



Escola Politécnica  
Universidade de São Paulo



# Mecânica Computacional na Análise de Esforços de Contato em Sistemas com e sem Revestimento

Roberto Martins Souza

Universidade de Caxias do Sul

20/08/2013



# Sumário

- Mecânica do contato
  - Relevância
  - Complexidade
  - Análise
    - Identificar característica mecânica – precisão da análise
    - Associar problema de contato com a característica mecânica
    - Propor alternativa para melhoria de desempenho
- Exemplos de análise numérica
  - Indentação instrumentada (nanoindentação)
  - Indentação de sistema com filme resistente ao desgaste e substrato dútil
  - Esforços normais e tangenciais
  - Simulações por dinâmica molecular

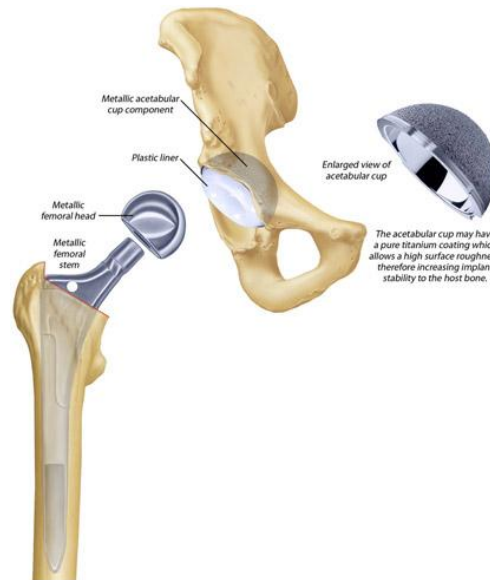


# Mecânica do Contato

- Presente em várias situações práticas
  - Contatos tribológicos (atrito, desgaste e lubrificação)



Componentes  
mecânicos



Aplicações de  
bioengenharia

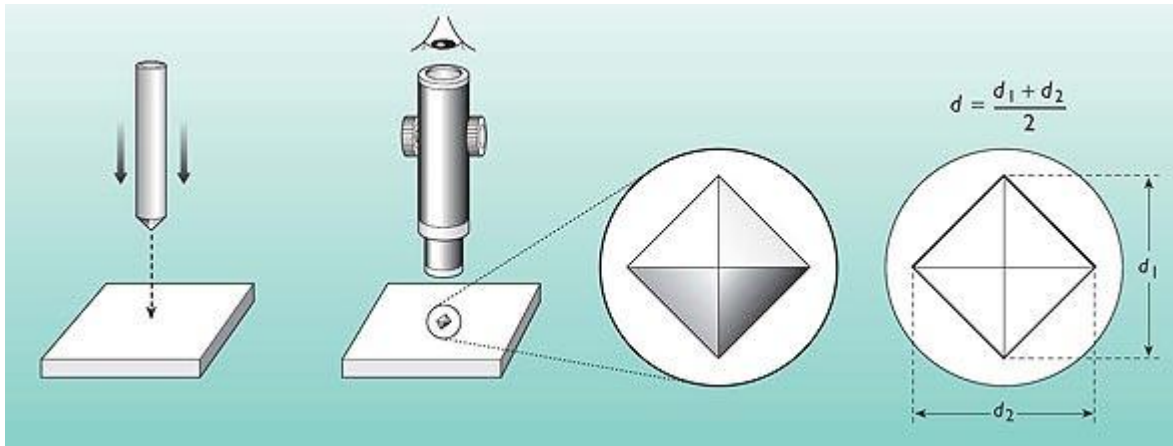


Manufatura  
(ferramentas de  
corte e conformação)



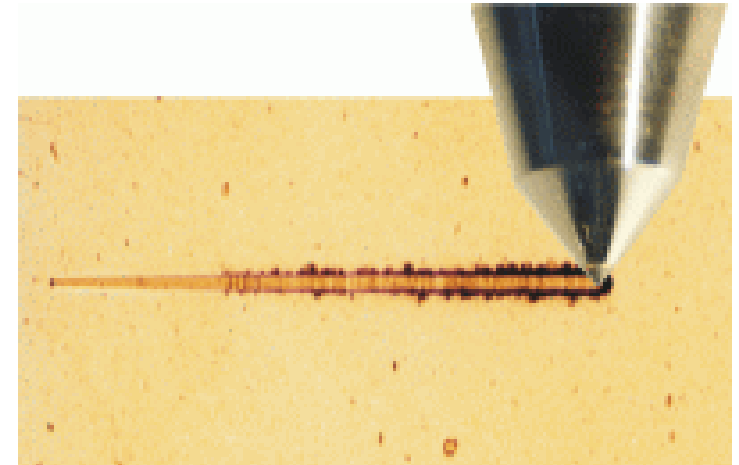
# Mecânica do Contato

- Presente em testes laboratoriais



Dureza

<http://openlearn.open.ac.uk>



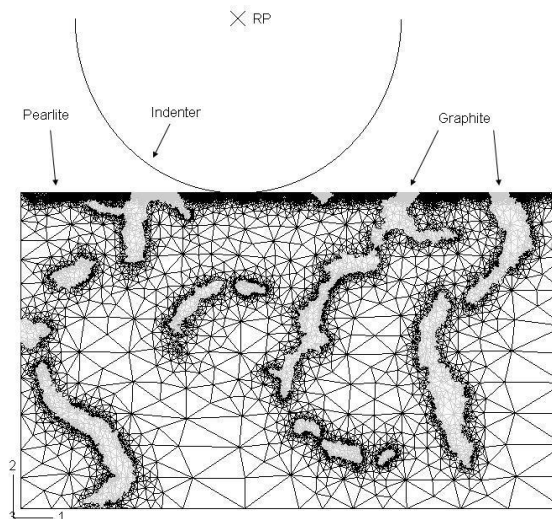
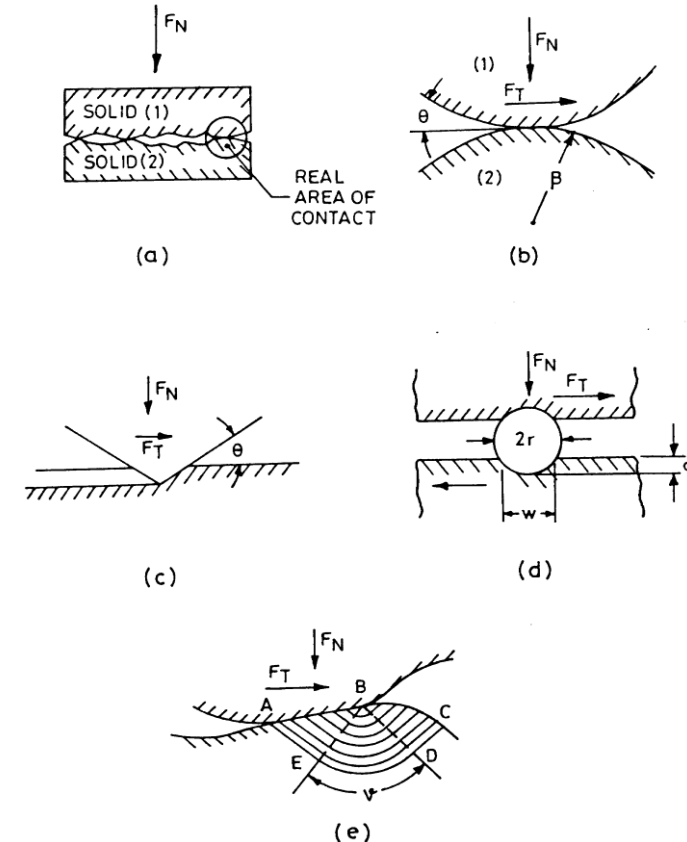
*Scratch testing*

<http://www.bam.de>



# Mecânica do Contato

- Contato pode ser simples ou complexo
  - Geometria: regular or irregular
  - Cargas: periódicas or aleatórias normais, tangenciais
  - Estrutura



[N.K. Fukumasu et al. Wear 2005]

B. Bhushan and B.K. Gupta, “**Handbook of Tribology: Materials, Coatings and Surface Treatments**”



# Mecânica do Contato

- Análises no Laboratório de Fenômenos de Superfície

Característica  
mecânica:

- Propriedade
- Estado de tensões  
+  
Precisão na medida



Correlacionar  
característica  
com  
desempenho



Propor  
alternativa:

- Material
- Processo
- Estado de  
tensões

Exemplos mostrando atividades de pesquisa nas três áreas



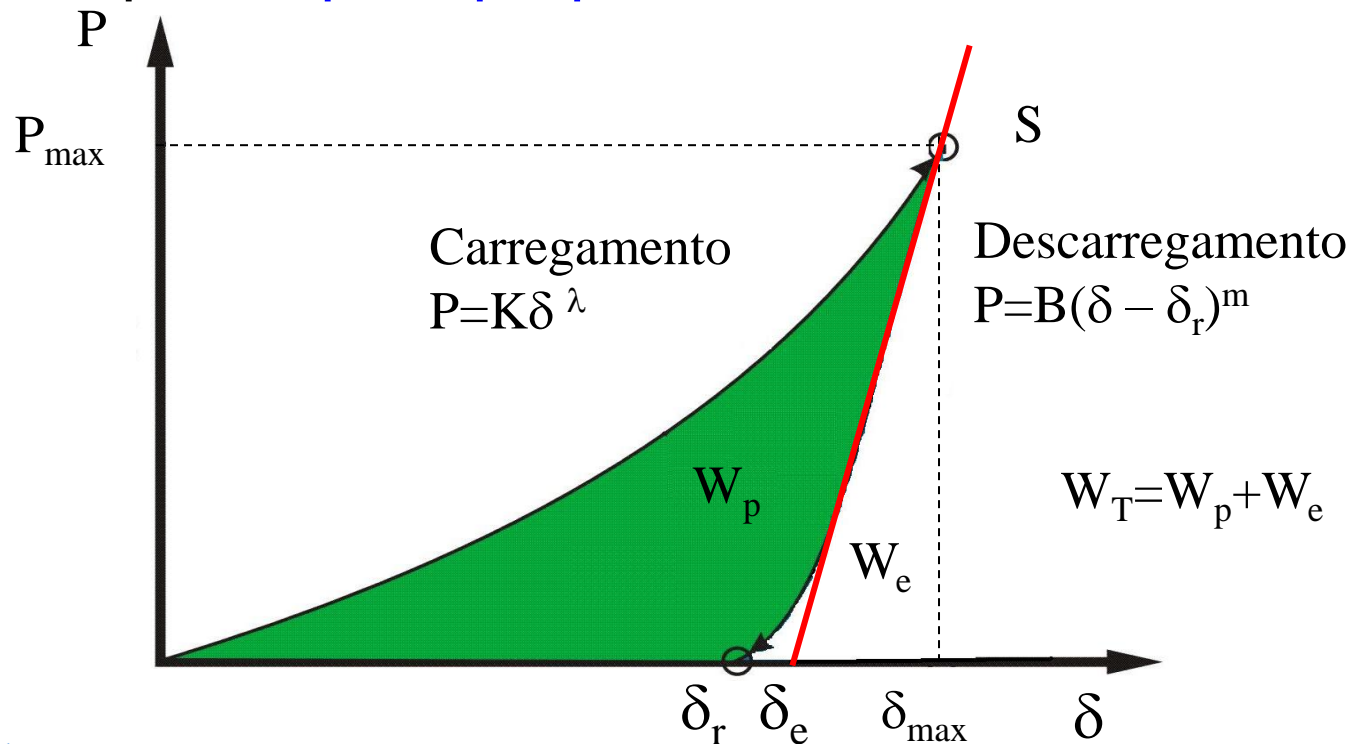
# Sumário

- Mecânica do contato
  - Relevância
  - Complexidade
  - Análise
    - Identificar característica mecânica – precisão da análise
    - Associar problema de contato com a característica mecânica
    - Propor alternativa para melhoria de desempenho
- Exemplos de análise numérica
  - Indentação instrumentada (nanoindentação)
  - Indentação de sistema com filme resistente ao desgaste e substrato dútil
  - Esforços normais e tangenciais
  - Simulações por dinâmica molecular



# Indentação Instrumentada

- Teste de dureza com **acompanhamento contínuo**:  
carga e deslocamento da ponta do penetrador
- Técnica adequada **para pequenos volumes**



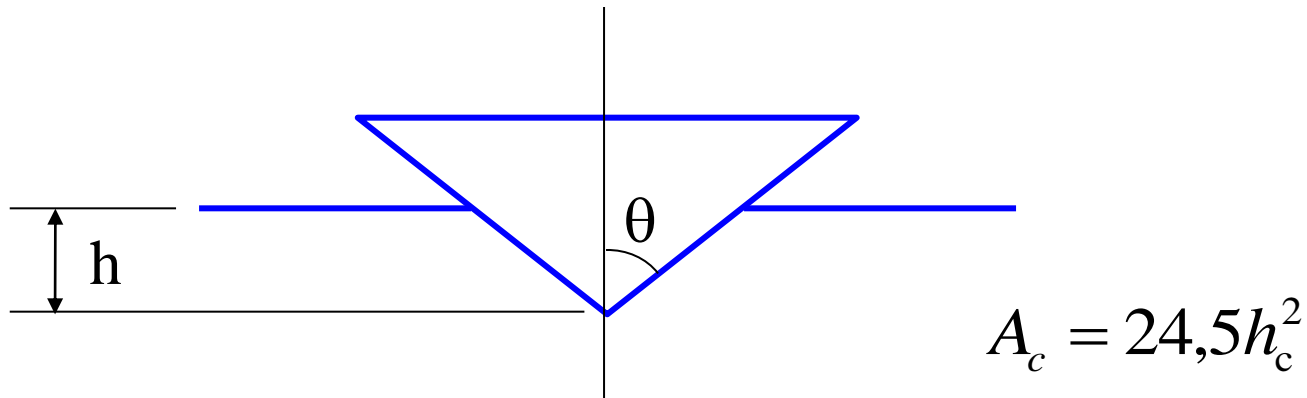




# Indentação Instrumentada

- Ponto chave: **Area** real de contato
  - Dureza, **módulo elástico** reduzido

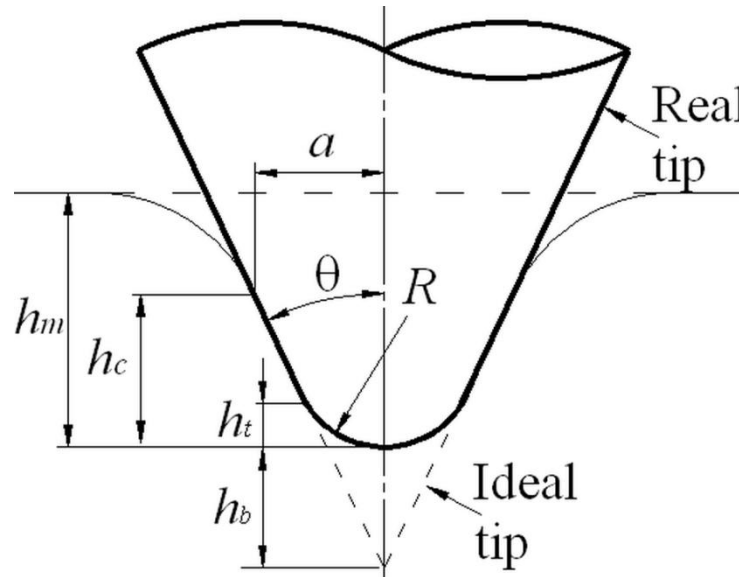
$$H = \frac{P_{max}}{A_c} \quad E_r = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta} \frac{S}{\sqrt{A_c}}$$





# Indentação Instrumentada

- Problemas:
  - Ponta do penetrador pode não ser perfeita – função de área



$$A_c = f(h_c)$$

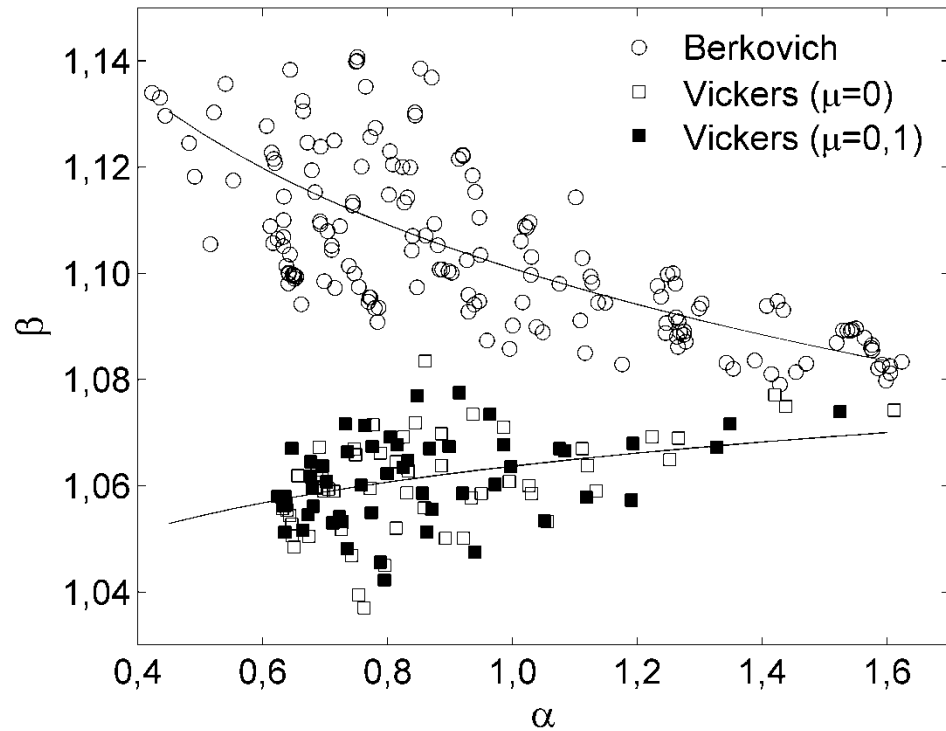


# Indentação Instrumentada

- Problemas:

- “Constante”  $\beta$

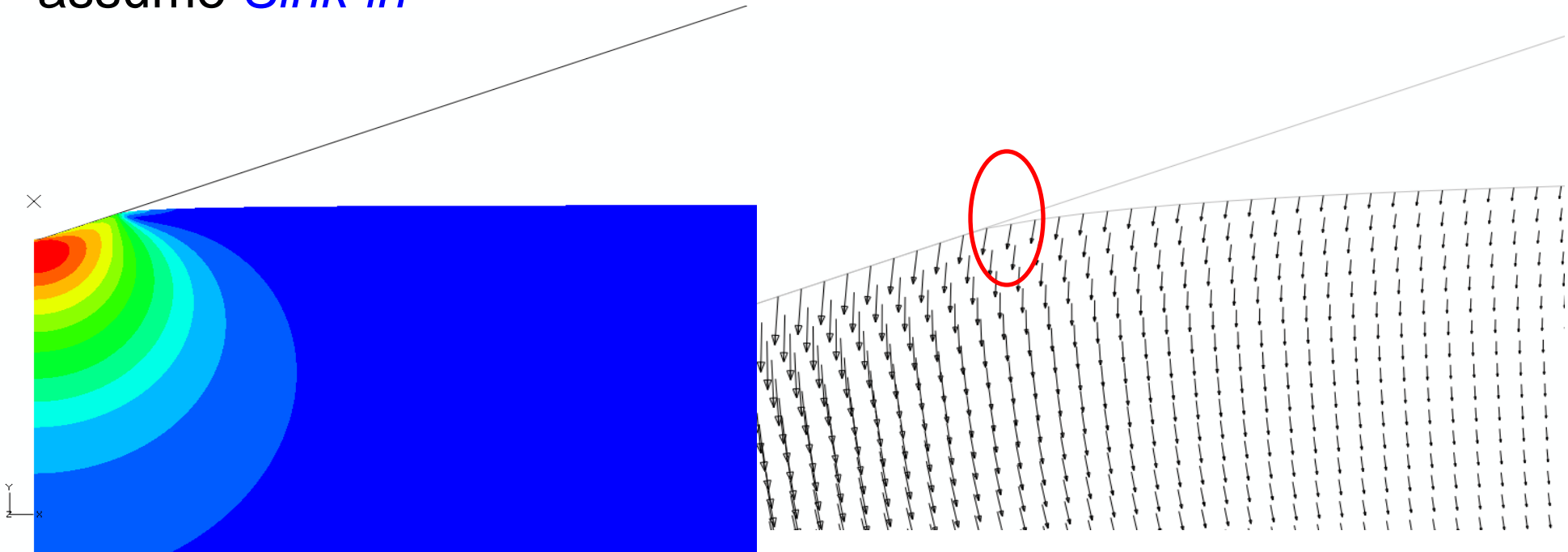
$$E_r = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta} \frac{S}{\sqrt{A_c}}$$





# Indentação Instrumentada

- Morfologia da indentação: Modelo analítico mais comum assume *Sink-in*

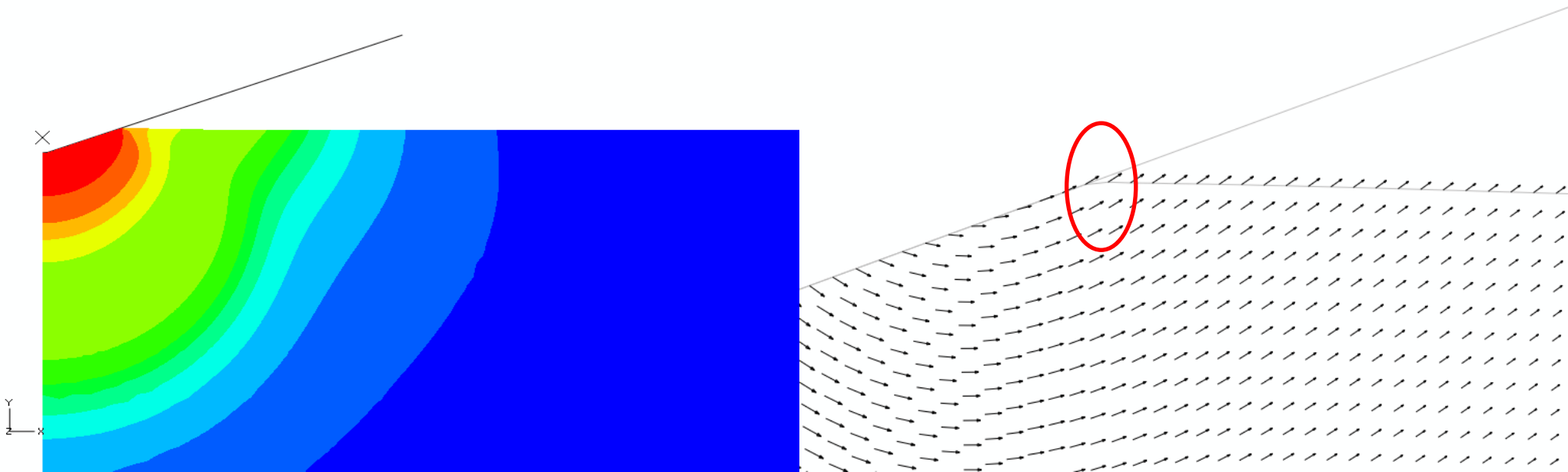


Tensão de von Mises e deslocamentos ( $Y = 1600$  MPa,  $E = 50,5$  GPa,  $n = 0,4$ )



# Indentação Instrumentada

- Morfologia da indentação: *Pile-up*



Tensão de von Mises e deslocamentos ( $Y = 335$  MPa,  $E = 210$  GPa,  $n = 0,1$ )



# Indentação Instrumentada

- Algoritmos diretos e inversos:

Equações adimensionais  $\Pi$

Método dos elementos finitos



Coeficientes para as equações adimensionais  $\Pi$



Equações  $\Pi$

Curvas de  
indentação  
( $P$ - $\delta$ )

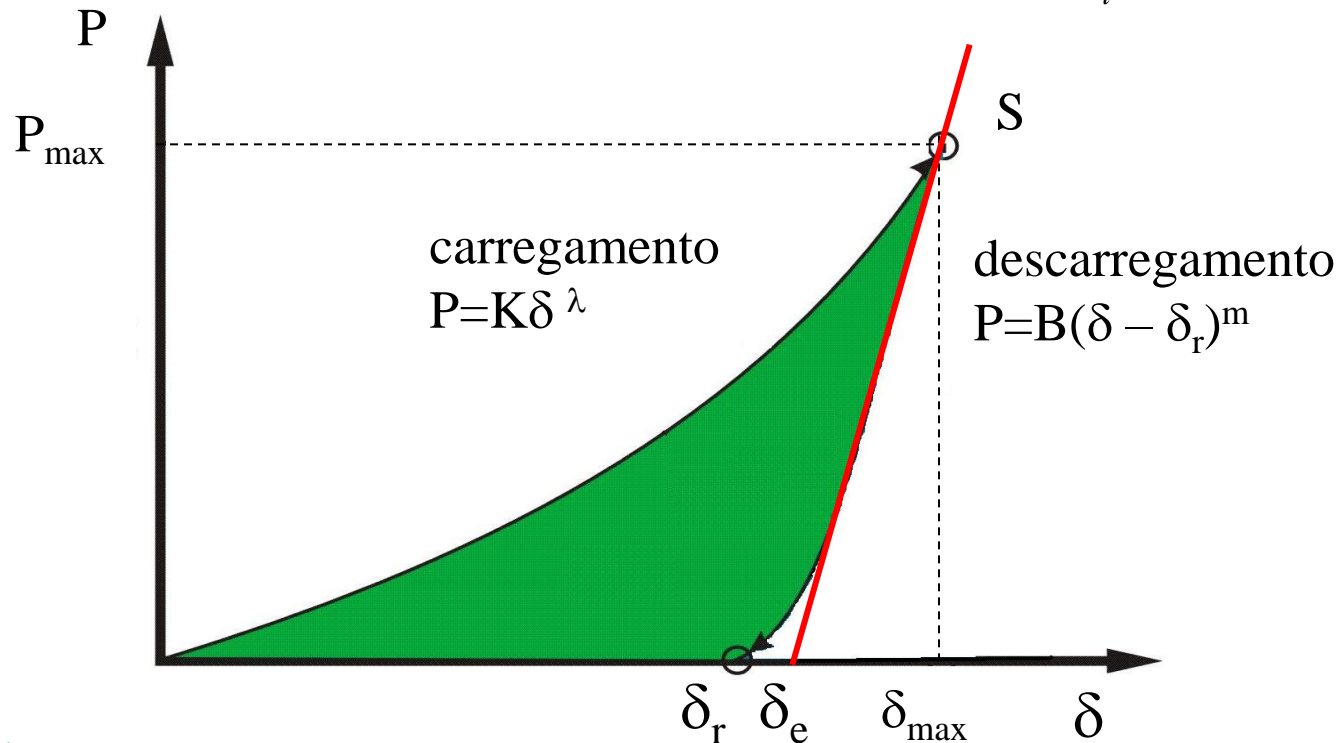


Propriedades  
mecânicas  
( $H$ ,  $E$ ,  $\sigma_y$ ,  $n$ )



# Indentação Instrumentada

- Parâmetros adimensionais curva P -  $\delta$ :  $\frac{P}{E_r \delta^2}$ ,  $\frac{\delta_r}{\delta_{\max}}$ ,  $\frac{\delta_e}{\delta_{\max}}$
- Parâmetros adimensionais material:  $\frac{\sigma_y}{E_r}$ ,  $n$ ,  $\frac{E_r}{E_i}$





# Indentação Instrumentada

- Método dos elementos finitos – Condições analisadas

Geometry	Indented material	$\frac{\sigma_y}{E_r}$	$n$	$\frac{E}{E_i}$
Berkovich (3D)	Bulk	0-0.05	0-0.5	0-0.4
Vickers (3D)	Bulk/Film	0-0.05	0-0.5	0
Perfect Cone (2D)	Bulk/Film	0-0.1	0-0.5	0-0.4
Tip rounded cone (2D)	Bulk/Film	0-0.1	0-0.5	0





# Indentação Instrumentada

- Algoritmos diretos e inversos:

Equações adimensionais  $\Pi$

Método dos elementos finitos



Coeficientes para as equações adimensionais  $\Pi$



Equações  $\Pi$

Curvas de  
indentação  
( $P$ - $\delta$ )



Propriedades  
mecânicas  
( $H$ ,  $E$ ,  $\sigma_y$ ,  $n$ )



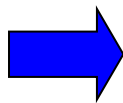
# Indentação Instrumentada

$$\delta_e / \delta_{\max}, \delta_r / \delta_{\max}$$

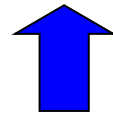
$$\frac{\delta_e}{\delta_{\max}} = \Xi_3 \left( \frac{\delta_r}{\delta_{\max}}, n \right)$$

$$n$$

$$\alpha = \Xi_4 \left( \frac{\delta_r}{\delta_{\max}}, n \right)$$

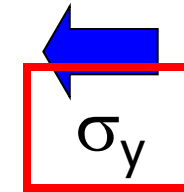


$$H = \frac{P_{\max}}{A_c}$$

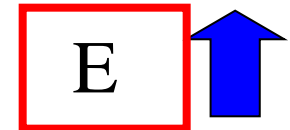


$$\beta = f_1(\alpha)$$

$$A_c = \alpha A_s = \alpha f \delta^2$$



$$\frac{\delta_r}{\delta_{\max}} = \Pi_1 \left( \frac{Y}{E_r}, n \right)$$

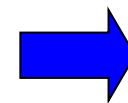


$$\frac{1}{E_r} = \frac{(1 - \nu^2)}{E} + \frac{(1 - \nu_i^2)}{E_i}$$



$\nu$

$P_{\max}$



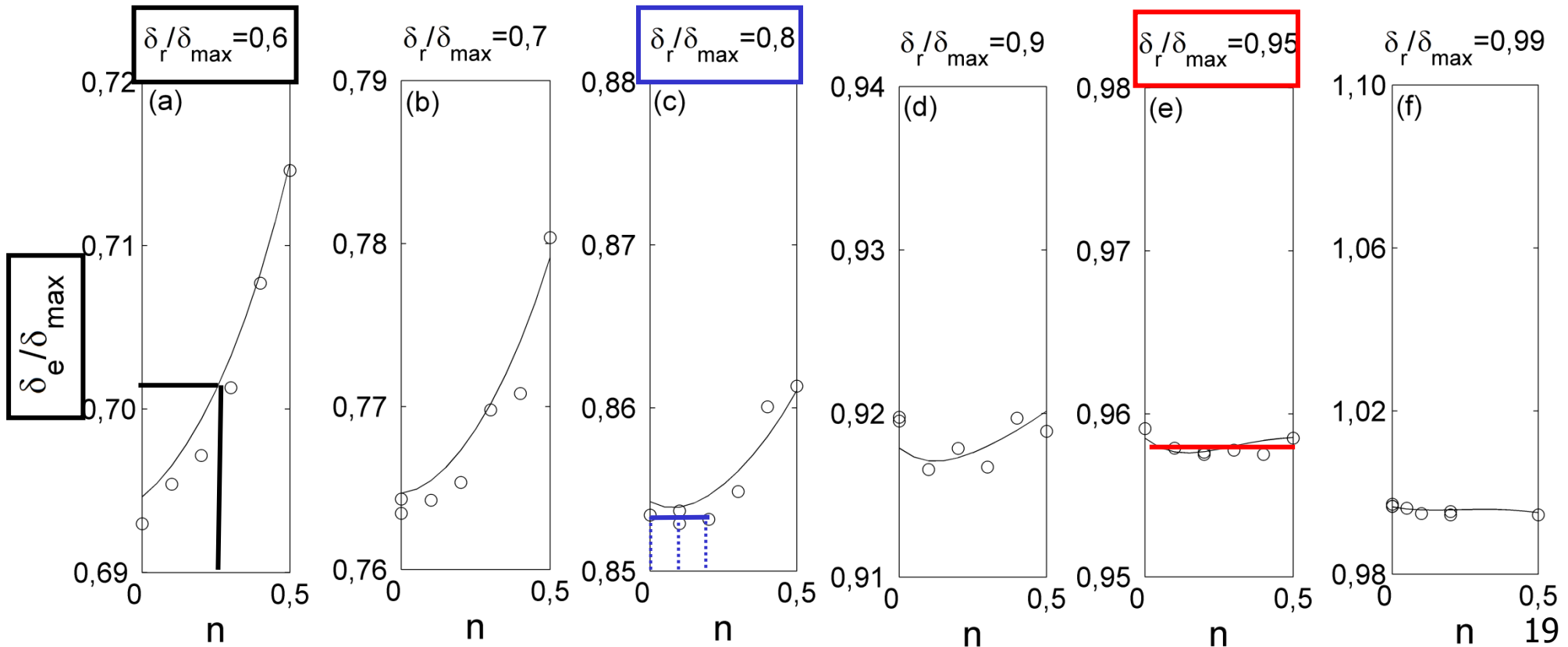
$$E_r = \beta \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{A_c}} \frac{P_{\max} / \delta_{\max}}{\left( 1 - \frac{\delta_e}{\delta_{\max}} \right)}$$



# Indentação Instrumentada

- Unicidade no cálculo de “n”?

Rodríguez et al *Philosophical Magazine*, 91 2011





# Indentação Instrumentada

- Método dos elementos finitos: Tensões residuais de filmes finos

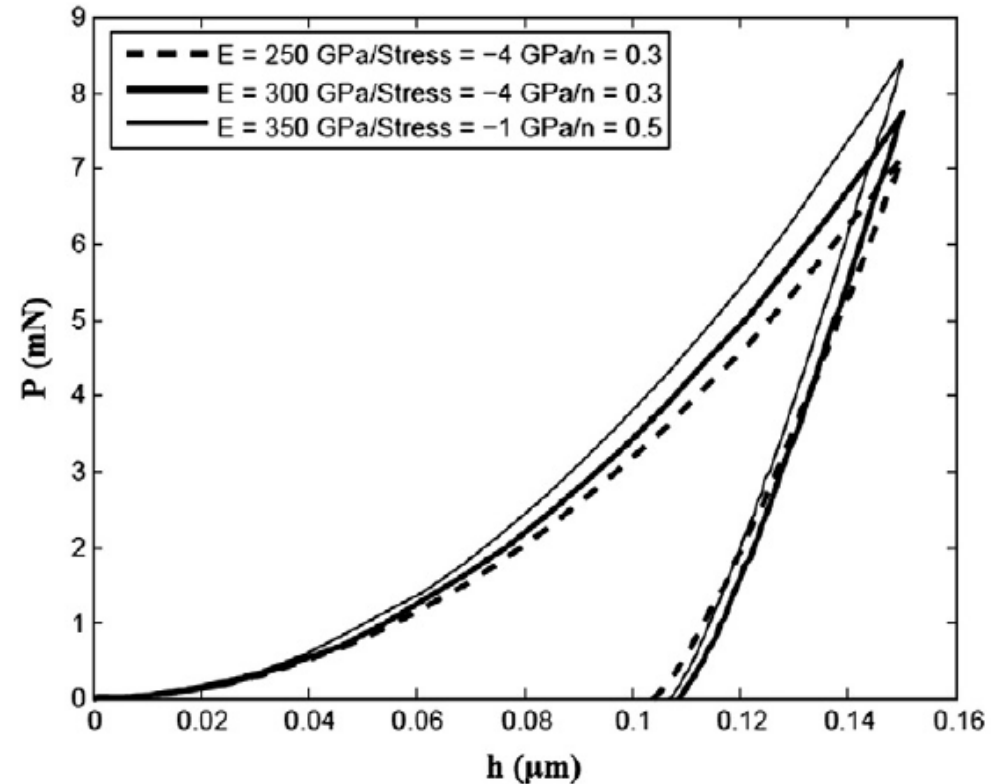
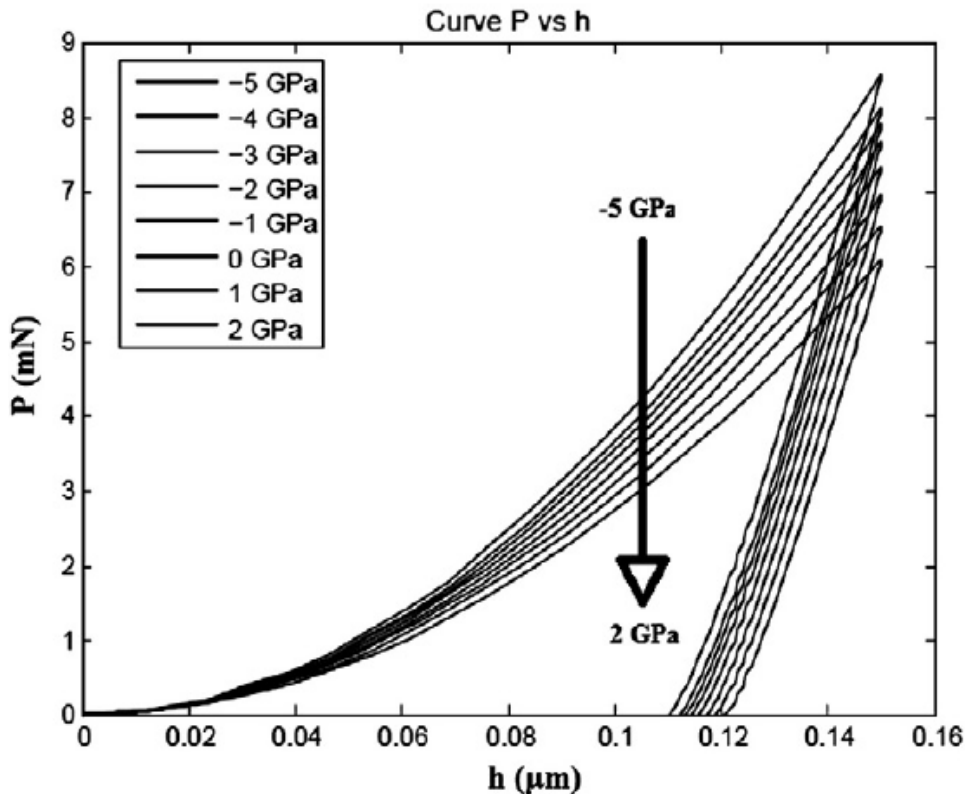


Mady et al *Surface and Coatings Technology*, 205, 2010



# Indentação Instrumentada

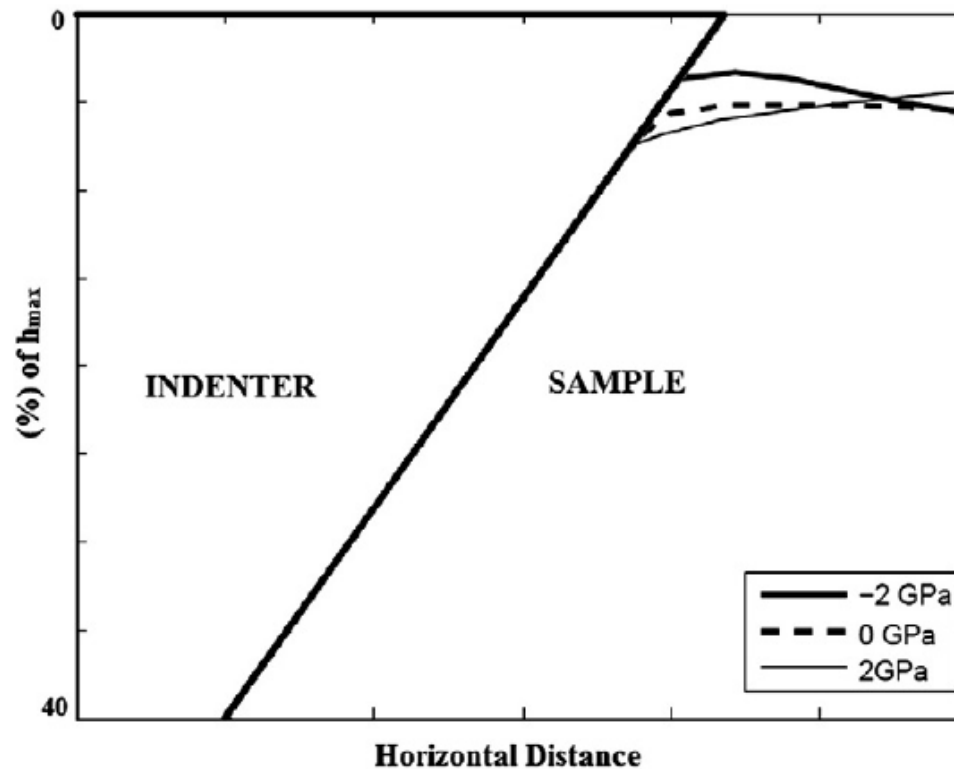
- Método dos elementos finitos: **Tensões residuais** de filmes finos
  - Cargas mais altas para atingir a mesma penetração
  - Em laboratório: Necessidade de manter as mesmas propriedades





# Indentação Instrumentada

- Método dos elementos finitos: **Tensões residuais** de filmes finos
- Mudança na área de contato





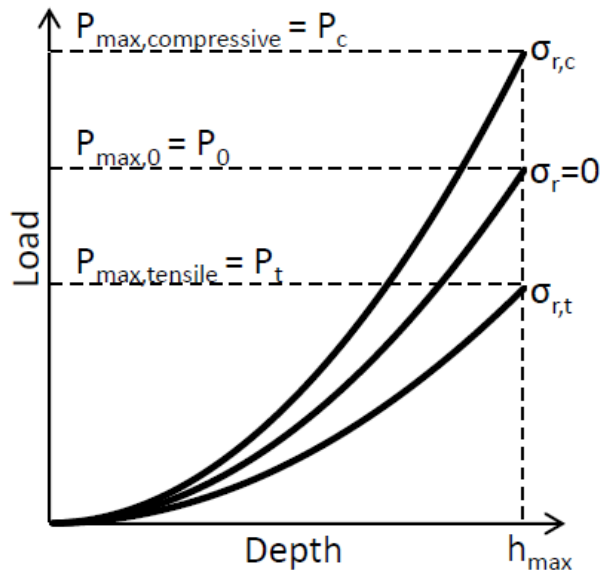
# Indentação Instrumentada

- Método dos elementos finitos: Tensões residuais de filmes finos

Curvas de  
indentação  
(P- $\delta$ )



Tensões  
residuais  
em filmes



Suresh and Giannakopoulous *Acta Mater.* **46**, 5755 (1998).

Atar et al. *Scripta Mater.* **48**, 1331 (2003).

Lee and Kwon *Scripta Mater.* **49**, 459 (2003).

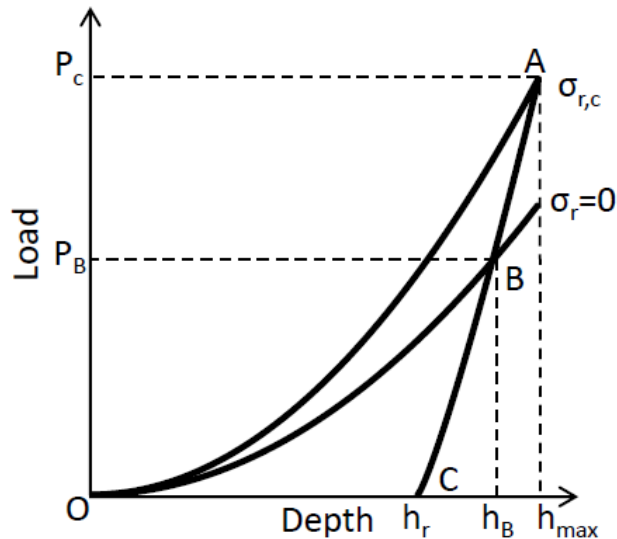
Lee and Kwon *Acta Mater.* **52**, 1555 (2004).

$$\sigma_r = K \frac{\Delta P}{A_{contact}}$$



# Aplicação: Tensões em filmes

- Método dos elementos finitos: Tensões residuais de filmes finos
- Métodos inversos (Cont.)



$$\sigma_r = \frac{\Delta P}{A_{residual}}$$

Wang et al. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* **242**, 2823 (2006)





# Aplicação: Tensões em filmes

- Método dos elementos finitos: Tensões residuais de filmes finos
- Métodos inversos (Cont.)

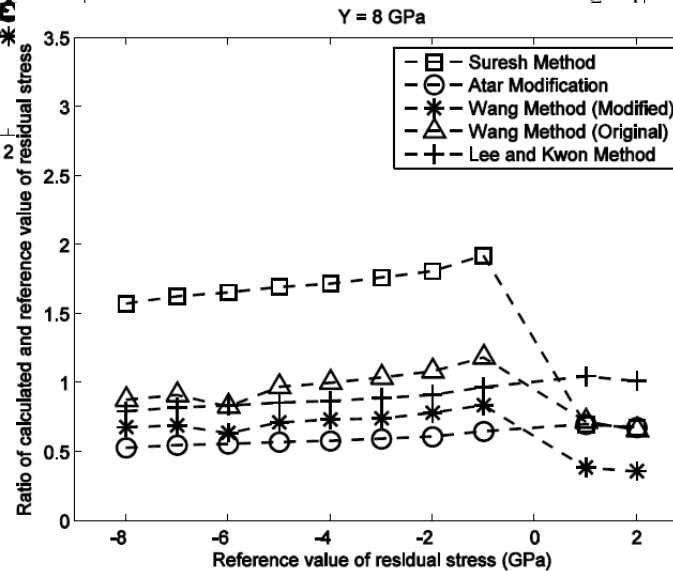
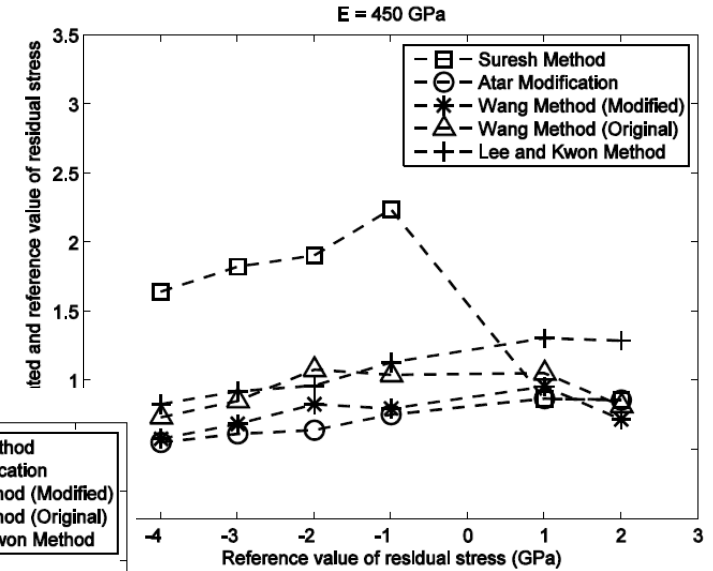
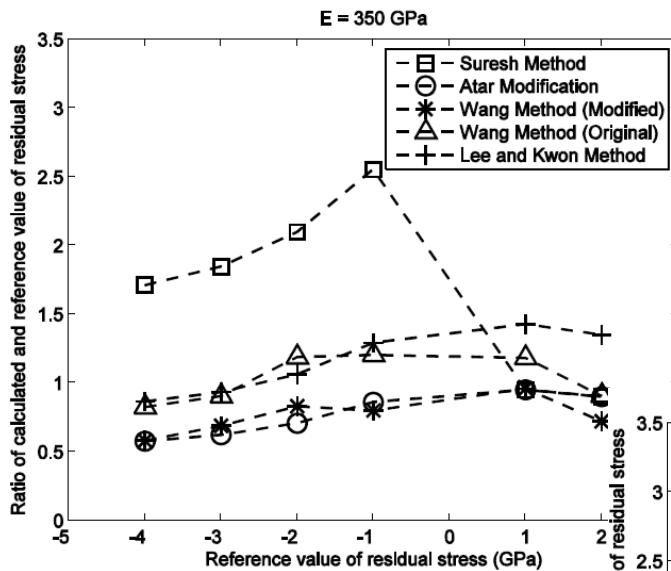
Diferença de dureza:  $\longrightarrow$  
$$\sigma_r = H_0 - H_r = \frac{P_0}{Ac_0} - \frac{P_\sigma}{Ac_\sigma}$$

- Durezas  $H_0$  e  $H_r$  medidas por meio do método de Oliver & Pharr



# Aplicação: Tensões em filmes

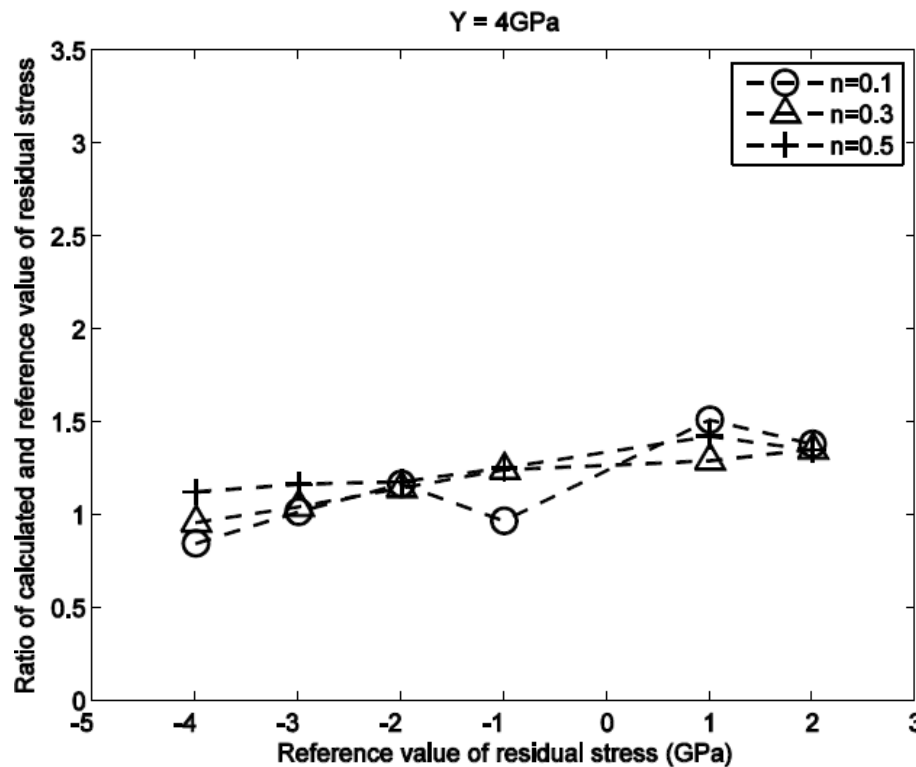
Efeito das  
propriedades  
mecânicas nos  
resultados dos  
métodos



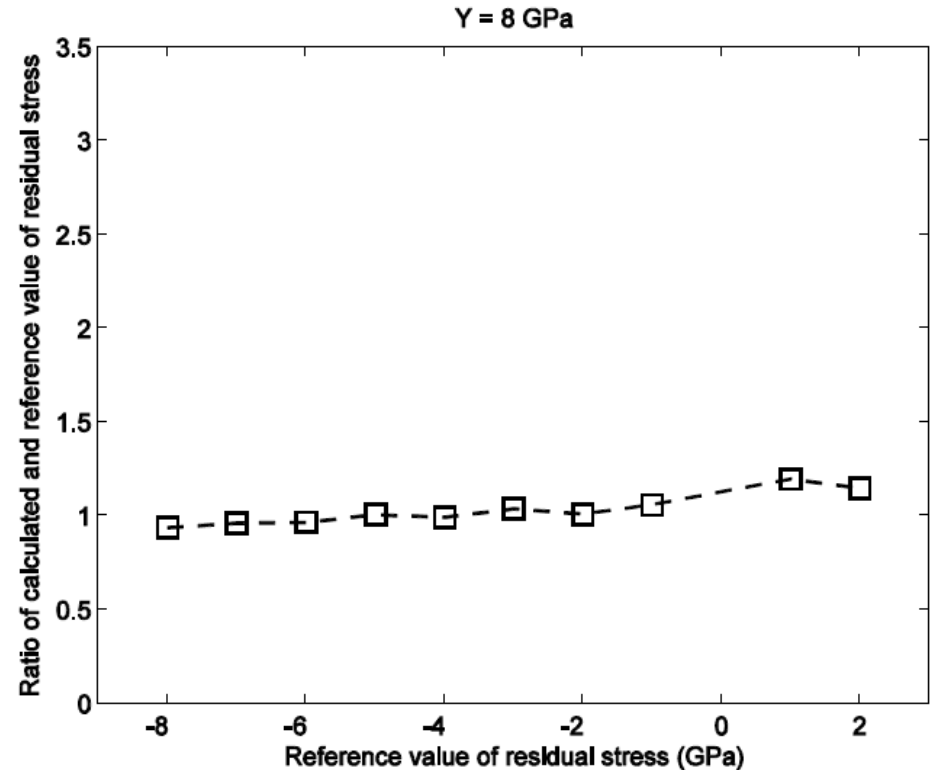


# Aplicação: Tensões em filmes

- Resultados do método proposto:



(a)



(b)



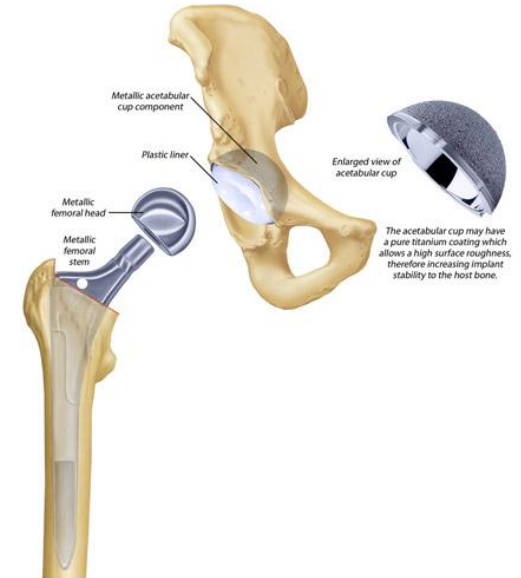
# Sumário

- Mecânica do contato
  - Relevância
  - Complexidade
  - Análise
    - Identificar característica mecânica – precisão da análise
    - Associar problema de contato com a característica mecânica
    - Propor alternativa para melhoria de desempenho
- Exemplos de análise numérica
  - Indentação instrumentada (nanoindentação)
  - Indentação de sistema com filme resistente ao desgaste e substrato dútil
  - Esforços normais e tangenciais
  - Simulações por dinâmica molecular



# Indentação de Substratos “moles”

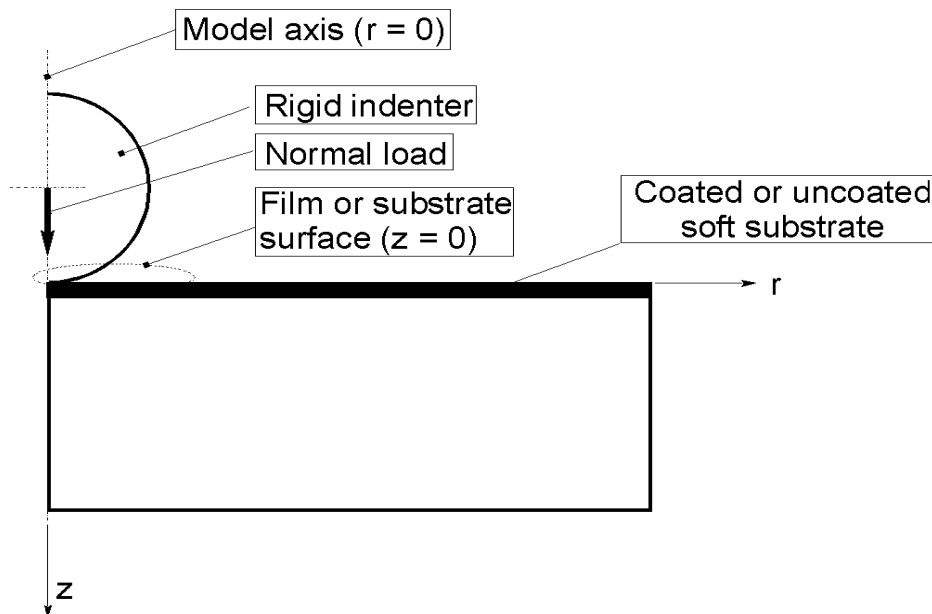
- Substratos “moles”
  - Metálicos
  - Poliméricos





# Indentação de Substratos “moles”

- Substratos “moles” – Comportamento similar – falta de suporte mecânico ao filme
- Análises por elementos finitos: Compreensão inicial  
– Série de análises MEF



## Condições

- $E_{\text{film}} > E_{\text{substrate}}$
- Filme elástico
- Substrato elasto-plástico

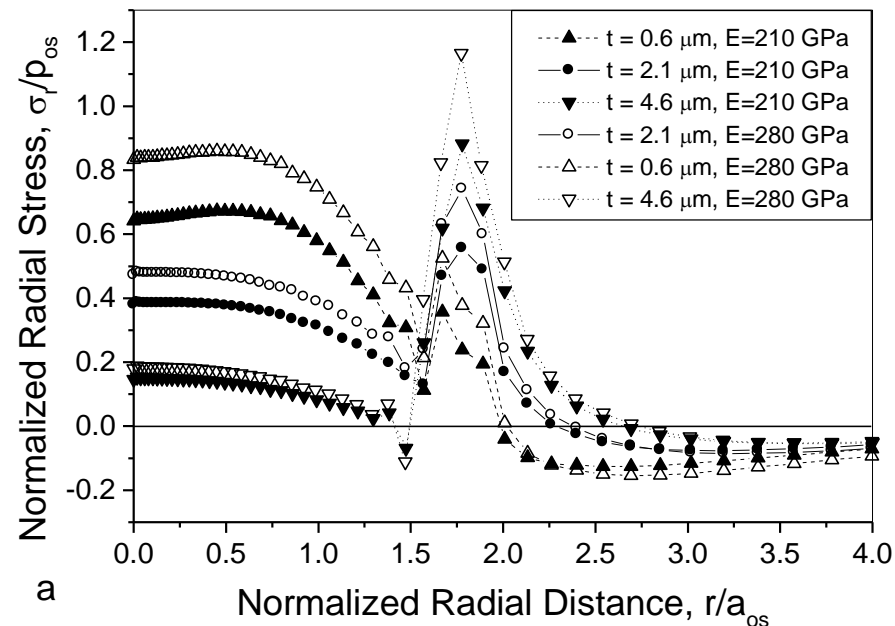
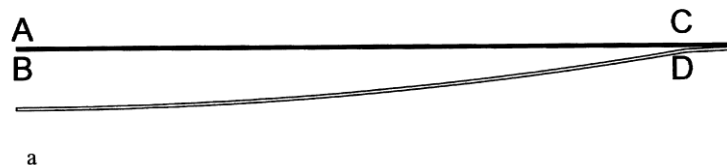
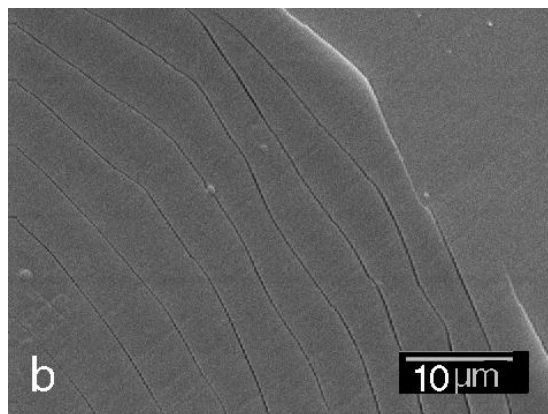
## Análises consideraram

- Tensões residuais nos filmes
- Fratura do filme
- Separação filme/substrato



# Indentação de Substratos “moles”

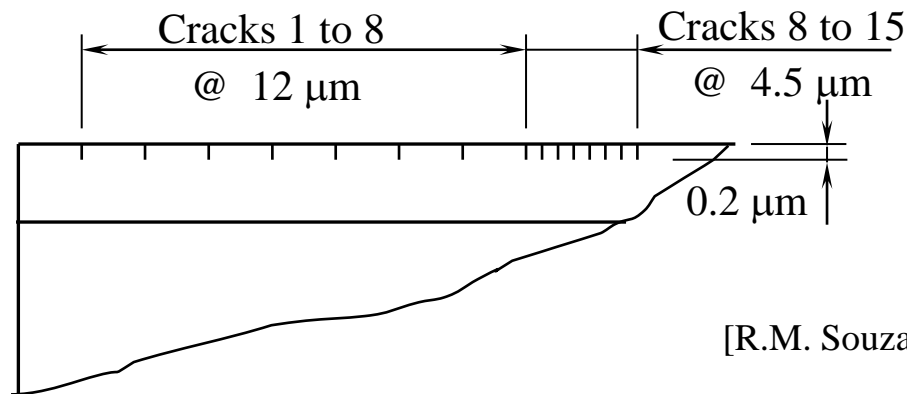
- Análises por elementos finitos: Compreensão inicial
  - Resultados das análises MEF – Flexão do filme





# Indentação de Substratos “moles”

- Análises MEF: Propagação de trincas no filme



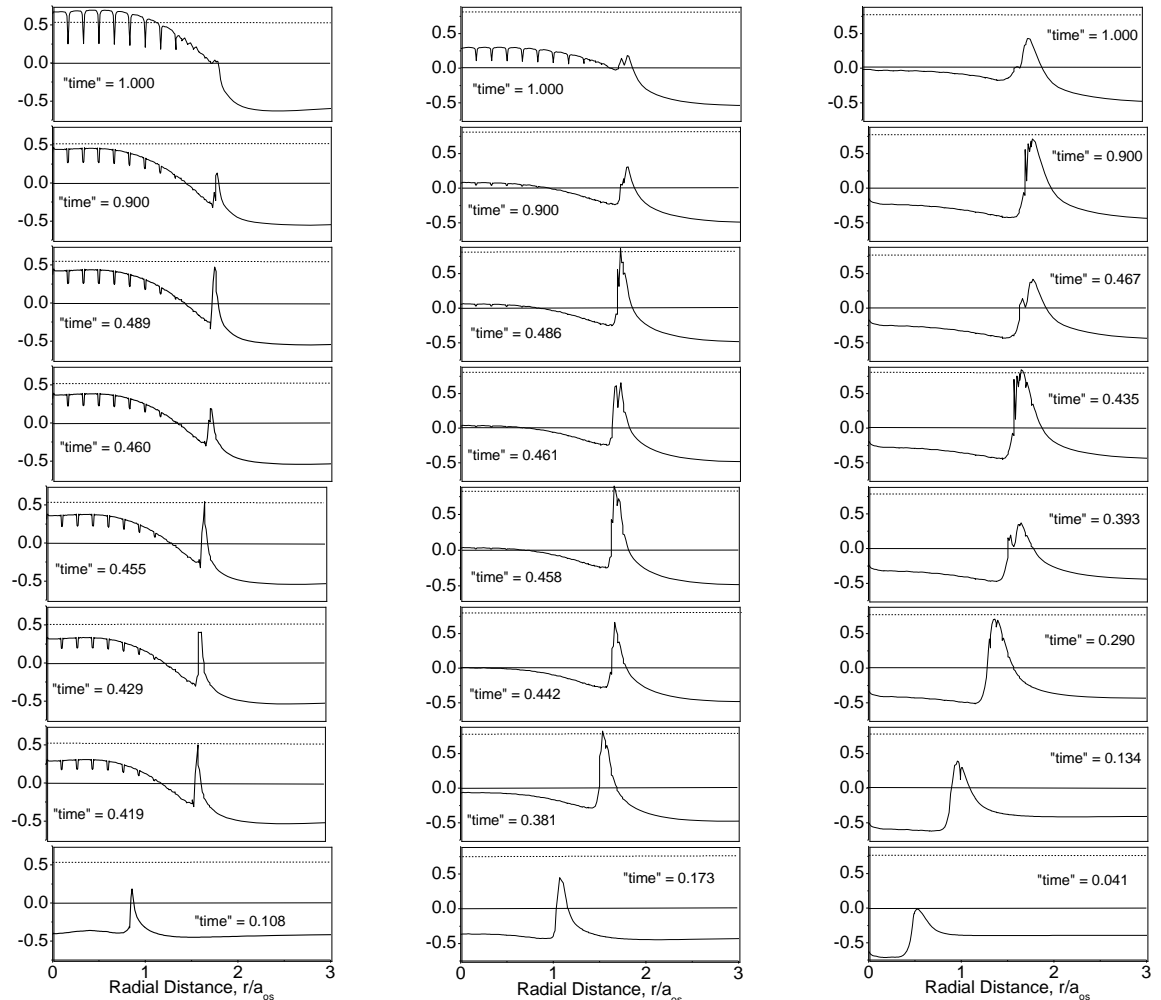
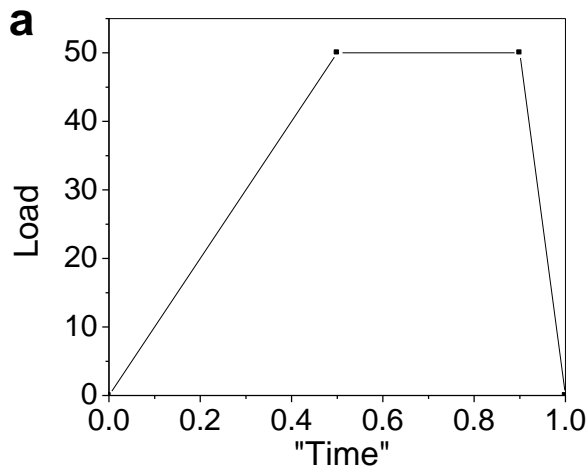
[R.M. Souza et al. Thin Solid Films 1999]





# Indentação de Substratos “moles”

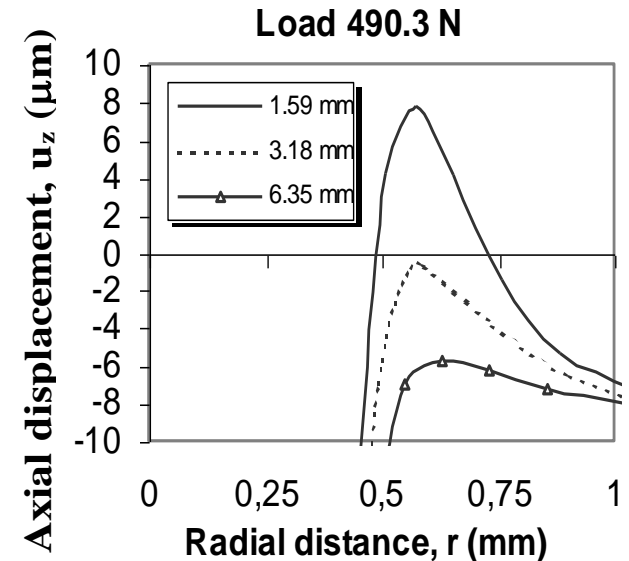
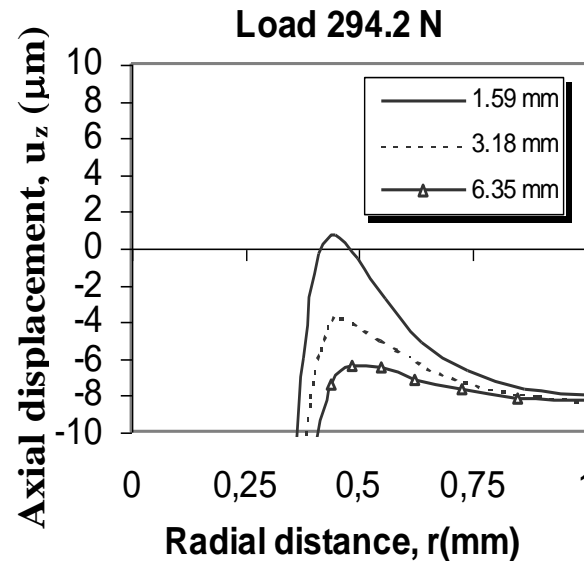
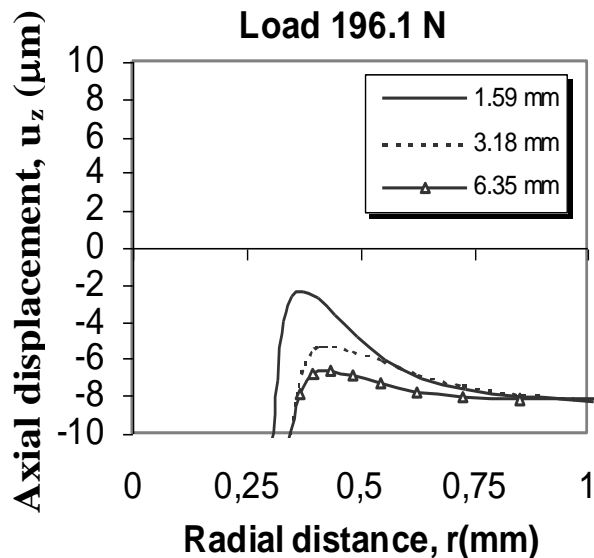
- MEF:
  - Evolução das tensões radiais ao longo da superfície





# Indentação de Substratos “moles”

- O que causa a flexão do filme?
  - Efeito da **carga** e do **diâmetro do penetrador** (esférico)
  - Análise numérica – Altura do *pile-up*



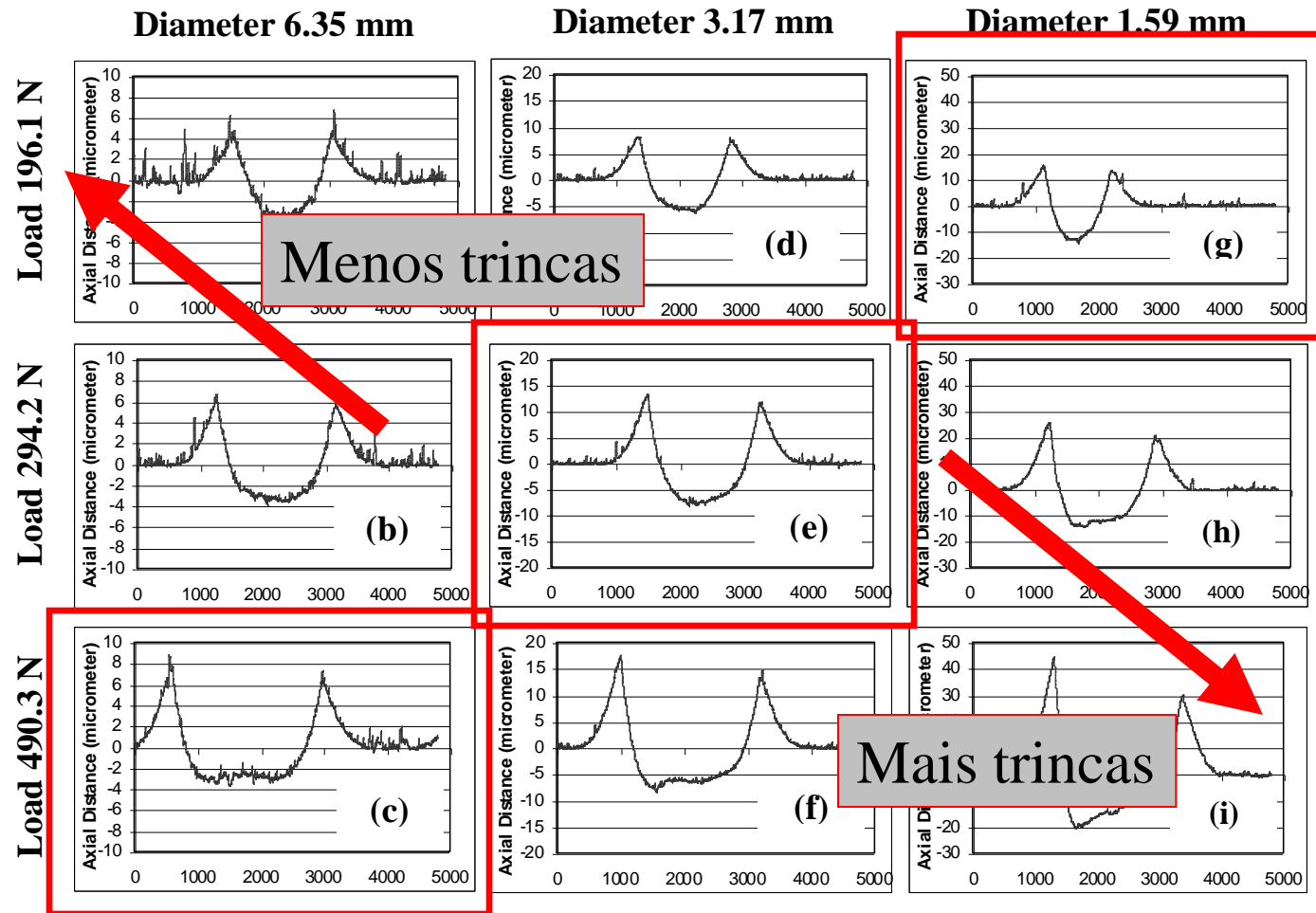


# Indentação de Substratos “moles”

- O que causa a flexão do filme?

## Experimental

- Efeito carga e diâmetro do penetrador (esférico)
- Análise experimental (quantidade de trincas)





# Indentação de Substratos “moles”

Tensões responsáveis  
pela fratura do filme

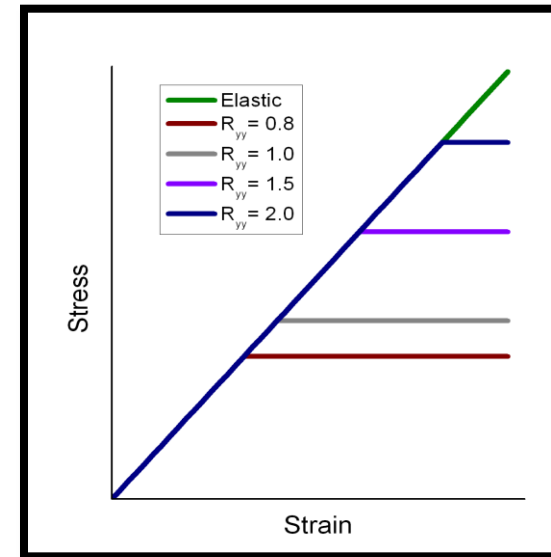


*pile-up* do substrato



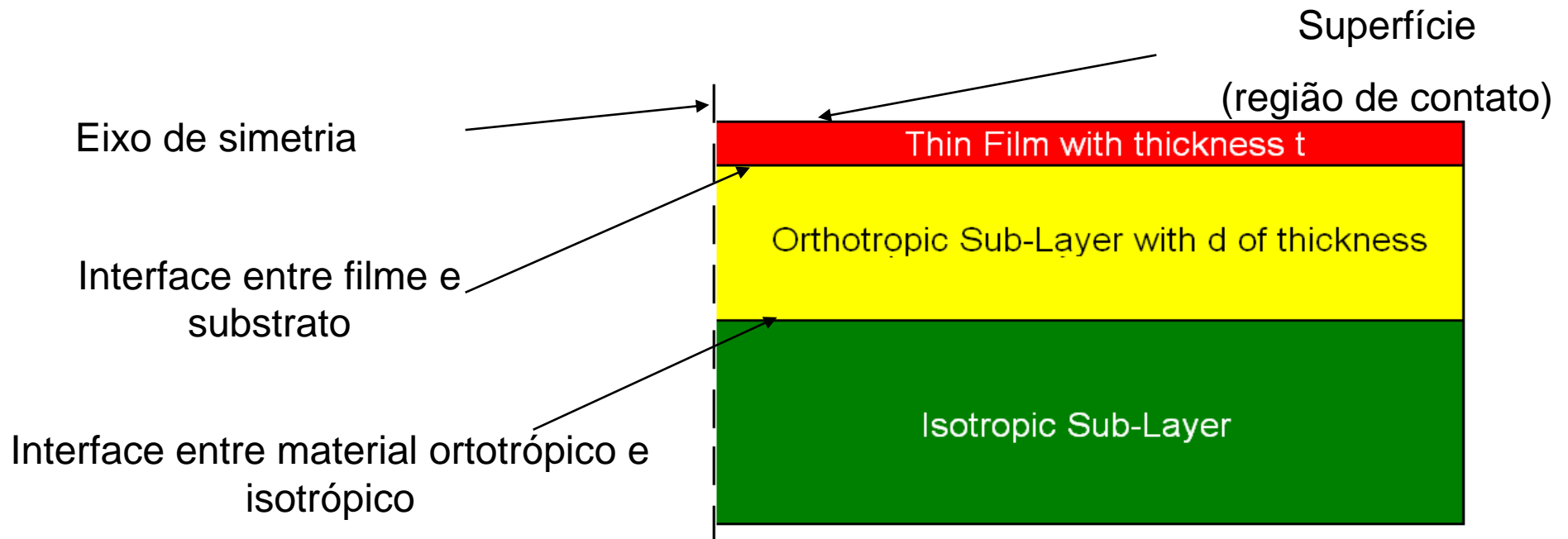
Deformação  
plástica na direção  
da carga

- **ABAQUS**: Material com propriedades plásticas ortotrópicas





# Indentação de Substratos “moles”



- **Resultado:** Diminuição das tensões responsáveis pela fratura



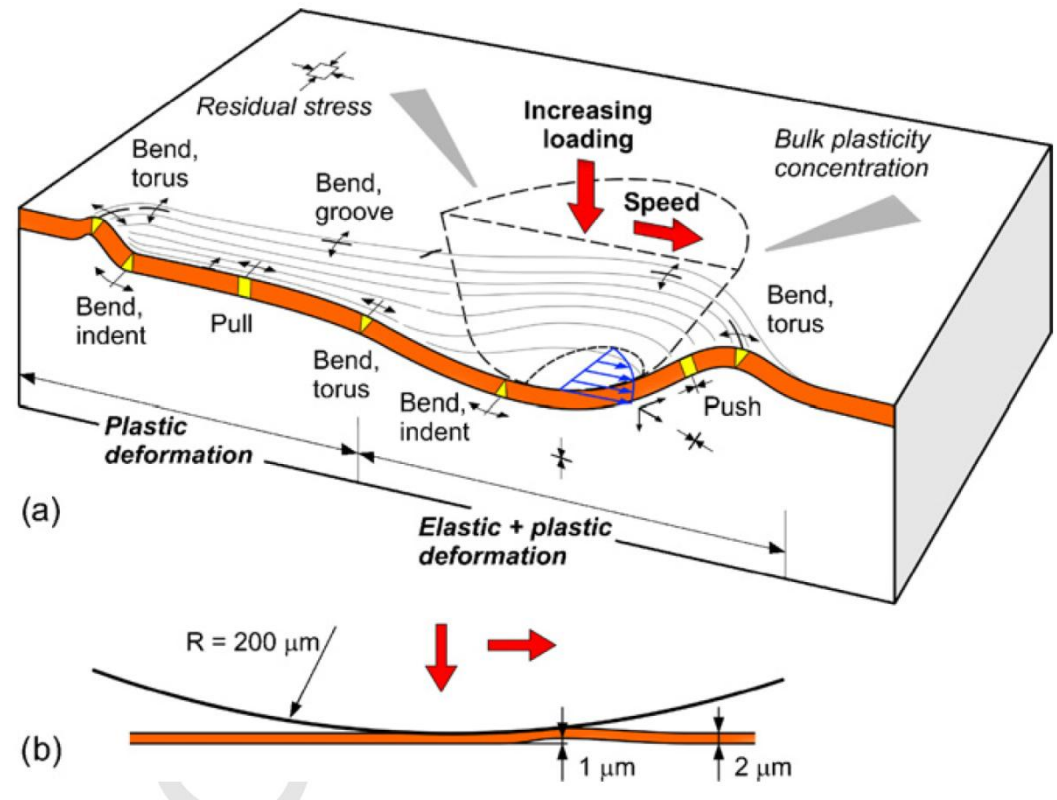
# Sumário

- Mecânica do contato
  - Relevância
  - Complexidade
  - Análise
    - Identificar característica mecânica – precisão da análise
    - Associar problema de contato com a característica mecânica
    - Propor alternativa para melhoria de desempenho
- Exemplos de análise numérica
  - Indentação instrumentada (nanoindentação)
  - Indentação de sistema com filme resistente ao desgaste e substrato dútil
  - Esforços normais e tangenciais
  - Simulações por dinâmica molecular



# Esforços Normais e Tangenciais

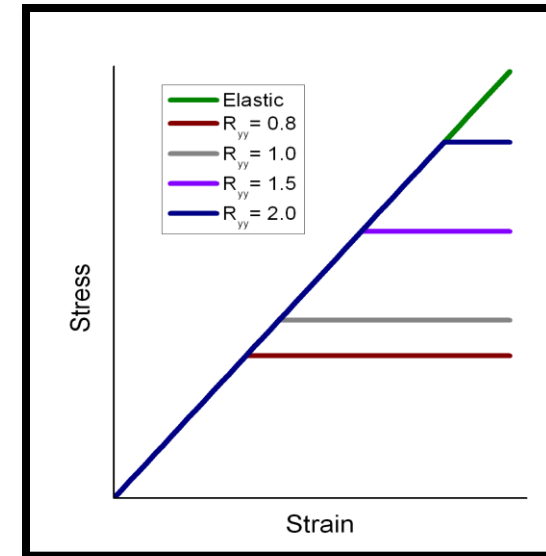
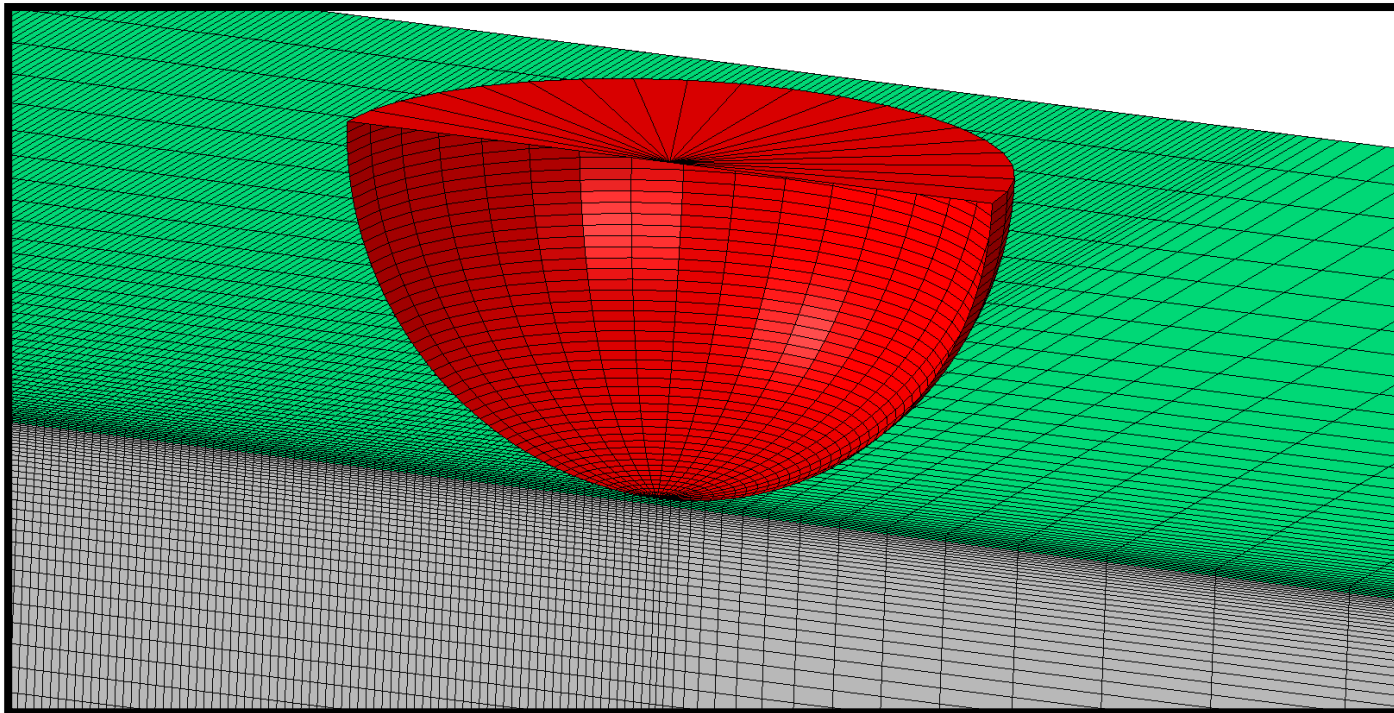
- *Scratch test* em sistemas revestidos – sequência de estados de tensão





# Esforços Normais e Tangenciais

- Análise tridimensional por elementos finitos
  - Filme: isotrópico, elástico ou elasto-plástico
  - Substrato: com propriedades plásticas ortotrópicas





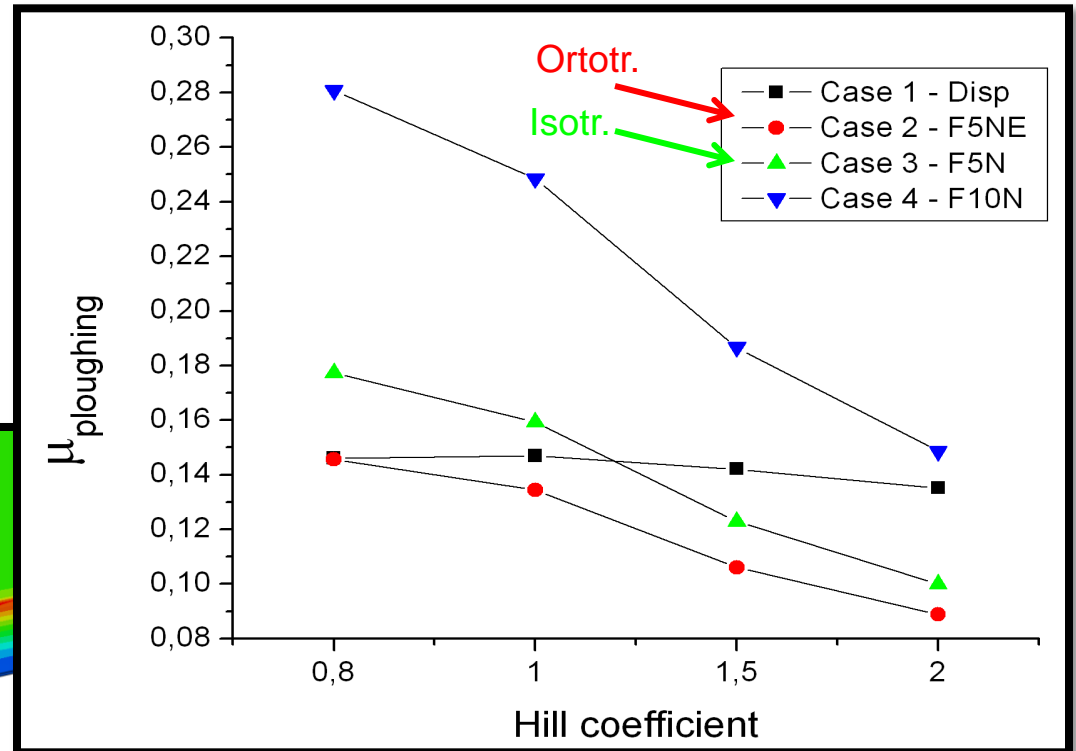
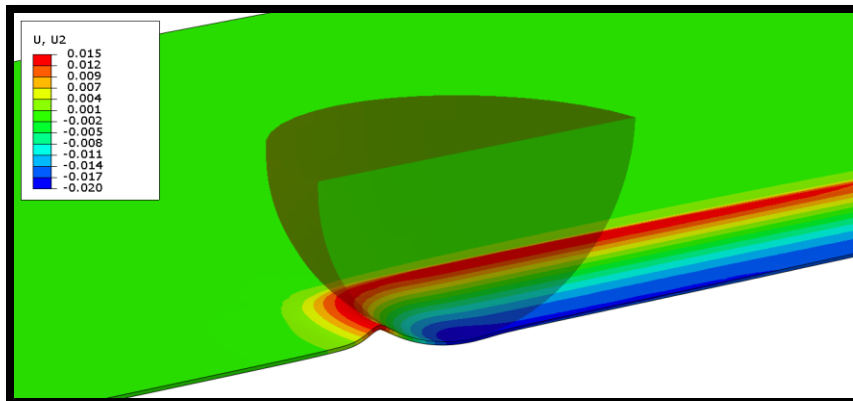


# Esforços Normais e Tangenciais

- Análise tridimensional por elementos finitos
  - Análise das componentes do coeficiente de atrito

$$\mu_{friction} = \mu_{adhesion} + \mu_{ploughing}$$

$$\mu_{ploughing} = \frac{F_{longitudinal}}{F_{normal}}$$

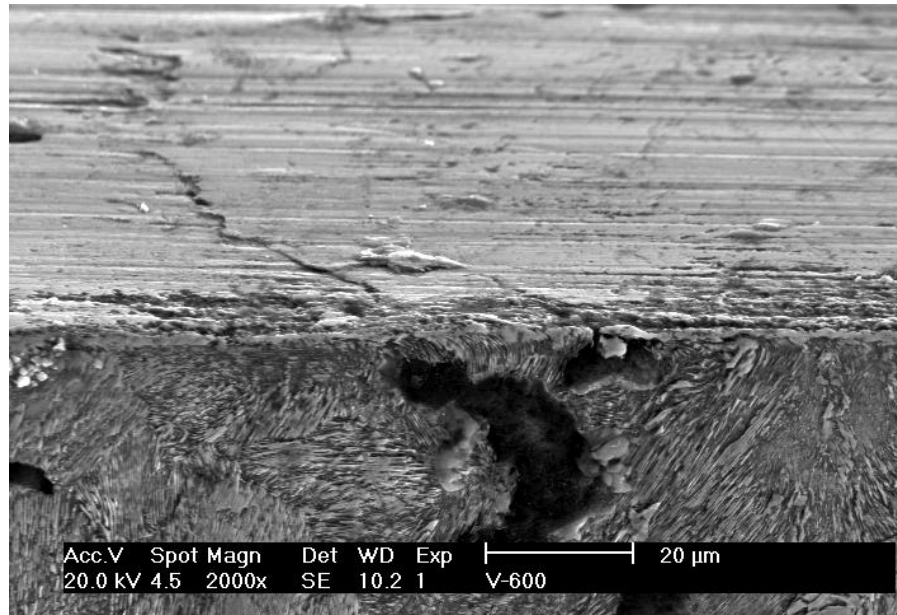




# Esforços Normais e Tangenciais

- Ensaio **pino sobre disco** em materiais bifásicos

**Análise** : Comportamento ao desgaste de discos de freio em ferro fundido vermicular

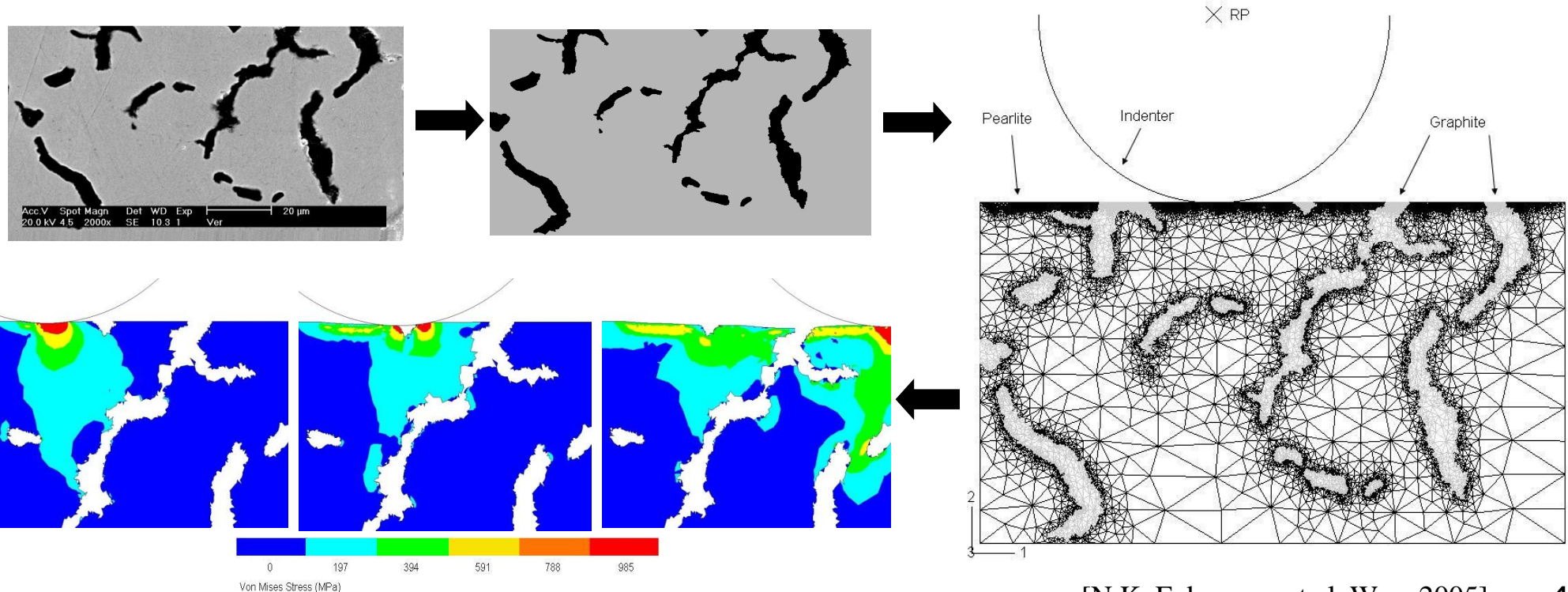


- Durante **os testes tribológicos**: Veios de grafite recobertos



# Esforços Normais e Tangenciais

**Análise:** Tensões em nível microestrutural - ABAQUS + ppm2oof (NIST, USA)





# Esforços Normais e Tangenciais

## Mahle Floating Liner Engine

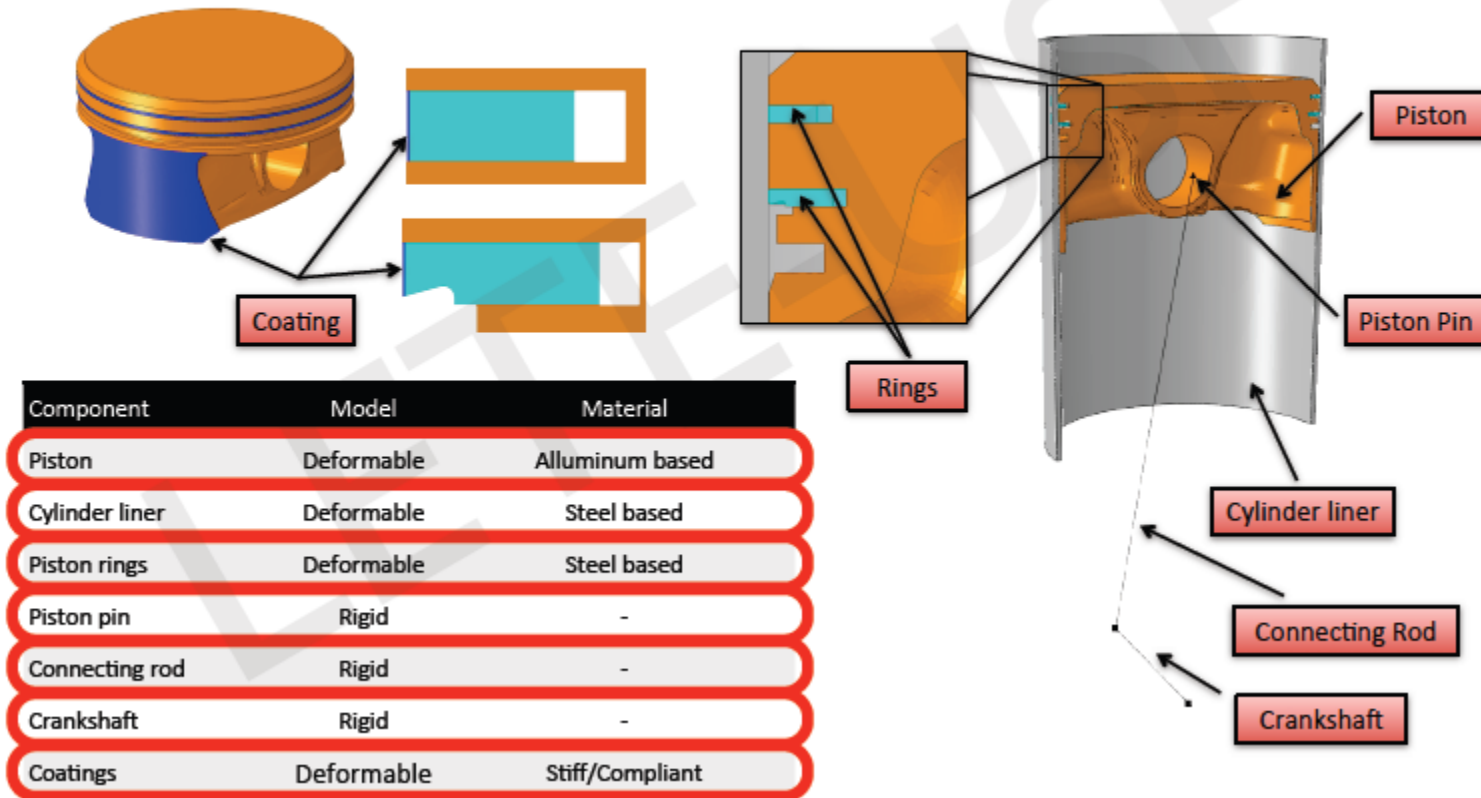
- Measurements of longitudinal forces due to contact between piston, piston rings and cylinder liner
- Mono-cylinder
- Four strokes
- Displacement of 0.646 liter
- Bore of 96mm
- Stroke of 89.2mm





# Esforços Normais e Tangenciais

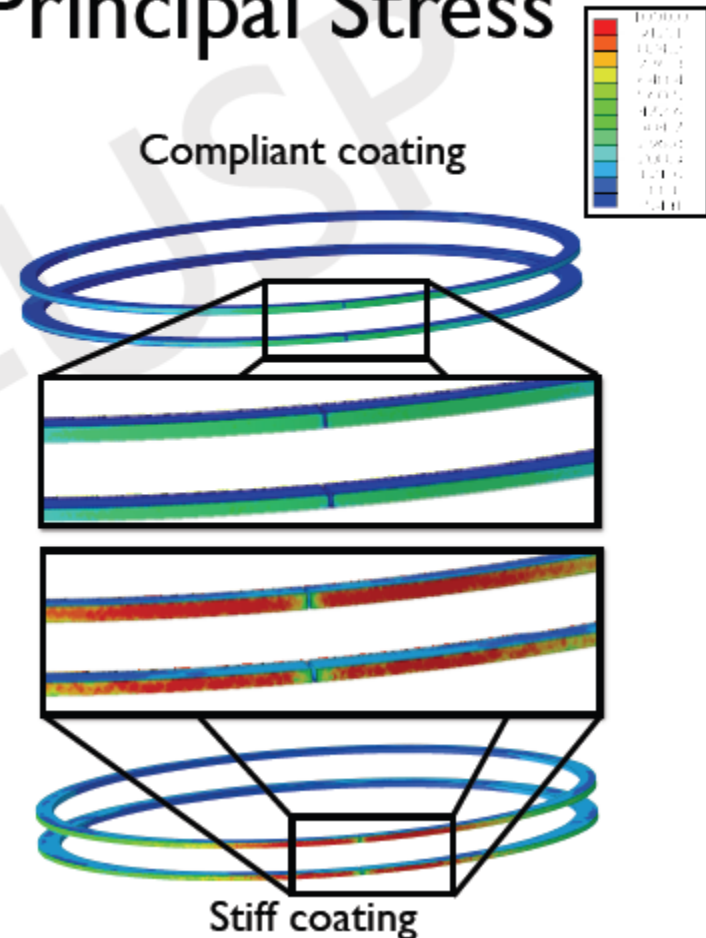
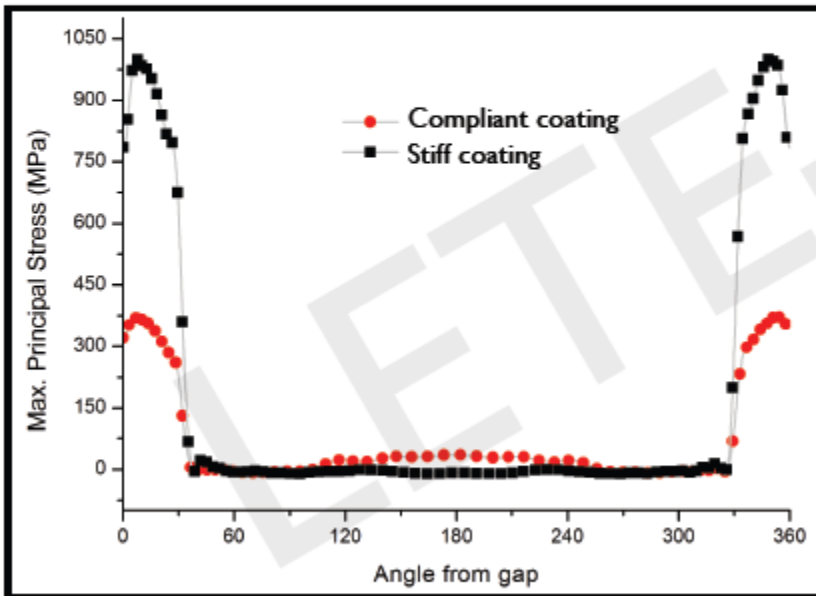
## Numerical model - General parameters





# Esforços Normais e Tangenciais

## Piston rings: Max. Principal Stress





# Sumário

- Mecânica do contato
  - Relevância
  - Complexidade
  - Análise
    - Identificar característica mecânica – precisão da análise
    - Associar problema de contato com a característica mecânica
    - Propor alternativa para melhoria de desempenho
- Exemplos de análise numérica
  - Indentação instrumentada (nanoindentação)
  - Indentação de sistema com filme resistente ao desgaste e substrato dútil
  - Esforços normais e tangenciais
  - Simulações por dinâmica molecular



# Simulações por Dinâmica Molecular

- Objetivo de longo prazo: Entendimento de fenômenos tribológicos no nível atômico
- Etapas iniciais: esforços normais
- Etapas atuais: esforços normais e tangenciais



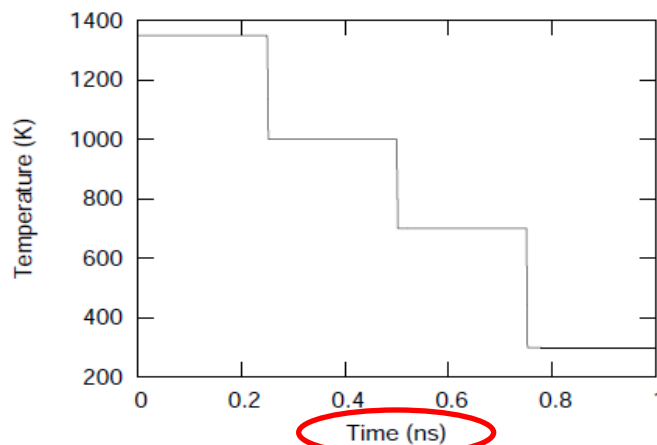
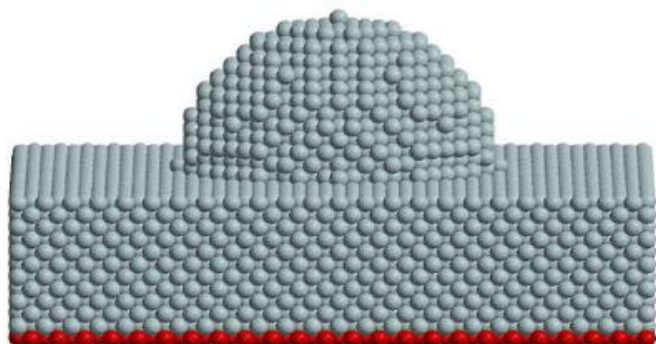


# Simulações por Dinâmica Molecular

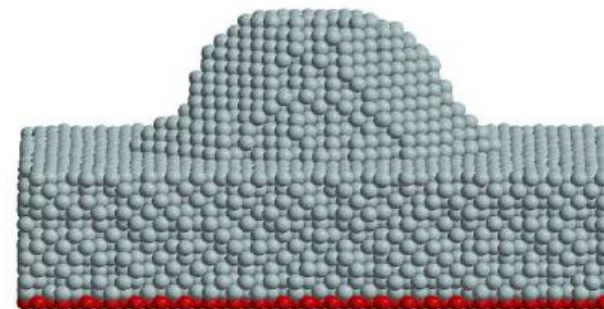
Exemplo: Esfera em contato com plano rígido (asperidade Ni diâmetro aprox. 2 nm)

Tratamento de “recozimento”

Sistema - configuração inicial



Configuração após “recozimento”

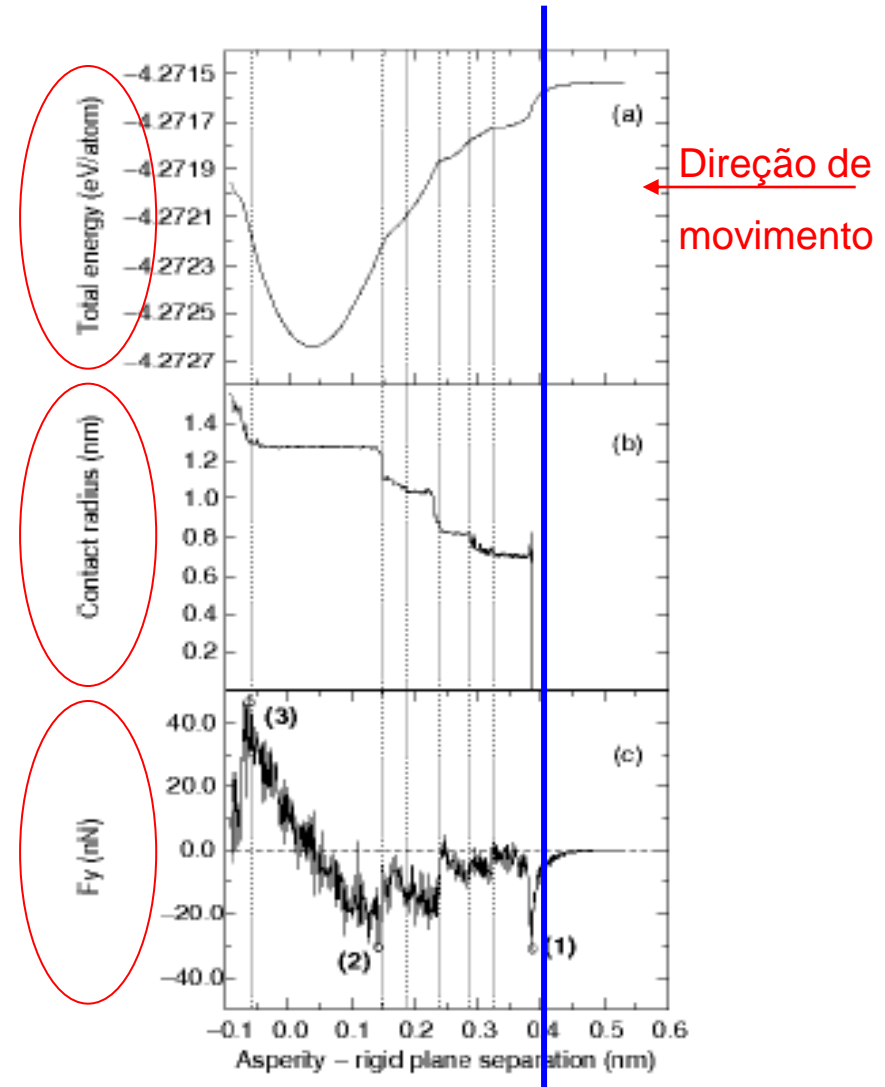




Es  
Univer

# Simulações por Dinâmica Molecular

- Carregamento:
  0. Movimento inicial



$F_y$ , raio de contato e energia por distância



Es  
Univer

# Simulações por Dinâmica Molecular

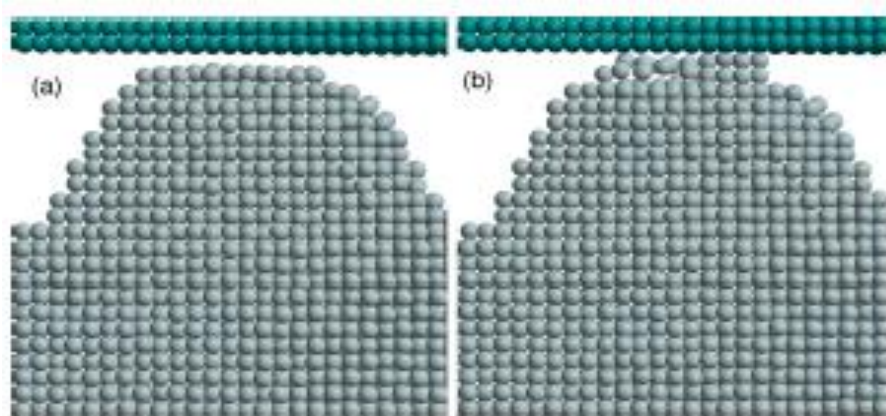
- Carregamento:

0. Movimento inicial

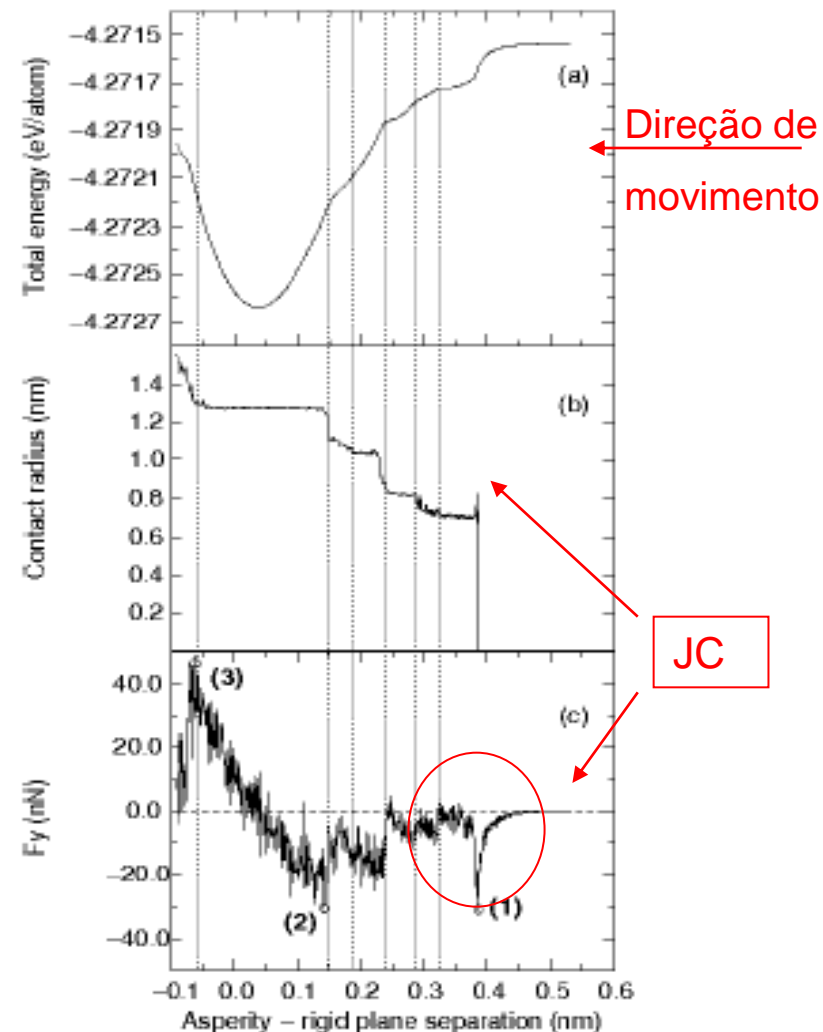
1. *Jump into contact*

– Aumento de área

– Força negativa



Fenômeno de *jump into contact*: (a): imediatamente antes do ponto crítico (b): Depois do *Jump into contact*



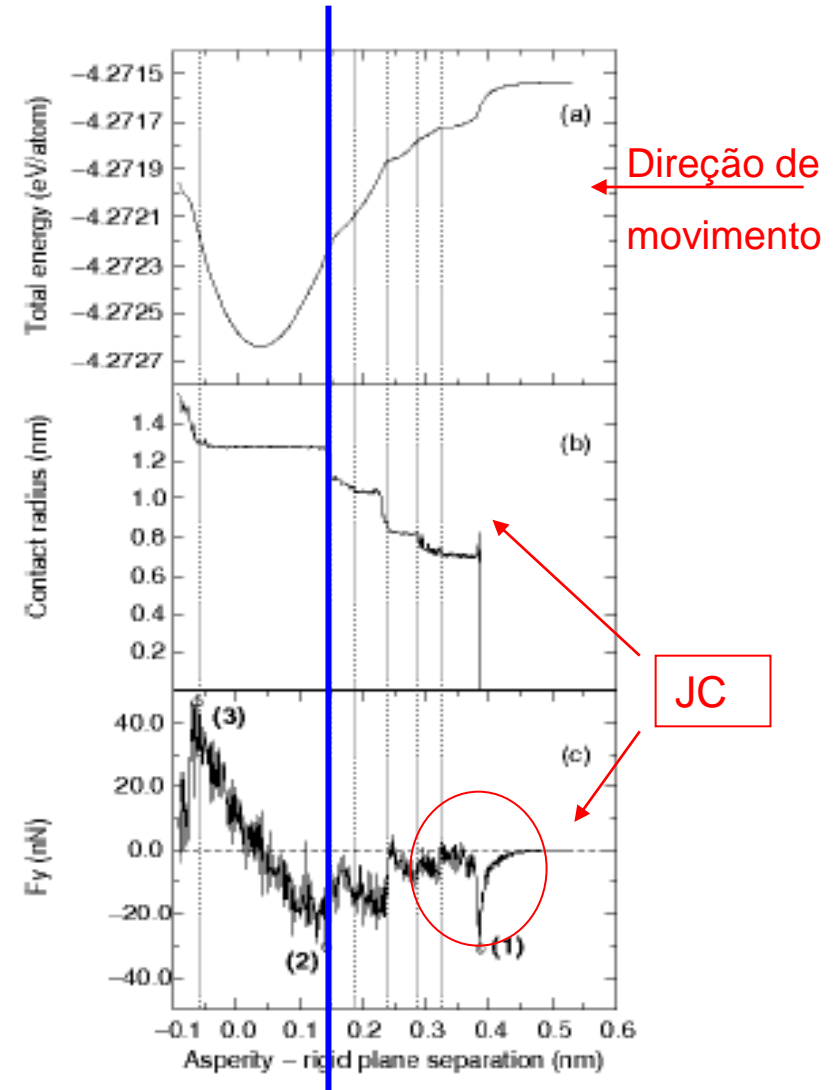
Fy, raio de contato e energia por distância



Es  
Univer

# Simulações por Dinâmica Molecular

- Carregamento:
  0. Movimento inicial
  1. *Jump into contact*
    - Parâmetro de rede Ni 0,352nm
    - *Jump into contact* (JC) ocorre em 0,4 nm
    - Decréscimo de energia
    - Aumento da área em degraus



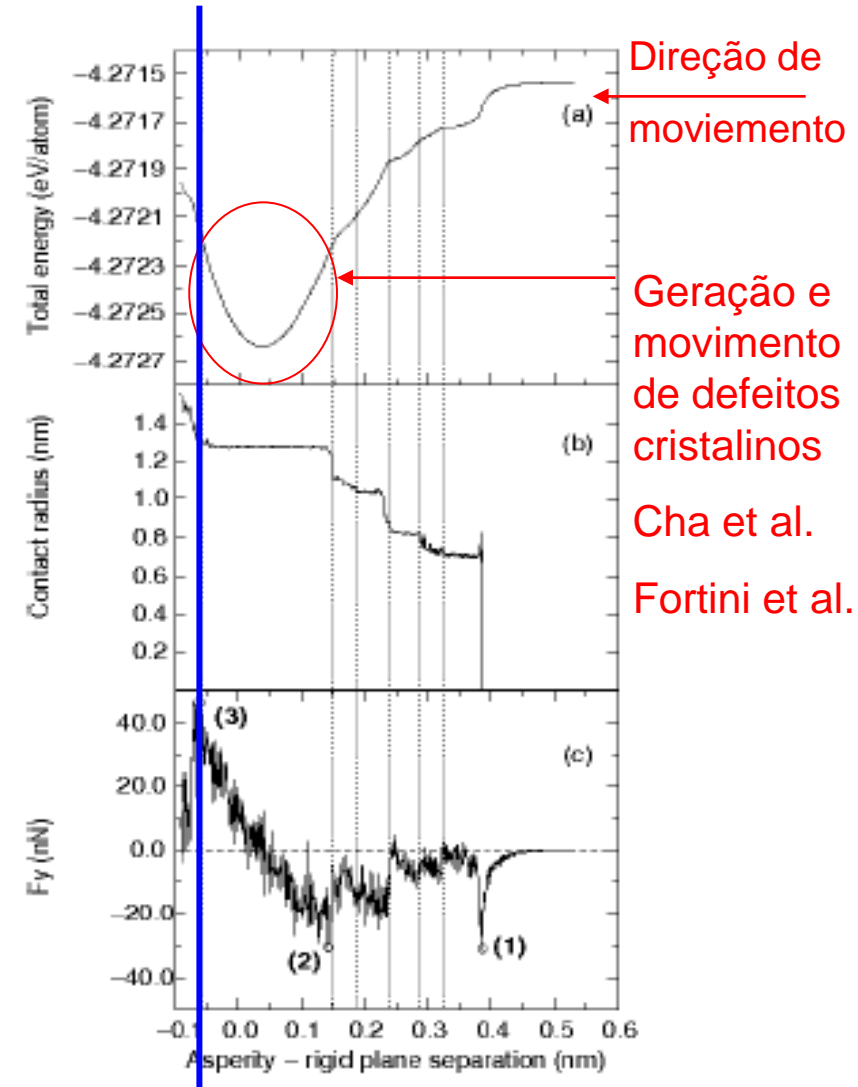
$F_y$ , raio de contato e energia por distância



Es  
Univer

# Simulações por Dinâmica Molecular

- Carregamento:
  0. Movimento inicial
  1. *Jump into contact*
  2. “Compressão”
    - Átomos em distâncias maiores que a de equilíbrio
    - Energia atinge mínimo
    - Átomos mais próximos que no equilíbrio
    - Área de contato permanece constante



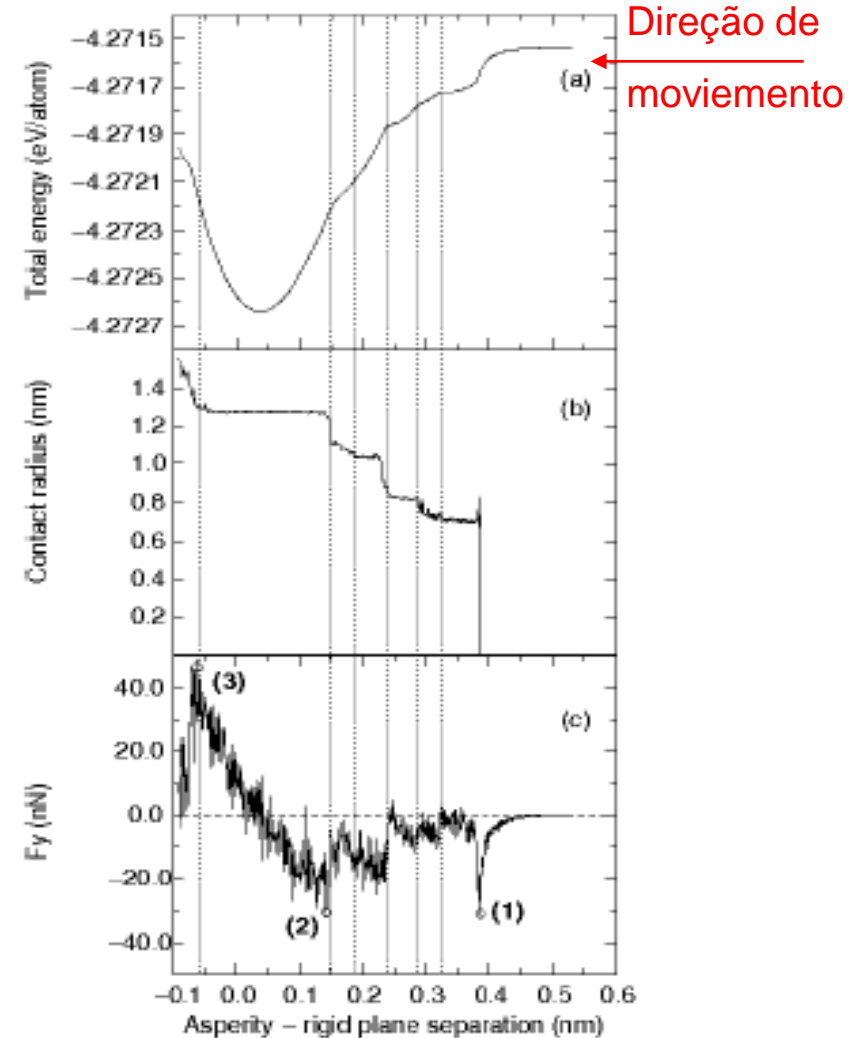
Fy, raio de contato e energia por distância



Es  
Univer

# Simulações por Dinâmica Molecular

- Carregamento:
  0. Movimento inicial
  1. *Jump into contact*
  2. “Compressão”
  3. Deformação plástica
    - Aumento da área de contato
    - Atinge-se o deslocamento máximo





Es  
Univer

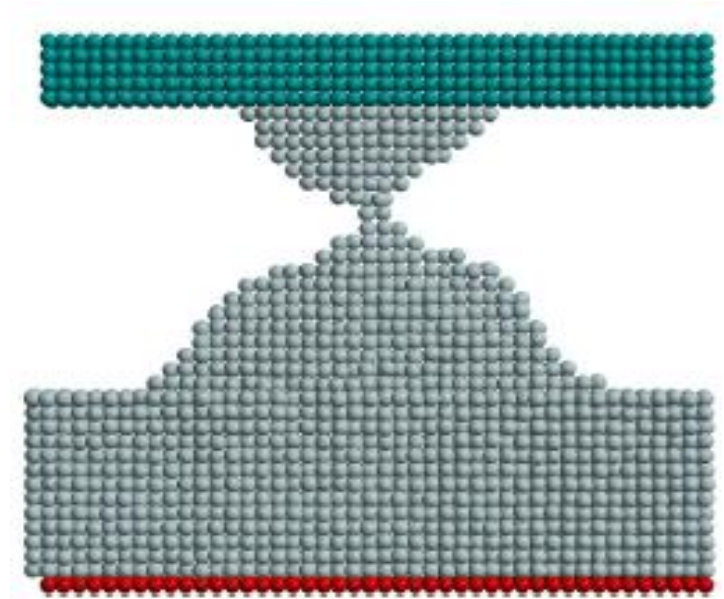
**LFS** Laboratório de  
Fenômenos de  
Superfície  
Interação meio-superfície  
Interação superfície-superfície  
CORROSÃO-DESQUASTE-ATRIÇÃO

**LFS** Laboratório de  
Fenômenos de  
Superfície  
Interação meio-superfície  
Interação superfície-superfície  
CORROSÃO-DESQUASTE-ATRIÇÃO

# Simulações por Dinâmica Molecular

- Descarregamento

- Fratura não ocorre na interface
- Adesão: transferência de material  
Material da aspereza e do plano  
é o mesmo



Momento imediatamente anterior ao descolamento



# Considerações Finais

- Tentativa de mostrar que as análises numéricas são ferramentas úteis. Por exemplo, para:
  - Entendimento de fenômenos (contato, tribológicos)
  - Identificação do efeito de uma dada característica mecânica (propriedade mecânica, estado de tensões,...)
  - Propor alternativas de melhoria de uma dada aplicação, reduzindo o número de experimentos necessários





# Agradecimentos

- Órgãos governamentais: CAPES, CNPq e FAPESP
- Colaboração com pesquisadores de ou atualmente na:
  - Universidade de São Paulo, Brasil
  - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Brasil
  - Universidade Federal do ABC, Brasil
  - Universidade Federal de Brasília, Brasil
  - Mahle, Brasil
  - Universidad del Valle, Colômbia
  - Universidad de Ibagué, Colômbia
  - Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colômbia
  - Colorado School of Mines, E.U.A.
  - Universitat Politècnica de Catalunya, Espanha