l3})), \quad q_0 = \epsilon_{mnl} \mathbf{T}_{m1} \mathbf{T}_{n2} \mathbf{T}_{l3}.
 \end{aligned} \tag{17}$$

8.2. Definición de las componentes de $\mathbf{p}_{ijkl}(t)$

Se definen las componentes de $\mathbf{p}_{ijkl}(t)$ como:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{p}_{ijkl}(t) &= \sum_{u=0}^{u=4} \mathbf{p}_{(1)ijkl}^u t^{6-u} + \sum_{u=0}^{u=4} \mathbf{p}_{(2)ijkl}^u t^{5-u} + \sum_{u=0}^{u=4} \mathbf{p}_{(3)ijkl}^u t^{4-u}, \\
 \mathbf{p}_{(1)ijkl}^u &= \hat{\mathbf{A}}_{jk}^u n_i n_l + \hat{\mathbf{A}}_{ik}^u n_j n_l + \hat{\mathbf{A}}_{jl}^u n_i n_k + \hat{\mathbf{A}}_{il}^u n_j n_k, \\
 \mathbf{p}_{(2)ijkl}^u &= \hat{\mathbf{A}}_{jk}^u (n_i m_l + n_l m_i) + \hat{\mathbf{A}}_{ik}^u (n_j m_l + n_l m_j) + \hat{\mathbf{A}}_{jl}^u (n_i m_k + n_k m_i) + \hat{\mathbf{A}}_{il}^u (n_j m_k + n_k m_j) \\
 \mathbf{p}_{(3)ijkl}^u &= \hat{\mathbf{A}}_{jk}^u m_i m_l + \hat{\mathbf{A}}_{ik}^u m_j m_l + \hat{\mathbf{A}}_{jl}^u m_i m_k + \hat{\mathbf{A}}_{il}^u m_j m_k, \\
 \hat{\mathbf{A}}_{ij}^0 &= \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} \mathbf{Q}_{km} \mathbf{Q}_{ln}, \quad \hat{\mathbf{A}}_{ij}^1 = \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} (\mathbf{Q}_{km} \mathbf{S}_{ln} + \mathbf{S}_{km} \mathbf{Q}_{ln}), \\
 \hat{\mathbf{A}}_{ij}^2 &= \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} (\mathbf{Q}_{km} \mathbf{T}_{ln} + \mathbf{S}_{km} \mathbf{S}_{ln} + \mathbf{T}_{km} \mathbf{Q}_{ln}), \quad \hat{\mathbf{A}}_{ij}^3 = \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} (\mathbf{S}_{km} \mathbf{T}_{ln} + \mathbf{T}_{km} \mathbf{S}_{ln}), \\
 \hat{\mathbf{A}}_{ij}^4 &= \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} \mathbf{T}_{km} \mathbf{T}_{ln}.
 \end{aligned} \tag{18}$$

8.3. Notación de Woo

Para la representación de los tensores de cuarto orden en el espacio de seis o cinco dimensiones se han utilizado la siguientes definiciones de la base μ^α introducidos por Woo (1985), donde \hat{e} es la base cartesiana.

$$\begin{aligned}
 \mu_{ij}^1 &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\hat{e}_1 \otimes \hat{e}_1 + \hat{e}_2 \otimes \hat{e}_2 + \hat{e}_3 \otimes \hat{e}_3), \quad \mu_{ij}^2 = \frac{1}{\sqrt{6}} (-\hat{e}_1 \otimes \hat{e}_1 - \hat{e}_2 \otimes \hat{e}_2 + 2\hat{e}_3 \otimes \hat{e}_3), \\
 \mu_{ij}^3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{e}_1 \otimes \hat{e}_1 - \hat{e}_2 \otimes \hat{e}_2), \quad \mu_{ij}^4 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{e}_1 \otimes \hat{e}_2 + \hat{e}_2 \otimes \hat{e}_1), \\
 \mu_{ij}^5 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{e}_1 \otimes \hat{e}_3 + \hat{e}_3 \otimes \hat{e}_1), \quad \mu_{ij}^6 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{e}_2 \otimes \hat{e}_3 + \hat{e}_3 \otimes \hat{e}_2).
 \end{aligned} \tag{19}$$

De esta forma, se puede expresar un tensor de cuarto orden en coordenadas cartesianas como un tensor de segundo orden en coordenadas de Woo:

$$\mathbf{C}_{\alpha\beta} = \mu_{ij}^\alpha \mathbf{C}_{ijkl} \mu_{kl}^\beta. \tag{20}$$

REFERENCIAS

- Bozzano P.B. y Miyagusuku M. Medición de tamaños de grano alfa en muestras de canales combustibles. 2018.
- Hashin Z. y Shtrikman S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids.*, 11:127–140, 1963.
- Hill R. Polycrystalline effects on irradiation creep and growth in textured zirconium. *J. Mech. Phys. Solids.*, 13:89–101, 1965.
- Holt R.A. In-reactor deformation of cold-worked zr–2.5nb pressure tubes. *J. Nucl. Mater.*, 372:182–214, 2008.
- Kocks U.F., Tomé C.N., Wenk H.R., y Beaudoin A.J. *Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties.*, volumen I. Cambridge University Press, 2000.
- Masson R. New explicit expressions of the hill polarization tensor for general anisotropic elastic solids. *Int. J. Solids Struct.*, 45:757–769, 2008.
- Ralston A. y Rabinowitz P. *A First Course in Numerical Analysis.*, volumen II. McGraw Hill, 1978.
- Signorelli J. Texturas del tubo de presión, muestras 174 y 174si. 2016.
- Sobol I.M. On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals. *USSR Comput. Math. Phys.*, 7:86–112, 1967.
- Willis J.R. Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids.*, 25:185–202, 1977.
- Willis J.R. Variational and related methods for the overall properties of composites. *Adv. Appl. Mech.*, 37:3323–3341, 1981.
- Woo C.H. Polycrystalline effects on irradiation creep and growth in textured zirconium. *J. Nucl. Mater.*, 131:105–117, 1985.