

UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, INGENIERÍA Y AGRIMENSURA



Tesis Doctoral

**Anisotropía en el Modelado de Internos del Reactor. Uso
de modelos de base micromecánica para la
caracterización y predicción del comportamiento
mecánico en materiales de interés nuclear.**

Fabrizio Ezequiel Aguzzi Llubel

Directores: Dr. Alejandro Albanesi
Dr. César Pairetti

Miembros del Jurado: Dr. Carlos Tomé
Dra. Analía Roatta
Dr. Pablo Sánchez

*Tesis presentada en la Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura,
en cumplimiento parcial de los requisitos para optar al título de*

Doctor en Ingeniería

Febrero de 2026

Certifico que el trabajo incluído en esta tesis es el resultado de tareas de investigación originales y que no ha sido presentado para optar a un título de postgrado en ninguna otra Universidad o Institución.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'F. Aguzzi Llubl', with a stylized, cursive script.

Fabrizio Ezequiel Aguzzi Llubl

D.N.I: 36.855.168

Prefacio

La presente tesis doctoral se desarrolla como requisito parcial para la obtención del grado de Doctor en Ingeniería. El trabajo fue realizado en el marco de las actividades de investigación llevadas a cabo en el Instituto de Física Rosario (IFIR, CONICET–UNR), durante el período de formación doctoral.

Esta tesis es el resultado de varios años de trabajo orientados al estudio del comportamiento termomecánico de materiales estructurales utilizados en reactores nucleares, combinando modelización micromecánica, simulaciones por elementos finitos y desarrollo de herramientas computacionales. El proceso de investigación implicó no solo la adquisición de conocimientos técnicos, sino también un aprendizaje continuo asociado al planteo, validación y reformulación de modelos físicos y numéricos.

En este sentido, el desarrollo de la tesis estuvo marcado por un trabajo iterativo entre formulación teórica, implementación computacional y análisis de resultados, propio de la investigación en mecánica computacional y ciencia de materiales. Este enfoque permitió abordar el problema desde una perspectiva multiescala, conectando la microestructura del material con su respuesta macroscópica bajo condiciones de operación relevantes.

Agradecimientos

Este trabajo requirió de creadores, y ese rol no recae únicamente sobre los hombros del autor. Una tesis doctoral es siempre una construcción colectiva, sostenida por personas que aportan conocimiento, tiempo, recursos, acompañamiento y, muchas veces, confianza en momentos en los que el propio autor duda.

En primer lugar, deseo expresar un reconocimiento profundo a Javier Signorelli, quien fue mi primer director de tesis. Javier tuvo no solo el conocimiento y la claridad intelectual para guiar los primeros pasos de este trabajo, sino también el don y la vocación de formar e impulsar mi transformación como alumno en investigación. Su manera de pensar la ciencia, su compromiso con la docencia y su generosidad intelectual marcaron de forma decisiva mi recorrido. Su fallecimiento, ocurrido a mitad del desarrollo de esta tesis, dejó una huella profunda; sin embargo, muchas de las ideas y enfoques que atraviesan este trabajo son fruto de sus enseñanzas.

Agradezco especialmente a mi director, Dr. Alejandro E. Albanesi, y a mi codirector, Dr. César I. Pairetti, por haber continuado y acompañado este proceso con compromiso, paciencia y rigor científico. Su guía fue fundamental para la consolidación de los resultados alcanzados y para la finalización de esta tesis.

Deseo reconocer a todas aquellas personas cuyo trabajo tuvo un impacto directo en los resultados científicos presentados. En particular, agradezco a los técnicos del clúster de cómputo y al personal informático, cuyo esfuerzo por mantener y poner en condiciones los recursos computacionales hizo posible el desarrollo de simulaciones complejas y extensas. Asimismo, agradezco a las autoridades del Instituto de Física, Fabio y Jorge, por la predisposición permanente para facilitar los recursos materiales y la infraestructura necesaria para avanzar en esta investigación.

Quiero también agradecer a quienes, sin intervenir de manera directa en los resultados publicados, tuvieron un impacto fundamental en lo humano y emocional durante este camino. A Ema N., Martín L., Gonza B., Martín A., Santi R., Lina G. y al resto de becarios y becarias con quienes compartí discusiones, mates, frustraciones y alegrías. Su compañía hizo que este recorrido fuera más llevadero y, sobre todo, más disfrutable.

Finalmente, agradezco a mi mamá y a mis hermanos, por el apoyo incondicional, la paciencia y la confianza a lo largo de todos estos años. Su presencia constante fue un sostén indispensable para llegar hasta aquí.

Resumen

En esta tesis se desarrolla y valida un marco multiescala para predecir el comportamiento termomecánico de componentes nucleares fabricados con aleaciones de circonio (Zircaloy-2). La implementación acopla el modelo viscoplástico autoconsistente (VPSC) —capaz de representar creep y crecimiento bajo irradiación, creep térmico y expansión térmica a nivel cristalino— con la plataforma de elementos finitos Code_Aster. Esta integración transfiere la física constitutiva desde la microestructura hacia un análisis estructural completo, vinculando textura cristalográfica y respuesta global.

Se desarrolló un esquema automatizado para rotar tensores de tensión y deformación entre el sistema global del FEM y los ejes cristalográficos de cada grano, funcionalidad no disponible originalmente en Code_Aster. Además, se recupera analíticamente la deformación elástica mediante la inversa del tensor de rigidez autoconsistente provisto por VPSC.

La capacidad predictiva del marco se demuestra mediante la simulación de un conjunto combustible tipo PWR, incluyendo el contacto no lineal entre la grilla espaciadora y el tubo de revestimiento de Zircaloy-2. Los resultados reproducen fenómenos complejos y confirman la influencia dominante de la textura en la respuesta anisotrópica.

Se identificó que texturas con alta fracción de planos prismáticos orientados en la dirección normal reducen la separación y el desgaste entre componentes. Los mecanismos térmicos gobiernan la relajación inicial, mientras que los inducidos por irradiación dominan a largo plazo.

En conjunto, la tesis presenta una plataforma computacional abierta y extensible para analizar el desempeño de combustibles nucleares, permitiendo simulaciones de alta fidelidad bajo condiciones combinadas de carga térmica, mecánica y de irradiación.

Palabras clave: Anisotropía; Daño por irradiación; Zircaloy-2; Modelado multiescala; Elementos finitos.

Abstract

This thesis develops and validates a multiscale modeling framework to predict the thermo-mechanical behavior of nuclear components made of Zircaloy-2. The approach couples the viscoplastic self-consistent (VPSC) model —capable of representing irradiation creep and growth, thermal creep, and thermal expansion at the crystal level— with the finite element platform Code_Aster. This integration transfers the constitutive physics from the microstructural scale to a full structural analysis, linking crystallographic texture to the global response.

An automated tensor-rotation scheme between the global FEM system and each grain's crystallographic axes was implemented, together with an analytical recovery of elastic deformation via the inverse of the VPSC stiffness tensor.

The predictive capability is demonstrated through the simulation of a Pressurized Water Reactor (PWR) fuel-assembly case, reproducing nonlinear contact between spacer grid and cladding tube. Results highlight the role of crystallographic texture in the anisotropic mechanical response.

Textures with a high fraction of prism planes aligned with the grid's normal direction reduce component separation and wear. Thermal mechanisms dominate the initial stress relaxation, while irradiation-induced effects prevail in the long term.

Overall, the thesis introduces an open and extensible computational framework for high-fidelity nuclear-fuel simulations under combined thermal, mechanical, and irradiation loads.

Keywords: Anisotropy; Irradiation damage; Zircaloy-2; Multiscale modeling; Finite elements.

Índice general

Prefacio

Agradecimientos

Resumen

Abstract

Nomenclatura

Principales acrónimos

1. Introducción y motivación: diseño mecánico en ingeniería nuclear	1
1.1. Diseño de dispositivos para la ingeniería nuclear	1
1.2. Objetivos	6
1.3. Organización del manuscrito	7
2. Caracterización de materiales para la industria nuclear	9
2.1. Introducción	9
2.2. Generalidades y aplicación en la industria Nuclear	10
2.2.1. Tipos de elementos combustibles	12
2.2.2. Aplicaciones de las aleaciones de Zr	13
2.2.3. Propiedades del Zr y sus aleaciones	14
2.3. Estructura Hexagonal Compacta (HCP) y Mecanismos de Deformación	16
2.3.1. Textura y anisotropía	18
2.3.2. Medición y Representación de la Textura	19
2.4. Procesamiento: Texturas Típicas en metales HCP	22
2.4.1. Texturas por deformación	22
2.4.2. Laminación de Chapas	25

2.5. Conclusiones	26
3. Relación tensión–deformación multiescala: del cristal simple al FEM	27
3.1. Introducción	27
3.2. Modelo a Nivel Microscópico: Ecuaciones Constitutivas del Cristal Simple	29
3.2.1. Deformación Elástica Lineal	29
3.2.2. Deformación Plástica	30
3.2.3. Modelo Cristalográfico bajo irradiación	37
3.2.4. Creep Térmico cristalográfico	42
3.2.5. Expansión Térmica cristalográfica	43
3.3. Modelo a Nivel Mesoscópico: Policristal	44
3.3.1. Propiedades Globales de Policristales: promedios y respuesta	44
3.3.2. Familias de modelos policristalinos	47
3.3.3. Modelo Visco-Plástico Auto Consistente (VPSC)	50
3.4. Modelos a Nivel Macroscópico: enfoque policristalino en FEM	54
3.4.1. Método de Elementos Finitos (FEM)	57
4. Implementación de la metodología VPSC–CAFEM en un marco de Elementos Finitos	68
4.1. Introducción	68
4.2. Subrutina UMAT: interfaz con Code_Aster	69
4.3. Algoritmo general de conexión de leyes constitutivas con Code_Aster	70
4.3.1. Caso de referencia: UMAT fenomenológica bajo irradiación	74
4.4. Definición de Sistemas de Referencias Locales	78
4.5. Flujo de cálculo VPSC dentro de la UMAT	80
4.6. Cálculo analítico de la deformación elástica y la matriz tangente consistente . . .	84
4.7. Validación código a código del acople VPSC–CAFEM mediante tracción uniaxial .	87
4.8. Análisis de convergencia y costo computacional	89
4.8.1. Rendimiento computacional del acoplamiento VPSC–CAFEM	90
4.9. Plataforma de ensayos virtuales basada en VPSC–CAFEM	92
4.9.1. Motivación y ventajas frente a modelos fenomenológicos	92
4.9.2. Ensayos numéricos para la calibración	93
4.10. Escalabilidad y aplicación en geometrías realistas	93
4.11. Perspectivas de uso	94

5. Validación del marco constitutivo y estudios de sensibilidad	95
5.1. Introducción	95
5.2. Estrategia de reducción de la textura cristalina	96
5.3. Caso de Referencia/Validación: Creep y Crecimiento bajo irradiación	98
5.3.1. Efecto de la textura en el crecimiento bajo irradiación	102
5.3.2. Efecto de la textura en el creep bajo irradiación	103
5.4. Caso de Referencia: Creep Térmico	104
5.5. Distribución de tensiones y deformaciones en el tubo de revestimiento: irradiación vs. irradiación + térmico	105
6. Aplicación industrial: interacción tubo–grilla en conjuntos combustibles	109
6.1. Introducción	109
6.2. Planteo del problema industrial y plataforma de simulación	110
6.3. Configuración de la simulación	111
6.4. Condiciones de Borde para el estudio del conjunto tubo-grilla	112
6.5. Efectos de la plasticidad cristalina en la separación de componentes	114
6.6. Formación y evolución de la separación de contacto	115
6.7. Sensibilidad de la separación en función de la alineación de texturas	116
6.8. Efecto de invertir las presiones en la separación de los componentes	119
6.9. Extensión de la plataforma a fenómenos térmicos	121
6.10. Análisis comparativo: respuesta bajo irradiación pura y bajo irradiación acoplada a efectos térmicos	122
6.10.1. Influencia de los efectos térmicos sobre el CLR	125
6.10.2. Efecto de la precarga térmica en componentes irradiados	127
6.11. Descripción detallada de la distribución espacial de tensiones y deformaciones	128
6.12. Influencia de los coeficientes elásticos en los campos de tensión y deformación	131
6.13. Regímenes cuantitativos de relevancia térmica	133
6.14. Efectos de temperatura y tensión sobre la CLR	134
6.15. Límite actual de escala geométrica y perspectivas de escalamiento	136
7. Conclusiones y Perspectivas	140
7.1. Conclusiones	140
7.2. Perspectivas a Futuro	142
7.2.1. Extensión del modelo a grandes deformaciones	142
7.2.2. Incorporación de Plasticidad Instantánea	143

7.2.3. Mejora del desempeño computacional del modelo VPSC	144
7.2.4. Impacto en simulaciones FEM	145
7.2.5. Incorporación de la elasticidad en el VPSC sin enfoque analítico	145
Bibliografía	147
A. Subrutina para definir sistemas de coordenadas locales	166
Apéndice A: Explicación del Código Python para definir sistemas de coordenadas locales	166
B. De la teoría a la práctica: qué cambia al migrar la UMAT a Code_Aster	168
C. Archivos de entrada de simulación	172
Apéndice B: Inputs para simulación VPSC-CAFEM	172
B. Input para iniciar simulación VPSC-CAFEM	172
B. Archivo de Textura para el tubo de revestimiento	175
B. Archivo de Textura para la grilla espaciadora	176
B. Archivo con información cristalográfica para modelo unicamente irradiado	176
B. Archivo con información cristalográfica para modelo irradiado + térmico	180
D. Publicaciones derivadas de esta tesis	183
Publicaciones derivadas de esta tesis	183

Índice de figuras

1.1. Componentes básicos y diseño de una central nuclear (ElectricalEasy.com, 2015).	2
1.2. Diseño básico de elementos combustible (Hussain and Al-Othmany, 2013).	2
1.3. Escalas de modelización de un sólido cristalino.	4
1.4. Integración de escalas en la simulación.	6
2.1. Representación computacional de la vasija de presión del reactor Atucha I, mostrando la disposición interna de los componentes principales (Rabazzi et al., 2024c).	10
2.2. Comparación de propiedades mecánicas y nucleares de distintos metales candidatos a materiales estructurales en el núcleo de un reactor nuclear (Cheadle, 1974).	11
2.3. Aleaciones y representaciones del elemento combustible.	12
2.4. Constitución del elemento combustible (CONUAR, 2025).	13
2.5. Composición típica (en %) de aleaciones de zirconio empleadas en combustible nuclear y componentes asociados. Se indican designaciones ASTM y rangos de Sn, Nb, Fe, Cr, Ni y O para Zircaloy-2/4 y aleaciones con Nb (M5, E110, Zr-2.5Nb, E125, ZIRLO, E635) (Cheadle, 1974).	15
2.6. Esquema comparativo de las celdas unitarias más comunes en metales: BCC, FCC y HCP.	17
2.7. Sistemas de deslizamiento más observados en α -Zr a bajas temperaturas Juarez et al. (2019) .	17
2.8. Relaciones de orientación para el maclado en fase α (tracción/compresión) Juarez et al. (2019) .	18
2.9. Esquema del proceso de laminación con reducción del espesor.	21
2.10. Rotación de un cristal debido a deslizamiento (Lebensohn et al., 2021).	23

2.11. Esquema de texturas de laminación en metales HCP con relación c/a (a) mayor a 1.633 (b) aproximadamente igual a 1.633 y (c) menor a 1.633. (0002) y (10 $\bar{1}$ 0) figuras de polo (Kocks et al., 2000).	24
2.12. Orientación preferencial de los cristales hexagonales por procesos de: (a) laminación y (b) recristalización.	25
3.1. Esquema del diagrama de deslizamiento sobre el plano de normal n en la dirección b	32
3.2. Esquema ilustrativo del efecto del crecimiento bajo irradiación en un cristal HCP. En negro, el cristal en su estado original. En rojo, el cristal deformado: expansión en las direcciones $\langle a \rangle$ y contracción en la dirección $\langle c \rangle$	37
3.3. Orientación del cristal simple utilizado para la incorporación del modelo de crecimiento por irradiación en VPSC. Imagen tomada de Subramanian et al. (2012) . .	40
3.4. Modelos de deformación del policristal: (a) Taylor, (b) Sachs, (c) Autoconsistente de 1-sitio y (d) Autoconsistente de n -sitios (Signorelli, 1999).	48
3.5. Deformación axial en función de la carga axial, considerando solo irradiación (creep y crecimiento) o los efectos combinados de irradiación y el creep térmico (incluida la expansión térmica para la velocidad de calentamiento). $= 0,0018 K/h$ (adaptado de Aguzzi et al. (2026)).	52
3.6. Textura del tubo de presión utilizada en la simulación (plano basal). Las direcciones principales del tubo se indican como A (axial), T (tangencial) y R (radial). . .	53
4.1. Esquema del proceso iterativo de análisis no lineal, mostrando cálculos a nivel global, de elemento y de punto de Gauss, con intervención en UMAT.	74
4.2. Validación de la implementación: comparación de campos y respuesta global con el modelo de referencia (IRRAD3M/baseline). (a) descomposición de deformación bajo una deformación impuesta, (b) curva tensión-deformación con variación de Temperatura y (c) curva tensión-deformación con variación de dosis de irradiación. . .	76
4.3. Aplicación: Escuadra soporte toroide superior CNA1.	77
4.4. Resultados de la aplicación -Escuadra soporte-: Tensión de Von Mises y componentes de deformación para 0, 3, 6.5 y 10 dpa bajo carga y temperatura constantes). . .	77
4.5. Posición relativa de los ejes cristalográficos HCP con respecto a los sistemas de coordenadas locales solidarios a un cuarto de tubo. Las direcciones A, H y R corresponden a las direcciones axial, circunferencial y radial del tubo de revestimiento. . .	79
4.6. Diagrama de flujo que resume las etapas de cálculo de la UMAT.	84

4.7. Diagrama de flujo para conectar VPSC con CAFEM.	87
4.8. Validación del acople VPSC–CAFEM frente a VPSC-SA en tracción uniaxial (textura de tubo de presión). Las tres curvas tensión–deformación (VPSC-SA, VPSC–CAFEM con 1 elemento y con 3 elementos) <i>coinciden dentro del espesor de línea</i> , lo que confirma la consistencia del acople constitutivo y de la rotación de tensores entre marcos local y global.	88
4.9. Figuras de polos directas (0002) y (10 $\bar{1}$ 0) superpuestas predichas por VPSC-SA (puntos azules de mayor tamaño) y VPSC-CAFEM (puntos naranjas más pequeños) para una tracción uniaxial del 20 % de un policristal HCP. Se grafica un punto por polo y por grano, lo que permite comparar la textura global y la correspondencia grano a grano.	89
4.10. Convergencia del esquema de Newton–Raphson en la interfaz VPSC–CAFEM: total de iteraciones globales necesarias para alcanzar el criterio χ (sección anterior) en función del tamaño de paso Δt . Pasos de tiempo más pequeños reducen el número de iteraciones por paso y estabilizan la tasa de convergencia; sin embargo, aumentan la cantidad de pasos totales. Existe, por lo tanto, un <i>trade-off</i> entre robustez y costo global.	90
4.11. Esquema jerárquico de las iteraciones: el primer nivel corresponde a VPSC para encontrar la respuesta del policristal, el segundo nivel a la UMAT para determinar la descomposición elasto-plástica. En casos de contactos entre piezas se resolvería un Newton-Raphson y finalmente otro NR a nivel global	91
4.12. Esquema conceptual de la plataforma de <i>ensayos virtuales</i> basada en la interfaz VPSC–CAFEM. La metodología integra el modelo micromecánico de policristales con la resolución estructural por elementos finitos, permitiendo reproducir fenómenos de irradiación, creep, crecimiento y efectos térmicos en componentes de reactor nuclear.	94
5.1. Figuras de polos basales: (a) tubo — textura completa (1144 orientaciones), (b) tubo — textura reducida (7 orientaciones), (c) grilla — textura completa (2428 orientaciones), (d) grilla — textura reducida (13 orientaciones). Las imágenes de las texturas completas (a) y (c) son extraídas de Patra and Tomé (2017) . Direcciones del tubo: axial (1), circunferencial (2) y radial (3). Direcciones de la grilla: laminado (4), transversal (5) y normal (6).	96
5.2. Puntos de Gauss para la geometría de un cuarto de tubo de recubrimiento. . . .	99

5.3. Distribution of (a): Radial, (b): Hoop, and (c): Axial strains in the cladding after irradiation to 20 dpa.	100
5.4. Evolución de las deformaciones de crecimiento (en ausencia de esfuerzos aplicados).	101
5.5. Comparison of total (growth and creep) strain under irradiation for axial loads of 100 MPa and 200 MPa.	102
5.6. Crecimiento bajo irradiación (componentes radial, circunferencial y axial) para (a) Zircaloy-2 con textura reducida y (b) agregado con textura aleatoria. A la izquierda: figura de polo basales de textura random con 200 orientaciones. Parámetros utilizados: Tabla 5.1.	103
5.7. Efecto de la textura en el creep bajo irradiación: deformación axial hasta 20 dpa para dos niveles de tensión axial. Las líneas sólidas corresponden a Zircaloy-2 con textura reducida y las líneas discontinuas al agregado con textura aleatoria. .	104
5.8. Deformación térmica a 523 K para un monocristal con 10 MPa aplicados en la dirección 22. Los símbolos representan los resultados del VPSC autónomo; las líneas continuas corresponden a las predicciones VPSC-CAFEM.	105
5.9. Anisotropía de la deformación total vs. dosis (DPA) para 50, 100, 150 y 200 MPa. Izquierda: sólo irradiación (creep + growth). Derecha: irradiación + <i>thermal creep</i> + <i>thermal expansion</i> a 523 K con $\dot{T} = 1,8 \times 10^{-3}$ K/h. Colores: verde (AXIAL), rojo (TANGENCIAL), azul (RADIAL). La contribución del <i>thermal creep</i> —dependiente de la tensión— incrementa la deformación axial y la diferencia entre paneles se vuelve mayor a medida que aumenta la tensión.	106
5.10. Respuesta bajo carga axial (dirección Z). (A) ε_{VM} : fila superior sólo irradiación (creep + growth); fila inferior irradiación + <i>thermal creep</i> + <i>thermal expansion</i> a $T = 523$ K con $\dot{T} = 1,8 \times 10^{-3}$ K/h. (B) σ_{VM} : mismos casos. Columnas: 100, 150 y 200 MPa. Los mecanismos térmicos incrementan ε_{VM} y alivian σ_{VM} , con efecto creciente al aumentar la tensión aplicada.	108
6.1. Separador elástico utilizado en el conjunto combustible. (a) Imagen de referencia adaptada de CONUAR (2025) . (b) Fotografía tomada por el autor.	109
6.2. (a) Configuración tubo–grilla espaciadora. (b) Vista frontal de la grilla con 4 dimples de apoyo. La esquina inferior izquierda representa el sistema material de la grilla. (c) Vista superior de la configuración tubo–grilla, mostrando la fuerza puntual debida al resorte.	113

6.3. Predicciones VPSC-SA de la deformación por crecimiento para la textura de la grilla en la Fig. 5.1(d).	114
6.4. Esquema de la deformación dependiente de la textura debido al crecimiento por irradiación en (a): tubo de recubrimiento, (b): hoyuelo en la grilla espaciadora, (c): vista superior del tubo de recubrimiento y de los hoyuelos en la grilla espaciadora.	115
6.5. CLR correspondiente a las superficies esclavas para contacto no lineal para 20 dpa.	115
6.6. CLR máximo para la textura del Test 1.	116
6.7. (a) figura de polos basales para el Ensayo 1. (b) figura de polos prismáticos para el Ensayo 1.	117
6.8. (a) figura de polos basales para el Ensayo 2. (b) figura de polos prismáticos para el Ensayo 2.	117
6.9. (a) figura de polos basales para el Ensayo 3. (b) figura de polos prismáticos para el Ensayo 3.	117
6.10. (a) figura de polos basales para el Ensayo 4. (b) figura de polos prismáticos para el Ensayo 4.	118
6.11. Comparación del CLR máximo para todos los ensayos en función de la dosis de irradiación, considerando la dependencia con la textura cristalina.	119
6.12. CLR máximo considerando el efecto de inversión de presión: Presión Interna > Presión Externa.	120
6.13. Comparación del CLR máximo para todos los ensayos en función de la dosis de irradiación, considerando la dependencia con la textura cristalina y la inversión de presión.	121
6.14. Evolución del CLR bajo diferentes mecanismos físicos. El CLR se evalúa aislando cada fenómeno individualmente: crecimiento por irradiación (símbolos azules), fluencia por irradiación (línea naranja discontinua), expansión térmica (línea verde con trazos y puntos), fluencia térmica (línea marrón con trazos y puntos) y el caso combinado con todos los fenómenos activos (línea roja continua).	123
6.15. CLR máximo en función de la dosis (DPA), comparando casos con solo irradiación (símbolos) y casos combinados irradiación + carga térmica (líneas), hasta 20 dpa (55 560 horas).	125
6.16. Evolución de la CLR para distintas tasas de calentamiento considerando solo expansión térmica. Tasas mayores adelantan el contacto y potencian la fase de separación.	126

6.17. Evolución del CLR para distintas velocidades de calentamiento considerando solo <i>creep</i> térmico. Tasas mayores reducen la aproximación total por el aumento de la tasa de deformación y la orientación cristalográfica del revestimiento.	127
6.18. Comparación simulada de la separación (CLR) en el Lado 1: en rojo, caso con precarga térmica ($\Delta T = 523K$); en azul, caso sin precarga. Principales observaciones: (i) el caso precargado mantiene un régimen elástico inicial ($< 2dpa$), seguido de una aproximación gobernada por <i>creep</i> ($\approx 64\mu m$); (ii) el caso sin precarga muestra una separación temprana (0.5–1.2 dpa) y luego estabilización. Bandas de error: $\pm 5\mu m$	128
6.19. Deformación por irradiación	130
6.20. Deformación térmica	130
6.21. Deformación acoplada	130
6.22. Tensión por irradiación	130
6.23. Tensión térmica	130
6.24. Tensión acoplada	130
6.25. Deformación por irradiación	130
6.26. Deformación térmica	130
6.27. Deformación acoplada	130
6.28. Tensión por irradiación	130
6.29. Tensión térmica	130
6.30. Tensión acoplada	130
6.31. Distribución de deformaciones y tensiones de von Mises bajo diferentes condiciones de carga. (a–f): respuesta global. (g–l): respuesta local.	130
6.32. Distribuciones globales de deformación y tensión elástica de von Mises en el conjunto (tubo + grilla) bajo cargas combinadas de irradiación y térmicas. (a–b): campos de deformación usando coeficientes a temperatura ambiente y a 576 K. (c–d): campos de tensión correspondientes.	132
6.33. Influencia de los coeficientes elásticos en la separación (CLR) entre el tubo de revestimiento y la grilla espaciadora.	133
6.34. CLR máxima bajo carga acoplada irradiación+térmica para los cuatro casos de la Tabla 6.1.	135
6.35. Mallas de conjunto de Tubo y Grilla, vistas: (a) superior, (b) frontal y (c) isométrica	136
6.36. Geometría fiel del hexágono central de la grilla espaciadora	137

6.37.(a) Vista isométrica de la geometría correspondiente al hexágono central de la grilla. (b) vista superior del conjunto tubo-grilla y (c) zonas de contacto (en rojo) de la grilla hacia el tubo	137
6.38. Detalles del mallado de la geometría del hexágono central a la grilla.	138
D.1. Primera página del artículo publicado en <i>Nuclear Engineering and Design</i> (2025). DOI: 10.1016/j.nucengdes.2025.114345	183
D.2. Primera página del artículo “ <i>Multiphysics finite element modeling of irradiation and thermal behavior demonstrated on a fuel-assembly problem</i> ”, publicado en <i>Nuclear Engineering and Design</i> (2026). DOI: 10.1016/j.nucengdes.2025.114648	184

Índice de tablas

3.1. Comparación de las principales familias de modelos policristalinos.	49
4.1. Parámetros típicos en el baseline fenomenológico (ejemplo).	78
5.1. Model parameters for Zircaloy-2, from Patra et al. (2017) and Patra and Tomé (2017) .102	
5.2. Condiciones de simulación para creep térmico: Validación código a código.	105
6.1. Matriz de casos para el estudio paramétrico (todos con irradiación).	134

Nomenclatura

β	Variables internas (orientación, morfología y estado de endurecimiento de cada grano).
c_i	Concentración de intersticiales individuales.
c_{ic}^j	Concentración de cúmulos intersticiales en la dirección/variante j .
$\mathbb{C}^{\text{tg}}$	Operador tangente consistente.
c_v	Concentración de vacancias individuales.
ε	Tensor de deformaciones.
F^β	Ley de evolución de variables internas β .
F^σ	Relación constitutiva tensión-deformación.
m	Tensor de Schmid.
N_i^j	Densidad numérica volumétrica de bucles tipo intersticial (“interstitial loops”).
N_v^j	Densidad numérica volumétrica de bucles tipo vacancia (“vacancy loops”).
R	Tensor de rotación.
ρ_d	Densidad de dislocaciones.
ρ^j	Densidad de dislocaciones de la familia j .
r_i^j	Radio medio de bucles tipo intersticial en la dirección/variante j (nm).

r_v^j Radio medio de bucles tipo vacancia en la dirección/variante j (nm).

S Tensor de Eshelby.

σ Tensor de tensiones de Cauchy.

T Temperatura.

Principales acrónimos

CA	Cristal Axes.
CLR	Clearance.
FEM	Método de Elementos Finitos.
HCP	Hexagonal Compacta.
PWR	Pressurized Water Reactor.
SA	Sample Axes.
TA	Test Axes.
UMAT	User MATerial subroutine.
VPSC-SA	Modelo Visco-Plástico Autoconsistente autónomo.
VPSC-CAFEM	Integración de VPSC en Code_Aster (CAFEM).

Capítulo 1

Introducción y motivación: diseño mecánico en ingeniería nuclear

1.1 Diseño de dispositivos para la ingeniería nuclear

La energía eléctrica es un pilar del desarrollo social y económico: sustenta la industria, los servicios y la vida cotidiana de millones de personas. Entre las fuentes disponibles, la **energía nuclear** ocupa un lugar estratégico por su alta densidad energética, su bajo impacto en emisiones de carbono y su capacidad de proveer potencia base de manera continua. En países con una red diversificada, la contribución de los reactores nucleares permite estabilizar la oferta energética y disminuir la dependencia de combustibles fósiles, aportando a los objetivos globales de mitigación del cambio climático.

En el núcleo del reactor, el calor generado por la fisión nuclear se transfiere al refrigerante, que circula a través de los conjuntos combustibles y transporta esa energía hacia el generador de vapor o intercambiador de calor. Allí, el agua se convierte en vapor, que impulsa una turbina de vapor conectada a un alternador. La rotación de la turbina se transforma en energía eléctrica, que luego es acondicionada e inyectada a la red de distribución. De esta manera, la energía liberada a escala atómica en los núcleos de uranio se convierte en corriente eléctrica disponible para el consumo cotidiano (ver Fig. 1.1).

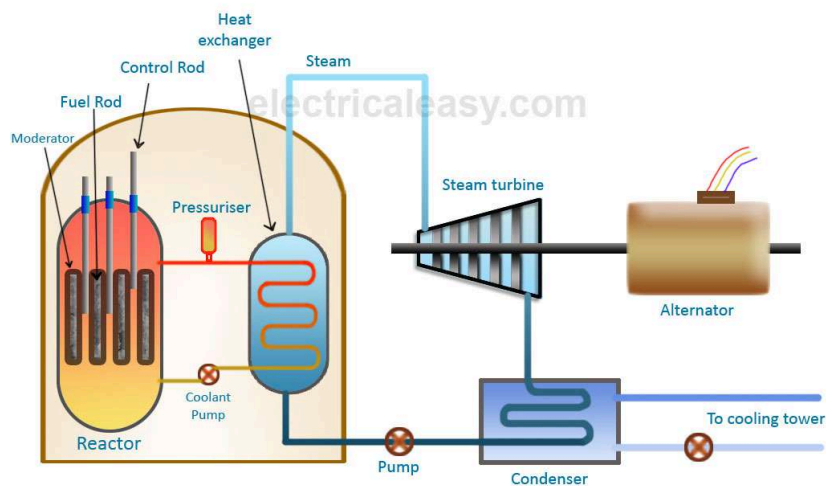


Figura 1.1: Componentes básicos y diseño de una central nuclear (ElectricalEasy.com, 2015).

La fiabilidad de esta energía depende directamente de la **integridad de los componentes estructurales del reactor**. Entre ellos se destacan los **elementos combustibles**, conjuntos que albergan el material fisionable y que, por lo tanto, son el corazón del proceso de generación eléctrica (ver Fig. 1.2). Cada elemento combustible está compuesto por decenas de **varillas de combustible**, formadas por pastillas cilíndricas de dióxido de uranio (UO_2) encapsuladas en tubos delgados de aleación de zirconio, denominados *vainas*. Estas vainas cumplen una doble función: contienen el material radiactivo y permiten la transferencia eficiente de calor al refrigerante. Para mantenerlas en posición y garantizar un flujo de agua uniforme, se emplean **grillas espaciadoras**, que aportan rigidez al conjunto.

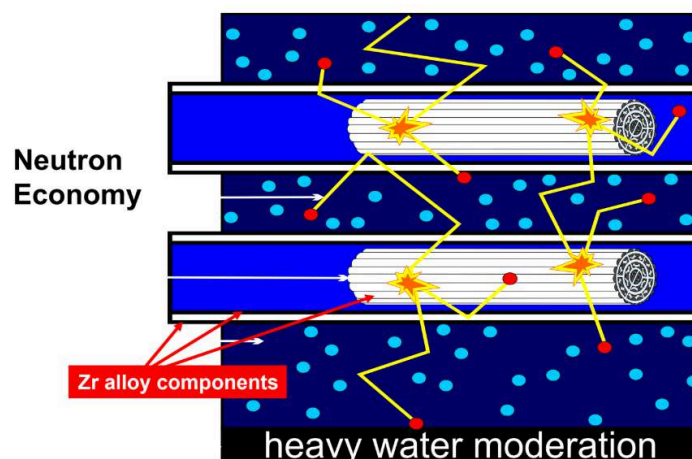


Figura 1.2: Diseño básico de elementos combustible (Hussain and Al-Othmany, 2013).

Si los elementos combustibles *fallan*, es decir, si las vainas pierden su estabilidad estructural por deformaciones acumuladas, pueden ocurrir problemas de diseño críticos:

Problemas de diseño

- pérdida de holgura entre vaina y grilla, generando **contactos no deseados** que concentran tensiones;
- **obstrucción parcial del flujo de refrigerante**, lo que reduce la capacidad de extraer calor;
- en casos extremos, **fisuras en la vaina** que permitan la liberación de material radiactivo al refrigerante.

El refrigerante —agua pesada a alta presión— es esencial porque extrae el calor de fisión y mantiene al combustible en condiciones seguras de operación. No obstante, el propio flujo de refrigerante puede inducir vibraciones que, si coinciden con la pérdida de holgura o con rigideces locales reducidas, incrementan el riesgo de desgaste por *fretting*¹ y la relocalización de tensiones en los puntos de contacto. Por ello, el diseño de componentes estructurales exige materiales de alto desempeño, lo que impulsa el desarrollo de aleaciones avanzadas con microestructuras complejas. Aquí llamamos *microestructura* al conjunto de rasgos internos del material —fases presentes, tamaño y forma de grano, *textura* (orientación cristalográfica), partículas de segunda fase y densidad de defectos— que se observan típicamente entre la nano y la micra. Esta heterogeneidad, presente en todas las escalas, influye de manera decisiva en la respuesta global. En consecuencia, comprender el comportamiento del material tanto durante su fabricación como en servicio resulta esencial para optimizar su desempeño y extender la vida útil de los componentes.

Desde el punto de vista del proceso de fabricación, el control de la microestructura es fundamental. La presencia de defectos cristalinos —como vacancias, intersticiales, dislocaciones o precipitados— no siempre resulta perjudicial; por el contrario, su correcta distribución y morfología puede conferir al material propiedades deseadas. Dado que la eliminación total de defectos es prácticamente imposible, el objetivo es inducir un arreglo controlado y funcional. Por su parte, desde el análisis estructural, se requiere una ley constitutiva que describa de forma efectiva la respuesta global del material bajo condiciones operativas. Este compromiso entre el detalle microestructural y la necesidad de una descripción global constituye uno de los principales desafíos del modelado de materiales.

Durante la operación en reactor, las vainas de combustible experimentan deformaciones irreversibles producto de dos mecanismos plásticos inducidos por irradiación: *creep*, cuando existe

¹ mecanismo de desgaste mecánico localizado que ocurre por contacto y vibración repetitiva entre tubo y grilla.

tensión aplicada, y *crecimiento*, en ausencia de tensión. Ambos procesos se originan por la creación y migración de defectos puntuales, generados por colisiones entre neutrones rápidos y átomos del material.

Poder predecir estos efectos indeseables es crucial para garantizar la seguridad y confiabilidad del reactor. Para ello, es necesario comprender en profundidad los mecanismos de deformación bajo irradiación, así como las tensiones internas y residuales generadas tanto durante la operación como en los procesos de fabricación. Esta comprensión requiere estudiar múltiples regímenes de respuesta del material: elástico y plástico. En el régimen plástico se distinguen mecanismos **dependientes de la temperatura** (creep térmico) y **dependientes de la irradiación** (crecimiento y creep bajo irradiación). En particular, el creep térmico puede adquirir relevancia en zonas de contacto o en presencia de precipitados, incluso a temperaturas moderadas.

Dado que los ensayos experimentales en condiciones de operación del reactor son extremadamente costosos, complejos y lentos —porque los fenómenos se desarrollan a lo largo de años—, la modelización se vuelve una herramienta indispensable. Además, no es posible acelerar estos procesos incrementando el flujo neutrónico sin alterar los mecanismos físicos involucrados. En este contexto, una **primera aproximación** razonable es recurrir a **modelos fenomenológicos** basados en ajustes empíricos de la respuesta global del material. Sin embargo, estos modelos presentan limitaciones relevantes: su validez queda restringida a los rangos para los que fueron calibrados y no resultan extrapolables a otras aleaciones ni a condiciones de operación distintas. De allí la necesidad de enfoques multiescala basados en la microestructura, capaces de fundamentar las predicciones y extender su dominio de aplicación.

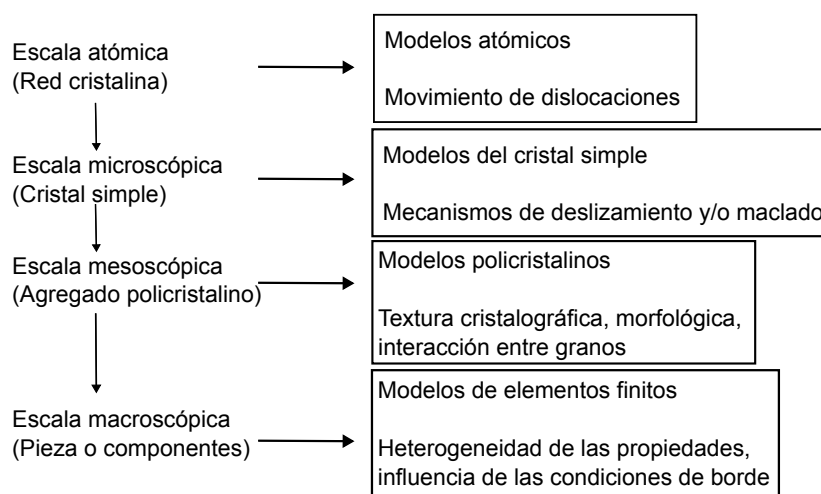


Figura 1.3: Escalas de modelización de un sólido cristalino.

Para abordar esta complejidad se requiere una **descripción multiescala** que vincule la mi-

microestructura con la respuesta macroscópica del componente. En esta tesis se adoptan tres niveles jerárquicos: **microscópico** (cristal simple), **mesoscópico** (policristal) y **macroscópico** (pieza o componente), como esquematiza la Fig. 1.3.

En la **escala microscópica** (cristal o sub-grano) la heterogeneidad surge de defectos puntuales (vacancias, intersticiales), lineales (dislocaciones) y volumétricos (precipitados). Las ecuaciones constitutivas relacionan tensiones y deformaciones (o velocidades de deformación) en un dominio que, en primera aproximación, se asume homogéneo.

En la **escala mesoscópica** (policristal) se emplean *modelos policristalinos* basados en hipótesis de homogeneización para promediar la respuesta de múltiples granos con distintas orientaciones. Según el régimen, las variables principales son tensión, deformación o velocidad de deformación del agregado. La información de estado grano-a-grano no está disponible a priori y debe inferirse mediante hipótesis adicionales, lo que da origen a diferentes familias de modelos.

En la **escala macroscópica** (componente) la respuesta efectiva del material se combina con la *geometría* y las *condiciones de borde*: variaciones de espesor, radios y uniones; interfaces de contacto con holguras y fricción; concentradores geométricos; y campos térmicos con gradientes, incluso con efectos de gran deformación. La resolución numérica se aborda con el método de elementos finitos (FEM), que históricamente ha recurrido a leyes fenomenológicas sin mecanismos microscópicos explícitos.

Para incorporar explícitamente la influencia de la microestructura en la respuesta global se utilizan **modelos policristalinos** que conectan el nivel del cristal simple con el del agregado y permiten representar anisotropía, textura y activación de mecanismos (deslizamiento/maclado), mejorando la capacidad de extrapolación frente a las leyes puramente empíricas. La §3.3.2 (Cap. 3) presenta la familia de estos enfoques —límites de Taylor/Sachs, esquemas con condiciones relajadas y modelos autoconsistentes (VPSC), así como alternativas de *campo completo* (CPFEM)— comparando hipótesis, alcance y costo, y justificando la elección de VPSC para el acople multiescala de esta tesis.

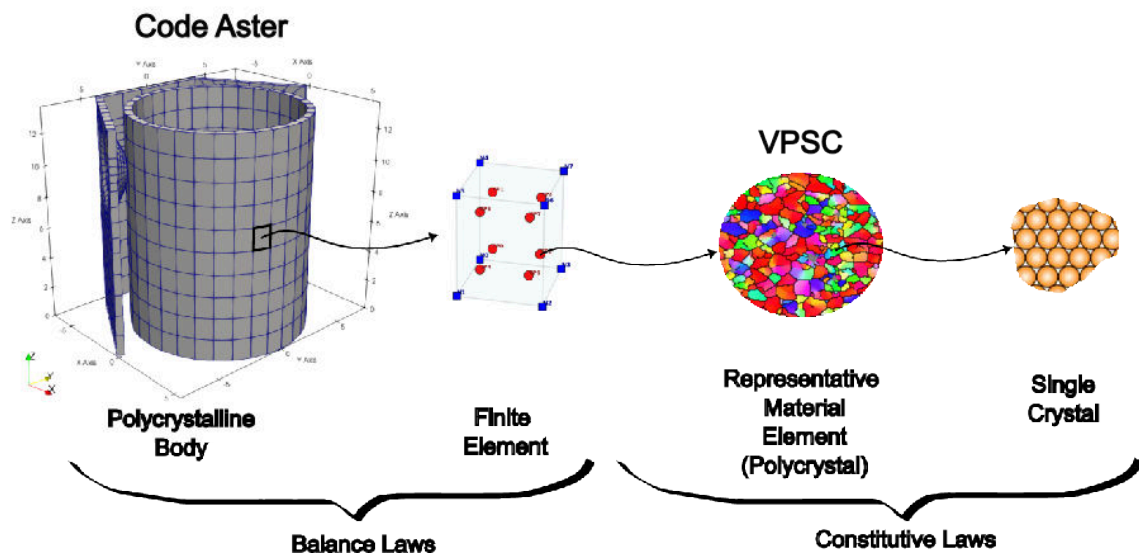


Figura 1.4: Integración de escalas en la simulación.

La Fig. 1.4 sintetiza esta *integración de escalas*: en aplicaciones a nivel de componente, el policristal representa sólo un *volumen local* (estadísticamente representativo) en cada punto de integración del FEM, donde se asumen condiciones de borde uniformes a primer orden. En este marco, la Integración de VPSC en Code_Aster (CAFEM) (VPSC–CAFEM) permite transportar la física cristalográfica a la simulación estructural, manteniendo **coherencia** entre escalas y **verificabilidad** del esquema.

En síntesis, este capítulo establece la necesidad de desarrollar una herramienta multiescala capaz de vincular la física de la microestructura con el diseño estructural de componentes nucleares, sentando la base conceptual de toda la tesis.

1.2 Objetivos

Objetivo general

- Desarrollar una plataforma numérica basada en FEM, acoplada a un modelo policristalino VPSC, para analizar componentes sometidos a irradiación, temperatura y presión, superando limitaciones de leyes fenomenológicas y habilitando la generación de **relaciones constitutivas macroscópicas** mejor informadas por la microestructura.

Objetivos específicos

- Implementar una interfaz de comunicación entre VPSC y FEM que evalúe, en cada punto de integración del dominio, la respuesta constitutiva derivada del modelo policristalino.

- Validar la herramienta mediante casos de referencia representativos (crecimiento y *creep* por irradiación; *creep* y expansión térmica).
- Contrastar con leyes fenomenológicas y delinear alcances y límites de cada enfoque.
- Habilitar ensayos virtuales de componentes internos de reactor fuera del rango de calibración de modelos empíricos.
- Generar curvas constitutivas y parámetros efectivos para calibrar y validar modelos macroscópicos —fenomenológicos— de menor costo computacional.

1.3 Organización del manuscrito

El manuscrito se ha organizado para conducir al lector desde la motivación tecnológica y los fundamentos de ciencia de materiales hasta la implementación numérica multiescala y su aplicación a un problema representativo de la industria nuclear. A continuación se sintetiza el contenido y el objetivo de cada capítulo.

- **Cap. 1 — Introducción y motivación: diseño mecánico en ingeniería nuclear.** Presenta el contexto general de los elementos combustibles en reactores Pressurized Water Reactor (PWR), los desafíos de diseño mecánico del tubo de revestimiento que contiene el combustible y de la grilla espaciadora; expone los objetivos específicos de la tesis, las preguntas de investigación y la metodología general adoptada.
- **Cap. 2 — Caracterización de materiales para la industria nuclear.** Se contextualiza el uso del Zr y sus aleaciones (propiedades, familias y condiciones de servicio) e introduce la estructura HCP con sus mecanismos de deformación. Se sintetizan la formación y medición de textura, así como las texturas por procesamiento, discutiendo su impacto en la respuesta bajo irradiación.
- **Cap. 3 — Relación tensión–deformación multiescala: del cristal simple al FEM.** Desarrolla las ecuaciones constitutivas desde el nivel de cristal simple (elasticidad, plasticidad, crecimiento y *creep* bajo irradiación, *creep* térmico y expansión térmica) hasta el policristal. Presenta el método de elementos finitos (FEM) para resolver el problema a escala de componente, incluyendo la formulación variacional, el cierre constitutivo y el tratamiento del contacto no lineal.
- **Cap. 4 — Implementación de la metodología VPSC–CAFEM en un marco de elementos finitos.** Detalla la integración del modelo policristalino VPSC en CODE_ASTER me-

diante una subrutina UMAT, la definición de sistemas de referencia locales, el flujo de cálculo interno y las pruebas de validación código–a–código. Se analizan la convergencia numérica, el costo computacional y se presenta la plataforma de *ensayos virtuales* para estudios paramétricos y de calibración.

- **Cap. 5 — Validación del marco constitutivo y estudios de sensibilidad.** Comprueba el desempeño del modelo frente a casos de referencia para crecimiento y *creep* bajo irradiación, y para *creep* térmico. Evalúa la estrategia de reducción de textura y cuantifica la sensibilidad de la respuesta frente a la anisotropía y a los parámetros constitutivos.
- **Cap. 6 — Aplicación industrial: interacción tubo–grilla en conjuntos combustibles.** Traslada la metodología a un caso representativo de la escala de componente: la interacción mecánica entre el tubo de revestimiento y la grilla espaciadora. Se describen la configuración de simulación, las condiciones de borde, la formación y evolución de las zonas de contacto y la influencia de la alineación de texturas. Se comparan escenarios de irradiación pura y de irradiación acoplada a efectos térmicos.
- **Cap. 7 — Conclusiones y perspectivas.** Resume los aportes principales, destaca las conclusiones generales y específicas, y plantea líneas de trabajo futuro: extensión del modelo a grandes deformaciones, incorporación de plasticidad instantánea, mejora de la eficiencia computacional, escalamiento a geometrías de mayor complejidad e integración de un modelo elastoviscoplastico a nivel del cristal simple.

Apéndices. Incluyen material de apoyo para la reproducibilidad (códigos y archivos de entrada), así como un compendio de publicaciones derivadas de esta tesis, con las referencias completas y las primeras páginas de los artículos.

Capítulo 2

Caracterización de materiales para la industria nuclear

2.1 Introducción

Se ha dicho con razón que el siglo XX fue el “siglo atómico”: en él nació y se consolidó la ingeniería nuclear. En términos sencillos, la industria nuclear genera electricidad al convertir el calor de la fisión en trabajo mecánico (vapor–turbina–generador). Con aporte de *bajas emisiones de gases de efecto invernadero durante la operación y bajas emisiones atmosféricas locales* en comparación con centrales térmicas convencionales.

Los materiales estructurales del núcleo del reactor nuclear operan en condiciones exigentes, ya que, además de estar expuestos a altas temperaturas, cargas estáticas, dinámicas significativas y entornos agresivos, también están expuestos a la radiación de partículas de alta energía, especialmente neutrones ([International Atomic Energy Agency, 2015](#)). Por lo tanto, además de las limitaciones estándar para los materiales estructurales de las centrales eléctricas, los materiales del núcleo del reactor también deben cumplir con requisitos específicos de servicio. En este capítulo se parte de una visión general de aplicaciones y requisitos, para luego descender hacia la descripción cristalográfica (estructura HCP), los mecanismos de deformación, la textura y los efectos del procesamiento ([Konings et al., 2012](#)).

*El Capítulo 1 enmarca la problemática de ingeniería a escala de componente y motiva los modelos multiescala. En este capítulo se abordan de forma necesaria la estructura cristalina, los mecanismos de deformación y el desarrollo de texturas en aleaciones de circonio (Zr), **destacando su papel irremplazable para explicar la anisotropía y fundamentar las leyes constitutivas**. Esta base microestructural es la que permite pasar de descripciones fenomenológicas a*

predicciones justificadas y extrapolables, *habilitando el modelo matemático y su implementación numérica que se desarrollan en los capítulos siguientes.*

2.2 Generalidades y aplicación en la industria Nuclear

En el contexto de un reactor de potencia, el **núcleo** (o *core*) es la región donde se alojan los conjuntos combustibles, embebidos por el refrigerante y expuestos al flujo neutrónico que sostiene la reacción en cadena. Está conformado principalmente por conjuntos combustibles integrados por barras de combustible, grillas espaciadoras y barras de varillaje que mantienen el paso y brindan soporte lateral (ver Fig.2.4), tubos de guía para varillas de control e instrumentación, y otros internos estructurales. En conjunto, estos elementos fijan el posicionamiento relativo de las barras, definen los canales de refrigeración para el adecuado caudal de flujo y habilitan el control de reactividad (ver Fig. 2.1).

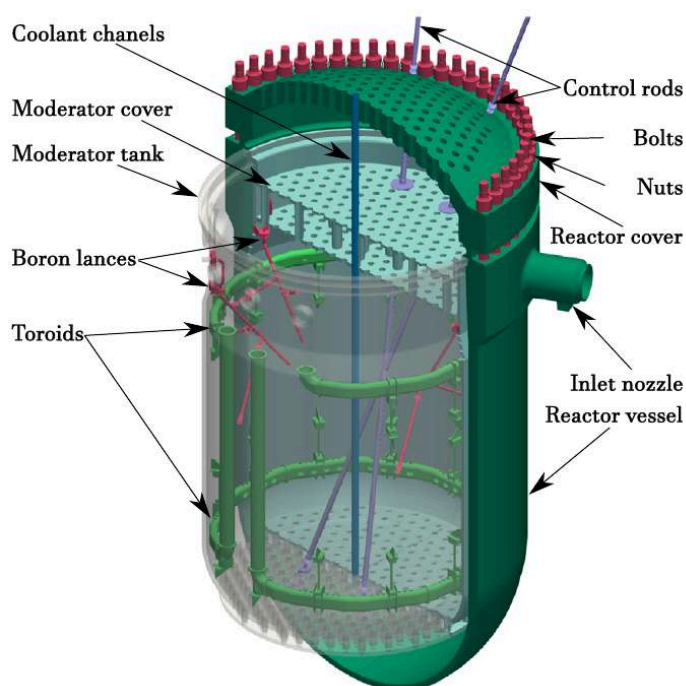


Figura 2.1: Representación computacional de la vasija de presión del reactor Atucha I, mostrando la disposición interna de los componentes principales ([Rabazzi et al., 2024c](#)).

Los materiales que componen el núcleo deben cumplir requisitos específicos del ambiente de radiación:

1. Sección transversal mínima de absorción de neutrones;
2. Buenas propiedades termofísicas (alta conductividad, baja capacidad calorífica, bajo coeficiente de expansión térmica);

3. Capacidades mecánicas frente a altos niveles de estrés (resistencia/ductilidad en corto y largo plazo) y resistencia térmica y a la radiación;
4. Alta resistencia a la corrosión y a la erosión en el entorno operativo;
5. Procesabilidad (deformabilidad, soldabilidad, fundición, maquinabilidad).

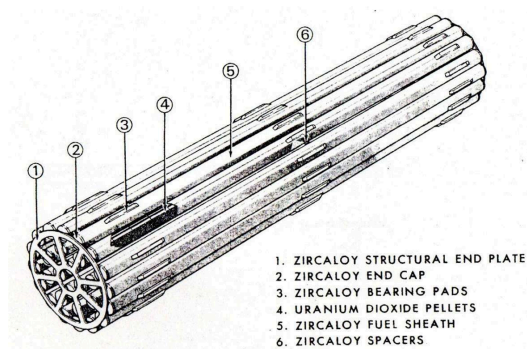
La Fig. 2.2 ilustra la combinación única de resistencia mecánica y baja absorción neutrónica que posiciona al Zr como material estructural de referencia en el núcleo de los reactores nucleares. El Zr destaca por combinar una resistencia mecánica elevada (≈ 900 MPa a 575 K) con una sección eficaz de absorción neutrónica muy baja ($0.01 \text{ cm}^2/\text{cm}^3$), lo que se traduce en una absorción relativa mínima en condiciones de diseño. Este balance lo convierte en el material estructural de referencia para vainas y grillas espaciadoras en combustibles nucleares. Por otro lado las aleaciones basadas en Zr purificado a partir de hafnio cumplen todos los requisitos mencionados. El Zr para reactores no debe contener más del 0,01 % de hafnio. Así, en la segunda mitad del siglo XX, gracias a sus notables características nucleares, el Zr pasó de ser un metal exótico y raro a “el material estructural número uno de la era atómica” (Cheadle, 1974; Konings et al., 2012; Lustman and Kerze, 1955).

Base Metal	Ultimate Tensile Strength of Alloy ^{a)} at 575K		Macroscopic Cross Section for Thermal Neutrons ^{b)} $\Sigma_c, \text{cm}^2/\text{cm}^3$	Relative Neutron Absorption for Given Design Stress
	MPa	kpsi		
Zirconium	900	130	.01	1
Iron	1100	160	.17	14
Nickel	1100	160	.31	25
Titanium	1000	145	.26	28
Aluminum	90	13	.014	14
Magnesium	90	13	.005	5
Beryllium	190–350 ^{c)}	25–50	.001 ^{c)}	.25–.5

Figura 2.2: Comparación de propiedades mecánicas y nucleares de distintos metales candidatos a materiales estructurales en el núcleo de un reactor nuclear (Cheadle, 1974).

2.2.1 Tipos de elementos combustibles

Las **vainas de combustible** (barras de combustible) se fabrican típicamente en *aleaciones* de Zr y encapsulan pastillas de UO_2 (Fig. 2.3a). Una barra de combustible es el principal elemento estructural del núcleo de un reactor heterogéneo, es decir, aquel en el que el combustible sólido y el moderador líquido se encuentran en fases separadas.



(a) Aleaciones y composición en el elemento combustible (Page, 1976).



(b) Pastillas de dióxido de uranio (CONUAR, 2025).

Figura 2.3: Aleaciones y representaciones del elemento combustible.

En una barra de combustible, el revestimiento es un tubo con un diámetro de 6–26 mm y un espesor de pared de 0,3–0,9 mm. Dado que la longitud de las barras de combustible es bastante larga (más de 1 m), para asegurarlas en una posición estrictamente fija se utilizan espaciadores y piezas finales, que normalmente están hechas del mismo material que el revestimiento.

El número de barras de combustible en un conjunto combustible puede variar considerablemente. Por ejemplo, en los reactores de vasija portadora, se sitúa en varias decenas (en el reactor WWER-1 hay 91 unidades, y en el WWER-2, 127) (Konings et al., 2012). En este tipo de reactores, cada conjunto combustible se aloja en una carcasa de aleación de Zr, al igual que el revestimiento. En los reactores WWER-1 y WWER-2 se utiliza una lámina de aleación Zr-2,5 % Nb para la carcasa; en los reactores PWR se utiliza la aleación Zircaloy-2. Las condiciones de operación de los componentes del conjunto combustible son más favorables que las de los revestimientos, ya que, por lo general, no están sometidos a cargas externas.

En los reactores de tubos de presión, el número de barras de combustible en el conjunto combustible es significativamente menor que en los reactores de recipiente portador (en los reactores de tipo PHW-CANDU de 7 a 28 piezas).

2.2.2 Aplicaciones de las aleaciones de Zr

Como se expuso más arriba, las aleaciones de Zr cumplen funciones clave en los conjuntos combustibles (cf. Fig. 2.4). Aquí nos centramos en **las condiciones de servicio** que condicionan su desempeño: el *refrigerante* y el *régimen térmico* de operación. Distinguimos tres entornos: (i) vapor-agua a presión, (ii) dióxido de carbono (CO_2) y (iii) refrigerantes orgánicos; a continuación se sintetizan usos típicos y limitaciones principales en cada caso.

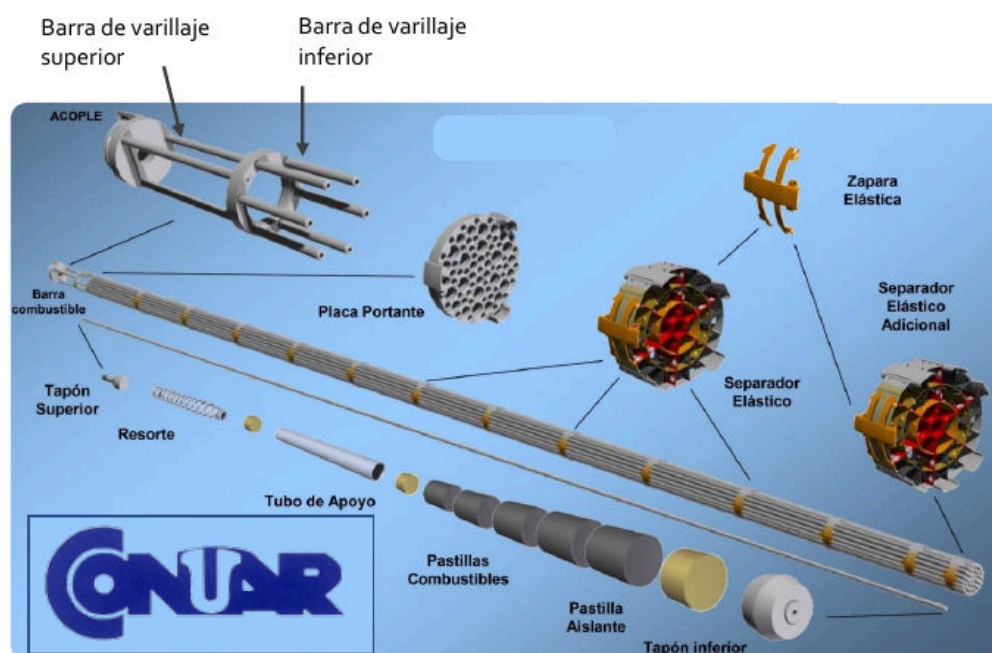


Figura 2.4: Constitución del elemento combustible (CONUAR, 2025).

CO_2 (400–550 °C). En reactores refrigerados con CO_2 a 400–550 °C, resultan promisorios los sistemas Zr–Cu (hasta 2,5 %) y Zr con Cu (0,5–1 %) y Mo (0,5–1,5 %) (Cheadle, 1974; Lustman and Kerze, 1955). Existen implementaciones históricas: en el EL-4 (Francia) se emplearon vainas Zr–2,5%Cu, y en los A-1 y A-2 (Eslovaquia) aleaciones con Cu y Mo. El desempeño en CO_2 queda limitado por la disolución de la película de óxido y por la fragilización asociada al oxígeno disuelto, factores que condicionan la vida útil de los componentes.

Refrigerantes orgánicos. El uso de Zr con refrigerantes orgánicos ha sido más restringido por el riesgo de hidrogenación y fragilización. Aun así, existen desarrollos que ampliaron el margen operativo, como el empleo de Zr–2,5%Nb en el WR-1 (Canadá), que aportaron evidencia sobre ventanas de operación seguras y mecanismos de degradación dominantes (Cheadle, 1974; Konings et al., 2012).

Vapor-agua a presión (PWR/BWR). En reactores de agua a presión y a ebullición, las familias más extendidas son Zircaloy-2, Zircaloy-4 y Zr-1 %Nb para vainas; además, el Zr se utiliza en canales de proceso ([International](#); [Konings et al., 2012](#)). La seguridad del conjunto combustible descansa en gran medida en la calidad de estas aleaciones, que constituyen la base estructural del núcleo con un costo relativo bajo dentro del ensamblaje.

Contexto argentino. Atucha I (operativa desde 1974) y su gemela Atucha II son PHWR que emplean aleaciones de Zr tanto en vainas como en tubos de presión (principalmente Zircaloy y Zr-Nb), combinando baja absorción neutrónica con resistencia mecánica bajo irradiación. La experiencia acumulada en estas centrales ha permitido consolidar conocimiento en condiciones reales de operación, con impacto directo en el diseño, la evaluación de integridad y las estrategias de extensión de vida de combustibles y componentes estructurales en el ámbito local.

2.2.3 *Propiedades del Zr y sus aleaciones*

La propiedad nuclear más valiosa del Zr es su pequeña sección eficaz de captura de neutrones y su baja activación neutrónica ([Konings et al., 2012](#)). Gracias a estas características, su adopción en la industria nuclear creció de manera acelerada: entre 1949 y 1959 la producción mundial se multiplicó por mil ([Cheadle, 1974](#); [Lustman and Kerze, 1955](#)), y ya en 1962, 21 de los 79 reactores de potencia en operación utilizaban recubrimientos de Zr; hacia 1969, más de 80.

Como ocurre con la mayoría de los metales puros, el Zr carece de propiedades de ingeniería adecuadas: su resistencia mecánica, ductilidad, resistencia al creep y resistencia a la corrosión en agua caliente no alcanzan niveles seguros para servicio prolongado. Por ello, fue necesario incorporar elementos de aleación con alta solubilidad y diseñar tratamientos térmicos que generasen microestructuras estables frente a la irradiación. Además, varios elementos quedaron descartados por consideraciones nucleares (Co, Hf, Cd, W), mientras que otros como O, Sn y Nb fueron seleccionados por su bajo impacto neutrónico. También se aceptaron pequeñas cantidades de metales de transición (Fe, Cr, Ni), siempre que no superaran el 0.5 % en conjunto ([Konings et al., 2012](#)).

Históricamente, los desarrollos iniciales en EE. UU. dieron origen a las aleaciones conocidas como *Zircalloys*, reveladas en la primera Conferencia de la ONU sobre Usos Pacíficos de la Energía Atómica (1955). La primera formulación incluyó 2.5 % de Sn, pero se redujo a la mitad por su pobre comportamiento a largo plazo frente a la corrosión. De manera fortuita, la contaminación de un colado con restos de acero inoxidable mostró mejoras notables, lo que llevó a incorporar pequeñas fracciones de Fe, Cr y Ni. Estas aleaciones —Zircaloy-2 y posteriormente Zircaloy-4—

se consolidaron como referencia en reactores de agua ligera (PWR/BWR).

En paralelo, en la segunda Conferencia de la ONU (1958), la URSS presentó datos extensos sobre aleaciones Zr–Nb, dando origen a la familia de aleaciones *E* adoptadas en vainas y tubos de presión de reactores refrigerados por agua pesada. Así surgieron el Zr–1 %Nb para vainas y el Zr–2.5 %Nb para tubos de presión, utilizados extensamente en los reactores VVER, RBMK y CANDU. Posteriormente, una renovación del interés en Occidente llevó en los años noventa al desarrollo de aleaciones optimizadas como M5 (Zr–1 %Nb, con control de Fe y S) y ZIRLO (Sn $\approx$ 1 %, Nb $\approx$ 1 %, O 0.1 %), diseñadas para mitigar la corrosión y el crecimiento por irradiación.

En la práctica, se distinguen dos familias principales de aleaciones de Zr:

- **Zircaloys:** con Sn (1.2–1.7 %), Fe/Cr en centésimas, y en el caso de Zircaloy-2 trazas de Ni (0.05 %). La eliminación de Ni en Zircaloy-4 mejoró la resistencia a la corrosión e ingreso de hidrógeno en PWR.
- **Aleaciones con Nb:** entre 0.8 y 2.7 %, como Zr–2.5Nb, E110, E125, M5, ZIRLO o E635. Se caracterizan por niveles mínimos de Fe/Cr/Ni (ppm o décimas) y control estricto del oxígeno intersticial (0.05–0.16 %), ajustando así resistencia mecánica, creep y crecimiento bajo irradiación.

La Fig. 2.5 resume los rangos compositivos más representativos, reflejando la evolución histórica de estas aleaciones hacia un balance cada vez más refinado entre resistencia mecánica, resistencia a la corrosión y estabilidad frente a irradiación.

	<i>ASTM</i>	<i>Sn</i>	<i>Nb</i>	<i>Fe</i>	<i>Cr</i>	<i>Ni</i>	<i>O</i>
Zircaloy-2	R 60802	1.2–1.5		0.07–0.2	0.1	0.05	0.12
Zircaloy-4	R 60902	1.2–1.7		0.18–0.24	0.1		0.1–0.14
M5			0.8–1.2	<500 ppm			0.11–0.16
E110			1	100 ppm			0.05–0.07
Zr 2.5Nb	R 60904		2.5–2.7	<650 ppm			0.12–0.15
E125			2.5–2.6				0.04–0.07
Zirlo		1	1	0.1			0.09–0.12
E635		1.2	1	0.35			0.05–0.07

Figura 2.5: Composición típica (en %) de aleaciones de zirconio empleadas en combustible nuclear y componentes asociados. Se indican designaciones ASTM y rangos de Sn, Nb, Fe, Cr, Ni y O para Zircaloy-2/4 y aleaciones con Nb (M5, E110, Zr-2.5Nb, E125, ZIRLO, E635) ([Cheadle, 1974](#)).

2.3 Estructura HCP y Mecanismos de Deformación

Antes de analizar en detalle el comportamiento a nivel cristal del Zr, es necesario comprender cómo se organizan los átomos en los metales y qué implicancias tiene dicho ordenamiento en sus propiedades mecánicas.

Los sólidos metálicos presentan redes cristalinas periódicas. Entre las estructuras más comunes se encuentran:

- **Cúbica centrada en el cuerpo (BCC):** típica del hierro α , el tungsteno y el cromo. Presenta un átomo en cada vértice del cubo y uno en el centro.
- **Cúbica centrada en las caras (FCC):** como en el aluminio, cobre o níquel, con átomos en los vértices y en el centro de cada cara.
- **Hexagonal compacta (HCP):** presente en metales como titanio, magnesio y Zr, con una disposición atómica muy densa pero con menos planos y direcciones favorables para la deformación.

Aunque FCC y HCP logran un empaquetamiento atómico similar ($\approx 74\%$), la geometría hexagonal impone restricciones cinemáticas a la cantidad de **sistemas de deslizamiento** independientes disponibles, lo que condiciona su capacidad de deformación plástica.

Un sistema de deslizamiento combina un plano cristalográfico y una dirección a lo largo de la cual se mueven las dislocaciones. En la estructura HCP, a y c denotan los *parámetros reticulares* y, por extensión, los *ejes cristalográficos*: las direcciones $\langle a \rangle$ corresponden a las tres direcciones equivalentes en el plano basal (0001) (p. ej., $\langle 11\bar{2}0 \rangle$), mientras que $\langle c \rangle$ corresponde al eje $\langle 0001 \rangle$ perpendicular al plano basal (véase Fig. 2.7).

Para que un cristal pueda deformarse plásticamente en cualquier dirección, la condición de von Mises requiere al menos cinco sistemas de deslizamiento independientes. Mientras que las redes FCC satisfacen este criterio gracias a sus 12 sistemas $\{111\}\langle 110 \rangle$, en los materiales HCP el número de sistemas efectivamente activos es más limitado. Esta limitación no está determinada primariamente por la relación geométrica c/a —que presenta valores similares en muchos metales HCP—, sino por la naturaleza de las ligaduras electrónicas y la estructura electrónica del material, que gobiernan las tensiones críticas relativas necesarias para activar cada sistema de deslizamiento. La relación c/a actúa, en este contexto, como un factor geométrico secundario que puede influir en la anisotropía, pero no como el mecanismo físico dominante.

La falta de sistemas de deslizamiento suficientes puede ser compensada en parte por mecanismos alternativos como el maclado (*twinning*) [Tenckhoff \(1988\)](#). En el marco de esta tesis,

el maclado está contemplado en la formulación constitutiva, pero no llega a activarse porque las deformaciones analizadas son pequeñas. Por tanto, la deformación plástica relevante queda dominada por los sistemas de deslizamiento.

En el Capítulo 3 se profundizará en la relación entre estos sistemas y la formulación constitutiva empleada.

En el caso particular del Zr, la fase estable a temperatura ambiente es la α -HCP. La anisotropía cristalográfica propia de esta fase determina los mecanismos de deformación más favorables en servicio y explica tanto la evolución de la textura durante el procesado como la respuesta anisótropa bajo irradiación en operación nuclear [Tenckhoff \(2005\)](#).

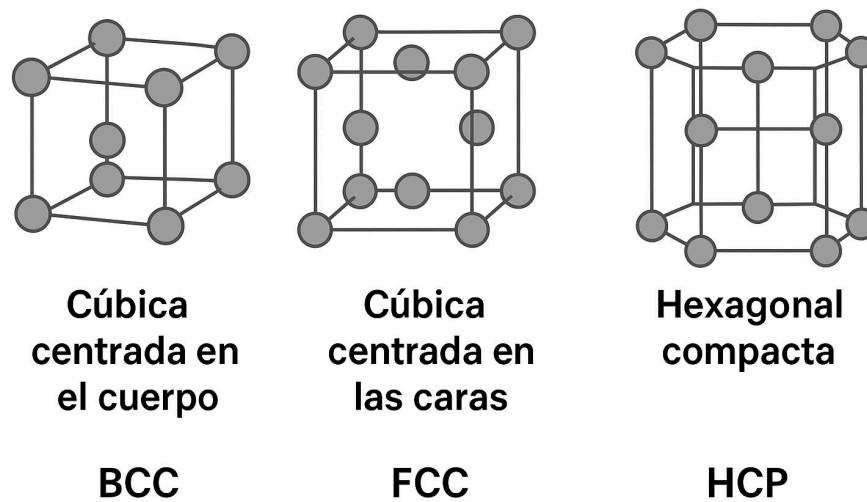


Figura 2.6: Esquema comparativo de las celdas unitarias más comunes en metales: BCC, FCC y HCP.

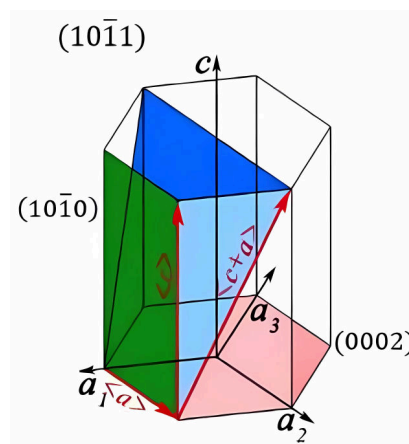


Figura 2.7: Sistemas de deslizamiento más observados en α -Zr a bajas temperaturas [Juarez et al. \(2019\)](#).

En Zr, para $T < 500^\circ\text{C}$, el deslizamiento favorecido ocurre en planos prismáticos de primer

orden $(10\bar{1}0)$ en direcciones $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ($\langle a \rangle$); también en basal (0002) . En bordes de grano se activa $\langle a \rangle$ en piramidal $(10\bar{1}1)$. A compresiones y altas temperaturas aparece deslizamiento con componente $\langle c \rangle$ en planos piramidales de primer/segundo orden $(10\bar{1}1)/(10\bar{2}2)$ en $\langle c + a \rangle$, $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ [Tenckhoff \(2005\)](#). En la Fig. 2.7 se muestran los sistemas más observados en fase α -HCP.

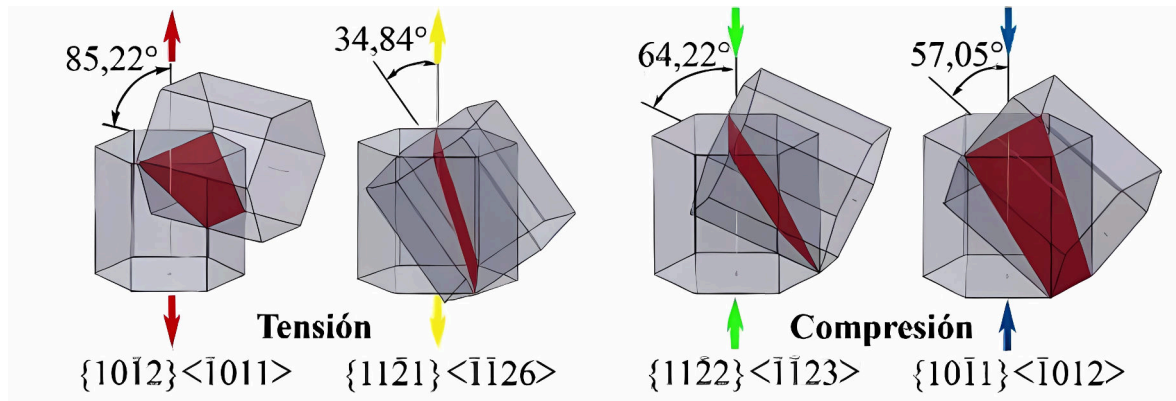


Figura 2.8: Relaciones de orientación para el maclado en fase α (tracción/compresión) [Juarez et al. \(2019\)](#).

La deformación con componente $\langle c \rangle$ también puede explicarse por maclado en planos piramidales (1º y 2º orden), mecanismo que reorienta regiones inicialmente desfavorables y activa nuevos deslizamientos cerca de bordes de macla o por interacción con deslizamientos. La Fig. 2.8 resume los sistemas de maclado en tracción/compresión a lo largo de $\langle c \rangle$ [Tenckhoff \(1988\)](#).

2.3.1 Textura y anisotropía

El ordenamiento atómico de las estructuras cristalinas hace que las propiedades físicas de los monocristales varíen según la dirección en la que se aplica el estímulo mediante el cual se mide cada propiedad. Si bien la mayoría de los metales y aleaciones de uso práctico consisten en agregados policristalinos, la distribución espacial de las orientaciones de los diversos cristales (o granos) que los componen no suele ser aleatoria, por lo que las propiedades macroscópicas de dichos agregados también tienden a ser anisótropas. La distribución preferencial de orientaciones cristalinas en los materiales metálicos es conocida como textura cristalográfica [Engler and Randle \(2010\)](#). Si la cantidad de granos presentes en un policristal es lo suficientemente grande y, mediante algún proceso determinado, se consigue distribuir aleatoriamente su orientación (es decir, eliminar la textura), la dependencia de las propiedades con la dirección se difumina en el promedio y el material puede considerarse macroscópicamente isótropo.

El origen de la textura cristalográfica en los materiales metálicos está relacionado con sus

procesos de fabricación: tanto la solidificación como la deformación plástica y la recrystalización involucran relaciones cristalográficas predominantes que llevan a que la orientación de los granos no se distribuya aleatoriamente. En particular, como vimos, los mecanismos micromecánicos que gobiernan los procesos de deformación plástica implican deformaciones de corte a lo largo de planos y direcciones cristalográficas determinadas. Esto provoca que cada cristal sufra un desplazamiento relativo de sus planos cristalinos, que al verse parcialmente restringido por la interacción con los granos vecinos va siempre acompañado de una rotación de la red. Por lo tanto, los granos en un policristal tienden a rotar hacia orientaciones preferenciales que reflejan la simetría de los modos de deformación del material y el estado de deformación impuesto [Engler and Randle \(2010\)](#); [Kocks et al. \(2000\)](#). Esta relación entre cristalografía, textura y anisotropía macroscópica ha sido sistematizada y discutida extensamente en la literatura clásica sobre textura cristalográfica en policristales [Kocks et al. \(2000\)](#). De allí surge el desarrollo de texturas particulares en los diversos materiales para cada proceso termomecánico de fabricación.

Cabe destacar que, en aleaciones de Zr, los procesos de conformado plástico pueden inducir distintos niveles de maclado cristalográfico, el cual contribuye tanto a la evolución de la textura como a la anisotropía mecánica del material. En el presente trabajo, sin embargo, se parte de un estado microestructural ya conformado, en el que el maclado puede estar presente como resultado de la historia termomecánica previa. Para los niveles de tensión y deformación inducidos por irradiación analizados en esta tesis, el maclado no se activa como mecanismo de deformación adicional, por lo que la respuesta plástica relevante queda gobernada por los sistemas de deslizamiento cristalográfico.

2.3.2 Medición y Representación de la Textura

Conocer la textura cristalográfica conlleva determinar la distribución de orientaciones preferenciales en una muestra policristalina. Matemáticamente, esto implica relacionar el sistema de coordenadas asignado a la muestra (SA) con el sistema de referencia que se le asigne a la estructura cristalina de cada grano (CA). Esta relación, en su forma más general, está dada por la matriz de orientaciones, $\mathbf{g}$ ([Engler and Randle, 2010](#)):

$$CA = \mathbf{g}SA, SA = \mathbf{g}^{-1}CA \quad (2.1)$$

De la matriz $\mathbf{g}$ se pueden deducir las expresiones diversas en las que se suele representar la textura. La más tradicional es la representación de los ángulos de Euler, terna de tres rotaciones consecutivas requeridas para alinear dos sistemas de referencia ortogonales entre sí [Wenk and Van Houtte \(2004\)](#). Existen varias convenciones para definir los ángulos de Euler; la más común

en la literatura metalúrgica es la convención de Bunge, designada por la terna $\{ \varphi_1, \Phi, \varphi_2 \}$ [Bunge \(2013\)](#)¹. Así, una cierta orientación queda representada como un punto en un espacio tridimensional cuyos ejes ortogonales son los ángulos de Euler (espacio de Euler). La textura de un policristal quedará representada como una nube de puntos (uno por cada orientación medida), o bien como una función de densidad de probabilidad cuando la estadística de la medición sea lo suficientemente grande. Esta representación se denomina función distribución de orientaciones (ODF, por sus siglas en inglés). El espacio de Euler representado por la convención de Bunge tiene una inversión en $\Phi = \pi$, por lo que el rango del ángulo para representar unívocamente la ODF queda reducido a $0^\circ \sim 180^\circ$. Además, según las propiedades de simetría de cada estructura cristalina, los rangos de los ángulos de Euler pueden reducirse aún más. Para el caso de la estructura HCP se tiene: $\Phi = 0^\circ \sim 90^\circ$ y $\varphi_2 = 0^\circ \sim 60^\circ$. Los métodos más usuales para la medición experimental de la textura se basan en las técnicas de difracción de haces electromagnéticos de baja longitud de onda, como los rayos X, los haces de neutrones y los de electrones. En general, las técnicas de difracción de rayos X o de neutrones interactúan con un volumen relativamente grande de material, recolectando datos de una gran cantidad de granos de la muestra policristalina. Las técnicas basadas en difracción de haces electrónicos, en cambio, proveen información de cristales individuales dentro de una superficie relativamente pequeña, y permiten correlacionar la distribución de orientaciones con la topología de la microestructura ([Wenk and Van Houtte, 2004](#)). En la presente tesis se utilizaron resultados experimentales obtenidos, por otros autores, mediante difracción de rayos X (XRD, por sus siglas en inglés) con goniómetro de texturas y difracción de electrones retrodispersados en microscopía electrónica de barrido (SEM-EBSD). El método de XRD con goniómetro de texturas emplea la técnica de interacción por reflexión para rayos X monocromáticos, aprovechando el principio de difracción dado por la ley de Bragg. Esta ley permite determinar la orientación de un cierto plano cristalino, en un dado cristal, mediante una disposición angular tal que, al incidir el haz sobre el cristal, ocurre difracción con interferencia constructiva (ángulo 2θ , según la ley de Bragg). En el caso de un policristal, la intensidad detectada para una cierta orientación de la muestra es proporcional a la fracción de volumen de granos cuyos planos cristalinos se encuentran en condición de difracción. El difractómetro por reflexión con goniómetro permite posicionar la muestra policristalina en el ángulo 2θ correspondiente a cada plano cristalino de interés, y rotar la muestra de forma tal de medir la fracción de dichos planos orientados favorablemente por efecto de la textura que

¹La convención de Euler está definida por las siguientes rotaciones sucesivas entre los sistemas de referencia inicial x, y, z y final x''', y''', z''' : alrededor del eje z , alrededor del nuevo eje x' y alrededor del eje z'' (es decir que se trata de una convención de tipo ZXZ).

posee el agregado. Para cada plano cristalino se obtiene una figura de polo (PF), representación bidimensional de la probabilidad de que la normal de dicho plano (polo) esté alineada con las distintas direcciones de referencia de la muestra policristalina (es decir, $SA = \mathbf{g}^{-1}CA$). Como la geometría de reflexión limita el rango de inclinación de la probeta por efecto del desenfoque del haz, cada PF medida es incompleta. Por otra parte, la PF es una representación bidimensional de una distribución tridimensional, por lo que existe ambigüedad en la determinación de la textura cristalográfica mediante este método si se emplea sólo una PF. Por medio de técnicas numéricas de inversión puede calcularse la ODF a partir de las PFs medidas para una cierta cantidad de planos cristalinos (al menos cuatro en la estructura HCP); y luego, mediante la ODF, es posible recalculas las PFs completas con mayor precisión. La representación gráfica de la textura así determinada suele realizarse con las propias PFs recalculadas, mediante las llamadas figuras de polo inversas (IPF), o bien mediante algún tipo de representación plana de la ODF tridimensional. Las IPFs representan la distribución de direcciones cristalinas en relación al sistema de referencia de la muestra (es decir, proveen la relación $CA = \mathbf{g}SA$). Para representar la ODF suelen graficarse secciones planas de ángulo constante del espacio euleriano. La elección del ángulo de Euler y de la cantidad de secciones depende del tipo de estructura y de la simetría de muestra que presente el agregado policristalino.

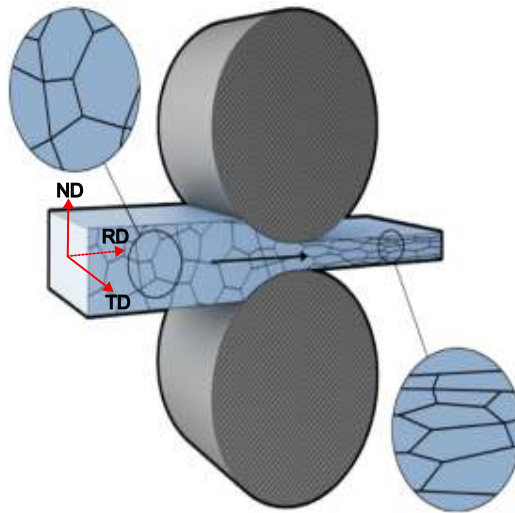


Figura 2.9: Esquema del proceso de laminación con reducción del espesor.

El proceso termomecánico de laminación induce una anisotropía particular en los policristales, caracterizada por la simetría de sus propiedades mecánicas con respecto a tres planos ortogonales. Este comportamiento anisótropo es llamado ortotropía, y es característico de toda chapa laminada. De allí que resulte conveniente definir el sistema de referencia de un material laminado de acuerdo a los ejes o direcciones principales de anisotropía (o de ortotropía) de di-

cho proceso (Figura 2.9): dirección de laminación (RD), dirección transversal (TD) y dirección normal (ND). Este tipo de simetría demuestra permite representar la ODF del material laminado con un rango del ángulo de Euler φ_1 reducido a $0^\circ - 90^\circ$.

2.4 Procesamiento: Texturas Típicas en metales HCP

Como se discutió previamente, la estructura HCP del Zr genera una respuesta marcadamente direccional. Aquí nos limitamos a sus consecuencias prácticas: durante la fabricación condiciona la conformabilidad y el desarrollo de textura; en servicio, influye en la tensión de fluencia y rotura, la susceptibilidad a corrosión bajo tensión, la orientación de hidruros y el crecimiento inducido por irradiación.

La formación de la textura cristalográfica puede estar influenciada por varios factores, los cuales se pueden clasificar en 2 grupos mayoritarios: las variables del procesado y las variables del material. Las variables del material son mayormente la estructura cristalina, la cantidad de soluto, partículas de segunda fase y tamaños de grano, los que pueden afectar los procesos metalúrgicos durante el tratamiento térmico. Muchos mecanismos pueden producir textura cristalográfica, pero los mas importantes son el deslizamiento de dislocaciones, el maclado, la recrystalización y la transformación de fase [Tenckhoff \(1988\)](#). La mayoría de las mediciones de textura cristalográfica en materiales con estructura HCP, se representan por las distribuciones del polo basal, ya que la orientación del eje $\langle c \rangle$ del hexágono juega un rol muy importante en el comportamiento anisotrópico. Otros estudios se han centrado en las orientaciones de los planos prismáticos o piramidales, ya que la orientación de estos planos es indicador del grado de recrystalización en el material [Tenckhoff \(2005\)](#).

2.4.1 Texturas por deformación

Durante los procesos de manufactura de piezas de uso ingenieril, muchos materiales metálicos resultan ser producidos con un grado de textura importante, que se magnifica proporcionalmente a la deformación aplicada en el proceso. Cuando un policristal es deformado, la tensión aplicada es transmitida a cada grano de forma individual. Esto da lugar a un proceso complejo y heterogéneo: las dislocaciones se mueven por sistemas de deslizamiento e interactúan causando endurecimiento. Los granos cambian de forma y orientación e interactúan con sus pares cercanos creando tensiones. Todos estos fenómenos combinados hacen que el entendimiento y modelado del desarrollo de las texturas sea una tarea compleja. El proceso comúnmente activado durante la deformación plástica en cristales, es el deslizamiento de dislocaciones. Co-

mo se describió en la sección 2.3 los movimientos de dislocaciones ocurren preferentemente en planos cristalográficos específicos, en los cuales la componente de cizalladura es la más alta para la tensión aplicada. En otras palabras, los deslizamientos, acomodan las tensiones de corte mediante desplazamientos cizalladores. Entonces el cristal sufre un cambio de forma sin cambiar su volumen. Esto se debe acomodar mediante una rotación del cristal, manteniendo las limitaciones de los bordes de grano.

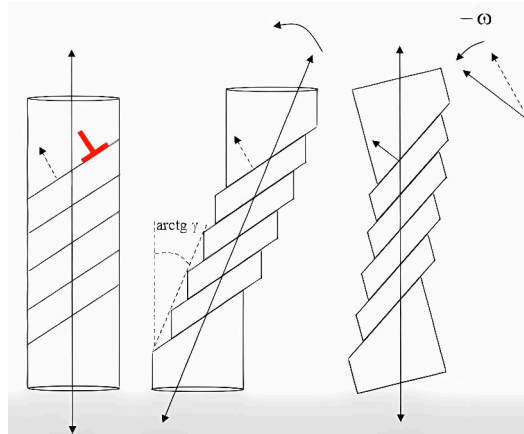


Figura 2.10: Rotación de un cristal debido a deslizamiento (Lebensohn et al., 2021).

La Figura 2.10 muestra un esquema de una tensión uniaxial sobre un monocristal, el cual deforma por deslizamiento en un solo sistema de planos. Cuando la tensión es aplicada, se activa el mecanismo de deslizamiento en un conjunto de planos paralelos y la fuerza ahora separa su eje en ambos extremos. Cuando existe una condición de mantener la tensión aplicada en un mismo eje, como en un caso real de una muestra tensada en sus extremos, el cristal rotará hasta alinear la dirección de la fuerza. En un policristal, un grano está fuertemente limitado por sus vecinos. Algunas rotaciones cristalinas son necesarias para acomodar la cizalladura inducida por los deslizamientos y mantener la integridad en los bordes de granos. La reorientación de los cristales ocurre durante el proceso de tracción hasta que se encuentre una orientación estable. Usualmente existe un grupo limitado y restringido de orientaciones estables para un dado proceso de deformación. Como resultado, los granos tienden a acomodarse con orientaciones cristalográficas preferenciales.

Otro mecanismo responsable de la reorientación de los granos durante la deformación, es el maclado (*twinning*). El maclado induce una fuerte desorientación en gran parte del cristal. El ángulo de desorientación entre el cristal original y la nueva lámina creada por la macla llega a ser cercano a los 90° (ver Figura 2.8). Como resultado, los cambios de textura inducidos por maclado es el mecanismo de deformación que más contribuye al desarrollo de la textura cristalográfica.

Tenckhoff (1988) describe como el mecanismo de maclado se activa durante los procesos de laminación, trefilado de barras y reducciones tubulares de aleaciones de Zr de fase hexagonal, determinando la textura final de la pieza.

En el Zr, los mecanismos de deformación y la textura cristalográfica son campos de investigación muy amplios y estudiados con rigurosidad. Principalmente, el trabajo desarrollado por Tenckhoff (1988, 2005); Tenckhoff and Rittenhouse (1970) resume varios de los detalles involucrados, que son aceptados como referencia en las investigaciones actuales Murty and Charit (2006).

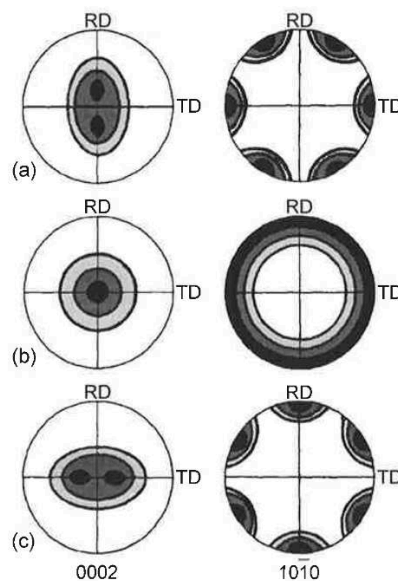


Figura 2.11: Esquema de texturas de laminación en metales HCP con relación c/a (a) mayor a 1.633 (b) aproximadamente igual a 1.633 y (c) menor a 1.633. (0002) y (10 $\bar{1}$ 0) figuras de polo (Kocks et al., 2000).

Cuando los metales de estructura cristalina HCP son trabajados en frío, la orientación final de los polos del plano basal (0002) tienden a alinearse con la dirección de compresión. Esto se atribuye a una rápida reorientación del plano basal debido a maclado. Sin embargo existe una ligera desviación de esta alineación que depende principalmente de parámetros específicos del metal, como la relación entre los parámetros de red c/a , y del sistema de deformación activado. Estos sistemas se ilustran en la figura 2.11 Kocks et al. (2000).

La figura 2.11 describe la textura esperada en un proceso de laminado para 3 casos: (a) para metales con realación c/a sobre el valor ideal ($\sqrt{3}$) como el zinc, donde los polos basales se desvían entre $15^\circ - 25^\circ$ desde la normal hacia la dirección de laminación (RD), mientras que los plano prismáticos (10 $\bar{1}$ 0) se alinean con la dirección transversal (TD). (b) metales con una relación c/a cercana a la ideal, como el magnesio, generan una textura con su polo basal alineado con la dirección normal y los planos prismáticos distribuidos de manera aleatoria entre

las direcciones de laminación y la transversal. (c) el caso correspondiente a metales con una relación c/a menor que $\sqrt{3}$ como el Zr y titanio. Acá los planos prismáticos se alinean con la dirección de laminación y los polos basales se desvían entre $15^\circ - 25^\circ$ desde la normal hacia la dirección de transversal.

2.4.2 Laminación de Chapas

Durante un proceso de laminación, el material experimenta una reducción en su espesor original, mediante una compresión en la dirección normal (ND) y consecuentemente es alargado hacia la dirección de laminación (RD), como se indica la figura 2.9. Los cambios en la dirección transversal son menores siempre que la chapa mantenga una relación de ancho/espesor mayor que 6 (Moya Riffo, 2017). Este proceso de deformación, transforma tanto la microestructura como la textura cristalográfica del material original.

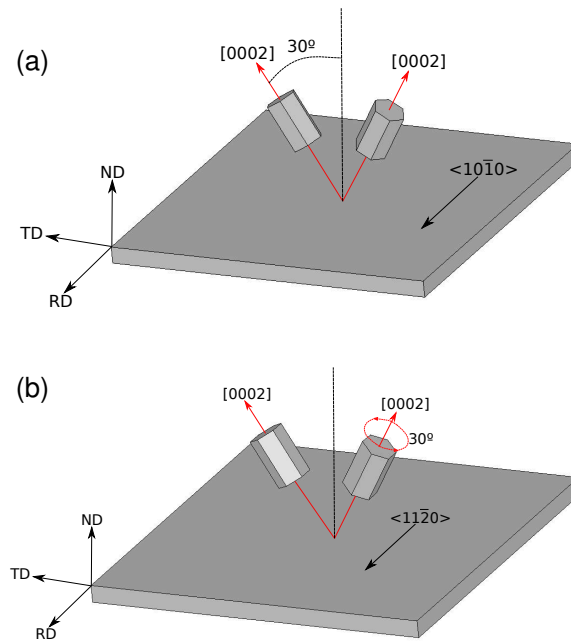


Figura 2.12: Orientación preferencial de los cristales hexagonales por procesos de: (a) laminación y (b) recristalización.

Como se espera para el Zr, los polos basales (0002) tienden a alinearse con la dirección de compresión, en este caso la dirección normal de la chapa (ND), mostrando una desviación mayoritaria entre $\pm 20^\circ - 40^\circ$ hacia la dirección transversal (ver figura 2.12 (a)).

La siguiente etapa después de la laminación, aunque no siempre es necesaria, es un recocido (a veces llamado “recristalizado”) del material para restaurar su ductilidad. Generalmente este tratamiento se realiza a $550 - 600^\circ C$. La figura de polos del plano basal no cambia mucho durante un tratamiento de recocido para materiales HCP. En algunos casos se ha visto que

los polos basales (0002) tienden a alinearse de forma más concentrada en la dirección normal (ND) o en la dirección radial en el caso de los tubos. En cambio la figura de polos de los planos prismáticos ($10\bar{1}0$) se ve más afectada por este tratamiento [Tenckhoff and Rittenhouse \(1970\)](#). Al incrementar la temperatura, se desarrollan componentes de textura que presentan los planos basales rotados $\pm 30^\circ$ en torno al eje $< c >$ en comparación a la orientación anterior generada por la laminación. Consecuentemente los planos prismáticos que estaban alineados con la dirección de laminación, pasan ahora a apuntar hacia la dirección transversal, mientras que ahora los polos ($11\bar{2}0$) se alinean con la dirección de laminación como indica la figura 2.12 (b).

Para explicar este fenómeno se supone que antes del recocido en materiales HCP, algunas regiones presentan granos severamente deformados y maclados, los cuales presentan heterogeneidades con alta energía superficial ideal para la nucleación y el comienzo de la recristalización [Wenk and Van Houtte \(2004\)](#). En PWR suele privilegiarse un estado *stress-relieved* (SR), preservando granos alargados y alta densidad de dislocaciones; en BWR es frecuente un estado totalmente recristalizado (RX). Esta ruta fija la función densidad de orientaciones (ODF) y favorece texturas HCP con los ejes c tendiendo a la dirección radial, lo que explica la fuerte anisotropía elasto-plástica que se observa a nivel macroscópico.

2.5 Conclusiones

La ruta de lo general a lo particular permite conectar requisitos de servicio y aplicaciones con la base cristalográfica del Zr (HCP), sus mecanismos de deformación y la textura derivada del procesamiento. Estos conceptos explican la anisotropía y el desempeño de Zircaloy en servicio, y preparan el terreno para el capítulo siguiente, dedicado a las leyes constitutivas y su uso en simulaciones multiescala.

Capítulo 3

Relación tensión–deformación multiescala: del cristal simple al FEM

3.1 Introducción

En el capítulo anterior se presentan las propiedades microestructurales de las aleaciones de Zr utilizadas en aplicaciones nucleares, así como los mecanismos físicos que gobiernan su comportamiento. A partir de esa descripción cualitativa, es necesario plantear un marco matemático que permita caracterizar cuantitativamente la respuesta mecánica del material. En particular, se formulan modelos constitutivos que relacionan los campos de tensión y deformación con la evolución de las variables internas, de modo tal que se integren a las ecuaciones de la mecánica de sólidos y, con ello, se prediga el estado de sollicitación de un componente en condiciones de servicio.

En este capítulo se formulan las ecuaciones constitutivas que describen la respuesta del Zr bajo irradiación y temperatura, abarcando el régimen elástico y los mecanismos plásticos relevantes. Estas ecuaciones se formulan primero a nivel de cristal simple y luego se generalizan al agregado policristalino, sentando las bases para la construcción del modelo multiescala que se implementa en el método de elementos finitos en los capítulos posteriores. En el contexto de la resolución de problemas cuasi-estáticos no lineales en mecánica estructural, el solver de FEM aborda el siguiente sistema de ecuaciones ([Agouzal, 2024](#)):

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f} & \text{en } \Omega, \\ \boldsymbol{\sigma} = F^\sigma(\nabla_s \mathbf{u}, \boldsymbol{\beta}) & \text{en } \Omega, \\ \dot{\boldsymbol{\beta}} = F^\beta(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\beta}) & \text{en } \Omega, \end{cases} \quad (3.1)$$

donde $\mathbf{u}$ es el campo de desplazamientos, $\boldsymbol{\sigma}$ es el campo de tensiones, y β son las variables internas que caracterizan la microestructura, incluyendo la orientación, morfología y estado de endurecimiento de cada grano representativo estadísticamente en este estudio. El operador no lineal F^σ corresponde a la ecuación constitutiva que relaciona el estado tensional en el material a partir del estado de deformaciones, es decir, la parte simétrica del gradiente $\nabla_s = \frac{1}{2}(\nabla + \nabla^T)$, mientras que el operador no lineal F^β denota una ecuación de evolución de las variables internas en el material. Además, las condiciones de borde cinemáticas y dinámicas se imponen independientemente sobre el campo de desplazamientos y de tracciones en el contorno del dominio, y no forman parte de la relación constitutiva del material.

Cabe destacar que el sistema anterior representa la formulación en forma fuerte de las ecuaciones de gobierno. En el marco del método de elementos finitos, este problema se resuelve a partir de su forma débil o variacional, obtenida mediante el principio de trabajos virtuales y posteriormente discretizada, tal como se desarrolla en la Sección 3.4.1.

La primera ecuación del sistema anterior describe el equilibrio físico en el dominio considerado. En la segunda línea, la ecuación constitutiva proporciona el estado de tensiones del material, es decir, el tensor de tensiones de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$, como función de la deformación macroscópica local $\nabla_s \mathbf{u}$, evaluada en cada punto de integración del elemento finito, y de las variables internas (β) del material. La tercera ecuación describe la dinámica de las variables internas, brindando una descripción de la evolución del material. Estas variables juegan un papel crucial en la caracterización de cómo el material responde a influencias externas a lo largo del tiempo.

El sistema presentado resume la esencia de un problema de mecánica de materiales: equilibrio, relación constitutiva y evolución microestructural. Para resolverlo con fidelidad física es necesario precisar el comportamiento del material a nivel microscópico, es decir, en el interior de cada cristal del agregado policristalino. En este nivel, las ecuaciones constitutivas cobran un papel central: traducen las leyes que rigen la elasticidad, la plasticidad y la fluencia en expresiones matemáticas tratables mediante un esquema numérico de integración. La siguiente sección introduce dichas ecuaciones en el caso más sencillo —el cristal simple—, que servirá de base para modelos de mayor alcance. La formulación presentada se desarrolla bajo la hipótesis de deformaciones infinitesimales, por lo que la cinemática se describe a través del gradiente simétrico de los desplazamientos y no se consideran efectos geoméricamente no lineales.

Sobre la base del Capítulo 2, este capítulo formaliza el vínculo tensión–deformación y la evolución de variables internas, avanzando desde el nivel microscópico (§3.2: cristal simple—elasticidad, plasticidad, irradiación, creep y expansión térmica) hasta el mesoscópico (§3.3: policristal mediante el esquema viscoplástico autoconsistente, VPSC), y cierra el marco necesario para la

resolución a escala de componente (§3.4), en diálogo con la formulación de elementos finitos presentada en §3.4.1.

3.2 Modelo a Nivel Microscópico: Ecuaciones Constitutivas del Cristal Simple

Una *ecuación constitutiva* es, en pocas palabras, una expresión concreta del operador F^σ (eq. 3.1) que conecta causas y efectos dentro de un material. Relaciona matemáticamente variables mecánicas como tensión, deformación y temperatura, incorporando además un conjunto de variables internas β que representan la memoria del material (defectos, endurecimiento, historia de carga, etc.).

De manera general, esta relación puede escribirse como:

$$\sigma = F^\sigma(\dot{\epsilon}, \epsilon, T, \beta), \quad (3.2)$$

donde $\dot{\epsilon}$ es la velocidad de deformación, ϵ la deformación acumulada y T la temperatura. La variable interna β resume el estado microestructural del material. Esta formulación, ampliamente discutida en la literatura constitutiva (Kocks et al., 2000), constituye la base sobre la cual se construyen modelos más complejos. La evolución de β está determinada por una ecuación adicional del tipo

$$\dot{\beta} = F^\beta(\sigma, \beta), \quad (3.3)$$

consistente con el sistema general planteado anteriormente.

3.2.1 Deformación Elástica Lineal

La primera respuesta que observamos en un material al aplicarle tensión es la *deformación elástica lineal*. “Elástica” significa que desaparece cuando se retira la carga, y “lineal” que la relación entre tensión y deformación es proporcional.

En una dimensión, este comportamiento está representado por la ley de Hooke. Si además escribimos todo en términos de velocidades (una forma más conveniente para los modelos numéricos), obtenemos:

$$\dot{\sigma} = C \dot{\epsilon}^{el}, \quad (3.4)$$

$$\dot{\epsilon}^{el} = S \dot{\sigma}, \quad (3.5)$$

donde C es la constante de rigidez (*stiffness*) y S la constante de flexibilidad (*compliance*). En una dimensión, C se reduce simplemente al módulo de Young.

Estas ecuaciones se apoyan en una hipótesis clave: cuando los átomos del cristal se desplazan de su posición de equilibrio bajo una carga externa, la energía que se requiere para

desplazarlos puede aproximarse como una curva cuadrática. En esa aproximación se descartan los términos de orden superior, lo cual solo es válido mientras las deformaciones sean pequeñas (del orden de 10^{-3}). Este límite es lo que define al “régimen elástico lineal”.

Además, supondremos que los defectos internos (vacancias, dislocaciones, etc.) no afectan de manera apreciable a las constantes elásticas. Aunque en la realidad sí lo hacen, y también lo hace la temperatura, este es un supuesto razonable para la mayoría de los análisis iniciales.

Si pasamos de una dimensión a tres, debemos escribir la ley de Hooke en forma generalizada. Allí, tensiones y deformaciones se representan con tensores de segundo orden, y la relación entre ellos requiere un tensor de cuarto orden de constantes elásticas:

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^{el}. \quad (3.6)$$

En teoría, C_{ijkl} tiene 81 componentes. Pero gracias a las simetrías físicas —las tensiones y deformaciones son simétricas, y la energía de un sólido debe ser invariante al intercambio de índices—, ese número se reduce a 21:

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij}. \quad (3.7)$$

Finalmente, la propia estructura cristalográfica (véase Cap. 2.3) impone restricciones adicionales. No es lo mismo un cristal cúbico que uno hexagonal; esas diferencias geométricas reducen el número de constantes elásticas independientes a:

- 9 en materiales ortotrópicos,
- 5 en materiales hexagonales,
- 3 en materiales cúbicos,
- y sólo 2 en materiales isotrópicos, que se corresponden con el *módulo de Young* E —que relaciona tensión y deformación uniaxial— y el *coeficiente de Poisson* ν , que describe la contracción lateral frente a una carga axial.

3.2.2 Deformación Plástica

A medida que la carga aumenta, los cristales dejan atrás el régimen elástico y entran en la *deformación plástica*, que ya no es reversible. En otras palabras: el material cambia su forma de manera permanente.

Los estudios experimentales muestran tres características centrales de este fenómeno ([Reid, 2016](#)):

- La deformación plástica solo aparece si existen tensiones de corte. La presión hidrostática por sí sola no la produce. Por eso decimos que depende únicamente del tensor desviador de tensiones:

$$\sigma'_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{kk} \delta_{ij}, \quad \sigma'_{kk} = 0. \quad (3.8)$$

- El volumen del material prácticamente no cambia durante la deformación plástica:

$$\varepsilon_{kk}^{pl} = 0. \quad (3.9)$$

- La red cristalina conserva sus parámetros geométricos. Incluso en materiales muy deformados, los análisis con rayos X confirman que la celda unitaria no se altera significativamente.

Desde el punto de vista microscópico, los mecanismos que activan esta deformación dependen de la tensión aplicada, de la temperatura y, en algunos casos, del flujo de irradiación (Ashby, 1972). Estos mecanismos se dividen en dos grandes grupos:

- **No difusivos:** dominan cuando las tensiones son elevadas y operan a cualquier temperatura. El principal mecanismo aquí es el deslizamiento, asociado al movimiento de dislocaciones.
- **Difusivos:** prevalecen cuando las tensiones son bajas y la temperatura es alta (superior a un tercio de la de fusión). Incluyen, por ejemplo, el creep de dislocaciones (por deslizamiento o trepado) y el creep por difusión (intergranular o por borde de grano).

La diferencia entre ambos es también temporal: los mecanismos no difusivos actúan de manera prácticamente instantánea frente a una carga, mientras que los difusivos se manifiestan a largo plazo. Por eso, cuando analizamos la respuesta inmediata de un material, podemos ignorar a los segundos; pero en procesos de servicio prolongados, su aporte es fundamental.

Deslizamiento

El principal mecanismo no difusivo de deformación plástica en los cristales es el *deslizamiento*. Para entenderlo, conviene imaginar qué ocurre con una dislocación dentro de un cristal: cuando se mueve y alcanza la superficie, deja tras de sí un pequeño “escalón”. La acumulación de estos movimientos microscópicos produce un cambio macroscópico en la forma del material.

El deslizamiento no ocurre en cualquier dirección, sino sobre planos específicos (los *planos de deslizamiento*, identificados por su versor normal $\mathbf{n}$) y en direcciones cristalográficas particulares (los vectores de Burgers $\mathbf{b}$). Por continuidad del cristal, el vector de Burgers debe estar

contenido en el plano de deslizamiento, y por lo tanto es perpendicular a la normal de dicho plano. Una pareja $(\mathbf{n}, \mathbf{b})$ define entonces un *sistema de deslizamiento*.

Cuando una dislocación se desplaza, la deformación que aparece en ese sistema se denomina *deformación de corte simple*, denotada por γ . Su derivada temporal corresponde a la velocidad de corte simple, $\dot{\gamma}$. Aunque en la realidad el deslizamiento es heterogéneo dentro del cristal (solo ocurre en ciertas líneas), en los modelos se adopta la hipótesis de homogeneidad: consideramos que γ o $\dot{\gamma}$ representa la contribución promedio de todas las dislocaciones de un sistema.

Ley de Schmid. El deslizamiento no se activa de manera arbitraria: requiere que el cristal esté sometido a un estado de tensiones particular. La condición que determina si un sistema se activa está dada por la *ley de Schmid* (Schmid, 1924). Según esta ley, un sistema de deslizamiento se activa cuando la tensión de corte resuelta en ese sistema alcanza un valor crítico, conocido como *Critical Resolved Shear Stress* (CRSS), o simplemente τ_c .

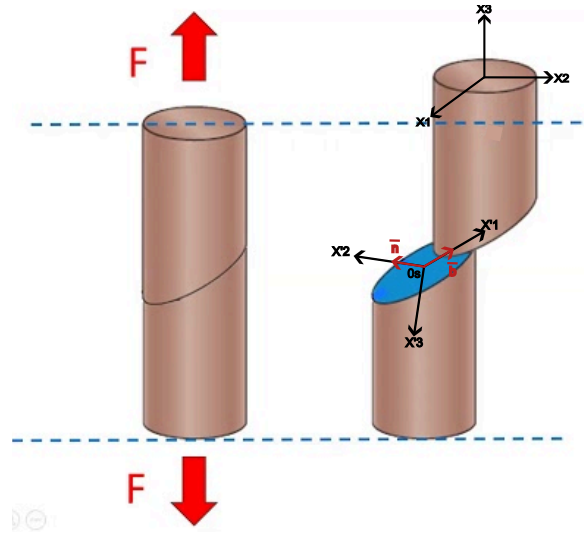


Figura 3.1: Esquema del diagrama de deslizamiento sobre el plano de normal $\mathbf{n}$ en la dirección $\mathbf{b}$

Para calcular esa tensión resuelta, debemos transformar el estado de tensiones del cristal al sistema de coordenadas asociado al plano de deslizamiento. Sea $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ la matriz de cosenos directores de la transformación entre el sistema cristalino 0_c y el sistema del plano de deslizamiento 0_s , con componentes definidas a partir de $\mathbf{n}$ y $\mathbf{b}$:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & b_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \\ (\mathbf{b} \times \mathbf{n})_1 & (\mathbf{b} \times \mathbf{n})_2 & (\mathbf{b} \times \mathbf{n})_3 \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

El estado de tensiones referido al sistema 0_s (ver Fig. 3.1) resulta

$$\sigma_{ij}^s = a_{ik}a_{jl}\sigma_{kl}^c. \quad (3.11)$$

En particular, la tensión de corte resuelta es

$$\sigma_r^s = b_in_j\sigma_{ij}^c, \quad (3.12)$$

que también puede escribirse como

$$\sigma_r^s = \frac{1}{2}(n_ib_j + n_jb_i)\sigma_{ij}^c = m_{ij}\sigma_{ij}^c, \quad (3.13)$$

donde m es el *tensor de Schmid*.

La ley de Schmid establece entonces que un sistema de deslizamiento es activo si

$$m_{ij}\sigma_{ij}^c \geq \tau_c. \quad (3.14)$$

En un cristal existen múltiples sistemas posibles. Cada uno tiene su propio tensor de Schmid y su tensión crítica. Además, los pares de sistemas con el mismo plano de deslizamiento pero vectores de Burgers opuestos tienen tensores de Schmid con signo contrario. Esto significa que, aplicando una misma tensión, uno de ellos puede activarse en una dirección y el opuesto en la contraria.

Velocidad de deformación plástica. Si un sistema se activa, la velocidad de deformación plástica en el sistema cristalino 0_c se obtiene como

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{pl} = m_{ij}\dot{\gamma}. \quad (3.15)$$

Dado que $\mathbf{n}$ y $\mathbf{b}$ son perpendiculares, la traza de m_{ij} es nula ($m_{ii} = 0$), lo que garantiza que la deformación plástica no cambia el volumen.

Si varios sistemas se activan simultáneamente, la deformación resultante es la suma de las contribuciones individuales:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{pl} = \sum_s m_{ij}^s \dot{\gamma}^s. \quad (3.16)$$

El tensor velocidad de deformación es simétrico y tiene 6 componentes, pero al imponer que su traza sea nula (condición de volumen constante) quedan solo 5 independientes. Esto implica que hacen falta al menos 5 sistemas de deslizamiento activos e independientes para acomodar una deformación arbitraria. En cristales de alta simetría suelen existir más de 5 sistemas, lo que plantea el problema de elegir qué combinaciones se activan.

Criterios de selección: Taylor y Bishop–Hill. Taylor (Taylor, 1938) propuso que, si todos los sistemas tienen la misma tensión crítica, la combinación activa es aquella que minimiza la suma de las velocidades de corte, lo que equivale a minimizar el trabajo plástico interno:

$$\dot{W}^{int} = \sum_{s=1}^5 \sigma_r^s \dot{\gamma}^s \quad \text{sea mínima.} \quad (3.17)$$

Más tarde, Bishop y Hill (Bishop and Hill, 1951) extendieron este criterio al caso en que los sistemas tienen distintas tensiones críticas. Ellos reformularon el problema como un sistema de desigualdades que define la *superficie de fluencia del cristal simple*:

$$m_{ij}^s \sigma_{ij} = \sigma_r^s \quad \text{en 5 sistemas independientes,} \quad (3.18)$$

$$m_{ij}^s \sigma_{ij} \leq \sigma_r^s \quad \text{en el resto de los sistemas.} \quad (3.19)$$

Geoméricamente, esta superficie puede imaginarse como un poliedro en un espacio de 5 dimensiones (las tensiones deviatoras). El vector de velocidad de deformación plástica debe estar dentro del cono definido por las normales a esas caras.

Bishop y Hill también propusieron un criterio alternativo: entre todas las combinaciones posibles, el estado de tensiones elegido debe maximizar el trabajo plástico externo

$$\dot{W}^{ext} = \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^{pl} \quad \text{sea máximo.} \quad (3.20)$$

Ambos principios (mínimo trabajo interno y máximo trabajo externo) son equivalentes, aunque este último resulta más sencillo de aplicar en la práctica.

Modelo viscoplástico. Hasta aquí vimos el criterio de Schmid y sus extensiones, que funcionan bien para describir cuándo un sistema de deslizamiento se activa. Sin embargo, en muchos materiales reales la plasticidad no ocurre de manera “brusca” al alcanzar una tensión crítica, sino que depende de la velocidad de deformación: cuanto más rápido intentamos deformar, más tensión se necesita. Este efecto se conoce como *sensibilidad a la velocidad de deformación*.

El modelo viscoplástico (Canova et al., 1984, 1985) incorpora justamente esta dependencia. En él, la velocidad de corte simple $\dot{\gamma}^s$ de un sistema activo se relaciona con la tensión resuelta σ_r^s mediante una ley constitutiva de la forma

$$\frac{\sigma_r^s}{\tau_0^s} = \left(\frac{\dot{\gamma}^s}{\dot{\gamma}_0^s} \right)^m, \quad (3.21)$$

donde τ_0^s es la tensión crítica de referencia para el sistema s , $\dot{\gamma}_0^s$ es la velocidad de corte simple de referencia, m es el exponente de sensibilidad a la velocidad de deformación.

La ecuación (3.21) puede interpretarse así:

- Si $m = 0$, recuperamos el caso clásico sin sensibilidad a la velocidad, equivalente al criterio de Schmid.
- Para $0 < m < 1$, el material exhibe un comportamiento intermedio, asociado al creep no lineal controlado por dislocaciones.
- Para $m = 1$, la ley describe un creep lineal, típico de procesos difusivos.

Invertida, la ley se escribe como

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0^s \left(\frac{m_{ij}^s \sigma_{ij}}{\tau_0^s} \right)^{1/m}, \quad (3.22)$$

lo que permite obtener directamente la velocidad de corte simple de cada sistema a partir del estado de tensiones.

Si reemplazamos esta expresión en (3.16), obtenemos la ecuación constitutiva viscoplástica del cristal simple:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{pl} = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}_0^s \left(\frac{m_{kl}^s \sigma_{kl}}{\tau_0^s} \right)^{1/m}. \quad (3.23)$$

Esta formulación es poderosa porque permite describir distintos regímenes de deformación con una misma ley matemática, simplemente ajustando los parámetros. A bajas temperaturas y altas tensiones (cuando $m \rightarrow 0$), recuperamos la plasticidad por deslizamiento. Con $0,1 \leq m \leq 0,5$, describimos el creep no lineal de dislocaciones. Y con $m = 1$, el creep lineal por difusión.

Endurecimiento. Un aspecto fundamental de la plasticidad es que la tensión crítica de cada sistema de deslizamiento no permanece fija. A medida que el material se deforma, el movimiento de dislocaciones se dificulta: aparecen interacciones entre sistemas, aumentan los obstáculos internos y, en consecuencia, la tensión necesaria para seguir deformando crece. Este fenómeno se conoce como *endurecimiento por deformación*.

La evolución de la tensión crítica τ^s en cada sistema puede representarse con la siguiente ley:

$$\dot{\tau}^s = \sum_{s'} h^{ss'} \dot{\gamma}^{s'}, \quad (3.24)$$

donde $h^{ss'}$ son los coeficientes de endurecimiento, que cuantifican la influencia de la deformación en el sistema s' sobre el sistema s .

Si suponemos que todos los sistemas interactúan de la misma manera ($h^{ss'} = h$), obtenemos el modelo clásico de endurecimiento isotrópico propuesto por Taylor (Taylor, 1938). En ese caso, la tensión crítica crece linealmente con la deformación acumulada total.

Geoméricamente, este efecto hace que la superficie de fluencia del cristal simple se “expanda” a medida que avanza la deformación, desplazando el umbral necesario para activar los sistemas. En términos prácticos, significa que cuanto más se deforma un cristal, más difícil resulta seguir deformándolo.

Condiciones de activación. Con endurecimiento, el criterio de activación de un sistema se escribe como:

$$m_{ij}^s \sigma_{ij} = \tau_c^s \rightarrow \dot{\gamma}^s \geq 0 \quad (\text{sistema en carga}), \quad (3.25)$$

$$m_{ij}^s \sigma_{ij} < \tau_c^s \rightarrow \dot{\gamma}^s = 0 \quad (\text{sistema en descarga}). \quad (3.26)$$

Esto refleja que un sistema solo contribuye a la deformación si la tensión resuelta supera su tensión crítica actualizada. De lo contrario, permanece inactivo.

Comentarios finales

Hemos recorrido, paso a paso, cómo se construyen las ecuaciones constitutivas a nivel de un cristal simple. Empezamos con la respuesta más básica —la deformación elástica lineal— y mostramos cómo las simetrías cristalinas condicionan el número de constantes elásticas independientes. Luego avanzamos hacia la deformación plástica, introduciendo la ley de Schmid como criterio fundamental para la activación de sistemas de deslizamiento.

A partir de allí vimos que, para describir de manera realista el comportamiento de un cristal, no basta con un criterio instantáneo de fluencia: es necesario considerar cómo interactúan varios sistemas en paralelo (Taylor, Bishop–Hill), cómo influye la velocidad de deformación (modelos viscoplásticos), y cómo evoluciona la resistencia interna del material con la deformación acumulada (leyes de endurecimiento). Todo esto nos llevó a una formulación capaz de capturar tanto la plasticidad a bajas temperaturas como los fenómenos de creep gobernados por la difusión o por dislocaciones.

Este desarrollo nos deja en condiciones de dar un paso más: incorporar el efecto de la irradiación sobre los cristales. La irradiación no solo altera la microestructura interna, generando defectos puntuales y clusters, sino que también modifica los mecanismos de deformación disponibles y las variables internas que gobiernan el comportamiento constitutivo. En la próxima sección presentaremos los modelos cristalográficos que permiten describir estas transformaciones y su impacto en la respuesta mecánica de los materiales bajo ambientes irradiados.

3.2.3 Modelo Cristalográfico bajo irradiación

Crecimiento Bajo Irradiación

El fenómeno de *crecimiento bajo irradiación* en Zr y sus aleaciones es uno de los factores más críticos que limitan su uso como material de revestimiento en reactores nucleares, y ha sido estudiado de manera extensa en las últimas décadas Buckley (1962); Carpenter et al. (1988); Fidleris (1988); Holt (2008a,b); Rogerson (1988). Su efecto es bien conocido: produce un cambio de forma anisotrópico del cristal HCP aún en ausencia de tensiones externas, manteniendo el volumen constante Causey et al. (1988b).

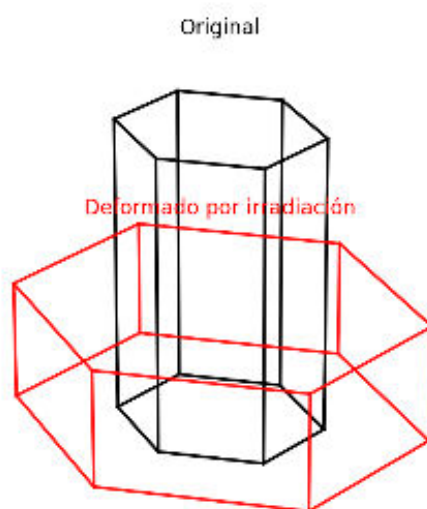


Figura 3.2: Esquema ilustrativo del efecto del crecimiento bajo irradiación en un cristal HCP. En negro, el cristal en su estado original. En rojo, el cristal deformado: expansión en las direcciones $\langle a \rangle$ y contracción en la dirección $\langle c \rangle$.

En términos físicos, este comportamiento se asocia con la formación de lazos de dislocaciones intersticiales en planos prismáticos y lazos de vacancias en planos basales Griffiths and Gilbert (1987); Griffiths et al. (1995); Holt and Gilbert (1986); Was (2007). El resultado neto es una deformación positiva (expansión) en las direcciones $\langle a \rangle$ del cristal y una deformación negativa (contracción) en la dirección $\langle c \rangle$ (ver Fig. 3.2). Una vez iniciada la irradiación, el crecimiento progresa a un ritmo acelerado, intensificado por la multiplicación de lazos de vacancias en los planos basales. La evolución microestructural no es, sin embargo, universal: factores como la historia del material (tratamientos térmicos, trabajado en frío, relajación de tensiones), la composición química y la temperatura de irradiación afectan significativamente la nucleación y multiplicación de defectos Causey et al. (1988b); Griffiths (1988); Murgatroyd and Rogerson (1980); Zee et al. (1987).

Dada esta complejidad, se han desarrollado modelos a dos escalas principales:

- **Fenomenológicos**, que describen la evolución macroscópica del crecimiento en policristales mediante parámetros ajustados a datos experimentales [Causey et al. \(1988b\)](#); [Tomé et al. \(1993, 1996\)](#); [Turner et al. \(1999\)](#). Estos modelos son útiles en rangos de calibración, pero carecen de capacidad predictiva fuera de ellos.
- **Basados en mecanismos físicos**, que recurren a la teoría de campo medio o a enfoques de clústeres dinámicos para describir la cinética de defectos bajo irradiación [Barashev et al. \(2015\)](#); [Bullough and Wood \(1980\)](#); [Christien and Barbu \(2009\)](#); [Golubov et al. \(2012, 2014\)](#); [Holt et al. \(1993\)](#); [Woo \(1988\)](#); [Woo and Gösele \(1983\)](#). Si bien incorporan la física de los defectos puntuales, suelen dejar de lado factores microestructurales como textura o interacciones intergranulares.

Con el fin de tender un puente entre ambos niveles de descripción, [Patra et al. \(2017\)](#) implementaron un modelo físico de crecimiento bajo irradiación —basado en la teoría de [Golubov et al. \(2012\)](#)— dentro del marco VPSC [Lebensohn and Tomé \(1993\)](#). Este enfoque permite capturar de manera explícita el rol de la textura, la anisotropía y las interacciones intergranulares en policristales HCP, extendiendo la capacidad predictiva del modelo.

A continuación, se presenta la formulación cristalográfica empleada en esta tesis para describir el crecimiento bajo irradiación, basada en un modelo de reacción–difusión cuya expresión detallada se pueden encontrar en [Barashev et al. \(2015\)](#); [Golubov et al. \(2014\)](#); [Patra et al. \(2017\)](#).

El flujo neutrónico producto de la fisión nuclear genera cascadas de desplazamientos que alteran la red cristalina y crean defectos puntuales: vacancias, intersticiales y clústeres intersticiales. Estos defectos migran por la red y pueden ser capturados por dislocaciones, bordes de grano o interfases, que actúan como sumideros [Brailsford and Bullough \(1972\)](#).

El modelo de reacción–difusión considera cuatro direcciones cristalográficas para describir las deformaciones y los vectores de Burgers de las dislocaciones: tres direcciones basales compactas $j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ y la dirección del eje c , $j \equiv c$. Se definen las concentraciones medias de vacancias e intersticiales en el medio efectivo como c_v y c_i , respectivamente, asumiendo difusión isotrópica. Se generan cantidades iguales de cúmulos de átomos auto-intersticiales (SIA) a lo largo de cada dirección basal, con concentraciones c_{ic}^j ; estos cúmulos difunden unidireccionalmente sobre $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$.

Las dislocaciones lineales se proyectan sobre las direcciones $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ y c . Los lazos de dislocación nucleados en planos prismáticos o basales poseen vectores de Burgers $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$

y c, respectivamente. Tanto los defectos puntuales como los cúmulos SIA son absorbidos por dislocaciones (de densidad ρ^j), permitiendo el trepado de éstas y el crecimiento de lazos intersticiales y de vacancias. Dado que los cúmulos intersticiales tienen vector de Burgers basal y difunden de manera unidireccional, sólo interactúan con dislocaciones de igual orientación, es decir, aquellas con $j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$.

Los lazos intersticiales (densidad N_i^j , radio medio r_i^j) y los lazos de vacancias (densidad N_v^j , radio medio r_v^j) se forman y crecen en planos prismáticos y basales. El modelo predice una captura neta de intersticios en lazos prismáticos y de vacancias en lazos basales. En consecuencia, el trepado y crecimiento de estos lazos producen deformaciones positivas $\varepsilon_{cree}^{a_1}, \varepsilon_{cree}^{a_2}, \varepsilon_{cree}^{a_3}$ en las direcciones prismáticas y una deformación negativa ε_{cree}^c en la dirección basal. Parte de los defectos generados por radiación también es absorbida por los bordes de grano (GBs) [Singh et al. \(2002\)](#).

Bajo hipótesis de estado estacionario, la tasa de deformación cristalográfica asociada al trepado de dislocaciones lineales y lazos de dislocaciones viene dada por [Patra et al. \(2017\)](#):

$$\varepsilon_{climb}^j = G_{NRT} (1 - f_r) f_{ic} \left(\frac{1}{3} - \frac{\rho^j}{\sum_j \rho_j + \sum_j \sum_m k_m^{j2}} \right), \quad j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3; \quad m \equiv \mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}', \quad (3.27)$$

$$\varepsilon_{climb}^j = -G_{NRT} (1 - f_r) f_{ic} \left(\frac{\rho^j}{\sum_j \rho_j + \sum_j \sum_m k_m^{j2}} \right), \quad j \equiv \mathbf{c}; \quad m \equiv \mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}'. \quad (3.28)$$

Aquí, G_{NRT} es la tasa de producción de defectos de Norgett–Robinson–Torrens (vacancias e intersticiales) [Norgett et al. \(1975\)](#); f_r es la fracción de defectos puntuales que recombinan durante la cascada; y f_{ic} es la fracción de intersticiales que forman clústeres. La *fuerza de absorción* de los bordes de grano para defectos puntuales k_m^{j2} (superíndice j : dirección del vector de Burgers; subíndice m : eje principal del grano elipsoidal) se define como [Patra et al. \(2017\)](#):

$$k_m^{j2} = \left(\hat{\mathbf{m}} \cdot \hat{\mathbf{j}} \right) \frac{\frac{1}{R_m^2}}{\sum_m \frac{1}{R_m^2}} \frac{1}{R_m^2} \frac{3\beta_m^2 [\beta_m \coth(\beta_m) - 1]}{R_m^2 \beta_m^2 - 3 [\beta_m \coth(\beta_m) - 1]}, \quad (3.29)$$

donde R_m es la longitud del m -ésimo semieje del grano (elipsoidal) y β_m el parámetro adimensional correspondiente.

La densidad total de dislocaciones asociada a la dirección $\mathbf{j}$ se modela como

$$\rho_j = \rho_d + 2\pi r_i^j N_i^j + 2\pi r_v^j N_v^j, \quad (3.30)$$

donde ρ_d es la densidad de dislocaciones lineales, y los términos restantes representan las contribuciones “por unidad de área” de lazos intersticiales y de vacancias.

Existe además una contribución de crecimiento por captura de defectos en bordes de grano:

$$\varepsilon_{GB}^j = -G_{NRT} (1 - f_r) f_{ic} \frac{\sum_m k_m^{j2}}{\sum_j \rho_j + \sum_j \sum_m k_m^{j2}}, \quad j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3; \quad m \equiv \mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}'. \quad (3.31)$$

La tasa de deformación cristalográfica total por crecimiento bajo irradiación resulta:

$$\dot{\epsilon}_{\text{crec}}^j = \dot{\epsilon}_{\text{climb}}^j + \dot{\epsilon}_{\text{GB}}^j, \quad j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c}. \quad (3.32)$$

Finalmente, el tensor de tasa de deformación *macroscópica* asociado al crecimiento por irradiación se obtiene proyectando las tasas cristalográficas sobre los ejes del cristal:

$$\dot{\epsilon}_{kl}^{(\text{crec})} = \sum_j \dot{\epsilon}_{\text{crec}}^j b_k^j b_l^j, \quad j \equiv \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c}; \quad k, l \equiv \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \quad (3.33)$$

donde b_k^j y b_l^j son las componentes del vector de Burgers $\mathbf{b}^j$ en las direcciones $\mathbf{x}_k$ y $\mathbf{x}_l$ del sistema cristalino (ver Fig. 3.3).

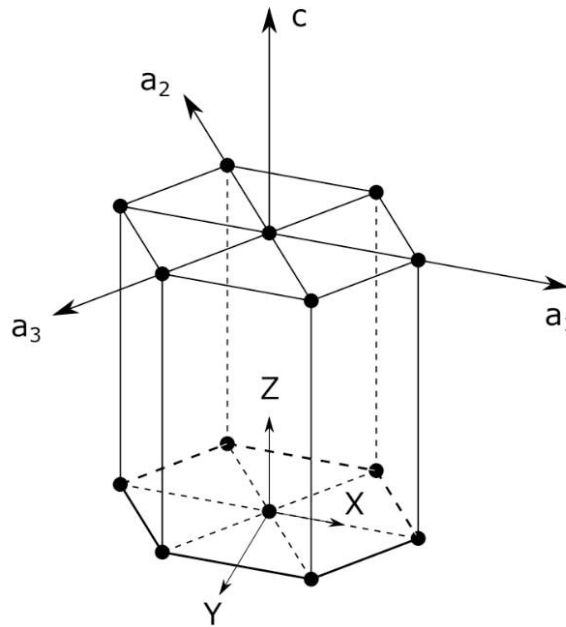


Figura 3.3: Orientación del cristal simple utilizado para la incorporación del modelo de crecimiento por irradiación en VPSC. Imagen tomada de [Subramanian et al. \(2012\)](#)

Creep bajo Irradiación

El crecimiento bajo irradiación está estrechamente vinculado con el fenómeno de *creep* bajo irradiación. La razón es que el crecimiento anisotrópico de los granos no siempre es compatible con el crecimiento promedio del material. Esta incompatibilidad genera tensiones internas que, a su vez, desencadenan procesos de fluencia. Por ello, es fundamental considerar el creep bajo irradiación incluso en ausencia de cargas externas aplicadas.

A partir de mediciones de tensiones residuales en tubos de revestimiento de combustible de acero inoxidable AISI 304, y de experimentos con tubos presurizados, Foster ([Foster et al., 1972](#)) propuso una ley empírica para la tasa de creep bajo irradiación. Según esta formulación, la velocidad de creep es lineal con la tensión aplicada y consta de dos términos: uno independiente del swelling y otro proporcional a la tasa de swelling.

Inspirados en esta descripción, Patra ([Patra et al., 2017](#)) desarrollaron un modelo cristalográfico de creep bajo irradiación. Dicho modelo conserva la dependencia lineal con la tensión y la tasa de dosis de radiación, pero omite el término de swelling. En su forma macroscópica, la ley se expresa como:

$$\dot{\epsilon}^{\text{creep}} = B_0 \sigma \frac{d\phi}{dt}, \quad (3.34)$$

donde σ es la tensión efectiva, B_0 el *creep compliance* por irradiación y $\frac{d\phi}{dt}$ la tasa de dosis de radiación (en dpa s^{-1}).

En esta tesis se emplea un equivalente cristalográfico de la ecuación (3.34), partiendo de la idea de que la fuerza motriz principal de la irradiación es la producción de defectos en cascadas de desplazamiento de átomos. Con esta hipótesis, la velocidad de cizallamiento asociada al creep bajo irradiación en un sistema de deslizamiento j se representa mediante la siguiente ley fenomenológica:

$$\dot{\gamma}_{\text{creep}}^j = B \frac{\rho_d^j}{\rho_{\text{ref}}} \tau^j \frac{d\phi}{dt}, \quad (3.35)$$

donde τ^j es la tensión de corte resuelta en el sistema j , B es el *creep compliance* cristalográfico, ρ_d^j es la densidad de dislocaciones lineales que deslizan en el sistema j , ρ_{ref} es una densidad de referencia que actúa como factor de normalización.

Esta formulación refleja que la velocidad de cizallamiento es mayor en los sistemas de deslizamiento con mayor densidad de dislocaciones activas, lo que introduce de manera natural una anisotropía en la respuesta al creep. Al mismo tiempo, el factor de referencia ρ_{ref} asegura que la magnitud B mantenga las mismas dimensiones que el B_0 macroscópico de la ecuación (3.34).

En el marco de esta tesis, el foco principal está puesto en el crecimiento bajo irradiación. Por este motivo, se adopta el modelo fenomenológico de creep descrito anteriormente, que resulta suficiente para acompañar el análisis. En trabajos futuros se planea extender esta base incorporando mecanismos de creep con mayor sustento físico, considerando en particular si su origen se encuentra en los procesos de absorción preferencial de intersticiales (SIPA) [Mansur \(1979\)](#) o en el deslizamiento de dislocaciones activado por cascadas neutrónicas [Golubov et al. \(a\)](#).

3.2.4 Creep Térmico cristalográfico

El *creep* térmico aparece cuando las dislocaciones se deslizan a través de la red cristalina, sorteando el entramado de dislocaciones y otros obstáculos gracias a mecanismos de difusión activados por la tensión y la temperatura. En términos prácticos, esto ocurre a temperaturas relativamente altas ($T > 0,5T_M$) o cuando las tensiones alcanzan valores cercanos a la tensión de fluencia ($\sigma > 0,75\sigma_f$). Aunque en condiciones normales de operación del reactor su efecto es marginal, bajo escenarios anómalos o accidentales (donde pueden producirse picos localizados de tensión y temperatura) el *creep* térmico se vuelve un actor clave. De hecho, incluso en ensayos controlados bajo condiciones estacionarias se ha registrado su presencia, lo que permite caracterizar su comportamiento en escenarios extremos (Christodoulou et al., 2002; Fidleris, 1988).

La ley de potencia expresada en la Ecuación 3.23 resulta adecuada para describir la contribución de distintos sistemas de deslizamiento al *creep* total de un grano. En este contexto, la formulación adoptada es:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \sum_s m_{ij}^s \dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0(T) \sum_s m_{ij}^s \left(\frac{m_{ij}^s \sigma_{kl}}{\tau_{\text{thres}}^s} \right)^n, \quad (3.36)$$

donde se asume que el deslizamiento ocurre en los planos prismáticos, basales y piramidales (ver mecanismos de deformación, sección 2.3). Los parámetros de esta expresión están directamente vinculados con las propiedades físicas de las aleaciones de Zr y se detallan a continuación.

La cizalla de referencia $\dot{\gamma}_0$ depende tanto de la temperatura como de la energía de activación del mecanismo difusivo. En particular, se adopta la dependencia propuesta por Christodoulou et al. (Christodoulou et al., 2002), obtenida a partir del ajuste de una amplia base experimental de ensayos de *creep* (tensión y corte) en tubos de Zr-2.5 %Nb, sometidos a diferentes tensiones y temperaturas. Dichos autores proponen una simplificación: asignar un mismo $\dot{\gamma}_0$ para todos los sistemas de deslizamiento, trasladando la especificidad del mecanismo al valor umbral τ_{thres}^s . La expresión reportada es:

$$\dot{\gamma}_0(T) = \dot{\gamma}_0(T = 523) \exp \left[-Q(T) \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{523} \right) \right], \quad (3.37)$$

$$\text{con } \dot{\gamma}_0(T = 523) = 4,157 \times 10^{-3} \text{ h}^{-1} \text{ y}$$

$$Q(T) = 5000 + \frac{5600}{1 + \exp^{-\left(\frac{T-470}{15}\right)}}.$$

Un aspecto llamativo de la Ecuación 3.37 es que el factor preexponencial varía con la temperatura, lo que sugiere un posible cambio en la naturaleza del mecanismo activado. No obstante, dado que la base experimental abarca $373\text{ K} < T < 596\text{ K}$, su extrapolación a condiciones más severas (por ejemplo, escenarios de *ballooning*) debe tomarse con cautela.

En cuanto al parámetro de sensibilidad a la tasa (n), los datos de Christodoulou indican un intervalo $3,8 < n < 4,2$, consistente con el rango $3,4 < n < 4,6$ recopilado por Wang et al. (Wang et al., 2013) para Zircaloy-4. En este trabajo se adopta $n = 4$. Para las tensiones críticas resueltas se toman los valores $\tau_{\text{thres}}^s = 0,100, 0,111, 0,300\text{ GPa}$ para los sistemas prismático, basal y piramidal, respectivamente.

En síntesis, el marco cristalográfico del *creep* térmico es robusto, ya que refleja los mecanismos que, a nivel físico, gobiernan la deformación.

En futuros trabajos se buscará ampliar y contrastar esta base con otras fuentes experimentales, como los estudios de Butcher y Donohue (Butcher and Donohue, 1986), quienes midieron el *creep* térmico en condiciones de irradiación.

La validación código a código del modelo adoptado se presenta en la Sección 5.4, mientras que su aplicación combinada con el *creep* bajo irradiación se analiza en la Sección 5.5.

3.2.5 Expansión Térmica cristalográfica

Cuando un material experimenta un cambio de temperatura, responde con una deformación asociada. En términos sencillos, el sólido “se expande o contrae” al calentarse o enfriarse. Matemáticamente, bajo ciertas condiciones, las componentes del tensor de deformación pueden asumirse proporcionales al cambio de temperatura:

$$\varepsilon_{ij}^{\text{therm}} = \alpha_{ij} \Delta T \quad (3.38)$$

donde α_{ij} son los coeficientes de expansión térmica del material. Generalmente estos coeficientes son positivos, reflejando la tendencia normal de los sólidos a expandirse al aumentar la temperatura. Sin embargo, existen casos particulares en los que pueden encontrarse valores negativos (Sleight, 1998), lo cual indica un comportamiento anómalo. Cabe destacar que dichos coeficientes no son constantes: dependen de la temperatura, y a menudo de manera marcada.

Para el caso del Zr, los coeficientes de expansión empleados en este trabajo fueron los medidos por Goldak et al. (1966): $\alpha_{11} = 5,4$, $\alpha_{22} = 9,1$ y $\alpha_{33} = 7,4$, en unidades de 10^{-6} K^{-1} . Estos valores reflejan el carácter anisotrópico del cristal, donde cada dirección responde de manera distinta frente a un mismo cambio térmico.

Ahora bien, la expansión térmica no puede analizarse de manera aislada: depende de la interacción con las propiedades elásticas del material. En el caso del Zr, sus constantes elásticas anisotrópicas han sido estudiadas en profundidad. Fisher et al. (Fisher and Renken, 1961, 1964) determinaron estas constantes en un amplio rango de temperaturas, desde apenas 4 K hasta unos 1100 K. Tremblay et al. (Tremblay and Roy, 1973) realizaron estudios adicionales para aleaciones con alto contenido de oxígeno, destacando que la presencia de elementos aleantes modifica los parámetros de red y, por lo tanto, también altera las constantes elásticas.

En este trabajo se adoptaron los valores reportados por Simmons y Kocks (Kocks et al., 2000; Simmons, 1965) para las simulaciones de la expansión térmica. A modo de referencia, a temperatura ambiente las constantes elásticas utilizadas fueron:

$$\begin{aligned} C_{11} &= 143,5 \text{ GPa}, & C_{33} &= 164,9 \text{ GPa}, \\ C_{44} &= 32,1 \text{ GPa}, & C_{12} &= 72,5 \text{ GPa}, & C_{13} &= 65,4 \text{ GPa}. \end{aligned}$$

Estos valores, junto con los coeficientes de dilatación anisotrópicos, permiten describir de manera realista la respuesta del Zr frente a gradientes térmicos, algo esencial en el contexto de aplicaciones nucleares donde la anisotropía juega un rol determinante.

3.3 Modelo a Nivel Mesoscópico: Policristal

3.3.1 Propiedades Globales de Policristales: promedios y respuesta

Con el fin de obtener la respuesta macroscópica de policristales, usualmente se considera a estos como medios compuestos de varios subdominios continuos, que son los granos (cristales simples). Los modelos policristalinos, se basan en correlacionar la respuesta del agregado policristalino con la de los cristales simples que lo componen. En general, independientemente de diferencias en algunas de las suposiciones en que se apoyan estos modelos, todos ellos obedecen a principios generales comunes relacionados con el método y procedimiento de modelización. Se puede establecer que estos principios consisten en la combinación de tres clases de elementos:

1. Caracterización de la respuesta de los cristales simples.
2. Definición de un procedimiento de promedio u hipótesis de homogeneización.
3. Un criterio de localización.

En relación al primer punto, se vió en la subsección 3.2 un análisis de las ecuaciones constitutivas que permiten caracterizar la respuesta homogénea del grano bajo diferentes condiciones

(mecánicas, térmicas y bajo irradiación), tratando en todos los casos de considerar los fenómenos básicos a nivel microestructural. En esta subsección, analizaremos y presentaremos las hipótesis bajo las cuales puede considerarse la respuesta media del policristal como representativa de la respuesta global del material. El criterio de localización es tenido en cuenta en el desarrollo del presente trabajo; sin embargo, su análisis detallado queda fuera del alcance de esta tesis, dado que no es el foco principal de la investigación.

En la transición desde las variables microscópicas a las mesoscópicas, ciertas propiedades y estados deben promediarse sobre un volumen adecuado. En policristales, ese volumen corresponde al agregado policristalino. Para describir un medio heterogéneo se define un *elemento representativo de volumen* (RVE, por sus siglas en inglés) que sea lo suficientemente pequeño para resolver las heterogeneidades microscópicas y, a la vez, lo bastante grande para reproducir con precisión la respuesta efectiva del material. En este sentido importa la *escala relativa* del RVE respecto de la microestructura “esencial”, más que su tamaño absoluto (Hill, 1965, 1967). Denotando por L la dimensión lineal del RVE y por d la dimensión característica de la microestructura esencial, Hill (Hill, 1965) sugirió que un medio efectivo homogéneo se obtiene cuando $d/L \lesssim 10^{-3}$. En policristales, la microestructura esencial que se desea preservar está asociada al dominio granular (que aquí se asume homogéneo, con tensión y deformación uniformes). Dado que los granos metálicos suelen tener tamaños del orden de decenas de micrones, ello sugiere que un RVE típico efectivo puede alcanzar escalas del orden centimétrico.

Más recientemente, formulaciones multiescala basadas en RVE han extendido el principio de Hill–Mandel para incorporar efectos de micro-inercia y fuerzas de cuerpo a nivel microscópico, estableciendo rigurosamente las relaciones de homogeneización entre cantidades macro y micro mediante argumentos variacionales. En particular, se demuestra que sólo las *fluctuaciones* de la inercia y las fuerzas de cuerpo respecto de sus promedios volumétricos del RVE influyen en el equilibrio microscópico y en el esfuerzo homogeneizado, mientras que los promedios actúan a nivel macroscópico (De Souza Neto et al., 2015).

Estas dimensiones son comparables a las que habitualmente poseen las muestras ensayadas experimentalmente. En consecuencia, las magnitudes medidas en dichos ensayos, que representan respuestas globales del agregado, pueden compararse directamente con los resultados de modelizaciones numéricas obtenidas bajo la hipótesis de homogeneización en elementos representativos de volumen.

Habiendo definido el comportamiento mesoscópico en base a un elemento representativo de volumen en el cual se conserva la microestructura esencial, es razonable suponer que, con mayor o menor detalle, la ecuación constitutiva del agregado será cualitativamente similar a la que

describe la respuesta de sus componentes, los granos (Hill (1967)). Esta aproximación permite no sólo correlacionar las respuestas globales con la de los granos, sino también identificar las propiedades macroscópicas o globales del agregado con la de los cristales simples.

Se define como uniforme a la condición de borde de tensión Σ que resultaría en la superficie del material al imponer un estado de tensión uniforme localmente en el volumen. Análogamente, se define como uniforme a la condición de borde de desplazamientos, o deformación $\mathbf{E}$, que resultaría en la superficie del material al imponer un estado de deformación uniforme localmente en el volumen. Obviamente debido a la heterogeneidad del material, cuando se impone un estado de tensión (deformación) localmente uniforme, no resulta un estado de deformación (tensión) uniforme local. Sin embargo, es sencillo probar que cuando una de estas condiciones de carga (tensión o deformación) uniforme es impuesta en la superficie del material heterogéneo, resulta que el escalar definido por el producto interno del estado de tensión con el estado de deformación satisface (Hill, 1967):

$$\overline{\sigma \varepsilon} = \bar{\sigma} \bar{\varepsilon}; \quad (3.39)$$

donde la barra indica el promedio espacial en el volumen representativo. Como el estado de tensión y el estado de deformación locales están relacionados a través de un “módulo de constantes o compliancias” en el sentido general de una ley constitutiva pseudolineal, de la condición 3.39 surge que dichos “módulos de constantes o compliancias” globales pueden ser definidos en términos de la energía global dada por la expresión 3.39.

Si se impone una condición de borde uniforme Σ ($\mathbf{E}$), resulta inmediatamente que vale el promedio:

$$\Sigma = \bar{\sigma}; (\mathbf{E} = \bar{\varepsilon}) \quad (3.40)$$

mientras que la deformación (tensión) presenta una fluctuación de periodo “d”, debido a la heterogeneidad del material, y amplitud independiente de “L”, sobre la superficie del volumen. Para valores suficientemente grandes de “d/L” esta fluctuación puede ser ignorada de modo que los estados mesoscópicos de la respuesta del policristal satisfagan simultáneamente:

$$\Sigma = \bar{\sigma} \quad (3.41)$$

$$\mathbf{E} = \bar{\varepsilon} \quad (3.42)$$

bajo una u otra condición de borde uniforme. Las condiciones 3.41 y 3.42 son los promedios espaciales que dan la respuesta mesoscópica uniforme en función de las respuestas locales. Bajo la hipótesis de ergodicidad con respecto a la aleatoriedad de la distribución de granos de igual orientación dentro del volumen del policristal, se obtiene que los promedios espaciales

son iguales a los promedios pesados por la fracción de volumen en el conjunto discreto de orientaciones que representan al agregado policristalino, es decir:

$$\Sigma = \langle \sigma^c \rangle \quad (3.43)$$

$$\mathbf{E} = \langle \varepsilon^c \rangle \quad (3.44)$$

Por último mencionaremos aquí que el modelo policristalino que se utilizará se considera que las propiedades del materiales se encuentran localizadas en el interior del dominio del grano y no en las interfases entre los cristales simples (borde de grano). Estas interfases siempre poseen un volumen finito y por lo tanto componen otra fase en el agregado, pero fundamentalmente, en el caso de agregados policristalinos metálicos con una única fase dicho volumen representa un porcentaje del volumen total del material el cual puede ser despreciado en primera aproximación.

3.3.2 Familias de modelos policristalinos

Retomando la motivación esbozada en el Cap. 1, el modelado de la plasticidad de agregados policristalinos puede organizarse en dos grandes familias: (i) los *modelos de campo medio* (*mean-field*), que idealizan la interacción entre los granos y su entorno mediante hipótesis promedio, y (ii) los *modelos de campo completo* (*full-field*), que discretizan explícitamente una representación de la microestructura y resuelven los campos locales de tensión y deformación. Ambos enfoques ofrecen distintos compromisos entre realismo físico, costo computacional y posibilidad de acoplar fenómenos adicionales.

Modelos de campo medio. Estos modelos buscan predecir la respuesta macroscópica a partir del comportamiento idealizado de un volumen representativo (RVE) formado por múltiples granos. Los límites teóricos de este enfoque están dados por los modelos de *Taylor* ([Taylor, 1938](#)) y *Sachs* ([Sachs, 1928](#)): el primero impone deformación uniforme en todos los granos (*restricción completa*), mientras que el segundo asume igual tensión en cada uno (*isotensión*). Ambos constituyen cotas superiores e inferiores del comportamiento plástico del agregado. Entre ellos surgen los esquemas de *condiciones relajadas* (RC) y configuraciones *multisitio* ([Van Houtte et al., 1999, 2005](#)), que introducen compatibilidad parcial inspirada en la morfología granular y mejoran la predicción de texturas con un costo moderado.

Más cerca del comportamiento real se ubican los modelos *autoconsistentes* (SC), en los que cada grano se considera una inclusión que interactúa con un medio homogéneo efectivo. Entre ellos, el modelo *Elastic-Plastic Self-Consistent* (EPSC) ([Tomé et al., 1991](#)) incorpora un

régimen elástico lineal antes del inicio del deslizamiento, mientras que su extensión viscoplástica, el *Visco-Plastic Self-Consistent* (VPSC) (Lebensohn and Tomé, 1993; Tome and Lebensohn, 2023), permite capturar de manera continua la transición al flujo plástico. En VPSC, las inclusiones son elipsoidales y obedecen una ley viscoplástica local que facilita la evolución de textura y la incorporación de fenómenos dependientes del tiempo como la fluencia (*creep*) o el crecimiento (*growth*). Existen formulaciones de uno o varios sitios: en el primer caso, cada grano interactúa con el medio efectivo homogéneo; en el segundo, se modelan interacciones explícitas con vecinos cercanos, aumentando el detalle local a expensas del costo computacional (Fig. 3.4).

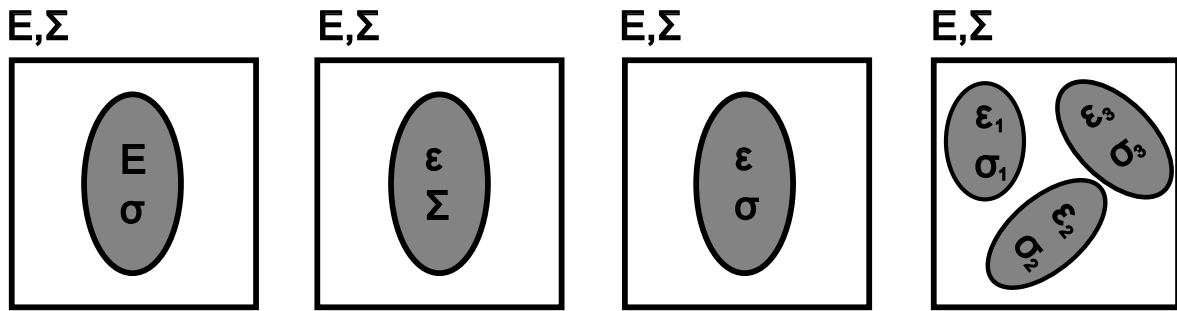


Figura 3.4: Modelos de deformación del policristal: (a) Taylor, (b) Sachs, (c) Autoconsistente de 1-sitio y (d) Autoconsistente de n -sitios (Signorelli, 1999).

Modelos de campo completo. Cuando el objetivo es capturar heterogeneidades intra e intergranulares o fenómenos localizados, los modelos de *campo completo* (*full-field*) constituyen la alternativa más detallada. En este enfoque, la microestructura se discretiza explícitamente en una malla o red de voxels, y se resuelven las ecuaciones de equilibrio en cada punto mediante esquemas numéricos de alta resolución. El *Crystal Plasticity Finite Element Method* (CPFEM) representa la aproximación más extendida: cada elemento finito se asocia a un cristal con su orientación y ley de deslizamiento, permitiendo reproducir gradientes, localizaciones de deformación y evolución de textura con fidelidad, aunque con un costo computacional elevado (Zhai et al., 2025). Más recientemente, los métodos espectrales basados en la *Transformada Rápida de Fourier* (FFT) (Moulinec and Suquet, 1998; Onimus et al., 2022a; Vondřejc et al., 2013) han emergido como una alternativa eficiente al CPFEM. El enfoque *Viscoplastic FFT* (VPFFT) y su extensión *Galerkin FFT* permiten resolver directamente el equilibrio mecánico en el dominio de Fourier, asociando a cada voxel una orientación cristalográfica y una ley constitutiva local. Estos métodos capturan con precisión las heterogeneidades de tensión y deformación, presentan excelente escalabilidad en arquitecturas paralelas y evitan el costo de mallado propio del FEM, aunque requieren condiciones periódicas y formulaciones específicas para grandes deformaciones.

Modelos híbridos y multiescala. Con el objetivo de equilibrar fidelidad microestructural y eficiencia numérica, han surgido enfoques *híbridos* y *multiescala*, tales como el esquema FE^2 (*Finite Element squared*) y los modelos de orden reducido (*Reduced Order Models*, ROM). En FE^2 , cada punto de integración del dominio macroscópico se asocia a una RVE policristalina que se resuelve en línea (Chen et al., 2022), mientras que los ROM extraen modos fundamentales de una microestructura previamente resuelta para acelerar simulaciones posteriores, manteniendo la precisión esencial en la respuesta global (Nasirov et al., 2024). Adicionalmente, marcos híbridos basados en *machine learning* permiten incorporar información microestructural para predecir respuesta y daño en aleaciones de circonio cuando existen variables latentes difíciles de modelar explícitamente (Hasan et al., 2023).

En la Tabla 3.1 se resumen las tres familias de modelos policristalinos más utilizadas, junto con algunos ejemplos y el equilibrio que cada una ofrece entre fidelidad microestructural y costo computacional.

Cuadro 3.1: Comparación de las principales familias de modelos policristalinos.

Categoría	Modelos representativos	Ventajas y limitaciones
Campo medio	Taylor, Sachs, EPSC, VPSC, RC, multisitio	Costo muy bajo; permite capturar anisotropía global y textura; limitado en la descripción de heterogeneidades locales.
Campo completo	CPFEM, VPFFT, Galerkin FFT	Alta fidelidad microestructural; excelente para gradientes y localizaciones; costo computacional y de memoria elevado.
Híbrido / Multiescala	FE^2 , ROM	Equilibrio entre rapidez y detalle; permite acoplamientos macro–micro; alta complejidad de implementación.

Esta síntesis permite situar el modelo VPSC adoptado en esta tesis dentro del panorama general de las técnicas policristalinas: un esquema autoconsistente de campo medio que ofrece un compromiso óptimo entre realismo físico, capacidad predictiva y eficiencia numérica, adecuado para acoplarse con códigos de elementos finitos en problemas de ingeniería a gran escala.

3.3.3 Modelo Visco-Plástico Auto Consistente (VPSC)

El modelo policristalino visco plástico auto consistente (VPSC) desarrollado por [Tomé et al. \(1993\)](#); [Tome and Lebensohn \(2023\)](#), tiene implementado las ecuaciones constitutivas de creep y crecimiento bajo irradiación a nivel del grano discutidos anteriormente (sec. 3.2.3), teniendo en cuenta la textura, la interacción inter granular y la forma del grano. En el presente trabajo, se realizó el acople de la ecuación constitutiva correspondiente al creep térmico (3.2.4) a las ecuaciones existentes a nivel del grano, permitiendo así ampliar las capacidades del modelo para describir de manera más precisa los mecanismos de deformación en condiciones térmicas específicas. El modelo VPSC permite seguir la evolución incremental del estado de tensiones, deformaciones, las orientaciones de los cristales, la actividad de los sistemas de deslizamiento de cada grano, densidad de dislocaciones de cada sistema de deslizamiento, etc. Este modelo trata a cada grano como una inclusión elipsoidal embebida en un medio efectivo visco plástico, ambos, inclusión y medio poseen propiedades anisotrópicas. El medio efectivo representa el entorno promedio visto por cada grano. Cuando se somete el medio efectivo a tensión, deformación, irradiación o cambio de temperatura, ocurre una interacción entre el medio efectivo y el grano (inclusión embebida), generando tensiones locales entre el medio y la inclusión. Las tensiones, que resultan de resolver las ecuaciones de equilibrio, son uniformes dentro de la inclusión, pero se desvían respecto de la tensión promedio del medio dependiendo de las propiedades relativas y de la tendencia de deformación entre el medio y la inclusión. El deslizamiento y el trepado de las dislocaciones inducen deformaciones plásticas de cizallamiento y no resultan dilataciones volumétricas. Se denota $\mathbf{n}^s$ a la normal al plano de deslizamiento, y $\mathbf{b}^s$ a la dirección de corte (vector de Burger) sobre el sistema de deslizamiento s . La tensión de corte resuelta sobre el plano de corte y a lo largo de la dirección de corte asociado con el tensor de tensiones σ_{ij}^c que actúa sobre el grano está dado por:

$$\tau^s = b_i^s n_j^s \sigma_{ij}^c = m_{ij}^s \sigma_{ij}^c \quad (3.45)$$

donde, el tensor de Schmid $m_{ij}^s = \frac{1}{2}(b_i^s n_j^s + b_j^s n_i^s)$, proyecta la tensión aplicada sobre el plano de corte a lo largo de la dirección de corte. La tasa del tensor de deformaciones asociado con la tasa de tensión de corte debido a creep bajo irradiación, $\dot{\gamma}_{\text{creep}}^s$ (ver Ec. 3.35) en el sistema s es:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{(\text{creep})} = \sum_s m_{ij}^s \dot{\gamma}_{\text{creep}}^s \quad (3.46)$$

Agregando las contribuciones debidas a creep y crecimiento bajo irradiación (ver Ec. 3.33 y 3.46) además la contribución debida a creep térmico (ver Ec. 3.36), la tasa de deformación total en el

grano es:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^c = \dot{\varepsilon}_{ij}^{(crec)} + \dot{\varepsilon}_{ij}^{(creep)} + \dot{\varepsilon}_{ij}^{(thcreep)} + \dot{\varepsilon}_{ij}^{(therm)} \quad (3.47)$$

Para la respuesta del medio efectivo (policristal), se usa la linealización tangente¹:

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \bar{M}_{ijkl} \bar{\sigma}_{kl} + \bar{\varepsilon}_{ij}^0 \quad (3.48)$$

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

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

$$(\dot{\varepsilon}_{ij}^c - \bar{\varepsilon}_{ij}) = -\tilde{M}_{ijkl} (\sigma_{kl} - \bar{\sigma}_{kl}) \quad (3.49)$$

donde,

$$\tilde{M}_{ijkl} = (I - S)_{ijmn}^{-1} S_{mnpq} \bar{M}_{pqkl} \quad (3.50)$$

donde S es el tensor visco plástico de Eshelby. La Ec. 3.49 indica que la tensión y la tasa de deformación entre la inclusión y el medio efectivo difieren.

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

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \langle \dot{\varepsilon}_{ij}^c \rangle; \bar{\sigma}_{kl} = \langle \sigma_{kl} \rangle \quad (3.51)$$

El modelo policristalino autoconsistente ha sido aplicado para simular *creep* y crecimiento bajo irradiación en metales HCP (Tomé et al., 1993, 1996; Turner et al., 1999). A diferencia de esos trabajos—donde las tasas de *creep*/crecimiento se consideran constantes y tanto el radio de los lazos como las densidades de defectos (vacancias e intersticiales) no evolucionan— aquí se incorpora explícitamente la evolución microestructural, permitiendo que dichas magnitudes cambien con la irradiación.

¹Nótese que el código VPSC puede ejecutarse bajo diferentes supuestos de linealización, y que los resultados correspondientes pueden diferir sustancialmente entre sí cuando se utilizan los mismos parámetros de endurecimiento. Para más información, ver sección 3.7 Linearization del libro VPSC Tome and Lebensohn (2023)

Estudio de Sensibilidad de los Efectos Térmicos

Durante la operación del reactor, las tensiones inducidas por gradientes térmicos y por irradiación se superponen, dando lugar a una respuesta viscoplástica compleja. En este contexto, los mecanismos activados térmicamente —en particular el creep y la expansión térmica— desempeñan un papel clave en la relajación de tensiones y la deformación acumulada del tubo de revestimiento. Si bien su contribución suele ser menor que la asociada a la irradiación, puede volverse significativa bajo temperaturas elevadas o en zonas de contacto, donde el material experimenta restricciones mecánicas y anisotropía pronunciada.

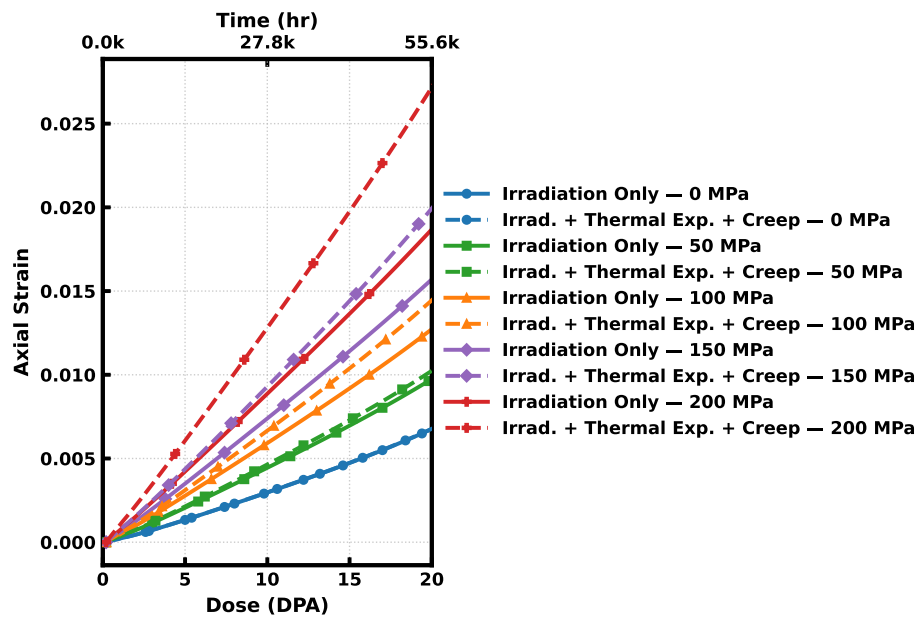


Figura 3.5: Deformación axial en función de la carga axial, considerando solo irradiación (creep y crecimiento) o los efectos combinados de irradiación y el creep térmico (incluida la expansión térmica para la velocidad de calentamiento) $\dot{T} = 0,0018 K/h$ (adaptado de [Aguzzi et al. \(2026\)](#)).

La Figura 3.5 muestra la dependencia del creep térmico respecto de la tensión aplicada al tubo de revestimiento. Las curvas representan la evolución de la deformación axial a $T = 523 K$ para diferentes cargas axiales (0, 50, 100, 150, 200 MPa). Las líneas continuas corresponden a la deformación inducida únicamente por efectos de irradiación (creep y crecimiento), mientras que las líneas discontinuas muestran la deformación axial total cuando también se incluyen el creep térmico y la expansión térmica. Estos resultados fueron obtenidos utilizando el código Modelo Visco-Plástico Autoconsistente autónomo (VPSC-SA). Los resultados demuestran claramente que, para un nivel de tensión dado, la deformación total es consistentemente mayor cuando se consideran los efectos térmicos—indicando la naturaleza sensible a la tensión de la fluencia térmica.

Cabe destacar que el modelo VPSC, en su formulación clásica, describe exclusivamente mecanismos plásticos desviadores y, por lo tanto, no incluye deformación dilatacional. En consecuencia, los mecanismos de creep y crecimiento bajo irradiación son conservativos de volumen. La incorporación de efectos térmicos y de la respuesta elástica requiere un tratamiento adicional que no se aborda en detalle en esta sección.

En el marco de esta tesis, la expansión térmica se introduce como una contribución adicional a la deformación de transformación a nivel cristalográfico, constituyendo una primera aproximación que no captura explícitamente la componente volumétrica. El tratamiento completo de la recuperación elástica y su integración dentro del esquema VPSC–CAFEM se presenta en la Sección 4.6 (véase también Fig. 4.6).

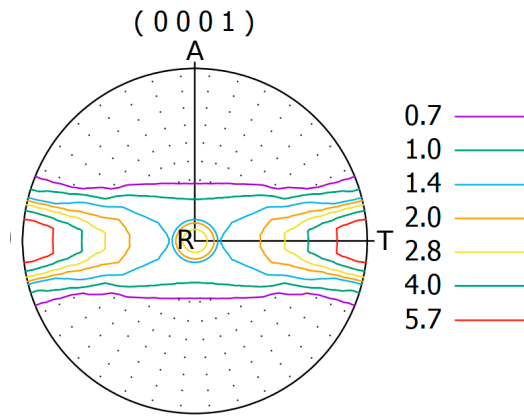


Figura 3.6: Textura del tubo de presión utilizada en la simulación (plano basal). Las direcciones principales del tubo se indican como A (axial), T (tangencial) y R (radial).

Esta observación es consistente con la formulación del creep térmico en la Ec. 3.36, donde la velocidad de deformación es proporcional a la tensión elevada a una potencia n (típicamente $n = 4$ para Zircaloy). Aunque la dependencia con la temperatura aparece a través del prefactor $\dot{\gamma}_0(T)$ en la Ec. 3.37, su variación exponencial es mucho más lenta en comparación con la amplificación polinómica de la tensión. Esto ilustra que, bajo condiciones típicas de un PWR, el creep térmico es significativamente más sensible a la tensión que a las variaciones de temperatura.

El papel de la textura es clave. En la Fig. 3.6 los polos basales (ejes c) se concentran hacia la dirección tangencial T . Dado que los sistemas prismáticos $\{10\bar{1}0\}\langle a \rangle$ poseen vectores de Burgers $\langle a \rangle$ contenidos en el plano basal y, por lo tanto, perpendiculares al eje c , esta configuración orienta dichos sistemas con componentes preferentes en el plano A – R . Por tanto, bajo carga axial, estos sistemas acomodan de manera eficaz la deformación plástica.

3.4 Modelos a Nivel Macroscópico: enfoque policristalino en FEM

La formulación multiescala para simular la deformación plástica de materiales policristalinos es un campo de investigación muy activo, que combina desafíos computacionales y de ciencia de materiales con un alto impacto en ingeniería. Su objetivo es considerar simultáneamente los mecanismos de deformación activos a nivel del cristal simple, la naturaleza policristalina de la microestructura y su evolución durante la deformación, junto con las condiciones de contorno aplicadas a una probeta representativa.

Desde su desarrollo inicial por [Peirce et al. \(1982\)](#), el método de elementos finitos de plasticidad cristalina (CPFEM) se ha empleado extensamente para analizar el comportamiento mecánico de materiales cristalinos. Esta metodología combina la plasticidad del monocristal (CP) como ley constitutiva y el análisis FEM como solucionador de problemas de contorno (para una revisión detallada, véase [Roters et al. \(2010\)](#)). En la mayoría de los trabajos, las ecuaciones constitutivas de plasticidad monocristalina se resuelven directamente dentro del FEM —a menudo con resolución intragranular, es decir, varios puntos de integración y elementos por grano—. El enfoque adoptado aquí pertenece a una subclase de estos modelos, en la que el comportamiento monocristalino (microscópico) se vincula con la respuesta global (macroscópica) mediante una escala intermedia (mesoscópica). A esta escala, la respuesta del material se obtiene a partir de la respuesta homogeneizada de un policristal representativo asociado a cada punto de la malla de FEM.

Este enfoque de homogeneización a mesoescala es válido cuando existe una clara separación de escalas, es decir, cuando las longitudes características de los gradientes de campo a nivel macroscópico son mucho mayores que el tamaño típico de los granos o subgranos de la microestructura.

En ambos extremos del problema multiescala existen distintos modelos y métodos numéricos. En este trabajo, la escala microscópica —representada por monocristales que se deforman por deslizamiento— se modela mediante un enfoque viscoplástico dependiente de la velocidad [Asaro and Needleman \(1985\)](#) y un esquema de endurecimiento basado en la actualización fenomenológica de las tensiones de corte críticas de los distintos sistemas de deslizamiento [Tome et al. \(1984\)](#). Esta formulación reduce el número de parámetros constitutivos a calibrar, aunque el marco es extensible e incluye la posibilidad de incorporar leyes de endurecimiento más detalladas, basadas en densidad de dislocaciones o interacciones entre sistemas de deslizamiento [Beyerlein and Tomé \(2008, 2007\)](#); [Patra and Tomé \(2017\)](#); [Patra et al. \(2017\)](#); [Proust et al. \(2007\)](#).

La escala macroscópica, correspondiente al sólido elastoviscoplástico —de geometría com-

pleja y condiciones de contorno no triviales—, se resuelve mediante el código de elementos finitos CODE_ASTER [Électricité de France \(1989–2017\)](#), en su versión implícita. Esta elección garantiza mayor estabilidad numérica y eficiencia respecto de formulaciones explícitas, y permite una portabilidad directa del modelo en forma de subrutina de material definida por el usuario (UMAT) (Las características principales y funcionamiento de UMAT se ven en la sección 4.2).

En cuanto al nivel mesoscópico, las estrategias disponibles pueden clasificarse en dos tipos. Por un lado, los enfoques de *homogeneización numérica* resuelven los campos micromecánicos dentro de una celda unitaria policristalina para cada punto de integración, promediando posteriormente la respuesta local [Kouznetsova and Geers \(2008\)](#); [Miehe et al. \(1999\)](#); [Werwer and Cornec \(2000\)](#). En el contexto general de materiales heterogéneos —de los que el policristal es un caso particular—, estos enfoques se conocen como modelos FE^2 [Feyel \(2003\)](#). Por otro lado, los métodos de *campo medio*, más eficientes, estiman el comportamiento efectivo del policristal a partir de principios como iso-deformación, iso-tensión o minimización de energía, junto con una descripción estadística de la microestructura como vimos en 3.3.2.

Un aspecto adicional es la forma en que el modelo de mesoescala se acopla con el FEM [Van Houtte et al. \(2006\)](#). En un esquema *embebido*, el modelo de policristal se evalúa en cada iteración de FEM, mientras que en un enfoque *jerárquico*, se precálculan y parametrizan sus respuestas [Van Houtte et al. \(2006, 2009\)](#). El primer método ofrece mayor precisión al seguir la evolución microestructural, mientras que el segundo reduce el costo computacional. Un enfoque intermedio, el *método de muestreo adaptativo* [Barton et al. \(2008\)](#), combina ambos: integra un modelo policristalino y almacena sus respuestas en una base de datos, reutilizándolas para microestructuras similares y evitando así reevaluaciones innecesarias.

En esta tesis se adopta la estrategia de acoplar completamente un modelo de campo medio dentro del análisis FEM. En particular, se utiliza un modelo policristalino basado en la homogeneización autoconsistente (SC) del comportamiento plástico monocristalino. Este enfoque, a diferencia de la aproximación iso-deformación de Taylor, permite que los cristales constituyentes se deformen de manera diferente según su orientación y su interacción con el medio, proporcionando una respuesta constitutiva más realista y dependiente de la textura.

En concreto, se utiliza el modelo viscoplástico autoconsistente (VPSC, sección 3.3.3), formulado originalmente por [Molinari et al. \(1987\)](#) y extendido por [Lebensohn and Tomé \(1993\)](#). Posteriormente, [Lebensohn et al. \(2007\)](#) presentaron mejoras y ampliaciones significativas, consolidando el código VPSC como una herramienta ampliamente utilizada para simular la deformación plástica de agregados policristalinos y analizar ensayos experimentales en materiales metálicos, geológicos y poliméricos.

Existen antecedentes consolidados de integración de modelos policristalinos en FEM. Por ejemplo, [Mathur and Dawson \(1989\)](#) emplearon un enfoque de FEM euleriano rígido-viscoplástico para modelar la evolución de textura durante la laminación, bajo la hipótesis de iso-deformación de Taylor. Del mismo modo, [Kalidindi et al. \(1992\)](#) desarrollaron una implementación elasto-viscoplástica en ABAQUS con integración temporal implícita, seguida de mejoras en la obtención analítica de la matriz Jacobiana [Delannay et al. \(2006\)](#), e incorporaron el maclado a mesoescala [Kalidindi \(1998\)](#).

En cuanto a la implementación de modelos viscoplásticos autoconsistentes en códigos FEM, las aplicaciones previas se limitaron a formulaciones explícitas, especialmente en materiales HCP como el Zr y el Mg, donde la plasticidad monocristalina involucra deslizamiento y maclado [Kaschner et al. \(2001\)](#); [Tomé et al. \(2001\)](#); [Walde and Riedel \(2007a,b\)](#). La superioridad del enfoque VPSC [Lebensohn and Tomé \(1993\)](#); [Tomé et al. \(2001\)](#) respecto del modelo de Taylor radica en su capacidad para capturar la fuerte anisotropía textural, los rápidos cambios inducidos por maclado y la compleja interacción entre sistemas de deslizamiento.

A diferencia de estos acoplamientos previos, en este trabajo el modelo policristalino autoconsistente se integra en un código FEM **implícito**. Además de la robustez y la eficiencia propias de este esquema, una innovación central es que la matriz de rigidez tangente del FEM no lineal se obtiene analíticamente, reduciendo el costo computacional (la validación de la integración se ve en 4.7). Esta matriz se expresa en función de los módulos tangentes viscoplásticos —calculados dentro del esquema autoconsistente—, la rigidez elástica del agregado y el incremento de tiempo. La eficiencia y aplicabilidad de este tipo de acoplamiento han sido demostradas por varios autores [Knezevic et al. \(2011, 2013b,c\)](#); [Patra and Tomé \(2017\)](#); [Prakash et al. \(2015\)](#); [Segurado et al. \(2012\)](#); [Upadhyay et al. \(2018\)](#); [Zecevic et al. \(2016\)](#); [Zecevic and Knezevic \(2018\)](#).

La integración del modelo policristalino en un marco de elementos finitos requiere, sin embargo, una descripción del método numérico que permite resolver las ecuaciones de equilibrio y ensamblar la respuesta constitutiva de cada punto material. En la siguiente sección se presenta la formulación general del **Método de Elementos Finitos (FEM)**, incluyendo su planteo variacional, el tratamiento de las no linealidades constitutivas y geométricas, y los esquemas de resolución empleados en este trabajo.

Cabe destacar que, en el marco de esta tesis, el problema macroscópico resuelto mediante el método de elementos finitos se formula exclusivamente en términos mecánicos. Los efectos térmicos y de irradiación no se modelan mediante la resolución explícita de ecuaciones de campo adicionales (como la ecuación de calor o ecuaciones de transporte de defectos), sino que

se incorporan a través de las leyes constitutivas locales, afectando la respuesta tensional y la evolución de las variables internas del material.

Las variables térmicas y de irradiación se consideran como campos prescritos, impuestos como datos de entrada del modelo, y no generan condiciones de borde adicionales a nivel macroscópico más allá de las asociadas al problema mecánico.

3.4.1 Método de Elementos Finitos (FEM)

Introducción

El *método de elementos finitos* (FEM, por sus siglas en inglés) constituye una de las herramientas numéricas más potentes y versátiles para resolver ecuaciones diferenciales parciales en problemas de ingeniería y física aplicada. Su desarrollo y formalización moderna pueden consultarse en textos clásicos como [Johnson \(2009\)](#). La idea central del método es reemplazar un problema continuo —con infinitos grados de libertad— por un sistema discreto con un número finito de incógnitas que puede resolverse numéricamente.

En términos simples, el dominio físico (una pieza, un tubo, una estructura) se divide en pequeñas *celdas* o *elementos finitos* conectados entre sí por *nodos*. Dentro de cada elemento se aproximan las variables desconocidas (por ejemplo los desplazamientos) mediante funciones polinómicas simples, llamadas *funciones de forma*.

El método de elementos finitos se apoya en un principio matemático: reformular la EDP original en un problema *variacional* o de *trabajos virtuales*. En esta forma, en vez de exigir que la ecuación se cumpla punto a punto, se requiere que el equilibrio se satisfaga en promedio frente a un conjunto de funciones de prueba. Este paso, denominado *integración en forma débil*, es clave para poder discretizar el problema y garantizar la estabilidad numérica de la solución.

Integración y puntos de Gauss. Las integrales que aparecen en la formulación variacional no pueden evaluarse de manera exacta para cada elemento. En su lugar se utilizan reglas de *cuadratura*, que aproximan la integral como una suma de valores evaluados en ciertos puntos especiales. En FEM estos puntos reciben el nombre de *puntos de Gauss*. Allí se calculan las tensiones y deformaciones elementales; luego, si se desea visualizar campos continuos en todo el dominio, esos valores se interpolan o promedian en los nodos.

Ventajas frente a diferencias finitas. A diferencia del método de diferencias finitas, que sustituye derivadas por cocientes de diferencias en una malla regular, el FEM permite manejar

geometrías complejas, propiedades de material variables y condiciones de contorno generales con gran flexibilidad, además de contar con una base teórica sólida para estimar el error.

Ecuaciones de equilibrio en un sólido continuo

El punto de partida es la segunda ley de Newton aplicada a un medio continuo deformable:

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} \quad \text{en } \Omega, \quad (3.52)$$

donde ρ es la densidad, $\mathbf{u}$ el campo de desplazamientos, $\boldsymbol{\sigma}$ el tensor de tensiones de Cauchy y $\mathbf{f}$ el vector de fuerzas volumétricas. En esta tesis se trabaja en régimen *cuasi–estático*, de modo que las aceleraciones se despreciarán y (3.52) se reduce a

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f} \quad \text{en } \Omega. \quad (3.53)$$

El problema se completa con las condiciones de contorno:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_\Gamma \text{ en } \Gamma_d, \quad \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} \text{ en } \Gamma_n, \quad (3.54)$$

donde Γ_d es la porción del borde con desplazamientos prescritos (Dirichlet), Γ_n la porción con esfuerzos superficiales (Neumann) y $\mathbf{n}$ la normal exterior.

Este planteo macroscópico se apoya en los conceptos introducidos en las secciones anteriores: las **relaciones cinemáticas** aquí utilizadas —que vinculan desplazamientos, deformaciones y tasas de deformación— representan la extensión continua de la cinemática cristalina descrita en el nivel microscópico (Sección 3.2.2), donde la deformación surge de la activación de sistemas de deslizamiento dependientes del régimen tensional, temperatura y dosis de irradiación. Del mismo modo, las **leyes constitutivas** que relacionan tensiones y deformaciones provienen de la homogeneización policristalina que se desarrolla en la Sección 3.3.3, que define la respuesta efectiva del agregado a partir de la física local del cristal. Así, la ecuación de equilibrio en el continuo proporciona el marco global en el cual se integra la respuesta multiescala del material, conectando los mecanismos del cristal simple con el comportamiento estructural simulado por FEM.

Forma variacional: principio de trabajos virtuales

Para discretizar el problema anterior mediante FEM se emplea la *forma débil* o principio de trabajos virtuales (véase, por ejemplo, (Zienkiewicz and Taylor, 1997)). Sea $X = [H^1(\Omega)]^d$ y $X_{bc} = \{\mathbf{v} \in X : \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_d\}$ el espacio de funciones de prueba que respetan las condiciones

cinemáticas. Definimos

$$\nabla_s(\cdot) = \frac{1}{2}[\nabla(\cdot) + \nabla(\cdot)^T], \quad \varepsilon(v) = \nabla_s v,$$

donde $\nabla_s(\cdot)$ es la parte simétrica del gradiente y $\varepsilon(v)$ la deformación virtual asociada. Multiplicando la ecuación de equilibrio por $v \in X_{bc}$, integrando por partes y usando las condiciones de Neumann se obtiene:

$$\mathcal{R}_\sigma(\sigma; v) := \int_{\Omega} \sigma : \varepsilon(v) dx - \int_{\Omega} f \cdot v dx - \int_{\Gamma_n} t \cdot v ds = 0 \quad \forall v \in X_{bc}. \quad (3.55)$$

La cantidad $\mathcal{R}_\sigma$ representa el residuo asociado a la ecuación de equilibrio en su forma variacional, el cual debe anularse para toda función de prueba admisible.

Esta es la formulación débil del problema de equilibrio, base para su discretización por elementos finitos.

Cierre constitutivo y variables internas

El modelo debe cerrarse con una ley constitutiva

$$\sigma = F^\sigma(\nabla_s u, \beta), \quad \dot{\beta} = F^\beta(\sigma, \beta), \quad (3.56)$$

donde β representa variables internas que capturan la historia del material (endurecimiento, daño, etc.).

Si el problema depende del tiempo se introduce, por ejemplo, un esquema de Euler hacia atrás:

$$\beta^{(k)} = \beta^{(k-1)} + \Delta t F^\beta(\sigma^{(k)}, \beta^{(k)}), \quad \sigma^{(k)} = F^\sigma(\nabla_s u^{(k)}, \beta^{(k)}). \quad (3.57)$$

El equilibrio en forma débil (3.55) debe cumplirse en cada paso k , conduciendo a un problema no lineal:

$$\mathcal{R}(u^{(k)}, \beta^{(k)}; v) = 0. \quad (3.58)$$

Discretización por elementos finitos

El dominio se divide en una malla de *elementos finitos*. Dentro de cada elemento se aproximan desplazamientos y funciones de prueba con funciones de forma $N(x)$. Las integrales de (3.55) se evalúan con cuadratura de Gauss, introduciendo los *puntos de Gauss* donde se calculan tensiones y deformaciones elementales.

El problema continuo se transforma en un sistema discreto no lineal

$$\mathbf{R}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, \quad (3.59)$$

donde $\mathbf{U}$ es el vector de grados de libertad nodales y *el residuo global* se define como

$$\mathbf{R}(\mathbf{U}) = \mathbf{F}_{\text{ext}} - \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U}),$$

con $\mathbf{F}_{\text{ext}}$ el vector de fuerzas externas conocidas y $\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U})$ el vector de fuerzas internas ensambladas.

Se resuelve mediante un procedimiento de Newton–Raphson, cuyo paso corrector requiere la matriz tangente consistente

$$\mathbf{K}_{\text{tan}} = \frac{\partial \mathbf{F}_{\text{int}}}{\partial \mathbf{U}} \quad (\text{equivalente a } -\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{U}). \quad (3.60)$$

El equilibrio en cada paso incremental k conduce a un problema no lineal de la forma

$$\mathbf{R}^{(k)}(\mathbf{U}^{(k)}) = \mathbf{0}, \quad (3.61)$$

donde el residuo global se define como

$$\mathbf{R}^{(k)}(\mathbf{U}^{(k)}) = \mathbf{F}_{\text{ext}}^{(k)} - \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}).$$

con $\mathbf{F}$ vector de fuerzas externas. Este sistema se resuelve mediante un esquema incremental–iterativo, típicamente del tipo Newton–Raphson, utilizando el módulo tangente consistente.

Solvers lineales

En problemas FEM, tras el ensamblaje global se obtiene el sistema lineal $K\mathbf{U} = \mathbf{F}$, caracterizado por matrices grandes, dispersas y (en elasticidad) simétricas definidas positivas. Para enmarcar los conceptos básicos —condicionamiento, familias de métodos directos versus iterativos, noción de preconditionamiento y criterios de parada— seguimos la presentación clásica de [Chapra et al. \(2011\)](#). Sobre esta base, la resolución eficiente del sistema domina el costo computacional total, de modo que la elección del *solver* y del preconditionador es crítica para el desempeño y la robustez numérica.

Los solvers lineales pueden clasificarse en dos grandes grupos: directos e iterativos.

Solvers directos

Los métodos directos, como la eliminación de Gauss o la factorización LU, buscan una solución exacta (dentro del error de redondeo) en un número finito de operaciones. Aunque son robustos y precisos, su costo computacional y de memoria puede ser prohibitivo para sistemas de gran tamaño, debido a la pérdida de esparsidad y al crecimiento del número de operaciones con el tamaño del sistema.

Solvers iterativos

Los métodos iterativos, por otro lado, aproximan la solución mediante un proceso sucesivo que converge hacia la solución verdadera. Estos métodos resultan particularmente adecuados para matrices grandes y dispersas, como las que aparecen frecuentemente en problemas de elementos finitos.

Entre los métodos iterativos más comunes se encuentran:

- **Método de Jacobi:** se basa en la descomposición de la matriz $\mathbf{K}$ en su parte diagonal y en iteraciones sucesivas. Su convergencia es lenta y solo está garantizada para matrices diagonalmente dominantes.
- **Método de Gauss-Seidel:** mejora al método de Jacobi utilizando los valores actualizados dentro de cada iteración. Tiene mejores propiedades de convergencia, pero aún así es limitado en problemas grandes o mal condicionados.
- **Método del Gradiente Conjugado (CG):** diseñado para matrices simétricas y definidas positivas, es ampliamente utilizado en simulaciones mecánicas por su buena eficiencia y convergencia, especialmente si se utiliza un preconditionador adecuado.
- **Métodos GMRES y BiCGStab:** extensiones para matrices no simétricas o indefinidas. GMRES (Generalized Minimal Residual) es robusto pero costoso en almacenamiento, mientras que BiCGStab (Biconjugate Gradient Stabilized) intenta balancear eficiencia y estabilidad numérica.

Precondicionadores

El desempeño de los métodos iterativos puede mejorarse significativamente mediante el uso de preconditionadores, que transforman el sistema original en uno equivalente pero con mejores propiedades espectrales. Entre los más comunes se encuentran el preconditionador diagonal (Jacobi), ILU (Incomplete LU), y los basados en multigrid.

Criterios de convergencia

La iteración se detiene cuando la norma del residuo relativo cae por debajo de un umbral preestablecido, típicamente:

$$\frac{\|\mathbf{K}\mathbf{U}^{(k)} - \mathbf{F}\|}{\|\mathbf{F}\|} < \epsilon, \quad (3.62)$$

donde ϵ es una tolerancia que se elige según el problema y el nivel de precisión deseado.

Según la documentación oficial de CODE_ASTER (Boiteau, 2015), el comando SOLVEUR permite seleccionar distintos algoritmos lineales, tanto directos (*MULT_FRONT*, *LDLT*, *MUMPS*) como iterativos (*GCPC* y los de la librería *PETSc*). *MULT_FRONT*, *MUMPS* y *PETSc* admiten ejecución paralela; en particular, los solvers iterativos de *PETSc* requieren ejecutar CODE_ASTER en modo MPI. En la práctica, el directo *MUMPS* suele ser la opción recomendada para modelos grandes o numéricamente exigentes, ya que incorpora pivoteo en su factorización multifrontal y ofrece buena robustez ante mal condicionamiento. Por su parte, *PETSc* puede ser una alternativa cuando las limitaciones de memoria lo justifican, aunque su configuración es más delicada y no compatible con la ejecución secuencial.

En este trabajo, y ejecutando CODE_ASTER en MPI, todos los sistemas lineales se resolvieron con el solver directo multifrontal MUMPS. La elección de un método directo se debió a su robustez frente a matrices mal condicionadas y a la necesidad de pivoteo fiable, aun a costa de un mayor consumo de memoria por pérdida de esparsidad durante la factorización. No se utilizaron solvers iterativos ni preconditionadores.

Resolución de sistemas no lineales

Como referencia general para el análisis no lineal con elementos finitos —incluyendo las fuentes de no linealidad, la linealización consistente, los esquemas de Newton y las estrategias de control de carga o desplazamiento (como *line-search* y trayectorias de longitud de arco)— se sigue la exposición clásica de De Borst et al. (2012). A nivel local, Albanesi (Albanesi, 2011) desarrolló formulaciones incrementales y procedimientos de linealización consistente aplicados al análisis y diseño inverso de mecanismos y estructuras, cuyos principios son análogos a los adoptados en este trabajo.

En muchos problemas de ingeniería, la respuesta del sistema no puede describirse mediante relaciones lineales entre las variables de estado. La formulación del equilibrio conduce entonces a un sistema no lineal de la forma

$$\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U}) = \mathbf{F}_{\text{ext}}, \quad (3.63)$$

donde $\mathbf{F}_{\text{int}}$ y $\mathbf{F}_{\text{ext}}$ representan los vectores de fuerzas internas y externas, respectivamente, y $\mathbf{U}$ es el vector de incógnitas —el campo nodal de desplazamientos—. La dependencia no lineal de $\mathbf{F}_{\text{int}}$ con respecto a $\mathbf{U}$ refleja que, al modificarse la configuración del cuerpo o el estado constitutivo del material, cambian también las direcciones y magnitudes de las fuerzas internas. En consecuencia, la relación entre carga y desplazamiento no es proporcional, y el sistema debe

resolverse iterativamente.

Fuentes de no linealidad

Las fuentes de no linealidad en el análisis con elementos finitos pueden clasificarse según su origen:

- **Geométrica:** aparece cuando las deformaciones o rotaciones son finitas y la relación cinemática entre desplazamientos y deformaciones deja de ser lineal.
- **Material:** proviene de una ley constitutiva no lineal, como en plasticidad, viscoplasticidad o creep dependiente del tiempo.
- **De contacto:** surge por la activación o desactivación de restricciones entre cuerpos, produciendo cambios abruptos en las condiciones de contorno.

Procedimiento de linealización

Para resolver el sistema no lineal (3.63), se aplica un procedimiento iterativo basado en la *linealización consistente*. El método de Newton–Raphson constituye el enfoque estándar en FEM: se parte de una estimación inicial $\mathbf{U}^{(k)}$ y se busca una corrección incremental $\Delta\mathbf{U}^{(k)}$ que satisfaga

$$\mathbf{K}_{\text{tan}}^{(k)} \Delta\mathbf{U}^{(k)} = \mathbf{R}(\mathbf{U}^{(k)}) = \mathbf{F}_{\text{ext}} - \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U}^{(k)}), \quad \mathbf{K}_{\text{tan}}^{(k)} = \left. \frac{\partial \mathbf{F}_{\text{int}}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{\mathbf{U}^{(k)}}. \quad (3.64)$$

La matriz $\mathbf{K}_{\text{tan}}$ se denomina *matriz tangente consistente*, y representa la derivada de las fuerzas internas respecto de los desplazamientos. Esta linealización permite resolver el problema de forma incremental, aproximando localmente el comportamiento no lineal mediante un sistema lineal en cada iteración. El proceso se repite hasta satisfacer un criterio de convergencia, ya sea sobre el residuo o sobre el incremento de desplazamientos.

Variantes del método de Newton

Existen distintas variantes del método de Newton que buscan equilibrar la precisión y el costo computacional:

- **Newton completo (full Newton):** ensambla y factoriza $\mathbf{K}_{\text{tan}}$ en cada iteración. Ofrece convergencia cuadrática, aunque con alto costo computacional.
- **Newton modificado:** mantiene fija la matriz tangente durante varias iteraciones, reduciendo el costo de ensamble y factorización, a costa de una menor tasa de convergencia.

- **Quasi-Newton:** actualiza la matriz tangente de manera aproximada mediante reglas de actualización (por ejemplo, BFGS), evitando el cálculo explícito de la derivada exacta.

En síntesis, el método de elementos finitos transforma las ecuaciones de equilibrio en un sistema algebraico de la forma (3.63). Mediante la linealización consistente y un esquema iterativo de Newton, se obtiene el campo de desplazamientos $\mathbf{U}$ que satisface las condiciones de equilibrio global y local, permitiendo recuperar los campos de deformación y tensión sobre geometrías y condiciones muy generales. Sobre esta base numérica se acopla el modelo multiescala VPSC desarrollado en los capítulos siguientes.

Implementación en esta tesis

En el marco de este trabajo, se resolvieron problemas no lineales asociados principalmente a comportamientos materiales dependientes del tiempo y al acoplamiento con modelos constitutivos complejos. Se utilizó el método de Newton-Raphson con actualización completa de la matriz tangente, dado que se dispone de su forma analítica mediante la implementación de subrutinas de usuario. El criterio de convergencia se definió en términos de residuo relativo y del incremento, con tolerancias típicas del orden de 10^{-6} .

Contacto no lineal

El modelado del contacto entre sólidos es un aspecto central en la simulación numérica de ensambles estructurales. La formulación implementada en CODE_ASTER sigue los lineamientos descritos en el manual técnico [U2.04.04] *Tips on Contact Simulation with Code_Aster* (Code_Aster Team, 2017), donde se detallan los principios físicos, las formulaciones numéricas y las recomendaciones prácticas para el tratamiento del contacto unilateral. En este contexto, el contacto representa el mecanismo mediante el cual se transfieren fuerzas entre cuerpos que interactúan mecánicamente. Su modelado busca garantizar dos condiciones físicas fundamentales: (i) que las superficies no se interpenetren y (ii) que las fuerzas normales de reacción aparezcan únicamente cuando existe contacto efectivo. Aunque el concepto físico es sencillo, su implementación numérica involucra restricciones de desigualdad y, en muchos casos, grandes deslizamientos y no linealidades geométricas.

Conceptos básicos. En un problema de contacto se distinguen la **superficie maestra** y la **superficie esclava**, que son las dos fronteras potencialmente interactuantes. Cada punto de la superficie esclava se proyecta sobre la maestra para evaluar si existe contacto. Definimos la

brecha normal g_n como la **distancia con signo** entre ambos puntos, positiva si hay separación y nula en contacto:

$$g_n(\mathbf{u}) := (\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_m) \cdot \mathbf{n},$$

donde $\mathbf{u}_s$ y $\mathbf{u}_m$ son los desplazamientos de los puntos esclavo y maestro, respectivamente, y $\mathbf{n}$ es la normal unitaria a la superficie maestra (apuntando hacia la esclava). Así, $g_n > 0$ indica *separación*, $g_n = 0$ *contacto activo* y $g_n < 0$ *interpenetración*, esta última no permitida por la restricción.

El multiplicador de Lagrange λ_n (Pa) representa la *tracción normal de contacto* asociada a la restricción de impenetrabilidad. Por convención, se toma como compresivo y no negativo ($\lambda_n \geq 0$). Las condiciones de Kuhn–Tucker expresan el carácter unilateral del contacto:

$$g_n \geq 0, \quad \lambda_n \geq 0, \quad g_n \lambda_n = 0.$$

Estas condiciones implican que la tracción de contacto sólo existe cuando las superficies están en contacto efectivo.

No linealidades involucradas. El contacto introduce dos tipos de no linealidades principales:

- **No linealidad de contacto:** proviene de la naturaleza no diferenciable de las condiciones de Kuhn–Tucker, que requieren métodos iterativos especializados o formulaciones suavizadas.
- **No linealidad geométrica:** en presencia de grandes deslizamientos o rotaciones relativas, la geometría del contacto debe actualizarse en cada iteración del equilibrio global.

Formulaciones numéricas. Las condiciones de contacto pueden imponerse de distintas formas. En formulaciones *discretas* (nodo–superficie), las restricciones se aplican punto a punto. En formulaciones *continuas*, denominadas **mortar**, las condiciones se imponen de manera integrada a lo largo de toda la superficie de contacto, lo que mejora la conservación de energía y la estabilidad numérica del algoritmo.

Alcance en este trabajo. En el presente trabajo se considera únicamente contacto **sin fricción**, es decir, se omite la componente tangencial de las tracciones ($\lambda_t = 0$). El objetivo es concentrar el análisis en los efectos geométricos y constitutivos del acoplamiento entre la vaina y la grilla, evitando la complejidad adicional que introduce la fricción de tipo Coulomb.

Etapas del análisis. El tratamiento numérico del contacto se realiza en dos fases:

1. **Emparejamiento geométrico:** identificación, para el estado actual de deformación, de los nodos o segmentos de la superficie esclava que interactúan con la superficie maestra. En grandes deslizamientos, esta búsqueda se actualiza iterativamente.
2. **Imposición de las condiciones de contacto:** resolución del problema de equilibrio con restricciones, ya sea mediante una formulación discreta o mortar, asegurando el cumplimiento de las condiciones de impenetrabilidad.

Consideraciones prácticas. El correcto funcionamiento de la simulación depende de: (i) una definición precisa de las superficies en contacto para evitar pares espurios; (ii) el uso de una linealización consistente de los términos de contacto, que mejora la convergencia del método de Newton; y (iii) un control adecuado de la tolerancia en la detección y activación de los pares de contacto.

Formulación discreta vs. continua. En CODE_ASTER hay dos maneras principales de imponer las condiciones de contacto y fricción; ambas buscan evitar la *interpenetración* y calcular las fuerzas de contacto, pero lo hacen con enfoques numéricos distintos:

- **Formulación discreta** (FORMULATION='DISCRETE'): La interfaz de contacto se representa mediante un *método nodo–superficie* (también llamado *nodo–segmento*): cada nodo de la “superficie esclava” se proyecta sobre un elemento de la “superficie maestra”, que está formada por sus caras de elementos finitos (los “segmentos” en 2D o las “caras” en 3D). La condición de no interpenetración se expresa como una *restricción de desigualdad* $g_n \geq 0$ (brecha normal no negativa) con una reacción $\lambda_n \geq 0$, es decir, un problema de optimización donde hay que encontrar desplazamientos y fuerzas de contacto que satisfagan esas desigualdades. En cada paso de Newton se resuelve primero el sistema elástico “sin contacto” y, en una sub-iteración, se ajusta la solución corrigiendo los desplazamientos y las fuerzas nodales para que respeten las restricciones de contacto. Esa fase de corrección se llama “sub-iteraciones”.
- **Formulación continua** (FORMULATION='CONTINUE'): En lugar de imponer las condiciones solo en nodos, se construyen *elementos de contacto* que cubren toda la superficie potencial de interacción. Se plantea una formulación variacional mixta (Lagrangiano aumentado o método *mortar*) en la que las reacciones de contacto aparecen como grados de libertad

adicionales (multiplicadores de Lagrange). De esta manera las restricciones de no interpenetración quedan incorporadas directamente en el sistema global de ecuaciones y no hacen falta sub-iteraciones específicas.

En pocas palabras: la *discreta* aplica las desigualdades nodo a nodo y luego corrige la solución para que ningún nodo penetre en la superficie maestra, mientras que la *continua* incorpora esas restricciones a nivel de superficie completa desde el principio, lo que suele ser más robusto cuando hay grandes deslizamientos, fricción o mallas incompatibles.

Capítulo 4

Implementación de la metodología VPSC–CAFEM en un marco de Elementos Finitos

4.1 Introducción

En los capítulos anteriores se estableció el marco multiescala que vincula la microestructura de las aleaciones de circonio con su respuesta mecánica. Tras formular las leyes constitutivas a nivel de cristal y de policristal, es necesario ahora integrarlas en un esquema de elementos finitos que permita simular, a escala de componente, el comportamiento bajo irradiación y térmico.

En este capítulo se presenta la implementación de ese acoplamiento multiescala en CODE_ASTER [EDF R&D \(2019\)](#), una plataforma *open-source* para análisis estructural y multifísico que favorece la reproducibilidad y la extensión de capacidades. Se describe primero el algoritmo general de conexión entre el *solver* de elementos finitos y la ley de material, junto con las particularidades de la interfaz UMAT de CODE_ASTER y sus diferencias respecto de ABAQUS. Como paso preliminar se implementa un caso de referencia fenomenológico bajo irradiación, que ilustra el uso de una ley de material inelástica y evidencia las limitaciones de un enfoque puramente macroscópico.

Sobre esa base se introduce la definición de sistemas de referencia locales, necesaria para mapear la textura y la anisotropía cristalográfica a los ejes del laboratorio, y se presenta el cálculo analítico de la deformación elástica y de la matriz tangente consistente, destacando su función en la convergencia del esquema de Newton–Raphson global. A continuación se detalla el flujo de cálculo interno de la interfaz VPSC–CAFEM, el intercambio de tensiones, deformacio-

nes y la matriz tangente consistente, así como la gestión de las variables internas asociadas a los sistemas de deslizamiento. Finalmente, se verifica la consistencia del acoplamiento mediante ensayos de tracción uniaxial y se analiza su rendimiento computacional. Estos desarrollos permiten construir una plataforma de ensayos virtuales orientada a la calibración y aplicación del modelo en geometrías realistas, facilitando la transferencia del marco VPSC–CAFEM a casos de interés ingenieril.

Sobre la base establecida en los Capítulos 1–3, este capítulo describe la implementación del acoplamiento VPSC–CAFEM en CODE_ASTER: (i) algoritmo general de conexión constitutiva y UMAT (§4.3, §B); (ii) caso de referencia fenomenológico (§4.3.1); (iii) sistemas de referencia locales y flujo de cálculo interno (§4.4, §4.5); (iv) cálculo de la matriz tangente consistente y validación en tracción (§4.6, §4.7); y (v) análisis de convergencia, contacto y ensayos virtuales (§4.8–§4.11).

4.2 Subrutina UMAT: interfaz con Code_Aster

En los análisis numéricos basados en FEM, la caracterización precisa del comportamiento mecánico de los materiales es crucial para garantizar la fidelidad de las simulaciones. Los programas comerciales de elementos finitos ofrecen una amplia variedad de modelos constitutivos (elasticidad lineal, plasticidad J_2 , viscoelasticidad, etc.). Sin embargo, en aplicaciones avanzadas donde los materiales exhiben respuestas altamente no lineales o fenómenos específicos —por ejemplo, *creep* térmico e inducido por irradiación, crecimiento por irradiación (deformación sin tensión aplicada), viscoplasticidad dependiente de la tasa, plasticidad cristalina con deslizamiento y maclado, endurecimiento cinemático/isotrópico no lineal, anisotropía elástica marcada, transformación de fase dependiente de temperatura/fluencia o endurecimiento por defectos de irradiación— las opciones predeterminadas suelen ser insuficientes. En este contexto, las User MATerial subroutine (UMAT) Dassault Systèmes (2009); EDF R&D (2019) resultan esenciales.

La UMAT es una subrutina definida por el usuario, debe estar escrita en el lenguaje de programación FORTRAN. Esto permite implementar modelos constitutivos personalizados, ampliando la funcionalidad del software de simulación. Estas subrutinas se integran directamente con el núcleo del programa de elementos finitos, calculando las tensiones y la matriz constitutiva tangente del material en función de las deformaciones y otras variables de estado durante cada paso de la simulación. La matriz constitutiva tangente, también conocida como matriz de rigidez constitutiva, describe la relación incremental entre las variaciones de las tensiones y las deformaciones, y es fundamental para garantizar la estabilidad y la convergencia del análisis numérico.

El desarrollo de una UMAT es especialmente útil en investigaciones científicas y aplicaciones industriales como la modelización del daño en materiales como el hielo [Xiao \(1991\)](#), la simulación numérica de excavaciones en minería profunda [Snyman et al. \(1991\)](#), el análisis combinado micromecánico y estructural de compuestos laminados [Haj-Ali et al. \(1993\)](#), el modelado del proceso de deformación de polvos metálicos en prensado isostático en frío y caliente [Govindarajan and Aravas \(1994b\)](#) [Govindarajan and Aravas \(1994a\)](#), el estudio del cambio de forma macroscópica y evolución de la textura cristalográfica en metales FCC pretexturados [Anand and Kalidindi \(1994\)](#), además de los ya mencionados en la sección 3.4 con enfoque de materiales policristalinos. La flexibilidad que ofrece la subrutina UMAT permite integrar formulaciones complejas que incluyen acoplamientos térmicos, químicos o multifísicos, proporcionando un enfoque robusto y versátil para el estudio de materiales innovadores.

Cabe destacar que, en el transcurso de esta tesis, el desarrollo e implementación de diferentes subrutinas UMAT derivó en publicaciones científicas presentadas en congresos internacionales. En una primera instancia, se incorporó y desarrolló una UMAT de carácter fenomenológico para describir el comportamiento bajo irradiación —*Creep y swelling*— en el código Code_Aster, trabajo que se publicó bajo el título “*Implementación Numérica de una Ley de Comportamiento Bajo Irradiación en el Marco de una Ley de Usuario (UMAT) en el Código Code-ASTER*” [Aguzzi et al. \(2022\)](#). Posteriormente, se avanzó hacia la construcción de una UMAT de mayor complejidad, basada en el modelo visco-plástico autoconsistente, que permite considerar mecanismos de deformación a nivel del cristal simple y superar las limitaciones de los enfoques fenomenológicos. Este trabajo se presentó en el artículo titulado “*Integración del Modelo Visco-Plástico Autoconsistente con Leyes bajo Irradiación de Creep y Crecimiento en el Código de Elementos Finitos Code_Aster*” [Aguzzi and Signorelli \(2024\)](#). Ambas contribuciones reflejan la evolución de los desarrollos realizados en el marco de esta investigación, y constituyen un aporte original al campo de la modelización numérica de materiales sometidos a irradiación.

4.3 Algoritmo general de conexión de leyes constitutivas con Code_Aster

Interrelación jerárquica de los cálculos en un análisis de elementos finitos

Para comprender como es la comunicación entre la interfaz VPSC-CAFEM (sección 4.6) y el código de elementos finitos Code Aster es necesario hacer un repaso general de la interrelación jerárquica de los cálculos en un análisis de elementos finitos.

En el análisis de elementos finitos no lineal, los cálculos se organizan jerárquicamente desde el nivel más detallado, el punto de Gauss (PG), hacia niveles superiores como el elemento y el

sistema global. Este enfoque permite descomponer un problema complejo en pasos manejables y conectar la respuesta material local con el equilibrio global. A continuación, se describe cómo cada nivel contribuye al siguiente y cómo se retroalimenta el sistema. Denotaremos con i al incremento temporal y con n a la iteración de Newton Raphson global.

1. A nivel del PG: El punto de Gauss es la base de los cálculos locales, donde se evalúan las propiedades constitutivas del material y se integran las ecuaciones constitutivas. En cada PG se calculan dos aspectos fundamentales:

- Tensiones y variables internas: Se actualizan las tensiones (σ) y las variables internas del material (β) basándose en el estado previo:

$$(\sigma_{i-1}, \beta_{i-1}) \longrightarrow (\sigma_i^n, \beta_i^n) \quad (4.1)$$

Estas variables representan el estado actual del material.

- Derivada tangente: Se calcula la respuesta incremental del material ante cambios en la deformación (ϵ):

$$(\sigma_{i-1}, \beta_{i-1}) \longrightarrow \mathbb{C}^{tg} = \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon} \quad (4.2)$$

Este término es esencial para construir la matriz tangente elemental que sea consistente con el algoritmo de resolución.

El nivel del PG provee al nivel del elemento:

- Tensiones actuales (σ_i^n), necesarias para calcular las fuerzas internas nodales.
 - Derivada tangente $(\frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon})_i^n$, utilizada en la construcción de la matriz tangente del elemento.
2. A nivel del elemento: En este nivel, las contribuciones de los PG se integran sobre el volumen del elemento (Ω_E) para obtener:

- Fuerzas nodales internas:

$${}^E(\mathbf{L}^{(int)})_i^n = \int_{\Omega_E} \mathbf{Q}^T \sigma_i^n d\Omega \quad (4.3)$$

donde $\mathbf{Q}^T$ es matriz de forma transpuesta. Las tensiones calculadas en los PG se integran para determinar las fuerzas internas que el elemento resiste frente a las fuerzas externas.

- Matriz tangente elemental:

$${}^E\mathbf{K}_i^n = \int_{\Omega_E} \mathbf{Q}^T \left(\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right)_i^n \mathbf{Q} d\Omega \quad (4.4)$$

Esta matriz linealiza la relación entre los incrementos de desplazamiento y las fuerzas internas del elemento, facilitando la convergencia del método de Newton-Raphson.

El nivel del elemento provee al nivel global:

- Fuerzas internas nodales (${}^E\mathbf{L}^{(\text{int})}$), que contribuyen al equilibrio global.
 - Matriz tangente elemental (${}^E\mathbf{K}$), que se suma para formar la matriz tangente global.
3. A nivel global: Se ensamblan las contribuciones de todos los elementos para formar el sistema de ecuaciones global:

Fuerzas nodales internas globales:

$$\mathbf{L}^{\text{int}}(\Delta \mathbf{u}_i^n, \boldsymbol{\sigma}_{i-1}, \boldsymbol{\beta}_{i-1}) = \sum_E {}^E\mathbf{L}_i^{\text{int}n} \quad (4.5)$$

Este vector representa la suma de las fuerzas internas de todos los elementos.

La Matriz tangente global se constituye:

$$\mathbf{K}_i^n = \sum_E {}^E\mathbf{K}_i^n \quad (4.6)$$

La matriz tangente global es la suma de las matrices tangentes de cada elemento.

Estas contribuciones permiten resolver el sistema de ecuaciones no lineal:

$$\mathbf{K}_i^n \delta \mathbf{u}_i^n = \mathbf{L}^{(\text{meca})} - \mathbf{L}^{(\text{int})} \quad (4.7)$$

donde $\delta \mathbf{u}_i^n$ es el incremento de desplazamiento nodal calculado para corregir el desequilibrio entre las fuerzas debido a cargas mecánicas ($\mathbf{L}^{(\text{meca})}$) y las fuerzas internas ($\mathbf{L}^{(\text{int})}$).

El nivel global retroalimenta a los niveles inferiores distribuyendo los desplazamientos nodales calculados ($\Delta \mathbf{u}$) hacia los elementos y, a través de estos, hacia los PG, iniciando una nueva iteración.

Resumen del flujo jerárquico

El cálculo comienza en los PG, donde se determina la respuesta constitutiva del material. Los elementos integran las contribuciones de los PG para formar las fuerzas nodales internas y la matriz tangente elemental. A nivel global, se ensamblan las contribuciones de todos los elementos para resolver el equilibrio del sistema. Este enfoque asegura que los cálculos locales (a nivel del PG) se traduzcan en resultados consistentes a nivel global, mientras que las decisiones a nivel global influyen directamente en los cálculos locales, cerrando el ciclo iterativo del análisis no lineal. En la Figura 4.1 se muestra como los cálculos locales se traducen en resultados consistentes a nivel global.

Cabe aclarar que los detalles prácticos a considerar para incorporar una subrutina UMAT en CODE_ASTER se presentan en el Apéndice B. Si bien CODE_ASTER adopta la filosofía general de ABAQUS para este tipo de interfaz, la implementación y, en particular, la lista de argumentos y convenciones de la rutina no son exactamente equivalentes.

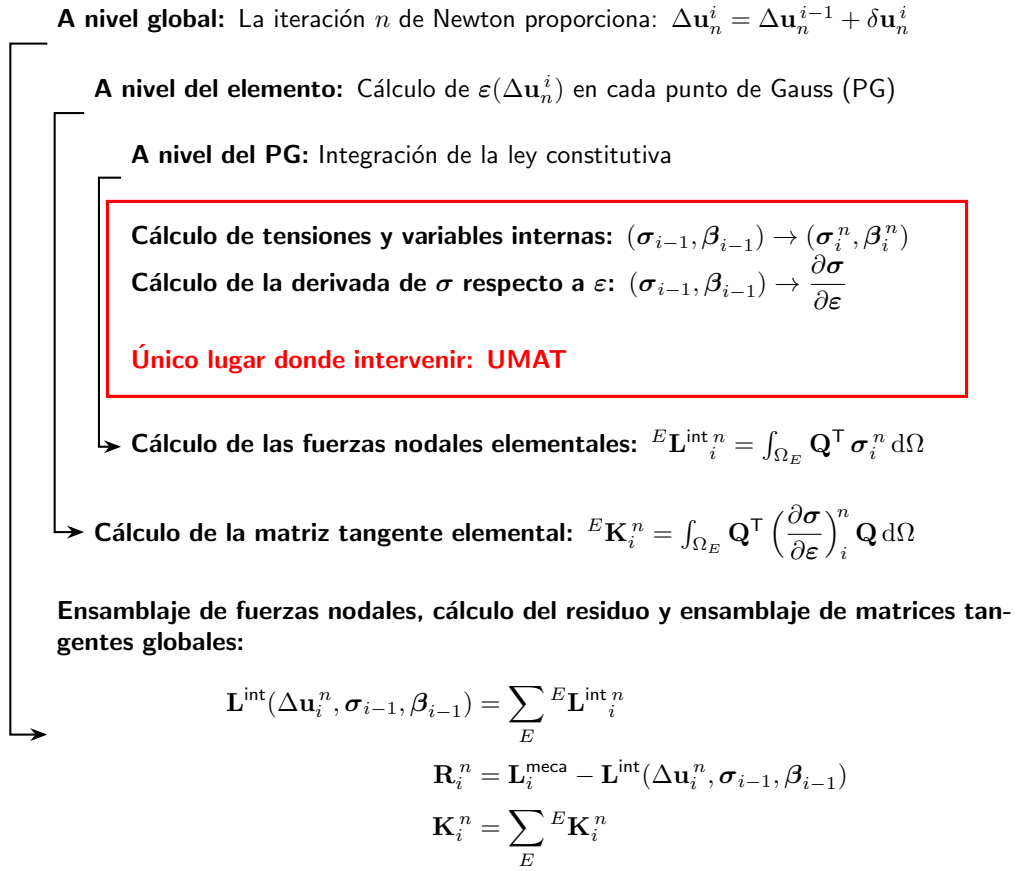


Figura 4.1: Esquema del proceso iterativo de análisis no lineal, mostrando cálculos a nivel global, de elemento y de punto de Gauss, con intervención en UMAT.

4.3.1 Caso de referencia: UMAT fenomenológica bajo irradiación

Con el fin de contextualizar el nivel de complejidad que introduce el acople VPSC y CAFEM, resulta útil presentar primero un *baseline* fenomenológico de irradiación implementado como UMAT independiente en Code_Aster. Este caso de referencia pone de manifiesto que, si bien es posible modelar respuestas más allá de lo elástico (plasticidad, creep por irradiación y *swelling*) con un número acotado de parámetros y ecuaciones escalares, dicha aproximación carece del soporte microestructural y de la consistencia energética propias de un modelo de primeros principios acoplado a policristales. Una implementación de este tipo, sus validaciones y una aplicación industrial se reportan en (Aguzzi et al., 2022)

Alcance y descomposición de la deformación

Se adopta una descomposición aditiva clásica del incremento de deformación

$$\Delta\epsilon = \Delta\epsilon^e + \underbrace{\Delta\epsilon_{irr}^{pl} + \Delta\epsilon_{irr}^{cr} + \Delta\epsilon_{irr}^{sw}}_{\Delta\epsilon^p},$$

donde $\Delta\epsilon^e$ es la parte elástica, mientras que la parte plástica efectiva $\Delta\epsilon^p$ agrupa la plasticidad independiente, la fluencia por irradiación (*irradiation creep*) y la dilatación volumétrica por *swelling*. La relación constitutiva macroscópica se escribe como

$$\Delta\sigma = \mathbb{C} : (\Delta\epsilon - \Delta\epsilon^p),$$

con $\mathbb{C}$ el tensor elástico efectivo (en este modelo depende de la temperatura y de la dosis de irradiación).

Leyes fenomenológicas

Las contribuciones inelásticas se gobiernan con leyes escalares dependientes de la tensión efectiva, la dosis (dpa), el flujo neutrónico ϕ y la temperatura T . De forma esquemática:

$$\dot{\epsilon}_{irr}^{cr} = f_{cr}(\sigma_{eq}, T, \phi), \quad \dot{\epsilon}_{irr}^{sw} = f_{sw}(dpa, T), \quad \dot{\epsilon}_{irr}^{pl} = f_{pl}(\sigma_{eq}, T), \quad (4.8)$$

donde las funciones $f_{\bullet}(\cdot)$ son elegidas para capturar umbrales de activación, sensibilidades térmicas y/o saturaciones de acuerdo con datos de referencia.¹

Integración en UMAT y jacobiano consistente

La integración temporal se realiza por Euler hacia atrás. Para cada incremento, la UMAT: (i) calcula un estado de prueba elástico, (ii) actualiza las variables internas asociadas a creep y *swelling*, (iii) corrige tensiones imponiendo el residuo sobre $\Delta\epsilon^p$, (iv) retorna $\sigma^{t+\Delta t}$ y la tangente consistente $\mathbb{C}^{tg}$ que linealiza la respuesta inelástica. Detalles de los residuos y del jacobiano se muestran en la contribución del MECOM 2022 ([Aguzzi et al., 2022](#)).

Calibración y validación (T y ϕ constantes y variables)

Los parámetros se calibran frente a curvas de tracción uniaxial y/o ensayos a carga/flujo constantes, y se contrasta la respuesta con la ley IRRAD3M propia de Code_Aster bajo condiciones homogéneas de campo de tensiones (ver Fig. 4.2). La UMAT fenomenológica reproduce la

¹En [Électricité de France \(1989–2017\)](#) existen implementaciones de referencia (p.ej. IRRAD3M) útiles para validación cruzada.

partición de deformaciones (elástica, creep, *swelling*) y su sensibilidad a T y ϕ ; los mapas de Von Mises y las comparaciones cuantitativas se documentan en MECOM 2022 (ver Fig. 4.3 y 4.4).

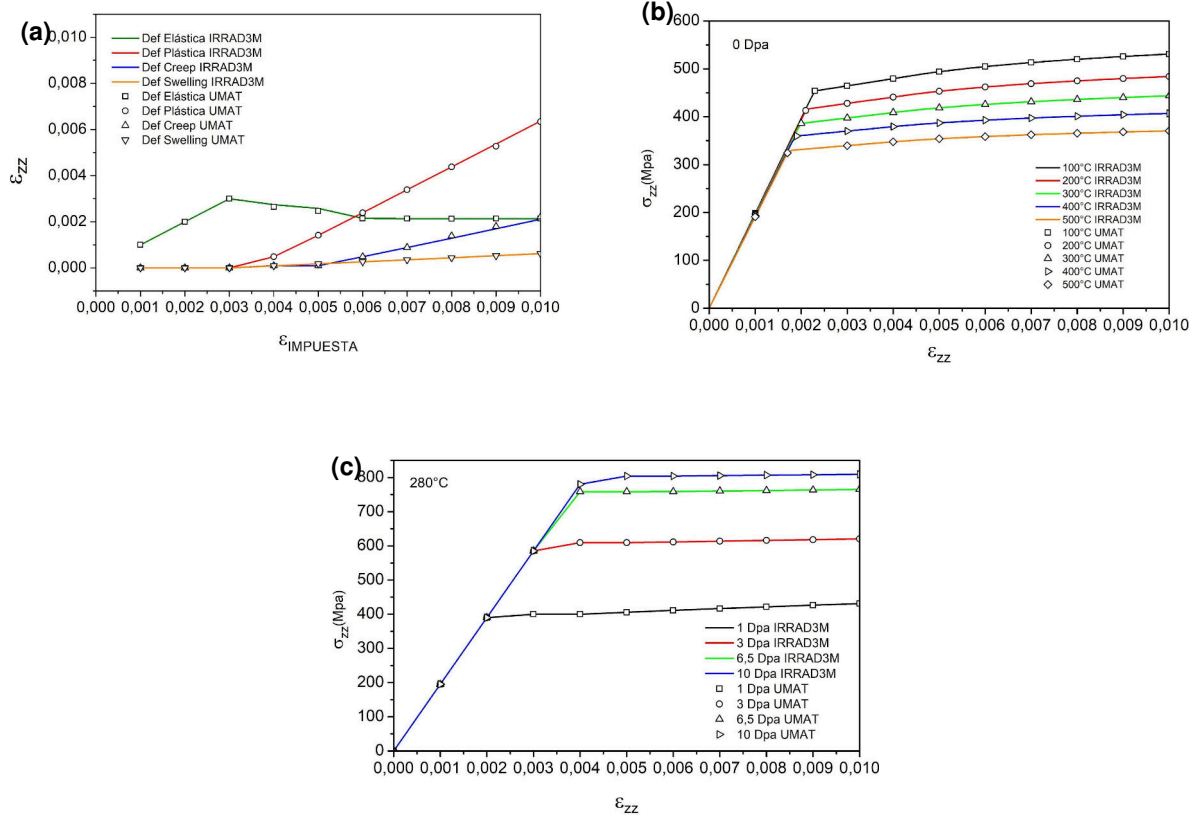


Figura 4.2: Validación de la implementación: comparación de campos y respuesta global con el modelo de referencia (IRRAD3M/baseline). (a) descomposición de deformación bajo una deformación impuesta, (b) curva tensión-deformación con variación de Temperatura y (c) curva tensión-deformación con variación de dosis de irradiación.

¿Qué enseña este baseline y por qué no basta?

Este caso muestra que la UMAT ofrece, desde ya, la *capacidad* de incorporar respuestas más allá de lo elástico con leyes de complejidad arbitraria (incluso calibradas contra datos de planta o de laboratorio), con un costo computacional bajo y sin requerir estadística de granos. Sin embargo:

- La respuesta inelástica se gobierna por funciones escalares efectivas, sin *feedback* microestructural (textura, sistemas de deslizamiento activos, maclado, etc.).
- No hay consistencia termodinámica explícita a nivel de grano ni cómputo de módulos tangentes derivados de una homogeneización policristalina.

(a)–(b) Geometría del caso de aplicación

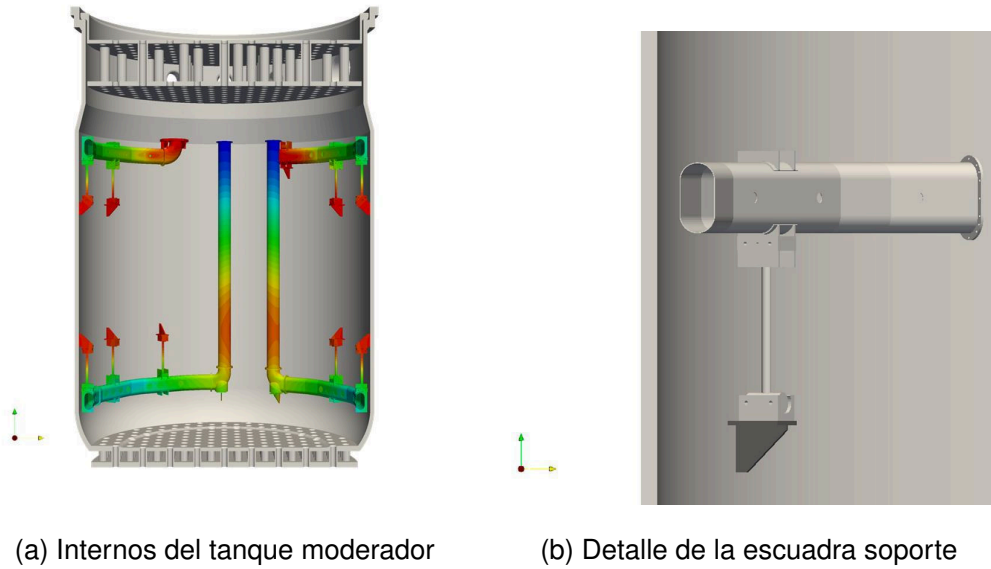


Figura 4.3: Aplicación: Escuadra soporte toroide superior CNA1.

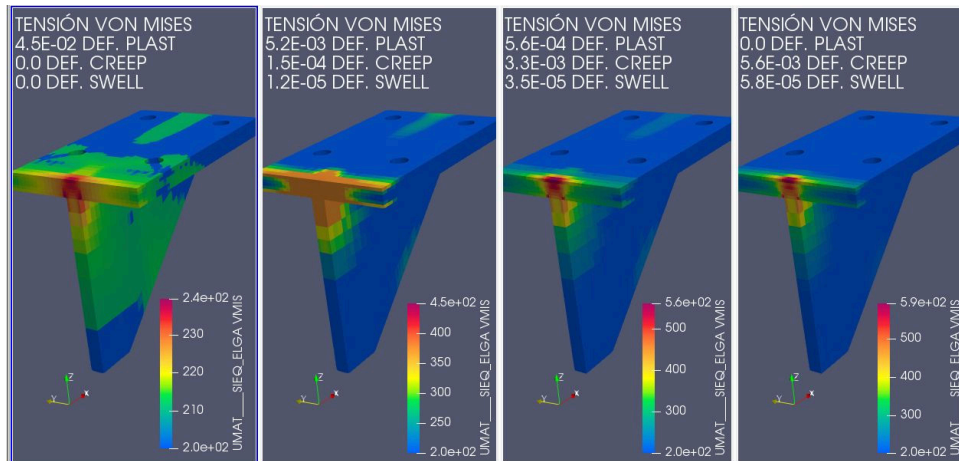


Figura 4.4: Resultados de la aplicación -Escuadra soporte-: Tensión de Von Mises y componentes de deformación para 0, 3, 6.5 y 10 dpa bajo carga y temperatura constantes).

- La anisotropía inducida por textura y su *evolución* con la deformación quedan fuera del modelo (o se imitan a través de coeficientes direccionales).

Contraste con el acople VPSC–FEM

En el marco VPSC-SA–Método de Elementos Finitos (FEM) desarrollado en esta tesis (Secs. 4.5 y 4.6), cada punto de Gauss representa un agregado policristalino cuya cinemática interna se resuelve por homogeneización autoconsistente; las tensiones macroscópicas calculadas en el equilibrio global retroalimentan la evolución microestructural (orientaciones, endurecimiento, módulos tangentes), y de allí se obtienen tensiones σ y tangentes consistentes C^{tg} derivadas del

modelo policristalino. Es decir, el cierre es por *primeros principios* (a la escala del cristal) y no por funciones efectivas impuestas.

Los resultados fenomenológicos prueban que la UMAT habilita leyes materiales complejas y útiles para ingeniería, pero también dejan claro por contraste que el acople VPSC–CAFEM añade la pieza faltante: la relación entre microestructura y respuesta a nivel de la pieza, con una matriz tangente consistente derivada de la homogeneización, lo que mejora la predicción y la robustez numérica.

En la práctica, la calibración del modelo fenomenológico requiere establecer un conjunto reducido de parámetros materiales que controlan cada mecanismo inelástico. La Tabla 4.1 resume los parámetros típicos empleados en este *baseline*, junto con su rol físico y su dependencia con la temperatura o la irradiación.

Cuadro 4.1: Parámetros típicos en el baseline fenomenológico (ejemplo).

Símbolo	Rol	Comentario
E, ν	Elasticidad	Módulos elásticos efectivos.
$A_{cr}(T, \phi)$	Creep irr.	Coeficiente de ley Creep bajo irradiación; sensibilidad a T y ϕ .
$S(dpa, T)$	Swelling	Tasa volumétrica en función de dpa y T .
$\sigma_y(T)$	Umbral plástico	Puede depender de T y dpa.

4.4 Definición de Sistemas de Referencias Locales

En la Sec. 4.3.1 se muestra un caso de UMAT fenomenológica bajo irradiación con comportamiento *isotrópico*. En ese contexto, la respuesta constitutiva no depende de la orientación del estímulo mecánico y, por lo tanto, la definición de un sistema de coordenadas local es prescindible. Esta salvedad deja de ser válida cuando el material presenta *anisotropía cristalográfica* marcada—como en Zircaloy-2 (HCP) con textura de tubo (ver textura de la Fig. 3.6)—porque la rigidez elástica, los módulos tangentes y la activación de modos de deformación (*slip/twin*) dependen de la orientación. En consecuencia, se requieren marcos locales por punto de Gauss para: (i) expresar la ley en los ejes del material, (ii) rotar tensores de segundo y cuarto orden entre el sistema del ensayo (Test Axes (TA)) y el de la muestra (Sample Axes (SA)), y (iii) evitar respuestas espurias cuando la orientación varía espacialmente (geometrías curvas, contacto). A continuación se formaliza esta definición de sistemas de referencia locales y su uso dentro del acople VPSC–CAFEM.

Típicamente, la textura cristalográfica (ejes cristalinos, Cristal Axes (CA)) y la textura morfológica (ejes elipsoidales) se definen con respecto al sistema de referencia principal de la muestra (ejes de la muestra, SA). Asimismo, al simular la deformación de agregados texturados, es común expresar las variables de estado mecánico—como el gradiente macroscópico de velocidades, el estado tensional y las variables internas—en el sistema de referencia del ensayo (ejes del ensayo, TA, que se asumen coincidentes con los ejes globales de CAFEM), el cual se hace coincidir con SA. Sin embargo, cuando TA no coincide con SA, se vuelve necesario definir un sistema de referencia local asociado a cada SA en cada punto de Gauss (ver Fig. 4.5), resolver el estado de tensiones o deformaciones en ese sistema local y, posteriormente, rotar las magnitudes resultantes al sistema TA.

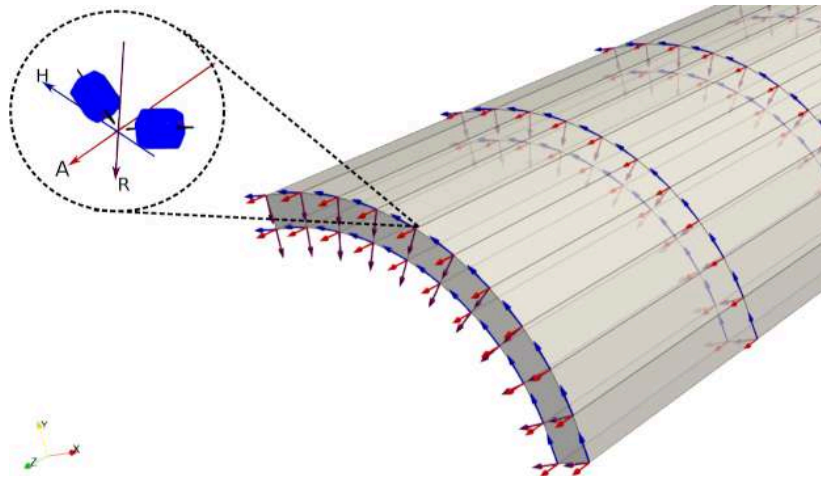


Figura 4.5: Posición relativa de los ejes cristalográficos HCP con respecto a los sistemas de coordenadas locales solidarios a un cuarto de tubo. Las direcciones A, H y R corresponden a las direcciones axial, circunferencial y radial del tubo de revestimiento.

Cada punto de Gauss de la malla de CAFEM se considera un policristal con su textura inicial asociada. En tal caso, se define un SA en cada punto de Gauss. Si la geometría en estudio es curvada—como el tubo de revestimiento del elemento combustible—los sistemas SA y TA no coinciden, ya que cada SA rota elemento por elemento a medida que se avanza a lo largo de la circunferencia del tubo, tal como se ilustra en la Figura 4.5.

Esto resulta importante porque la textura de estos tubos es circunferencial (el eje de los prismas hexagonales está mayormente orientado en la dirección circunferencial/tangencial, H), ver Fig. 3.6. Las orientaciones que contienen la información microestructural más relevante para este tipo de textura son la cara circunferencial (plano R-A, dado que el polo basal es mayormente perpendicular a la sección circunferencial del tubo) y la cara axial (plano R-H, dado que los polos prismáticos son mayormente perpendiculares a la sección axial) [Juarez et al. \(2019\)](#).

El solver Code_Aster permite la definición de sistemas de coordenadas locales en los puntos de Gauss de la malla. Es posible asignar manualmente la orientación relativa de estos sistemas locales para cada volumen definido con respecto a un sistema de referencia global. Este enfoque es manejable cuando se trabaja con un número reducido de elementos; sin embargo, resulta poco práctico en mallas grandes, especialmente cuando la geometría involucra superficies curvadas. En tales casos, la asignación manual de orientaciones locales puede ser tediosa y propensa a errores—particularmente al analizar el contacto entre dos componentes curvos.

En esta sección se construye la matriz de rotación R que mapea del sistema global del ensayo (TA) al sistema local del material (SA). Esta misma R (ver Sec. 4.6) se usa luego en el *flujo VPSC dentro de la UMAT*. Por lo tanto, para mallas grandes, se desarrolló una subrutina (ver Apéndice A), utilizando Python, que asigna automáticamente un sistema de coordenadas local a cada elemento de la malla CAFEM en función de su geometría. Esta automatización mejora significativamente tanto la precisión como la eficiencia en la definición de orientaciones locales, particularmente en geometrías complejas y en materiales que presentan propiedades mecánicas y físicas anisotrópicas.

4.5 Flujo de cálculo VPSC dentro de la UMAT

La subrutina desarrollada en esta tesis, escrita en **Fortran 90**, se ejecuta en cada punto de Gauss y en cada incremento de tiempo. Su flujo de cálculo puede resumirse en la siguiente secuencia de operaciones:

1. Inicialización.

- Lee, a través del vector PROPS, el tipo de modelo constitutivo (elástico puro o elástico+VPSC) y parámetros de control (ver Sec. B).
- Identifica el elemento y el punto de integración y, en la primera llamada, invoca UEXTERNALDB para cargar el agregado policristalino (orientaciones, parámetros de endurecimiento, etc.).
- Si está habilitado el modo de depuración, abre archivos de *debug*.

2. Transformación de variables de entrada.

- Convierte los incrementos de deformación DSTRAN y las tensiones STRESS de notación de Voigt (vector de 6 componentes) a tensores 3×3 .
- Aplica la matriz de rotación DRROT para pasar del sistema global de CODE_ASTER al sistema local del policristal.

- **Cambio de base (autotensores $\{\mathbf{b}^{(\beta)}\}$).** En el sistema local (*), descomponemos cualquier tensor simétrico de segundo orden ($\boldsymbol{\sigma}^*$, $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^*$) en la base ortonormal $\{\mathbf{b}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1}^6$, donde $\mathbf{b}^{(\alpha)} : \mathbf{b}^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta}$. Así,

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \sum_{\alpha=1}^6 s_{\alpha} \mathbf{b}^{(\alpha)}, \quad s_{\alpha} = \mathbf{b}^{(\alpha)} : \boldsymbol{\sigma}^*, \quad \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^* = \sum_{\alpha=1}^6 e_{\alpha} \mathbf{b}^{(\alpha)}, \quad e_{\alpha} = \mathbf{b}^{(\alpha)} : \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^*. \quad (4.9)$$

Las primeras cinco componentes ($\alpha = 1, \dots, 5$) son *deviadoras* y la sexta ($\alpha = 6$) es la *hidrostática*. De este modo,

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{dev}}^* = \sum_{\alpha=1}^5 s_{\alpha} \mathbf{b}^{(\alpha)}, \quad \boldsymbol{\sigma}_{\text{hyd}}^* = s_6 \mathbf{b}^{(6)}, \quad (4.10)$$

y de forma análoga para $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^*$.

La proyección del *módulo tangente consistente* de cuarto orden al subespacio deviatorio se escribe como una matriz 5×5 :

$$\underbrace{M_{\alpha\beta}}_{5 \times 5} = \mathbf{b}^{(\alpha)} : \mathbb{C}^{\text{tg}*} : \mathbf{b}^{(\beta)}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, 5, \quad (4.11)$$

que puede invertirse para obtener la *compliance* deviatoria $L_{\alpha\beta} = (M^{-1})_{\alpha\beta}$. Este cambio de base preserva la conjugación trabajo (consistencia energética) y es especialmente útil en formulaciones incompresible o cuando se separan modos deviatorios e hidrostáticos.

3. Evaluación del módulo elástico del agregado.

- Calcula, mediante el esquema autoconsistente (ELSC), el módulo elástico policristalino, que servirá como *predictor elástico* y punto de partida de la integración.

4. Predicción elástica y bifurcación de modelos.

- Si no hay incremento de deformación, devuelve directamente las tensiones y el módulo elástico rotados al sistema global (Fase de predicción en Newton-Rahpson global).
- Si existe incremento, se calcula un predictor elástico ($\text{dstressBel} = \text{CELAV} * \text{dstranB}$) y decide:
 - *Sólo elástico*: actualiza la tensión y retorna el módulo tangente.
 - *Elástico + VPSC*: continúa con la integración viscoplástica.

5. Integración viscoplástica (modo VPSC).

- Actualiza los factores de Schmid y las variables de tasa de deformación.
- Si corresponde, ejecuta UPDATE_GROWTH_ZIRC2 para actualizar densidad y radios de lazos de dislocación (crecimiento por irradiación).
- Recupera estados previos para usarlos como *guess* inicial en la iteración.

6. Iteración de Newton–Raphson.

- Plantea el residuo entre la deformación total impuesta y la suma de la parte elástica y viscoplástica.
- Calcula el *Jacobiano* (módulo tangente consistente) y su inversa.
- Corrige el incremento de tensión hasta que la norma del residuo o la métrica de convergencia χ cae por debajo de la tolerancia establecida (τ_{olNR}). Si tras 100 iteraciones no converge, detiene la simulación.

7. Actualización de variables de salida.

- Con el estado convergido, calcula:
 - la *tensión final* y el *módulo tangente consistente* (DDSDDE) en la convención de CODE_ASTER;
 - los incrementos elásticos y viscoplásticos en notación de Voigt;
 - magnitudes acumuladas: deformación viscoplástica equivalente, dosis de irradiación y deformaciones acumuladas en direcciones radial, tangencial y axial.
- Almacena todos estos valores en el vector STATEV, que CODE_ASTER utiliza en los siguientes incrementos de carga.

8. Reconstrucción en cartesiano local y rotación a global.

- (*De bbasis a cartesiano local*) Primero se reconstruyen los tensores en la base cartesiana local (*):

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \sum_{\alpha=1}^6 s_{\alpha} \mathbf{b}^{(\alpha)}, \quad \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^* = \sum_{\alpha=1}^6 e_{\alpha} \mathbf{b}^{(\alpha)}.$$

Para el operador tangente consistente:

$$\mathbb{C}^{tg*} = \sum_{\alpha=1}^5 \sum_{\beta=1}^5 M_{\alpha\beta} \mathbf{b}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{b}^{(\beta)} + K \mathbf{b}^{(6)} \otimes \mathbf{b}^{(6)},$$

donde $M_{\alpha\beta} = \mathbf{b}^{(\alpha)} : \mathbb{C}^{tg*} : \mathbf{b}^{(\beta)}$ es el bloque deviator 5×5 y K es el módulo volumétrico efectivo (si hay acople dev–hidro, incluir los términos cruzados $\mathbf{b}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{b}^{(6)}$ y $\mathbf{b}^{(6)} \otimes \mathbf{b}^{(\alpha)}$).

- (*Rotación a global*) Con las magnitudes ya en cartesiano local, se rotan al sistema global del CAFEM:

$$\boldsymbol{\sigma}^{t+\Delta t} = \mathbf{R}^T \boldsymbol{\sigma}^* \mathbf{R}, \quad \mathbb{C}_{ijkl}^{\text{tg}} = R_{im} R_{jn} R_{ko} R_{lp} \mathbb{C}_{mnop}^{\text{tg}*}.$$

- (*Caso trivial*) Si el marco global coincide con el local, $\mathbf{R} = \mathbf{I}$ y la rotación es la identidad.

9. Depuración y cierre.

- Si está activo el modo *debug*, escribe en archivos de salida la evolución de tensiones, deformaciones y variables internas, y cierra las unidades lógicas abiertas.

Este esquema describe de manera explícita el **flujo interno de cálculo** de la UMAT VPSC–CAFEM, evidenciando el acoplamiento fuerte entre la respuesta policristalina y el solver de elementos finitos y la necesidad de un *módulo tangente consistente* para la convergencia del algoritmo de Newton global. En la Fig. 4.6 se muestra una síntesis diagrama de flujo de los pasos que realiza la UMAT.

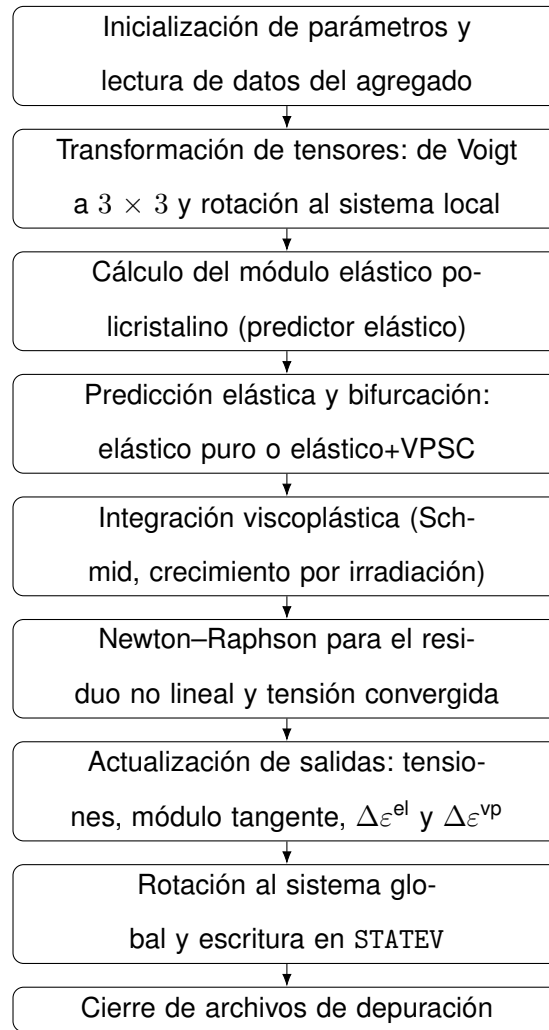


Figura 4.6: Diagrama de flujo que resume las etapas de cálculo de la UMAT.

4.6 Cálculo analítico de la deformación elástica y la matriz tangente consistente

El problema macroscópico se formula mediante una aproximación estándar en desplazamientos, bajo la hipótesis de deformaciones infinitesimales. En este marco, no se introduce una variable de presión independiente ni se emplea una formulación mixta. La condición de (cuasi-)incompresibilidad del material se maneja a nivel constitutivo, restringiendo la respuesta viscoplástica a deformaciones puramente deviatorias, mientras que la componente hidrostática se trata a través de la respuesta elástica recuperada de forma consistente en cada punto de integración.

Este enfoque resulta coherente con el marco VPSC, que describe mecanismos plásticos conservativos de volumen, y es adecuado para los regímenes de deformación considerados en esta tesis.

Por construcción, el modelo VPSC no contempla la respuesta elástica a nivel de cristal simple

(véase Sec. 3.3.3, Ec. 3.47): el agregado se modela en régimen viscoplástico mediante tasas asociadas a *creep* térmico e inducido por irradiación y al crecimiento bajo irradiación libre de tensiones. Al acoplar VPSC con el FEM, se restituye explícitamente la contribución elástica para compatibilizar los incrementos provistos por ambos modelos y garantizar la convergencia del esquema de Newton–Raphson. El término elástico se calcula con el tensor de rigidez macroscópico $\mathbf{C}$ del agregado, estimado por VPSC al comienzo de cada incremento.

El acople VPSC–FEM ha sido explorado en distintos códigos: en ABAQUS, vía UMAT [Knezevic et al. \(2013b\)](#); [Patra and Tomé \(2017\)](#); [Segurado et al. \(2012\)](#), y en BISON–CASL como modelo de material [Liu et al. \(2015\)](#). Más recientemente se implementó VPSC en Code_Aster [Aguzzi et al. \(2025b\)](#); [Aguzzi and Signorelli \(2024\)](#), ampliando de forma sustantiva las capacidades de simulación multifísica en un entorno ampliamente utilizado en el sector nuclear.

Formulación del algoritmo de acople

El esquema adoptado sigue los lineamientos de [Segurado et al. \(2012\)](#) con un criterio de convergencia modificado. Bajo el supuesto VPSC–SA (sin parte elástica a nivel de cristal), la interfaz VPSC–CAFEM adopta la descomposición aditiva del incremento de deformación

$$\Delta \varepsilon = \Delta \varepsilon^e + \Delta \varepsilon^{vp}, \quad \Delta \varepsilon^e = \mathbf{C}^{-1} : \Delta \sigma, \quad (4.12)$$

donde $\mathbf{C}$ es el tensor de constantes elásticas del agregado policristalino provisto por VPSC al inicio del paso.

Rotación a sistemas locales. El cálculo constitutivo se realiza en el sistema material local. Sea $R^{t+\Delta t}$ la rotación total al final del paso de tiempo; las magnitudes expresadas en el sistema local se indican con superíndice $*$:

$$\Delta \varepsilon^* = R^{t+\Delta t} \Delta \varepsilon (R^{t+\Delta t})^T, \quad \sigma^* = R^{t+\Delta t} \sigma (R^{t+\Delta t})^T, \quad (4.13)$$

con $R^{t+\Delta t} = \Delta R_{FE} R^t$, donde ΔR_{FE} es la rotación rígida incremental provista por el solver de FEM ([Nolan et al., 2022](#)).

Estado de prueba y actualización de tensiones. Suponiendo que la deformación total se acomoda elásticamente, el estado de tensión de prueba se obtiene como

$$\Delta \sigma^* = \mathbf{C} : (\Delta \varepsilon^* - \Delta \varepsilon^{vp*}), \quad \sigma^{t+\Delta t*} = \sigma^{t*} + \Delta \sigma^*. \quad (4.14)$$

VPSC es llamado con $\sigma^{t+\Delta t*}$ para calcular la tasa de deformación viscoplástica $\dot{\varepsilon}^{vp*}$.

Residuo e iteración de Newton–Raphson. La interfaz VPSC–CAFEM calcula el residuo entre el incremento de deformación local y el proporcionado por FEM:

$$\mathbf{X}(\Delta\sigma^*) = \Delta\epsilon^* - \Delta\epsilon_{FEM}^* = \mathbf{C}^{-1} : \Delta\sigma^* + \dot{\epsilon}^{vp*} \Delta t - \Delta\epsilon_{FEM}^*. \quad (4.15)$$

Si el criterio de convergencia no se satisface en la iteración k (Ec. 4.16), el incremento de tensión de prueba se actualiza como

$$(\Delta\sigma^*)_{k+1} = (\Delta\sigma^*)_k - \mathbf{J}_{NR}^{-1*}((\Delta\sigma^*)_k) : \mathbf{X}((\Delta\sigma^*)_k), \quad (4.16)$$

donde el jacobiano del método de Newton–Raphson es

$$\mathbf{J}_{NR}^*(\Delta\sigma^*) = \frac{\partial \mathbf{X}(\Delta\sigma^*)}{\partial (\Delta\sigma^*)} = \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{M} \Delta t. \quad (4.17)$$

Aquí $\mathbf{M}$ es el módulo tangente viscoplástico calculado por VPSC como parte de los cálculos autoconsistentes.

Una vez calculado el incremento de tensión en la iteración $k + 1$, el procedimiento de Newton–Raphson continúa evaluando el residuo $\mathbf{X}((\Delta\sigma^*)_{k+1})$ hasta que la norma de dicho residuo resulte inferior a una tolerancia prefijada (*por ejemplo*, $\|\mathbf{X}\| < 10^{-6}$). Sólo cuando se satisface este criterio de convergencia se considera que el incremento de tensión $\Delta\sigma^*$ es aceptable y se procede a la rotación de las magnitudes al sistema de coordenadas global.

Transformación de resultados al sistema global. Finalmente, el solver de FEM requiere las magnitudes en el sistema de coordenadas global:

$$\sigma^{t+\Delta t} = (R^{t+\Delta t})^T \sigma^{t+\Delta t*} R^{t+\Delta t}, \quad \mathbb{C}^{tg} = \mathcal{R} \mathbb{C}^{tg*} \mathcal{R}^T, \quad (4.18)$$

donde $\mathcal{R}$ es el tensor de rotación de cuarto orden derivado de R , y

$$\mathbb{C}^{tg}_{ijkl} = R_{im} R_{jn} R_{ko} R_{lp} \mathbb{C}^{tg*}_{mnop}. \quad (4.19)$$

Para acelerar la convergencia se emplea una métrica ponderada [McGinty \(2001\)](#):

$$\chi = \sqrt{\sum_i \sum_j \left(\frac{|\Delta\epsilon_{FE}^{ij}|}{\max(|\Delta\epsilon_{FE}^{ij}|)} X^{ij} \right)^2}, \quad (4.20)$$

donde i y j son los índices tensoriales.

En la Fig. 4.7 se muestra el *flowchart* para lograr la comunicación y los calculos correspondientes entre VPSC y Code Aster.

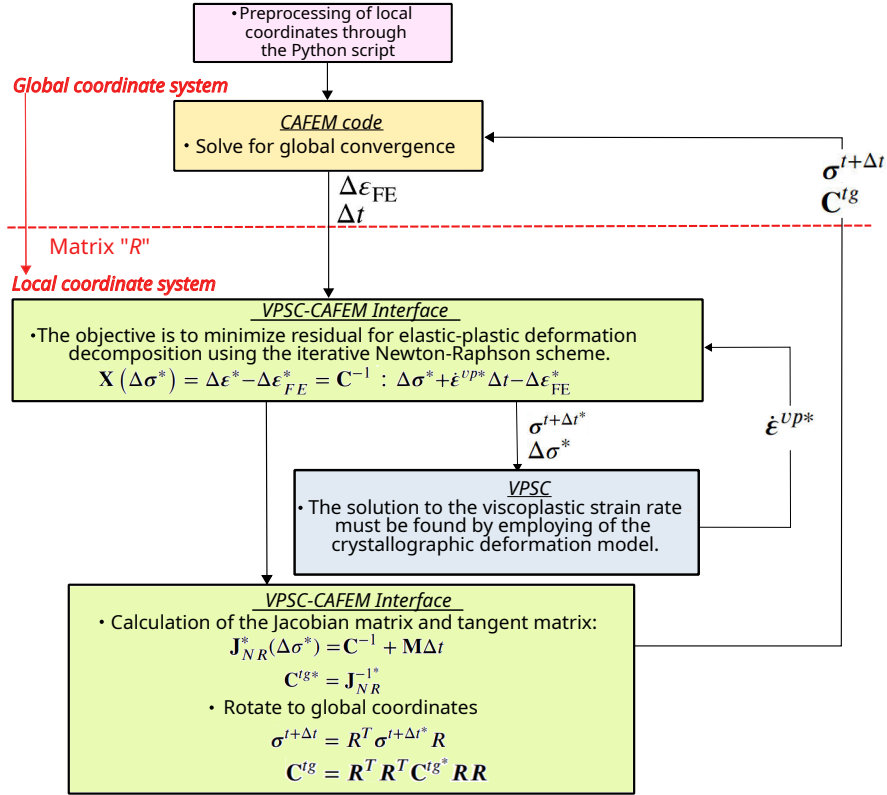


Figura 4.7: Diagrama de flujo para conectar VPSC con CAFEM.

Validación. La interfaz VPSC–CAFEM se validó mediante:

- Ensayo de tracción simple (ver 4.7) -Sin irradiación ni temperatura-.
- creep y crecimiento bajo irradiación en la geometría de un cuarto de tubo de revestimiento (véase Sec. 5.3), siguiendo la metodología descrita en [Patra and Tomé \(2017\)](#); [Segurado et al. \(2012\)](#).

4.7 Validación código a código del acople VPSC–CAFEM mediante tracción uniaxial

Para verificar que la interfaz VPSC–CAFEM en Code_Aster reproduce fielmente la respuesta del código VPSC-SA, se realizó un ensayo de tracción uniaxial controlado en deformación sobre un material HCP con textura de Zr laminado en frío. El ensayo se llevó hasta un 20 % de deformación ingenieril.

Casos comparados

- (I) **VPSC-SA:** respuesta policristalina sin FEM.
- (II) **VPSC–CAFEM (malla 1 elemento):** hexaedro lineal con $2 \times 2 \times 2$ puntos de Gauss.

- (III) **VPSC–CAFEM (malla 3 elementos)**: 3 hexaedros en serie en la dirección de carga (mis-
mo total de puntos de Gauss por sección).

En los tres casos se emplearon los mismos parámetros constitutivos, la misma textura (asignada a cada punto de Gauss) y las mismas condiciones de contorno (barras de desplazamiento, sin rotaciones parásitas). La tasa de deformación y el Δt fueron seleccionados de modo que el incremento equivalente de deformación por paso coincidiera entre configuraciones.

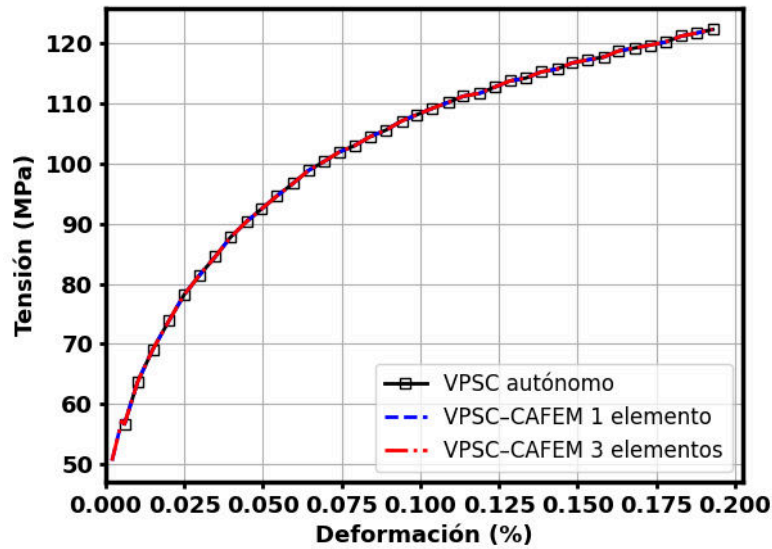


Figura 4.8: Validación del acople VPSC–CAFEM frente a VPSC-SA en tracción uniaxial (textura de tubo de presión). Las tres curvas tensión–deformación (VPSC-SA, VPSC–CAFEM con 1 elemento y con 3 elementos) *coinciden dentro del espesor de línea*, lo que confirma la consistencia del acople constitutivo y de la rotación de tensores entre marcos local y global.

Sistema	τ_0	τ_1	θ_0	θ_1	h^{PR}, h^{PY}	h^{TT}, h^{CT}
Prismático	19	16	1289	82	1.0, 1.0	10, 2
Basal	50	50	100	100	1.0, 1.0	10, –
Piramidal $\langle c + a \rangle$	50	50	100	100	1.0, 1.0	10, –

Nota: parámetros en MPa. Coeficientes de endurecimiento (Lebensohn and Tomé (1993)) utilizada como referencia.

La superposición de las curvas de la Fig. 4.8 demuestra que: (a) la descomposición aditiva $\Delta \varepsilon = \Delta \varepsilon^e + \Delta \varepsilon^{vp}$ y el uso de $\mathbf{C}$ autoconsistente son coherentes con VPSC-SA; (b) la transformación de cuarto orden $\mathcal{R}$ para $\mathbb{C}^{tg}$ preserva la respuesta al cambiar de marco; y (c) el *loop* de Newton–Raphson con $\mathbf{J}_{NR}^* = \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{M}\Delta t$ está correctamente implementado en Code_Aster bajo la interfaz VPSC–CAFEM.

Textura y orientación grano a grano. Como complemento de la verificación anterior, la Fig. 4.9

muestra figuras de polos (0002) y $(10\bar{1}0)$ superpuestas, predichas por VPSC-SA y por la implementación VPSC–CAFEM. En lugar de la representación habitual para tracción uniaxial —figuras de polos inversas con líneas de nivel en múltiplos de la distribución aleatoria (MDA/MRD), que brindan una descripción compacta y cuantitativa—, aquí utilizamos *figuras de polos directas* y se graficó *un punto por polo y por grano*. Esta visualización permite evidenciar no sólo el muy buen acuerdo entre las texturas globales obtenidas por ambas aproximaciones, sino también la *coincidencia casi perfecta, grano a grano*, de las orientaciones finales predichas por ambos enfoques.

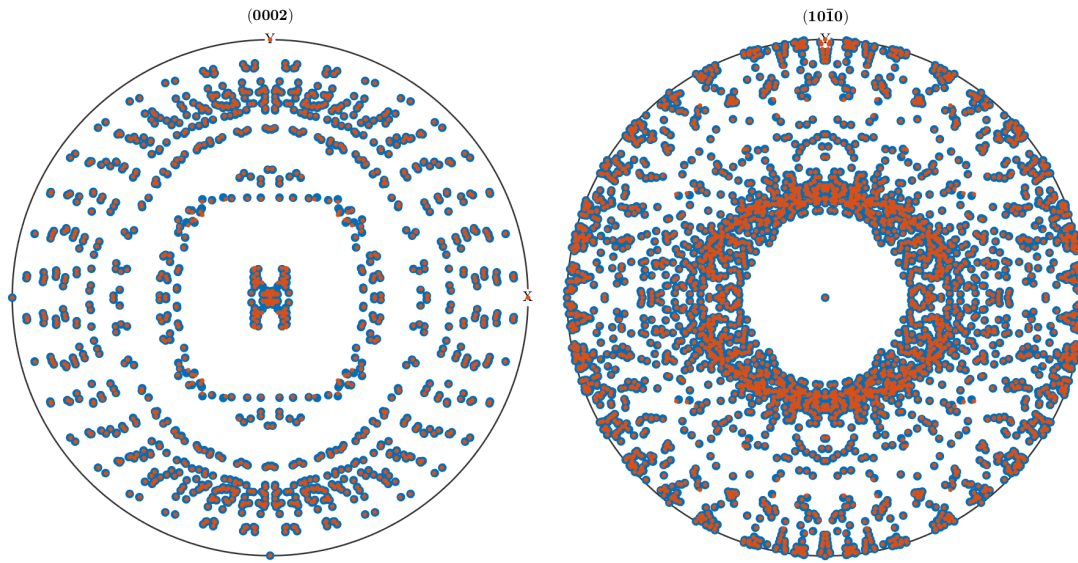


Figura 4.9: Figuras de polos directas (0002) y $(10\bar{1}0)$ superpuestas predichas por VPSC-SA (puntos azules de mayor tamaño) y VPSC-CAFEM (puntos naranjas más pequeños) para una tracción uniaxial del 20 % de un policristal HCP. Se grafica un punto por polo y por grano, lo que permite comparar la textura global y la correspondencia grano a grano.

4.8 Análisis de convergencia y costo computacional

Se estudió la sensibilidad del número de iteraciones en el solver Code_Aster (Newton–Raphson en la interfaz VPSC–CAFEM) respecto del tamaño de paso Δt (y, por ende, de la tasa de deformación efectiva por paso). Para un mismo tramo de carga, se variaron $\Delta t \in \{ \Delta t_{\text{grande}}, \Delta t_{\text{medio}}, \Delta t_{\text{chico}} \}$ manteniendo constante la curva objetivo de deformación total.

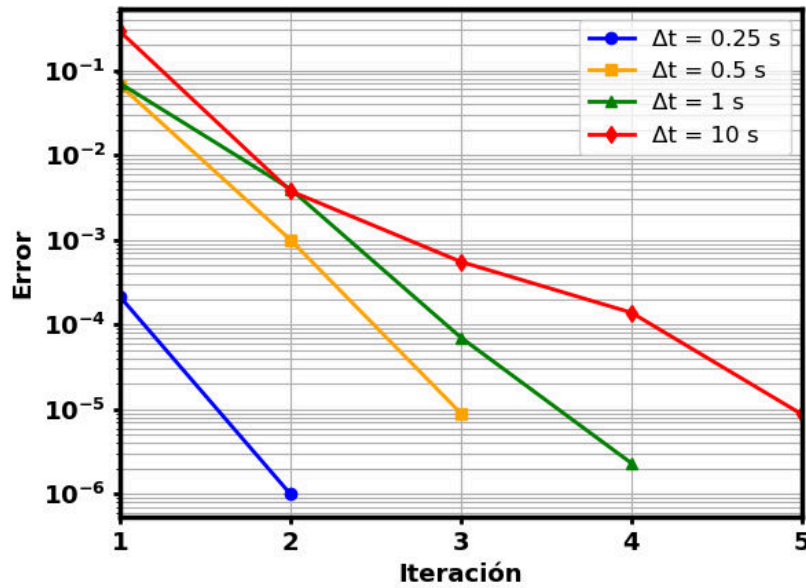


Figura 4.10: Convergencia del esquema de Newton–Raphson en la interfaz VPSC–CAFEM: total de iteraciones globales necesarias para alcanzar el criterio χ (sección anterior) en función del tamaño de paso Δt . Pasos de tiempo más pequeños reducen el número de iteraciones por paso y estabilizan la tasa de convergencia; sin embargo, aumentan la cantidad de pasos totales. Existe, por lo tanto, un *trade-off* entre robustez y costo global.

Observaciones principales. (i) Disminuir Δt reduce el residuo inicial del paso y, con ello, el número de iteraciones necesarias para satisfacer $\chi \leq \chi_{\text{tol}}$. (ii) El costo total (pasos $\times$ iteraciones por paso) exhibe un mínimo amplio para valores intermedios de Δt , que resultan recomendables para corridas de ingeniería. (iii) Para cargas con fuerte no linealidad (p. ej., activación de múltiples sistemas o cambios rápidos de rigidez efectiva), conviene activar un control adaptativo de Δt (reducción automática al detectar estancamiento de χ).

Guía práctica de uso. Para problemas cuasi–estáticos con texturas marcadas, se sugiere iniciar con Δt que produzca incrementos de deformación equivalentes del orden 10^{-3} – 5×10^{-3} por paso, tolerancia $\chi_{\text{tol}} \sim 10^{-8}$ – 10^{-6} , y permitir reducción automática de Δt cuando el número de iteraciones exceda un umbral (p. ej., 12–15 iteraciones).

4.8.1 Rendimiento computacional del acoplamiento VPSC–CAFEM

El marco multiescala propuesto acopla de manera jerárquica **cuatro** solvers no lineales (ver Fig. 4.11):

1. **Iteración de punto fijo** para obtener la respuesta policristalina promedio a partir de las respuestas individuales de grano.

2. **Esquema de Newton–Raphson** que minimiza el residuo entre el tensor de tasa de deformación predicho por el modelo policristalino y el impuesto por el FEM, identificando además el régimen elástico.
3. **Algoritmo de contacto**, que introduce iteraciones adicionales para resolver las condiciones no lineales de contacto a escala macro.
4. Un segundo **Newton–Raphson global** empleado por Code_Aster para resolver la ecuación de equilibrio global $\mathbf{KU} = \mathbf{F}$.

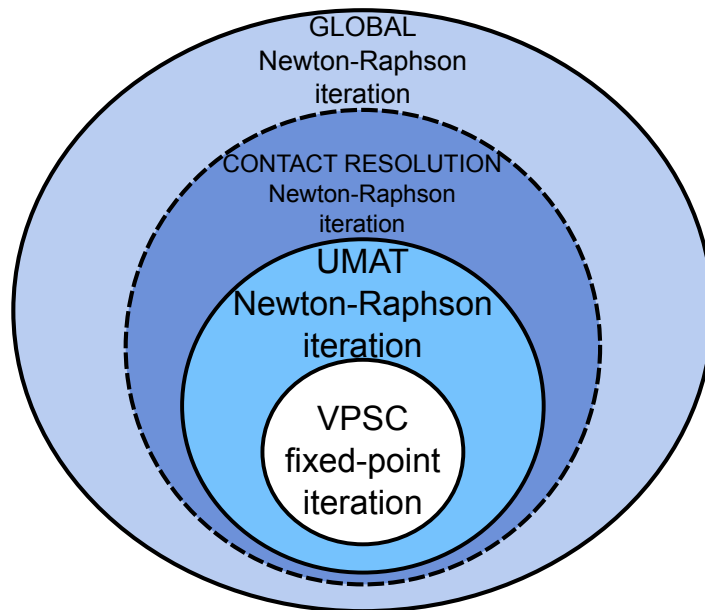


Figura 4.11: Esquema jerárquico de las iteraciones: el primer nivel corresponde a VPSC para encontrar la respuesta del policristal, el segundo nivel a la UMAT para determinar la descomposición elasto-plástica. En casos de contactos entre piezas se resolvería un Newton-Raphson y finalmente otro NR a nivel global

Tiempo de cómputo. Las simulaciones se ejecutaron en un nodo HPC con *AMD EPYC 7513 32-Core* (64 hilos, 2.6 GHz) empleando **MPI con 4 procesos**, distribuyendo las llamadas UMAT sobre los puntos de integración. Los principales resultados de performance fueron:

- Llamada independiente al solver VPSC (10^{-4} de tolerancia): $\approx$ **33 ms**.
- UMAT acoplada (10^{-6} de tolerancia) *por punto de integración*:
 - $\approx$ **38 ms** sin aceleración de convergencia (2 iteraciones Newton–Raphson).
 - $\approx$ **33 ms** con aceleración (1 iteración).
- A nivel global, la integración de un caso completo (incluyendo contacto y equilibrio global) requirió $\approx$ **4 min 3 s** (243 s) con criterio de convergencia global 10^{-3} por paso de tiempo.

Escalabilidad. Aunque el presente estudio utilizó sólo 4 procesos MPI, la independencia de las operaciones en cada punto de Gauss hace que la metodología sea naturalmente escalable, tanto en memoria compartida (OpenMP) como distribuida (MPI). Se prevé realizar estudios específicos de optimización y escalabilidad en trabajos futuros.

4.9 Plataforma de ensayos virtuales basada en VPSC–CAFEM

A lo largo de esta tesis se desarrolló e implementó una metodología de simulación por elementos finitos acoplada a un modelo policristalino de base micromecánica (interfaz VPSC–CAFEM). El propósito fundamental de este desarrollo es disponer de una *máquina de ensayos virtuales*, capaz de reproducir con fidelidad la respuesta de materiales policristalinos sometidas a condiciones representativas de servicio en reactores nucleares.

Esta plataforma numérica combina la resolución estructural del método de elementos finitos con un modelo constitutivo que describe explícitamente los mecanismos de deformación a nivel del grano. De este modo, integra en una misma herramienta los fenómenos de *daño inducido por irradiación*, *creep* y *crecimiento*, así como *efectos térmicos* de *creep* y *expansión*. La posibilidad de vincular directamente la microestructura con la respuesta macroscópica de un componente permite trasladar a escala industrial el conocimiento micromecánico, superando las limitaciones de los modelos puramente fenomenológicos.

4.9.1 Motivación y ventajas frente a modelos fenomenológicos

Los modelos constitutivos de tipo fenomenológico se utilizan ampliamente en la industria por su bajo costo computacional y su facilidad de calibración. Sin embargo, su validez queda restringida a los rangos de temperatura, tensión o dosis de irradiación para los que fueron ajustados. La interfaz VPSC–CAFEM, en cambio, parte de una descripción física de los mecanismos de deformación, lo que le permite extrapolar de manera controlada hacia otros escenarios de operación, y a lo largo de esta tesis quedó demostrada su factibilidad para ser extendida a otros fenómenos físicos, como por ejemplo la incorporación de modelos de endurecimiento asociados a la deformación plástica.

Este enfoque abre la posibilidad de calibrar modelos fenomenológicos de uso industrial a partir de resultados obtenidos con un modelo micromecánico de alta fidelidad. En otras palabras, la “máquina de ensayos virtuales” que constituye la interfaz VPSC–CAFEM puede generar curvas constitutivas de referencia —por ejemplo, leyes de *creep* o de crecimiento— que luego sirvan para ajustar modelos empíricos con márgenes de error acotados. De hecho, con la metodología

aquí presentada quedan sentadas las bases para extender la calibración a otros materiales de interés en la industria nuclear, como las aleaciones base níquel del tipo Inconel, siempre que se disponga de caracterizaciones previas de su textura cristalina y parámetros microestructurales.

4.9.2 Ensayos numéricos para la calibración

La calibración de modelos fenomenológicos puede apoyarse en una variedad de ensayos numéricos virtuales que reproducen configuraciones experimentales típicas. Entre ellos se destacan:

- **Ensayos de tracción uniaxial:** simulaciones de tracción simple que permite obtener curvas tensión–deformación directamente ligadas a la microestructura tal y como se hizo en Sec. 4.7.
- **Tubos sometidos a presión, temperatura e irradiación:** modelos tridimensionales de tubos de revestimiento o componentes equivalentes, expuestos a condiciones de presión interna, gradientes térmicos y flujo neutrónico. Estos casos de carga mixta son esenciales para calibrar leyes de fluencia y crecimiento bajo condiciones de servicio representativas. Casos como este se ven en la Sec. 5.3

En este contexto, una estrategia de calibración posible consiste en aprovechar los resultados de estudios micromecánicos específicos, como el *Estudio de Sensibilidad de los Efectos Térmicos* presentado en la Sec. 3.3.3. Dicha sección mostró cómo la combinación de creep térmico, expansión térmica e irradiación permite analizar, de manera controlada, la respuesta viscoplástica del tubo de revestimiento bajo distintas condiciones de carga. Estos ensayos virtuales constituyen un ejemplo representativo de cómo el modelo policristalino VPSC, incluso sin acoplamiento FEM, puede emplearse como herramienta rápida de predicción para generar curvas constitutivas de referencia bajo condiciones de borde arbitrarias. A partir de tales resultados, es posible derivar parámetros efectivos y validar modelos fenomenológicos a nivel estructural, cerrando así el ciclo multiescala propuesto en esta tesis.

4.10 Escalabilidad y aplicación en geometrías realistas

Otra fortaleza de la plataforma radica en su escalabilidad computacional. La implementación se diseñó para ejecutarse en entornos de cómputo de alto desempeño (clusters) y admite paralelización, lo que posibilita el análisis de mallas con millones de elementos finitos. Esta capacidad permite estudiar geometrías realistas de componentes de reactor (como ensamblajes completos de tubo–grilla) sin comprometer la descripción detallada de la respuesta microestructural.

4.11 Perspectivas de uso

La interfaz desarrollada se perfila así como una herramienta de doble impacto:

- En el ámbito académico y de I+D, posibilita explorar de manera controlada la influencia de texturas, dosis de irradiación, gradientes de temperatura y otras variables microestructurales.
- En la industria, ofrece un camino para alimentar y validar modelos fenomenológicos que, una vez calibrados, pueden aplicarse de forma rutinaria en análisis de diseño y evaluación de vida útil.

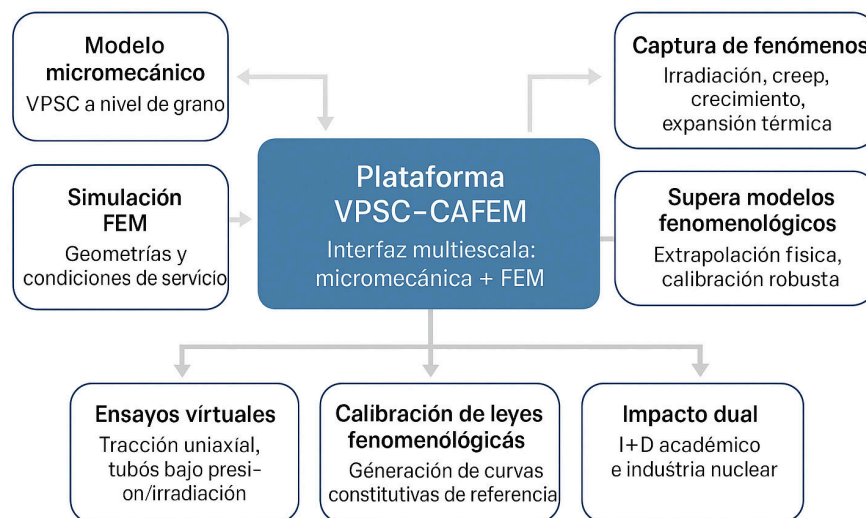


Figura 4.12: Esquema conceptual de la plataforma de *ensayos virtuales* basada en la interfaz VPSC–CAFEM. La metodología integra el modelo micromecánico de policristales con la resolución estructural por elementos finitos, permitiendo reproducir fenómenos de irradiación, creep, crecimiento y efectos térmicos en componentes de reactor nuclear.

En conjunto, la plataforma VPSC–CAFEM no sólo responde a la motivación original de esta tesis —unir la física de la microescala con las simulaciones estructurales de gran escala— sino que también abre la puerta a aplicaciones de mayor alcance, donde la combinación de precisión micromecánica y capacidad de cómputo masivo constituye una ventaja estratégica para el diseño de componentes nucleares (ver Fig. 4.12).

Capítulo 5

Validación del marco constitutivo y estudios de sensibilidad

5.1 Introducción

Este capítulo tiene un propósito *académico*: validar el marco constitutivo implementado y analizar su sensibilidad antes de abordar aplicaciones con geometrías y condiciones de borde propias del diseño industrial. Se comprueba la integración del modelo policristalino VPSC con el solver de elementos finitos *Code_Aster* (interfaz VPSC–CAFEM) y se cuantifica el efecto de la microestructura —en particular, de la textura— y de las condiciones mecánicas y térmicas en las predicciones.

En primer lugar se presenta la *estrategia de reducción de textura*, que permite representar la anisotropía del Zircaloy-2 con un número acotado de orientaciones, preservando los factores de Kearns y conteniendo el costo computacional sin sacrificar fidelidad física. Luego se desarrollan *casos de referencia* para crecimiento y *creep* bajo irradiación, comparando VPSC–CAFEM con VPSC–SA en modo autónomo para verificar la consistencia direccional de las deformaciones. A continuación se incorpora y valida el *creep* térmico mediante una prueba código a código y, por último, se contrasta la respuesta “sólo irradiación” frente a “irradiación + térmico” en términos de campos de deformación y tensión.

*Hasta aquí, los Capítulos 1–4 han presentado el contexto y la motivación del problema (Cap. 1), la base material y el rol de la textura en aleaciones HCP (Cap. 2), la formulación multiescala desde el cristal simple hasta el FEM —incluidos los modelos de irradiación y temperatura— (Cap. 3) y la implementación de la metodología VPSC–CAFEM en Code_Aster, con su validación inicial y análisis de convergencia (Cap. 4). En este Capítulo 5 estas herramientas se aplican a **validacio-***

nes académicas y a estudios de sensibilidad microestructurales y mecánicos que consolidan la exactitud y la robustez del marco constitutivo. *Esto prepara* el terreno para que, en el Capítulo 6, la metodología se utilice en una **aplicación industrial** dedicada a la interacción tubo–grilla en conjuntos combustibles.

5.2 Estrategia de reducción de la textura cristalina

Las simulaciones FEM con respuesta a nivel de grano son costosas cuando la ley constitutiva se evalúa con VPSC. Para contener el costo sin perder fidelidad física, se adopta una *reducción de textura*: se selecciona el mínimo conjunto de orientaciones cristalográficas que reproduce, dentro de un desvío $\lesssim 10\%$, la respuesta del agregado. Siguiendo los lineamientos de [Patra and Tomé \(2017\)](#), se emplean texturas reducidas tanto para el tubo de revestimiento como para la grilla, preservando los *factores de Kearns*¹ de las texturas originales.

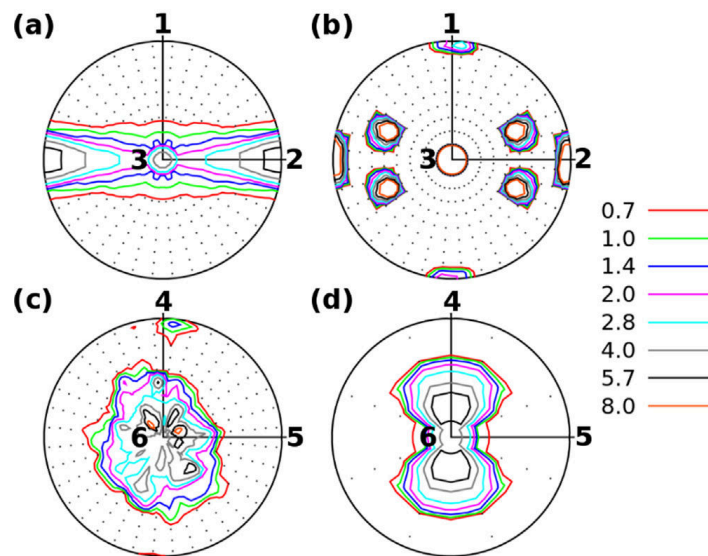


Figura 5.1: Figuras de polos basales: (a) **tubo** — textura completa (1144 orientaciones), (b) **tubo** — textura reducida (7 orientaciones), (c) **grilla** — textura completa (2428 orientaciones), (d) **grilla** — textura reducida (13 orientaciones). Las imágenes de las **texturas completas** (a) y (c) son extraídas de [Patra and Tomé \(2017\)](#). Direcciones del tubo: axial (1), circunferencial (2) y radial (3). Direcciones de la grilla: laminado (4), transversal (5) y normal (6).

Criterio y procedimiento de reducción. En la práctica no existe un método determinista único para generar texturas reducidas “óptimas”. En esta tesis se adoptó un esquema de muestreo y

¹En circonio HCP, los factores de Kearns A , B y C cuantifican la fracción de normales a planos basales $\langle 0001 \rangle$ orientadas dentro de un cono de semiángulo 30° alrededor de tres direcciones de referencia del componente (p. ej., radial R , circunferencial/aro T y axial/longitudinal L en tubos), cumpliendo $A + B + C = 1$. Valores altos de A implican mayor proporción de planos basales paralelos a la superficie del tubo. Los factores se estiman a partir de figuras de polos o del tensor de orientación de segundo orden.

validación a posteriori, con la siguiente secuencia:

- (I) A partir de la textura completa (XRD/EBSD), se construye la ODF o la lista de orientaciones en *MTEX*².
- (II) Se selecciona aleatoriamente (con semilla fija para reproducibilidad) un subconjunto de N orientaciones y sus pesos, manteniendo la normalización $\sum_g w^g = 1$. En la medida de lo posible, el muestreo se realiza de forma estratificada por sectores de las figuras de polos para evitar sesgos.
- (III) El subconjunto propuesto se exporta a formato compatible con VPSC y se evalúan los factores de *Kearns* con la utilidad `po1e8`³, que genera el archivo `text_facts.dat` con los coeficientes de segundo orden.
- (IV) Se comparan los factores objetivo $\{F_i^{\text{full}}\}$ (textura completa) con los obtenidos para la textura reducida $\{F_i^{\text{red}}\}$ y se acepta el subconjunto si

$$\max_i \frac{|F_i^{\text{red}} - F_i^{\text{full}}|}{F_i^{\text{full}}} \leq 0,10.$$

De lo contrario, se re-muestrea y repite el proceso.

- (v) (Validación opcional) Se comprueba que la respuesta mecánica promedio de VPSC para trayectorias representativas (p. ej., tracción axial, circunferencial y corte) permanezca dentro del desvío aceptado.

Este flujo refleja la práctica reportada por el investigador que desarrolló la estrategia original: uso de *MTEX* para construir y muestrear la textura a partir del archivo completo, seguido de la verificación de los factores de *Kearns* con `po1e8`, que entrega `text_facts.dat` con los coeficientes de segundo orden (*comunicación personal, A. Patra*).

En el tubo de Zircaloy-2 trabajado en frío, la textura original (1144 orientaciones) se reduce a 7; para la grilla, de 2428 a 13 (ver Fig.5.1 b y c). La reducción se realiza imponiendo que los factores de Kearns —segundos momentos de los polos basales—

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

²MTEX es un *toolbox* de MATLAB de código abierto para el análisis y la visualización de texturas cristalográficas; permite procesar datos de EBSD, calcular y representar funciones de distribución de orientación (ODF) y figuras de polos, así como evaluar factores de Kearns y otras métricas de anisotropía en materiales policristalinos.

³`po1e8` es una utilidad incluida en el paquete VPSC que calcula y representa figuras de polos, tensores de textura y factores de *Kearns* a partir de una lista de orientaciones cristalográficas.

permanezcan equivalentes entre la textura completa y la reducida. Para las texturas utilizadas aquí, los valores del tubo son $F_H = 0,4244$, $F_R = 0,5472$, $F_A = 0,0284$, y para la grilla $F_{Ro} = 0,1907$, $F_{Tr} = 0,1102$, $F_{No} = 0,6991$, consistentes con [Patra and Tomé \(2017\)](#) y la literatura de referencia. En la simulación, la textura del tubo se expresa en {**Axial**, **Hoop**, **Radial**} y se rota a los ejes del laboratorio en cada elemento de la malla de CAFEM; de modo análogo, la textura de la grilla definida en {**Rolling**, **Transverse**, **Normal**} se transforma a los ejes del laboratorio en los elementos correspondientes de cada lado de la grilla (véase Fig. 5.1).

5.3 Caso de Referencia/Validación: Creep y Crecimiento bajo irradiación

Antes de aplicar la herramienta desarrollada a configuraciones complejas, resulta fundamental verificar que el marco numérico reproduce de manera consistente resultados ya reportados en la literatura. En este sentido, el modelo cristalográfico de crecimiento y creep bajo irradiación implementado en esta tesis sigue de manera directa la formulación desarrollada por [Patra et al. \(2017\)](#).

En su trabajo original, los autores integraron este modelo dentro del marco VPSC y lo acoplaron al código comercial ABAQUS, realizando una calibración sistemática de parámetros a partir de datos experimentales de irradiación en Zircaloy-2 ([Holt et al., 1996](#)). En particular, mostraron que la formulación es capaz de reproducir tanto la evolución anisotrópica de la deformación (crecimiento positivo en direcciones prismáticas y negativo en la dirección c) como las tendencias de creep bajo irradiación observadas en ensayos de referencia. De este modo, el modelo ya se encuentra validado a nivel constitutivo frente a resultados experimentales relevantes para aplicaciones nucleares.

La principal diferencia de este trabajo con respecto a [Patra et al. \(2017\)](#) radica, por un lado, en el entorno de implementación: mientras que ellos emplearon ABAQUS como plataforma de elementos finitos, aquí se desarrolló una interfaz abierta con Code_Aster, lo que asegura reproducibilidad y carácter *open-source* sin alterar la base física ni los parámetros constitutivos previamente calibrados. Por otro lado —y de forma sustantiva—, la formulación presentada *acopla explícitamente los fenómenos térmicos*, incorporando expansión térmica anisótropa y *creep* térmico (dependiente de T) junto con los efectos de irradiación, de modo de resolver escenarios termo-mecánicos representativos.

En síntesis, la estrategia seguida no persigue una nueva calibración del modelo, sino verificar que la implementación en Code_Aster reproduce coherentemente los comportamientos reportados en la literatura y, además, *extiende* su alcance al régimen termo-mecánico acoplado. Con

este objetivo, a continuación se presentan casos de validación en geometrías simplificadas y bajo condiciones de carga representativas, diseñados para comprobar la solidez del acoplamiento VPSC–Code_Aster y su capacidad para replicar las predicciones de referencia.

Cabe aclarar que el mecanismo de creep bajo irradiación considerado en este estudio se rige por la ley cristalográfica introducida en el Capítulo 3, ecuación 3.34. En dicho modelo, la tasa de deslizamiento inducida por irradiación es lineal con la tensión resuelta sobre cada sistema y depende exclusivamente de la densidad de dislocaciones lineales disponibles, sin involucrar explícitamente la densidad de lazos de dislocación. Esta formulación refleja el carácter volumétricamente conservativo del creep bajo irradiación y es consistente con observaciones experimentales que indican una relación aproximadamente lineal entre la tasa de deformación efectiva, la tensión aplicada y la tasa de dosis.

La geometría utilizada es la correspondiente a un cuarto de tubo, que emula el tubo de revestimiento. En este caso, la textura reducida (5.1 b) caracteriza el comportamiento del tubo. La malla del tubo de revestimiento (ver Fig. 5.2) tiene un diámetro exterior de 11,094 mm y un diámetro interior de 10,134 mm, con una longitud de 27,2 mm. La geometría se discretizó con 160 elementos hexaédricos, 20 a lo largo de la dirección axial y 8 en la dirección circunferencial, cada uno conteniendo 8 puntos de Gauss. La Fig. 5.2 muestra los puntos de Gauss, lo que resulta en una distribución aparente de 40 hexaedros axiales $\times$ 16 circunferenciales.

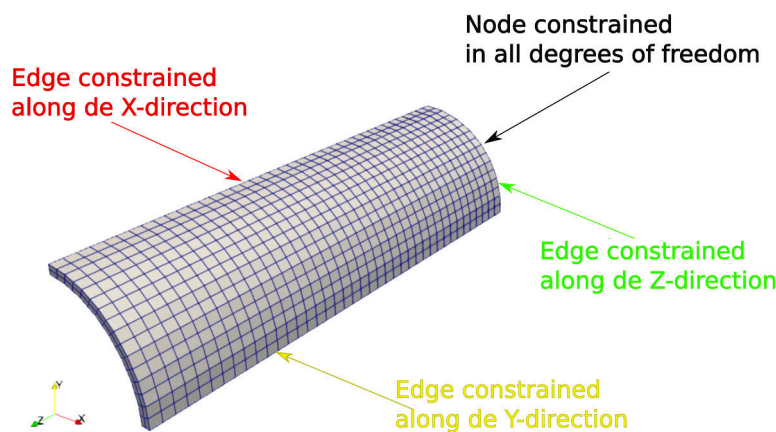


Figura 5.2: Puntos de Gauss para la geometría de un cuarto de tubo de recubrimiento.

Como condiciones de borde mecánicas, se aplicaron restricciones axisimétricas: los bordes paralelos al eje del tubo se restringieron en X y Y ; el desplazamiento axial se anuló en un extremo y se dejó libre en el opuesto para evidenciar el crecimiento por irradiación. Para evitar movimiento de cuerpo rígido, dos nodos en la base, ubicados en la semircircunferencia central, se restringieron en todos los grados de libertad. Esta estrategia es estándar en modelado y asegura estabilidad numérica (véase, p. ej., (Patra and Tomé, 2017)). No se impusieron restricciones

adicionales, permitiéndose la expansión/contracción radial en toda la estructura (Fig. 5.2).

Los parámetros de material se tomaron de (Patra and Tomé, 2017; Patra et al., 2017) y se muestran en la Tabla 5.1. El tubo se irradió a una tasa de $3,6 \times 10^{-4} \text{ dpa h}^{-1}$ durante 480 pasos de 111,12 h cada uno, con presión interna suficientemente pequeña como para suponer carga externa nula y aislar el crecimiento por irradiación.

Tras la simulación de una irradiación acumulada de 20 dpa, la distribución espacial de la deformación debido al crecimiento inducido por irradiación se ilustra en la Fig. 5.3(a)–(c). La Fig. 5.3 se compone de tres componentes distintos, designados como Radial, Circunferencial (Hoop) y Axial, respectivamente, tomando el tubo de revestimiento como punto de referencia. Esta descomposición permite un análisis detallado del comportamiento anisotrópico del material bajo irradiación, destacando la dependencia direccional de los cambios dimensionales dentro de la estructura policristalina.

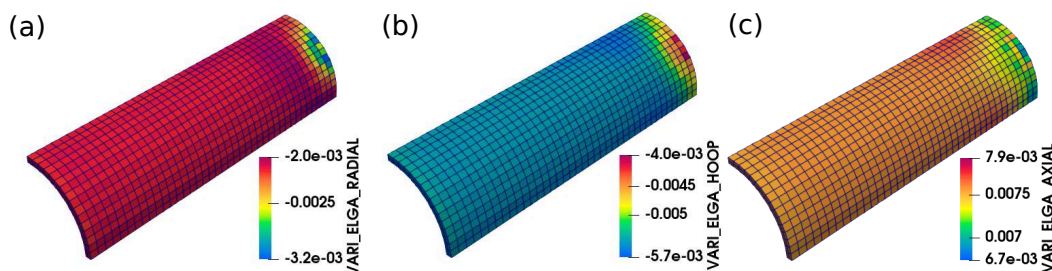


Figura 5.3: Distribution of (a): Radial, (b): Hoop, and (c): Axial strains in the cladding after irradiation to 20 dpa.

En contraste, se observa una distribución uniforme de la deformación a lo largo de la dirección circunferencial. Este fenómeno ocurre como consecuencia de las condiciones de borde simétricas, junto con la observación de que el único agente actuante es la irradiación, en ausencia de cargas externas. Como resultado de la textura del tubo, el crecimiento positivo ocurre en la dirección axial bajo la influencia de la irradiación. Conforme al principio de conservación de volumen, las deformaciones en las direcciones radial y circunferencial son negativas.

Se seleccionó un punto de Gauss en la mitad del tubo para validar que los resultados obtenidos por VPSC-CAFEM son consistentes con los predichos por VPSC-SA (ver Fig. 5.4). Esta figura muestra la evolución de las deformaciones Radial, Circunferencial y Axial en función de la dosis de irradiación. Se observa que ambas predicciones (VPSC-CAFEM y VPSC-SA) presentan una buena concordancia. La Fig. 5.4 también incluye datos experimentales reportados por Holt et al. (1996) para comparación. Las deformaciones de crecimiento medidas a 550 K se muestran con símbolos de estrella, mientras que aquellas a 561 K se representan con símbolos cuadrados.

Para verificar la predicción del creep por irradiación, se realiza una comparación similar entre

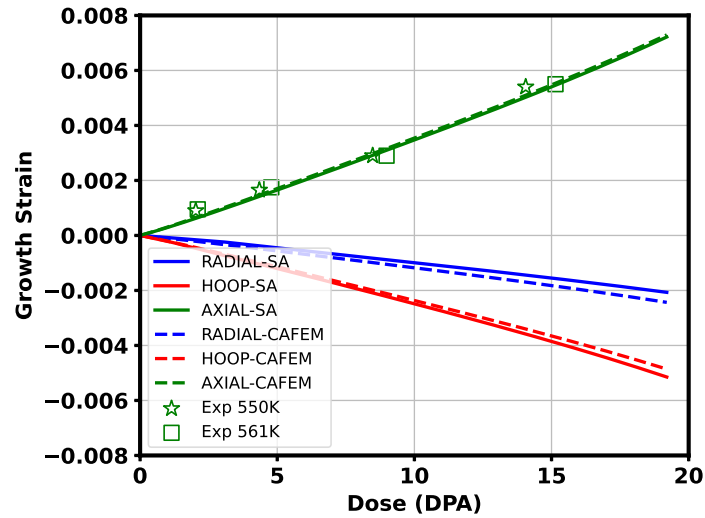


Figura 5.4: Evolución de las deformaciones de crecimiento (en ausencia de esfuerzos aplicados).

las predicciones de VPSC-CAFEM y VPSC-SA, esta vez bajo diferentes condiciones de carga axial. La Fig. 5.5 muestra la evolución de la deformación axial en un punto de Gauss representativo para tensiones aplicadas de 100 MPa y 200 MPa. La deformación total resulta de la acción simultánea del crecimiento inducido por irradiación y el creep por irradiación. Aunque el componente de crecimiento es independiente del estado tensional, contribuye a la deformación total e induce esfuerzos internos debido a incompatibilidades a nivel de grano. Estos esfuerzos, junto con las cargas externas aplicadas, activan el mecanismo de creep por irradiación. Por lo tanto, ambos mecanismos operan de manera acoplada durante la simulación.

Como se presentó en §3.2.3, a escala microscópica se adopta la formulación de crecimiento por irradiación de (Patra et al., 2017), calibrada para Zircaloy-2 con sólo dos parámetros: la fracción de defectos puntuales que recombinan en cascadas (f_r) y la fracción de intersticiales que forman cúmulos (f_c). A modo ilustrativo, un ajuste a 550 K arroja $f_r = 0,97$ y $f_c = 0,13$, en buena concordancia con simulaciones atomísticas (p. ej., (Barashev et al., 2015): $f_r \approx 0,9$, $f_c \approx 0,2$). La estrategia de calibración es transferible a otros materiales HCP, lo que destaca la flexibilidad del modelo para capturar mecanismos de deformación inducidos por irradiación.

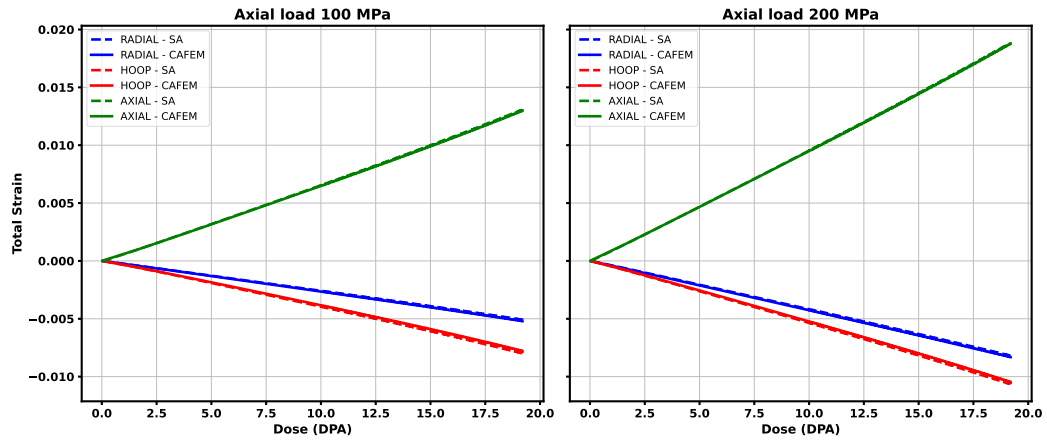


Figura 5.5: Comparison of total (growth and creep) strain under irradiation for axial loads of 100 MPa and 200 MPa.

Cuadro 5.1: Model parameters for Zircaloy-2, from [Patra et al. \(2017\)](#) and [Patra and Tomé \(2017\)](#).

Parameter	Value	Meaning
C_{11}, C_{22}, C_{33}	143.5, 143.5, 164.9	Elastic constants in GPa (assumed to be the same as that for pure Zr). Values taken from Simmons (1965) and Kocks et al. (2000) .
C_{12}, C_{13}, C_{23}	72.5, 65.4, 65.4	
C_{44}, C_{55}, C_{66}	32.1, 32.1, 35.5	
f_r	0.97	Fraction of point defects that recombine during the cascade
f_{ic}	0.13	Fraction of interstitials that form clusters
B	$5,0 \times 10^{-5} \text{ MPa} \cdot \text{dpa}^{-1}$	Crystallographic irradiation creep compliance
p_{ref}	$2,26 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$	Weighting factor for line dislocation density in irradiation creep model
$b^i, j = \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$	$3,0 \times 10^{-10} \text{ m}$	Magnitude of Burgers vector along the prismatic directions
$b^i, j = c$	$5,0 \times 10^{-10} \text{ m}$	Magnitude of Burgers vector along the basal direction

5.3.1 Efecto de la textura en el crecimiento bajo irradiación

Para cuantificar la influencia de la textura sobre el crecimiento bajo irradiación, se compararon dos agregados policristalinos dentro del marco VPSC–CAFEM: (i) Zircaloy-2 con la *textura reducida* del tubo de revestimiento (Sección 5.2) y (ii) un material con *textura aleatoria*, generado a partir de 200 orientaciones por policristal. En ambos casos se emplearon los mismos parámetros constitutivos de la Tabla 5.1 y un historial de irradiación equivalente al del caso de referencia (Subsección 5.3), manteniendo carga externa nula para aislar el fenómeno de crecimiento.

La Figura 5.6 compara las deformaciones de crecimiento en las direcciones radial, circunferencial y axial en función de la dosis (dpa). Tal como se espera desde la física subyacente y la estadística de orientaciones, el agregado con textura aleatoria presenta una deformación neta de crecimiento prácticamente nula (las pequeñas desviaciones se asocian a dispersión numérica finita en el muestreo de orientaciones). En cambio, el material texturado (Zircaloy-2) exhibe crecimiento positivo en la dirección axial y contracción en las direcciones radial y circunferencial,

en concordancia con la anisotropía HCP del Zr y con los resultados reportados en la literatura.

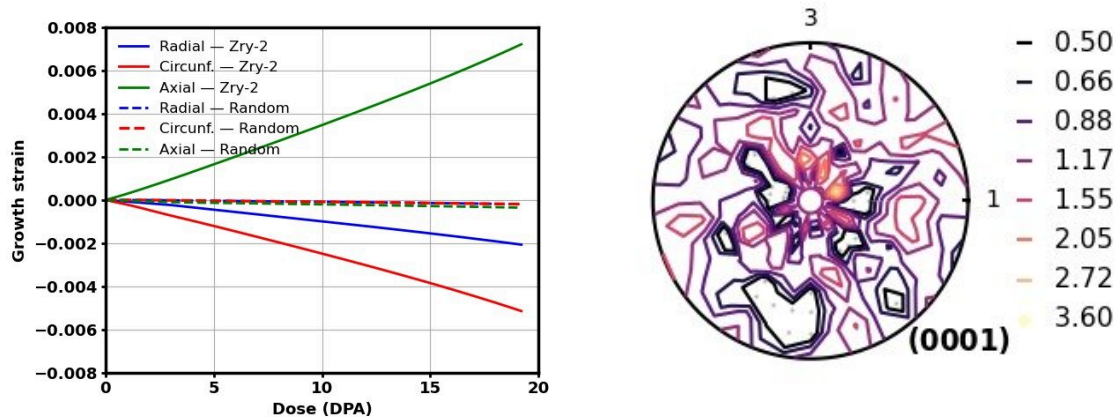


Figura 5.6: Crecimiento bajo irradiación (componentes radial, circunferencial y axial) para (a) Zircaloy-2 con textura reducida y (b) agregado con textura aleatoria. A la izquierda: figura de polo basales de textura random con 200 orientaciones. Parámetros utilizados: Tabla 5.1.

5.3.2 Efecto de la textura en el creep bajo irradiación

Se analizó la deformación axial acumulada hasta 20 dpa bajo cargas axiales constantes para los dos agregados mencionados: textura reducida del tubo de revestimiento (Sección 5.2) y textura aleatoria. La contribución de crecimiento bajo irradiación es independiente del estado tensional; por lo tanto, el incremento con la carga se debe exclusivamente al creep por irradiación (ver Ec.3.34). El modelo de creep adoptado implica una relación aproximadamente lineal con la tensión de corte resuelta sobre los sistemas activos; en consecuencia, al aumentar la carga axial se incrementa la deformación axial total.

La Figura 5.7 muestra la evolución de la deformación axial para dos niveles de tensión representativos. Para la misma carga aplicada, el material con textura de tubo de revestimiento presenta mayor deformación axial que el agregado aleatorio. Esta diferencia se atribuye a la mayor fracción de sistemas prismáticos favorablemente orientados en dirección axial en el caso texturado, lo que incrementa la tasa efectiva de creep por irradiación.

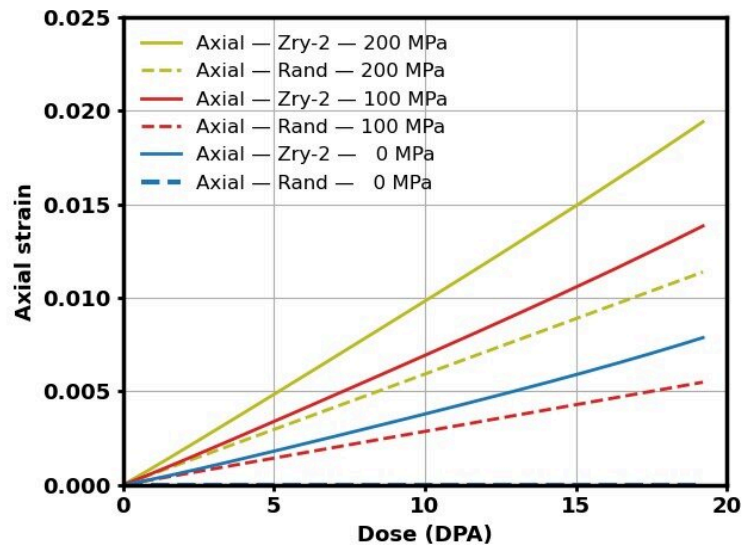


Figura 5.7: Efecto de la textura en el creep bajo irradiación: deformación axial hasta 20 dpa para dos niveles de tensión axial. Las líneas sólidas corresponden a Zircaloy-2 con textura reducida y las líneas discontinuas al agregado con textura aleatoria.

5.4 Caso de Referencia: Creep Térmico

El comportamiento de creep térmico analizado en las siguientes Secciones se describe mediante la ley cristalográfica introducida en la Sección 3.2.4, ecuación 3.36. En dicha formulación, la tasa de deslizamiento por creep térmico depende de una ley de potencia con respecto a la tensión resuelta, caracterizada por un exponente de sensibilidad a la tasa n , y de una tensión crítica resuelta τ_{thres}^s asociada a cada sistema de deslizamiento.

En este trabajo se adopta $n = 4$, valor consistente con el intervalo $3,8 < n < 4,2$ reportado por Christodoulou (Christodoulou et al., 2002) y con el rango $3,4 < n < 4,6$ recopilado por Wang et al. (Wang et al., 2013) para aleaciones de circonio. Las tensiones críticas resueltas empleadas son $\tau_{\text{thres}}^s = 0,100, 0,111$ y $0,300$ GPa para los sistemas prismático, basal y piramidal, respectivamente.

Se utilizó un caso de referencia para verificar la implementación del fenómeno del creep térmico en el acople VPSC-CAFEM. Esto implicó una comparación código a código contra los resultados obtenidos con el código VPSC-SA. Las condiciones del caso de referencia se resumen en la Tabla 5.2. La simulación se realizó empleando un único elemento finito tridimensional de ocho nodos bajo esfuerzo constante. Los resultados de la comparación entre VPSC-CAFEM y VPSC-SA se muestran en la Figura 5.8.

En consecuencia, los resultados confirman que el módulo de creep térmico se encuentra correctamente incorporado dentro de la interfaz VPSC-CAFEM. Esta verificación, sumada a la

Cuadro 5.2: Condiciones de simulación para creep térmico: Validación código a código.

Descripción	Temp. (K)	Esfuerzo (MPa)	Textura
Fluencia térmica	523	10 (22)	(0,0,0)*

*Ángulos de Euler: rotación alrededor de Z, luego X, y finalmente Z.

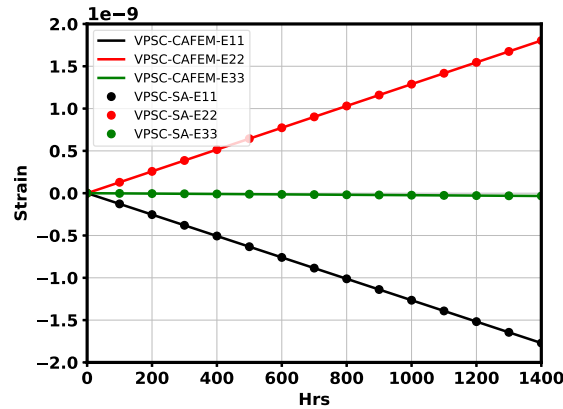


Figura 5.8: Deformación térmica a 523 K para un monocristal con 10 MPa aplicados en la dirección 22. Los símbolos representan los resultados del VPSC autónomo; las líneas continuas corresponden a las predicciones VPSC-CAFEM.

validación del crecimiento y creep bajo irradiación, brinda una base sólida para aplicar el marco numérico al análisis de configuraciones más complejas de interacción tubo–grilla.

5.5 Distribución de tensiones y deformaciones en el tubo de revestimiento: irradiación vs. irradiación + térmico

La Fig. 5.9 muestra la deformación total en las tres direcciones principales (AXIAL en verde, TANGENCIAL en rojo y RADIAL en azul) como función de la dosis para cuatro niveles de tensión nominal (50, 100, 150 y 200 MPa). El panel izquierdo considera únicamente fenómenos inducidos por irradiación (creep + growth), mientras que el derecho incluye además *thermal creep* y *thermal expansion* a $T = 523$ K con rampa $\dot{T} = 1,8 \times 10^{-3}$ K/h.

Se observa que, a igualdad de dosis y tensión, la inclusión de mecanismos térmicos incrementa la magnitud de la deformación axial y acentúa la respuesta anisótropa. La diferencia entre paneles crece con la tensión aplicada, en línea con la ley potencia del *thermal creep* (Ec. 3.36); en cambio, la *thermal expansion* aporta un término libre de tensión esencialmente independiente de la carga. En el rango analizado, el aumento relativo de deformación axial es más marcado para 150–200 MPa, evidenciando la fuerte sensibilidad del *thermal creep* al estado tensional. Todas las simulaciones emplean la **textura reducida** del tubo de Zircaloy-2 mostrada en Sec. 5.2.

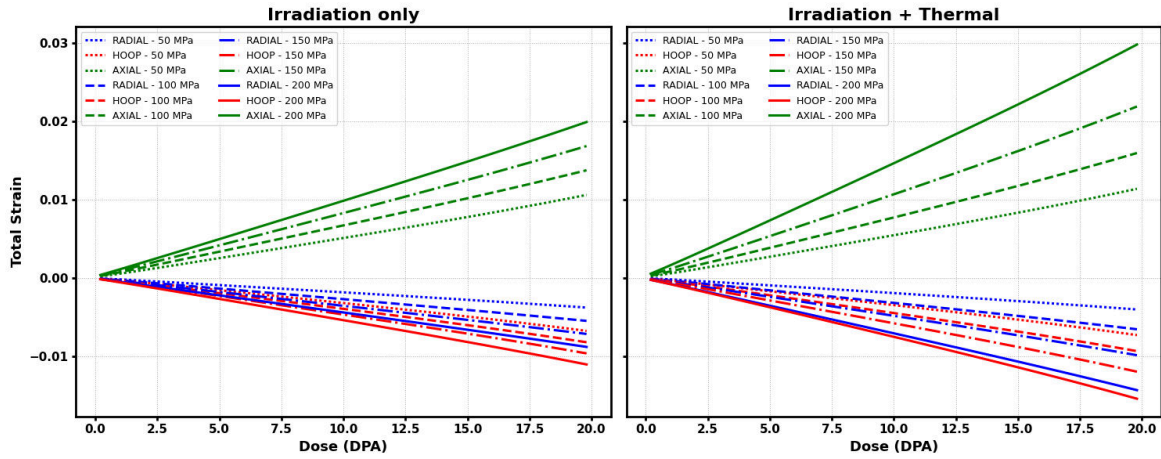


Figura 5.9: Anisotropía de la deformación total vs. dosis (DPA) para 50, 100, 150 y 200 MPa. Izquierda: sólo irradiación (creep + growth). Derecha: irradiación + *thermal creep* + *thermal expansion* a 523 K con $\dot{T} = 1,8 \times 10^{-3}$ K/h. Colores: verde (AXIAL), rojo (TANGENCIAL), azul (RADIAL). La contribución del *thermal creep* —dependiente de la tensión— incrementa la deformación axial y la diferencia entre paneles se vuelve mayor a medida que aumenta la tensión.

En la figura 5.10 se compara la respuesta bajo carga axial (dirección Z) para 100, 150 y 200 MPa. Las dos primeras filas muestran la deformación equivalente de von Mises ε_{VM} : (i) sólo fenómenos inducidos por irradiación y (ii) irradiación + efectos térmicos a $T = 523$ K con $\dot{T} = 1,8 \times 10^{-3}$ K/h. Al incorporar los mecanismos térmicos, ε_{VM} aumenta sistemáticamente—en especial en la componente axial (ver Fig. 5.9)—y la diferencia crece con la tensión aplicada, en concordancia con la ley potencia del *thermal creep* dependiente de la tensión cortante resuelta (Ec. 3.36); la *thermal expansion* añade, además, una deformación libre de tensión dependiente exclusivamente de T . En las dos últimas filas de la figura 5.10 se presenta la tensión equivalente de von Mises σ_{VM} : al incluir los efectos térmicos se observa un aliviado de tensiones respecto del caso sólo irradiado, más marcado a mayores tensiones. Esta relajación se explica por la activación del deslizamiento prismático $\langle a \rangle$ en la microestructura HCP, con planos mayormente alineados con la carga axial y umbrales de tensión de corte más bajos (Eq. 3.36), lo que facilita la acomodación plástica.

Cabe destacar que, a nivel de cristal simple, la expansión térmica en aleaciones de Zr es anisotrópica y posee una componente dilatacional. Sin embargo, el formalismo VPSC empleado en este trabajo se restringe a deformaciones plásticas deviatorias, filtrando explícitamente la componente volumétrica. En consecuencia, la expansión térmica no se incorpora dentro del cálculo viscoplastico interno del VPSC.

En el marco del acople VPSC–CAFEM, la expansión térmica se introduce como una contribución adicional a la deformación total a nivel del punto de integración del elemento finito, de manera consistente con el tratamiento elástico y térmico descrito en la Sección 4.6. Este enfoque

constituye una primera aproximación que permite capturar el efecto macroscópico dominante de la expansión térmica, manteniendo la coherencia con las hipótesis fundamentales del modelo VPSC.

Un tratamiento completamente consistente de la expansión térmica anisotrópica a nivel cristalográfico requeriría una extensión del formalismo VPSC para incluir deformaciones dilatacionales, lo cual excede el alcance de la presente tesis.

Los resultados de este capítulo demuestran la robustez y versatilidad del acople VPSC–CAFEM para capturar, dentro de un mismo marco constitutivo, los mecanismos de creep, crecimiento bajo irradiación y expansión térmica. La formulación implementada garantiza la coherencia entre las escalas micro y macroscópica, preservando la anisotropía y la sensibilidad a los parámetros materiales, y constituye la base para analizar configuraciones estructurales de mayor complejidad. En el siguiente capítulo se aplica este marco multiescala al estudio industrial de la interacción tubo–grilla en conjuntos combustibles.

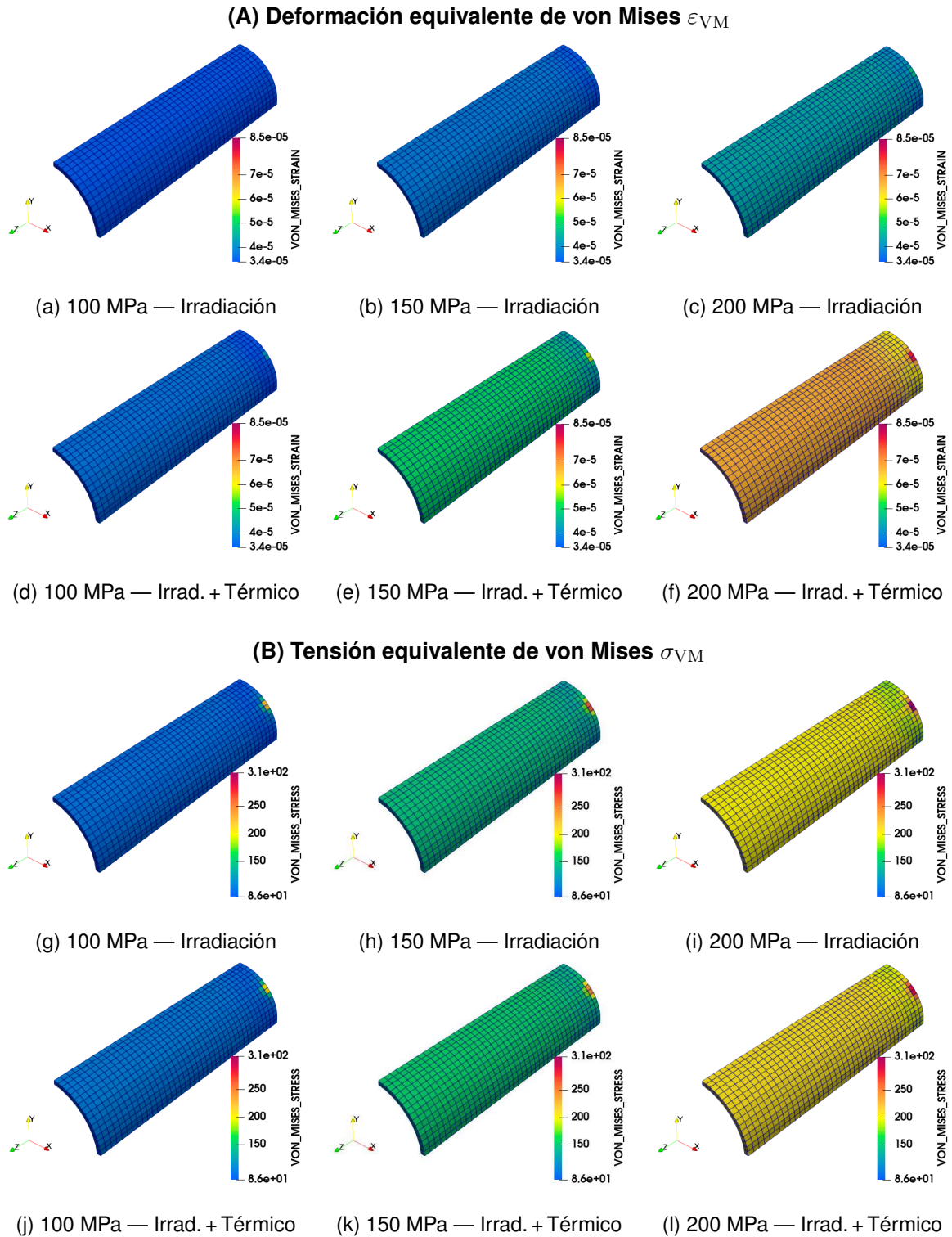


Figura 5.10: Respuesta bajo carga axial (dirección Z). (A) ε_{VM} : fila superior sólo irradiación (creep + growth); fila inferior irradiación + *thermal creep* + *thermal expansion* a $T = 523$ K con $\dot{T} = 1,8 \times 10^{-3}$ K/h. (B) σ_{VM} : mismos casos. Columnas: 100, 150 y 200 MPa. Los mecanismos térmicos incrementan ε_{VM} y alivian σ_{VM} , con efecto creciente al aumentar la tensión aplicada.

Capítulo 6

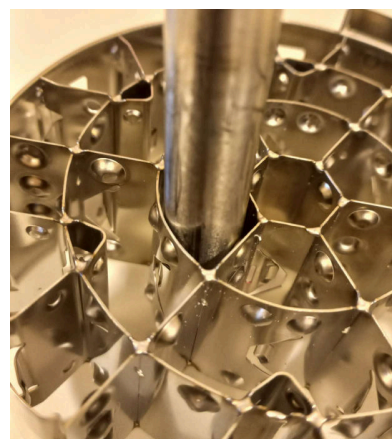
Aplicación industrial: interacción tubo–grilla en conjuntos combustibles

6.1 Introducción

En este capítulo se aplica el marco VPSC–CAFEM desarrollado en los Capítulos 4 y 5 a un caso de **interés industrial**: la interacción tubo–grilla (Fig. 6.1b) en conjuntos combustibles de PWR bajo historiales representativos de irradiación y efectos térmicos. El objetivo es explicar, con base microestructural, cómo la textura cristalográfica y los mecanismos de deformación a nivel de grano condicionan la evolución de la holgura de contacto (*clearance*, *CLR*) y la redistribución local de tensiones y deformaciones a escala de componente. *Hasta aquí, los Capítulos*



(a) Grilla espaciadora flexible (CONUAR, 2025).



(b) Conjunto tubo-grilla.

Figura 6.1: Separador elástico utilizado en el conjunto combustible. (a) Imagen de referencia adaptada de CONUAR (2025). (b) Fotografía tomada por el autor.

4 y 5 han mostrado que: (i) el Capítulo 4 implementa y valida la interfaz VPSC–CAFEM en CODE_ASTER, estableciendo el flujo de cálculo, la gestión de marcos locales, el uso de módulos tangentes consistentes y el desempeño numérico; (ii) el Capítulo 5 consolida la validez académica del marco mediante casos de referencia y estudios de sensibilidad —crecimiento y *creep* bajo irradiación, *creep* y expansión térmica, impacto de la textura y su reducción—. Sobre esas bases, este Capítulo 6 traslada la metodología a una **plataforma de simulación industrial** con contacto no lineal para estudiar la cinemática de holguras y juego, la relocalización de zonas de apoyo y la trayectoria de presiones normales y tangenciales asociadas al riesgo de *fretting*.

La organización es la siguiente. En § 6.2 se plantea el problema industrial y la plataforma de simulación; la § 6.3 describe la configuración del modelo y la § 6.4 establece las condiciones de borde del conjunto tubo–grilla. La § 6.5 evalúa los efectos de la plasticidad cristalina sobre la respuesta macroscópica. Las § 6.6–6.8 analizan la formación y evolución del *CLR* en condiciones nominales, su sensibilidad a la alineación de texturas y el efecto de invertir presiones de trabajo. En § 6.9 se incorporan los fenómenos térmicos y en § 6.10 se presenta un análisis comparativo entre irradiación pura y el caso acoplado irradiación + térmico. Finalmente, las § 6.11–6.13 examinan la distribución espacial de tensiones y deformaciones, la influencia de los coeficientes elásticos y los límites actuales de escalamiento.

Con esta estructura, el capítulo integra la microfísica de la deformación con la respuesta estructural del conjunto, aporta criterios cuantitativos para el diseño y prepara el cierre del manuscrito en el Capítulo 7.

6.2 Planteo del problema industrial y plataforma de simulación

El problema industrial que motiva este capítulo es la evolución del contacto vaina–grilla en ensamblajes PWR y su incidencia sobre la integridad del combustible. Bajo irradiación, la vaina de Zircaloy desarrolla deformaciones anisotrópicas que modifican la holgura con los *dimples/springs* de la grilla; como consecuencia, cambia la topología del contacto, se relocalizan los puntos de apoyo y se redistribuyen las presiones locales. Este reacomodamiento —incluida la aparición de zonas de *pérdida de contacto*— condiciona el nivel de soporte efectivo, y en presencia de excitaciones hidráulicas del refrigerante puede favorecer mecanismos de *fretting* y degradación funcional del conjunto (Choi et al., 2004; Fidleris, 1988; Kim et al., 2008; Kim and Suh, 2009; Yan et al., 2011). Más allá de describir un estado instantáneo, el interés práctico reside en predecir con base física *cuándo, dónde y cómo* se relocaliza el contacto a lo largo de la vida operativa del combustible, y qué trayectorias de presión normal y régimen tangencial

(adherencia/deslizamiento) emergen de dicha evolución.

En este marco, la pregunta guía es: *dada una historia operativa representativa, cómo evoluciona la holgura vaina–grilla y cuál es la trayectoria de las presiones de contacto —en magnitud y localización— que condiciona el riesgo de fretting?* La respuesta exige conectar la cinemática impuesta por la microestructura (textura y mecanismos a nivel de cristal, ya establecidos) con la respuesta estructural a escala de componente, en un dominio representativo del contacto vaina–*dimple* de una grilla industrial, modelado con contacto no lineal.

El análisis se considera satisfactorio si permite, de manera consistente con la evidencia reportada, (i) reproducir las tendencias de evolución anisotrópica de la deformación en Zircaloy irradiado, (ii) predecir la emergencia y relocalización temporal de zonas de *pérdida de contacto* y de máximos de presión, y (iii) cuantificar la separación en el par vaina–grilla con métricas comparables a las discutidas en [Choi et al. \(2004\)](#); [Fidleris \(1988\)](#); [Kim et al. \(2008\)](#); [Kim and Suh \(2009\)](#); [Yan et al. \(2011\)](#). Sobre esta base, la sección (§6.9) incorpora, cuando corresponde, la contribución del *creep* térmico y la expansión térmica en Zircaloy-2 para completar el panorama operativo sin redundancias con lo ya expuesto.

6.3 Configuración de la simulación

La configuración geométrica y las condiciones de borde adoptadas en las simulaciones reflejan la arquitectura patentada del conjunto *tubo–grilla* de los elementos combustibles utilizados en PWR. En este sistema, las grillas espaciadoras flexibles aseguran la alineación y soporte del tubo de revestimiento, permitiendo al mismo tiempo su libre dilatación térmica y la transferencia mecánica de cargas durante la operación. La Figura 6.1 ilustra estos componentes: en (a) se observa la grilla espaciadora individual, mientras que en (b) se muestra el conjunto completo tubo–grilla, que constituye la unidad básica de análisis empleada en este trabajo.

El estudio numérico se centra en el hexágono central de la grilla espaciadora mostrada en la Fig. 6.1b, seleccionada por su simetría geométrica, lo que simplifica el proceso de modelado numérico.

La Fig. 6.2(a) muestra la malla del tubo de revestimiento junto con una sección del hexágono central de la grilla. La grilla tiene *dimples* en contacto con la superficie del tubo, como se observa en la Fig. 6.2(b), los cuales impiden que el tubo se desplace debido a la vibración inducida por el flujo del refrigerante. El punto rojo en la Fig. 6.2(c) representa la carga puntual de 45 N ejercida por el resorte de la grilla hacia el tubo, que asegura el contacto inicial entre el tubo y los *dimples*.

El conjunto tubo–grilla fue irradiado de manera uniforme a una tasa de $3,6 \times 10^{-4} \text{ dpa} \cdot \text{hr}^{-1}$

durante 100 pasos de tiempo de 555,6 *hr*. Se aplicó una presión de 15.5 MPa sobre la superficie externa del tubo, representando la presión del refrigerante, mientras que sobre la superficie interna se aplicó una presión de 10 MPa. Esta última es una aproximación de primer orden de la presión experimentada por el pellet de combustible a lo largo del período de quemado, la cual varía entre 6 y 15 MPa (cf. [Liu et al. \(2016\)](#); [Williamson \(2011\)](#); [Williamson et al. \(2012\)](#)). Aunque no se aplicó ninguna carga externa adicional sobre la grilla, la diferencia de presiones genera tanto tensiones circunferenciales como axiales.

Además, el modelo de material para Zircaloy-2 trabajado en frío fue calibrado utilizando datos experimentales de crecimiento inducido por irradiación a 550 K extraídos de [Holt et al. \(1996\)](#). Con la tasa de dosis indicada, se acumula un total de 3.15 dpa en un año de operación a plena potencia, lo que implica que 10 dpa corresponden a 3.2 años de operación y 20 dpa a 6.4 años.

Además, los archivos de entrada utilizados para implementar el modelo viscoplástico en las simulaciones se presentan en el Apéndice B.

6.4 Condiciones de Borde para el estudio del conjunto tubo-grilla

Para reducir el costo computacional, se modeló únicamente la mitad del tubo y de la grilla espaciadora, aprovechando las condiciones de simetría. En la Fig. 6.2(a) se muestra en color amarillo el plano de simetría utilizado en la simulación.

El borde inferior del tubo (ubicado en el plano de simetría) se restringió en la dirección axial (Z), permitiendo la expansión o contracción radial. Además, los nodos ubicados en los bordes discontinuos de las superficies en contacto con los resaltes de la grilla espaciadora (Fig. 6.2(a)) fueron completamente restringidos en todos los grados de libertad (traslaciones y rotaciones) para eliminar posibles movimientos de cuerpo rígido y asegurar la estabilidad del modelo numérico.

La configuración inicial del tubo y de la grilla se definió de manera que el primero quedara contenido por la segunda. Para lograr esto, se forzó el contacto durante un intervalo de tiempo no irradiado mediante un modelo elástico clásico. Una vez establecido el contacto, la simulación pasó a un modelo de contacto no lineal, iniciándose la irradiación con las propiedades de textura cristalográfica asignadas a cada componente (ver Sec. 5.2).

Para analizar la evolución de la separación entre estos componentes durante la irradiación, en un análisis de contacto no lineal en Code_Aster la variable de estado Clearance (CLR) permite seguir la variación de dicha separación a lo largo de la simulación. Adicionalmente, se consideró el efecto de las condiciones de presión aplicadas al tubo en esta evolución.

Otros enfoques encontrados en la literatura respecto de la interacción tubo–grilla utilizan una condición clásica de no-penetración entre superficies, en la cual la holgura (*clearance*) entre el tubo y la grilla se predefine, imponiendo un desplazamiento uniforme sobre todos los nodos de las regiones de contacto y despreciando el movimiento relativo localizado entre nodos individuales (Joulin et al., 2002; King et al., 2002; Lee and Kim, 2013). Un aspecto clave del presente trabajo, que proporciona una aproximación más realista a la aplicación numérica, es el uso de un contacto no lineal implementado en Code_Aster mediante algoritmos de superficie maestro–esclavo con detección de contacto nodo–segmento (U2.04.04, 2024), lo cual captura desplazamientos diferenciales y distribuciones de tensiones a escala mesoscópica–macroscópica. El tubo se definió como la superficie maestra y la grilla como la superficie esclava. Los efectos de fricción entre ambos componentes fueron despreciados, y se seleccionó un algoritmo de formulación discreta (§3.4.1). Al eliminar la idealización de contacto perfecto y excluir deliberadamente la fricción, el modelo aísla los efectos mecánicos puros derivados de la evolución de la holgura, proporcionando una base física rigurosa para evaluar posibles modos de falla estructural.

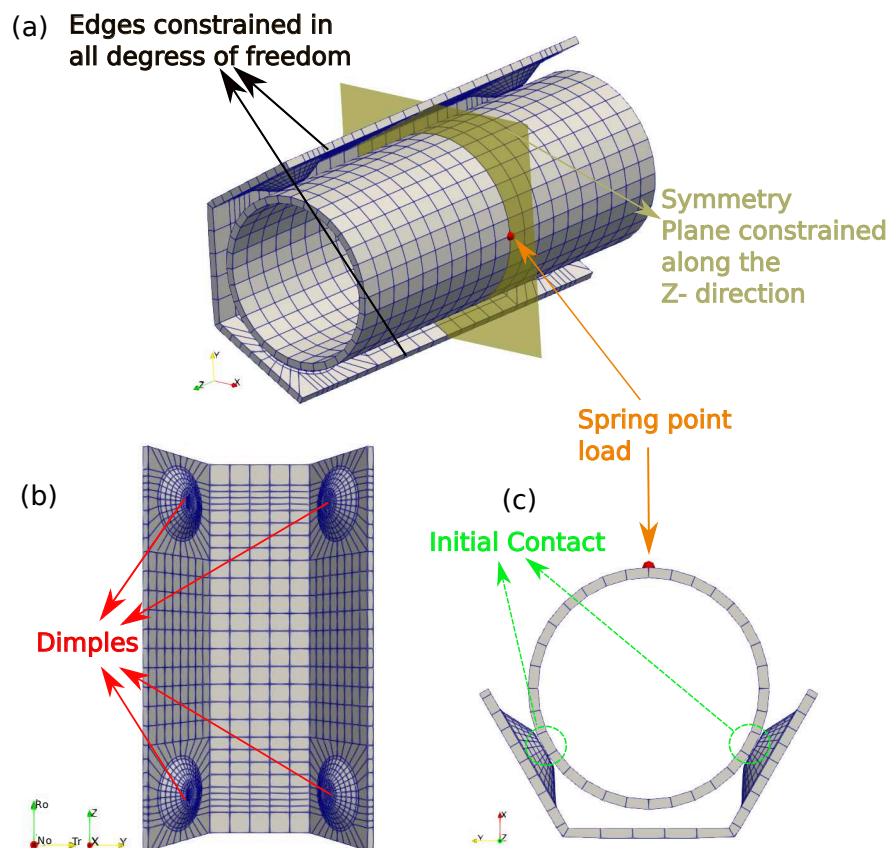


Figura 6.2: (a) Configuración tubo–grilla espaciadora. (b) Vista frontal de la grilla con 4 dimples de apoyo. La esquina inferior izquierda representa el sistema material de la grilla. (c) Vista superior de la configuración tubo–grilla, mostrando la fuerza puntual debida al resorte.

6.5 Efectos de la plasticidad cristalina en la separación de componentes

La elongación axial del tubo y la contracción radial/circunferencial bajo crecimiento por irradiación (Sec. 5.3, Fig. 5.4) son fenómenos dependientes de la textura, como se demuestra por la orientación cristalográfica en la Fig. 5.1 (b). Tanto el crecimiento por irradiación como el creep exhiben una fuerte dependencia de la microestructura y de la textura. Como se ilustra en la Fig. 6.3, la textura de la grilla presentada en la Fig. 5.1(d) provoca que los dimples se expandan en las direcciones de laminado y transversal, mientras se contraen en la dirección normal. Tal como se muestra en la Fig. 6.4(a)-(c), la dirección alineada con el polo basal se contrae a través de los lazos de dislocaciones por vacancias en el eje c , mientras que los lazos de dislocaciones por intersticiales a lo largo de a_1 , a_2 , a_3 inducen una elongación en las direcciones transversales—una consecuencia directa de la anisotropía de la estructura cristalina (Sec. 3.2.3). La acumulación de dosis de radiación impulsa dos fenómenos concurrentes: (1) la evolución del CLR entre los dimples y el tubo de revestimiento, y (2) la relajación de las fuerzas de contacto a través de los mecanismos de crecimiento por irradiación y creep (Sección 6.6).

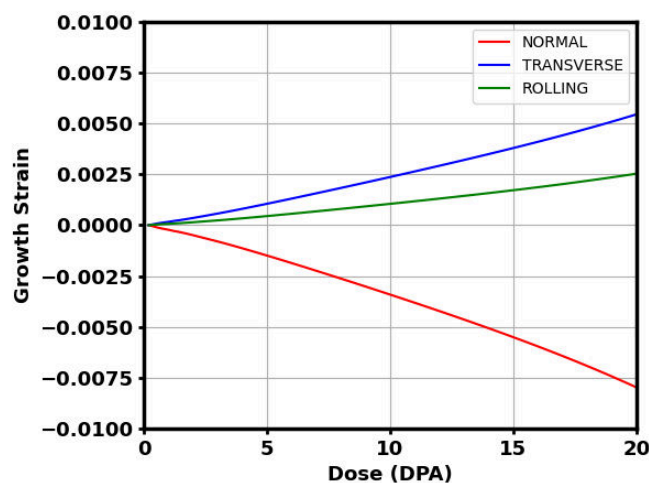


Figura 6.3: Predicciones VPSC-SA de la deformación por crecimiento para la textura de la grilla en la Fig. 5.1(d).

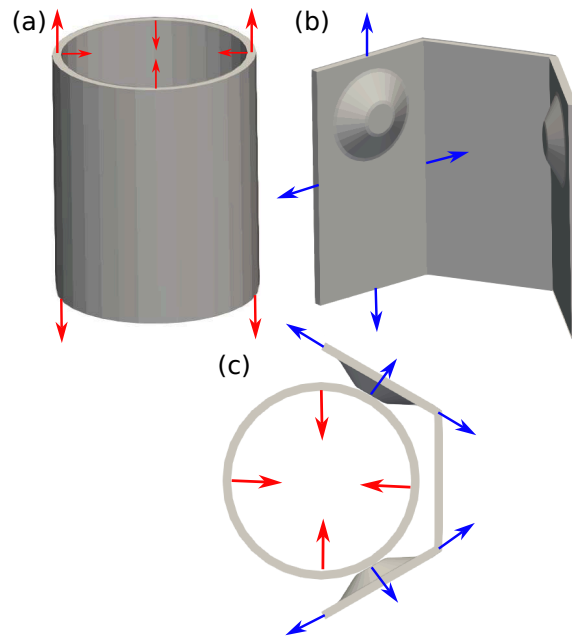


Figura 6.4: Esquema de la deformación dependiente de la textura debido al crecimiento por irradiación en (a): tubo de recubrimiento, (b): hoyuelo en la grilla espaciadora, (c): vista superior del tubo de recubrimiento y de los hoyuelos en la grilla espaciadora.

6.6 Formación y evolución de la separación de contacto

La Fig. 6.5 muestra las superficies de contacto a analizar. Considerando una orientación en la que el eje X emerge perpendicularmente del plano, el contacto ubicado a la izquierda se denomina "Side 1", mientras que el contacto de la derecha se identifica como "Side 2".

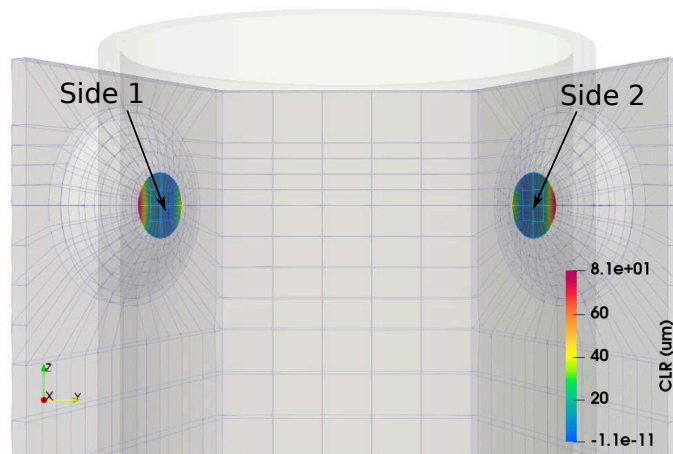


Figura 6.5: CLR correspondiente a las superficies esclavas para contacto no lineal para 20 dpa.

La Fig. 6.6 muestra el CLR máximo correspondiente a las texturas presentadas en la Fig. 5.1 b y d. Este valor corresponde a la mayor separación entre todos los nodos, específicamente en los nodos periféricos de la superficie esclava (dimple), donde la separación respecto al tubo es

mayor (ver Fig. 6.5). Puede observarse que, hasta 1.2 dpa, el tubo en contacto con la superficie de los dimples experimenta un movimiento de pivoteo alrededor de la región de mayor contacto (y por lo tanto mayor tensión) hasta acomodarse completamente. Más allá de 1.2 dpa, ambos componentes comienzan a separarse debido a los mecanismos de deformación descritos en la Sección 6.5. Aunque las condiciones de borde son simétricas, la ligera diferencia en CLR entre ambos lados se debe a una mínima asimetría en la malla, del orden de micrómetros.

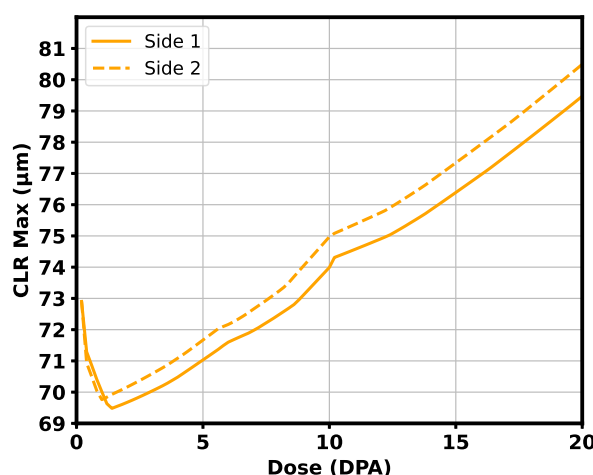


Figura 6.6: CLR máximo para la textura del Test 1.

Si bien los datos de CLR en-reactor siguen siendo escasos, los experimentos ex-reactor en conjuntos de barras de combustible emplean comúnmente amplitudes de desplazamiento transversal de 5–30 μm en estudios de desgaste por fricción entre grilla y tubo [Jiang et al. \(2016\)](#); [Joulin et al. \(2002\)](#). Un estudio analítico realizado por [Billerey \(2005\)](#) predijo un CLR grilla–tubo de 10 μm al final de vida para grillas espaciadoras y tubos de Zircaloy-4, considerando crecimiento por irradiación y creep a través de modelos constitutivos fenomenológicos. Por otro lado, [Patra and Tomé \(2017\)](#) reportaron un CLR aproximado de 28 μm en dos de los cuatro dimples para la geometría de grilla utilizada en su estudio, considerando la misma configuración de textura cristalográfica y el mismo modelo constitutivo empleado en el presente trabajo. Aunque nuestras simulaciones predicen un CLR menor de 13 μm , confirman la presencia de CLR bajo condiciones y mecanismos de deformación similares.

6.7 Sensibilidad de la separación en función de la alineación de texturas

Esta sección resalta el efecto de la textura sobre el CLR. Se realizaron cuatro simulaciones en las que el parámetro variable fue la orientación de los polos basales en relación con la geometría de los dimples, manteniendo inalterada la orientación de los polos basales del tubo.

Aunque se trata de casos hipotéticos, resultan útiles para establecer un parámetro de diseño basado en la textura cristalográfica. En el primer ensayo, denominado Test 1, los polos basales están orientados a lo largo de la dirección normal (ver Fig. 6.7 (a)). En el segundo ensayo, denominado Test 2, los polos basales están orientados hacia la dirección transversal de los dimples (ver Fig. 6.8 (a)). En el tercer ensayo, denominado Test 3, los polos basales están orientados hacia la dirección de laminado de los dimples (ver Fig. 6.9 (a)). Finalmente, el cuarto ensayo, denominado Test 4, corresponde a un monocristal HCP con el polo basal orientado a lo largo de la dirección transversal de los dimples (ver Fig. 6.10 (a)). En las Figs. 6.7 a 6.10, las direcciones Ro, Tr y No corresponden a las direcciones de laminado, transversal y normal de la lámina de la grilla espaciadora.

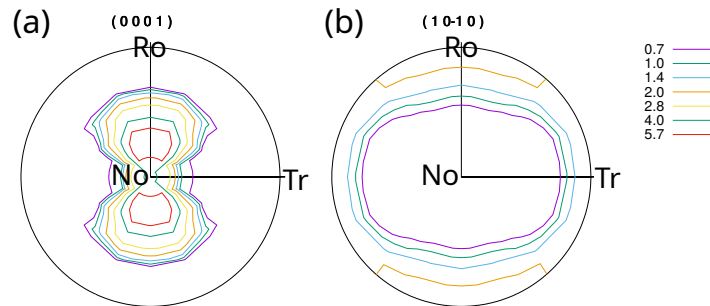


Figura 6.7: (a) figura de polos basales para el Ensayo 1. (b) figura de polos prismáticos para el Ensayo 1.

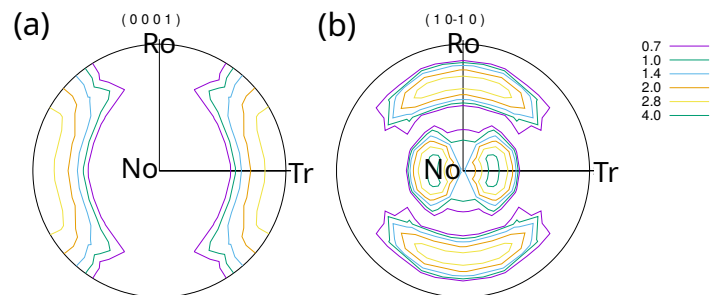


Figura 6.8: (a) figura de polos basales para el Ensayo 2. (b) figura de polos prismáticos para el Ensayo 2.

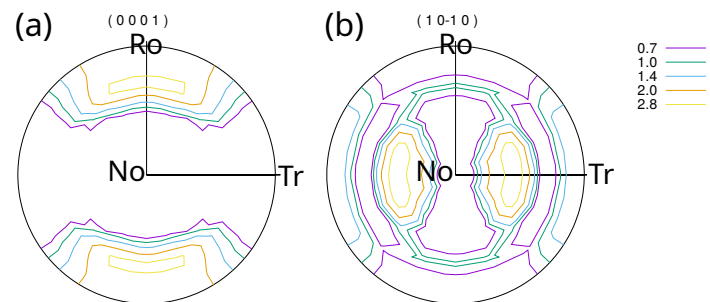


Figura 6.9: (a) figura de polos basales para el Ensayo 3. (b) figura de polos prismáticos para el Ensayo 3.

Si la grilla con los dimples se fabrican de manera tal que los polos basales estén predominan-

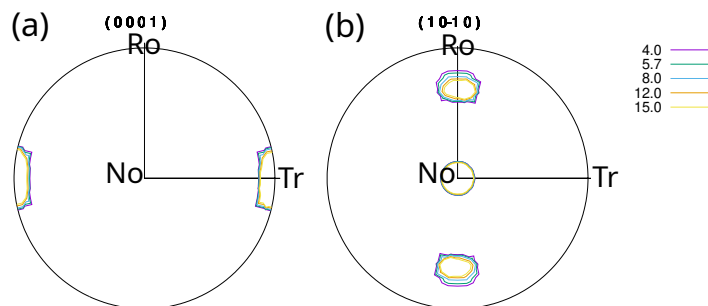


Figura 6.10: (a) figura de polos basales para el Ensayo 4. (b) figura de polos prismáticos para el Ensayo 4.

temente alineados con la dirección normal (Test 1), se obtiene un CLR mayor, de aproximadamente $13\ \mu\text{m}$, lo cual es desfavorable desde el punto de vista del desgaste por fricción (mayores CLR inducen vibraciones más fuertes inducidas por el flujo, exacerbando el daño por desgaste por fricción); ver las curvas **naranjas** en la Fig. 6.11. Si los polos basales se orientan a lo largo de la dirección transversal (Test 2), el CLR disminuye significativamente en comparación con el Test 1, manteniéndose prácticamente inalterado respecto a su valor inicial en el Test 2; ver las curvas **rojas** en la Fig. 6.11. Este comportamiento se asocia a la mayor intensidad de los planos prismáticos orientados cerca de la dirección normal en comparación con la textura del Test 1 (ver Fig. 6.8 (b)). Dado el mecanismo de deformación bajo irradiación descrito en la Sección 3.2.3, en este ensayo la orientación de los ejes hexagonales a se encuentra más próxima a la dirección normal de la grilla, lo que resulta en una reducción de la separación entre componentes debido a la expansión a lo largo de este eje, como consecuencia de la contracción del eje c y la conservación de volumen. Si los polos basales se orientan a lo largo de la dirección de laminado de la grilla, el CLR disminuye en comparación con el Test 1, aunque no tan significativamente como en el Test 2 (ver las curvas **violetas** en la Fig. 6.11). Esto se explica por una mayor intensidad de los planos prismáticos en la dirección normal respecto al Test 1, pero menor que en el Test 2 (ver Fig. 6.9 (b)).

Para reforzar los hallazgos anteriores, se realizó un ensayo denominado Test 4, en el cual se utilizó un monocristal HCP con el polo basal orientado a lo largo de la dirección transversal de la grilla (ver Fig. 6.10(a)). Esta configuración resulta en la mayor intensidad de planos prismáticos en la dirección normal de la grilla (ver Fig. 6.10(b)). En este caso, el CLR fue menor que en el Test 2 (ver curvas **verdes** en la Fig. 6.11), confirmando que una textura con polos basales orientados en la dirección transversal es la más adecuada para el diseño de grillas.

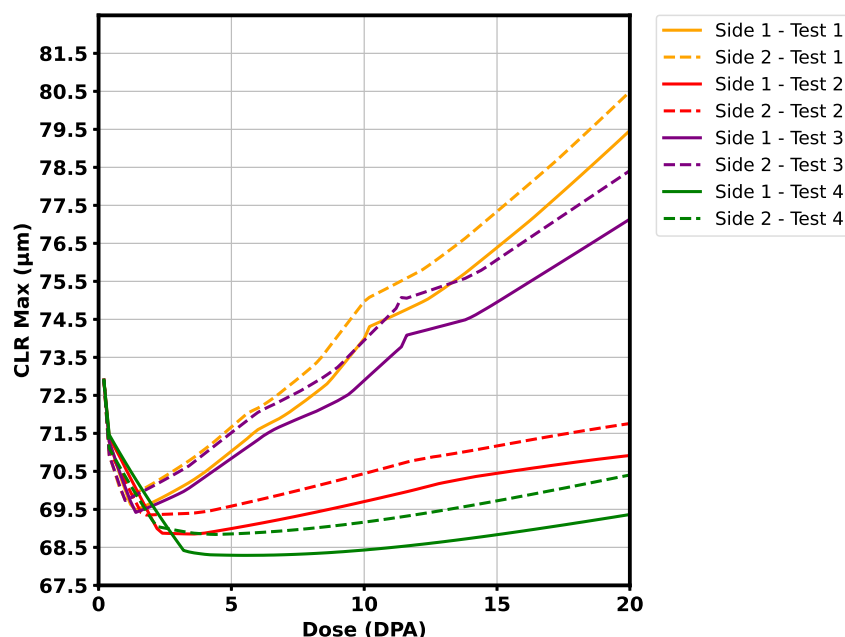


Figura 6.11: Comparación del CLR máximo para todos los ensayos en función de la dosis de irradiación, considerando la dependencia con la textura cristalina.

6.8 Efecto de invertir las presiones en la separación de los componentes

Se realizó otra simulación para analizar la separación cuando la presión que actúa sobre cada lado del tubo se invierte, cambiando de 15.5 MPa en la superficie externa y 10 MPa en la superficie interna a 10 MPa en la superficie externa y 15.5 MPa en la superficie interna. Como resultado, una presión interna neta de 5.5 MPa actúa sobre el tubo, promoviendo creep en la dirección circunferencial y conduciendo a la expansión radial—un escenario accidental que puede ocurrir en caso de una condición de pérdida de refrigerante. Todas las demás condiciones de borde, propiedades de material y textura se mantuvieron consistentes con la simulación descrita en la Sección 6.4. La Fig. 6.12 muestra la evolución del CLR máximo para este caso. Puede observarse que el CLR máximo entre el tubo de revestimiento y los dimples disminuye a medida que progresa la irradiación. El desplazamiento radial del tubo promueve un acoplamiento más fuerte con la grilla espaciadora, mientras que el crecimiento por irradiación y el creep proporcionan una relajación de tensiones insuficiente para contrarrestar estas fuerzas de contacto.

Considerando las diferentes configuraciones de textura de las simulaciones en la Sección 6.7, puede observarse que una mayor presencia de planos prismáticos orientados cerca de la dirección normal de la geometría de los dimples resulta en un mayor CLR en comparación con los casos en los que dichos planos no se alinean predominantemente en esta dirección (ver Fig. 6.13). Sin embargo, una baja presencia sigue siendo preferible a una ausencia total (Test 1 vs.

Test 3). Esto se debe a que cuando el eje a del cristal HCP está más alineado con la dirección normal de la geometría del dimple, el crecimiento se ve restringido debido a la expansión radial del tubo hacia la grilla como resultado de la presión interna neta del tubo. Por otro lado, todas las simulaciones bajo estas condiciones de borde son deseables desde la perspectiva de la reducción del CLR.

Aunque este escenario de carga es hipotético, confirma que el CLR—aun bajo condiciones estacionarias—resulta de los efectos combinados de la presión sobre el tubo y del comportamiento de crecimiento por irradiación y creep del material. Bajo condiciones de reactor, un aumento en la presión interna puede surgir de la liberación de burbujas de gas de las pastillas de combustible y su posterior expansión.

Cabe destacar que los desarrollos metodológicos aquí implementados derivaron en una publicación internacional, en la cual se documenta la estrategia de acoplamiento entre el modelo VPSC y el método de elementos finitos FEM para estudiar la interacción tubo–grilla exclusivamente bajo condiciones de irradiación. Este trabajo se presentó en el artículo titulado “An open-source finite element toolbox for anisotropic creep and irradiation growth: Application to tube and spacer grid assembly” [Aguzzi et al. \(2025c\)](#) (ver ApéndiceD), constituyendo la primera validación sistemática de la metodología acoplada en un problema de relevancia nuclear.

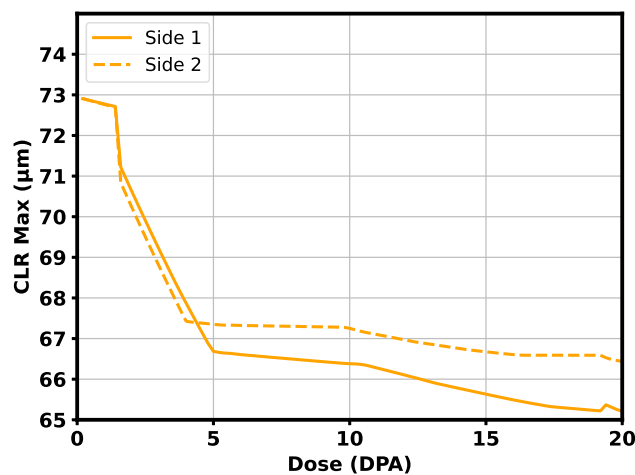


Figura 6.12: CLR máximo considerando el efecto de inversión de presión: Presión Interna > Presión Externa.

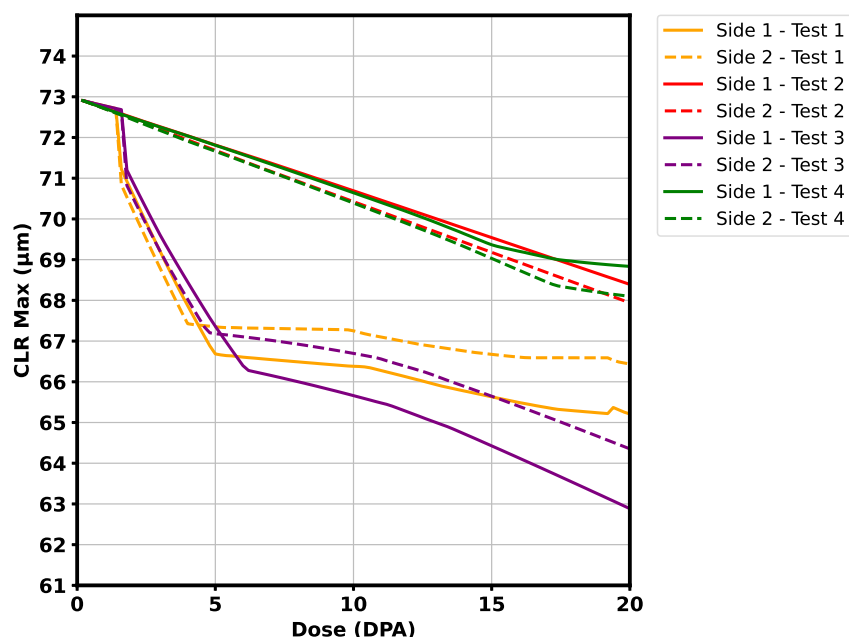


Figura 6.13: Comparación del CLR máximo para todos los ensayos en función de la dosis de irradiación, considerando la dependencia con la textura cristalina y la inversión de presión.

6.9 Extensión de la plataforma a fenómenos térmicos

En operación, además de los mecanismos inducidos por irradiación, pueden activarse contribuciones térmicas asociadas a gradientes locales de temperatura, interacción pellet–vaina (PC-MI)¹ o transitorios. Estas condiciones modifican la holgura vaina–grilla y la redistribución de presiones de contacto, afectando el soporte efectivo y la propensión al desgaste por vibraciones. En aleaciones de Zr, el *creep térmico* se activa por encima de 523–623 K, con sensibilidad a la microestructura, la tensión y la composición (Franklin et al., 1983; Matsuo, 1987; Montgomery et al., 2017). La evidencia indica que las contribuciones térmica e irradiada actúan en paralelo, con diferente dependencia en T y en σ (Adamson et al., 2009; Moore et al., 2025).

Con este objetivo, la plataforma VPSC–CAFEM se extendió para incluir explícitamente el *creep térmico* y la *expansión térmica* a nivel cristalográfico, manteniendo coherencia con las ecuaciones constitutivas presentadas en el Capítulo 3. El término térmico se implementa como una ley viscoplástica dependiente de T y σ en los sistemas de deslizamiento, de tipo Arrhenius en régimen estacionario, calibrada con curvas experimentales de Zircaloy-2 (Christodoulou et al., 2002; Fidleris, 1988) sin alterar la identificación previa de parámetros irradiados (ver Sec.3.2.4).

Esta ampliación permite evaluar, sobre la misma base micromecánica, la contribución térmica a la evolución del contacto vaina–grilla: su influencia en el momento y la localización de

¹Pellet–Cladding Mechanical Interaction

la pérdida de apoyo, en la reconfiguración de presiones normales y regímenes tangenciales (adherencia/deslizamiento), y en la participación relativa del creep térmico frente al inducido por irradiación en escenarios con PCMI o transitorios térmicos.

En lo que sigue, se emplea la versión extendida de la interfaz VPSC–CAFEM para analizar la interacción tubo–grilla considerando simultáneamente irradiación y temperatura, como cierre del estudio de simulación multiescala.

6.10 Análisis comparativo: respuesta bajo irradiación pura y bajo irradiación acoplada a efectos térmicos

Con el objetivo de evaluar la contribución relativa de los distintos mecanismos micromecánicos, se realizaron cinco simulaciones bajo condiciones de presión interna y externa constantes. Los casos (i)–(iv) corresponden a estudios de sensibilidad en los que se aíslan artificialmente mecanismos individuales mediante la anulación explícita de los restantes a nivel cristalográfico. En consecuencia, estos casos deben interpretarse como escenarios límite, y no como estados físicamente completos.

En particular, se consideran las siguientes hipótesis:

- **Caso (i): crecimiento por irradiación.** Se anulan el creep por irradiación y el creep térmico, de modo que no existen mecanismos de relajación viscoplástica, lo que conduce a niveles de tensión más elevados.
- **Caso (ii): creep por irradiación.** Se anula el crecimiento por irradiación; las tensiones que relajan por creep provienen exclusivamente del estado de carga mecánica impuesto.
- **Caso (iii): expansión térmica.** Se aplica únicamente un incremento de temperatura, anulando el crecimiento y el creep por irradiación, así como el creep térmico. La expansión térmica se incorpora como una contribución a la deformación de transformación a nivel cristalográfico, sin utilizar la opción termo-elástica compresible de VPSC. El cambio brusco observado alrededor de 45 000 h no está asociado al contacto grilla–tubo.
- **Caso (iv): creep térmico.** Se consideran únicamente los mecanismos de creep térmico bajo carga mecánica constante, anulando los mecanismos inducidos por irradiación.
- **Caso (v): caso combinado.** Se consideran conjuntamente el crecimiento y el creep por irradiación, el creep térmico y la expansión térmica incorporada a nivel cristalino.

Hasta este punto se analizaron de manera independiente los mecanismos inducidos por irradiación. A partir de esta sección se incorporan explícitamente los efectos térmicos, con el objetivo de contrastar escenarios y evaluar su impacto en el contacto y la separación tubo–grilla dentro del mismo marco VPSC–CAFEM.

Si bien desde un punto de vista físico el desacople de estos mecanismos no es estrictamente realista —dado que todos ellos están inherentemente presentes e interactuando durante la operación—, esta separación permite identificar con mayor claridad la contribución individual de cada fenómeno en la evolución del CLR.

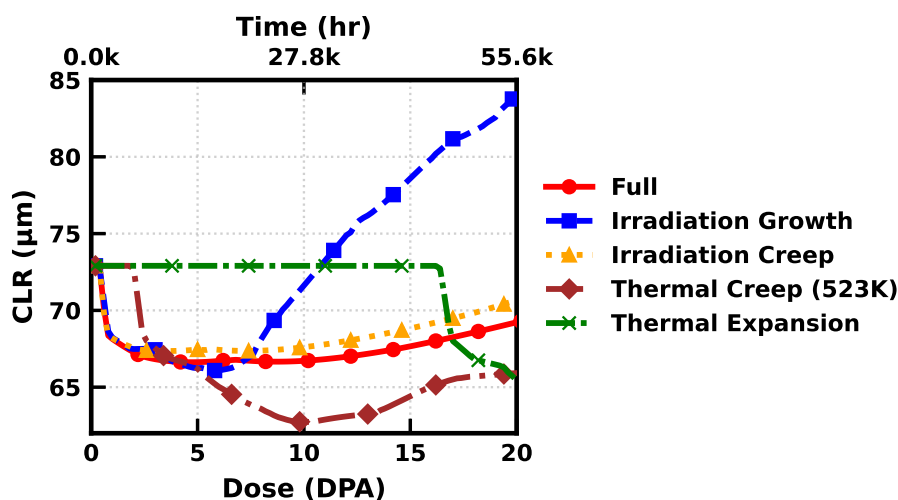


Figura 6.14: Evolución del CLR bajo diferentes mecanismos físicos. El CLR se evalúa aislando cada fenómeno individualmente: crecimiento por irradiación (símbolos azules), fluencia por irradiación (línea naranja discontinua), expansión térmica (línea verde con trazos y puntos), fluencia térmica (línea marrón con trazos y puntos) y el caso combinado con todos los fenómenos activos (línea roja continua).

La Fig. 6.14 resume los efectos individuales y combinados de los distintos mecanismos físicos en la evolución del CLR. La simulación que considera únicamente el *crecimiento por irradiación* (símbolos azules) muestra una aproximación inicial rápida entre el tubo y la grilla, seguida de una estabilización hasta aproximadamente 7.5 dpa, tras lo cual se observa una tendencia de separación aproximadamente lineal. Este comportamiento se atribuye a la deformación anisotrópica de la red cristalina HCP del circonio, caracterizada por una contracción a lo largo del eje c y una expansión a lo largo de los ejes a . Como se muestra en la Fig. 5.1, la alineación de los polos basales amplifica esta expansión radial.

En el caso de la *expansión térmica*, se aplicó una tasa de calentamiento constante de $1,799 \times 10^{-5}$ K/h (i.e., $\Delta T = 1$ K a lo largo de la simulación). El CLR permanece prácticamente constante durante las primeras 45 000 horas, seguido de un leve acercamiento (hasta aproximadamente

65 μm), comportamiento consistente con el ablandamiento térmico del material.

La simulación que considera únicamente el *creep térmico* muestra una aproximación progresiva entre el tubo y la grilla durante las primeras 7 000 horas, asociada a una deformación radial positiva por fluencia. Este proceso continúa hasta aproximadamente 27 780 horas, cuando se produce el contacto mecánico en el *dimple* (véase Fig. 6.31(j–l)). A partir de este punto, el contacto restringe la deformación local y se genera una ligera separación en el lado opuesto del tubo debido a efectos de flexión.

En el caso del *creep bajo irradiación*, el CLR presenta un aumento cuasi-lineal una vez alcanzado un estado de equilibrio alrededor de 1.2 dpa. Esta tendencia sugiere que la deformación inducida por irradiación se desarrolla de manera gradual y coherente con el estado de carga aplicado.

Cuando se consideran *todos los fenómenos simultáneamente*, la evolución del CLR está dominada por los mecanismos inducidos por irradiación, los cuales generan deformaciones significativamente mayores que los efectos térmicos. Tras una fase inicial de acomodación (aproximadamente 1.2 dpa), se observa una tendencia de separación casi lineal, reflejando la contribución acumulada del crecimiento y la fluencia por irradiación.

La Fig. 6.15 muestra la evolución del CLR en ambos lados de la grilla espaciadora, comparando casos con y sin efectos térmicos hasta una dosis de 20 dpa (55 560 horas). Las curvas correspondientes a ambas simulaciones permanecen prácticamente paralelas, lo que indica que la expansión y la fluencia térmica introducen únicamente desviaciones menores en la interacción tubo–grilla bajo las condiciones analizadas. Estos resultados confirman que los mecanismos inducidos por irradiación, en particular el crecimiento y el creep, constituyen los principales responsables de la deformación y separación del sistema.

La incorporación de efectos térmicos en el modelo incrementa de manera significativa el costo computacional. Mientras que las simulaciones que consideran únicamente efectos de irradiación requieren aproximadamente entre 4 y 6 horas de cálculo, los casos completamente acoplados — que incluyen tanto fenómenos térmicos como de irradiación — demandan entre 14 y 15 horas. Todas las simulaciones se ejecutaron utilizando MPI con cuatro procesos en paralelo sobre un procesador AMD EPYC 7513 a 2.6 GHz. Este aumento en el costo computacional pone de manifiesto el compromiso entre la fidelidad física y el costo numérico al modelar escenarios multifísicos acoplados.

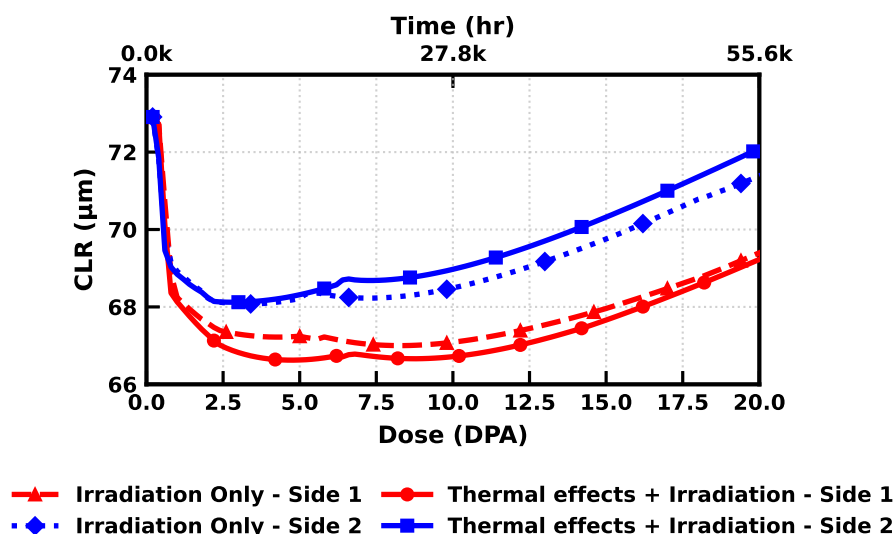


Figura 6.15: CLR máximo en función de la dosis (DPA), comparando casos con solo irradiación (símbolos) y casos combinados irradiación + carga térmica (líneas), hasta 20 dpa (55 560 horas).

6.10.1 Influencia de los efectos térmicos sobre el CLR

Tratamiento térmico y propiedades efectivas. En las simulaciones de las Secciones 6.10.1–6.10.3, la expansión térmica se incorpora en la UMAT a nivel cristalográfico mediante un tensor de deformación térmica añadido a la deformación de transformación. De este modo, el código FEM no utiliza explícitamente un coeficiente macroscópico de expansión térmica, sino que recibe en cada incremento el estado de tensiones actualizado, el cual ya incluye la contribución térmica introducida en el constitutivo.

La respuesta elástica utilizada en el punto de integración es anisótropa y se obtiene a partir del tensor de rigidez autoconsistente provisto por VPSC (propiedades efectivas del policristal). En el modelo cristalográfico se emplean coeficientes de expansión térmica anisotrópicos $\alpha_{11} = 5,4 \times 10^{-6}$, $\alpha_{22} = 9,1 \times 10^{-6}$ y $\alpha_{33} = 7,4 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Este tratamiento constituye una aproximación consistente con el marco VPSC aplicado a deformaciones esencialmente desviatorias, y permite capturar el efecto macroscópico dominante de la dilatación térmica dentro del esquema VPSC–CAFEM.

Se realizaron dos análisis de sensibilidad para evaluar cómo la *velocidad de calentamiento* afecta la separación tubo–grilla (CLR).

La Fig. 6.16 muestra la evolución temporal del CLR considerando únicamente **expansión térmica** para distintas velocidades de calentamiento. A medida que la velocidad de calentamiento aumenta, el *acercamiento* entre las piezas se inicia antes, alcanzando un mínimo cercano a $64 \mu\text{m}$. Este acercamiento inicial se explica por la expansión en la dirección *Normal* de la grilla

y en la dirección *Radial* del tubo, lo que produce un primer contacto seguido de una fase de separación con aumento progresivo del CLR en el extremo opuesto de la zona de contacto (ver zonas en color Rojo de la Fig. 6.5).

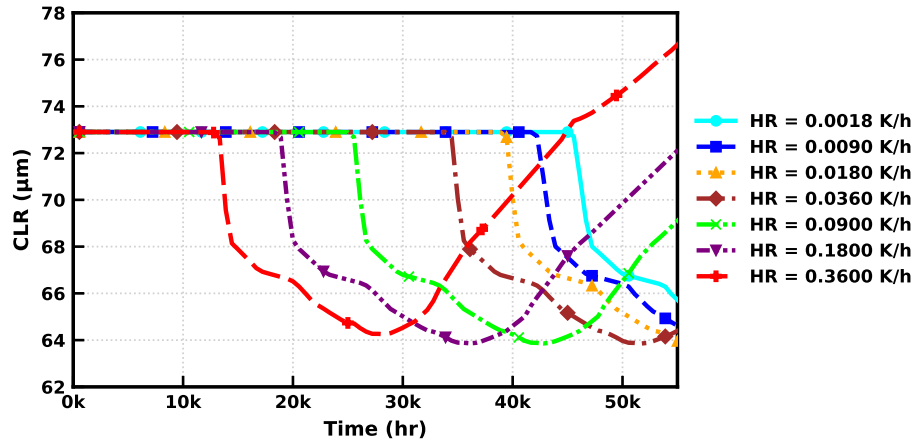


Figura 6.16: Evolución de la CLR para distintas tasas de calentamiento considerando solo expansión térmica. Tasas mayores adelantan el contacto y potencian la fase de separación.

La Fig. 6.17 presenta el caso en que se considera únicamente **creep térmico** bajo los mismos escenarios de calentamiento. En este régimen, un calentamiento más rápido conduce a una *menor aproximación* entre tubo y grilla. La razón es el incremento de la tasa de deformación por creep debido a gradientes térmicos más pronunciados y al estado de compresión radial del tubo. Además, la *textura cristalográfica* —en particular, la orientación de planos prismáticos perpendiculares a la tensión radial— favorece que, al aumentar la velocidad de calentamiento, crezca la tasa de creep en los modos compatibles con esa compresión (Ec. 3.36). En términos de la ley de potencia, el aumento de $\dot{\gamma}_0(T)$ acelera la relajación por creep antes de que se produzca un desplazamiento radial significativo, por lo que la aproximación efectiva y el contacto con la grilla disminuyen.

Los gradientes térmicos considerados en estas simulaciones no provienen de la resolución de la ecuación de conducción de calor. En su lugar, se prescribe un campo térmico espacial como condición de contorno (*temperatura prescrita*), aplicado sobre el dominio (tubo y grilla), de modo que el gradiente resulta del perfil impuesto. En particular, la temperatura impuesta en las superficies de tubo y grilla es la misma, y el gradiente espacial responde al campo térmico prescripto.

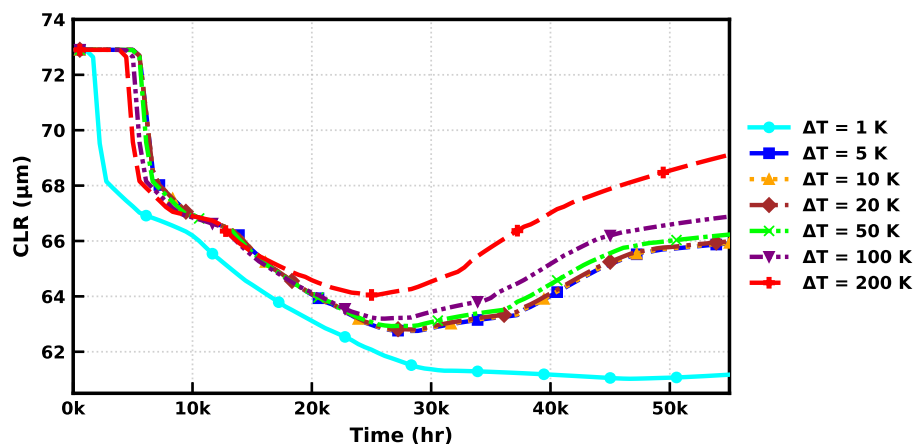


Figura 6.17: Evolución del CLR para distintas velocidades de calentamiento considerando solo *creep* térmico. Tasas mayores reducen la aproximación total por el aumento de la tasa de deformación y la orientación cristalográfica del revestimiento.

6.10.2 Efecto de la precarga térmica en componentes irradiados

En este estudio se compararon dos escenarios de simulación: (1) sin aplicar precarga térmica antes de la irradiación, y (2) con una precarga térmica de $\Delta T = 523K$ previa a la irradiación, con el objetivo de evaluar su impacto en la evolución en el CLR entre el tubo y la grilla.

Este segundo escenario busca representar situaciones como las de *hot shutdowns* o *hot standbys* en reactores PWR, en las cuales el núcleo permanece a alta temperatura y presión aunque ya no esté crítico. En tales condiciones, los componentes del combustible pueden experimentar una expansión térmica inicial antes de la irradiación, lo que a su vez puede modificar la interacción mecánica en las primeras etapas.

Los resultados muestran que la precarga térmica induce una expansión inicial que mantiene la separación prácticamente constante durante las primeras fases de irradiación (hasta $\approx 2dpa$), reflejando un comportamiento principalmente elástico. Superado este umbral, la no linealidad aparece debido al ablandamiento por *creep* térmico, lo que provoca una aproximación progresiva entre tubo y grilla, alcanzando una separación mínima de $\approx 64 \mu m$. La geometría de los *dimples* genera concentraciones locales de tensiones (ver Fig. 6.14(j-l)), conduciendo a una deformación asimétrica con un máximo de separación ($\approx 76 \mu m$) en el borde opuesto al contacto, como se observa en la Fig. 6.18 para dosis superiores a $\approx 8dpa$.

En contraste, las simulaciones sin precarga muestran una separación temprana provocada por el efecto de pivoteo del tubo con los *dimples* (iniciada en $\approx 0,5dpa$ y estabilizada hacia $\approx 1,2dpa$), seguida de una separación prácticamente constante. Aunque aún falta validación experimental, estos resultados ofrecen claves útiles para analizar la interacción dinámica del

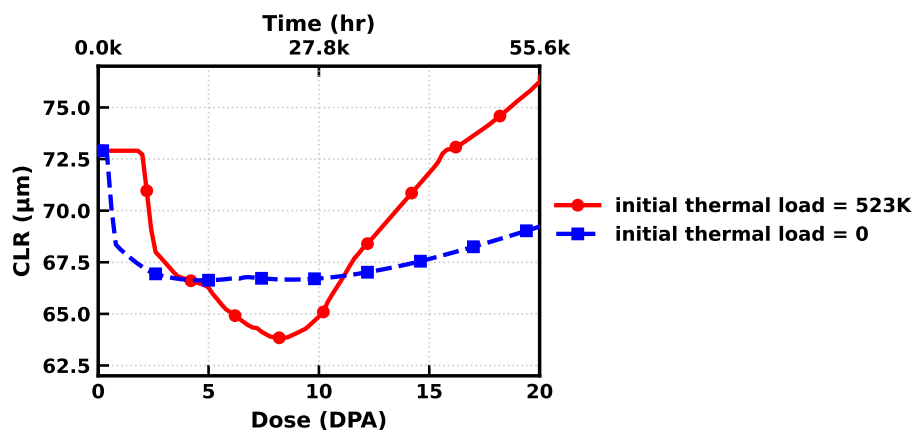


Figura 6.18: Comparación simulada de la separación (CLR) en el Lado 1: en rojo, caso con precarga térmica ($\Delta T = 523\text{K}$); en azul, caso sin precarga. Principales observaciones: (i) el caso precargado mantiene un régimen elástico inicial ($< 2\text{dpa}$), seguido de una aproximación gobernada por *creep* ($\approx 64\mu\text{m}$); (ii) el caso sin precarga muestra una separación temprana (0.5–1.2 dpa) y luego estabilización. Bandas de error: $\pm 5\mu\text{m}$.

conjunto combustible, optimizar el diseño de la separación tubo–grilla y comprender cómo los mecanismos de deformación se ven potenciados por la irradiación.

6.11 Descripción detallada de la distribución espacial de tensiones y deformaciones

La Fig. 6.31 compara la respuesta global (a–f) y local en la zona de contacto con el *dimple* (g–l) para tres escenarios: (i) sólo irradiación (*creep* + crecimiento), (ii) sólo térmico (expansión + *creep* térmico, con una tasa de calentamiento de $\dot{T} = 0,0018\text{ K/h}$) y (iii) el caso acoplado. En todos los casos se representan la deformación equivalente (von Mises) y la tensión equivalente, permitiendo analizar cómo la superposición de mecanismos afecta la redistribución de esfuerzos en el conjunto tubo–grilla.

En el escenario dominado por irradiación, las deformaciones se concentran bajo el resorte de la grilla, con una magnitud aproximada de $\tilde{\epsilon} \approx 1,6 \times 10^{-2}$, acompañadas de tensiones equivalentes cercanas a 230 MPa. Cuando sólo actúan los efectos térmicos, la respuesta global es más homogénea: la deformación equivalente disminuye a $\approx 7,2 \times 10^{-3}$ y las tensiones a 180 MPa, evidenciando que la expansión térmica y el *creep* térmico por sí solos tienen una contribución moderada en estas condiciones de carga. Al combinar ambos mecanismos, la deformación en la región cargada alcanza $\tilde{\epsilon} \approx 2,1 \times 10^{-2}$, un incremento del orden del 30 % respecto al caso puramente irradiado, mientras la tensión equivalente se reduce a 210 MPa. Esta respuesta compuesta indica que el acoplamiento térmico–irradiado no actúa de forma aditiva: los efectos térmicos inducen un ablandamiento local que facilita la redistribución de tensiones, reduciendo

las concentraciones aunque la deformación total siga aumentando.

A escala local (paneles g–l), la misma tendencia se mantiene con mayor contraste. Bajo irradiación, la deformación máxima en el punto de contacto es de $1,1 \times 10^{-2}$, con tensiones de aproximadamente 210 MPa. Con sólo efectos térmicos, la deformación crece a $1,9 \times 10^{-2}$ pero las tensiones disminuyen a 200 MPa. En el caso acoplado, la irradiación domina la evolución de la deformación, mientras que la componente térmica contribuye a aliviar gradualmente las tensiones de contacto.

En conjunto, estos resultados confirman que los mecanismos térmicos no modifican de manera sustancial la magnitud de las deformaciones, pero sí afectan su distribución espacial y el equilibrio tensional del contacto, favoreciendo condiciones de soporte más estables a largo plazo.

(a)–(f) Respuesta global (tubo de revestimiento + grilla)

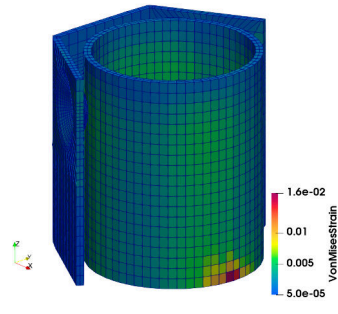


Figura 6.19: Deformación por irradiación

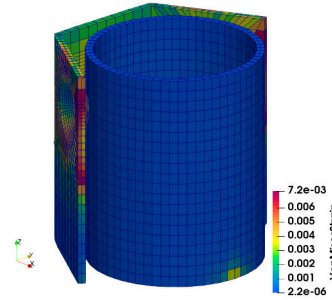


Figura 6.20: Deformación térmica

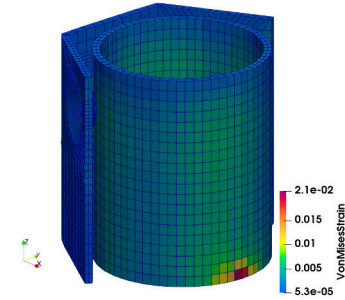


Figura 6.21: Deformación acoplada

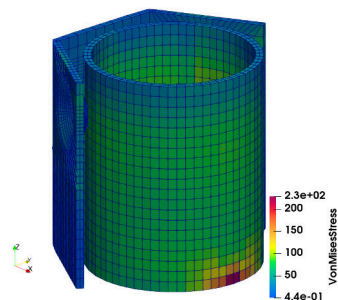


Figura 6.22: Tensión por irradiación

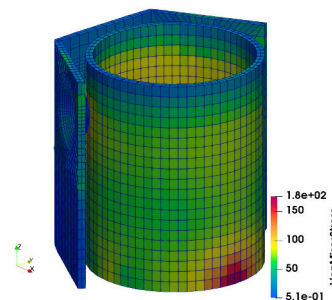


Figura 6.23: Tensión térmica

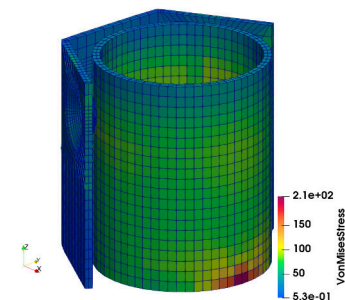


Figura 6.24: Tensión acoplada

(g)–(l) Respuesta local en el contacto con dimple (Lado 1)

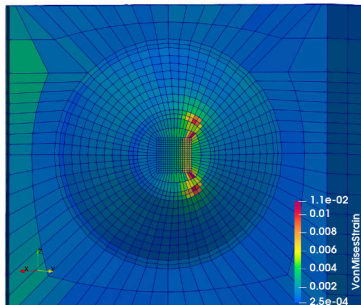


Figura 6.25: Deformación por irradiación

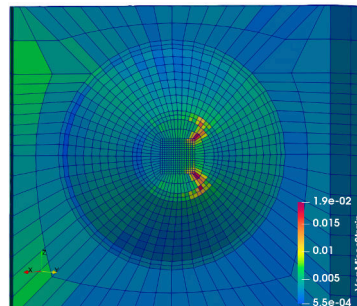


Figura 6.26: Deformación térmica

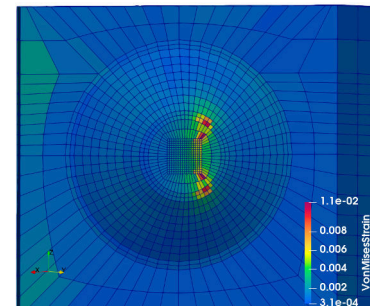


Figura 6.27: Deformación acoplada

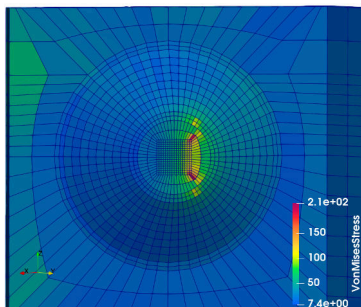


Figura 6.28: Tensión por irradiación

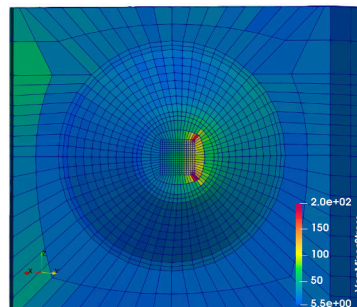


Figura 6.29: Tensión térmica

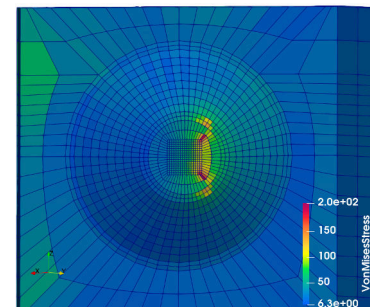


Figura 6.30: Tensión acoplada

Figura 6.31: Distribución de deformaciones y tensiones de von Mises bajo diferentes condiciones de carga. (a–f): respuesta global. (g–l): respuesta local.

6.12 Influencia de los coeficientes elásticos en los campos de tensión y deformación

Las constantes elásticas anisotrópicas del circonio en función de la temperatura fueron determinadas por [Fisher and Renken \(1961, 1964\)](#) en un rango de 4 K a aproximadamente 1100 K. [Tremblay and Roy \(1973\)](#) realizaron estudios adicionales para aleaciones con alto contenido de oxígeno, confirmando que los elementos aleantes modifican los parámetros de red y, por ende, las constantes elásticas.

En este trabajo se adoptaron los valores reportados por [Douglass \(1971\)](#) para simular la expansión térmica. A 576 K, los coeficientes elásticos utilizados fueron:

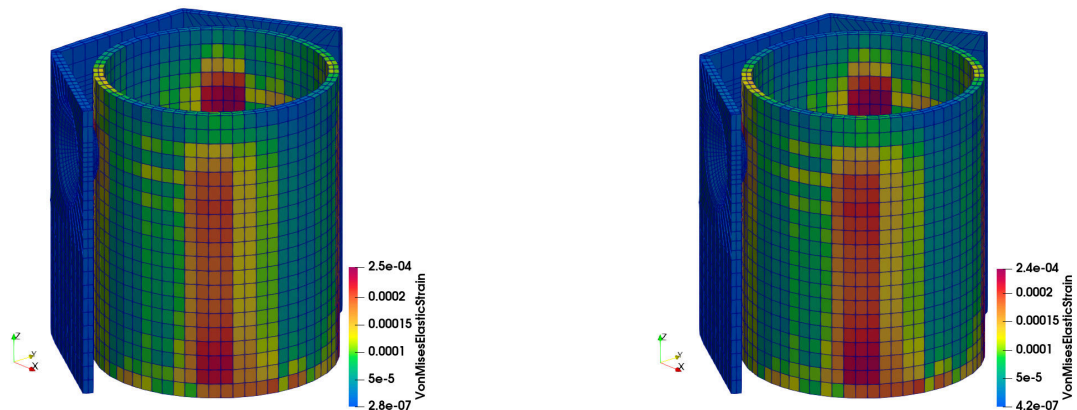
$$\begin{aligned} C_{11} &= 130,1 \text{ GPa}, & C_{33} &= 155,9 \text{ GPa}, \\ C_{44} &= 28,2 \text{ GPa}, & C_{12} &= 78,6 \text{ GPa}, & C_{13} &= 65,7 \text{ GPa}. \end{aligned}$$

Las Fig. 6.32 muestran la comparación de las distribuciones de deformaciones y tensiones de von Mises usando coeficientes elásticos a temperatura ambiente (Sección 3.2.5) y a 576 K. A nivel global, las deformaciones equivalentes alcanzan valores de $2,5 \times 10^{-4}$ en el primer caso y $2,4 \times 10^{-4}$ en el segundo, mientras que las tensiones se mantienen prácticamente iguales (máximo ≈ 210 MPa).

Aunque cabría esperar que el uso de constantes elásticas a alta temperatura conduzca a mayores deformaciones, la estrategia de modelado empleada introduce un factor adicional: la rigidez de la restricción que vincula los nodos del borde interior del extremo del tubo a un nodo ficticio en el infinito. Este esquema permite el desplazamiento radial hacia la grilla en el lado cargado por el resorte (ver Fig. 6.2). Como ambas simulaciones se realizaron bajo la misma estrategia de contorno, las diferencias se deben principalmente a los efectos térmicos.

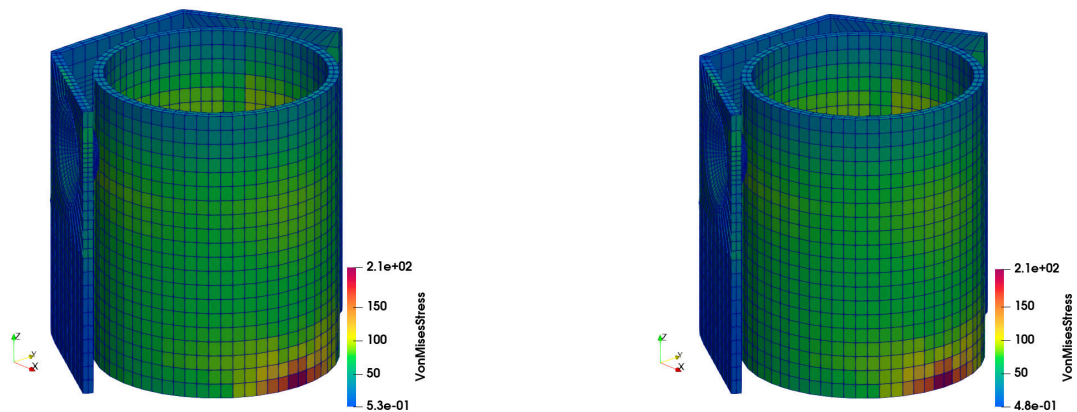
La comparación sugiere que los efectos térmicos —en particular a nivel elástico— influyen más en la relajación de tensiones que en el incremento de deformaciones (ver Fig. 6.31d–f). Esto indica que la temperatura afecta la respuesta del material sobre todo a través de mecanismos micromecánicos, más que por la simple variación de los coeficientes elásticos. La Fig. 6.33 refuerza esta conclusión, mostrando la evolución de la separación tubo–grilla para ambos juegos de coeficientes: aunque los campos de tensión y deformación apenas cambian, el uso de coeficientes a 576 K provoca una aproximación relativa de $\approx 2 \mu\text{m}$, sugiriendo una influencia pequeña pero no despreciable de la rigidez elástica en la evolución del contacto.

(a)–(b) Campos de deformación elástica



(a) Deformación elástica VM (coeficientes en frío) (b) Deformación elástica VM (coeficientes a 576 K)

(c)–(d) Campos de tensión elástica



(c) Tensión elástica VM (coeficientes en frío) (d) Tensión elástica VM (coeficientes a 576 K)

Figura 6.32: Distribuciones globales de deformación y tensión elástica de von Mises en el conjunto (tubo + grilla) bajo cargas combinadas de irradiación y térmicas. (a–b): campos de deformación usando coeficientes a temperatura ambiente y a 576 K. (c–d): campos de tensión correspondientes.

Cabe remarcar que todos los resultados de esta subsección se obtuvieron bajo la acción combinada de expansión térmica, *creep* térmico, *creep* por irradiación y crecimiento por irradiación. Por lo tanto, las diferencias observadas se deben exclusivamente a la variación en los coeficientes elásticos, dentro de un marco multifísico acoplado.

La extensión posterior del modelo permitió incorporar explícitamente los fenómenos de expansión y *creep* térmico junto a los inducidos por irradiación, consolidando un marco integral para el análisis multifísico de conjuntos combustibles. Este avance quedó plasmado en la publicación internacional —al día de la fecha en revisión— “*Multiphysics Finite Element Modeling of Irradiation and Thermal Behavior Demonstrated on a Fuel-Assembly Problem*” (Aguzzi et al., 2025a), donde se mostró la capacidad del modelo acoplado para reproducir la evolución conjunta

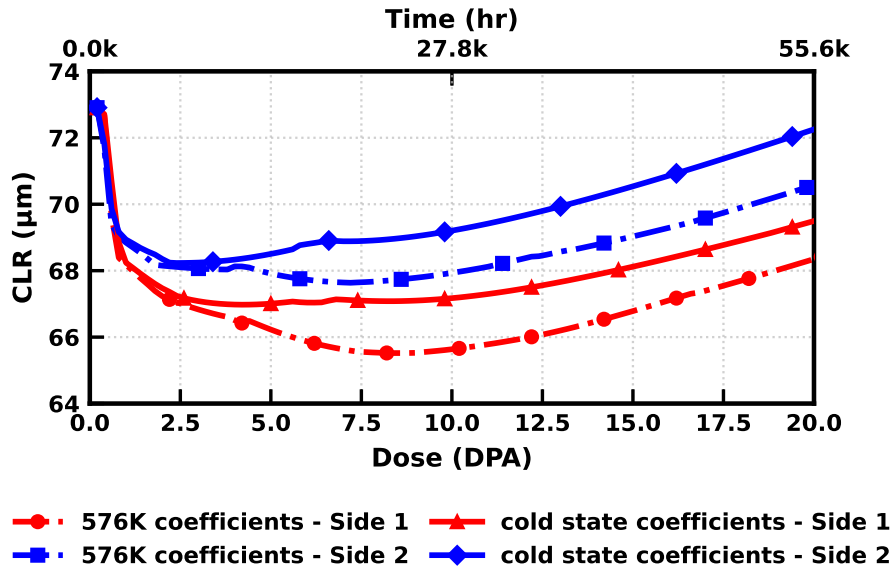


Figura 6.33: Influencia de los coeficientes elásticos en la separación (CLR) entre el tubo de revestimiento y la grilla espaciadora.

de la interacción tubo–grilla bajo condiciones operativas cercanas a las de reactor.

6.13 Regímenes cuantitativos de relevancia térmica

En esta sección cuantificamos *cuándo* y *cuánto* los mecanismos térmicos (expansión y *creep* térmico) pueden incidir en el CLR entre tubo–grilla. Partimos del escalamiento constitutivo de la ley de potencia y del prefactor dependiente de la temperatura, obtenemos razones normalizadas de $\dot{\gamma}_0(T)$ en torno a la condición nominal PWR (523 K), y usamos esos órdenes de magnitud para interpretar tendencias de las simulaciones (barridos de velocidad de calentamiento) y para delinear condiciones paramétricas donde los efectos térmicos dejan de ser despreciables.

A partir de las Ecs. (3.36)–(3.37), la contribución de *creep* térmico escala como $\dot{\epsilon}^{\text{th}} \propto \dot{\gamma}_0(T) \sigma^n$ con $n = 4$. Usando la $\dot{\gamma}_0(T)$ adoptada aquí, la razón $\dot{\gamma}_0(T)/\dot{\gamma}_0(523 \text{ K})$ vale ≈ 2.70 a 550 K, ≈ 6.25 a 575 K y ≈ 13.47 a 600 K. Así, incrementos moderados de T (p. ej., durante *power ramps* o en *hot-standby*) pueden amplificar la cinética de *creep* térmico casi un orden de magnitud. De modo análogo, un aumento de tensión del 20 % (50 %, 100 %) multiplica la tasa por ~ 2 (~ 5 , ~ 16).

Para la geometría presente, las curvas de CLR máxima con y sin mecanismos térmicos se mantienen casi paralelas a 523 K (Fig. 6.15), lo que indica que el crecimiento y el *creep* por irradiación dominan la separación a largo plazo. No obstante, los mecanismos térmicos afectan la respuesta transitoria y la relajación de tensiones. Los barridos de velocidad de calentamiento

(Figs. 6.16, 6.17) modifican tanto el *timing* como la pendiente de los eventos de contacto/separación, y una precarga térmica a 523 K demora la separación temprana y luego promueve un cierre gobernado por *creep* (Fig. 6.18).

Con base en el escalamiento constitutivo $\dot{\varepsilon}^{\text{th}} \propto \dot{\gamma}_0(T) \sigma^n$ y en la $\dot{\gamma}_0(T)$ adoptada (Ecs. (3.36)–(3.37)), podemos delinear condiciones *paramétricas* (no simuladas) bajo las cuales se espera que los efectos térmicos sobre el CLR dejen de ser despreciables: (a) temperaturas apreciablemente mayores que 523 K; (b) cargas de contacto más altas o CLR iniciales menores que incrementen localmente σ ; y (c) orientaciones cristalográficas que reduzcan τ_{thres} en sistemas de deslizamiento favorablemente orientados. Una exploración cuantitativa del caso (a) excede el alcance de este trabajo.

El prefactor normalizado se deriva directamente de la Ec. (3.37): $\dot{\gamma}_0(T)/\dot{\gamma}_0(523 \text{ K}) = \exp[-Q(T)(1/T - 1/523)]$, con $Q(T)$ dado por la Ec. (3.37). Estos resultados de sensibilidad indican que, dentro del rango nominal de temperatura PWR (en torno a 523 K), la deformación por irradiación gobierna la evolución de la CLR frente a los mecanismos térmicos. Aun así, su inclusión explícita es esencial: antes de estas simulaciones no estaba establecido el alcance de la influencia del *creep* térmico en la dinámica de contacto. La resolución conjunta (micromecánica–FEM) de irradiación y efectos térmicos evidencia que, aunque su efecto sobre el CLR es acotado a 523 K, los mecanismos térmicos alteran mediblemente la relajación transitoria de tensiones y el patrón espacial de contacto tubo–grilla

6.14 Efectos de temperatura y tensión sobre la CLR

Con el fin de cuantificar cómo varían las curvas de CLR ante cambios térmicos y mecánicos, se consideran dos familias de simulaciones: (i) un barrido de temperatura en torno al valor nominal y (ii) un barrido de carga de contacto modulado por PI y PE.

Cuadro 6.1: Matriz de casos para el estudio paramétrico (todos con irradiación).

Caso	T (K)	Irrad.	PI (MPa)	PE (MPa)	Comentario
1	450	Sí	10	15.5	T menor en torno a la nominal
2	596	Sí	10	15.5	T mayor en torno a la nominal
3	523	Sí	15.5	10	PI > PE (tipo <i>inflation</i>)
4	523	Sí	5	15.5	PI < PE (pérdida de gas interno)

Impacto sobre el CLR. La Fig. 6.34 compara la evolución del CLR para los cuatro casos de la Tabla 6.1. A igualdad de temperatura, alterar el estado tensional invirtiendo o ampliando el dife-

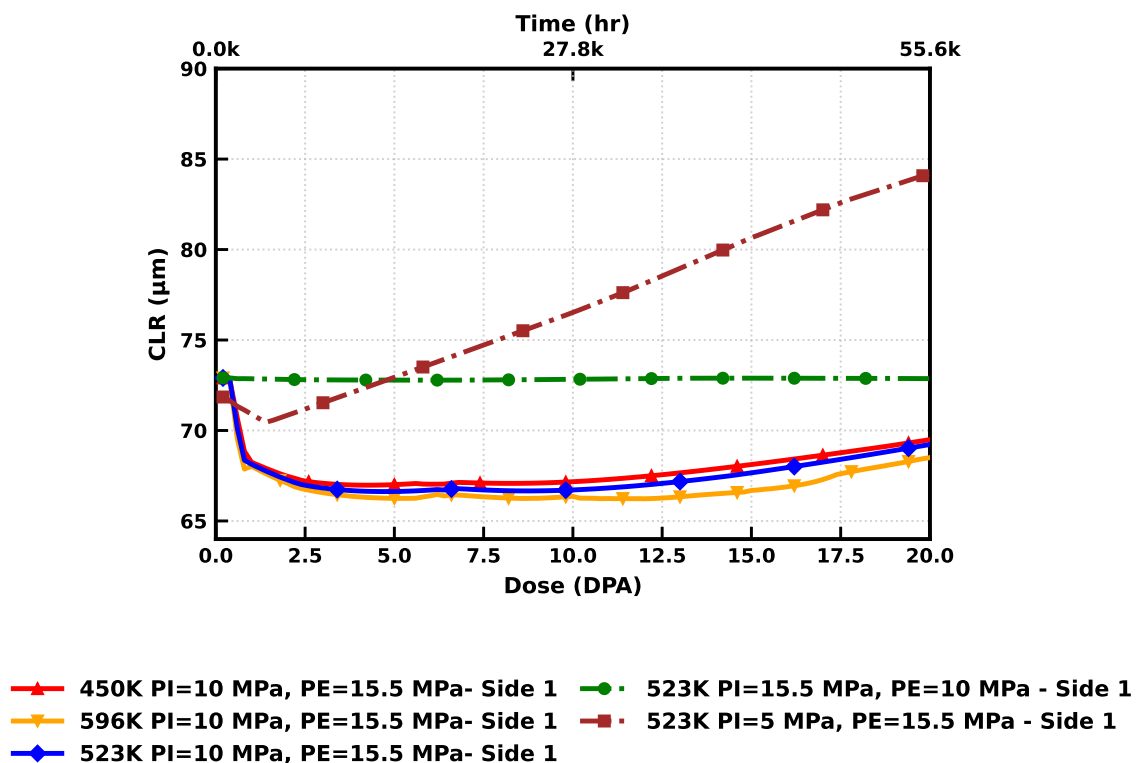


Figura 6.34: CLR máxima bajo carga acoplada irradiación+térmica para los cuatro casos de la Tabla 6.1.

rencial de presiones modifica la CLR de manera cualitativa: en el Caso 3 (523 K, $PI > PE$; *inflation*) el tubo se apoya sobre la grilla y la CLR se mantiene prácticamente constante —no aparece separación pese a la acumulación de dosis—, mientras que en el Caso 4 (523 K, $PI < PE$) el CLR aumenta de forma marcada, con implicancias operativas por el potencial de *fretting*. En síntesis, para la configuración analizada, la respuesta del modelo resulta mucho más sensible al estado tensional impuesto por PI/PE que a variaciones de temperatura dentro del rango ensayado.

Interpretación y alcance. Estos resultados son consistentes con las expectativas constitutivas de la Sec. 3.2.4: la tasa de *creep* térmico aumenta con el prefactor dependiente de la temperatura $\dot{\gamma}_0(T)$ y escala fuertemente con σ^n ($n=4$). En la configuración presente, sin embargo, el estado tensional inducido por PI/PE gobierna la evolución de la CLR frente al rango de temperaturas probado, mientras que los mecanismos térmicos modulan principalmente los transitorios y la relajación local de tensiones. Importa destacar que esto no modifica la cinética lineal (proporcional a la tasa de dosis) adoptada para el *creep* por irradiación, que permanece superpuesta y gobernada por sus propios parámetros.

6.15 Límite actual de escala geométrica y perspectivas de escalamiento

El alcance computacional del marco propuesto está hoy condicionado por el tamaño de la geometría —y, en consecuencia, por la cantidad de elementos y puntos de integración que activan la constitutiva policristalina—. Los resultados presentados se obtuvieron sobre una malla tridimensional del conjunto tubo–grilla con 1114 elementos hexaédricos (Fig. 6.35); la simulación del contacto no lineal se ejecutó en un *AMD EPYC 7513 32-Core* (64 hilos) a 2.6 GHz, con paralelización **MPI** en 4 procesos, arrojando un tiempo total de cómputo del orden de 16 horas. Este orden de magnitud ilustra el costo de evaluar, en cada punto material, la respuesta cristalográfica con rotación de marcos y módulo tangente consistente.

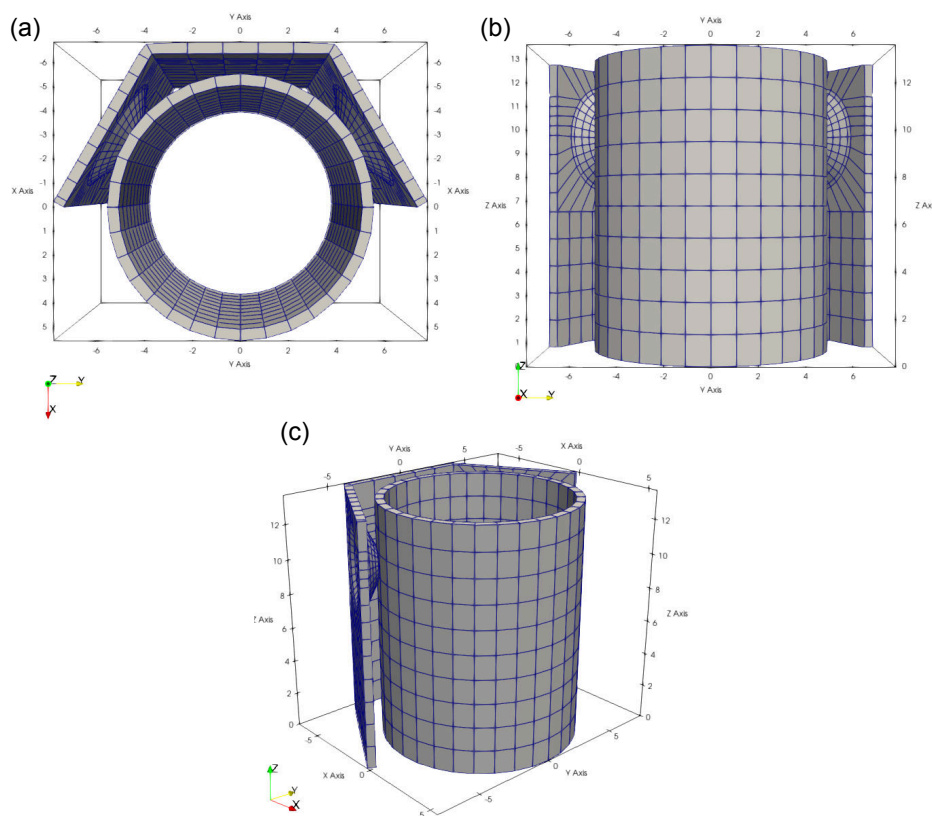


Figura 6.35: Mallas de conjunto de Tubo y Grilla, vistas: (a) superior, (b) frontal y (c) isométrica

Para mantener tiempos razonables, se introdujo una simplificación local en la zona de interacción: la geometría completa del resorte de la grilla —encargado del contacto permanente tubo–grilla— se reemplazó por una carga equivalente (Fig. 6.2). La sustitución reduce drásticamente el número de elementos y puntos de Gauss activos en contacto y, con ello, la cantidad de agregados policristalinos resueltos en cada incremento. El compromiso es claro: se pierde resolución geométrica en regiones donde los campos son altamente localizados y no lineales, a cambio de viabilidad computacional para explorar escenarios de operación.

Una descripción fiel del resorte y de la celda central de la grilla (Figs. 6.36 y 6.37) permitiría capturar, con mayor realismo, la relocalización de presiones y regímenes tangenciales en los *dimples/springs*. Sin embargo, el costo crece de manera prohibitiva: mallas completas de referencia alcanzan 6.06×10^5 elementos (Fig. 6.38). Extrapolando linealmente el costo por punto de integración, una corrida de esa escala demandaría del orden de $8,7 \times 10^3$ horas incluso con paralelización similar, lo que desplaza el problema desde la física hacia la infraestructura de cómputo.

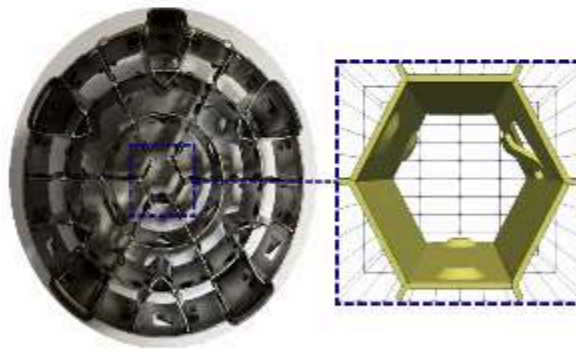


Figura 6.36: Geometría fiel del hexágono central de la grilla espaciadora

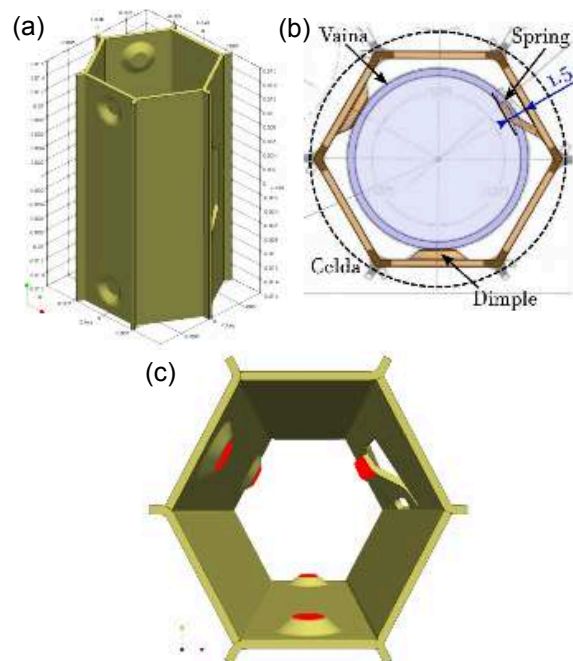


Figura 6.37: (a) Vista isométrica de la geometría correspondiente al hexágono central de la grilla. (b) vista superior del conjunto tubo-grilla y (c) zonas de contacto (en rojo) de la grilla hacia el tubo

Este límite de escala no es solo geométrico: también interviene la cinemática. Como se discute en la Sección 7.2.1, la ausencia de una actualización automática de la matriz de rotación **R** en cada paso de carga en CODE_ASTER compromete la precisión bajo grandes deformacio-

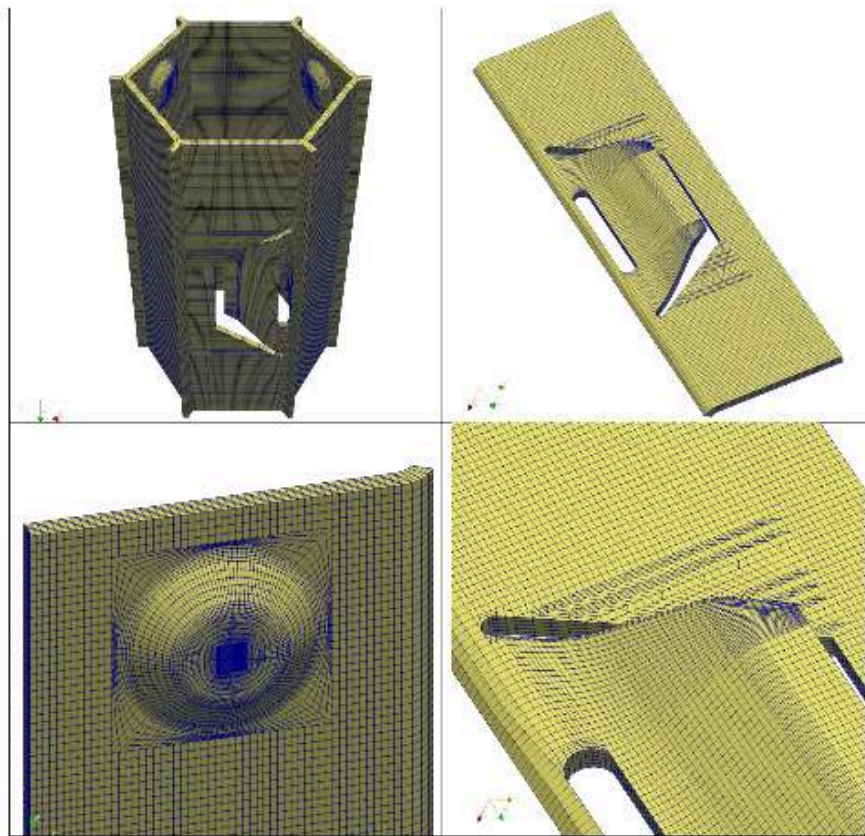


Figura 6.38: Detalles del mallado de la geometría del hexágono central a la grilla.

nes. Esto se debe a que, en la implementación actual, `CODE_ASTER` no expone dentro de la UMAT los gradientes de deformación análogos a `DFGRD0/DFGRD1` de `ABAQUS`, necesarios para recalcular $\mathbf{R}$ incremento a incremento. En una geometría con resortes explícitos, los brazos del resorte pueden experimentar rotaciones significativas; si la orientación del sistema material (Sección 4.4) no se actualiza de manera consistente al converger cada incremento, se introducen errores acumulativos en la dirección cristalográfica efectiva y, por ende, en la predicción anisotrópica de tensiones y deformaciones.

Reconocer esta frontera es parte del aporte de la tesis: el modelo resuelve con fidelidad física un dominio representativo y, al mismo tiempo, explicita dónde se ubican las barreras para escalar a geometrías completas. La continuidad natural de este trabajo pasa por explorar estrategias de escalamiento que mantengan el vínculo micro–macro sin incurrir en costos inabordables: acoplamiento global–local con *submodeling* para concentrar resolución donde el contacto domina la respuesta; enriquecimientos selectivos que limiten la evaluación VPSC a vecindades activas de contacto; modelos reducidos y sustitutos calibrados sobre la constitutiva cristalográfica para aliviar el costo por punto de Gauss; y paralelización más fina a nivel de integración local (vectorización/OMP en la UMAT combinada con MPI a nivel de dominio). Estas líneas, fuera del alcance

de la validación presentada, constituyen la ruta inmediata para superar el límite de escala aquí documentado sin sacrificar trazabilidad física en las zonas críticas del contacto.

Capítulo 7

Conclusiones y Perspectivas

7.1 Conclusiones

En esta tesis se desarrolló e implementó un marco de simulación multiescala que integra el modelo de plasticidad cristalina VPSC con el código de elementos finitos *Code_Aster*, mediante una interfaz VPSC–CAFEM capaz de intercambiar de forma coherente los tensores de tensiones y deformaciones, junto con la matriz tangente consistente con el algoritmo de resolución. La formulación basada en una descomposición aditiva de deformaciones permite un acoplamiento analítico entre elasticidad y viscoplasticidad en un entorno abierto y extensible, superando las limitaciones de versiones recientes de VPSC de acceso libre. La herramienta se validó frente a ejecuciones con VPSC independiente y luego se aplicó al análisis del contacto no lineal entre el tubo de revestimiento y la grilla espaciadora de un conjunto combustible, incorporando la geometría real de los *dimples* de apoyo y considerando efectos de irradiación y de activación térmica.

Los principales resultados y aportes pueden sintetizarse en los siguientes puntos:

1. **Acoplamiento y validación.** El acople VPSC–CAFEM reproduce de manera estable la respuesta de VPSC a nivel de punto material y la transfiere con consistencia al nivel de componente, asegurando la correcta comunicación de tensores y del operador tangente a lo largo de los incrementos del FEM.
2. **Dependencia con tensión del *creep* térmico.** A 523 K y 200 MPa, la deformación axial evoluciona de 0.018 (solo irradiación, 20 dpa) a 0.027 al incluir *creep* y expansión térmica, lo que representa un incremento cercano al 50 % y confirma la sensibilidad del *creep* térmico a la tensión en condiciones de operación estacionaria.
3. **Influencia de la textura cristalográfica.** La evolución de la separación de contacto (CLR)

está fuertemente condicionada por la textura. Configuraciones con polos prismáticos alineados con la normal de la chapa de los *dimples* reducen el *CLR* y favorecen la resistencia al desgaste por *fretting*. Este comportamiento se corroboró mediante la simulación de un monocristal con la misma orientación bajo la misma dosis de irradiación.

4. **Efectos térmicos: impacto global acotado, relevancia local.** La incorporación de *creep* y expansión térmica altera poco la cinemática global de contacto (variaciones del *CLR* inferiores al 1 % respecto del caso dominado por irradiación), pero modifica los campos locales de tensiones y deformaciones a través de mecanismos de relajación y ablandamiento, en concordancia con la activación preferente de sistemas prismáticos.
5. **Precarga térmica y estabilidad del contacto.** Una variación inicial de temperatura ($\Delta T = 523$ K) adelanta el inicio del contacto tubo–grilla, lo que podría mejorar la estabilidad mecánica inicial y mitigar vibraciones inducidas por flujo en la fase temprana de operación.
6. **Dominio de la micromecánica sobre la elasticidad macroscópica.** Los campos de tensiones y deformaciones simulados muestran mayor sensibilidad a la actividad de deslizamiento y a la acumulación de defectos cristalinos—principalmente la generación de dislocaciones y, bajo irradiación, de vacancias e intersticiales—que a variaciones razonables de las constantes elásticas, lo que destaca el rol de la micromecánica en la respuesta estructural.

En conjunto, esta metodología de plasticidad cristalina ofrece un entendimiento profundo de la interacción mecánica en componentes de combustible sometidos a irradiación y temperatura. Al mismo tiempo, constituye una herramienta de simulación abierta y extensible que permite realizar “ensayos virtuales” y sirve de base para derivar modelos fenomenológicos de menor costo computacional, facilitando el diseño y la evaluación de componentes internos de reactor en escenarios industriales más complejos.

Limitaciones del enfoque adoptado. La formulación desarrollada en esta tesis se basa en la hipótesis de deformaciones infinitesimales, lo cual resulta adecuado para los regímenes de deformación considerados en los problemas analizados, dominados por contacto no lineal, irradiación y activación térmica en condiciones cuasi-estacionarias. No obstante, esta aproximación presenta limitaciones frente a situaciones que involucran grandes deformaciones, rotaciones finitas o cambios geométricos significativos, donde una formulación en deformaciones finitas se vuelve necesaria para mantener la consistencia cinemática y constitutiva.

En este sentido, la extensión del acople VPSC–CAFEM hacia un marco de deformaciones finitas constituye una línea natural de trabajo futuro, actualmente en desarrollo, que permitirá ampliar el rango de aplicabilidad del modelo y abordar escenarios con mayor no linealidad geométrica y trayectorias de carga complejas.

7.2 Perspectivas a Futuro

7.2.1 Extensión del modelo a grandes deformaciones

Para llevar el acople VPSC–CAFEM al régimen de *grandes deformaciones* es imprescindible *actualizar objetivamente* la base material local: la rotación $\mathbf{R}$ debe evolucionar a cada paso, porque el sistema local se deforma y gira con el material [Nolan et al. \(2022\)](#). Aquí aparece una dificultad práctica en CODE_ASTER: a diferencia de la UMAT de ABAQUS, las variables DFGRD0 y DFGRD1 (gradientes de deformación inicial y final) no están disponibles. Esto impide, de forma directa, una actualización de $\mathbf{R}$ basada en el gradiente de deformación provisto por el *solver*.

Estrategias de actualización de $\mathbf{R}$. En ausencia de DFGRD0/1, se contemplan dos vías equivalentes en espíritu:

1. *Vía cinemática (espín)*: reconstruir el gradiente de velocidad $\mathbf{L}$ en los puntos de Gauss y descomponerlo como $\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$, con $\mathbf{D}$ simétrica (deformación) y $\mathbf{W}$ antisimétrica (espín). Integrar la ecuación $\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{W} \mathbf{R}$ con un esquema estable (p. ej., exponencial matricial o actualización ortonormalizada) para obtener $\mathbf{R}^{t+\Delta t}$.
2. *Vía polar incremental*: reconstruir el gradiente de deformación incremental $\mathbf{F}^{t \rightarrow t+\Delta t}$ a partir de los campos nodales y realizar la descomposición polar $\mathbf{F} = \mathbf{R} \mathbf{U}$ (o $\mathbf{F} = \mathbf{V} \mathbf{R}$); tomar $\mathbf{R} = \text{polar}(\mathbf{F})$ como rotación material y propagarla en el tiempo.

La primera vía puede apoyarse en el *Green–Lagrange* $\mathbf{E}$ para estimar $\mathbf{L}$ (vía tasas) y extraer $\mathbf{W}$; la segunda utiliza directamente $\mathbf{F}$ y evita trabajar con tasas, al precio de una reconstrucción incremental más cuidadosa. En ambos casos, la preservación de la ortogonalidad de $\mathbf{R}$ (re-ortonormalización o $\exp(\Delta t \mathbf{W})$) es clave para la estabilidad numérica.

Impacto físico y alcance. Actualizar $\mathbf{R}$ bajo grandes deformaciones no es sólo un requisito numérico: permite capturar la rotación macroscópica de los granos y, con ello, la evolución de orientaciones y de la textura a nivel de agregado. Esta consistencia cinemática es esencial para predecir correctamente la respuesta anisotrópica en cargas con trayectorias complejas (descarga/recarga, inversión de caminos, contactos con fricción, etc.). La implementación robusta de

este esquema —actualmente en fase de validación— habilitará la generalización del modelo a dominios con alta no linealidad geométrica y ampliará su aplicabilidad en escenarios industriales.

7.2.2 Incorporación de Plasticidad Instantánea

La *plasticidad instantánea* se diferencia del creep en que aparece cuando la tensión aplicada se acerca a la tensión de fluencia o cuando se impone una cierta velocidad de deformación. En un reactor nuclear en operación, condiciones anormales pueden generarse debido a fluctuaciones de temperatura asociadas a un accidente por pérdida de refrigerante (LOCA) o por un accidente de reactividad (RIA). En estos casos, los aumentos locales de temperatura, presión interna en la vaina y tensiones pueden inducir deformación plástica instantánea, llevando a fenómenos de *ballooning* e incluso a la rotura de los tubos de revestimiento.

En este régimen, las dislocaciones móviles interactúan con la microestructura modificada por la irradiación (por ejemplo, cúmulos intersticiales o lazos de dislocaciones). El efecto de la irradiación sobre la tensión de fluencia y el endurecimiento se traduce en un aumento de la resistencia y una reducción de la ductilidad a medida que crece la dosis de irradiación (Cazalis et al., 2007; Deo et al., 2008; Gittus, 1974; Le Saux et al., 2008; Lucas and Pelloux, 1981; Maloy et al., 2001; Onchi et al., 1980). Además, la irradiación inhibe la formación de maclas, y en el caso particular del Zircaloy, el maclado deja de ser un mecanismo activo por encima de los 400 K. Por esta razón, en los estudios del comportamiento de las vainas no se considera la contribución de maclas.

El valor máximo de tensión interna que el material puede sostener corresponde a la *tensión de fluencia*, estado en el cual las dislocaciones comienzan a moverse. Durante la deformación plástica o bajo irradiación, la densidad de dislocaciones aumenta, lo que incrementa también la cantidad de obstáculos que estas dislocaciones deben superar al migrar. En consecuencia, la tensión de fluencia crece tanto con la deformación como con la irradiación, en un fenómeno conocido como *endurecimiento* (por trabajo o por irradiación).

Si bien esta tesis no implementa el modelo de evolución de dislocaciones de Beyerlein y Tomé (Beyerlein and Tomé, 2008) para Zr —ni su extensión que incorpora la evolución de lazos bajo irradiación—, ambos se adoptan como marco de referencia. Sus parámetros fueron calibrados por Le Saux et al. (Le Saux et al., 2008) a partir de ensayos de tracción en Zircaloy-4, irradiado y no irradiado, en un rango de temperaturas y tasas de deformación. En esta línea, el presente trabajo sienta las bases para que desarrollos futuros integren estas formulaciones avanzadas al marco VPSC, con miras a capturar de forma más realista el endurecimiento por irradiación.

El enfoque considera el deslizamiento en planos prismáticos, basales y piramidales; por lo tanto, la velocidad total de deformación a nivel de grano se expresa mediante la ecuación viscoplástica general (Eq. 3.23). Se adopta un exponente de sensibilidad a la tasa $n = 20$, suficientemente alto para aproximar un umbral casi rate–independiente: no se activa deformación plástica mientras la tensión cortante resuelta permanezca por debajo de la tensión umbral del sistema.

7.2.3 Mejora del desempeño computacional del modelo VPSC

El modelo VPSC es ampliamente utilizado para simular la respuesta de materiales policristalinos sometidos a grandes deformaciones. No obstante, su elevado costo computacional ha sido históricamente una limitación, en especial cuando se lo acopla con FEM en simulaciones multiescala.

Una línea de desarrollo reciente orientada a superar esta dificultad es la implementación propuesta por Galán et al. (2014), quienes desarrollaron una versión optimizada del código, denominada **VPSC90**. Esta nueva formulación conserva la misma física que el VPSC clásico, pero introduce mejoras sustanciales en el algoritmo numérico y en la arquitectura del software.

El enfoque de Galán et al. (2014) aplica de manera directa el método de Newton–Raphson a todo el sistema de ecuaciones que rige el comportamiento del agregado policristalino: la ecuación constitutiva elasto–viscoplástica macroscópica, las ecuaciones de interacción de cada grano y la condición micro–macro. A diferencia de versiones anteriores como VPSC7, que emplean varios niveles de iteraciones anidadas, esta estrategia permite calcular en una sola pasada las correcciones de tensiones en los granos, eliminando redundancias numéricas y mejorando notablemente la robustez y la velocidad de convergencia.

Para reducir aún más el costo computacional, se incorporaron criterios heurísticos que evitan recalcular el tensor de compliance plástico cuando no aporta mejoras, disminuyendo así de forma significativa la cantidad de veces que debe resolverse el costoso problema de inclusión de Eshelby. Estas optimizaciones se complementan con una región de confianza y una ponderación de los residuos que estabilizan el método aun con altos exponentes de sensibilidad a la velocidad.

La implementación se realizó en Fortran 90 con una arquitectura modular que facilita su uso tanto como programa independiente como en subrutinas de Abaqus/Standard. Además, su compatibilidad con la ejecución en paralelo permite aprovechar de forma eficiente equipos multinúcleo, logrando aceleraciones del orden de 20–30 veces respecto a VPSC7-UMAT y de 2–4 veces en comparación con VPSC7, sin pérdida de precisión en las predicciones de textura ni de respuesta mecánica.

7.2.4 Impacto en simulaciones FEM

Las simulaciones realizadas en este trabajo muestran que la integración eficiente del modelo VPSC dentro de un marco multiescala permite lograr tiempos de cómputo competitivos, incluso en contextos de contacto y deformaciones no lineales. En particular, se alcanzaron los siguientes resultados:

- El tiempo por punto de integración fue de **33–38 ms**, dependiendo del esquema de aceleración de convergencia utilizado.
- El tiempo total de simulación FEM, considerando resolución de contacto, equilibrio global y llamadas a UMAT para todos los puntos de integración, fue de **243 segundos** (4 minutos y 3 segundos), utilizando paralelización MPI con 4 procesos.
- La fidelidad del modelo se mantuvo, reproduciendo de forma precisa la respuesta mecánica y la evolución de la textura cristalográfica del agregado.

Estos resultados fueron obtenidos en un nodo de cómputo de alto rendimiento con procesador *AMD EPYC 7513 de 32 núcleos físicos* (64 hilos) a 2.6 GHz, demostrando que el esquema de resolución propuesto es adecuado para simulaciones multiescala complejas con tiempos razonables de ejecución.

Como perspectiva a futuro, sería deseable incorporar técnicas de optimización adicionales como las implementadas por Galán et al. [Galán et al. \(2014\)](#), quienes desarrollaron una versión más eficiente del modelo VPSC (VPSC90) con mejoras significativas en la estructura algorítmica y la gestión de memoria, lo que permitió una reducción aún mayor de los tiempos de cómputo en entornos FEM.

7.2.5 Incorporación de la elasticidad en el VPSC sin enfoque analítico

Una evolución natural del presente marco multiescala consiste en extender el modelo VPSC para incorporar la respuesta elástica de cada grano mediante un esquema elasto–viscoplástico autoconsistente, sin depender del cálculo analítico de la deformación elástica ni de la matriz tangente consistente. En esta línea, Jeong y Tomé ([Jeong and Tomé, 2020](#)) proponen un enfoque incremental denominado Δ EVPS, que unifica en un único tensor *compliance* elasto–viscoplástico la interacción entre los granos y el medio efectivo. Esta formulación evita la resolución separada de los problemas elástico y viscoplástico, elimina incompatibilidades en la transición elasto–plástica y mejora tanto la estabilidad numérica como la eficiencia computacional frente a esquemas EVPS convencionales.

Integrar este tipo de formulación en el acople VPSC–CAFEM permitiría capturar de manera más realista la evolución simultánea de tensiones elásticas internas y deformaciones plásticas, describiendo con mayor fidelidad fenómenos como el *springback*, la inversión de trayectoria de carga y el efecto Bauschinger, sin incrementar significativamente el costo de cómputo. Esta vía de desarrollo abriría la posibilidad de estudiar no solo el régimen de grandes deformaciones plásticas, sino también la respuesta durante etapas de descarga y recarga, ampliando el alcance de la metodología a escenarios industriales donde la recuperación elástica desempeña un papel crítico.

Bibliografía

- Adamson, R., Garzarolli, F., Patterson, C., 2009. In-reactor creep of zirconium alloys. Advanced Nuclear Technology International.
- Adamson, R.B., Coleman, C.E., Griffiths, M., 2019. Irradiation creep and growth of zirconium alloys: A critical review. Journal of Nuclear Materials 521, 167–244.
- Agouzal, E., 2024. Reduced order models in quasi-static nonlinear mechanics for state estimation by calibration through data assimilation: application to containment buildings. Ph.d. thesis. Université de Bordeaux.
- Aguzzi, F., Armoa, M., Rabazzi, S.M., Pairetti, C., Albanesi, A.E., 2026. Multiphysics finite element modeling of irradiation and thermal behavior demonstrated on a fuel-assembly problem. Nuclear Engineering and Design 447, 114648.
- Aguzzi, F., Nervi, J.R., Signorelli, J., 2022. Implementación numérica de una ley de comportamiento bajo irradiación en el marco de una ley de usuario (umat) en el código code-aster. Mecánica Computacional 39, 1093–1106.
- Aguzzi, F., Rabazzi, S., Armoa, M., Pairetti, C., Albanesi, A., 2025a. Multiphysics finite element modeling of irradiation and thermal behavior demonstrated on a fuel-assembly problem. Nuclear Engineering and Design Under review; Manuscript No. NED-D-25-01161. Corresponding author: Prof. Dr. Alejandro Albanesi.
- Aguzzi, F., Rabazzi, S.M., Armoa, M., Pairetti, C., Albanesi, A.E., 2025b. An open-source finite element toolbox for anisotropic creep and irradiation growth: Application to cladding tube and spacer grid. Nuclear Engineering and Design Under review.
- Aguzzi, F., Signorelli, J.W., 2024. Integración del modelo visco-plástico autoconsistente con leyes bajo irradiación de creep y crecimiento en el código de elementos finitos code aster, in: XL Congreso Argentino de Mecánica Computacional.

- Aguzzi, F.E., Rabazzi, S.M., Armoa, M.S., Pairetti, C.I., Albanesi, A.E., 2025c. An open-source finite element toolbox for anisotropic creep and irradiation growth: Application to tube and spacer grid assembly. *Nuclear Engineering and Design* 444, 114345. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0029549325005229>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2025.114345>.
- Albanesi, A.E., 2011. Inverse Design Methods for Compliant Mechanisms. Tesis doctoral. Universidad Nacional de Rosario. Argentina.
- Anand, L., Kalidindi, S., 1994. The process of shear band formation in plane strain compression of fcc metals: effects of crystallographic texture. *Mechanics of Materials* 17, 223–243.
- Asaro, R., Needleman, A., 1985. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystal. *Acta metallurgica et Materialia* 33, 923–953.
- Ashby, M.F., 1972. A first report on deformation-mechanism maps. *Acta Metallurgica* 20, 887–897.
- Bailey, R.W., 1935. Creep of steel under simple and complex conditions of stress. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers* 131, 131–150.
- Barashev, A.V., Golubov, S.I., Stoller, R.E., 2012. Theoretical investigation of microstructure evolution and deformation of zirconium under cascade damage conditions. Technical Report. Oak Ridge National Lab.(ORNL), Oak Ridge, TN (United States).
- Barashev, A.V., Golubov, S.I., Stoller, R.E., 2015. Theoretical investigation of microstructure evolution and deformation of zirconium under neutron irradiation. *Journal of Nuclear Materials* 461, 85–94.
- Barton, N.R., Knap, J., Arsenlis, A., Becker, R., Hornung, R.D., Jefferson, D.R., 2008. Embedded polycrystal plasticity and adaptive sampling. *International Journal of Plasticity* 24, 242–266.
- Beyerlein, I., Tomé, C., 2008. A dislocation-based constitutive law for pure zr including temperature effects. *International Journal of Plasticity* 24, 867–895.
- Beyerlein, I.J., Tomé, C.N., 2007. Modeling transients in the mechanical response of copper due to strain path changes. *International Journal of Plasticity* 23, 640–664.
- Billerey, A., 2005. Evolution of fuel rod support under irradiation—impact on the mechanical behaviour of fuel assemblies. *Structural behaviour of fuel assemblies for water cooled reactors* , 101–111.

- Bishop, J., Hill, R., 1951. Xlvi. a theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 42, 414–427.
- Boiteau, O., 2015. Mot clé SOLVEUR (U4.50.01). EDF R&D, Code_Aster. Keyword factor SOLVEUR. Version: default.
- Brailsford, A., Bullough, R., 1972. The rate theory of swelling due to void growth in irradiated metals. *Journal of Nuclear Materials* 44, 121–135.
- Brenner, R., Masson, R., Castelnau, O., Zaoui, A., 2002. A “quasi-elastic” affine formulation for the homogenised behaviour of nonlinear viscoelastic polycrystals and composites. *European Journal of Mechanics A/Solids* 21, 943–960.
- Buckley, S., 1962. Irradiation growth, in proceedings in international conference: Properties of reactor materials and effects of irradiation damage.
- Bullough, R., Wood, M., 1980. Mechanisms of radiation induced creep and growth. *Journal of Nuclear Materials* 90, 1–21.
- Bunge, H.J., 2013. *Texture analysis in materials science: mathematical methods*. Elsevier.
- Butcher, F., Donohue, S., 1986. In-reactor deformation of cold-drawn tubes of Zr-2.5 wt % Nb. Internal report CNRL-4022. CNRL.
- Canova, G., Kocks, U., Jonas, J., 1984. Theory of torsion texture development. *Acta Metallurgica* 32, 211–226.
- Canova, G., Kocks, U., Tomé, C., Jonas, J., 1985. The yield surface of textured polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 33, 371–397.
- Carpenter, G., Zee, R., Rogerson, A., 1988. Irradiation growth of zirconium single crystals: A review. *Journal of Nuclear Materials* 159, 86–100.
- Causey, A., Butcher, F., Donohue, S., 1988a. Measurement of irradiation creep of zirconium alloys using stress relaxation. *Journal of Nuclear Materials* 159, 101–113.
- Causey, A., Woo, C., Holt, R., 1988b. The effect of intergranular stresses on the texture dependence of irradiation growth in zirconium alloys. *Journal of Nuclear Materials* 159, 225–236.

- Cazado, M.E., Goldberg, E., Togneri, M.A., Denis, A., Soba, A., 2021. A new irradiation growth model for zr-based components of nuclear reactors for the dionisio code. *Nuclear Engineering and Design* 373, 111009.
- Cazalis, B., Desquines, J., Poussard, C., Petit, M., Monerie, Y., Bernaudat, C., Yvon, P., Averty, X., 2007. The prometra program: Fuel cladding mechanical behavior under high strain rate. *Nuclear technology* 157, 215–229.
- Chapra, S.C., Canale, R.P., Ruiz, R.S.G., Mercado, V.H.I., Díaz, E.M., Benites, G.E., 2011. Métodos numéricos para ingenieros. volume 5. McGraw-Hill New York, NY, USA.
- Cheadle, B.A. (Ed.), 1974. *The Physical Metallurgy of Zirconium Alloys*. Atomic Energy of Canada Limited.
- Chen, W., Tan, V.B.C., Zeng, X., Li, P., 2022. Fe2 methodology for discrete cohesive crack propagation in heterogenous materials. *Engineering Fracture Mechanics* 269, 108537.
- Choi, M.H., Kang, H.S., Yoon, K.H., Song, K.N., 2004. Vibration analysis of a dummy fuel rod continuously supported by spacer grids. *Nuclear Engineering and Design* 232, 185–196.
- Christien, F., Barbu, A., 2009. Cluster dynamics modelling of irradiation growth of zirconium single crystals. *Journal of Nuclear Materials* 393, 153–161.
- Christodoulou, N., Causey, A.R., Holt, R.A., Tomé, C.N., Badie, N., Klassen, R.J., Sauvé, R., Woo, C.H., 1996. Modeling in-reactor deformation of zr-2.5 nb pressure tubes in candu power reactors, in: *Zirconium in the Nuclear Industry: Eleventh International Symposium*, ASTM International.
- Christodoulou, N., Chow, C., Turner, P., Tomé, C., Klassen, R., 2002. Analysis of steady-state thermal creep of zr-2.5 nb pressure tube material. *Metallurgical and Materials Transactions A* 33, 1103–1115.
- Code_Aster, 2024a. Affe_cara_elem. https://code-aster.org/doc/v15/fr/man_u/u4/u4.42.01.pdf. Version 15. Documentation générale du Code_Aster.
- Code_Aster, 2024b. Surcharge des mots-clés defi_materiau et affe_materiau. https://code-aster.org/doc/v15/fr/man_u/u4/u4.41.01.pdf. Version 15. Documentation générale du Code_Aster.
- Code_Aster Team, 2017. Tips on Contact Simulation with Code_Aster. EDF R&D. URL: <https://www.code-aster.org>. [U2.04.04].

- CONUAR, 2025. Conuar - combustibles nucleares argentinos. URL: <https://www.conuar.ar/>.
- Dassault Systèmes, 2009. User-defined mechanical material behavior — umat. <https://classes.engineering.wustl.edu/2009/spring/mase5513/abaqus/docs/v6.6/books/sub/default.htm?startat=ch01s01asb31.html#sub-rtn-uumat>.
- De Borst, R., Crisfield, M.A., Remmers, J.J., Verhoosel, C.V., 2012. Nonlinear finite element analysis of solids and structures. John Wiley & Sons.
- De Souza Neto, E.A., Blanco, P.J., Sánchez, P.J., Feijóo, R.A., 2015. An rve-based multiscale theory of solids with micro-scale inertia and body force effects. *Mechanics of Materials* 80, 136–144.
- Delannay, L., Jacques, P.J., Kalidindi, S.R., 2006. Finite element modeling of crystal plasticity with grains shaped as truncated octahedrons. *International Journal of Plasticity* 22, 1879–1898.
- Deo, C., Tomé, C., Lebensohn, R., Maloy, S., 2008. Modeling and simulation of irradiation hardening in structural ferritic steels for advanced nuclear reactors. *Journal of nuclear materials* 377, 136–140.
- Douglass, D.L., 1971. The metallurgy of zirconium. *Atomic energy review* .
- EDF R&D, 2019. Finite element modeling using code_aster. https://code-aster.org/doc/v15/en/man_u/u2/u2.10.01.pdf.
- Ehrlich, K., 1981. Irradiation creep and interrelation with swelling in austenitic stainless steels. *Journal of nuclear materials* 100, 149–166.
- ElectricalEasy.com, 2015. Basic layout and working of a nuclear power plant. <https://www.electricaleasy.com/2015/09/nuclear-power-plant.html>. Consultado: día mes año.
- Engler, O., Randle, V., 2010. Texture analysis: Macrottexture, microtexture and orientation mapping.
- Feyel, F., 2003. A multilevel finite element method (fe2) to describe the response of highly nonlinear structures using generalized continua. *Computer Methods in applied Mechanics and engineering* 192, 3233–3244.
- Fidleris, V., 1988. The irradiation creep and growth phenomena. *Journal of Nuclear Materials* 159, 22–42.

- Fisher, E., Renken, C., 1961. Adiabatic elastic moduli of single crystal alpha zirconium. *Journal of Nuclear Materials* 4, 311–315.
- Fisher, E.S., Renken, C.J., 1964. Single-crystal elastic moduli and the hcp→bcc transformation in Ti, Zr, and Hf. *Physical Review* 135, A482.
- Foster, J., Wolfer, W., Biancheria, A., Boltax, A., 1972. Analysis of irradiation-induced creep of stainless steel in fast spectrum reactors. Technical Report. Westinghouse Electric Corp., Madison, Pa.(USA). Advanced Reactors Div.
- Électricité de France, 1989–2017. Finite element *code_aster*, analysis of structures and thermo-mechanics for studies and research. Open source on www.code-aster.org.
- Franklin, D.G., Lucas, G.E., Bement, A.L., 1983. Creep of zirconium alloys in nuclear reactors. 815, ASTM International.
- Galán, J., Verleysen, P., Lebensohn, R., 2014. An improved algorithm for the polycrystal viscoplastic self-consistent model and its integration with implicit finite element schemes. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 22, 055023.
- Galán, J., Lebensohn, R.A., Llorca, J., Tomé, C.N., 2014. An efficient implementation of the viscoplastic self-consistent model in a finite element framework. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 22, 035015.
- Gicquel, C., Onimus, F., Brenner, R., Helfer, T., Masson, R., 2023. Polycrystalline simulations of in-reactor deformation of zircaloy-4 cladding tubes during nominal operating conditions, in: *Zirconium in the Nuclear Industry: 20th International Symposium*, pp. 118–148.
- Gittus, J., 1974. Theory of dislocation creep for a material subjected to bombardment by energetic particles role of thermal diffusion. *Philosophical Magazine* 30, 751–764.
- Goldak, J., Lloyd, L., Barrett, C., 1966. Lattice parameters, thermal expansions, and grüneisen coefficients of zirconium, 4.2 to 1130 k. *Physical Review* 144, 478.
- Golubov, S., Barashev, A., Garner, F., a. A feasible mechanism of irradiation creep explaining its observed cessation at high neutron doses. Manuscript in preparation.
- Golubov, S., Barashev, A., Stoller, R., b. On the origin of radiation growth of hcp crystals (2012). DOI 10, 1037031.

- Golubov, S.I., Barashev, A., Stoller, R.E., 2012. On the origin of radiation growth of hcp crystals. Technical Report. Oak Ridge National Lab.(ORNL), Oak Ridge, TN (United States).
- Golubov, S.I., Barashev, A.V., Stoller, R.E., Singh, B., 2014. Breakthrough in Understanding Radiation Growth of Zirconium. Technical Report. Oak Ridge National Lab.(ORNL), Oak Ridge, TN (United States).
- Govindarajan, R., Aravas, N., 1994a. Deformation processing of metal powders: Part ii—hot isostatic pressing. *International journal of mechanical sciences* 36, 359–372.
- Govindarajan, R., Aravas, N., 1994b. Deformation processing of metal powders: Part i—cold isostatic pressing. *International Journal of Mechanical Sciences* 36, 343–357.
- Griffiths, M., 1988. A review of microstructure evolution in zirconium alloys during irradiation. *Journal of Nuclear Materials* 159, 190–218.
- Griffiths, M., Gilbert, R., 1987. The formation of c-component defects in zirconium alloys during neutron irradiation. *Journal of Nuclear Materials* 150, 169–181.
- Griffiths, M., Gilbon, D., Regnard, C., Lemaignan, C., 1993. Hvem study of the effects of alloying elements and impurities on radiation damage in zr-alloys. *Journal of nuclear materials* 205, 273–283.
- Griffiths, M., Holt, R., Rogerson, A., 1995. Microstructural aspects of accelerated deformation of zircaloy nuclear reactor components during service. *Journal of Nuclear Materials* 225, 245–258.
- Haj-Ali, R., Pecknold, D., Ahmad, M., 1993. Combined micromechanical and structural finite element analysis of laminated composites, in: *ABAQUS Users' Conference*, Aachen, Germany, pp. 233–47.
- Hasan, T., Capolungo, L., Zikry, M., 2023. A machine learning microstructurally predictive framework for the failure of hydrided zirconium alloys. *npj Materials Degradation* 7, 22.
- Hellio, C., De Novion, C., Boulanger, L., 1988. Influence of alloying elements on the dislocation loops created by Zr^{+} ion or by electron irradiation in α -zirconium. *Journal of Nuclear Materials* 159, 368–378.
- Hershey, A., 1954. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals .

- Hill, R., 1965. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 13, 89–101.
- Hill, R., 1967. The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 15, 79–95.
- Holt, R., 1988. Mechanisms of irradiation growth of alpha-zirconium alloys. *Journal of Nuclear Materials* 159, 310–338.
- Holt, R., 2008a. In-reactor deformation of cold-worked zr–2.5 nb pressure tubes. *Journal of Nuclear Materials* 372, 182–214.
- Holt, R., 2008b. In-reactor deformation of Zirconium alloy components. ASTM International.
- Holt, R., Causey, A., Christodoulou, N., Griffiths, M., Ho, E., Woo, C., 1996. Non-linear irradiation growth of cold-worked zircaloy-2. ASTM Special Technical Publication 1295, 623–637.
- Holt, R., Gilbert, R., 1986. <c>component dislocations in annealed zircaloy irradiated at about 570 k. *Journal of Nuclear Materials* 137, 185–189.
- Holt, R., Woo, C., Chow, C., 1993. Production bias—a potential driving force for irradiation growth. *Journal of nuclear materials* 205, 293–300.
- Hussain, A., Al-Othmany, D., 2013. Assessment of aging of zr-2.5 nb pressure tubes for use in heavy water reactor. Assessment 3.
- Ibrahim, E., 1983. Deformation of cold-drawn tubes of zr-2.5 wt % nb after 7 years in-reactor. *Journal of Nuclear Materials* 118, 260–268.
- Ibrahim, E., Holt, R., 1980. Contribution of grain shape to anisotropy of irradiation growth. *Journal of Nuclear Materials* 91, 231–233.
- International, A., . Zirconium in the Nuclear Industry (Series of Symposia, STP). Volúmenes de actas publicados cada 3–4 años, con avances en procesamiento, propiedades y desempeño en servicio.
- International Atomic Energy Agency, 2015. Quality and Reliability Aspects in Nuclear Power Reactor Fuel Engineering. Technical Report. IAEA.
- Jeong, Y., Jeon, B., Tome, C.N., 2021. Finite element analysis using an incremental elasto-viscoplastic self-consistent polycrystal model: Fe simulations on zr and low-carbon steel subjected to bending, stress-relaxation, and unloading. *International Journal of Plasticity* 147, 103110.

- Jeong, Y., Tomé, C.N., 2020. An efficient elasto-visco-plastic self-consistent formulation: Application to steel subjected to loading path changes. *International Journal of Plasticity* 135, 102812. doi:[10.1016/j.ijplas.2020.102812](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102812).
- Jiang, H., Qu, J., Lu, R.Y., Wang, J.A.J., 2016. Grid-to-rod flow-induced impact study for pwr fuel in reactor. *Progress in Nuclear Energy* 91, 355–361.
- Johnson, C., 2009. Numerical solution of partial differential equations by the finite element method. Courier Corporation.
- Joulin, T., Gue´rout, F., Lina, A., Moinereau, D., 2002. Effects of loading conditions and types of motion on pwr fuel rod cladding wear, in: *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, pp. 1011–1018.
- Juarez, G., Buioli, C.P., Flores, A., Dellagnolo, M., Santisteban, J.R., Vicente Alvarez, M.A., Azzi-nari, D., Bianchi, D., Revesz, A., Hoffman, M., et al., 2019. Evolución de la textura cristalina en los procesos de fabricación de combustibles y componentes internos de reactores nucleares de potencia .
- Kalidindi, S.R., 1998. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 46, 267–290.
- Kalidindi, S.R., Bronkhorst, C.A., Anand, L., 1992. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of fcc metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 40, 537–569.
- Kaschner, G., Bingert, J., Liu, C., Lovato, M., Maudlin, P., Stout, M., Tomé, C., 2001. Mechanical response of zirconium—ii. experimental and finite element analysis of bent beams. *Acta Materialia* 49, 3097–3108.
- Kim, H.K., Lee, Y.H., Lee, K.H., 2008. On the geometry of the fuel rod supports concerning a fretting wear failure. *Nuclear Engineering and Design* 238, 3321–3330.
- Kim, K.T., 2010. A study on the grid-to-rod fretting wear-induced fuel failure observed in the 16×16 kofu fuel. *Nuclear Engineering and Design* 240, 756–762.
- Kim, K.T., Suh, J.M., 2009. Impact of nuclear fuel assembly design on grid-to-rod fretting wear. *Journal of Nuclear Science and Technology* 46, 149–157.

- King, S.J., Young, M.Y., Seel, D.D., Conner, M.E., Lu, R.Y., Paramonov, D.V., 2002. Flow induced vibration and fretting wear in pwr fuel, in: International Conference on Nuclear Engineering, pp. 639–648.
- Knezevic, M., Beyerlein, I.J., Brown, D.W., Sisneros, T.A., Tomé, C.N., 2013a. A polycrystal plasticity model for predicting mechanical response and texture evolution during strain-path changes: application to beryllium. *International Journal of Plasticity* 49, 185–198.
- Knezevic, M., McCabe, R.J., Ricardo, L.A., Tomé, C.N., Mihaila, B., 2011. Finite element implementation of a self-consistent polycrystal plasticity model: application to alpha-uranium. Technical Report. Los Alamos National Laboratory (LANL), Los Alamos, NM (United States).
- Knezevic, M., McCabe, R.J., Lebensohn, R.A., Tomé, C.N., Liu, C., Lovato, M.L., Mihaila, B., 2013b. Integration of self-consistent polycrystal plasticity with dislocation density based hardening laws within an implicit finite element framework: Application to low-symmetry metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 61, 2034–2046.
- Knezevic, M., McCabe, R.J., Tomé, C.N., Lebensohn, R.A., Chen, S.R., Cady, C.M., Gray III, G.T., Mihaila, B., 2013c. Modeling mechanical response and texture evolution of α -uranium as a function of strain rate and temperature using polycrystal plasticity. *International Journal of Plasticity* 43, 70–84.
- Kocks, U.F., Tomé, C.N., Wenk, H.R., 2000. Texture and anisotropy: preferred orientations in polycrystals and their effect on materials properties. Cambridge university press.
- Konings, R.J.M., Allen, T.R., Stoller, R.E., Yamanaka, S., 2012. Zirconium alloys: Properties and characteristics, in: Comprehensive Nuclear Materials, Volume 2. Elsevier, pp. —.
- Kouznetsova, V., Geers, M., 2008. A multi-scale model of martensitic transformation plasticity. *Mechanics of Materials* 40, 641–657.
- Le Saux, M., Besson, J., Carassou, S., Poussard, C., Averty, X., 2008. A model to describe the anisotropic viscoplastic mechanical behavior of fresh and irradiated zircaloy-4 fuel claddings under rir loading conditions. *Journal of Nuclear Materials* 378, 60–69.
- Lebensohn, R., Idiart, M., Cruchaga, M., 2021. 4to. webinar: Microstructural & multiscale analysis in computational mechanics. Webinar online. URL: <https://example.com/webinar-link>. organizado por el Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad de Santiago de Chile.

- Lebensohn, R.A., Canova, G., 1997. A self-consistent approach for modelling texture development of two-phase polycrystals: application to titanium alloys. *Acta Materialia* 45, 3687–3694.
- Lebensohn, R.A., Tomé, C., 1993. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals: application to zirconium alloys. *Acta metallurgica et materialia* 41, 2611–2624.
- Lebensohn, R.A., Tomé, C., Castaneda, P.P., 2007. Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations. *Philosophical Magazine* 87, 4287–4322.
- Lebensohn, R.A., Turner, P., Canova, G., 1997. Recent advances in modelling polycrystals with complex microstructures. *Computational materials science* 9, 229–236.
- Lee, Y.H., Kim, H.K., 2013. Fretting wear behavior of a nuclear fuel rod under a simulated primary coolant condition. *Wear* 301, 569–574.
- Lhuillier, D., Tomé, C., 1995. Modeling of irradiation and thermal creep of pressure tubes: 1. Texture reduction and interpolation. Technical Report COG-94-232 RC-1222. Atomic Energy of Canada Ltd.
- Limbäck, M., Andersson, T., 1996. A model for analysis of the effect of final annealing on the in-and out-of-reactor creep behavior of zircaloy cladding, in: *Zirconium in the Nuclear Industry: Eleventh International Symposium*.
- Liu, R., Prudil, A., Zhou, W., Chan, P.K., 2016. Multiphysics coupled modeling of light water reactor fuel performance. *Progress in Nuclear Energy* 91, 38–48.
- Liu, W., Montgomery, R., Tomé, C., 2014. Demonstration of atomistically-informed multiscale zr alloy deformation models in peregrine for normal and accident scenarios. Los Alamos: Report, Los Alamos National Laboratory , 52.
- Liu, W., Montgomery, R., Tome, C., Stanek, C., Hales, J., 2015. Vpsc implementation in bison-casl code for modeling large deformation problems, in: *Mathematics and Computations, Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo International Conference, M and C+ SNA+ MC 2015*, American Nuclear Society. pp. 2682–2693.
- Liu, W., Rashid, J., Sunderland, D., Montgomery, R., Stanek, C., Wirth, B., Hales, J., Williamson, R., 2013. Numerical method of modeling creep of zirconium-alloy cladding in a multi-physics

- fuel performance code, in: LWR Fuel Performance Meeting, Top Fuel 2013, American Nuclear Society. pp. 706–711.
- Lucas, G., Pelloux, R., 1981. Texture and stress state dependent creep in zircaloy-2. *Metallurgical Transactions A* 12, 1321–1331.
- Lustman, B., Kerze, F., 1955. *The Metallurgy of Zirconium*. McGraw–Hill.
- Maloy, S., James, M., Willcutt, G., Sommer, W., Sokolov, M., Snead, L., Hamilton, M., Garner, F., 2001. The mechanical properties of 316L/304L stainless steels, alloy 718 and mod 9cr–1mo after irradiation in a spallation environment. *Journal of Nuclear Materials* 296, 119–128.
- Mansur, L.K., 1979. Irradiation creep by climb-enabled glide of dislocations resulting from preferred absorption of point defects. *Philosophical Magazine A* 39, 497–506.
- Mathur, K.K., Dawson, P.R., 1989. On modeling the development of crystallographic texture in bulk forming processes. *International Journal of Plasticity* 5, 67–94.
- Matsuo, Y., 1987. Thermal creep of zircaloy-4 cladding under internal pressure. *Journal of Nuclear Science and Technology* 24, 111–119.
- McGinty, R.D., 2001. Multiscale representation of polycrystalline inelasticity. Georgia institute of technology.
- Miehe, C., Schröder, J., Schotte, J., 1999. Computational homogenization analysis in finite plasticity simulation of texture development in polycrystalline materials. *Computer methods in applied mechanics and engineering* 171, 387–418.
- Molinari, A., Canova, G., Ahzi, S., 1987. A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metallurgica* 35, 2983–2994.
- Montgomery, R., Tomé, C., Liu, W., Alankar, A., Subramanian, G., Stanek, C., 2017. Use of multiscale zirconium alloy deformation models in nuclear fuel behavior analysis. *Journal of Computational Physics* 328, 278–300.
- Moore, B., Topping, M., Long, F., Daymond, M.R., 2025. Stress and temperature dependence of irradiation creep in zircaloy-4 studied using proton irradiation. *Journal of Nuclear Materials* 603, 155383.
- Moulinec, H., Suquet, P., 1994. Fast numerical method for computing the linear and nonlinear properties of composites, in: *C. R. Acad. Sci., Paris (Series / Comptes Rendus)*. Método seminal FFT para homogenización.

- Moulinec, H., Suquet, P., 1998. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering* 157, 69–94. doi:[10.1016/S0045-7825\(97\)00042-9](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(97)00042-9).
- Moya Rizzo, Á., 2017. Estudios de los cambios de microestructura, textura cristalográfica y propiedades mecánicas en soldaduras de aleaciones de circonio. Tesis doctoral. Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) y Universidad Nacional de Cuyo. Mendoza, Argentina.
- Murgatroyd, R., Rogerson, A., 1980. An assessment of the influence of microstructure and test conditions on the irradiation growth phenomenon in zirconium alloys. *Journal of Nuclear Materials* 90, 240–248.
- Murty, K.L., 1999. Creep studies for zircaloy life prediction in water reactors. *JOM* 51, 32–39.
- Murty, K.L., Charit, I., 2006. Texture development and anisotropic deformation of zircaloys. *Progress in nuclear energy* 48, 325–359.
- Nasirov, A., Zhang, X., Wagner, D., Yeratapally, S.R., Oskay, C., 2024. Achieving high efficiency in reduced order modeling for large scale polycrystal plasticity simulations. *Finite Elements in Analysis and Design* 228, 104053.
- Nolan, D., Lally, C., McGarry, J., 2022. Understanding the deformation gradient in abaqus and key guidelines for anisotropic hyperelastic user material subroutines (umat). *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials* 126, 104940.
- Norgett, M., Robinson, M., Torrens, I.M., 1975. A proposed method of calculating displacement dose rates. *Nuclear engineering and design* 33, 50–54.
- Norton, F.H., 1929. The creep of steel at high temperatures. *Transactions of the American Society of Mechanical Engineers* 51, 533–561.
- Onchi, T., Kayano, H., Higashiguchi, Y., 1980. Effect of neutron irradiation on fracture behavior of zirconium. *Journal of Nuclear Science and Technology* 17, 359–369.
- Onimus, F., Doriot, S., Béchade, J.L., 2020. Radiation effects in zirconium alloys. *Comprehensive Nuclear Materials* 3, 1–56.
- Onimus, F., Gélébart, L., Brenner, R., 2022a. Polycrystalline simulations of in-reactor deformation of recrystallized zircaloy-4 tubes: Fast fourier transform computations and mean-field self-consistent model. *Journal name (si lo encontrás en tu base de datos) FFT + self-consistent coupling, aplicación a Zr en condiciones de reactor*.

- Onimus, F., Gelebart, L., Brenner, R., 2022b. Polycrystalline simulations of in-reactor deformation of recrystallized zircaloy-4 tubes: Fast fourier transform computations and mean-field self-consistent model. *International Journal of Plasticity* 153, 103272.
- Page, R.D., 1976. Canadian Power Reactor Fuel. Technical Report AECL-5609. Atomic Energy of Canada Limited. Mississauga, Ontario. URL: <https://canteach.candu.org/Content%20Library/19760101.pdf>. power Projects, Sheridan Park Research Community.
- Patra, A., Tomé, C.N., 2017. Finite element simulation of gap opening between cladding tube and spacer grid in a fuel rod assembly using crystallographic models of irradiation growth and creep. *Nuclear Engineering and Design* 315, 155–169.
- Patra, A., Tomé, C.N., Golubov, S.I., 2017. Crystal plasticity modeling of irradiation growth in zircaloy-2. *Philosophical Magazine* 97, 2018–2051.
- Peirce, D., Asaro, R., Needleman, A., 1982. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta metallurgica* 30, 1087–1119.
- Prakash, A., Nöhring, W., Lebensohn, R., Höppel, H., Bitzek, E., 2015. A multiscale simulation framework of the accumulative roll bonding process accounting for texture evolution. *Materials Science and Engineering: A* 631, 104–119.
- Proust, G., Tomé, C., Kaschner, G., 2007. Modeling texture, twinning and hardening evolution during deformation of hexagonal materials. *Acta Materialia* 55, 2137–2148.
- Rabazzi, S., Aguzzi, F., 2024. Python code for assigning material systems in code_aster. <https://github.com/Fabrizio1992111/Python-code-for-assigning-material-systems-in-Code-Aster>. Accessed: 2025-04-29.
- Rabazzi, S., Albanesi, A., Signorelli, J., 2024a. Modelo 3D de Espaciador y Elemento Combustible. Condición Inicial de Fuerza de Contacto. Technical Report IFIR-IT-2024-09. Instituto de Física Rosario (IFIR) – Grupo de Física y Micromecánica de Sólidos. Rosario, Argentina. Informe técnico bajo convenio NASA–IFIR.
- Rabazzi, S., Signorelli, F., Aguzzi, F., Armoa, M., Albanesi, A., 2024b. Efecto de la anisotropía en la predicción del comportamiento bajo irradiación de un separador de combustible nuclear, in: XL Congreso Argentino de Mecánica Computacional.

- Rabazzi, S.M., Albanesi, A.E., Nervi, J.E.R., Signorelli, J.W., 2024c. Highly detailed structural integrity assessment of the reactor pressure vessel nozzle of atucha-i during a pressurized thermal shock event. *Nuclear Engineering and Design* 418, 112905.
- Reid, C.N., 2016. Deformation geometry for materials scientists: international series on materials science and technology. volume 11. Elsevier.
- Rogerson, A., 1988. Irradiation growth in zirconium and its alloys. *Journal of Nuclear Materials* 159, 43–61.
- Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D.D., Bieler, T.R., Raabe, D., 2010. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. *Acta materialia* 58, 1152–1211.
- Sachs, G., 1928. *Zietschrift verein. deut. Ing* 72, 734–736.
- Schmid, E., 1924. Neuere untersuchungen metallkristallen, in: *Proceedings of the 1st International Congress for Applied Mechanics, Delft, The Netherlands*. pp. 342–353.
- Segurado, J., Lebensohn, R.A., LLorca, J., Tomé, C.N., 2012. Multiscale modeling of plasticity based on embedding the viscoplastic self-consistent formulation in implicit finite elements. *International Journal of Plasticity* 28, 124–140.
- Shewfelt, R., 1988. The ballooning of fuel cladding tubes: theory and experiment. Technical Report. Atomic Energy of Canada Limited.
- Signorelli, J., 1999. Aplicación de modelos policristalinos y de elementos finitos a aleaciones metálicas anisótropas. Tesis doctoral. Universidad Nacional de Rosario. Rosario, Argentina. Defendida el 7 de septiembre de 1999.
- Simmons, G., 1965. Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties. *Journal of the Graduate Research Center* 34, 1.
- Singh, B.N., Eldrup, M., Zinkle, S., Golubov, S., 2002. On grain-size-dependent void swelling in pure copper irradiated with fission neutrons. *Philosophical Magazine A* 82, 1137–1158.
- Sleight, A.W., 1998. Isotropic negative thermal expansion. *Annual review of materials science* 28, 29–43.
- Snyman, M.F., Mitchell, G.P., Martin, J.B., 1991. The numerical simulation of excavations in deep level mining, in: *ABAQUS Users' Conference Proceedings*.

- Subramanian, G., Perez, D., Uberuaga, B.P., Tome, C., Voter, A.F., 2012. Progress report on the incorporation of lower lengthscales into polycrystal plasticity models-Part 2. Technical Report. Los Alamos National Laboratory (LANL), Los Alamos, NM (United States).
- Taylor, G.I., 1938. Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals* 62, 307–324.
- Tenckhoff, E., 1988. Deformation mechanisms, texture, and anisotropy in zirconium and zircaloy. volume 966. ASTM International.
- Tenckhoff, E., 2005. Review of deformation mechanisms, texture, and mechanical anisotropy in zirconium and zirconium base alloys. *Journal of ASTM International* 2, 1–26.
- Tenckhoff, E., Rittenhouse, P., 1970. Annealing textures in zircaloy tubing. *Journal of Nuclear Materials* 35, 14–23.
- Tome, C., 1995. Role of internal stresses in the transient of irradiation growth of zircaloy-2. aecl research no. aecl-11383 .
- Tome, C., Canova, G., Kocks, U., Christodoulou, N., Jonas, J.J., 1984. The relation between macroscopic and microscopic strain hardening in fcc polycrystals. *Acta metallurgica* 32, 1637–1653.
- Tomé, C., Maudlin, P., Lebensohn, R.A., Kaschner, G.C., 2001. Mechanical response of zirconium—i. derivation of a polycrystal constitutive law and finite element analysis. *Acta Materialia* 49, 3085–3096.
- Tomé, C., Necker, C., Lebensohn, R., 2002. Mechanical anisotropy and grain interaction in recrystallized aluminum. *Metallurgical and Materials Transactions A* 33, 2635–2648.
- Tomé, C., So, C., Woo, C., 1993. Self-consistent calculation of steady-state creep and growth in textured zirconium. *Philosophical magazine A* 67, 917–930.
- Tomé, C.N., Christodoulou, N., Turner, P., Miller, M., Woo, C., Root, J., Holden, T., 1996. Role of internal stresses in the transient of irradiation growth of zircaloy-2. *Journal of nuclear materials* 227, 237–250.
- Tome, C.N., Lebensohn, R.A., 2023. Material modeling with the visco-plastic self-consistent (VPSC) approach: theory and practical applications. Elsevier.
- Tomé, C.N., Lebensohn, R.A., Kocks, U., 1991. A model for texture development dominated by deformation twinning: application to zirconium alloys. *Acta metallurgica et materialia* 39, 2667–2680.

- Tomé, C.N., Lebensohn, R.A., 2023. Vpsc code repository. https://github.com/lanl/VPSC_code. Associated with the book: *Material Modeling with the Visco-Plastic Self-Consistent (VPSC) Approach: Theory and Practical Applications*, Elsevier.
- Tremblay, M., Roy, C., 1973. Elastic parameters of single crystal Zr–O alloys. *Materials Science and Engineering* 12, 235–243.
- Turner, P., Tomé, C., 1993. Self-consistent modeling of visco-elastic polycrystals: application to irradiation creep and growth. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 41, 1191–1211.
- Turner, P., Tomé, C., Christodoulou, N., Woo, C., 1999. A self-consistent model for polycrystals undergoing simultaneous irradiation and thermal creep. *Philosophical Magazine A* 79, 2505–2524.
- Turner, P.A., Tomé, C.N., 1993. Self-consistent modeling of visco-elastic polycrystals: application to irradiation creep and growth. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 41, 1191–1211.
- Turner, P.A., Tomé, C.N., Woo, C.H., 1994. Self-consistent modelling of nonlinear visco-elastic polycrystals: an approximate scheme. *Philosophical Magazine A* 70, 689–711.
- U2.04.04, 2024. The code_aster mesh file. <https://biba1632.gitlab.io/code-aster-manuals/docs/user/u2.04.04.html>.
- U3.01.00, 2024. The code_aster mesh file. <https://biba1632.gitlab.io/code-aster-manuals/docs/user/u3.01.00.html>.
- Upadhyay, M.V., Patra, A., Wen, W., Panzner, T., Van Petegem, S., Tomé, C.N., Lebensohn, R.A., Van Swygenhoven, H., 2018. Mechanical response of stainless steel subjected to biaxial load path changes: Cruciform experiments and multi-scale modeling. *International Journal of Plasticity* 108, 144–168.
- Van Houtte, P., Delannay, L., Samajdar, I., 1999. Quantitative prediction of cold rolling textures in low-carbon steel by means of the lamel model. *Texture, Stress, and Microstructure* 31, 109–149.
- Van Houtte, P., Kanjarla, A.K., Van Bael, A., Seefeldt, M., Delannay, L., 2006. Multiscale modelling of the plastic anisotropy and deformation texture of polycrystalline materials. *European Journal of Mechanics-A/Solids* 25, 634–648.
- Van Houtte, P., Li, S., Seefeldt, M., Delannay, L., 2005. Deformation texture prediction: from the taylor model to the advanced lamel model. *International journal of plasticity* 21, 589–624.

- Van Houtte, P., Yerra, S.K., Van Bael, A., 2009. The facet method: A hierarchical multilevel modelling scheme for anisotropic convex plastic potentials. *International Journal of Plasticity* 25, 332–360.
- Vondřejc, J., Zeman, J., Marek, I., 2013. An fft-based galerkin method for homogenization of periodic media. *Computational Mechanics* (o arXiv preprint) Reformulación variacional del esquema FFT.
- Walde, T., Riedel, H., 2007a. Modeling texture evolution during hot rolling of magnesium alloy az31. *Materials Science and Engineering: A* 443, 277–284.
- Walde, T., Riedel, H., 2007b. Simulation of earing during deep drawing of magnesium alloy az31. *Acta materialia* 55, 867–874.
- Wang, H., Hu, Z., Lu, W., Thouless, M., 2013. A mechanism-based framework for the numerical analysis of creep in zircaloy-4. *Journal of Nuclear Materials* 433, 188–198.
- Was, G., 2007. *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys*. Springer.
- Wenk, H.R., Van Houtte, P., 2004. Texture and anisotropy. *Reports on Progress in Physics* 67, 1367.
- Werwer, M., Cornec, A., 2000. Numerical simulation of plastic deformation and fracture in polysynthetically twinned (pst) crystals of tial. *Computational materials science* 19, 97–107.
- Williamson, R., 2011. Enhancing the abaqus thermomechanics code to simulate multipellet steady and transient lwr fuel rod behavior. *Journal of Nuclear Materials* 415, 74–83.
- Williamson, R.L., Hales, J., Novascone, S., Tonks, M., Gaston, D., Permann, C., Andrs, D., Martineau, R., 2012. Multidimensional multiphysics simulation of nuclear fuel behavior. *Journal of Nuclear Materials* 423, 149–163.
- Woo, C., 1988. Theory of irradiation deformation in non-cubic metals: effects of anisotropic diffusion. *Journal of Nuclear Materials* 159, 237–256.
- Woo, C., Gösele, U., 1983. Dislocation bias in an anisotropic diffusive medium and irradiation growth. *Journal of nuclear materials* 119, 219–228.
- Woo, C.H., 1985. Polycrystalline effects on irradiation creep and growth in textured zirconium. *Journal of Nuclear Materials* 131, 105–117.

- Xiao, J., 1991. Finite element modelling of damage process in ice-structure interaction. Ph.D. thesis. Memorial University of Newfoundland.
- Yan, J., Yuan, K., Tatli, E., Karoutas, Z., 2011. A new method to predict grid-to-rod fretting in a pwr fuel assembly inlet region. *Nuclear Engineering and Design* 241, 2974–2982.
- Zecevic, M., Beyerlein, I.J., McCabe, R.J., McWilliams, B.A., Knezevic, M., 2016. Transitioning rate sensitivities across multiple length scales: Microstructure-property relationships in the Taylor cylinder impact test on zirconium. *International Journal of Plasticity* 84, 138–159.
- Zecevic, M., Knezevic, M., 2018. A new visco-plastic self-consistent formulation implicit in dislocation-based hardening within implicit finite elements: Application to high strain rate and impact deformation of tantalum. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 341, 888–916.
- Zee, R., Carpenter, G., Rogerson, A., Watters, J., 1987. Irradiation growth in deformed zirconium. *Journal of Nuclear Materials* 150, 319–330.
- Zhai, H., Ma, X., Zhang, W., He, X., Jiang, J., Yang, Z., Chen, H., Xiao, H., Pan, X., 2025. Effect of CrAl and Cr coatings on the fatigue behavior of zirconium alloy: In-situ SEM study and CPFEM analysis. *Surface and Coatings Technology*, 132619.
- Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L., 1997. The finite element method. volume 3. McGraw-Hill London.

Apéndice A

Subrutina para definir sistemas de coordenadas locales

El script hace uso de utilidades de *Code_Aster* junto con librerías científicas como Pandas y NumPy para procesar mallas estructurales, calcular los vectores normales de las caras de elementos QUAD4 ([U3.01.00 \(2024\)](#)) y determinar sus ángulos de rotación, θ y ϕ . La siguiente sección proporciona una visión general concisa de su funcionalidad.

- Conversión y lectura de la malla: El módulo de particionado de *Code_Aster* se utiliza para convertir la malla seleccionada (MESH) al formato interno MAIL_PY. Este formato permite una extracción eficiente de las coordenadas de nodos y la conectividad de elementos. Los datos de coordenadas y conectividad se organizan luego en DataFrames de Pandas, lo que facilita su manipulación.
- Extracción de conectividades de caras QUAD4: Los datos de conectividad correspondientes a las caras de elementos QUAD4 se filtran utilizando el identificador (GROUP_Q4). Esto asegura que solo se procesen las caras relevantes para el análisis.
- Cálculo de vectores normales: Para cada cara QUAD4 se identifican las coordenadas de sus cuatro nodos, ordenados en sentido antihorario. A partir del primer nodo se construyen dos vectores dentro del plano de la cara: uno hacia el segundo nodo y otro hacia el tercero. Esto garantiza que ambos vectores se encuentren en el mismo plano. Luego se calcula el producto vectorial de estos vectores y se normaliza, obteniendo así el vector normal “ n ” de la cara.
- Determinación de ángulos de rotación: Los vectores normales calculados se transforman en coordenadas angulares al determinar la inclinación (θ) y el acimut (ϕ) a partir de los

tres componentes $[n_x, n_y, n_z]$ del vector normal n :

$$\theta = \arcsin \frac{n_z}{r}, \quad \phi = \arctan 2(n_x, n_y)$$

donde $r = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$ es la magnitud del vector normal. Los valores se convierten a grados y se redondean a dos decimales.

- Asociación con volúmenes HEX8: Los ángulos obtenidos para las caras QUAD4 se vinculan con los volúmenes HEX8 correspondientes en la malla, filtrados en función del grupo objetivo (GROUP_HEX8).
- Salida del script: La salida consiste en una tabla que contiene el identificador del volumen HEXA8 y los ángulos de rotación (ϕ, θ) correspondientes a la cara QUAD4 seleccionada. Esta tabla es leída posteriormente por *Code_Aster* para asignar el nuevo sistema de coordenadas local al elemento volumétrico mediante el comando AFPE_CARA_ELEM con la opción MASSIF.

El uso de este script permite automatizar el análisis geométrico en simulaciones por elementos finitos, reduciendo significativamente el esfuerzo manual e incrementando la precisión del proceso. Este tipo de herramienta resulta particularmente valiosa en escenarios que requieren una integración detallada entre modelos policristalinos y software de elementos finitos, como en el desarrollo e implementación de subrutinas de material de usuario.

En este contexto, la definición de sistemas de coordenadas locales cumple un rol crucial, ya que permite a *Code_Aster*, al llamar a la subrutina de material de usuario, proporcionar una matriz de rotación R (véase la Ecuación 4.13), que define la transformación del sistema de referencia local al sistema global (TA). Esta capacidad no solo asegura la correcta interpretación de orientaciones, sino que también facilita simulaciones más precisas y representativas del comportamiento anisotrópico del material.

Las subrutinas utilizadas para asignar sistemas de coordenadas de material en *Code_Aster* están disponibles en (Rabazzi and Aguzzi, 2024). Asimismo, el código fuente del modelo VPSC, asociado al libro de Tomé y Lebensohn (2023), también es de acceso abierto (Tomé and Lebensohn (2023)).

Apéndice B

De la teoría a la práctica: qué cambia al migrar la UMAT a Code_Aster

CODE_ASTER ofrece un acople nativo para rutinas de usuario tipo UMAT siguiendo la *firma* de ABAQUS: en cada punto de integración, la rutina debe actualizar σ (Cauchy), las variables internas β y el operador tangente consistente $\mathbb{C}^{tg}$. Esta compatibilidad está pensada para facilitar la portabilidad de leyes constitutivas ya existentes, pero no es una copia bit-a-bit: ciertos argumentos se interpretan de modo ligeramente distinto, otros no se usan, y hay limitaciones de modelado que conviene explicitar.

Firma y variables clave. La cabecera esperada por CODE_ASTER replica la de ABAQUS (UMAT(STRESS, STATEV, DDSDD, ...)), y el solver gestiona el intercambio de:

- STRAN, DSTRAN: deformación *mecánica* total y su incremento (las partes térmicas se retiran antes de llamar a UMAT).
- STRESS, STATEV, DDSDD: tensiones, variables internas y tangente (a devolver por la rutina).
- PROPS: parámetros materiales (definidos vía DEFI_MATERIAU/UMAT/LISTE_COEF).
- TIME, DTIME, TEMP, DTEMP, PREDEF/DPRED (campos externos interpolados, e.g. IRRA, SECH, HYDR, CORR, NEUT1, NEUT2, si fueron declarados como variables de orden).

En CODE_ASTER, STRESS se vuelca en el campo interno SIEF_ELGA, STATEV en VARI_ELGA, y DDSDD alimenta la matriz tangente global del esquema no lineal (STAT_NON_LINE/DYNA_NON_LINE).

Lo que *no* es igual a ABAQUS.

- *Campos de energía y acople termo-mecánico*: SE, SPD, SCD, RPL, DDSDDT, DRPLDE, DRPLDT no se utilizan actualmente por el acople ASTER–UMAT; el acople termo-mecánico explícito no está disponible en esta interfaz.
- *Modelizaciones soportadas*: 3D, AXIS, D_PLAN y C_PLAN (esta última mediante el método de De Borst).
- *PNEWDT*: el control adaptativo del paso temporal sugerido por la UMAT no se emplea.
- *Rotación material*: DROT es el incremento de rotación calculado por CODE_ASTER (a partir de ángulos “náuticos”); si la ley usa marcos materiales giratorios, debe tratarlo explícitamente.

Mapa rápido de correspondencias.

ABAQUS (UMAT)	Uso/interpretación en CODE_ASTER
STRESS (NTENS)	Tensiones de Cauchy al final del incremento → campo SIEF_ELGA.
STATEV (NSTATV)	Variables internas → VARI_ELGA; el número se declara con NB_VARI.
DDSDDT (NTENS, NTENS)	Tangente consistente (simétrica) usada en el Jacobiano global.
STRAN, DSTRAN	Deformaciones <i>mecánicas</i> (sin la parte térmica).
PROPS (NPROPS)	DEFI_MATERIAU/UMAT/LISTE_COEF; NPROPS fijo en 50 en la interfaz.
PREDEF, DPRED	Variables de orden opcionales (IRRA, SECH, ...) si fueron definidas.
DROT	Incremento de rotación material proporcionado por ASTER.

Implicancias prácticas en esta tesis. Para portar nuestra ley (y, luego, el acople VPSC–CAFEM) fue necesario: (i) validar la *semántica* de cada argumento (especialmente STRAN/DSTRAN como partes *mecánicas* y el manejo de PREDEF/DPRED); (ii) declarar correctamente NB_VARI y el LISTE_COEF coherente; (iii) respetar las modelizaciones soportadas; (iv) comprobar que $\mathbb{C}^{\text{tg}}$ se ensambla con la orientación adecuada cuando se usan marcos locales (rotación vía DROT). Estos detalles de interpretación consumieron tiempo de estudio y pruebas de consistencia para asegurar que los resultados de ASTER reproduzcan los de referencia de ABAQUS/VPSC-SA.

Cómo se compila y usa una UMAT en CODE_ASTER.

1. Compilar la librería compartida (Fortran):

```
as_run --make_shared -O libumat.so umat.f
```

2. Declarar el material y el comportamiento en el *comando*:

```
MAT = DEFI_MATERIAU(  
  UMAT = _F(LISTE_COEF=(...)), # PROPS  
);  
  
STAT_NON_LINE(  
  ...  
  COMPORTEMENT = _F(  
    RELATION      = 'UMAT',  
    NB_VARI       = nvar,          # tamaño de STATEV  
    LIBRAIRIE     = 'libumat.so', # ruta a la .so  
    NOM_ROUTINE   = 'umat'        # nombre de la subrutina  
  ),  
  ...  
);
```

Nota técnica: carga de la biblioteca .so en CODE_ASTER vs. ABAQUS. En CODE_ASTER el usuario debe *precompilar* la UMAT como una biblioteca compartida (.so) y el solver la carga dinámicamente en tiempo de ejecución. En la UMAT con VPSC, si se emplean *arreglos estáticos* de gran tamaño cuya dimensión depende del número total de policristales (p.ej., $\sim 2 \times 10^4$), la .so resultante puede volverse muy grande y el *cargador dinámico* puede fallar al levantarla desde el solver. En ABAQUS, en cambio, es habitual compilar/enlazar `umat.for` durante el proceso de ejecución, lo cual evita esta restricción específica de tamaño del fichero compartido.

Recomendaciones prácticas para CODE_ASTER:

- *Evitar arreglos estáticos globales grandes.* Usar arreglos `ALLOCATABLE` dimensionados *en tiempo de ejecución* (por punto de Gauss o por agregado), y liberar memoria cuando no se usa.
- *Compilación para grandes secciones BSS.* Con `gfortran`, habilitar un *memory model* mayor si fuera necesario (p.ej., `-mmodel=medium`) y `-fPIC`. Ejemplo:

```
as_run --make_shared --f90flags="-O3 -fPIC -mmodel=medium" \  
-O libumat.so umat.f90
```

Con ifort, el análogo es `-mmodel=medium` (y, según instalación, `-shared-intel`).

- *Reducir el tamaño “global” del agregado.* Representar la textura con un número de granos por punto de Gauss moderado (p. ej., 300–2000) y usar pesos estadísticos, evitando dimensionar arrays por el *número total* de puntos de Gauss.
- *Externalizar estados por punto.* Persistir variables internas por punto de Gauss en STATEV (y/o archivos auxiliares) en lugar de mantener buffers globales muy grandes dentro de la biblioteca.

Estas medidas minimizan el tamaño de la `.so` y mejoran la robustez del cargado dinámico, sin sacrificar la fidelidad de VPSC–CAFEM. Estas instrucciones reflejan el flujo recomendado en la *Notice d'utilisation du couplage Code_Aster–UMAT* (U2.10.01).

Apéndice C

Archivos de entrada de simulación

B0

B Input para iniciar simulación VPSC-CAFEM

```
1                      number of elements (nelem)
1                      number of phases (nph)
1.0  0.0              relative vol. fract. of phases (wph(i))
*INFORMATION ABOUT PHASE #1
0    0    25          grain shape contrl, fragmentn, crit
      aspect ratio
1.0  1.0  1.0          initial ellipsoid ratios (dummy if
      ishape=4)
0.0  0.0  0.0          init Eul ang ellips axes (dummy if
      ishape=3,4)
* name and path of texture file (filetext)
/home/faguzzi.ifir/2025_Mejora/PT420ROT.007
* name and path of single crystal file (filecrys)
/home/faguzzi.ifir/2025_Mejora/zrly2_GrowthCreep.sx
* name and path of grain shape file (dummy if ishape=0) (fileaxes)
shape1.100
* name and path of diffraction file (dummy if idiff=0)
0
dummy
*PRECISION SETTINGS FOR CONVERGENCE PROCEDURES (default values)
1.e-4 1.e-4 1.e-4 1.e-4      errs,errd,errm,errso
100 100 25      itmax:      max # of iter, external, internal and S0 loops
```

```

0  2  10  2      irsvar & jrsini,jrsfin,jrstep (dummy if irsvar=0)
*INPUT/OUTPUT SETTINGS FOR THE RUN (default is zero)
0                      irecover:read grain states from POSTMORT.IN (1) or not
                        (0)?
0                      isave:   write grain states in POSTMORT.OUT at step '
                        isave'?
0                      icubcomp:calculate fcc rolling components?
0                      nwrite (frequency of texture downloads)
*MODELING CONDITIONS FOR THE RUN
1                      interaction (0:FC,1:affine,2:secant,3:neff=10,4:tangent
                        ,5:S0)
1  1  1          iupdate: update orient, grain shape, hardening
0                      nneigh (0 for no neighbors, 1 for pairs, etc.)
0                      iflu (0: don't calc, 1: calc fluctuations)
*NUMBER OF PROCESSES (Lij const; Lij variable; PCYS ;LANKFORD; rigid
                        rotatn)
1
*IVGVAR AND PATH\NAME OF FILE FOR EACH PROCESS
0
TENSION.3

```

Descripción del archivo:

- Línea 1: régimen mecánico simulado (IREGIME = 1: viscoplástico; IREGIME = -1: termo-elástico).
- Línea 2: número de fases cristalográficas en el agregado (NPH).
- Línea 3: fracciones volumétricas relativas de las fases (WPH(1:NPH)).
- Línea 4: control de morfología de granos (ISHAPE = 0–3), control de fragmentación de granos (IFRAG), forma crítica de grano (CRIT_SHP).
- Línea 5: longitudes de los ejes del elipsoide AXISPH(0,1:3,IPH) que describen la forma inicial de los granos de cada fase (dummy si ISHAPE = 3). Solo importan las razones, no los valores absolutos.
- Línea 6: ángulos de Euler que describen los ejes iniciales del elipsoide promedio respecto al sistema de referencia de la muestra (dummy si ISHAPE = 3).
- Línea 7: nombre y ruta del archivo de textura cristalográfica (FILETEXT).

- Línea 8: nombre y ruta del archivo de propiedades del monocristal (FILECRYS).
- Línea 9: nombre y ruta del archivo de morfología individual de granos (FILEAXES), dummy si ISHAPE = 0, 1, 2.
- Línea 10: parámetro IDIFF (IPH) que indica si deben calcularse deformaciones cristalográficas direccionales (IDIFF = 1) o no (IDIFF = 0).
- Línea 11: nombre y ruta del archivo de direcciones de difracción y planos cristalográficos (FILEDIFF), usado si IDIFF = 1. Dummy si IDIFF = 0.
- Línea 12: tolerancias relativas ERRS, ERRD, ERRM, ERRSO para la iteración autoconsistente. Valores típicos entre 0.01 y 0.001.
- Línea 13: número máximo de iteraciones permitidas (ITMAXEXT, ITMAXINT, ITMAXSO). Valores típicos: ITMAXEXT = 100, ITMAXINT = 25, ITMAXSO = 25.
- Línea 14: parámetro IRSVAR, que controla un bucle externo en la subrutina VPSC para facilitar la convergencia cuando el exponente de velocidad es alto ($n > 40$).
- Línea 15: parámetro IRECOVER. Si IRECOVER = 0 (default) usa una estimación tipo Taylor; si IRECOVER = 1 lee los estados desde POSTMORT.IN.
- Línea 16: parámetro ISAVE. Si ISAVE = n guarda estados en POSTMORT.OUT en el paso de deformación n . Si ISAVE = 0 se omite la salida.
- Línea 17: parámetro ICUBCOM. Si ICUBCOM = 1 abre CUBCOMP.IN y calcula las fracciones volumétricas asociadas a componentes de laminación FCC en cada paso.
- Línea 18: parámetro NWRITE, controla la frecuencia de escritura de texturas cristalográficas y morfológicas de cada fase (TEX_PH n .OUT, MOR_PH n .OUT). Si NWRITE = 0 solo guarda el último paso.
- Línea 19: parámetros INTERACTION y NEFF. Definen el tipo de interacción inclusión-matriz: -1: termoelástico; 0: Taylor; 1: affine; 2: secante; 3: neff/RDC; 4: tangente; 5: segundo orden.
- Línea 20: parámetros IUPDORI, IUPDSHP, IUPDHAR. Controlan si se actualizan (1, default) o no (0) orientación de grano, forma de grano y endurecimiento al final de cada paso.
- Línea 21: parámetro NNEIGH, controla si se acopla la reorientación de granos con vecinos (0 = no acopla, n = número de vecinos acoplados).

- Línea 22: parámetro IFLU, calcula fluctuaciones intragranulares de tensiones si IFLU = 1 (opcional, usado en la aproximación de segundo orden).
- Línea 23: parámetro NPRDC, número de procesos secuenciales a simular.
- Líneas 24 en adelante: información de cada proceso (carga impuesta, gradiente de velocidad variable, proyección PCYS, coeficiente de Lankford, rotación de textura, etc.), definidos según el valor de IVGVAR.

B Archivo de Textura para el tubo de revestimiento

```
TEXTURE AT STRAIN =      0.0000
    1.000    1.000    1.000  <-- length of phase ellipsoid axes
    180.00   90.00   180.00  <-- Euler angles (deg) of phase ellipsoid
        axes
B          7
    -90.00   90.00   90.00   0.1860504
   -180.00   90.00   -0.00   0.2494035
     90.00    0.00    0.00   0.0411971
   -139.19   72.90   75.75   0.1308373
     40.81   72.90   75.75   0.1308373
    -40.81  107.10 -104.25   0.1308373
    139.19  107.10 -104.25   0.1308373
```

Descripción del archivo: Este archivo de entrada proporciona la orientación cristalográfica y la fracción volumétrica (VF) de cada grano en una fase. El nombre del archivo se especifica en VPSC8.IN y se almacena en FILETEXT. Los pesos de los granos no necesitan estar normalizados, sino únicamente representar la fracción correspondiente a esta textura. Al ser leídos, se normalizan a 1 y, si existe más de una fase, se renormalizan de acuerdo con la VF de la fase.

- **Líneas 1 a 3:** comentarios recordatorios.
- **Línea 4:** una letra que identifica la convención de ángulos de Euler utilizada (B o b: Bunge; R o r: Roe; K o k: Kocks) y el número de orientaciones a leer.
- **Línea 5 en adelante:** los tres ángulos de Euler $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ de cada grano (IGR) y su fracción volumétrica relativa $WGT(IGR)$. Tras la lectura, los pesos se renormalizan a 1 cuando solo hay una fase presente, o a la fracción volumétrica de la fase $WPH(IPH)$ en el caso de un agregado multifásico.

B Archivo de Textura para la grilla espaciadora

```

TEXTURE AT STRAIN =      0.0000
    1.000    1.000    1.000  <-- length of phase ellipsoid axes
    0.00    0.00    0.00  <-- Euler angles (deg) of phase ellipsoid axes
B          13
-90.00    90.00    90.00    0.0174358
-101.59   104.93   -38.52    0.1093685
-78.41    104.93    38.52    0.1093685
-78.41    75.07   141.48    0.1093685
-101.59    75.07  -141.48    0.1093685
-115.32   119.57   -43.79    0.1100713
-64.68    119.57    43.79    0.1100713
-64.68    60.43   136.21    0.1100713
-115.32    60.43  -136.21    0.1100713
-134.74   133.05   -55.44    0.0262012
-45.26    133.05    55.44    0.0262012
-45.26    46.95   124.56    0.0262012
-134.74    46.95  -124.56    0.0262012

```

B Archivo con información cristalográfica para modelo unicamente irradiado

```

*Material: Zircaloy-2
HEXAGONAL                                cysym
1.  1.  1.594      90.  90.  120.      cdim(i),cang(i)
*Elastic stiffness of single crystal [GPa]
143.5e3    72.5e3    65.4e3    0.0    0.0    0.0
 72.5e3    143.5e3    65.4e3    0.0    0.0    0.0
 65.4e3    65.4e3    164.9e3    0.0    0.0    0.0
  0.0      0.0      0.0    32.1e3    0.0e3    0.0e3
  0.0      0.0      0.0    0.0e3    32.1e3    0.0e3
  0.0      0.0      0.0    0.0e3    0.0e3    35.5e3
*Thermal expansion coefficients of single crystal[K^(-1)]
 5.7e-6    5.7e-6    10.3e-6    0.0e0    0.0e0    0.0e0
SLIP AND TWINNING MODES
3                                nmodesx

```

```

3                                     nmodes
1 2 3                               mode(i)
PRISMATIC <a>
  1      3      1      0                                     modex,nsmx,iopsysx,itwtypex
  1  0 -1  0      -1  2 -1  0
  0 -1  1  0      2 -1 -1  0
 -1  1  0  0     -1 -1  2  0
BASAL <a>
  2      3      1      0                                     modex,nsmx,iopsysx,itwtypex
  0  0  0  1     -1  2 -1  0
  0  0  0  1      2 -1 -1  0
  0  0  0  1     -1 -1  2  0
PYRAMIDAL <c+a>
  3     12      1      0                                     modex,nsmx,iopsysx,itwtypex
  1  0 -1  1     -1 -1  2  3
 -1  0  1  1      2 -1 -1  3
  0  1 -1  1     -1 -1  2  3
  0 -1  1  1     -1  2 -1  3
 -1  1  0  1      2 -1 -1  3
  1 -1  0  1     -1  2 -1  3
 -1  0  1  1      2 -1 -1  3
  1  0 -1  1     -1 -1  2  3
  0  1 -1  1     -1 -1  2  3
  0 -1  1  1     -1  2 -1  3
 -1  1  0  1      2 -1 -1  3
  1 -1  0  1     -1  2 -1  3
*Constitutive law
  31          Voce=0, MTS=1, irradiation growth=31
  1          iratesens (0:rate insensitive, 1:rate sensitive)
  4.0e-6      mean grain radius [m]
PRISMATIC <a> SLIP  for irradi growth -----
  1                                     nrsx
BASAL <a> SLIP  for irradi growth -----
  1                                     nrsx
PYRAMIDAL <c+a> SLIP  for irradi growth -----
  1                                     nrsx
Growth parameters from Patra, Tome, Golubov, Phil. Mag. (2017)
3.6e-4      dpa rate (dpa rate = 3.6e-4 dpa/hour = 1.0e-7 dpa/s; time

```

```

    increment in hours)
5.0e-5      Irradiation creep compliance    [MPa-1 . dpa-1]
2.26e14     Reference line dislocation density for irradiation creep  [
    m-2]
0.97e0      Fraction of defects recombined in cascades
0.13e0      Fraction of SIAs clustered in cascades
3.0e-10     Burgers vector magnitude on prismatic slip systems
5.0e-10     Burgers vector magnitude on basal slip systems
* Dislocation density in prism, basal and pyramidal systems
3.1444D13  3.1444D13  3.1444D13
3.1444D13  3.1444D13  3.1444D13
3.1111D12  3.1111D12  3.1111D12  3.1111D12  3.1111D12  3.1111D12
3.1111D12  3.1111D12  3.1111D12  3.1111D12  3.1111D12  3.1111D12

```

Este archivo de entrada contiene información acerca de la simetría cristalina, constantes elásticas y térmicas, así como los modos de deformación por deslizamiento y maclado que deben considerarse. La segunda parte de este archivo es específica de la ley constitutiva utilizada y lista los coeficientes y parámetros de endurecimiento correspondientes. El nombre de este archivo se especifica en VPSC8.IN y se almacena en FILECRYST.

Descripción del archivo:

- **Línea 1:** comentario recordatorio.
- **Línea 2:** simetría cristalina (ICRYST). Puede ser: CUBIC, HEXAGonal, TRIGOnal, TETRAgonal, ORTHOtropic, MONOClinic, TRICLinic. Solo se leen las primeras cinco letras como identificador.
- **Línea 3:** parámetros de red cristalina: longitudes relativas (a, b, c) de los ejes de la celda unitaria y ángulos entre los ejes (véase Fig. 1.2).
- **Línea 4:** comentario recordatorio.
- **Líneas 5–10:** constantes elásticas del cristal (notación de Voigt). VPSC calcula las constantes elásticas de Voigt, Reuss y autoconsistentes de la textura inicial y las escribe en RUN_LOG.OUT. Estas no intervienen en la simulación plástica, pero se usan para calcular módulos de Young direccionales cuando se calcula el PCYS.
- **Línea 11:** comentario recordatorio.
- **Línea 12:** coeficientes de expansión térmica del cristal (notación de Voigt). VPSC calcula

los coeficientes térmicos autoconsistentes del agregado y los escribe en `RUN_LOG.OUT`. No intervienen en la simulación plástica.

- **Línea 13:** comentario recordatorio.
- **Línea 14:** número total de modos de deformación listados en el archivo.
- **Línea 15:** número de modos a utilizar en el cálculo (`NMODES`).
- **Línea 16:** números secuenciales en el archivo que identifican los modos activos.
- **Línea 17:** etiqueta del modo.
- **Línea 18:** número secuencial del modo; número de sistemas en cada modo (solo los directos se listan); indicador de reversibilidad al corte (`ISENSE = 1`: bidireccional; `ISENSE = 0`: unidireccional, usualmente asociado a maclado pero también aplicable a sistemas de deslizamiento direccional); indicador de maclado (`ITWTYPE = 0`: deslizamiento; `ITWTYPE = 1`: maclado tipo I; `ITWTYPE = 2`: maclado tipo II).
- **Línea 18':** cizalla característica de maclado S (`TWSH`). Solo incluida si `ITWTYPE = 1` o `2`.
- **Línea 19':** índices de Miller del vector normal (n) y del vector de deslizamiento (b) de cada sistema. Para simetrías cúbica, tetragonal, ortorróptica, monoclinica y triclinica se usa la notación de tres índices; para hexagonal y trigonal, la notación de cuatro índices de Miller–Bravais.
- **Línea 20:** comentario recordatorio.
- **Línea 21:** parámetro `IHARDLAW` que identifica la ley constitutiva: 0 (Voce), 1 (MTS), 20 (DD), 23 (DD_REV), 30–32 (crecimiento por irradiación).
- **Línea 22:** parámetro `IRATESENS` que controla la sensibilidad a la velocidad inducida por el exponente n en la Ec. (5.1).
 - `IRATESENS = 1`: fija $\dot{\gamma}_0 = 1$ y permite que n controle la sensibilidad a la velocidad.
 - `IRATESENS = 0`: escala $\dot{\gamma}_0$ con la norma de la velocidad de deformación macroscópica, eliminando la sensibilidad extra introducida por n .
- **Línea 23:** tamaño de grano (`GRSZE`, usualmente en micras). Afecta los resultados solo si el factor Hall–Petch es distinto de cero. Esta línea puede estar presente o no según la ley constitutiva usada.

- **Línea 24:** comentario recordatorio para parámetros de deslizamiento o maclado listados a continuación.
- **Línea 25:** sensibilidad a la velocidad n (NRS) para cada modo.
- **Línea 26:** parámetros de la ley de Voce para el endurecimiento de los sistemas de deslizamiento o maclado de este modo: τ_0 , τ_1 , θ_0 , θ_1 , $hpfac$.
- **Línea 27:** parámetros de endurecimiento latente $h_{ss'}$ que acoplan la deformación por corte de cada sistema con los demás sistemas activos. Se leen un total de NMODES valores, acoplando únicamente los modos usados en la simulación.

B Archivo con información cristalográfica para modelo irradiado + térmico

```
*Material: Zircaloy-2
HEXAGONAL                                cysym
1.  1.  1.594      90.  90.  120.      cdim(i),cang(i)
*Elastic stiffness of single crystal [GPa]
130.1e3      78.6e3      65.7e3      0.0      0.0      0.0
78.6e3      130.1e3      65.7e3      0.0      0.0      0.0
65.7e3      65.7e3      155.9e3      0.0      0.0      0.0
0.0      0.0      0.0      28.2e3      0.0e3      0.0e3
0.0      0.0      0.0      0.0e3      28.2e3      0.0e3
0.0      0.0      0.0      0.0e3      0.0e3      25.75e3
*Thermal expansion coefficients of single crystal[K^(-1)]
5.7e-6      5.7e-6      10.3e-6      0.0e0      0.0e0      0.0e0
SLIP AND TWINNING MODES
6                                nmodesx
6                                nmodes
1 2 3 4 5 6                      mode(i)
PRISMATIC <a>
1      3      1      0                                modex,nsmx,iopsysx,itwtypex
1  0 -1  0      -1  2 -1  0
0 -1  1  0      2 -1 -1  0
-1  1  0  0      -1 -1  2  0
BASAL <a>
2      3      1      0                                modex,nsmx,iopsysx,itwtypex
```

```

0 0 0 1 -1 2 -1 0
0 0 0 1 2 -1 -1 0
0 0 0 1 -1 -1 2 0
PYRAMIDAL<c+a>
3 12 1 0 modex,nsmx,iopsysx,itwtypex
1 0 -1 1 -1 -1 2 3
-1 0 1 1 2 -1 -1 3
0 1 -1 1 -1 -1 2 3
0 -1 1 1 -1 2 -1 3
-1 1 0 1 2 -1 -1 3
1 -1 0 1 -1 2 -1 3
-1 0 1 1 2 -1 -1 3
1 0 -1 1 -1 -1 2 3
0 1 -1 1 -1 -1 2 3
0 -1 1 1 -1 2 -1 3
-1 1 0 1 2 -1 -1 3
1 -1 0 1 -1 2 -1 3
PRISMATIC <a>
4 3 1 0 modex,nsmx,iopsysx,itwtypex
1 0 -1 0 -1 2 -1 0
0 -1 1 0 2 -1 -1 0
-1 1 0 0 -1 -1 2 0
BASAL <a>
5 3 1 0 modex,nsmx,iopsysx,itwtypex
0 0 0 1 -1 2 -1 0
0 0 0 1 2 -1 -1 0
0 0 0 1 -1 -1 2 0
PYRAMIDAL<c+a>
6 12 1 0 modex,nsmx,iopsysx,itwtypex
1 0 -1 1 -1 -1 2 3
-1 0 1 1 2 -1 -1 3
0 1 -1 1 -1 -1 2 3
0 -1 1 1 -1 2 -1 3
-1 1 0 1 2 -1 -1 3
1 -1 0 1 -1 2 -1 3
-1 0 1 1 2 -1 -1 3
1 0 -1 1 -1 -1 2 3
0 1 -1 1 -1 -1 2 3

```

```

0 -1 1 1 -1 2 -1 3
-1 1 0 1 2 -1 -1 3
1 -1 0 1 -1 2 -1 3
*Constitutive law
31 Voce=0, MTS=1, irradiation growth=31
1 iratesens (0:rate insensitive, 1:rate sensitive)
4.0e-6 mean grain radius [m]
PRISMATIC <a> SLIP for irradi growth -----
1 nrsx
BASAL <a> SLIP for irradi growth -----
1 nrsx
PYRAMIDAL <c+a> SLIP for irradi growth -----
1 nrsx
PRISMATIC <a> SLIP for thermal creep -----
4 nrsx
BASAL <a> SLIP for thermal creep
-----
4 nrsx
PYRAMIDAL <c+a> SLIP for thermal creep -----
4 nrsx
Growth parameters from Patra, Tome, Golubov, Phil. Mag. (2017)
3.6e-4 dpa rate (dpa rate = 3.6e-4 dpa/hour = 1.0e-7 dpa/s; time
increment in hours)
5.0e-5 Irradiation creep compliance [MPa-1 . dpa-1]
2.26e14 Reference line dislocation density for irradiation creep [
m-2]
0.97e0 Fraction of defects recombined in cascades
0.13e0 Fraction of SIAs clustered in cascades
3.0e-10 Burgers vector magnitude on prismatic slip systems
5.0e-10 Burgers vector magnitude on basal slip systems
* Dislocation density in prism, basal and pyramidal systems
3.1444D13 3.1444D13 3.1444D13
3.1444D13 3.1444D13 3.1444D13
3.1111D12 3.1111D12 3.1111D12 3.1111D12 3.1111D12 3.1111D12
3.1111D12 3.1111D12 3.1111D12 3.1111D12 3.1111D12 3.1111D12

```

Apéndice D

Publicaciones derivadas de esta tesis

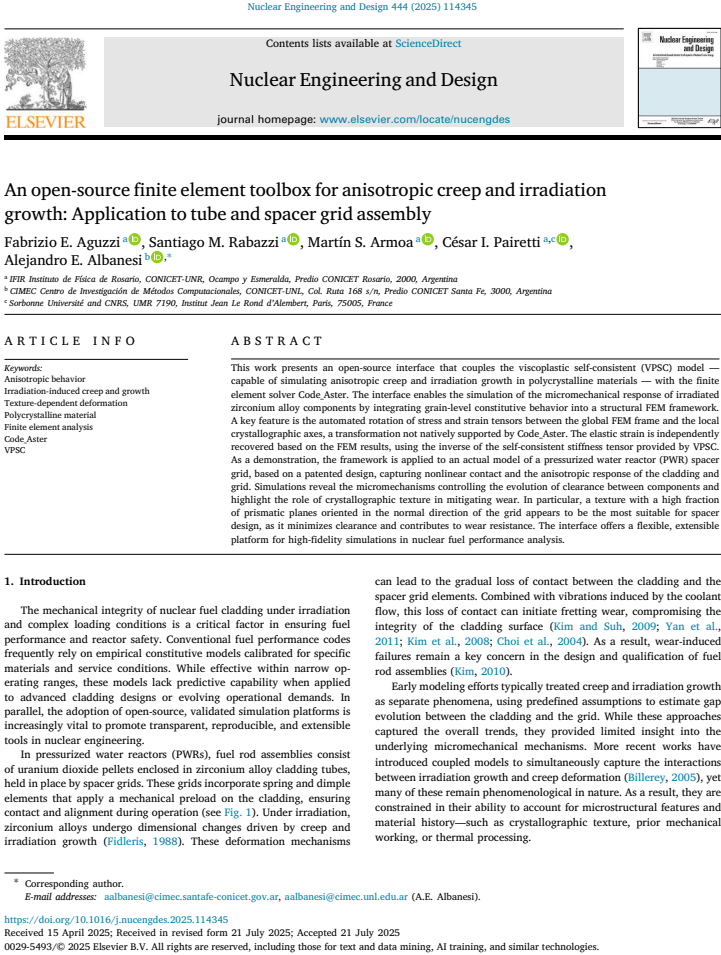


Figura D.1: Primera página del artículo publicado en *Nuclear Engineering and Design* (2025).
DOI: [10.1016/j.nucengdes.2025.114345](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2025.114345)

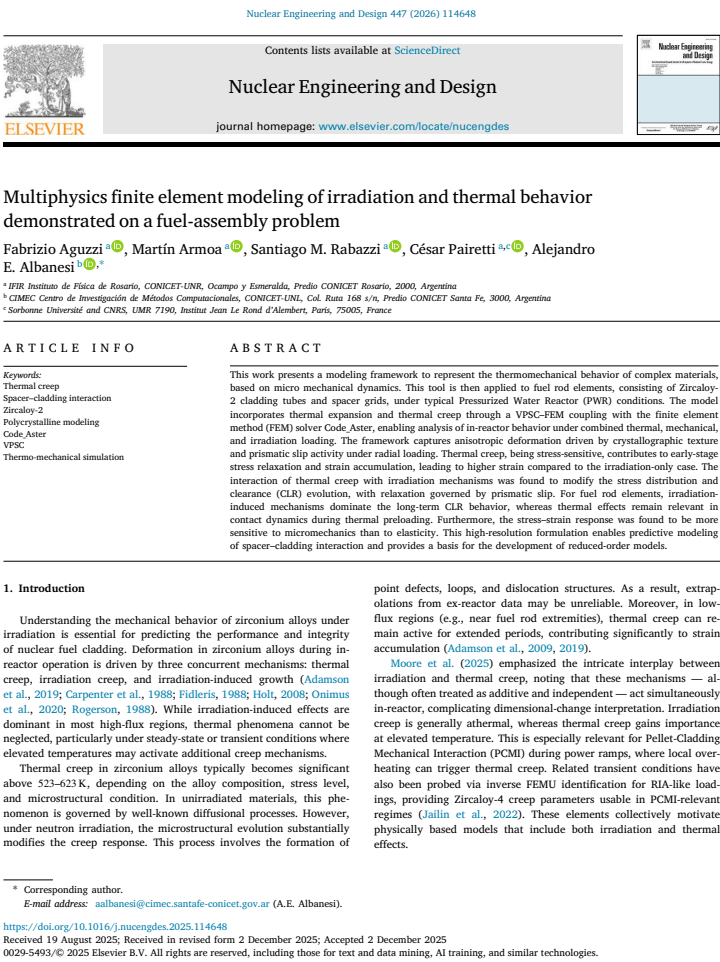


Figura D.2: Primera página del artículo “*Multiphysics finite element modeling of irradiation and thermal behavior demonstrated on a fuel-assembly problem*”, publicado en *Nuclear Engineering and Design* (2026).

DOI: [10.1016/j.nucengdes.2025.114648](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2025.114648)