

# IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA DE UNA LEY DE COMPORTAMIENTO BAJO IRRADIACIÓN EN EL MARCO DE UNA LEY DE USUARIO (UMAT) EN EL CÓDIGO CODE-ASTER

Fabrizio Aguzzi<sup>a</sup>, Juan Ramos Nervi<sup>c</sup>, Javier W. 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*

<sup>c</sup>*Dpto. de Ing. en Materiales y diseño de Combustibles, Nucleoeléctrica Argentina S.A., Laprida 3163, Villa Martelli, Argentina*  
*jnervi@na-sa.com.ar*

**Palabras clave:** User MATerial (UMAT), comportamiento bajo irradiación

**Resumen.** Los componentes internos de un reactor nuclear están expuestos a un entorno de irradiación neutrónica. Los materiales que constituyen los componentes son susceptibles de sufrir cambios notables en sus propiedades mecánicas: módulo elástico, ductilidad y tenacidad. Las deformaciones mecánicas y térmicas van acompañadas del incremento de las vacancias y de la fluencia por irradiación. En el presente trabajo, se implementa una ley constitutiva de comportamiento bajo irradiación como una rutina de usuario en el programa de elementos finitos Code-Aster para materiales irradiados. Se asume una descomposición aditiva de la deformación, se considera el aporte de la deformación elástica, plástica, debida al creep bajo irradiación y el swelling. Se detalla el algoritmo de resolución, incluyendo el cálculo de la matriz jacobiana consistente acorde al método de Newton-Raphson (N-R) utilizado en la integración. Finalmente, se comparan los resultados obtenidos con resultados reportado en la literatura para un acero inoxidable 304.

## 1 INTRODUCCIÓN

Durante el funcionamiento de un reactor los componentes internos experimentan elevadas temperaturas y dosis de flujo neutrónico por lo que acumulan daño por irradiación, es decir la irradiación por partículas energéticas crea defectos microestructurales que provoca el desplazamiento de los átomos (dpa) de la red de su posición original. Dependiendo de la partícula y de su energía, los desplazamientos atómicos pueden ser aislados produciendo defectos puntuales como vacancias o pueden ser en forma de cascadas formando clústeres de vacancias, a su vez causa cambios en la composición a través de procesos como la segregación inducida por la radiación, segregación de equilibrio y no equilibrio de elementos de aleación, impurezas y re formación de defectos (Foster et. al, 1974 y Adamson et. al, 2019). Estos mecanismos de deformación en prolongada exposición a la irradiación neutrónica pueden alterar las propiedades mecánicas a nivel macroscópico y afectar la respuesta de los componentes en condiciones de operación (Chopra et. al, 2010), lo que conlleva a realizar estudios de métodos que sean robustos y eficientes para mejorar la extensión del periodo de servicio y mantenimiento de las centrales nucleares, que requiere una constante incorporación de tecnología para garantizar los estándares de seguridad, confiabilidad y funcionalidad de los componentes del reactor.

En este estudio, las propiedades termo elásticas, plásticas, la fluencia bajo irradiación, generación de vacancias y el comportamiento de deformación en el acero austenítico 304 se modelan y discuten, siguiendo los lineamientos de (Chung, 2015). A partir de la caracterización de las propiedades y relaciones constitutivas con influencia de los parámetros ambientales del reactor (temperatura y flujo neutrónico), se implementa una subrutina de usuario UMAT escrita en lenguaje FORTRAN 90 en el código abierto de elementos finitos Code Aster usando el método de N-R.

El trabajo se estructura de la manera siguiente: en primer lugar, se desarrolla el modelo constitutivo elegido para describir la respuesta de los aceros endurecidos 304/304L, así como las ecuaciones que permiten su implementación en forma de implícita. Se exponen los coeficientes materiales y la dependencia de los parámetros material con respecto a las variables de control de la irradiación y la temperatura. Posteriormente, se presentan los resultados y conclusiones tomando como referencia, la ley propia de Code Aster (Massoud, 2005).

## 2 MODELO CONSTITUTIVO

Se propone utilizar una descomposición aditiva de las deformaciones:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{mec} = \boldsymbol{\varepsilon}^{elast} + \boldsymbol{\varepsilon}^{plast} + \boldsymbol{\varepsilon}^{creep} + \boldsymbol{\varepsilon}^{swell}, \quad (1)$$

donde

- $\boldsymbol{\varepsilon}^{mec}$  es la deformación mecánica, que se define como la deformación total menos la deformación térmica, es decir  $\boldsymbol{\varepsilon}^{mec} = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{ther}$
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{elast}$  es la deformación elástica
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{plast}$  es la deformación plástica
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{creep}$  es la deformación debido al creep por irradiación
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{swell}$  es la deformación debido al swelling

la deformación elástica se relaciona con la tensión mediante la ley de Hooke:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{elast} \quad (2)$$

el tensor de elasticidad  $C$  depende de la temperatura  $T[C]$ . En cuanto a la deformación plástica, tiene en cuenta la ley de Von Mises, donde la superficie de fluencia está dada por:

$$f = \sigma_{eq} - \sigma_y, \quad (3)$$

donde  $f$  es la superficie de fluencia,  $\sigma_{eq}$  es la tensión equivalente de Von Mises,  $\sigma_y$  es la tensión de fluencia del material. La tensión de fluencia  $\sigma_y$  depende de la temperatura  $T[C]$  y del flujo neutrónico  $\phi[dpa]$ , la regla de flujo nos permite determinar la deformación plástica mediante,

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{plast} = \dot{p} \mathbf{n}, \quad (4)$$

donde  $\mathbf{n}$  es la normal a la función plástica potencial  $\mathbf{n} = \frac{3}{2} \frac{\mathbf{S}}{\sigma_{eq}}$ ,  $\mathbf{S}$  es el tensor de tensiones desviatoria,  $\dot{p}$  es el multiplicador plástico, viene dado por la condición de consistencia, es decir  $\dot{f} = 0$  y  $\dot{f} = 0$ .

Para un ensayo de tensión y flujo constante, las leyes de fluencia por irradiación pueden expresarse:

Si  $(\sigma_{eq} \phi < \eta)$  entonces podemos decir que  $\boldsymbol{\epsilon}^{creep} = \mathbf{0}$ , sino

$$\boldsymbol{\epsilon}^{creep} = \dot{p}_i \mathbf{n}, \quad (5)$$

donde  $\eta$  es el umbral de incubación de fluencia, que puede calcularse como  $\eta = \zeta_f \sigma_{eq} \phi$ , la función  $\zeta_f$  permite introducir la dependencia con la temperatura  $T[C]$

$$\dot{p}_i = A_i \sigma_{eq} \phi, \quad (6)$$

donde  $A_i$  es un coeficiente que depende de la temperatura.

El swelling es un fenómeno que ocurre en metales sometidos a un flujo neutrónico, que en comparación de la fluencia por irradiación (creep), genera un cambio en el volumen del material (Massoud, 2005):

$$\frac{\Delta V}{V_0} = F_g(\phi), \quad (7)$$

donde  $\Delta V$  es el cambio de volumen,  $V_0$  es el volumen inicial. Si diferenciamos la Ec. (7), y asumimos que el cambio volumétrico es pequeño, es decir  $\Delta V \ll V_0$  se obtiene

$$\frac{\dot{V}}{V} = \frac{dF_g}{d\phi} \phi \quad (8)$$

la tasa de cambio de la Ec. (8) se identifica con la traza del tensor de swelling,

$$\frac{\dot{V}}{V} = tr(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{swell}) \quad (9)$$

se asumirá que el swelling es isotrópico, puede expresarse como:

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{swell} = \dot{g} \mathbf{1} \quad (10)$$

$\mathbf{1}$  es un tensor unitario de rango 1, por lo tanto, tenemos  $\frac{\dot{V}}{V} = 3\dot{g}$ , luego:

$$\dot{g} = \dot{A}_g \phi \quad (11)$$

con  $\dot{A}_g = \frac{1}{3} \frac{dF_g}{d\phi}$ ,  $\dot{A}_g$  es un nuevo parámetro del material que depende de la temperatura  $T[C]$  y del flujo de neutrónico  $\phi[dpa]$ .

### 3 COEFICIENTES MATERIALES

Para determinar el módulo de elasticidad, el coeficiente de Poisson, el coeficiente de dilatación térmica y la tensión de fluencia para el acero austenítico 304 (EPRI, Palo Alto, 2010) en función de los parámetros de control se requiere del uso de constantes que ajustan el comportamiento observado experimentalmente, las mismas se indican en el APÉNDICE A (Tabla A1, Tabla A2 y Tabla A3).

#### 3.1 Termo-Elasticidad

El módulo de Young depende de la temperatura y del swelling (Chung, 2015) viene dado por:

$$E(T, Sw) = \frac{(C_{E0} + C_{E1} T)}{(1 + Sw)^2}, \quad (12)$$

donde  $Sw$  es la magnitud de la deformación por swelling, el coeficiente de Poisson también está en función lineal con la temperatura:

$$\nu(T) = C_{\nu 0} + C_{\nu 1} T \quad (13)$$

el coeficiente de expansión térmica se aproxima cuadráticamente como:

$$\alpha(T) = C_0^\alpha + C_1^\alpha T + C_2^\alpha T^2 \quad (14)$$

#### 3.2 Plasticidad

Para conocer la tensión de fluencia del material  $\sigma_y = \sigma_y(r, T, \phi)$ , siendo  $r$  un coeficiente de endurecimiento por trabajado en frío, se hace la evaluación que comienza con el límite elástico del 0,2% mediante una interpolación secuencial de la siguiente manera:

$$\sigma_y'' = \sigma_{YSU0} + 2(\sigma_{YSI} - \sigma_{YSU0})r - (\sigma_{YSI} - \sigma_{YSU0})r^2 \quad (15)$$

$$\sigma_y'(r, \phi) = \sigma_y''(r) + (\sigma_{YSI} - \sigma_y''(r))\{1 - \exp(-\phi/\phi_y)\} \quad (16)$$

$$\sigma_y(r, \phi, T) = \sigma_y'(r, \phi) \times \exp\{[-C_{Y0} + C_Y \sigma_y'(r, \phi)](T - 330)\} \quad (17)$$

en Ecs. (15) se introduce la dependencia con el coeficiente  $r$ , luego en Ecs. (16) la temperatura y posteriormente en Ecs. (17) la dosis de irradiación.

Para evaluar la tensión de fluencia, es necesario tener información de la tensión última que resiste el material, de manera análoga:

$$\sigma_u''(r) = \sigma_{UTSU0} + 2(\sigma_{UTSI} - \sigma_{UTSU0})r - (\sigma_{UTSI} - \sigma_{UTSU0})r^2 \quad (18)$$

$$\sigma_u'(r, \phi) = \sigma_u''(r) + (\sigma_{UTSI} - \sigma_u''(r))\{1 - \exp(-\phi/\phi_u)\} \quad (19)$$

$$\sigma_u(r, \phi, T) = \sigma_u'(r, \phi) \times \exp\{[-C_{u0} + C_{u1} \sigma_u'(r, \phi)](T - 330)\} \quad (20)$$

la diferencia entre las expresiones Ec. (20) y Ec. (17) se relaciona mediante la siguiente expresión:

$$\Delta\sigma_{uy}(r, \phi, T) = \{\sigma_u(r, \phi, T) - \sigma_y(r, \phi, T)\} \exp(0.002/\varepsilon_0) \quad (21)$$

por último:

$$\sigma_y(r, \phi, T) = \sigma_u(r, \phi, T) - \Delta\sigma_{uy}(r, \phi, T) \quad (22)$$

siguiendo la teoría de plasticidad de Von Mises, comparamos la tensión de fluencia del material con la tensión equivalente de Von Mises:

$$\sigma_e = \sqrt{\frac{1}{2}[(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2] + 6\sigma_{12}^2 + 6\sigma_{13}^2 + 6\sigma_{23}^2} \quad (23)$$

si la tensión de fluencia supera la tensión equivalente de Von Mises, el material endurece isotrópicamente bajo la siguiente ley:

$$\sigma_f = \sigma_y \left(1 + \frac{E \varepsilon^p}{\sigma_y}\right)^N \quad (24)$$

para determinar el exponente N se requiere conocer la deformación que corresponde a la tensión máxima y al valor de la deformación que corresponde a la tensión última que resiste el material, en función del endurecimiento por trabajado en frio, de la dosis de irradiación y la temperatura.

$$N = \log(1 + \varepsilon_{te}) \quad (25)$$

$\varepsilon_{te}$  es la deformación total, para definirla se hace análogamente a como se hizo para conocer la tensión de fluencia, mediante una interpolación secuencial, encontraremos primero la deformación que corresponde a la tensión máxima y luego la deformación que corresponde a la tensión última:

$$\eta_{ue(r)} = f_{ue0} + f_{ue1} \left[1 - \exp\left(-\frac{r}{r_{ue}}\right)\right] \quad (26)$$

$$\xi_{ue}(\phi) = g_{ue0} + g_{ue1} \left[1 - \exp\left(-\frac{\phi}{\phi_{ue}}\right)\right] \quad (27)$$

$$\varepsilon'_{ue}(T) = C_{ue0} + C_{ue1}T + C_{ue2}T^2 + C_{ue3}T^3 \quad (28)$$

$$\varepsilon_{ue}(r, \phi, T) \eta_{ue(r)} \xi_{ue}(\phi) \varepsilon'_{ue}(T) \quad (29)$$

$$\eta_{tu(r)} = f_{tu0} + f_{tu1} \left[1 - \exp\left(-\frac{r}{r_{tu1}}\right)\right] + f_{tu2} \exp\left(-\frac{r}{r_{tu2}}\right) \quad (30)$$

$$\xi_{tu}(\phi) = g_{tu0} + g_{tu1} \left[1 - \exp\left(-\frac{\phi}{\phi_{tu1}}\right)\right] + g_{tu2} \exp\left(-\frac{\phi}{\phi_{tu2}}\right) \quad (31)$$

$$\varepsilon'_{te}(T) = C_{te0} + C_{te1}T + C_{te2}T^2 + C_{te3}T^3 + C_{te4}T^4 \quad (32)$$

para la expresión final calcularemos el  $\Delta\varepsilon_{tu}$  entre Ec. (32) y Ec. (28)

$$\Delta\varepsilon_{tu}(r, \phi, T) = \eta_{tu(r)} \xi_{tu}(\phi) \{\varepsilon'_{te}(T) - \varepsilon'_{ue}(T)\} \quad (33)$$

finalmente:

$$\varepsilon_{te}(r, \phi, T) = \varepsilon_{ue}(r, \phi, T) + \Delta\varepsilon_{tu}(r, \phi, T) \quad (34)$$

aplicando en Ec. (25) se puede determinar el exponente N,  $\eta$  y  $\xi$  son funciones que dependen de las características del material.

### 3.3 Creep por Irradiación

Los datos de creep por irradiación (Massoud, 2005) permiten determinar los valores de los parámetros materiales  $A_i$  y  $\eta^s$ , a priori estos valores permanecen constantes con la temperatura. Sin embargo, es probable que a bajas temperaturas no exista contribución del creep por irradiación.

Para modelar el aporte del creep por irradiación, es necesario poder introducir la dependencia del coeficiente material  $A_i$  con la temperatura:

$$A_i = A_i^0 \zeta_f(T), \quad (35)$$

donde  $A_i^0$  es el valor del parámetro para altas temperaturas,  $\zeta_f$  es una función que permite introducir la dependencia con la temperatura, además puede detener el fenómeno de creep por debajo de un umbral de temperatura, expresado como:

$$\zeta_f = \frac{1}{2} (1 + \tanh(\mu_T(T - T_c))) \quad (36)$$

siendo  $T_c$  es el valor de temperatura para el cual comienza el aporte de creep,  $\mu_T$  es un coeficiente que establece el delta de transición entre los rangos de temperatura con y sin creep por irradiación.

### 3.4 Swelling

Se utilizará la Ley de Foster bilineal, que permite representar el tiempo de incubación y luego el swelling lineal (Foster et. al, 1974), dada por la siguiente expresión:

$$\frac{\Delta V}{V_0} = F_g(\phi) = R \cdot \left( \phi + \frac{1}{\alpha} \text{Log} \left( \frac{1 + \exp(\alpha(\phi_0 - \phi))}{1 + \exp(\alpha\phi_0)} \right) \right) \quad (37)$$

para  $\phi \rightarrow \infty$  obtendríamos:

$$\frac{\Delta V}{V_0} = R \cdot \phi - \frac{R}{\alpha} \text{Log}(1 + \exp(\alpha\phi_0)), \quad (38)$$

donde la fluencia de incubación es  $\frac{\text{Log}(1 + \exp(\alpha\phi_0))}{\alpha}$ , a partir de la expresión Ec. (38), puede derivarse el valor del coeficiente material  $A_g$ , como sigue:

$$A_g = \frac{1}{3} R \left( 1 - \frac{\exp(\alpha(\phi_0 - \phi))}{1 + \exp(\alpha(\phi_0 - \phi))} \right), \quad (39)$$

donde  $R$ ,  $\alpha$  y  $\phi_0$  son parámetros materiales propia de la ley de Foster.

De igual manera como en el modelo de creep por irradiación, es necesario introducir la relación de dependencia de la temperatura al parámetro  $R$ , dado que, a bajas temperaturas, no existe aporte de swelling.

$$R = R_0 \zeta_g(T), \text{ donde } \zeta_g = \frac{1}{2} (1 + \tanh(\mu_g(T - T_c))) \quad (40)$$

## 4 INTEGRACIÓN NUMÉRICA

Las tensiones, las deformaciones y las variables de estado dependientes de la solución son resueltas incrementalmente por Code Aster, en cada punto de integración del elemento finito. La subrutina UMAT realiza dos funciones: actualiza los estados de tensiones y las variables de estado dependientes de la solución a sus valores al final del incremento, asimismo proporciona la matriz jacobiana consistente  $\partial \Delta \sigma / \partial \Delta \epsilon$  del modelo constitutivo, tal como requiere una solución global iterativa. Se implementa un método de integración implícito para encontrar el incremento de las variables internas  $\Delta V_i = (\Delta P, \Delta \eta_i, \Delta P_i, \Delta g, \Delta \epsilon^{elast})$  en cada paso de tiempo (Besson, 2001).

La discretización de las ecuaciones de evolución presentadas en la sección 2 y detalladas en Tabla 1, conllevan a resolver un sistema de ecuaciones no lineales. Partiendo de encontrar los residuos  $R = (R_e, R_p, R_\eta, R_i, R_s)$  correspondientes, y de manera de calcular  $\Delta V_i$  tal que  $R(\Delta V_i) = 0$  se tiene los siguientes residuos a minimizar:

$$\mathbf{R}_e = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{elast} + \Delta p \mathbf{n} + \Delta p_i \mathbf{n} + \Delta g \mathbf{1} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{mec} = 0 \quad (41)$$

$$R_p = \sigma_{eq} - \sigma_y = 0 \quad (42)$$

$$R_\eta = \Delta \eta_i - \zeta_f \sigma_{eq} \Delta \varphi = 0 \quad (43)$$

$$R_i = \Delta P_i - H(\eta_i - \eta_i^s) A_i \sigma_{eq} \Delta \varphi = 0 \quad (44)$$

$$R_g = \Delta g - A_g \Delta \varphi = 0 \quad (45)$$

donde  $H$  es la función de Heaviside,  $\Delta \varphi$  es el incremento de la fluencia.

El sistema de ecuaciones Ec. (41) a Ec. (45) se resuelve mediante la aplicación del método de N-R, el cual requiere obtener la matriz Jacobiana  $J = \partial R / \partial \Delta v_i$  la cual será calculada por bloques, se muestran los elementos en las siguientes líneas:

(Nota:  $\mathbf{N} = \partial \mathbf{n} / \partial \boldsymbol{\sigma}$  y  $\sigma^f, p = \partial \sigma^f / \partial p$ )

$$\frac{\partial R_e}{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^e} = \mathbf{1} + \Delta p \cdot \mathbf{N} : \mathbf{E} + \Delta p_i \cdot \mathbf{N} : \mathbf{E} \quad \frac{\partial R_e}{\partial \Delta p} = \mathbf{n} \quad (46a)$$

$$\frac{\partial R_e}{\partial \Delta p_i} = \mathbf{n} \quad \frac{\partial R_e}{\partial \Delta g} = \mathbf{1} \quad (46b)$$

$$\frac{\partial R_p}{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^e} = \Delta p \cdot \mathbf{n} : \mathbf{E} \quad \frac{\partial R_p}{\partial \Delta p} = -\sigma^f, p \quad (47)$$

$$\frac{\partial R_\eta}{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^e} = -\zeta_f \cdot \Delta \varphi \cdot \mathbf{n} : \mathbf{E} \quad \frac{\partial R_\eta}{\partial \Delta \eta_i} = 1 \quad (48)$$

$$\frac{\partial R_i}{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^e} = -A_i \cdot \Delta \varphi \cdot \mathbf{n} : \mathbf{E} \quad \frac{\partial R_i}{\partial \Delta p_i} = 1 \quad (49)$$

$$\frac{\partial R_g}{\partial \Delta g} = 1 \quad (50)$$

En la Ec. (46a) y Ec. (46b) se muestra la derivada parcial del residuo elástico respecto al incremento elástico, plástico, creep y swelling; la Ec. (47) muestra la derivada parcial del residuo plástico respecto al incremento elástico y plástico; la Ec. (48) muestra la derivada parcial del residuo del umbral por creep respecto al incremento elástico y umbral; en la Ec. (49) se muestra la derivada parcial del residuo plástico por creep respecto al incremento elástico y plástico por creep; y finalmente en la Ec. (50) se muestra la derivada parcial del residuo por swelling respecto al incremento de swelling.

#### 4.1 Variables Internas

La definición del modelo se basa en cinco variables internas  $p, \eta_i, p_i, g$  y  $\boldsymbol{\varepsilon}^{elast}$ . La temperatura y la dosis de irradiación son considerados como parámetros impuestos. Las ecuaciones del modelo se muestran en la [Tabla 1](#)

Variables Internas	Ecuaciones de evolución
$p$	Consistencia $\dot{p}$
$\eta_i$	$\dot{\eta}_i = \zeta_f \sigma_{eq} \varphi$
$p_i$	$\dot{p}_i = A_i \sigma \varphi$ si $\eta_i > \eta_i^s$ sino $\dot{p}_i = 0$
$g$	$\dot{g} = A_g \varphi$
$\boldsymbol{\varepsilon}^{elast}$	$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{elast} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{mec} - \dot{p} \cdot \mathbf{n} - \dot{p}_i \cdot \mathbf{n} - \dot{g} \cdot \mathbf{1}$

Tabla 1: Variables internas del modelo.

## 4.2 Matriz Tangente Consistente

El método de elementos finitos consiste en implementar una técnica para hallar soluciones numéricas de sistemas de ecuaciones diferenciales e integrales, discretizando un dominio continuo con infinitos grados de libertad a un problema discreto con grados de libertad finitos, donde cada subespacio de aproximación de dimensión finita es representado por un elemento finito en el que busca resolver cual es el desplazamiento  $\mathbf{u}$  tal que cumpla lo siguiente:

$$\mathbf{K} \mathbf{u} = \mathbf{f}^{ext} \quad (51)$$

Siendo  $\mathbf{K}$  la matriz de rigidez global que surge del ensamble de las matrices de rigidez de cada elemento,  $\mathbf{u}$  el vector de desplazamientos y  $\mathbf{f}^{ext}$  vector de esfuerzos externos al sistema, la matriz de rigidez tangente de cada elemento, que se define como:

$$\mathbf{K}^{(e)} = \int_{\Omega(e)} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dv, \quad (52)$$

donde  $\mathbf{B}$  es la matriz de masas que contiene las funciones de aproximación nodal y  $\mathbf{D} = \frac{\partial \Delta \boldsymbol{\sigma}}{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}}$  es la matriz tangente consistente, se obtiene directamente tomando las variaciones de las ecuaciones integradas con respecto a todos los parámetros de la solución (sección 4), y luego resolviendo la relación entre la tensión ( $\boldsymbol{\sigma}$ ) y deformación ( $\boldsymbol{\varepsilon}$ ):

$$\boldsymbol{\sigma}(t + \Delta t) = \boldsymbol{\sigma}(t) + \mathbf{C} : (\Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^p), \quad (53)$$

donde  $\Delta \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(t + \Delta t) - \boldsymbol{\sigma}(t)$  es el incremento de la tensión, siendo  $t$  el tiempo y  $(\Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^p)$  es el incremento de deformación elástica,  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$  es el incremento de la deformación total, es decir  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{elast} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^p$  y  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^p$  es el incremento de deformación plástica total, es decir  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^p = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{plast} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{creep} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{swell}$ . Despejando el incremento de la deformación total:

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : (\Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^p) \quad (54)$$

$$\mathbf{C}^{-1} : \Delta \boldsymbol{\sigma} = \Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^p, \quad (55)$$

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{C}^{-1} : \Delta \boldsymbol{\sigma} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^p, \quad (56)$$

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{C}^{-1} : \Delta \boldsymbol{\sigma} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{plast} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{creep} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{swell} \quad (57)$$

aplicando la derivada parcial a la expresión anterior respecto al incremento de tensiones:

$$\frac{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \Delta \boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^{-1} + \frac{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{plast}}{\partial \Delta \boldsymbol{\sigma}} + \frac{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{creep}}{\partial \Delta \boldsymbol{\sigma}} + \frac{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{swell}}{\partial \Delta \boldsymbol{\sigma}}, \quad (58)$$



$\Delta \epsilon^{swell}$  no depende de la tensión aplicada, el tercer termino se hace cero, luego:

$$\frac{\partial \Delta \epsilon^{plast}}{\partial \Delta \sigma} = \frac{\partial (\Delta p \frac{\partial f}{\partial \sigma})}{\partial \Delta \sigma} = \Delta p \frac{\partial n}{\partial \Delta \sigma} = \Delta p \cdot \frac{1}{\sigma_{eq}} \cdot \frac{\partial S}{\partial \sigma} \quad (59)$$

se deduce de igual manera para  $\frac{\partial \Delta \epsilon^{creep}}{\partial \Delta \sigma}$ , luego:

$$\frac{\partial \Delta \epsilon}{\partial \Delta \sigma} = \mathbf{C}^{-1} + \Delta p \cdot \frac{1}{\sigma_{eq}} \cdot \frac{\partial S}{\partial \sigma} + \Delta p_i \cdot \frac{1}{\sigma_{eq}} \cdot \frac{\partial S}{\partial \sigma} = \mathbf{J}(\Delta \sigma) \quad (60)$$

para operar el solver necesita la expresión inversa de  $\frac{\partial \Delta \epsilon}{\partial \Delta \sigma}$  por lo tanto:

$$\frac{\partial \Delta \sigma}{\partial \Delta \epsilon} = \left[ \mathbf{C}^{-1} + \Delta p \cdot \frac{1}{\sigma_{eq}} \cdot \frac{\partial S}{\partial \sigma} + \Delta p_i \cdot \frac{1}{\sigma_{eq}} \cdot \frac{\partial S}{\partial \sigma} \right]^{-1} \quad (61)$$

## 5 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 5.1 Caso de Referencia

Se preparó un modelo de referencia utilizando una geometría cúbica compuesta por un elemento finito hexaédrico de 8 puntos de integración como se ve en la [Figura 1](#). Para comparar los resultados que se obtienen de la subrutina UMAT con los resultados de utilizar la ley de irradiación propia de Code Aster se hace bajo las mismas condiciones de carga detalladas en la [Tabla 2](#).

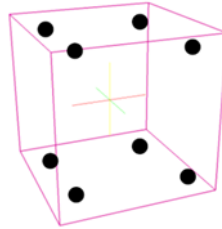


Figura 1: Esquema de los puntos de integración en un elemento hexaédrico.

Fluencia [dpa]	3
Temperatura[°C]	280
Desplazamiento unidireccional [mm]	[0 – 0,01]
Tiempo[s]	[0-1]

Tabla 2: Condiciones de borde para validación con dosis cte., temperatura cte. y carga incremental.

En la [Figura 2](#) (a) se muestra las restricciones impuestas a la geometría del cubo para generar un campo homogéneo de tensiones, las condiciones permiten el acople secuencial de los regímenes estudiados en la sección 2. En primera instancia únicamente el régimen elástico está presente y no es necesario resolver el sistema descrito en la sección 4, cuando la acumulación de deformación impuesta es tal que el material comienza a plastificar el problema deja de ser lineal y se requiere encontrar las variables internas del modelo a través del método de N-R.

En la Figura 2 (b) se muestran las iteraciones requeridas en función de la cantidad de pasos, con un error de  $1.0E-06$ , superado el límite de fluencia se observa que en el transitorio elasto-plástico requiere menos iteraciones para converger a la solución a medida que aumentamos la cantidad de paso o su equivalente a disminuir el tamaño de paso, esto se debe a que es más preciso encontrar la raíz en un intervalo acotado, estrictamente se cumple la condición de convergencia cuadrática que hace al método veloz. Para los regímenes completamente elástico y completamente plástico no hubo mejoras significativas en la precisión de la solución, Figura 3 (a).

Se hizo el mismo ensayo y se comparó con la ley propia de irradiación de Code Aster identificada IRRAD3M, donde se observa el aporte de cada componente de deformación, Figura 3 (b).

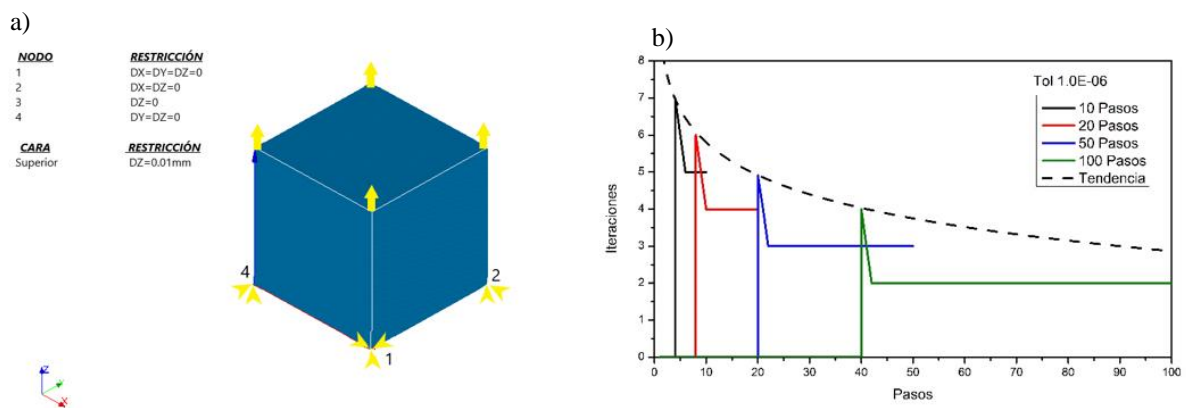


Figura 2: (a) Restricciones aplicadas a la geometría del cubo; (b) Análisis de iteraciones necesarias para alcanzar la convergencia en cada paso, variando la cantidad de pasos.

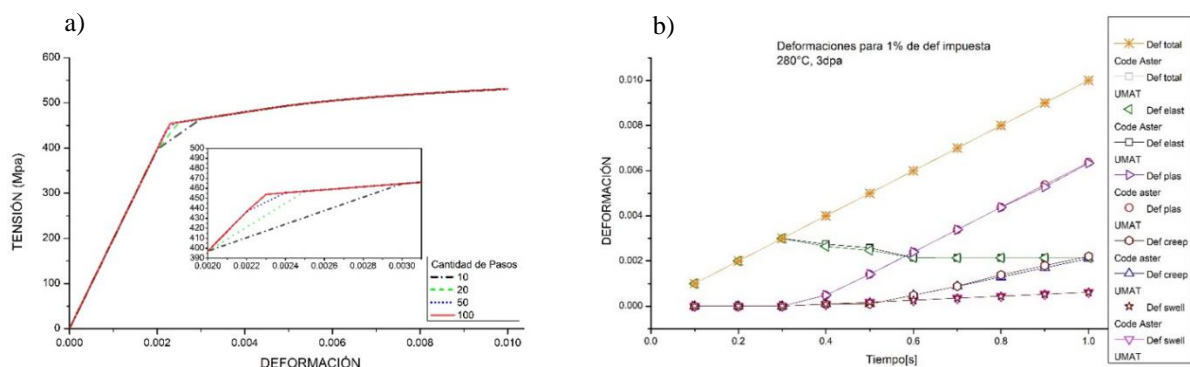


Figura 3: (a) Curva Tensión – Deformación para distinta cantidad de pasos; (b) Comparación de componentes de deformaciones para el ensayo de tracción unidireccional.

Una vez que superado el 30% de la carga impuesta, la componente de plasticidad deja de ser nula, disminuyendo la componente elástica, cuando la carga alcanza el 50% se satisfacen las condiciones de tensión y fluencia neutrónica Ec. (5) tal que existe creep por irradiación, la temperatura en ese mismo instante cumple con Ec. (40) donde el swelling no es nulo pero

tampoco de aporte significativo, se demostró (Chung, 2015) que en mayores periodos de exposición puede alcanzar deformaciones del orden de  $7.0E-05$ , se observa que el método numérico implementado en UMAT da buenos resultados en comparación con el mismo ensayo utilizando la ley propia de Code Aster visualizado en la Figura 3 (b).

## 5.2 Caso de Ballooning

Un caso de aplicación de interés de estudio en los tubos de revestimiento es el fenómeno conocido como ballooning, es un accidente que ocurre pérdida de líquido refrigerante (LOCA), disminución de presión del líquido y cambio brusco de temperatura en un periodo de tiempo corto, que conlleva a deformaciones plásticas que pueden generar acumulaciones de tensiones. Se modeló un segmento de un tubo revestido para simular las deformaciones en condiciones de LOCA detalladas en la Tabla 3, las condiciones iniciales y de contorno consiste en una presión interna cte., presión externa cte. nula, una rampa de temperaturas a velocidad cte. y dosis de irradiación cte., con condiciones mecánicas tal que permita el desplazamiento radial sin que se produzca ninguna contracción/expansión axial durante la simulación (Figura 4).

Fluencia [dpa]	3
Temperatura inicial[°C]	80
Temperatura final[°C]	500
Vel de Temperatura[°C/s]	4,2
Presión Interna [Mpa]	20
Presión Externa [Mpa]	0
Restricciones en los extremos	DZ=0
Tiempo de ensayo [s]	[0-100]

FEM	
Cantidad de elementos	45
Tipo de elemento	Hexaédrico
Puntos de integración por elem	8
Función aproximación	Lineal

Tabla 3: Condiciones de borde empleadas y configuración de FEM.

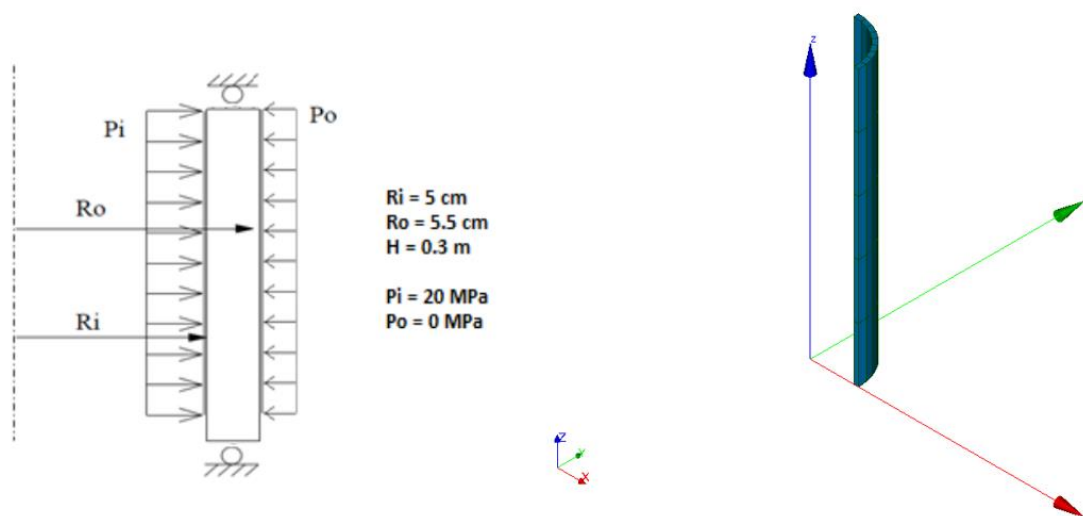


Figura 4: Geometría y malla de segmento de tubo.

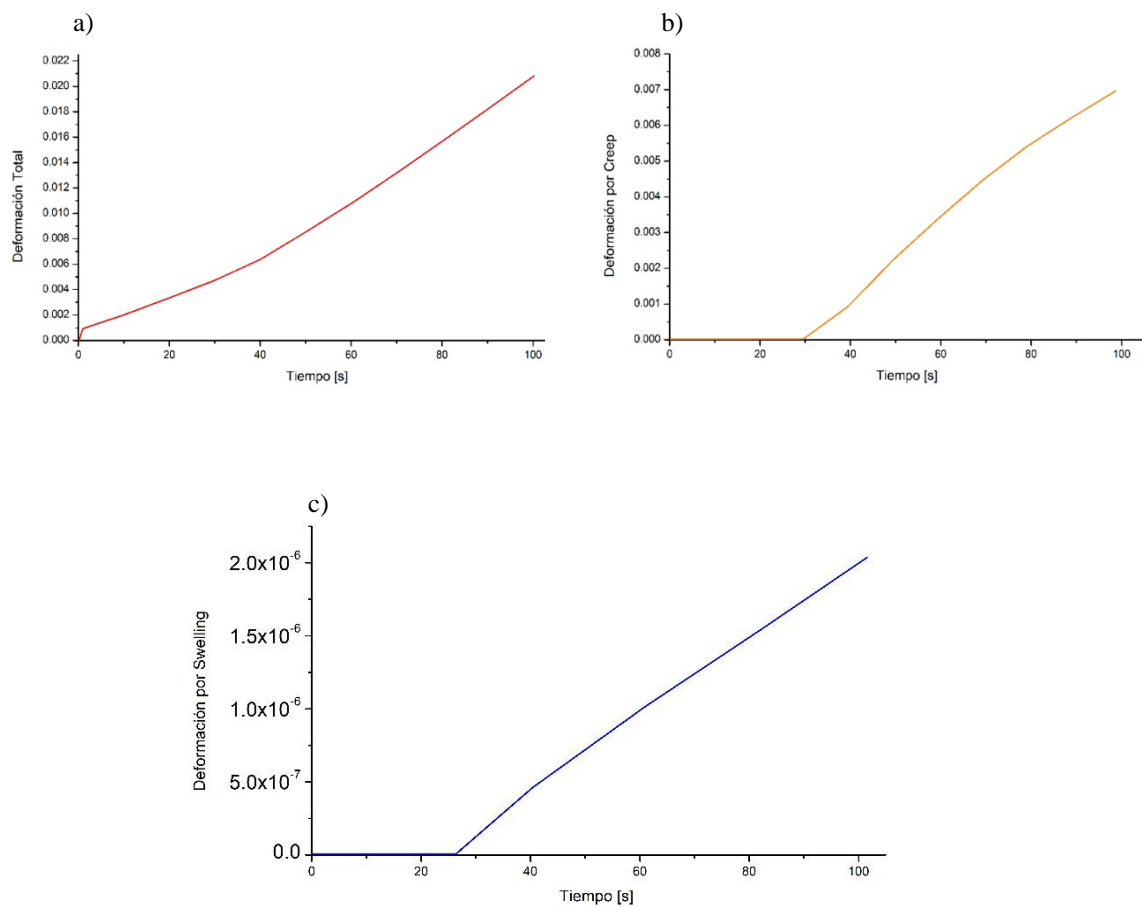


Figura 5: (a) Deformación total; (b) Deformación debida al creep por irradiación; (c) Deformación debida al swelling.

En situación de LOCA existe un aumento en la tensión de fluencia debido a la irradiación neutrónica (Chopra et. al, 2010), como el tubo opera a presión interna/externa cte., el material comienza a fluir plásticamente cuando la temperatura alcanza un valor crítico (Chung, 2015), para el caso en estudio este punto comienza en 122°C aprox. (Figura 5 (a)). En 194°C aprox. la tensión acumulada junto con la fluencia neutrónica es suficiente para el desarrollo de la deformación debida al creep por irradiación (Figura 5 (b)), en 210°C hay presencia del daño por swelling (Figura 5 (c)) acelerando el proceso de plasticidad por Ec. (12), el ensayo se realiza hasta alcanzar la temperatura máxima de estudio del material.

## 6 CONCLUSIONES

Se ha estudiado la relación constitutiva y los modelos de propiedades relevantes para el acero inoxidable austenítico 304, otros materiales de esta índole pueden ser analizados con algunas modificaciones, se implementó en un código abierto de elementos finitos llamado Code Aster mediante una subrutina de usuario UMAT utilizando el método de N-R, verificándose con el caso más simple, se implementó un caso de modelado para calcular la deformación de un tubo de revestimiento en condición de LOCA. Los resultados de las

pruebas han demostrado la funcionalidad y buena capacidad de la modelización para grandes deformaciones.

## REFERENCIAS

- Adamson, R.B., Coleman C. E., Griffiths M., “Irradiation creep and growth of zirconium alloys: A critical review”, *Journal of Nuclear Materials*, 2019.
- Besson J., Cailletaud G., Chaboche J.L., Forest S., “non-linear Mechanics of materials”, *Hermes*, 2001.
- Chopra O.K., Rao A.S., “A review of irradiation effects on LWR core internal materials – IASCC susceptibility and crack growth rates of austenitic stainless steels”, *Journal of Nuclear Materials*, 2010.
- Chung Ilup, “A study on the constitutive model of irradiated austenitic stainless steel for the functionality analysis of nuclear internals”, *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2015.
- EPRI, Materials reliability program: *Development of material constitutive model for irradiated austenitic stainless steels* (MRP-135, Revision 1), Palo Alto, CA, USA, 2010.
- Foster J.P., Strain R.V., “Empirical swelling equations for solution-annealed type 304 stainless steel”, *Nuclear Technology* (1974) 93-98
- Jean-Luc F., “Comportement élasto-plastique sous irradiation des métaux: application aux internes de cuve”, 2010.
- Massoud J.P., “Durée de vie des internes irradiés de cuve. Dossier de synthèse : Matériaux irradiés” (HT-27/04/045/A), *EDF R&D*, 2005.

## APÉNDICE A

Coefficientes que ajustan el comportamiento experimental del acero en estudio, utilizados para desarrollo de las propiedades mecánicas explicadas en la Sección 3:

CT0	$-3.8372 \times 10^{-4}$	CT1	$1.6209 \times 10^{-5}$	CT2	$5.1300 \times 10^{-9}$
CT3	$-1.3714 \times 10^{-12}$				

Tabla A1: Propiedades térmicas.

CE0	$2.0038 \times 10^5$	CE1	$-8.1220 \times 10^1$
Cv0	$2.9210 \times 10^{-1}$	Cv1	$7.2000 \times 10^{-5}$

Tabla A2: Propiedades elásticas.

$\sigma_{YSU0}$	$2.0000 \times 10^2$	$\sigma_{YSI}$	$8.0000 \times 10^2$	$\phi_y$	$3.0000 \times 10^0$
CY0	$1.5300 \times 10^{-3}$	CY1	$1.1440 \times 10^{-6}$		
$\sigma_{UTSU0}$	$4.5000 \times 10^2$	$\sigma_{UTSU1}$	$8.1000 \times 10^2$	$\phi_u$	$3.0000 \times 10^0$
Cu0	$1.5300 \times 10^{-3}$	Cu1	$1.1440 \times 10^{-6}$	$\varepsilon_0$	$2.4868 \times 10^{-1}$
fue0	$1.2105 \times 10^0$	fue1	$-1.2001 \times 10^0$	rue	$1.4517 \times 10^{-1}$
gue0	$1.0000 \times 10^0$	gue1	$-9.8750 \times 10^{-1}$	$\phi_{ue}$	$1.0000 \times 10^0$
Cue0	$5.5869 \times 10^{-1}$	Cue1	$-1.8930 \times 10^{-3}$		
Cue2	$5.3656 \times 10^{-6}$	Cue3	$-4.5779 \times 10^{-9}$		
ftu0	$-9.8861 \times 10^{-1}$	ftu1	$1.1433 \times 10^0$	ftu2	$1.3991 \times 10^0$
rtu1	$1.4517 \times 10^{-1}$	rtu2	$1.5102 \times 10^{-1}$		
gtu0	$8.9000 \times 10^0$	gtu1	$-7.4000 \times 10^0$	gtu2	$-7.9000 \times 10^0$
$\phi_{tu1}$	$2.5000 \times 10^0$	$\phi_{tu2}$	$1.0000 \times 10^0$		
Cte0	$7.1632 \times 10^{-1}$	Cte1	$-1.9560 \times 10^{-3}$	Cte2	$5.7562 \times 10^{-6}$
Cte3	$-7.1266 \times 10^{-9}$	Cte4	$3.2172 \times 10^{-12}$		

Tabla A3: Relación tensión-deformación.