



## RESISTENCIA PLÁSTICA EN MATERIALES POLICRISTALINOS CON MICROPOROSIDAD PRESURIZADA: EFECTO DEL CONTRASTE EN SISTEMAS DE DESLIZAMIENTO

Juan E. Ramos Nervi

Nucleoeléctrica Argentina S.A., Arribeños 3619, Ciudad Autónoma de Buenos Aires C1429BKQ, Argentina.

Departamento de Aeronáutica, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata,  
Avda. 1 esq. 47 S/N, La Plata B1900TAG, Argentina.

### RESUMEN

*Los materiales internos utilizados en reactores nucleares de potencia y las pastillas combustibles de  $UO_2$ , son policristales que experimentan cambios a nivel microscópico durante su irradiación en el reactor. Dichos cambios determinan el comportamiento mecánico limitando la vida del componente o en el caso de la pastilla la acción que se genera sobre la vaina, comprometiendo su integridad.*

*Los materiales policristalinos son agregados de granos compuestos de cristales simples orientados aleatoriamente. Su deformación elastoplástica es en gran medida, dictada por la morfología, la orientación de la red, la respuesta elastoplástica de cada grano individual –compuesto por un cristal simple- que constituye el agregado, la porosidad y la presión interior del gas. Para estimar la anisotropía inducida por la deformación plástica que desarrollan estos materiales cuando se someten a grandes deformaciones, es necesario relacionar la respuesta macroscópica con las propiedades microscópicas. Comúnmente la respuesta de estos materiales es idealizada como elásticamente rígida y plástica sin endurecimiento. Dentro de este modelo llamado rígido-perfectamente plástico, el problema anterior se reduce a encontrar la superficie de fluencia macroscópica del policristal dada la superficie de fluencia a nivel de cristal simple, la estadística morfológica y de distribución de orientación de los granos y cavidades. Debido a su inherente aleatoriedad microestructural, los sólidos policristalinos no muestran una única respuesta, pero sí una gama de respuestas esperadamente estrecha. Ramos Nervi e Idiart (Proc. R. Soc. A 471: 20150380, 2015) derivaron las cotas para dicha gama de posibles respuestas haciendo uso de un método de medio lineal de comparación propuesto por Idiart y Ponte Castañeda (Proc. R. Soc. Lond. A vol. 463, 2007), teniendo en cuenta el efecto de la presión interna. Las cotas se aplicaron a distintos sistemas materiales, a fin de explorar el efecto simultáneo de la simetría cristalográfica y el nivel de presión interna en la resistencia plástica global de sólidos policristalinos. En este trabajo se analiza la resistencia plástica al corte y la resistencia hidrostática –representativas de la superficie de fluencia- en función del contraste en las familias de planos de deslizamientos con el fin de explorar el efecto del contraste entre fases en sistemas policristalinos con sistemas deficientes.*



Mag. Juan E. Ramos Nervi

Graduado de la carrera de Ing. en Materiales del Instituto Sabato, realizó su trabajo de grado en Det Norske Veritas, Ohio USA. Realizó su posgrado en Micromecánica en la Universidad Nacional de La Plata. Se desempeña en la Gerencia de Ingeniería de Nucleoeléctrica Argentina S.A. a cargo del área de Materiales y Micromecánica.

El presente artículo, es un resumen del trabajo premiado por el Instituto Sabato, correspondiente a los premios 2014-2016, en la categoría: "Tesis de Maestría en el Campo de la Ciencia y Tecnología de Materiales".



## ABSTRACT

*Materials used in Nuclear Power Plants as reactor internals and UO<sub>2</sub> fuel pellets, are polycrystals that exhibit irradiation-induced microstructural changes. This affects the operational life limit of structural components and comprises the cladding integrity, in case of fuel pellets.*

*Polycrystalline materials are aggregates of randomly oriented single-crystal grains. Their elastoplastic deformation is to a great extent dictated by the morphology, lattice orientation, and elastoplastic response of each individual single-crystal grain composing the aggregate, the porosity, and the internal gas pressure. Relating the macroscopic response with the microscopic properties is necessary to estimate the deformation-induced plastic anisotropy that develops in these materials when subjected to large deformations. Very often, the response of these materials is idealized as elastically rigid and plastically non-hardening. Within this so-called rigid perfectly plastic model, the above problem reduces to finding the macroscopic yield surface of the polycrystal given the yield surface at the single-crystal level and the statistics of the morphology and orientation distributions of the grains and cavities. Due to their inherent microstructural randomness, cognate polycrystalline solids do not exhibit a single response but a —hopefully narrow— range of responses.*

*Ramos Nervi and Idiart (Proc. R. Soc. A 471: 20150380, 2015) derived bounds for this range of possible responses following the method of the linear comparison polycrystal proposed by Idiart and Ponte Castañeda (Proc. R. Soc. Lond. A vol. 463, 2007), considering the effect of the internal pressure. The bounds were applied to different materials systems, in order to explore the simultaneous effect of the crystallographic symmetry and the level of internal pressure in the global plastic strength of the polycrystalline solids. Continuing this work, the shear and hydrostatic strength —representative of the yield surface—is analyzed as a function of the slip contrast in order to determine the effect on the macroscopic response.*

## INTRODUCCIÓN

La mayoría de los materiales ingenieriles y naturales son intrínsecamente heterogéneos, entre estos se encuentran los metales de uso nuclear como el acero, aleaciones base Níquel, aleaciones de Circonio y los cerámicos como las pastillas combustibles. Estos materiales son agregados de granos compuestos de cristales simples orientados aleatoriamente, sus tamaños son típicamente del orden de los micrones. En las pastillas combustibles obtenidas por sinterización y en situaciones particulares en los materiales metálicos bajo irradiación, se generan distribuciones de poros orientadas aleatoriamente que son del tamaño de algunos micrones. La tendencia en los últimos veinte años es aumentar el grado de quemado en las pastillas combustibles de los reactores de potencia lo que lleva a la evolución de su porosidad; en el caso de los materiales metálicos, se ha empezado a extender las licencias operativas de las centrales por lo que surgen nuevas necesidades en el entendimiento de su comportamiento respecto a su vida remanente que incluyen en algunos casos nucleación de porosidad hacia el fin de su vida de diseño (Zinkle 2013). Además, con

el aumento en los estándares de seguridad internacionales, se han incrementado los esfuerzos en mejorar el entendimiento del comportamiento de los materiales en distintas situaciones de operación que implican respuestas mecánicas complejas. Por lo dicho anteriormente, el estudio del comportamiento de los materiales heterogéneos es de gran importancia para la industria nuclear.

Es conocido que la radiación en el núcleo de los reactores de potencia produce cambios en la distribución espacial de las fases que constituyen el material heterogéneo, es decir en su microestructura. Entre dichos cambios podemos destacar la nucleación y evolución de microcavidades presurizadas a distintas escalas; la segregación, precipitación y/o disolución de partículas de segundas fases en planos cristalinos preferenciales; el cambio en la relación de aspecto de las celdas cristalinas; en el caso de las pastillas de alto quemado, la recristalización dinámica de la zona periférica, nucleación y crecimiento de fases porosas, etc.

La pastilla combustible es un sólido cerámico policristalino cúbico iónico que durante el quemado en el reactor presenta una nucleación de porosidad a distintas escalas. En la figura 1, se muestra para el caso de



quemados típicos en un PWR las diferentes poblaciones de poros que se forman entre los granos del material y dentro de los mismos. Este fenómeno ha sido ampliamente estudiado en la literatura (por ejemplo Vincent 2007; Julien 2008). Durante situaciones incidentales de operación que duran algunas horas, localmente en ciertas zonas del núcleo se produce un aumento de reactividad y temperatura en los poros presurizados por los gases producto de fisión, consecuentemente aumenta la presión dentro de los poros (Blair 2008) que ejercen presión sobre la matriz de  $UO_2$  (véase Vincent 2009). Por otra parte, el efecto de la temperatura sobre la matriz tiende a contraer los poros. Dicha competencia produce una tasa de deformación tal que la respuesta mecánica de la matriz es viscoplástica; la fracción volumétrica de poros representa la variable clave microestructural que conecta ambos fenómenos. La pastilla se deforma y ejerce contacto con la vaina que la rodea comprometiendo su integridad. El crecimiento plástico en sólidos policristalinos, dúctiles y porosos puede ser influenciado significativamente por la textura morfológica y cristalográfica del agregado (e.g., Caré & Zaoui 1996, Millet et al. 2008). El análisis teórico de este proceso requiere modelos micromecánicos que relacionen los estados de tensiones macroscópicos con las deformaciones plásticas microscópicas en los sistemas policristalinos porosos. Una simple aproximación ampliamente utilizada al problema, consiste en idealizar la respuesta mecánica de los granos individuales como elásticamente rígida y plástica sin endurecimiento, empleando técnicas de homogeneización para derivar la resistencia plástica macroscópica en términos de la resistencia plástica de los cristales simples, de la estadística, de la morfología y orientación y distribución de los granos y poros —véase la monografía de Kocks et al. (1998). Debido a su naturaleza microestructural inherentemente al azar, policristales semejantes con la misma estadística no exhibirán una respuesta macroscópica simple pero si un rango de respuestas. Por lo tanto, se pueden desarrollar estimaciones que representen una respuesta representativa de un simple caso o derivar cotas para un rango entero de posibles

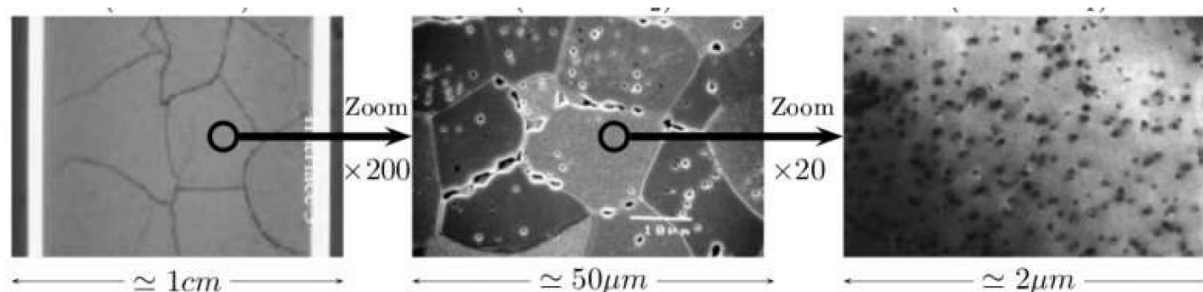
respuestas. El interés de este trabajo es en obtener dichas cotas. Las cotas son también útiles por dos razones adicionales: proveen benchmarks para probar estimaciones y pueden ser utilizadas como estimaciones por sí mismas.

Existen varias técnicas de homogeneización disponibles para acotar la resistencia plástica de sólidos policristalinos. Su utilización, sin embargo, ha sido enfocada casi exclusivamente en sistemas materiales completamente densos, es decir, sin porosidad. La cota externa más simple es la de Taylor (1938) y la interna es la de Reuss (1929), las cuales dependen únicamente de estadísticas puntuales. Estas cotas elementales han probado ser útiles en el contexto de sólidos policristalinos de gran simetría como cristales cúbicos (FCC) donde el contraste de heterogeneidad es bajo, pero al incrementarse la anisotropía cristalina sus predicciones divergen y se vuelven muy poco precisas. Haciendo uso de la idea de un medio lineal de comparación, se han derivado cotas menos estrictas o relajadas incorporando estadísticas de orden superior, véase Dendievel et al. (1991) y deBotton & Ponte Castañeda (1995), dicho medio es seleccionado óptimamente a través de principios variacionales diseñados específicamente. En particular, la técnica de deBotton & Ponte Castañeda (1995) permite el uso de cualquier abordaje de homogeneización lineal, como el de Hashin-Shtrikman o el Autoconsistente, para generar los correspondientes resultados para policristales no lineales. Se pueden encontrar en Willis (1994), Nebozhyn et al. (2001), Liu et al. (2003), y Liu & Ponte Castañeda (2004) la aplicación de dichos métodos lineales de comparación a varias clases de sólidos policristalinos. Dichos trabajos mostraron que las predicciones lineales de comparación pueden mejorar, a veces significativamente, a las predicciones elementales de Taylor y Reuss, y sirven para demostrar la inconsistencia de varias teorías de plasticidad policristalina basadas en esquemas de homogeneización *ad-hoc*. Luego, Idiart & Ponte Castañeda (2007a, 2007b) demostraron que la técnica lineal de comparación de deBotton & Ponte Castañeda (1995) hace uso

implícito de una relajación en el esquema variacional el cual debilita las cotas resultantes. Eliminando esa relajación se llega a cotas más estrictas a expensas de incrementar la complejidad computacional. Idiart (2012) ha evaluado recientemente el impacto de la relajación en las cotas lineales de comparación para varios sistemas cúbicos y hexagonales. Se observaron modestas diferencias entre las cotas relajadas y no relajadas, siendo las más notorias las correspondientes a policristales con sistemas deficientes.

*El presente artículo es un resumen parcial de la tesis de Maestría “plasticidad de materiales policristalinos con porosidad presurizada” (J.E. Ramos Nervi, Mag. Tesis, 2016, <http://sedici.unlp.edu.ar>). Se evalúa el comportamiento de las técnicas de homogeneización mencionadas anteriormente en el contexto de policristales porosos con sistemas deficientes. Debido a su contraste en heterogeneidad infinitamente grande, son sistemas materiales particularmente desafiantes de acotar ya que se espera que la aplicación de la mayoría de las técnicas produzca resultados con grandes divergencias. Ciertamente, es conocido que las cotas elementales se vuelven inútiles en presencia de fases porosas —la cota de Reuss se reduce al estado de tensiones idénticamente nulo, mientras que la de Taylor predice resistencia infinita bajo cargas puramente hidrostáticas — mientras que las*

cotas lineales de comparación brindan estimaciones significativas. Lebensohn et al. (2011) reportó recientemente cotas lineales de comparación relajadas del tipo Autoconsistente para sistemas FCC porosos viscoplásticos. Las cotas sirven para discriminar entre dos teorías lineales de comparación de plasticidad policristalina, pero lejanas a las predicciones obtenidas por simulaciones *full-field*. En este trabajo se reportan cotas lineales de comparación para la resistencia hidrostática de sistemas cúbicos que confirman que la relajación posee un impacto significativo en presencia de fases porosas. En este trabajo, se reportan cotas lineales de comparación del tipo Hashin-Shtrikman y Autoconsistente para sistemas cúbicos y hexagonales de policristales porosos con sistemas deficientes con textura isótropa y varios grados de anisotropía cristalina, sujetos a condiciones de carga axisimétrica. Debido a que el análisis trata de la misma forma a fases porosas y cristalinas, los resultados de este trabajo son relevantes para sistemas materiales con porosidad intergranular; la porosidad intragranular debe ser tratada en forma diferente—por ejemplo, Han et al. (2013). Se pone especial atención al juego entre la cristalinidad, porosidad y el impacto en las cotas de las relajaciones variacionales considerando policristales con sistemas cristalinos deficientes, es decir, con familias de planos de deslizamiento rígidas.



**Figura 1.** Pastilla de Uranio enriquecido irradiada a altas dosis. Se muestran las distintas poblaciones de poros a distintas escalas bien separadas. Ref. Dherbey et al. (2002).

## MODELO POLICRISTALINO POROSO

Los policristales porosos se idealizan como una distribución aleatoria de cavidades y

cristales simples perfectamente cohesionados. Se asume que el elemento de volumen representativo es un agregado estadísticamente uniforme y ergódico. La



respuesta plástica se estudia convenientemente adoptando una descripción Euleriana del movimiento; por lo tanto el presente análisis se refiere a la configuración actual del agregado en un estado de deformación general.

Las orientaciones de los granos en la configuración actual se caracterizan por un conjunto de  $N$  tensores de rotación  $Q^{(r)}$  ( $r = 1, \dots, N$ ) relativos a una orientación de referencia. Todos los granos con una dada orientación  $Q^{(r)}$  ocupan un dominio no-conexo  $\Omega^{(r)}$  y se denominan colectivamente como 'fase'  $r$ . Por otro lado, todas las cavidades ocupan un dominio no-conexo  $\Omega^{(0)}$  y se denominan colectivamente como 'fase'  $r = 0$ . Los dominios  $\Omega^{(r)}$  ocupados por cada fase  $r$  pueden describirse con un conjunto de funciones características  $\chi^{(r)}(\mathbf{x})$ , las cuales toman el valor 1 si el vector posición  $\mathbf{x}$  pertenece al dominio  $\Omega^{(r)}$  y 0 en caso contrario.

Se asume que los granos ( $r = 1, \dots, N$ ) se deforman por múltiples deslizamientos a lo largo de  $K$  sistemas de deslizamiento presentando una respuesta elásticamente rígido y perfectamente plástica. Por simplicidad, los efectos de la elasticidad de los granos y efectos de maclado se desprecian en la presente formulación. De acuerdo a la teoría estándar de plasticidad cristalina, los dominios de resistencia plástica están dados por conjuntos convexos

$$P^{(r)} = \left\{ \boldsymbol{\sigma} : \left| \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}_{(k)}^{(r)} \right| \leq \tau_0^{(k)}, k = 1, \dots, K \right\},$$

donde  $\boldsymbol{\sigma}$  es el estado de tensiones microscópico,  $\tau_0^{(k)} > 0$  es la resistencia a la fluencia del  $k$ -ésimo sistema de deslizamiento en un cristal de referencia y

$$\boldsymbol{\mu}_{(k)}^{(r)} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{n}_{(k)}^{(r)} \otimes \mathbf{m}_{(k)}^{(r)} + \mathbf{m}_{(k)}^{(r)} \otimes \mathbf{n}_{(k)}^{(r)} \right),$$

son los tensores de Schmid de segundo orden definidos en términos de vectores unitarios  $\mathbf{n}_{(k)}^{(r)}$  y  $\mathbf{m}_{(k)}^{(r)}$  que representan, respectivamente, la dirección normal al plano de deslizamiento y la dirección tangencial de deslizamiento del  $k$ -ésimo sistema de la fase  $r$ . Todos los

tensores de Schmid pueden expresarse en términos de un tensor  $\boldsymbol{\mu}_{(k)}$  para el cristal de referencia como

$$\boldsymbol{\mu}_{(k)}^{(r)} = \mathbf{Q}^{(r)T} \boldsymbol{\mu}_{(k)} \mathbf{Q}^{(r)} .$$

La fase porosa ( $r = 0$ ), por otra parte, se asume sometida a una presión interna  $p_0$  de igual valor en todas las cavidades. Caracterizaremos esta fase como una familia adicional de 'granos' con

$$P^{(0)} = \{-p_0 \mathbf{I}\}.$$

Los promedios volumétricos sobre el elemento de volumen representativo y sobre cada fase  $\Omega^{(r)}$  se denotarán como  $\langle \cdot \rangle$  y  $\langle \cdot \rangle^{(r)}$ , respectivamente. Debido al carácter aleatorio de la microestructura, las funciones  $\chi^{(r)}$  son variables estocásticas que deben ser caracterizadas en términos de promedios estadísticos (Willis, 1982). El promedio estadístico de  $\chi^{(r)}(\mathbf{x})$  representa la probabilidad total de primer orden  $p^{(r)}(\mathbf{x})$  de hallar la fase  $r$  en la posición  $\mathbf{x}$ ; el promedio del producto  $\chi^{(r)}(\mathbf{x})\chi^{(s)}(\mathbf{x}')$  representa las probabilidades de segundo orden  $p^{(rs)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  de hallar simultáneamente la fase  $r$  en la posición  $\mathbf{x}$  y la fase  $s$  en la posición  $\mathbf{x}'$ . Similarmente se pueden definir probabilidades de orden superior. Debido a la uniformidad estadística y la ergodicidad asumidas, las probabilidades de primer orden  $p^{(r)}(\mathbf{x})$  pueden identificarse con las fracciones de volumen (o concentraciones)  $c^{(r)} = \langle \chi^{(r)}(\mathbf{x}) \rangle$  de cada fase  $r$ , la probabilidad de segundo orden  $p^{(rs)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  puede identificarse con el volumen promedio  $\langle \chi^{(r)}(\mathbf{x})\chi^{(s)}(\mathbf{x}') \rangle$ , y así sucesivamente. Nótese que  $\sum_{r=0}^N c^{(r)} = 1$ . Por otro lado, al describir policristales porosos resulta conveniente utilizar el conjunto alternativo de concentraciones (Lebensohn *et al.* 2011):

$$f = c^{(0)}, \text{ y } c_g^{(r)} = \frac{c^{(r)}}{1-f} \text{ para } r = 1, \dots, N.$$

La variable microestructural  $f$  representa la fracción en volumen de las cavidades, o *porosidad*, en el policristal con cavidades, mientras que las concentraciones de granos



re-escaladas  $c_g^{(r)}$  representan la fracción volumétrica de los granos con una dada orientación  $Q^{(r)}$  dentro de la matriz policristalina, las concentraciones son tales que  $\sum_{r=0}^N c_g^{(r)} = 1$ . El conjunto de fracciones de volumen  $c_g^{(r)}$  caracterizan la *textura cristalográfica* del agregado alrededor de los poros, mientras que las funciones de correlaciones de orden superior caracterizan la *textura morfológica* del agregado, la relación de aspecto y distribución de cavidades.

La resistencia plástica macroscópica del agregado policristalino corresponde al conjunto de estados de tensiones que pueden producir flujo plástico. Homogeneizando las ecuaciones de campo apropiadas, Suquet (1983) y Bouchitté & Suquet (1991) demostraron que el *dominio efectivo de resistencia plástica* está dado por

$$\tilde{P} = \{\bar{\sigma}: \exists \sigma(x) \in \mathcal{S}(\bar{\sigma}) \text{ y } \sigma(x) \in P^{(r)} \text{ en } \Omega^{(r)}, r = 0, \dots, N\},$$

donde  $\bar{\sigma}$  representa el estado de tensiones macroscópico que puede producir flujo plástico y

$$\mathcal{S}(\bar{\sigma}) = \{\sigma(x): \text{div} \sigma(x) = 0 \text{ en } \Omega, \langle \sigma(x) \rangle = \bar{\sigma}\},$$

es el conjunto de campos de tensiones microscópicos estáticamente admisibles con promedio volumétrico  $\bar{\sigma}$ . Nótese que la convexidad de los conjuntos  $P^{(r)}$  implica convexidad de  $\tilde{P}$ . El borde  $\partial \tilde{P}$  del conjunto  $\tilde{P}$  representa la *superficie de fluencia efectiva* del sólido policristalino poroso, superficie que se busca acotar. En la próxima sección se describen los sistemas materiales a utilizarse.

## SISTEMAS MATERIALES

- sólidos iónicos (IONIC) que deforman por deslizamiento plástico en tres diferentes familias de planos de deslizamiento:  $\{110\} \langle 110 \rangle$ ,  $\{100\} \langle 110 \rangle$ ,  $\{111\} \langle 110 \rangle$ . Nos referiremos a las familias como  $A, B$  y  $C$ , que poseen una tensión crítica resuelta  $\tau_A, \tau_B$  y  $\tau_C$  respectivamente. La familia  $A$  consiste en seis

sistemas, entre los cuales dos son linealmente independientes ( $J = 2$ ) y pueden acomodar únicamente las componentes normales de la tasa de deformación —con respecto a los ejes cúbicos del cristal. La familia  $B$  consiste en seis sistemas, entre los cuales tres son linealmente independientes ( $J = 3$ ) y pueden únicamente acomodar tasas de deformaciones de corte —con respecto a los ejes cúbicos del cristal. Debido a la ortogonalidad de los sistemas  $A$  y  $B$ , ambas familias juntas proveen cinco sistemas de deslizamiento independientes ( $J = 5$ ) por lo que pueden acomodar una deformación isocórica general. La familia  $C$ , consiste de los mismos 12 sistemas de deslizamiento de un cristal cúbico centrado en las caras. Por lo tanto, las tres familias juntas proveen 24 sistemas de deslizamiento ( $K = 24$ ). Este conjunto de sistemas de deslizamiento define una superficie de fluencia con 312 vértices.

- sólidos hexagonales (HCP) que deforman por deslizamiento plástico en tres diferentes sistemas de deslizamiento: tres sistemas basales  $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ , tres sistemas prismáticos  $\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ , y doce sistemas piramidales de primer orden  $\langle c+a \rangle \{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ . Los denotaremos como las familias  $A, B$  y  $C$ , que poseen una tensión crítica resuelta  $\tau_A, \tau_B$  y  $\tau_C$ , respectivamente. Nótese que los tres sistemas basales más los tres sistemas prismáticos brindan solamente cuatro ( $J = 4$ ) sistemas linealmente independientes, no permitiendo la deformación a lo largo de los ejes del cristal hexagonal. Por otra parte, los doce sistemas piramidales contienen un conjunto de cinco sistemas independientes ( $J = 5$ ), permitiendo acomodar una deformación plástica arbitraria de los granos. Las tres familias juntas proveen un conjunto de 18 sistemas de deslizamiento ( $K = 18$ ). Este conjunto de sistemas de deslizamiento define una superficie de fluencia con 306 vértices.

## COTAS DE RESISTENCIA PLÁSTICA

Las cotas externas para la superficie de fluencia  $\tilde{P}$  se pueden obtener utilizando la técnica del policristal lineal de comparación presentada en Idiart & Ponte Castañeda

(2007a, b). Para el caso de policristales sin sistemas deficientes y porosos, dicha técnica fue presentada por M.I. Idiart & J.E. Ramos Nervi (2014) donde se obtienen cotas de resistencia hidrostática. Las cotas para las superficies de fluencia en el caso de corte axisimétrico, se presentaron en J.E. Ramos Nervi & M.I. Idiart (2015), por tal motivo se refiere al lector a dichos trabajos para el detalle en su derivación.

La idea principal detrás de la técnica es introducir un policristal lineal de comparación, caracterizado por un potencial por fase  $u_0^{(r)}$ , con los mismos dominios microestructurales  $\chi^{(r)}$  que posee el policristal original no lineal, caracterizado por un potencial  $\tilde{u}(\bar{\sigma})$ , donde  $\bar{\sigma} = \langle \sigma(x) \rangle$ , pero con una relación local lineal de la tensión--tasa de deformación caracterizada por un tensor de flexibilidad de cuarto orden positivo semidefinido y simétrico  $S_0$ . Aplicando técnicas de homogeneización basadas en principios variacionales como la de deBotton & Ponte Castañeda (1995) que además permiten el uso de cualquier abordaje de homogeneización lineal, se obtiene un potencial efectivo del policristal lineal de comparación  $\tilde{u}_0(x, \sigma)$ . Una vez obtenido este potencial, se computa la función  $v(S_0)$  que representa el grado de no-linealidad del policristal obteniendo una cota externa ('+') a la superficie de fluencia  $\partial\tilde{P}''_+$  y al potencial del policristal no-lineal a partir de la solución del siguiente problema de optimización:

$$\tilde{u}(\bar{\sigma}) \geq \min_{\sigma \in S^*(\bar{\sigma})} \langle u_0(x, \sigma) - v(S_0) \rangle,$$

donde  $S^*$  denota el subconjunto de campos de tensiones estáticamente admisibles con tracción cero en las superficies  $\partial\Omega^{(0)}$  de los poros. Se puede demostrar que la cota toma la forma

$$\partial\tilde{P}''_+ = \left\{ \bar{\sigma}; \bar{\sigma} = \Lambda \bar{\Sigma}, \|\bar{\Sigma}\| = 1, \right. \\ \left. \Lambda = \min_{S^{(r)} \geq 0} \left( \frac{\tilde{u}_0(\bar{\Sigma}; S^{(s)})}{v(S^{(s)})} \right)^{-1/2} \right\}$$

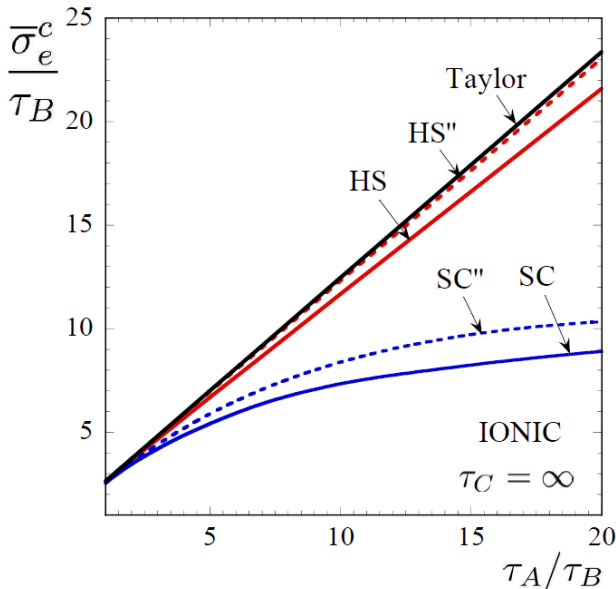
donde  $\|\cdot\|$  representa la norma Euclídea del tensor,  $S^{(r)}$  el tensor de flexibilidad de cuarto orden de cada fase del agregado y  $\bar{\Sigma}$  la

triaxialidad de la carga macroscópica aplicada dada por la relación entre la tensión de corte  $\bar{\sigma}_e$  y la resistencia hidrostática  $\bar{\sigma}_m$ . Si en el proceso de derivación de las cotas de deBotton & Ponte Castañeda (1995) se elimina cierta "relajación", se obtienen las cotas de Idiart & Ponte Castañeda (2007a,b) que son cotas internas a las mismas tal que  $\partial\tilde{P}'' > \partial\tilde{P}$ , obteniendo una superficie de fluencia más estricta a costas de aumentar la complejidad en el cálculo. Así se obtienen dos grupos de cotas que las denominaremos relajadas y no relajadas.

Las técnicas mencionadas permiten el uso de las técnicas de homogeneización lineal de Hashin-Shtrikman (HS) y Autoconsistente (SC). Por lo tanto se obtienen cuatro tipos de cotas según la naturaleza de su derivación y la metodología de homogeneización utilizada a saber, las cotas relajadas, HS'' – SC'' y las no relajadas HS – SC. Las mismas se presentan para la resistencia al corte e hidrostática en función de la relación entre las tensiones críticas resueltas de los distintos sistemas de deslizamiento denominadas contraste.

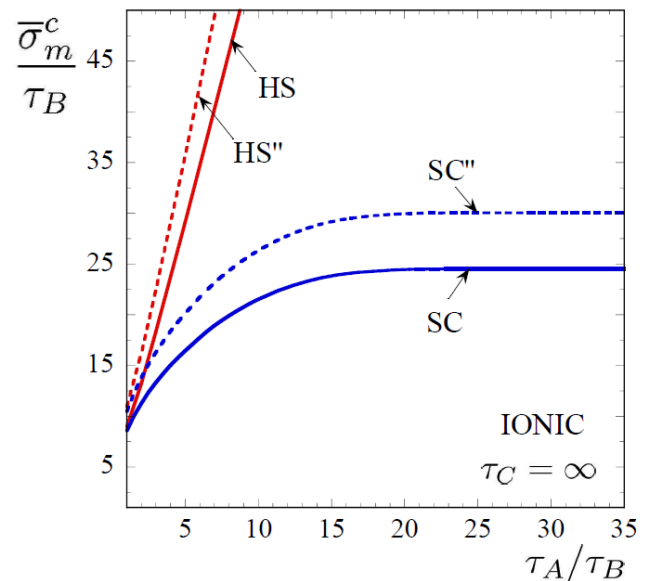
## RESULTADOS

Las figuras 2 a 5 muestran varias cotas para sólidos iónicos (IONIC) con un grado moderado de porosidad ( $f = 0,05$ ) y varios grados de anisotropía cristalina. Las curvas están dadas para resistencias plásticas de corte  $\bar{\sigma}_e^c$  e hidrostáticas  $\bar{\sigma}_m^c$  como función del contraste entre los sistemas de deslizamiento A y B en sólidos IONIC con sistemas tipo C infinitamente rígidos. Las cotas para la resistencia al corte muestran tendencias similares a las reportadas previamente para sólidos IONIC sin porosidad —véase figura 1 en Idiart (2012)—, como es de esperarse para este grado de porosidad. De este modo, las cotas de Taylor y HS crecen linealmente con el contraste en los sistemas de deslizamiento y se acercan bastante entre ellas para todo el rango de anisotropías plásticas considerado, mientras que las cotas SC divergen de aquellas cotas exhibiendo un crecimiento diferente y grandes diferencias debidas a la relajación variacional.

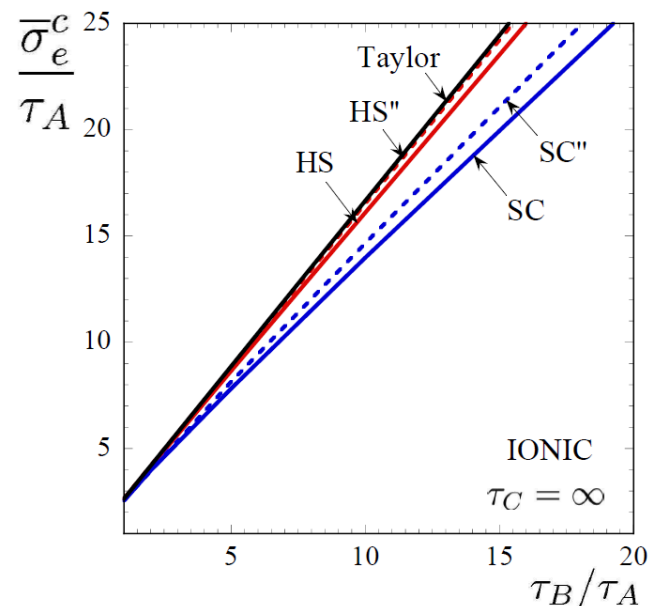


**Figura 2.** Cotas de resistencia plástica efectiva bajo cargas de corte ( $\bar{\sigma}_e^c$ ) para policristales iónicos (IONIC) isótropos con moderado nivel de porosidad ( $f = 0,05$ ), como función del contraste en los sistemas de deslizamiento.

Por otra parte, la cota de Taylor para la resistencia hidrostática es infinitamente grande, y por lo tanto trivial, mientras que las cotas de HS y SC para esta cantidad permanecen finitas siempre y cuando los sistemas de deslizamiento tipo-A y tipo-B puedan ambos deformar. Una vez más, las cotas para la resistencia hidrostática muestran las máximas diferencias relativas debido a la relajación variacional. Sin embargo, esas diferencias se mantienen del mismo orden (~22%) que aquellas reportadas anteriormente para sólidos IONIC de gran simetría, véase Ramos Nervi (2015). Cálculos adicionales en función de la porosidad, Ramos Nervi (2016), revelan que el impacto en la relajación variacional de esas cotas lineales de comparación es independiente del nivel de porosidad. Finalmente, como las cotas de HS crecen más rápido con el contraste que las cotas SC, las cotas no relajadas de HS para la resistencia hidrostática dejan de ser más estrictas que las cotas relajadas SC'' por encima de cierto nivel de contraste.

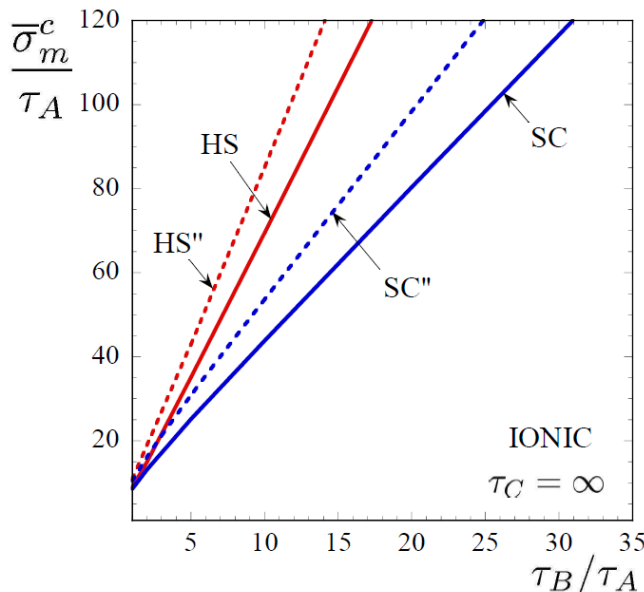


**Figura 3.** Cotas de resistencia plástica efectiva bajo cargas hidrostáticas ( $\bar{\sigma}_m^c$ ) para policristales iónicos (IONIC) isótropos con moderado nivel de porosidad ( $f = 0,05$ ), como función del contraste en los sistemas de deslizamiento.



**Figura 4** Cotas de resistencia plástica efectiva bajo cargas de corte ( $\bar{\sigma}_e^c$ ) para policristales iónicos (IONIC) isótropos con moderado nivel de porosidad ( $f = 0,05$ ), como función del contraste en los sistemas de deslizamiento.





**Figura 5** Cotas de resistencia plástica efectiva bajo cargas hidrostáticas ( $\bar{\sigma}_m^c$ ) para policristales iónicos (IONIC) isotrópicos con moderado nivel de porosidad ( $f = 0,05$ ), como función del contraste en los sistemas de deslizamiento.

Las figuras 6 a 9, muestran varias cotas para sólidos hexagonales compactos (HCP) con un moderado nivel de porosidad ( $f = 0,05$ ) y varios grados de anisotropía cristalina. Se presentan para resistencias plásticas tanto de corte ( $\bar{\sigma}_e^c$ ) como hidrostáticas ( $\bar{\sigma}_m^c$ ) en función del contraste en los sistemas de deslizamiento en sólidos con  $\tau_A = \tau_B \neq \tau_C$  y  $\tau_A \neq \tau_B = \tau_C$ .

Una vez más, las cotas para la resistencia al corte muestran tendencias similares a las observadas previamente en sólidos sin porosidad —véase la figura 2 en Idiart (2012)—, como es de esperarse a este nivel de porosidad. Por consiguiente, las cotas de Taylor y HS crecen linealmente con el contraste en los sistemas de deslizamiento y nos brindan predicciones similares, mientras que las cotas SC divergen de aquellas cotas mostrando un crecimiento diferente y brindando predicciones presumiblemente más realistas. Por otra parte, la cota de Taylor para la resistencia hidrostática es infinitamente grande mientras que las cotas de HS y SC para esta cantidad permanecen finitas, siempre y cuando los tres sistemas de deslizamiento puedan deformar. El impacto en la relajación variacional de las cotas lineales

de comparación permanece en el orden del ~40% pero decrece algo al incrementarse el contraste en los sistemas de deslizamiento. De este modo, el efecto de la relajación parece depender de la porosidad, la cristalografía y la anisotropía cristalina de manera intrincada. Finalmente, debido a que las cotas de HS crecen más rápido con el contraste en los sistemas de deslizamiento que las cotas SC, las cotas no relajadas HS para la resistencia hidrostática dejan de ser más estrictas que las cotas relajadas SC por encima de cierto contraste.

### EFFECTO DEL CONTRASTE EN SISTEMAS DE DESLIZAMIENTO.

Al hacer tender los contrastes en los sistemas de deslizamiento de las figuras 2 a 8 a infinito, el número de sistemas de deslizamientos linealmente independientes ( $J$ ) en los correspondientes cristales que constituyen el policristal se vuelve deficiente, es decir, menor a cinco. En este límite, las cotas para las resistencias plásticas de corte e hidrostáticas siguen un factor de escalamiento de la forma  $\bar{\sigma}_e^c \sim M^{\gamma_e}$  y  $\bar{\sigma}_m^c \sim M^{\gamma_m}$ , donde  $M$  es el contraste en sistemas de deslizamiento relevante y  $\gamma$  es el factor de escalamiento. Más específicamente, para la cota de Taylor  $\gamma_e = 1$  y  $\gamma_m$  queda indefinido, mientras que para las cotas de HS  $\gamma_e = \gamma_m = 1$  independientemente de las simetrías cristalinas. Por otro lado, los exponentes  $\gamma_e$  y  $\gamma_m$  para las cotas SC son diferentes y dependen de la simetría cristalina. Estos exponentes pueden expresarse en términos del número  $J$  de sistemas de deslizamiento linealmente independientes en el límite  $M \rightarrow \infty$ . De los resultados numéricos se infiere que:

$$\gamma_e = (4 - J)/2 \text{ y } \gamma_m = (4 - J)(3 - J)/2.$$

Esta expresión para  $\gamma_e$  coincide con la inferida previamente por Nebozhyn et al. (2001) para la resistencia plástica al corte en policristales sin porosidad.

En efecto, los resultados para las cotas SC mostrados en las figuras 2 y 3 para sistemas de deslizamiento dominantes tipo B ( $J = 3$ ) y en las figuras 4 y 5 para sistemas de

deslizamiento dominantes tipo A ( $J = 2$ ) son consistentes con los exponentes  $\gamma_e = 1/2 | \gamma_m = 0$  y  $\gamma_e = 1 | \gamma_m = 1$ , respectivamente; mientras que aquellos mostrados en las figuras 6 y 7 para sistemas de deslizamiento dominantes tipo basales + prismáticos ( $J = 4$ ) y en las figuras 8 y 9 para sistemas de deslizamiento dominantes tipo basales ( $J = 2$ ) son consistentes con los exponentes  $\gamma_e = 0 | \gamma_m = 0$  y  $\gamma_e = 1 | \gamma_m = 1$ , respectivamente.

De acuerdo a estas leyes, puede haber agregados de cristales deficientes con porosidad que aún pueden acomodar deformaciones macroscópicas arbitrarias.

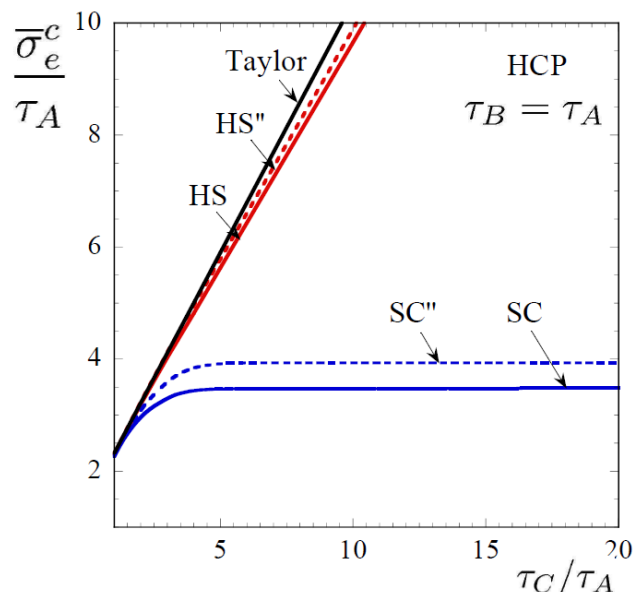
Sin embargo, las deformaciones esféricas arbitrarias no pueden ser acomodadas por policristales con menos de tres sistemas independientes, mientras que deformaciones desviadoras no pueden ser acomodadas por policristales con menos de cuatro sistemas independientes.

En otras palabras, los resultados SC aseguran que agregados cristalinos con porosidad y cuatro sistemas independientes pueden acomodar deformaciones arbitrarias, agregados de cristales con tres sistemas independientes pueden dilatar pero no distorsionarse y agregados de cristales con dos sistemas independientes no pueden deformarse.

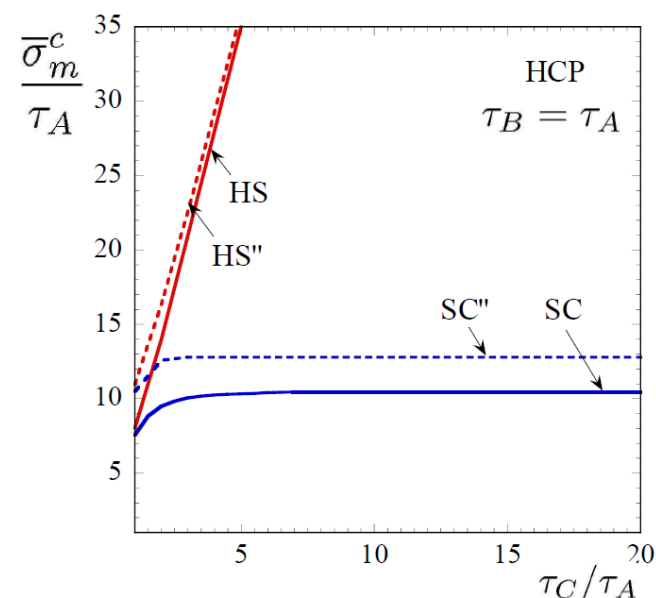
Este resultado se puede resumir en la tabla 1 como leyes de escalamiento para policristales porosos con sistemas deficientes.

**Tabla I.** Factores de escalamiento para la resistencia hidrostática y al corte en función del tipo de cota y el número de sistemas de deslizamiento linealmente independientes.

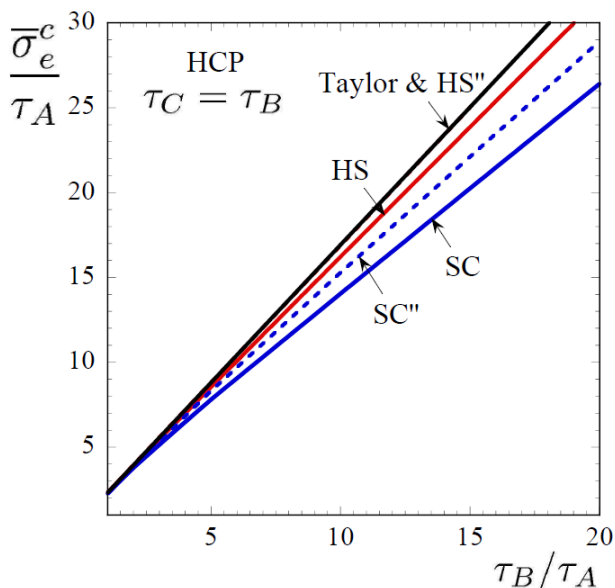
$\bar{\sigma}_{e,m}^c \sim M^{\gamma_{e,m}}$	$\gamma_e$	$\gamma_m$
Taylor	1	1
HS	1	1
SC	$(4 - J)$	$(4 - J)(3 - J)/2$



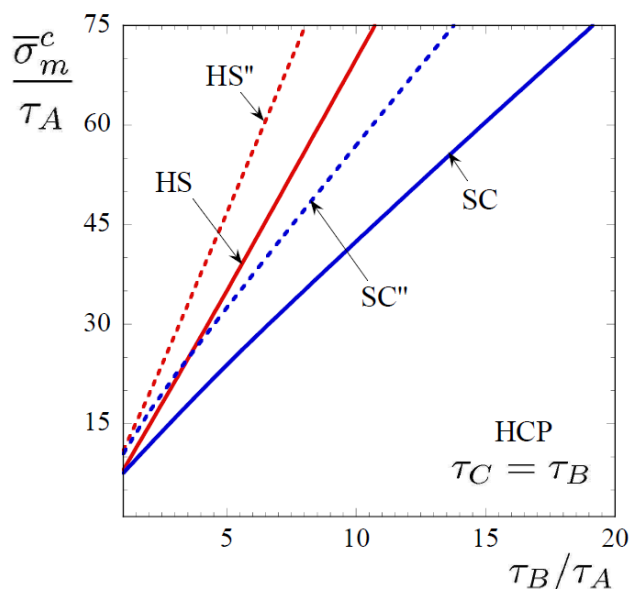
**Figura 6.** Cotas de resistencia plástica efectiva bajo cargas de corte ( $\bar{\sigma}_e^c$ ) para policristales hexagonales (HCP) isotropos con un nivel de porosidad moderada  $f = 0,05$ , como función del contraste al deslizamiento.



**Figura 7.** Cotas de resistencia plástica efectiva bajo cargas hidrostáticas ( $\bar{\sigma}_m^c$ ) para policristales hexagonales (HCP) isotropos con un nivel de porosidad moderada  $f = 0,05$ , como función del contraste al deslizamiento.



**Figura 8.** Cotas de resistencia plástica efectiva bajo cargas de corte ( $\bar{\sigma}_e^c$ ) para policrostales hexagonales (HCP) isotropos con un nivel de porosidad moderada  $f = 0,05$ , como función del contraste al deslizamiento.



**Figura 9.** Cotas de resistencia plástica efectiva bajo cargas hidrostáticas ( $\bar{\sigma}_m^c$ ) para policrostales hexagonales (HCP) isotropos con un nivel de porosidad moderada  $f = 0,05$ , como función del contraste al deslizamiento.

## REFERENCIAS

[1] S.J. Zinkle, & G.S. Was, "Materials challenges in nuclear energy", *Acta Mater.* 61 (2013), 735-758.

[2] P.-G. Vincent, "Modélisation micromécanique de la croissance et de la percolation de pores sous pression dans une matrice céramique à haute température". Tesis Doctoral, Université de Provence Aix Marseille I, Marseille, (2007) France.

[3] J. Julien, "Modélisation multi-échelles du couplage physico-chimie-mecanique du comportement du combustible à haute température des réacteurs à eau sous pression", Tesis Doctoral. Université de Provence Aix Marseille I, (2008), Francia.

[4] P. Blair, "Modelling of fission gas behaviour in high burnup nuclear fuel", Tesis Doctoral. École polytechnique, (2008), Francia.

[5] P.-G. Vincent, Y. Monerie, & Suquet P., "Porous materials with two populations of voids under internal pressure: I. Instantaneous constitutive relations", *Int. J. Solids Struct.* 46, (2009) 480–506.

[6] S. Caré, & A. Zaoui, "Cavitation at triple nodes in-zirconium polycrystals", *Acta Mater.* 44, (1996), 1323–1336.

[7] J. C. F. Millet, G. Whiteman, N. K. Bourne, & G. T. Gray III, "The role of anisotropy in the response of the titanium alloy Ti-6Al-4V to shock loading" *J. A. Phys.* 104, (2008) 073531.

[8] U. F., Tomé, C. N. & Wenk, H.-R. Kocks, "Texture and anisotropy", Cambridge, U.K.: Cambridge University Press (1998).

[9] G.I. Taylor, "Plastic strain in metals". *J. Inst. Metals* 62, (1938) 307–324.

[10] A. Reuss, *Z. Angew. Math. Mech.* 9, (1929) 49–58. (doi:10.1002/zamm.19290090104)

[11] R. Dendievel, G. Bonnet, & J.R. Willis, "Bounds for the creep behaviour of polycrystalline materials" En: Dvorak, G.J. (Ed.), *Inelastic Deformation of Composite Materials*, Springer, New York, (1991) 175–192.

[12] G. deBotton, Ponte Castañeda P., "Variational estimates for the creep behavior of polycrystals", *Proc. R. Soc. Lond. A* 448, (1995) 121–142. (doi:10.1098/rspa.1995.0009).

[13] J.R. Willis, Upper and lower bounds for nonlinear composite behavior *Mater. Sci. Engrg. A* 175, (1994), 7–14.

[14] Y. Liu, & P. Ponte Castañeda, "Homogenization estimates for the average behavior and field fluctuations in cubic and hexagonal viscoplastic polycrystals". *J. Mech. Phys. Solids* 52, (2004), 1175–1211.

[15] Y. Liu, P. Gilormini, & P. Ponte Castañeda, "Variational self-consistent estimates for texture evolution in viscoplastic polycrystals" *Acta Mater.* 51, (2003), 5425–5437.



- [16] M. I. Idiart, & P. Ponte Castañeda, "Variational principles and bounds for nonlinear composites with anisotropic phases" I. General results. Proc. R. Soc. Lond. A 463, (2007a), 907–924.
- [17] M. I. Idiart, & P. Ponte Castañeda, "Variational principles and bounds for nonlinear composites with anisotropic phases. II". Crystalline materials. Proc. R. Soc. Lond. A 463, (2007b) 925–943.
- [18] R.A. Lebensohn, M.I. Idiart, P. Ponte Castañeda, & P.-G. Vincent, "Dilatational viscoplasticity of polycrystalline solids with intergranular cavities" Phil. Mag. 91, (2011), 3038–3067.
- [19] X. Han, J. Besson, S. Forest, B. Tanguy, & S. Bugat, "A yield function for single crystals containing voids" Int. J. Solids Struct. 50, (2013) 2115–2131.
- [20] J.R. Willis, "Elasticity theory of composites", En: Hopkins, H. G., Sewell, M. J. (Eds.), Mechanics of Solids, The Rodney Hill 60th Anniversary Volume. Pergamon Press, (1982) 653–686.
- [21] Suquet, P., "Analyse limite et homogénéisation" C.R. Acad. Sci. Paris Ser. II 296, (1983), 1355–1358.
- [22] G. Bouchitté, & P. Suquet, "Homogenization, plasticity and yield design". En: Composite media and homogenization theory (G. Dal Maso & G. Dell'Antonio, eds.). Birkhäuser, Basel, (1991) 107–133.
- [23] J.E. Ramos Nervi, M.I. Idiart., "Bounding the plastic strength of polycrystalline voided solids by linear-comparison homogenization techniques", Proc. R. Soc. A 471: 20150380 (2015).
- [24] M.I. Idiart, J.E. Ramos Nervi, "Bounds on the hydrostatic plastic strength of voided polycrystals and implications for linear-comparison homogenization techniques", Comptes Rendus Mécanique, Vol. 342, Issue 1, (2014), 25-31.
- [25] J.E. Ramos Nervi., "Plasticidad de materiales policristalinos con porosidad presurizada", Tesis de Maestría presentada ante la facultad de ingeniería de la universidad nacional de la plata para optar al grado académico de magister en ingeniería. (2016) <http://sedici.unlp.edu.ar>
- [26] J.E. Ramos Nervi, "Respuesta plástica de materiales policristalinos con Microporosidad presurizada", 3º seminario ECAMAT: Fenómenos de transporte en sólidos deformables: Teorías de Homogenización", Academia Nacional de Ciencias de Buenos Aires, 2015. <http://www.ciencias.org.ar>.
- [27] M. I. Idiart, "Bounding the plastic strength of polycrystalline solids by linear comparison homogenization methods", Proc. R. Soc. Lond. A 468, (2012) 1136–1153.
- [28] M.V. Nebozhyn, P. Gilormini, & P. Ponte Castañeda, "Variational selfconsistent estimates for cubic viscoplastic polycrystals: the effects of grain anisotropy and shape", J. Mech. Phys. Solids 49, (2001) 313–340.
- [29] Dherbey, F. L., "Elevated temperature creep of polycrystalline uranium dioxide: from microscopic mechanisms to macroscopic behaviour", Acta Mater. 50, (2002) 1359–6454.