



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA DUREZA DE RECUBRIMIENTO DE COBRE
PRODUCIDO POR COLD SPRAY

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERA CIVIL MECÁNICA

DANIELA ROCÍO ORELLANA SOTO

PROFESOR GUÍA:
RUBÉN FERNÁNDEZ URRUTIA

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
AQUILES SEPÚLVEDA OSSES
ALI AKBARI-FAKHRABADI

SANTIAGO DE CHILE

2020

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR
AL TÍTULO DE INGENIERA CIVIL MECÁNICA
POR: DANIELA ROCÍO ORELLANA SOTO
FECHA: 2020
PROF. GUÍA: RUBÉN FERNÁNDEZ URRUTIA

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA DUREZA DE RECUBRIMIENTO DE COBRE PRODUCIDO POR COLD SPRAY

Cold Spray es una técnica de deposición de material cuyo fin es obtener un recubrimiento. Para ello se utilizan micropartículas que son aceleradas por un gas supersónico comprimido. Cuando las partículas impactan sobre el sustrato sufren deformación plástica y se adhieren a la superficie. Cabe señalar que una de las ventajas del *Cold Spray* es el bajo contenido de óxido en el recubrimiento final, esto debido a que las partículas, ni el sustrato no se ven expuestas a altas temperaturas.

Por otra parte, los fenómenos que ocurren durante este procedimiento son difíciles de evidenciar experimentalmente, debido al corto lapso de tiempo en el que se desarrollan, ocurriendo estos en la escala nano temporal. Por esta razón, poder predecir las propiedades mecánicas del material sometido a *Cold Spray* es una herramienta útil, lo que dio origen al objetivo general de este trabajo de título que es ‘Evaluar la capacidad de una simulación computacional para obtener valores de dureza de un recubrimiento de cobre’. A su vez los objetivos específicos se centraron en analizar el efecto de la deformación sobre la dureza del recubrimiento y comparar resultados numéricos con experimentales.

La metodología computacional se basó en realizar una simulación numérica (mediante el software ABAQUS) del impacto de partículas de cobre, de 11 μm de diámetro, sobre un sustrato de cobre. Para esto, se inició con una validación de un modelo de similares características; luego se determinaron variables del proceso, para después programar el código. Esta simulación entregó resultados de las deformaciones plástica que sufren las partículas. A partir del modelo de plasticidad de Johnson-Cook se calculó el esfuerzo de fluencia del material y finalmente, mediante relaciones empíricas se calculó la dureza del recubrimiento.

Al comparar los resultados de dureza numéricos con los experimentales, se obtuvieron diferencias del orden 2.5% y 7.5%. Entre las principales conclusiones se tuvo, que a mayor deformación plástica de las partículas, aumenta el esfuerzo de fluencia del recubrimiento, y por lo tanto, presenta mayor dureza, y las simulaciones numéricas entregan aproximaciones cercanas a las propiedades reales de los recubrimientos obtenidos mediante *Cold Spray*.

Para mamá y Mili

Agradecimientos

A la primera persona a quien debo agradecer es a mi mamá. Gracias por acompañarme en este camino, y en todos, por apoyarme incondicionalmente, por siempre incitarme a seguir mis sueños. Siempre creíste en mí y que lograría llegar a este momento. Gracias por siempre darme las palabras acertadas cuando más lo necesité, por siempre darme todo lo que necesité para llegar al día de hoy. Sin ti no habría podido lograr esto.

A quien me apoyó, crió y quiso desde pequeña. Gracias por inculcarme siempre lo mejor, gracias a usted aprendí lo valiosa que es la educación y también gracias a usted logré llegar a donde me encuentro. Gracias por querernos siempre.

Quiero agradecer a mi familia; papás, tíos, hermano, primos. A mis tatas, que hubiese querido disfrutarlos por más años, gracias por cuidarme y por su cariño infinito que hasta el día de hoy siento, sé que me acompañaron en esta etapa y siempre lo harán. A mi tía Ceci, por recibirme en su hogar durante estos 6 años, dándome un lugar donde sentirme en familia a pesar de estar lejos de casa, por apoyarme durante todos estos años.

A mi profesor guía Rubén, gracias por siempre estar disponible para responder cualquier inquietud y por su buena voluntad, por ser tan preocupado por sus memoristas y de que todo saliera bien. Gracias a mis profesores co-guía e integrante, Aquiles y Ali, que no sólo compartí con ellos en esta memoria, sino que durante sus cursos, gracias por confiar en mi al darme la oportunidad de ser su ayudante.

Agradezco todas las amistades que hice durante estos 6 años, partiendo por mis *cabros* de Plan Común: Seba, Santiago, Álvaro, José, Pancho, Enrique, Sami. Sin ustedes probablemente aún estaría pegada en Plan Común, gracias por esas tardes y noches de 'estudio', por siempre tener la voluntad de ayudarme. A mis *cabros* de mecánica, que me acogieron en un momento complicado: Mati, Maxi, Alfredo, Seba, gracias ser mis primeros amigos de mecánica. Gracias a mi amiguito Jadue, por soportarme, darme consejos, los memes y todas nuestras conversaciones. A mis niños del cuarto: Tiare, Kati, Landa, Marco, José, Coni, Felipe(s), Nico, Mauri, Eduardo, gracias por esas oncesitas, las palabras de aliento para terminar la memoria, por todos esos momentos de distensión, las risas, los juegos, por todo. Gracias a mi Vale, que hizo de mi última práctica, la mejor, me llevo nuestra amistad en el corazón. Gracias a todos quienes formaron parte de mi paso por la FCFM.

A mi chiquitita Mili, gracias por las alegrías, regalones y el infinito amor siempre.

Tabla de Contenido

1. Introducción	1
1.1. Objetivos	2
1.1.1. Objetivos general	2
1.1.2. Objetivos específicos	2
1.2. Alcances	3
2. Antecedentes	4
2.1. Proyección térmica	4
2.2. <i>Cold Spray</i>	6
2.2.1. Velocidad de partículas	8
2.2.2. Eficiencia de adherencia (DE)	9
2.2.3. Mecanismo de adherencia	12
2.2.3.1. Unión por enlace metálico	12
2.2.3.2. Unión mecánica	12
2.2.4. Inestabilidad de corte adiabática (<i>Adiabatic shear instability, ASI</i>) . .	13
2.3. Modelo de plasticidad: Johnson – Cook	14
2.4. Modelo de elasticidad: Mie–Grüneisen	15
2.5. Dureza Vickers	16
2.6. Relación de dureza y esfuerzo de fluencia	17
2.6.1. Ecuación general	17
2.6.2. Ecuaciones para el cobre	17
3. Revisión bibliográfica	20
3.1. Simulación de impactos de partículas	20
4. Metodología	23
4.1. Metodología computacional	23
4.1.1. Validación numérica	24
4.1.2. Parámetros del material	24
4.1.3. Tamaño de partículas	25

4.1.4.	Parámetros experimentales	26
4.1.5.	Temperatura de partículas	27
4.1.6.	Temperatura del sustrato	29
4.1.7.	Resumen parámetros de simulación	30
4.1.8.	Determinación del número de partículas	30
4.1.9.	Sensibilidad de malla	33
4.1.10.	Simulación en ABAQUS	33
4.2.	Análisis de datos: Cálculo de dureza	40
5.	Validación numérica	42
5.1.	Geometría	42
5.2.	Material	43
5.3.	Interacciones	44
5.4.	Condiciones de borde	44
5.5.	Mallado	44
5.6.	Condiciones iniciales	45
5.7.	Resultados y análisis	45
6.	Resultados, Análisis y Discusiones	49
6.1.	Número de partículas	49
6.2.	Resultados de análisis sensibilidad de malla	51
6.3.	Resultado de simulaciones	53
6.3.1.	Primera capa de partículas	53
6.3.2.	Segunda capa de partículas	55
6.3.3.	Tercera capa de partículas	56
6.3.4.	Cuarta capa de partículas	58
6.3.5.	Quinta capa de partículas	59
6.3.6.	Sexta capa de partículas	61
6.3.7.	Séptima capa de partículas	62
6.3.8.	Resumen de resultados de simulaciones	65
6.4.	Resultado de cálculo de dureza	67
6.4.1.	Esfuerzo de fluencia	67
6.4.2.	Dureza	68
7.	Conclusiones	71
	Bibliografía	73
	Anexo A. Análisis de sensibilidad de malla	76

Índice de Tablas

4.1.	Propiedades del cobre	25
4.2.	Datos experimentales	27
4.3.	Parámetros de impacto	30
4.4.	Resumen propiedades de interacción	35
4.5.	Condiciones iniciales	36
4.6.	Tamaño de mallado y medidas del sustrato	37
5.1.	Propiedades del aluminio	43
6.1.	Análisis de sensibilidad de malla	51
6.2.	Promedio deformación plástica capa 1	53
6.3.	Promedio deformación plástica capa 2	55
6.4.	Promedio deformación plástica capa 3	56
6.5.	Promedio deformación plástica capa 4	58
6.6.	Promedio deformación plástica capa 5	59
6.7.	Promedio deformación plástica capa 6	61
6.8.	Promedio deformación plástica capa 7	62
6.9.	Resumen de promedios de PEEQ por capa de partículas	66
6.10.	Esfuerzo de fluencia calculado del recubrimiento	68
6.11.	Dureza Vickers calculada por capa	68
6.12.	Dureza Vickers calculada del recubrimiento	69

Índice de Ilustraciones

2.1.	Esquema de las familias de proyección térmica	5
2.2.	Esquema del proceso de <i>Thermal Spray</i>	5
2.3.	Esquema del proceso de <i>Cold Spray</i>	7
2.4.	Comparación de velocidad de partículas, temperatura de gas y temperatura del sustrato entre procesos de proyección térmica	8
2.5.	Ventana de adherencia. Relación entre eficiencia, velocidad y temperatura de partículas	10
2.6.	Relación entre la velocidad de partículas y la eficiencia de adherencia, para una temperatura de impacto constante	11
2.7.	Entrelazamiento mecánico	13
2.8.	Curva típica de esfuerzo de fluencia (<i>stress</i>) – deformación plástica (<i>strain</i>)	14
2.9.	Esquema de indentación	16
2.10.	Relaciones esfuerzo de fluencia y dureza para distintas aleaciones de Cu	19
3.1.	Perfiles de simulación utilizando un arreglo FCC	21
3.2.	Morfología obtenida por la deformación por impacto de 3 partículas de cobre	22
3.3.	Deformación plástica equivalente del impacto de 100 partículas	22
4.1.	Diagrama resumen de la metodología computacional	24
4.2.	Microscopía (SEM) de las partículas de cobre Cu-159	26
4.3.	Distribución de tamaños de partícula	26
4.4.	Temperatura de impacto de partículas en función de la presión y temperatura del gas	28
4.5.	Gráfico de temperatura del sustrato en función de la temperatura del gas	29
4.6.	Curva de esfuerzo-deformación para un recubrimiento de cobre	31
4.7.	Esquema del radio de deformación	32
4.8.	Dimensiones partícula deformada	32
4.9.	Esquema con medidas del sustrato	34
4.10.	Esquematación de las condiciones de bordes aplicadas	35
4.11.	Zonas de mallado del sustrato	37
4.12.	Primera capa de partículas	38

4.13.	Mapa conceptual modelo por capas	38
4.14.	Configuración inicial para el modelo de cada capa simulada. Elaboración propia.	39
5.1.	Esquema de la geometría del modelo axisimétrico 2D	43
5.2.	Esquema de las condiciones de borde del modelo axisimétrico 2D	44
5.3.	Detalles del mallado del modelo axisimétrico 2D.	45
5.4.	Esfuerzos de Von Mises	46
5.5.	Esfuerzos de Von Mises	46
5.6.	Evolución de la deformación plástica equivalente (PEEQ)	47
5.7.	Evolución de la deformación plástica equivalente (PEEQ)	47
6.1.	Resultado del modelo de 1 partícula	49
6.2.	Radio de deformación	50
6.3.	Dimensiones partícula deformada	50
6.4.	Gráfico resumen de las curvas de deformación plástica promedio de cada tamaño de elemento de malla	51
6.5.	Distribución de la deformación plástica en la capa 1	54
6.6.	Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 1	54
6.7.	Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto. Capa 1	55
6.8.	Distribución de la deformación plástica en la capa 2	55
6.9.	Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 2	56
6.10.	Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto. Capa 2	56
6.11.	Distribución de la deformación plástica en la capa 3	57
6.12.	Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 3	57
6.13.	Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto. Capa 3	58
6.14.	Distribución de la deformación plástica en la capa 4	58
6.15.	Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 4	59
6.16.	Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto. Capa 4	59
6.17.	Distribución de la deformación plástica en la capa 5	60
6.18.	Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 5	60
6.19.	Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto. Capa 5	61
6.20.	Distribución de la deformación plástica en la capa 6	61
6.21.	Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 6	62

6.22.	Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto. Capa 6	62
6.23.	Distribución de la deformación plástica en la capa 7	63
6.24.	Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 7	63
6.25.	Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto. Capa 7	64
6.26.	Progresión de las simulaciones por capa. Elaboración propia.	65
6.27.	Evolución de la deformación plástica promedio de cada capa de partículas . . .	66
A.1.	Resultado simulación tamaño de malla $\varnothing/10$	76
A.2.	Resultado simulación tamaño de malla $\varnothing/20$	77
A.3.	Resultado simulación tamaño de malla $\varnothing/25$	77
A.4.	Resultado simulación tamaño de malla $\varnothing/30$	78
A.5.	Resultado simulación tamaño de malla $\varnothing/35$	78
A.6.	Resultado simulación tamaño de malla $\varnothing/40$	79

Capítulo 1

Introducción

La técnica de deposición *Cold Spray* es un tipo de proceso de aspersión térmica (*thermal spray*), siendo su principal característica que la proyección y la deposición de las partículas sobre el sustrato ocurren en estado sólido, y las temperaturas alcanzadas se mantienen por debajo del punto de fusión de los elementos utilizados.

En este proceso las partículas utilizadas son de dimensiones entre $1\ \mu m$ a $50\ \mu m$ [1], las cuales son aceleradas en una tobera convergente-divergente a velocidades entre $500\ m/s$ a $1200\ m/s$ [2], gracias a un gas inerte supersónico comprimido. Cuando las partículas impactan sobre el sustrato sufren una importante deformación plástica, adhiriéndose a la superficie del sustrato mediante deformación localizada.

Como consecuencia de la baja temperatura de trabajo, se minimizan o eliminan los efectos perjudiciales de la oxidación, la recristalización, esfuerzos residuales, entre otros. La eliminación de los efectos nocivos de la alta temperatura sobre los recubrimientos ofrece ventajas significativas y nuevas posibilidades. Lo que hace al *Cold Spray* prometedor para aplicaciones industriales, en especial para reforzar y reparar una amplia gama de piezas industriales como alabes de turbinas, pistones, cilindros, válvulas, elementos de bombas, ejes. Las capas de recubrimiento aportan resistencia, dureza, resistencia al desgaste y a la corrosión, propiedades de conductividad eléctrica y térmica, entre otras propiedades [3].

El proceso de impacto de las partículas, desde el momento del contacto inicial hasta la disipación total de la energía cinética tarda aproximadamente $100\ ns$ [4]. A estas escalas de tiempo tan acotadas, el monitoreo experimental con suficiente resolución del impacto de partículas y los fenómenos relacionados es difícil. Como alternativa se cuenta con la simulación numérica del impacto de partículas, la cual se utiliza para proporcionar una idea de los fenómenos que ocurren durante la deposición de estas últimas.

Debido al alto costo del *Cold Spray* y las bajas escalas de tiempo surge la necesidad de poder predecir propiedades mecánicas de los recubrimientos con modelos computacionales, de manera de determinar anticipadamente que ocurrirá una vez realizado el proceso de *Cold Spray*. Una de las propiedades que interesan es la dureza del recubrimiento y como esta se ve afectada por las deformaciones plásticas que sufren las partículas al incidir en el sustrato. Es importante conocer la dureza de antemano para ver si efectivamente el proceso de *Cold Spray* es el indicado para obtener propiedades que sean consecuentes con las solicitaciones que tendrá la pieza recubierta.

Esta memoria se centró en ejecutar simulaciones computacionales en el programa de elementos finitos ABAQUS/*Explicit* con el fin de predecir valores de dureza de un recubrimiento de Cobre obtenido por *Cold Spray* a partir de las deformaciones que ocurren en el proceso. Estos resultados computacionales, se compararon con resultados experimentales tomados de investigaciones previas, con el fin de analizar la correlación con el modelo numérico.

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivos general

Evaluar la capacidad de una simulación computacional para obtener valores de dureza de un recubrimiento de Cobre.

1.1.2. Objetivos específicos

- Simular computacionalmente el impacto de partículas con programa de elementos finitos ABAQUS
- Analizar la influencia de las deformaciones que sufren las partículas, sobre la dureza del recubrimiento
- Comparar resultados computacionales con experimentales previos

1.2. Alcances

El Trabajo de Título se limitó a simular un número fijo de partículas esféricas de Cobre. El proceso de impacto se consideró adiabático, es decir, no se tomó en cuenta la transferencia de calor entre la partícula y el sustrato. Con la simulación se obtuvieron valores de deformación plástica.

Las mediciones experimentales de dureza no fueron realizadas por la alumna, sino que se contaron con datos previamente medidos de dureza Vickers de un recubrimiento de Cobre.

Capítulo 2

Antecedentes

2.1. Proyección térmica

La proyección térmica o *thermal spray* agrupa a todos aquellos procesos que generan recubrimientos metálicos o no metálicos. Las fuentes de energía son utilizadas para calentar el material del que estará formado el recubrimiento, para llevarlo a un estado fundido o semi fundido [5]. El material de recubrimiento puede estar en forma de polvo, varilla de cerámica, alambre o materiales fundidos [6].

La tecnología de la proyección térmica se pueden clasificar en tres grandes grupos, según la naturaleza de la energía utilizada: Combustión, donde destaca la proyección con llama (*flame spray*). Eléctrico, entre los que se encuentran la proyección por arco eléctrico (*electric arc spray*) y la proyección por plasma (*plasma arc spray*), entre otros. Y por último, los basados en la proyección en estado sólido, entre los cuales destaca el *cold spray* [7], el cual ocupa la energía cinética de las partículas proyectadas. Lo anterior se ve graficado en la Figura 2.1, donde además se ejemplifican otros tipos de procesos de proyección térmica dentro de las principales clasificaciones.

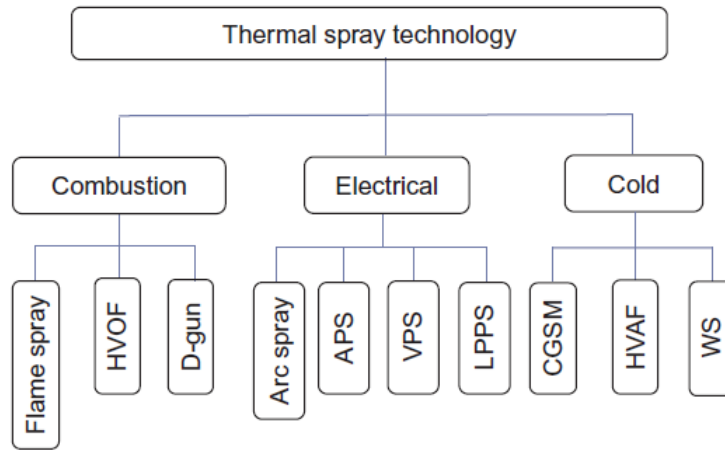


Figura 2.1: Esquema de las familias de proyección térmica. HVOF: *high velocity oxygen fuel*, D-gun: *detonation gun*, APS: *atmospheric plasma spray*, VPS: *vacuum plasma spray*, LPPS: *low-pressure plasma spray*, CGSM: *cold gas spraying method*, HVAF: *high-velocity air fuel*, WS: *warm spray*. [7].

La Figura 2.2 muestra el esquema general de un proceso de proyección térmica. El sistema central es un soplete (*spray torch*) que convierte la energía suministrada, energía química en el caso de la combustión o energía eléctrica en el caso de procesos de plasma, en gases de alta temperatura. El material de recubrimiento es calentado y eventualmente fundido, este es acelerado gracias a la corriente del gas de alta temperatura, hacia el sustrato, donde la partícula se deforma junto a otras, formando así el recubrimiento [6].

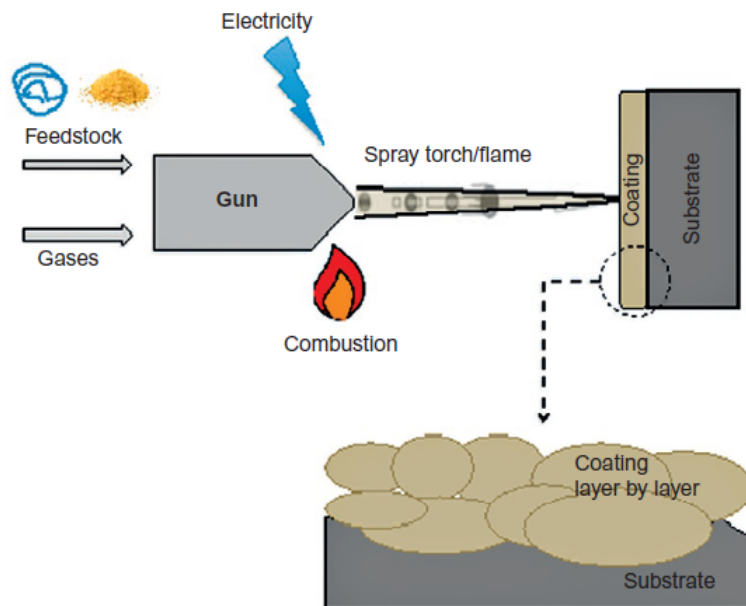


Figura 2.2: Esquema del proceso de *Thermal Spray* [7].

Entre las ventajas de estos procesos, está el amplio rango de materiales que puede ser depositado para formar los recubrimientos, incluyendo metales, aleaciones, cerámicas, plásticos, cermets, y compuestos de los anteriores. Teóricamente cualquier material que tenga una fase fundida estable podría ser depositada con uno o más procesos de proyección térmica [8]. Además, rápidas tasas de deposición se pueden alcanzar, entre 1 a 45 kg/h , cuando típicamente estas varían entre 2 a 7 kg/h en otros procesos. También se pueden lograr variados espesores del recubrimiento desde aproximadamente 50 μm a 6.5 mm [5].

Entre las desventajas de las tecnologías que funden o semi funden el material, se encuentran por ejemplo, la proyección térmica por plasma. Se tiene que para materiales como el aluminio, cobre y titanio, el exceso de temperatura puede oxidar la superficie y afectar la unión [5]. Esto ocurre con los metales, cuando en su estado fundido interactúa con el oxígeno del ambiente, resultando en la formación de impurezas de óxido en el recubrimiento [8].

Otra desventaja es la porosidad que presentan los recubrimientos, permitiendo el paso de gases y líquidos a través de la interfaz del recubrimiento, lo que posteriormente podría causar problemas de corrosión [5].

En los procesos tradicionales de proyección térmica, se desarrollan esfuerzos residuales, y medida que cada gota de material fundido, solidifica y luego se enfría a temperatura ambiente, sufre una contracción térmica, proporcional al cambio de temperatura [8].

2.2. *Cold Spray*

El principio de funcionamiento de la tecnología del *Cold Spray* es impactar polvos de partículas sobre un sustrato, para así obtener un recubrimiento. Las partículas (1-50 μm) [1] son aceleradas e impulsadas por un gas presurizado de alta velocidad precalentado. Este gas se expande al circular por una tobera convergente-divergente, acelerando a velocidades entre los 500 m/s a 1200 m/s (velocidades supersónicas) [2]. Las partículas son inyectadas en una boquilla antes de la garganta de la tobera. Una vez que la velocidad de las partículas excede la velocidad crítica, las partículas impactan sobre el sustrato y sufren una importante deformación plástica, adhiriéndose a la superficie de este mediante deformación localizada [9]. El proceso anteriormente descrito se ve representado en la Figura 2.3.

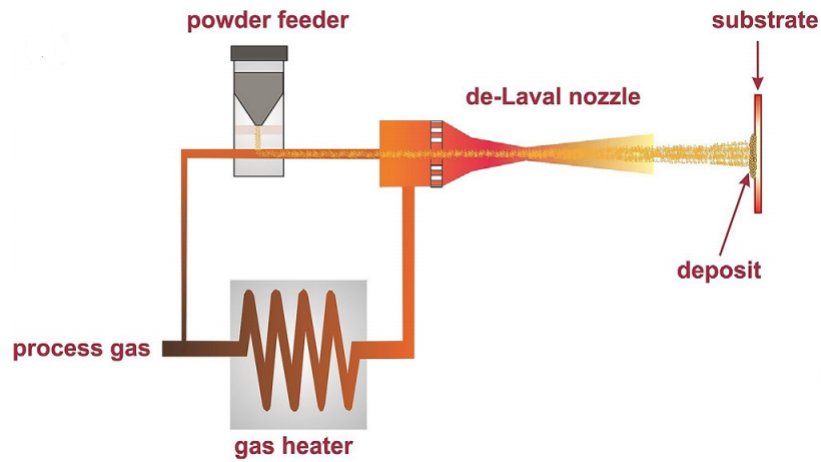


Figura 2.3: Esquema del proceso de *Cold Spray*. [4].

El término *Cold Spray* se usa para describir este proceso, debido a las temperaturas relativamente bajas (-100 a $+100$ °C) del gas expandido que sale de la tobera [8].

Esta tecnología de *Cold Spray* se desarrolló inicialmente a mediados de la década de 1980 en el Instituto Siberiano de Mecánica Teórica y Aplicada de Novosibirsk, Rusia. Allí los científicos depositaron con éxito un amplio rango de metales puros, aleaciones, polímeros y compuestos, sobre sustratos de distintos materiales, demostrando así que se pueden alcanzar altas tasas de adherencia utilizando el proceso de *Cold Spray* [8].

Es importante, enfatizar la diferencia entre el *Cold Spray* y otros procesos de aspersión térmica (*thermal spray*); en el primero el recubrimiento se forma a partir del impacto de partículas en estado sólido, debido a que se trabajan a temperaturas por debajo de la de fusión de los materiales, así la adhesión de partículas en este proceso se debe únicamente a su energía cinética en el momento del impacto. Esta diferencia de temperaturas utilizadas en otros procesos de proyección térmica en comparación a la usada en el proceso de *Cold Spray*, se ve reflejada en la Figura 2.4.

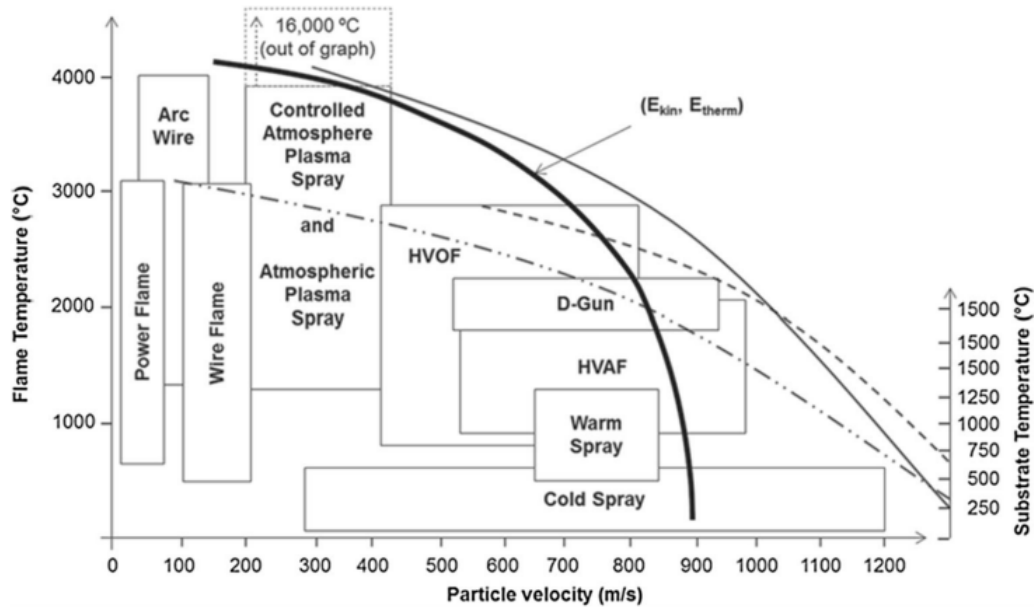


Figura 2.4: Comparación de velocidad de partículas, temperatura de gas y temperatura del sustrato entre procesos de proyección térmica. [10]

Esta condición de baja temperatura hace que los efectos de la alta temperatura en los recubrimientos y sustratos sean minimizados o eliminados, ofreciendo así ventajas como evitar la oxidación y cambios de fase. Lo anterior, trae como consecuencia que el proceso de *Cold Spray* sea muy adecuado para la proyección de materiales sensibles al oxígeno como el aluminio, cobre y titanio, y materiales sensibles a los cambios de fase como los compuestos de carburos [10].

A diferencia de otros procesos de proyección térmica, que conducen a un crecimiento de grano por las altas temperaturas, el proceso de *Cold Spray* produce recubrimientos sin un crecimiento de grano apreciable, lo que genera propiedades como alta dureza, propiedad que también se ve favorecida por las altas tasas de deformación plástica [11].

Los recubrimientos obtenidos por *Cold Spray* presentan conductividades térmicas y eléctricas más altas debido a la mayor densidad y a la reducida presencia de fases de óxido [10].

2.2.1. Velocidad de partículas

El proceso de *Cold Spray* está determinado por diversos factores, entre estos, por la velocidad de las partículas, y esta a su vez se ve afectada por los parámetros de presión y temperatura del gas, además de la geometría de la tobera [9].

La velocidad que se puede alcanzar en este procedimiento está limitada por la velocidad del gas. Debido al uso de gases a alta presión, toberas largas y partículas finas, las partículas se pueden mover a velocidades cercanas a las del gas, la que puede ser aumentada usando gases con bajo pesos moleculares y precalentandos. Entre los ejemplos de gases utilizados está el helio, el cual tiene bajo peso molecular, lo que implica que no interactúa con el oxígeno, pero trabajar con este gas a su vez enriquece los costos del proceso, por lo tanto, también se emplean con otros ejemplares como el nitrógeno. La velocidad alcanzada con el nitrógeno es significativamente menor que con helio, por lo tanto, para lograr la deposición de partículas en un rango favorable de velocidad-temperatura, se aplica el calentamiento de gas [12].

Para que las partículas se adhieran, toda la energía cinética de la partícula debe transformarse en calor y energía de deformación para el recubrimiento y/o sustrato. Así, la energía cinética y el momento proveniente de las partículas de alta velocidad, al impactar con las partículas previamente depositadas, se utilizan para construir progresivamente el recubrimiento [9].

Existe una área de velocidad crítica, por bajo de la cual las partículas no forman recubrimientos y por sobre de la cual el recubrimiento se comienza a formar rápidamente [13]. Si la velocidad de las partículas es baja, se produce un rebote de las partículas desde el sustrato. Con el aumento de la velocidad de las partículas al valor crítico, comienza el proceso de adhesión de estas a la superficie, por lo tanto, la probabilidad de unión entre la partícula y el sustrato aumenta con el aumento de la velocidad de la misma. La velocidad crítica depende de varios factores como del material de las partículas y el sustrato, la temperatura y tamaño de las partículas, el estado de la superficie del sustrato, entre otros [14].

Variadas publicaciones han estimado la velocidad crítica del cobre, arrojando valores entre los 520 y 610 m/s [2], [15], [16], [17].

2.2.2. Eficiencia de adherencia (DE)

La eficiencia de adherencia (o de deposición) se podría definir como el porcentaje en masa del polvo de partículas que se adhieren al sustrato con respecto a la masa total de partículas que inciden sobre el sustrato [18]:

$$DE = \frac{\Delta m}{M_o} \quad (2.1)$$

donde Δm es el aumento de masa de la muestra durante la proyección de partículas, y M_o es la masa total de material que fue proyectado sobre la muestra.

Esta eficiencia, dependerá de la velocidad de la partícula y su temperatura, entre otros factores [12]. Las mismas partículas podrían ser depositadas con éxito a una alta velocidad pero a temperatura baja o a una baja velocidad pero aumentando la temperatura. Este efecto de la velocidad y la temperatura sobre la adherencia, se puede observar en la Figura 2.5.

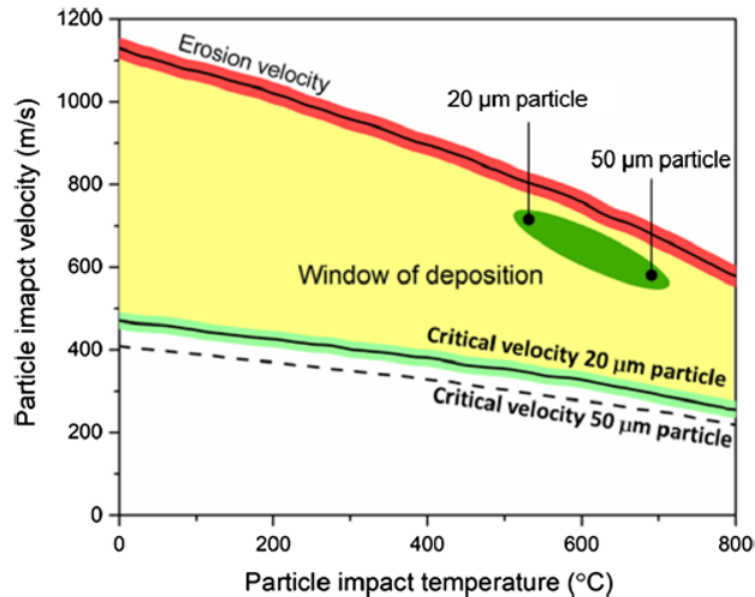


Figura 2.5: Ventana de adherencia. Relación entre eficiencia, velocidad y temperatura de partículas. [19]

El proceso de *Cold Spray* conlleva dos opciones: la adherencia de la partícula o la erosión del sustrato. Como ya se ha planteado, la adherencia ocurre cuando las partículas alcanzan velocidades superiores a la crítica. Mientras que la erosión ocurre cuando las partículas sobrepasan la velocidad de erosión, provocando que cuando estas chocan con la superficie rebotan, desgastan el sustrato y no se adhieren [12]. Entonces, existe una zona donde las partículas son efectivamente depositadas, la cual queda delimitada por la velocidad crítica y la de erosión, como se muestra en la Figura 2.6. Además, en esta figura se observa el efecto que el impacto de una partícula deja sobre el sustrato, para distintas velocidades.

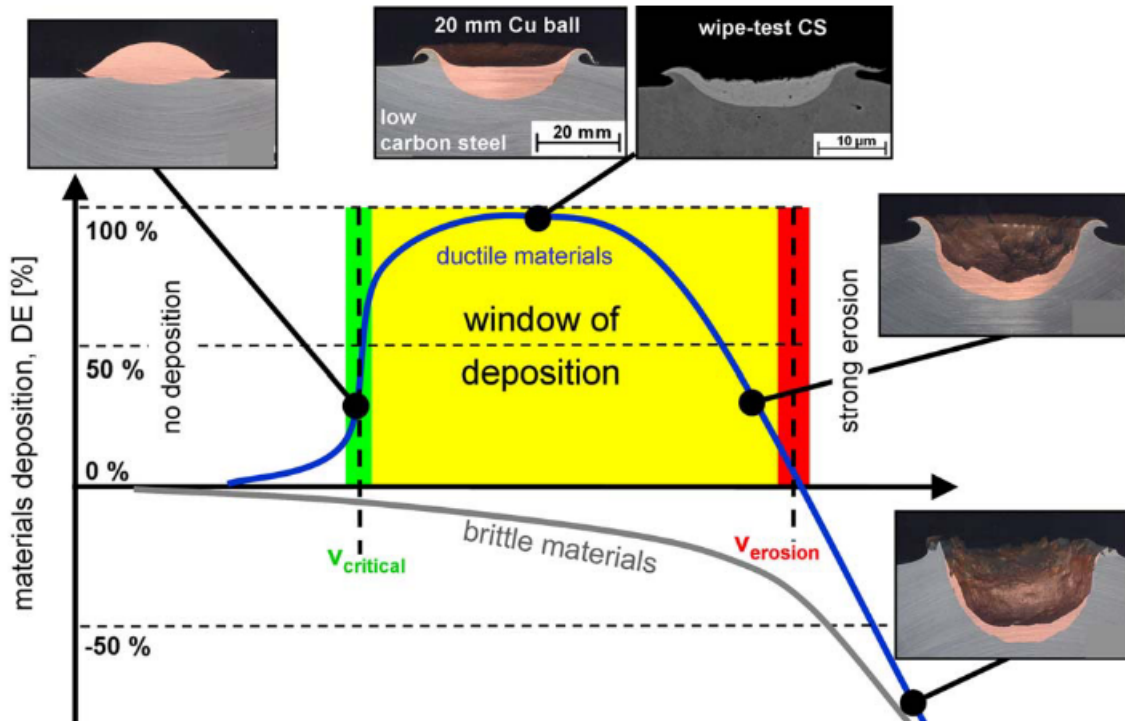


Figura 2.6: Relación entre la velocidad de partículas y la eficiencia de adherencia, para una temperatura de impacto constante. [20]

Si se tiene alta eficiencia de deposición significa, que la mayor parte de la masa de partículas se adhirió al recubrimiento, lo que tiene como consecuencia que la deformación del recubrimiento queda determinado sólo o en gran parte, por la deformación provocada por aquellas partículas que se adhirieron.

En cambio, si existe una baja eficiencia de adherencia, muchas de las partículas que impactaron sobre el sustrato o el recubrimiento, rebotaron y provocaron deformación en el mismo, pero no se adhirieron. Así para este caso, la deformación del recubrimiento no sólo estará dado por la deformación provocada por la cantidad de partículas que efectivamente se adhirieron, sino que también estará dada por la deformación provocada por aquellas partículas que impactaron y no se adhirieron.

En conclusión, a mayor eficiencia de adherencia, menor será la deformación plástica, y por el contrario, a menor eficiencia de adherencia se tendrá mayor deformación plástica.

2.2.3. Mecanismo de adherencia

La unión entre las partículas y el sustrato es resultado de la gran deformación y a los fenómenos relacionados a esta, ocurridas en la interfaz [2]. Dependiendo de las propiedades del material de las partículas y del sustrato, además de la velocidad de impacto y la temperatura de las partículas, el mecanismo de adherencia será distinto.

Kamaraj [19] en su investigación plantea clasificaciones para los mecanismos de adherencia:

2.2.3.1. Unión por enlace metálico

Generalmente, la unión ocurre tan pronto como dos superficies metálicas, atómicamente planas y limpias, entran en contacto, sin la necesidad de calor, fusión o entrelazamiento mecánico. Pero en la realidad, las superficies metálicas raramente cumplen estas condiciones, y además contienen una capa de óxido en su superficie, la cual debe ser eliminada para permitir un contacto estrecho entre superficies metálicas. Esta eliminación parcial de la capa de óxido se puede lograr sometiendo a la interfaz a deformación plástica [4].

En el caso del proceso de *Cold Spray*, la deformación plástica producida en el impacto de la partícula sobre el sustrato, puede alterar las películas superficiales delgadas, como óxidos, y proporcionar un contacto íntimo conforme a alta presión local, lo que permite que se produzca la unión [21].

2.2.3.2. Unión mecánica

Este mecanismo de adhesión, que ocurre entre las partículas y el sustrato, es causado por la penetración en el sustrato, el calentamiento de la interfaz y la formación de jet líquidos (*liquid jet*) [1]. Cuando las partículas impactan, ocurre deformación plástica en la superficie y el material es expulsado, creando así una cavidad, la cual es usada por la partícula que está impactando. Esta cavidad, envuelve parcialmente a la partícula incidente, como es demostrado esquemáticamente en la Figura 2.7, creando así un entrelazamiento mecánico (*mechanical interlocking*) entre el sustrato y las partículas [22].

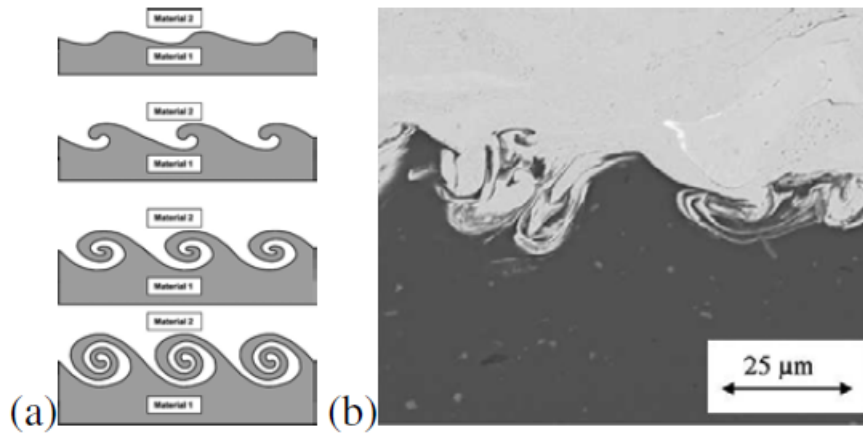


Figura 2.7: Entrelazamiento mecánico. (a) Esquema de *mechanical interlocking*. (b) Imagen SEM de la interfaz de cobre (partícula) y aluminio (sustrato). [23]

2.2.4. Inestabilidad de corte adiabática (*Adiabatic shear instability, ASI*)

A grandes tasas de deformación, el calor generado debido a la deformación plástica se asume como un comportamiento adiabático y localizado. Esta generación de calor localizada resulta en un ablandamiento térmico del material y por lo tanto, fomenta más deformación plástica. De esta manera, el material pierde localmente estabilidad y fluye como si fuera un líquido, formando *liquid jets* [24].

Este mecanismo ocurre cuando la velocidad de la partícula es mucho más alta que la velocidad crítica. Un campo de presión se presenta en la interfaz como resultado del impacto de las partículas sobre el sustrato, lo que lleva esfuerzos de corte localizados y al ablandamiento del material, lo que da como resultado una condición de inestabilidad de corte adiabática y por consiguiente la adhesión de las dos superficies.

En la Figura 2.8 se aprecia que un material que sufrió endurecimiento por deformación en condiciones no adiabáticas (isotérmico), la curva de esfuerzo-deformación, muestra un aumento monótono del esfuerzo y la deformación plástica. Sin embargo, en condiciones adiabáticas, la energía de la deformación plástica es disipada en calor, lo que lleva a un aumento de la temperatura y un ablandamiento (o relajación) térmico, haciendo que el esfuerzo de fluencia disminuya [25].

En condiciones ideales, un material con distribuciones uniformes de esfuerzos, deformación, temperatura y microestructura, el ablandamiento térmico puede continuar indefinidamente [25]. Ya que la mayoría de los materiales no son isotrópicos, el esfuerzo de corte y el calentamiento son localizados en un volumen pequeño en comparación al ocupado por la deformación y calentamiento.

La localización de la deformación plástica favorece un calentamiento más intenso, esto se debe a que la energía de la deformación es transformada en energía térmica, lo que conlleva a un ablandamiento del material dentro de la zona de localización, lo que a su vez provoca disminución del esfuerzo de fluencia en toda la muestra. A partir de ese momento, el flujo del material ya no es plástico, volviéndose viscoso, es decir, el esfuerzo de fluencia se vuelve proporcional a la velocidad de deformación [14]. Este comportamiento de la caída del esfuerzo de fluencia se puede apreciar en la Figura 2.8 en la curva ‘*Localized*’.

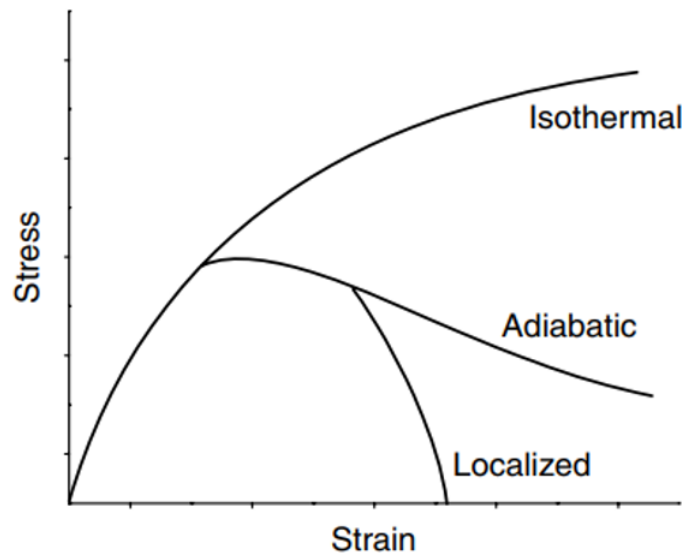


Figura 2.8: Curva típica de esfuerzo de fluencia (*stress*) – deformación plástica (*strain*) [14].

2.3. Modelo de plasticidad: Johnson – Cook

El endurecimiento por deformación en los procesos de *Cold Spray* es el resultado del aplanamiento de las partículas a medidas que impactan y se unen a la superficie. Un modelo usado con frecuencia para una alta tasa de deformación plástica es el de Johnson – Cook [26]. Este modelo incluye el endurecimiento por deformación y los efectos del ablandamiento del material durante la deformación. Este modelo se presenta como:

$$\sigma = [A + B \cdot \varepsilon^n] \cdot [1 + C \cdot \ln(\dot{\varepsilon}/\dot{\varepsilon}_0)] \cdot [1 - (T^*)^m] \quad (2.2)$$

donde σ es el esfuerzo de fluencia, ε la deformación plástica, $\dot{\varepsilon}$ la tasa de deformación de plástica, $\dot{\varepsilon}_0$ es el factor de normalización, normalmente es 1 [s⁻¹] [26]. A, B, C, n y m son constantes empíricas para cada material. A corresponde al esfuerzo de fluencia inicial del material, B da relación del endurecimiento, C tiene relación con la tasa de deformación, n una constante del endurecimiento por deformación y m del ablandamiento térmico. Finalmente T^* es equivalente a:

$$T^* = \frac{T - T_{ambiente}}{T_{fusión} - T_{ambiente}} \quad (2.3)$$

con T [K] temperatura del material, $T_{fusión}$ [K] temperatura de fusión del material y $T_{ambiente}$ [K] la temperatura ambiente.

En la Tabla 4.1 se presentan propiedades y los parámetros de Johnson – Cook del cobre.

2.4. Modelo de elasticidad: Mie–Grüneisen

La respuesta elástica del material en el impacto se asume que sigue un modelo de elasticidad lineal. Para esto se emplean las ecuaciones de estado de Mie–Grüneisen [23], las cuales entregan una relación presión (P) del material en función de su densidad (ρ) y energía interna (E_m):

$$P - P_H = \rho \cdot \Gamma(E_m - E_H) \quad (2.4)$$

donde P_H y E_H son la presión y energía específica Hugoniot respectivamente. Γ es la razón de Grüneisen, definida como [23]:

$$\Gamma = \Gamma_0 \frac{\rho_0}{\rho} \quad (2.5)$$

donde Γ_0 es una constante del material y ρ_0 es la densidad de referencia.

La energía de Hugoniot (E_H) se relaciona con la presión de Hugoniot (P_H) mediante:

$$E_H = \frac{P_H \cdot \eta}{2\rho_0} \quad (2.6)$$

donde $\eta = 1 - \rho_0/\rho$ es la deformación volumétrica nominal en compresión.

Para la presión de Hugoniot (P_H) se tiene el siguiente ajuste [23]:

$$P_H = \frac{\rho_0 c_0^2 \eta}{(1 - s\eta)^2} \quad (2.7)$$

donde c_0 y s define una relación lineal entre la velocidad linear de choque U_s y la velocidad de la partícula U_p , según:

$$U_s = c_0 + s \cdot U_p \quad (2.8)$$

Así se llega a una expresión para la presión:

$$P = \frac{\rho_0 c_0^2 \eta}{(1 - s\eta)^2} \left(1 - \frac{\Gamma_0 \eta}{2} \right) + \Gamma_0 \rho_0 E_m \quad (2.9)$$

donde $\rho_0 c_0^2$ es el módulo de compresibilidad (*elastic bulk modulus*).

2.5. Dureza Vickers

El ensayo de dureza Vickers y la dureza resultante de este, se calcula a partir del tamaño de las diagonales (d) de la marca dejada por el indentador de forma piramidal, que actúa bajo una carga P [27]. El indentador piramidal presenta un ángulo interfacial de 136° , lo que genera una impresión cuadrada [28], como puede ser apreciado en la Figura 2.9.



Figura 2.9: Esquema de indentación. [28]

El número de dureza Vickers (HV), es calculado según:

$$H_V = \frac{P}{A_c} = \frac{2P}{d^2} \sin\left(\frac{136^\circ}{2}\right) = 1.8544 \frac{P}{d^2} \quad (2.10)$$

donde H_v en $[kgf/mm^2]$, P [kgf] es la carga, A_c $[mm^2]$ el área de la impresión y d $[mm]$ el promedio de ambas diagonales [27].

La dureza Vickers se puede relacionar con la diagonal (d) o con la profundidad (t) de la marca dejada por el indentador [27], bajo la relación:

$$d = 7t \quad (2.11)$$

2.6. Relación de dureza y esfuerzo de fluencia

Varios investigadores han trabajado en técnicas experimentales y relaciones teóricas para determinar el esfuerzo de fluencia a partir de la dureza. Estas relaciones pueden ser útiles en situaciones donde las mediciones de propiedades ligadas a la tracción no son posibles por su carácter destructivo. Cabe precisar que estas relaciones reducen el número de ensayos para asegurar los controles de calidad de los materiales [29]. Correlaciones confiables entre la dureza y el esfuerzo de fluencia permiten conocer propiedades mecánicas del material sólo realizando ensayos de dureza, lo que más rápido y barato que realizar un ensayo elaborado de tracción [30].

2.6.1. Ecuación general

En la literatura se usa comúnmente una ecuación general empírica para los metales [30] para la relación de dureza Vickers (H_V) y el esfuerzo de fluencia (σ_y):

Así se llega a una expresión para la dureza en función del esfuerzo:

$$H_V \approx 3 \cdot \sigma_y \quad (2.12)$$

con σ_y y H_V en [MPa].

Sin embargo, esta relación general es válida sólo para materiales sin comportamiento de endurecimiento por deformación, esto quiere decir, idealmente para materiales plásticos [30].

2.6.2. Ecuaciones para el cobre

Chenna Krishna [29] en su estudio para buscar una correlación en particular para las aleaciones de cobre, llega a tres relaciones dependiendo de la razón entre el esfuerzo último (σ_{UTS}) y el esfuerzo de fluencia (σ_y):

Si se tiene una relación baja ($\sigma_{UTS}/\sigma_y < 1.20$):

$$\sigma_y = 3.018 \cdot VHN \quad (2.13)$$

Si se tiene una relación media ($1.20 < \sigma_{UTS}/\sigma_y < 1.52$):

$$\sigma_y = 2.594 \cdot VHN \quad (2.14)$$

Y si se tiene una relación alta ($\sigma_{UTS}/\sigma_y < 1.52$):

$$\sigma_y = 1.97 \cdot VHN \quad (2.15)$$

donde el esfuerzo de fluencia (σ_y) se expresa en [MPa]. VHN (*Vickers Hardness Number*) es la dureza Vickers expresada en [kgf/mm^2]. Se debe tener en cuenta la conversión de unidades $1kgf/mm^2 = 9.8070$ [MPa].

En la misma publicación Krishna [29] también plantea relaciones generales del esfuerzo fluencia y el esfuerzo último para las aleaciones de cobre:

$$\sigma_y = 2.874 \cdot VHN \quad (2.16)$$

$$\sigma_{UTS} = 3.353 \cdot VHN \quad (2.17)$$

con σ_y y σ_{UTS} en [MPa].

Se tienen además las ecuaciones aportadas por Zhang [30] en su publicación, donde presenta relaciones entre la dureza y el esfuerzo de fluencia para cobre con distintos tratamientos y porcentajes de aleaciones con Zinc. Estas relaciones se presentan en la Figura 2.10.

	σ (MPa)		H_V (MPa)	H_V/σ	
	σ_y	σ_{UTS}		H_V/σ_y	H_V/σ_{UTS}
Annealed Cu	80.71	223.43	545.86	6.76	2.44
Cold rolled Cu	250.03	271.28	925.81	3.70	3.41
Cu ECAP-1p	344.67	350.85	1194.18	3.46	3.40
Cu ECAP-2p	381.20	391.50	1253.34	3.29	3.20
Cu ECAP-3p	387.67	398.54	1263.19	3.26	3.17
Cu ECAP-4p	402.27	415.02	1329.86	3.31	3.20
Cu10%Zn ECAP-1p	375.87	389.97	1421.58	3.78	3.65
Cu10%Zn ECAP-2p	478.00	498.45	1565.72	3.28	3.14
Cu10%Zn ECAP-3p	531.70	546.43	1644.73	3.09	3.01
Cu10%Zn ECAP-4p	539.60	569.13	1691.32	3.13	2.97
Cu10%Zn HPT-1t	735.67	803.44	2046.80	2.78	2.55
Cu10%Zn HPT-5t	708.88	831.62	2105.72	2.97	2.53
Cu10%Zn HPT-10t	675.75	821.04	2130.74	3.15	2.60
Annealed Cu32%Zn	63.59	257.64	522.73	8.22	2.03
Cold rolled Cu32%Zn	374.35	422.86	1458.44	3.90	3.45
Cu32%Zn ECAP-1p	517.80	551.73	1847.54	3.57	3.35
Cu32%Zn ECAP-2p	648.90	685.27	2038.63	3.14	2.97
Cu32%Zn ECAP-3p	703.03	749.39	2038.31	2.90	2.72
Cu32%Zn ECAP-4p	734.63	768.27	2224.11	3.03	2.89
Cu32%Zn HPT-1t	918.31	1009.25	2415.99	2.63	2.39
Cu32%Zn HPT-5t	894.75	1035.44	2469.13	2.76	2.38
Cu32%Zn HPT-10t	968.76	1083.82	2500.69	2.58	2.31

Figura 2.10: Relaciones esfuerzo de fluencia y dureza para distintas aleaciones y tratamientos de Cu [30].

Capítulo 3

Revisión bibliográfica

3.1. Simulación de impactos de partículas

Existen una cantidad considerable de investigaciones que estudian distintas variables y propiedades resultantes del proceso de *Cold Spray*, mediante el impacto de partículas sobre un sustrato utilizando programas de elementos finitos como ABAQUS. Pero estas investigaciones en su mayoría se centran en la simulación de 1 partícula. Como por ejemplo, Li [31], Assadi [2], Schmidt [20], Grujicic [25], Nelias [32], han desarrollado publicaciones donde estudian las deformaciones sufridas por las partículas en el impacto, las diferencias de valores obtenidos en cuanto a deformación o esfuerzos al cambiar parámetros de simulación, la predicción de propiedades del recubrimiento, entre otros tópicos.

En cuanto a simulaciones de múltiples partículas el número se reduce. Entre este tipo de investigación se encuentra la tesis realizada por Jing Xie, titulada *Simulation of Cold Spray Particle Deposition* Xie [23]. Este estudio parte con la simulación de 1 partícula, pero se extiende a la simulación de múltiples partículas esféricas de cobre y aluminio. Se simula un arreglo de partículas utilizando la estructura de una celda centrada en las caras (FCC). Se busca investigar la tasa de porosidad y el esfuerzo residual que deja esta disposición de partículas.

La Figura 3.1 es uno de los resultados de la investigación de Xie. Esta imagen muestra la porosidad resultante en el recubrimiento, donde el color azul representa elementos rellenos con material y por el contrario el color rojo representa que el elemento está vacío, en otras palabras, esos elementos vacíos son poros o cavidades.

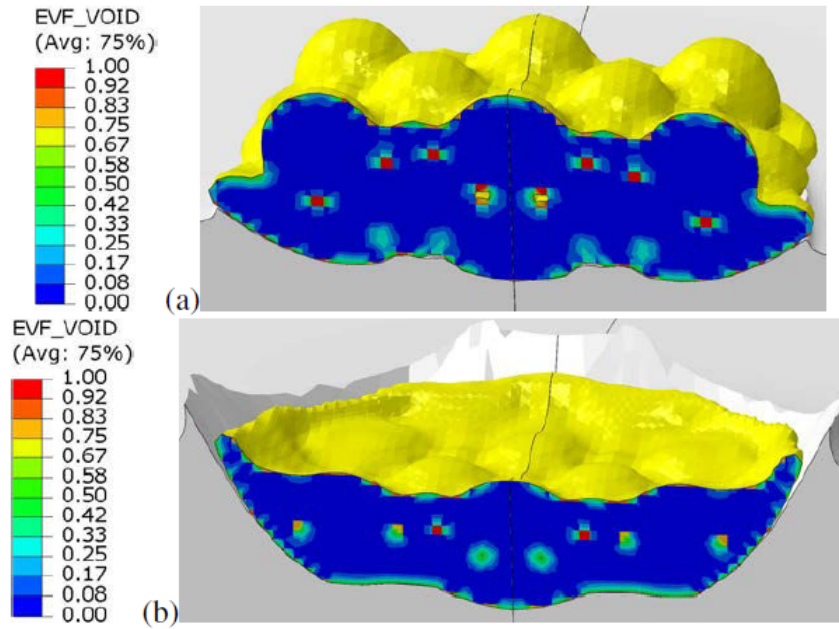


Figura 3.1: Perfiles de simulación utilizando un arreglo FCC. (a) Al/Al, (b) Cu/Cu. [23].

Otra publicación que trata de impacto de múltiples partículas, es la tesis desarrollada por Andrew Hulton, titulada *Investigation of the Effects of Particle Temperature and Spacing on Multi-Particle Impacts in Cold Spray* [24]. Al igual que la tesis anterior, se estudia el impacto de partículas esféricas de cobre y aluminio. La investigación parte con el impacto de una sola partícula, seguido por 2 más simultáneamente, para luego realizar otra simulación pero esta vez contabilizando 100 partículas.

El objetivo de la investigación es impactar partículas con variaciones de temperaturas, tanto del sustrato como de las partículas. Además, busca comparar las morfologías obtenidas del impacto de múltiples partículas simuladas con la obtenida de un recubrimiento experimental.

La Figura 3.2 muestra deformación plástica y la morfología resultante, del impacto de 3 partículas de cobre. La Figura 3.3 gráfica la deformación plástica equivalente durante tres instantes del impacto de 100 partículas, a la izquierda se tiene como condición inicial un sustrato a temperatura ambiente y a la derecha un sustrato precalentado.

Al comparar los resultados computacionales con los experimentales, las simulaciones de aluminio fueron capaces predecir de buena manera la morfología experimental. Mientras que las simulaciones de cobre tendían a mostrar más deformación que la realmente sufrida en el recubrimiento experimental.

Cu-Cu Impacts with cooling and $T_s = 293$ K
 $V_i^{(p)} = 636$ m/s, $T_i^{(p)} = 635$ K: $V_i^{(p)} = 684$ m/s, $T_i^{(p)} = 778$ K: $V_i^{(p)} = 725$ m/s, $T_i^{(p)} = 921$ K

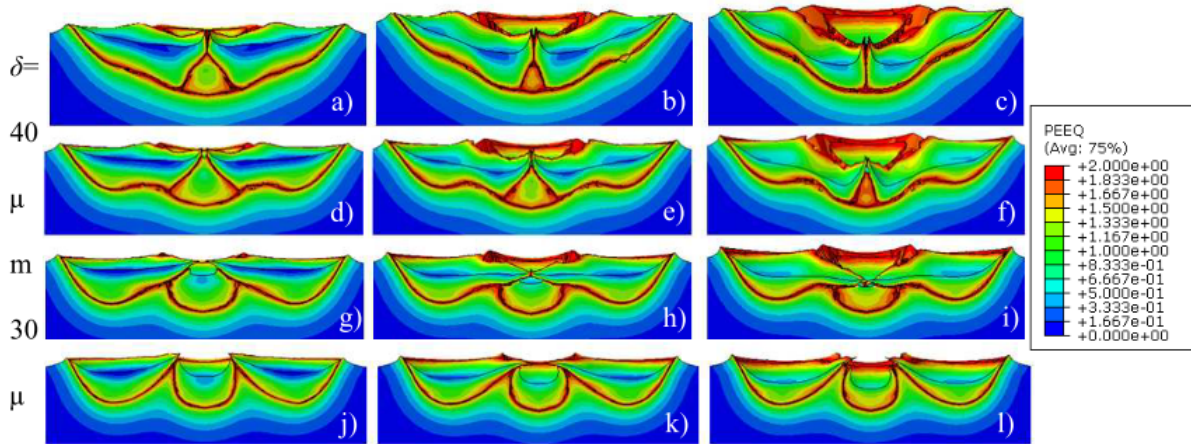


Figura 3.2: Morfología obtenida por la deformación por impacto de 3 partículas de cobre. [24].

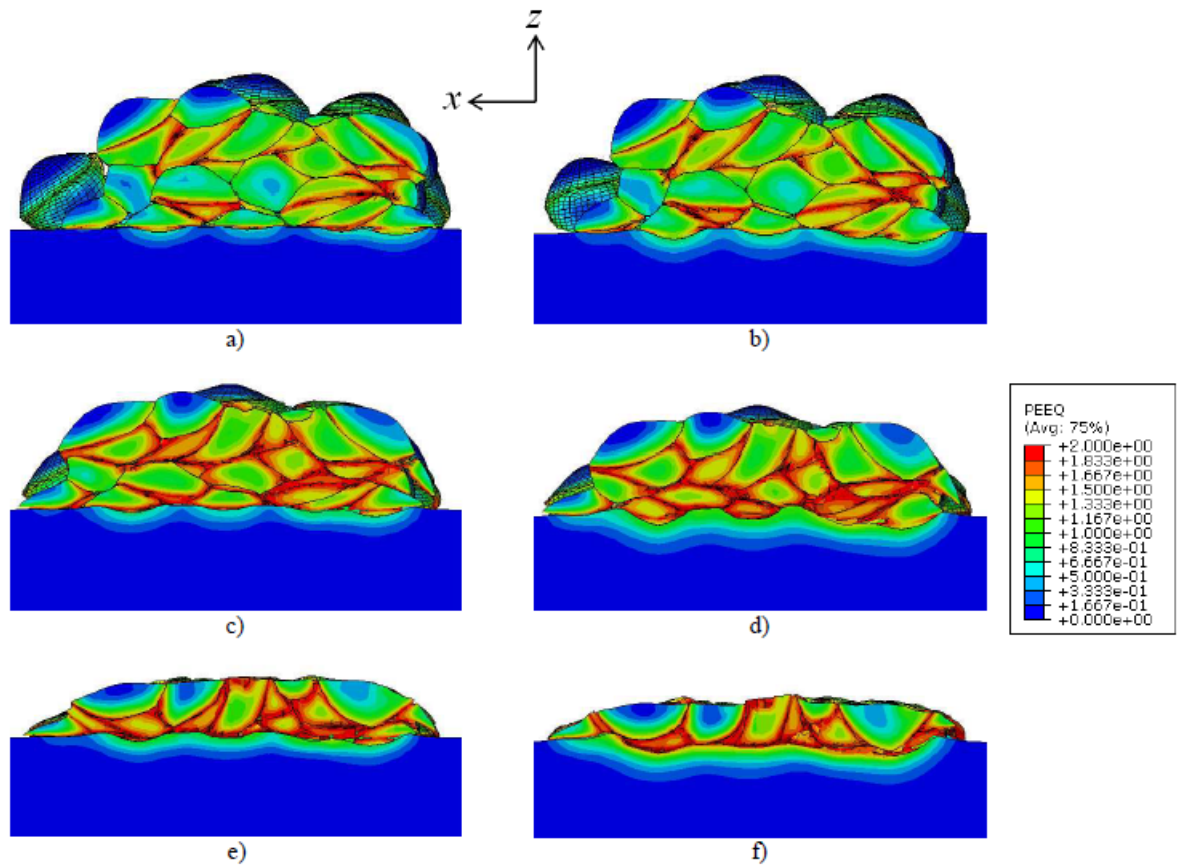


Figura 3.3: Deformación plástica equivalente del impacto de 100 partículas. Secuencia (a), (c), (e): Sustrato a temperatura ambiente. Secuencia (b), (d), (f): Sustrato precalentado. [24].

Capítulo 4

Metodología

El objetivo de la metodología realizada es obtener resultados de dureza de un recubrimiento de cobre obtenido por *Cold Spray*, mediante la simulación numérica del impacto de partículas sobre un sustrato.

Para esto, primero se planteó una metodología computacional con la cual se llevó a cabo la simulación del impacto, que entregó resultados en cuanto a la deformación sufrida por las partículas que formaban el recubrimiento. Luego, se prosiguió con un análisis de datos donde se calculó la dureza a partir de los datos de deformación entregados por la metodología computacional.

4.1. Metodología computacional

La metodología computacional contempló primero una validación numérica, para luego dar paso a la estimación de parámetros de simulación, como las temperaturas de las partículas y del sustrato, a partir de datos experimentales de la formación de un recubrimiento obtenido por *Cold Spray* de una investigación previa. También se definieron parámetros de simulación del programa ABAQUS, con los cuales se generó el primer modelo de una partícula. Con este primer modelo se desarrolló un análisis de sensibilidad de malla para determinar el tamaño de elemento de malla. Finalmente, se programó el modelo que consideraba el total de partículas.

El esquema general de la metodología computacional se muestra en la Figura 4.1.

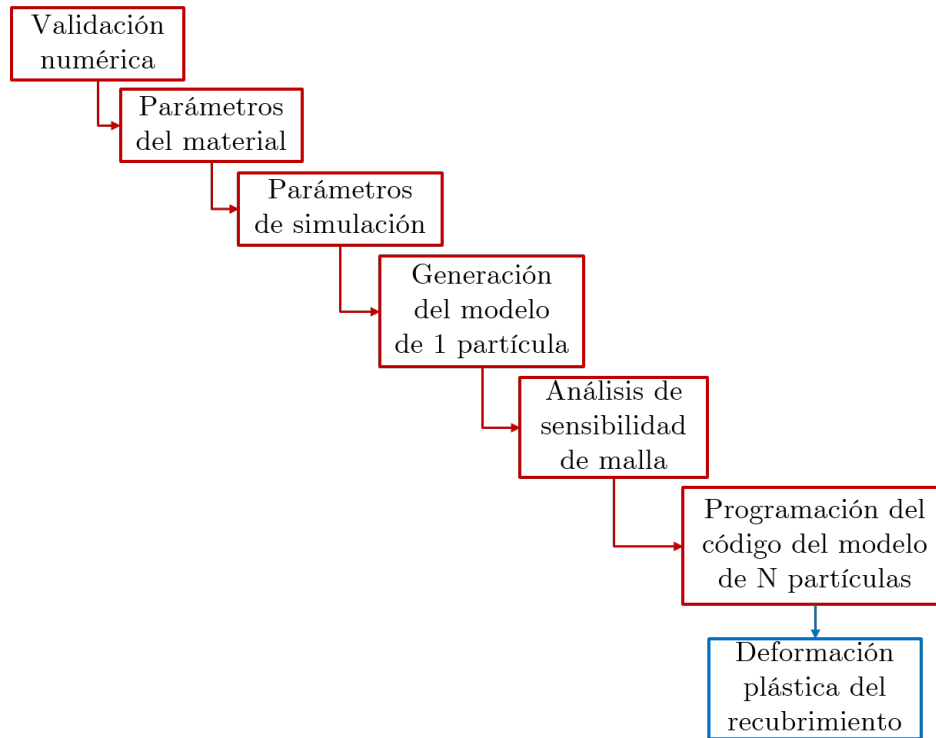


Figura 4.1: Diagrama resumen de la metodología computacional. Elaboración propia

4.1.1. Validación numérica

La metodología computacional consideró como primera actividad una validación numérica, con el fin de comprobar el manejo del *software* ABAQUS. Esta metodología junto con sus resultados es presentado en el capítulo 5, titulado ‘Validación numérica’.

4.1.2. Parámetros del material

Las propiedades y parámetros del cobre que fueron utilizada en todas las etapas siguientes son especificadas en la Tabla 4.1 y fueron consultadas de la publicación realizada por Xie en [23].

Tabla 4.1: Propiedades del cobre [23].

	Parámetro	Unidad	Valor
General	Densidad, ρ	kg/m^3	8.9×10^3
	Calor específico, c	$J/kg \cdot K$	383
	Temperatura de fusión, T_m	K	1356
	Conductividad térmica, λ	$W/m \cdot K$	386.5
Elástica	Módulo de corte, G	GPa	44.7
Johnson-Cook	A	MPa	90
	B	MPa	292
	C	-	0.025
	n	-	0.31
	m	-	1.09
	Temperatura de referencia, T_0	K	298
	Factor de normalización	1/s	1
Mie-Grüneisen	Velocidad del sonido, c_0	m/s	3,940
	Γ_0	-	2.02
	s	-	1.489

4.1.3. Tamaño de partículas

Las partículas a simular son modeladas como esferas de diámetro definido igual para todas, con el fin de simplificar el modelo y hacer más viable la simulación con los recursos computacionales dispuestos.

Los resultados experimentales con los cuales se trabajó fueron realizados por Justin Perry, en su investigación titulada *Powder Recycling for the Production of Pin Fin Heat Sinks by Cold Gas Dynamic Spray* [33]. Por lo tanto, para las simulaciones se utilizó el mismo diámetro de partículas que su estudio.

Los polvos utilizados por Perry son de cobre puro atomizado, Cu-159 (Figura 4.2), cuya distribución de tamaño de partícula fue medido mediante la técnica por difracción láser y es presentado a continuación en la Figura 4.3.

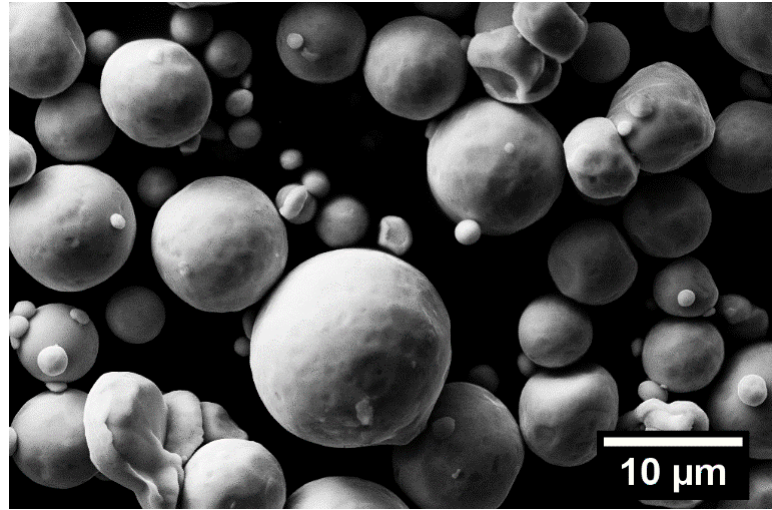


Figura 4.2: Microscopía (SEM) de las partículas de cobre Cu-159 [33].

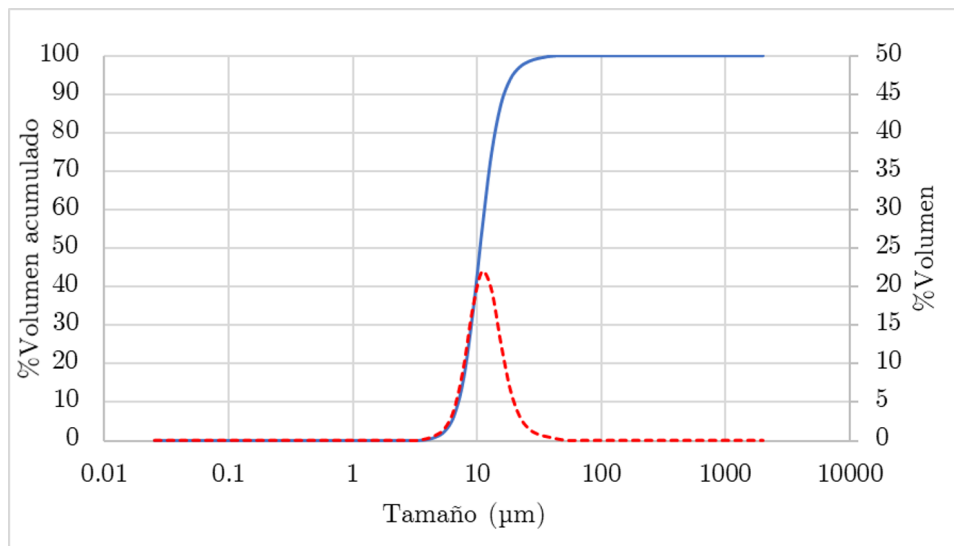


Figura 4.3: Distribución de tamaños de partícula.

En este análisis de difracción láser se determinó que el diámetro promedio de las partículas es $11.43 \mu\text{m}$ basándose en la distribución de volumen dentro del polvo [33]. Por lo tanto, para fines de la simulación se escoge un tamaño de partícula de $11.0 \mu\text{m}$.

4.1.4. Parámetros experimentales

Como ya se ha expuesto, la comparación de los resultados computacionales se hará con los datos experimentales realizados por Perry [33], por lo tanto, se tienen ciertos *inputs* del modelo numérico que fueron considerados a partir de la parte experimental, en específico, en la formación del recubrimiento utilizando la técnica de *Cold Spray* del estudio de Perry.

Los parámetros utilizados para el proceso de *Cold Spray* y datos medidos del recubrimiento resultante, se muestran en la Tabla 4.2.

Tabla 4.2: Datos experimentales [33].

Parámetro	Valor
Temperatura del gas	400 °C
Presión del gas	3.45 MPa
Tamaño del paso	1 mm
Pasos	1
Tasa de alimentación del polvo	30 g/min
Tasa de flujo de gas de alimentación	0.85 m ³ /h
Gas propulsor	Nitrógeno
Distancia <i>Standoff</i>	10 mm
Velocidad transversal	50 mm/s
Eficiencia de deposición (DE)	68 %
Velocidad promedio de partícula	528 ± 116 m/s
Dureza Vickers del recubrimiento	129.2 ± 7.6 kgf/mm ²

4.1.5. Temperatura de partículas

Es necesario estimar la temperatura de impacto de la partícula o temperatura inicial, al ser uno de los parámetros de entrada para la simulación numérica y que de esta dependerá la evolución del esfuerzo de fluencia según la ecuación 2.2 del modelo de plasticidad de Johnson–Cook.

El proceso de impacto de la partícula ocurre en la escala de los nanosegundos por lo que no se dispone de la tecnología necesaria para observar los cambios de temperaturas en esta acotada ventana de tiempo, por lo que es necesario ocupar herramientas de simulación computacional para estimar estas temperaturas. Schmidt [20] en su investigación titulada ‘*From Particle Acceleration to Impact and Bonding in Cold Spraying*’ resume algunos modelos y métodos computacionales de *Cold Spray* para describir condiciones de impacto de las partículas.

Para fines de esta simulación se consideró homogénea la temperatura de la partícula a lo largo de su radio para condiciones iniciales en los cálculos de impacto, como lo propone Schmidt [20].

La Figura 4.4 muestra la temperatura calculada de la partícula al momento del impacto, según la temperatura y la presión del nitrógeno como gas de proceso, para una partícula de diámetro $25 \mu m$ de cobre, con la inyección del polvo a una distancia de $20 mm$ antes de la garganta de la tobera.

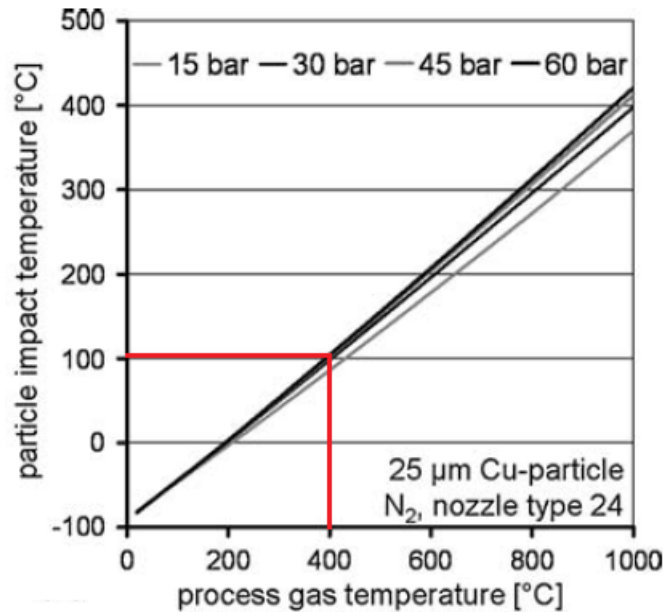


Figura 4.4: Temperatura de impacto de partículas en función de la presión y temperatura del gas [20].

Con las condiciones experimentales con las que se trabajó en esta memoria, se tiene que la temperatura medida del gas en la zona de estancamiento de la tobera es $400 \text{ }^\circ\text{C}$, por lo tanto, se intersectó esta temperatura en el eje de las abscisas en el gráfico de la Figura 4.4. También se tiene que la presión del gas en el mismo punto era 3.45 MPa , equivalente a 34.5 bar , por tanto, se escogió la curva 30 bar y se intersectó con la línea de temperatura del gas, lo cual arrojó una temperatura de impacto de las partículas de $100 \text{ }^\circ\text{C}$ aproximadamente.

Se debe destacar, que si bien el material de la partícula es el mismo que del estudio de Schmidt [20], varía el tamaño de partícula, en nuestro caso este diámetro es $11 \mu m$. Esto sin duda afectará la temperatura inicial que tendrá la partícula, sin embargo, dado al acotado número de investigaciones que estiman estas temperaturas iniciales de las partículas, se debe extrapolar estas estimaciones a nuestras condiciones experimentales. Así, la temperatura inicial de las partículas usada para la simulación fue $100 \text{ }^\circ\text{C}$.

4.1.6. Temperatura del sustrato

En el trabajo realizado por Perry [33] no se indica la temperatura del sustrato al momento del impacto de las partículas de cobre sobre este. Al ser la temperatura del sustrato un parámetro que afecta directamente la deformación del mismo, donde mientras más sea esta temperatura mayor será la deformación [24], por eso se debió encontrar una forma de estimar la temperatura del sustrato. Para este fin, se utilizó la investigación de Legoux [34], donde empíricamente obtuvo relaciones entre la temperatura del gas que impulsa a las partículas y la temperatura de superficie del sustrato al momento del impacto.

Legoux [34] demuestra que la temperatura del sustrato es directamente proporcional a la temperatura del gas en la tobera. Para el estudio de Legoux, se utilizó Nitrógeno como gas a una presión de 0.62 MPa. La temperatura del gas fue variada desde la temperatura ambiente hasta los 500°C. Los cambios en la temperatura del sustrato durante el proceso de deposición fueron medidos usando una cámara infrarroja. Las estimaciones se hicieron con los promedios obtenidos del impacto de partículas de Aluminio, Zinc y Estaño.

La Figura 4.5 muestra los resultados del estudio de Legoux, donde se presenta la variación de la temperatura de sustrato al momento del impacto (T_{imp}) en función de la temperatura del gas (T_{gas}).

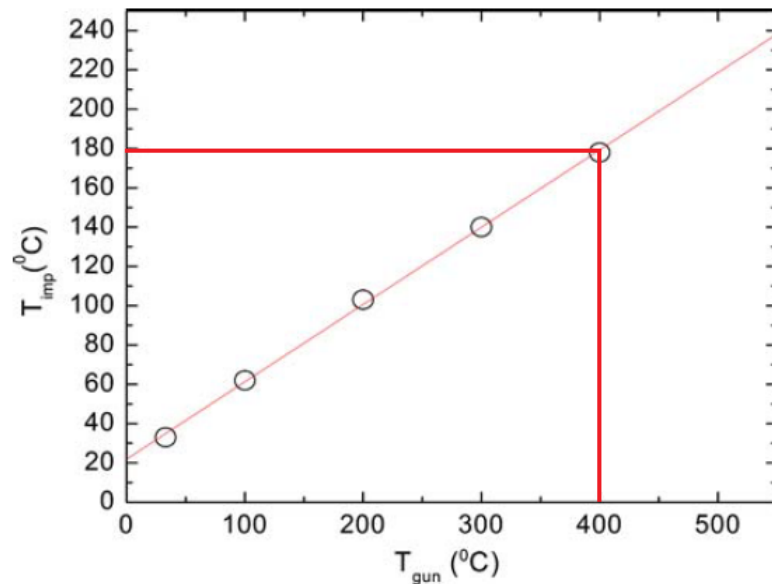


Figura 4.5: Gráfico de temperatura del sustrato en función de la temperatura del gas [34].

De los datos experimentales en los cuales se basó esta memoria (Tabla 4.2) se tiene que la temperatura del gas empleada fue 400 °C, por consiguiente en el gráfico de la Figura 4.5 se intersectó esta temperatura y se obtiene una aproximación para la temperatura del sustrato de 180 °C, la cual fue utilizada para las simulaciones numéricas.

4.1.7. Resumen parámetros de simulación

A continuación se presenta una tabla resumen con todos los parámetros que fueron utilizados para la simulación del impacto de partículas.

Tabla 4.3: Parámetros de impacto.

	Parámetro	Valor	Unidad	Referencia
General	Densidad	8.9×10^3	kg/m^3	[23]
	Calor específico	383	$J/kg \cdot K$	[23]
	Temperatura de fusión	1356	K	[23]
	Conductividad térmica	386.5	$W/m \cdot K$	[23]
Elástica	Módulo de corte	44.7	GPa	[23]
Johnson-Cook	A	90	MPa	[23]
	B	292	MPa	[23]
	C	0.025	-	[23]
	n	0.31	-	[23]
	m	1.09	-	[23]
	Temperatura de referencia	298	K	[23]
	Factor de normalización	1	$1/s$	[23]
Mie-Grüneisen	Velocidad del sonido	3940	m/s	[23]
	Γ_0	2.02	-	[23]
	s	1.489	-	[23]
Impacto	Temperatura de partículas	100	$^{\circ}C$	[33], [20]
	Temperatura del sustrato	180	$^{\circ}C$	[33], [34]
	Velocidad partículas	528	m/s	[33]

4.1.8. Determinación del número de partículas

Para determinar el número total de partículas fue necesario llevar a cabo un modelo inicial, el cual consistió en la simulación de una partícula de cobre que incide sobre el sustrato del mismo material, utilizando el programa ABAQUS en su módulo *Explicit* con todos los parámetros anteriormente expuestos. Este primer modelo permitió conocer el radio de deformación que genera el impacto de una partícula sobre el sustrato.

Con esta primera simulación, se definió el radio de deformación que causa el impacto de la partícula. Este radio está delimitado por una deformación plástica equivalente (PEEQ) de 0.009, es decir, 0.9 % de deformación.

Este límite de PEEQ (0.9 %) para definir el radio de deformación, fue escogido según el ensayo de tracción realizado por Ichikawa [35] a un recubrimiento de cobre obtenido por *Cold Spray* y este se muestra en la Figura 4.6. De esta curva se puede inferir que la deformación plástica comienza aproximadamente a 0.9 % de deformación, que es el momento cuando cambia la pendiente de la curva.

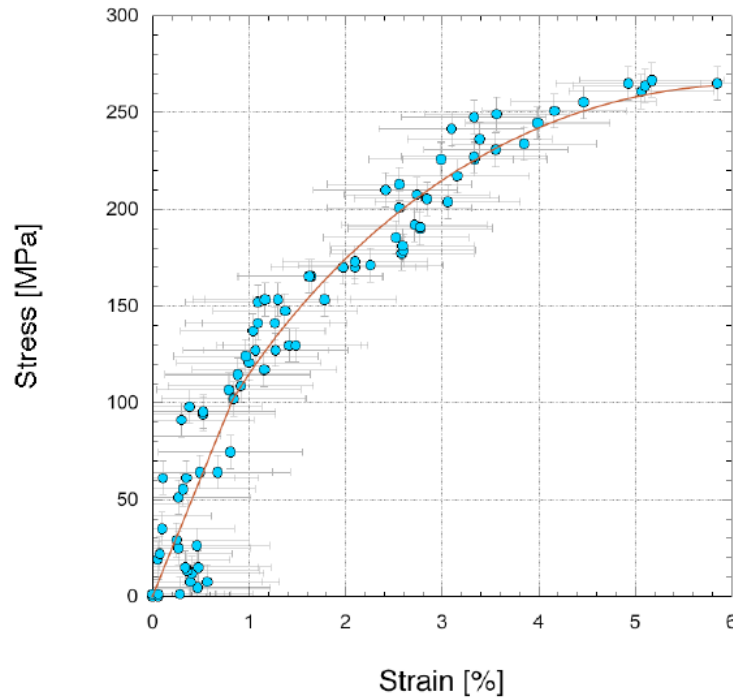


Figura 4.6: Curva de esfuerzo-deformación para un recubrimiento de cobre [35].

Este radio define la zona donde el impacto de la partícula afecta de manera significativa a la deformación. En otras palabras, la zona que esté dentro de este radio se deformará debido a la acción de la partícula que incidió. Y se consideró para fines de las simulaciones computacionales, que por fuera de este radio, el impacto de la partícula ya no afecta a la deformación.

Por lo tanto, el número de partículas a simular debe ser tal, que el impacto de la última partícula ya no esté afectando a la deformación de la capa de las primeras partículas que impactaron. Para esto se hicieron cálculos geométricos con las medidas de la partícula deformada y el radio de deformación, para así determinar cuántas partículas podían ser depositadas en esta área.

Los cálculos geométricos para determinar el radio (Figura 4.7) y las dimensiones de la partícula deformada (Figura 4.8), fueron realizados utilizando el programa de procesamiento de imagen digital *ImageJ*. En este programa se ingresaron las medidas ya conocidas del sustrato, y este *software* entregó como resultado las dimensiones que se buscaban.

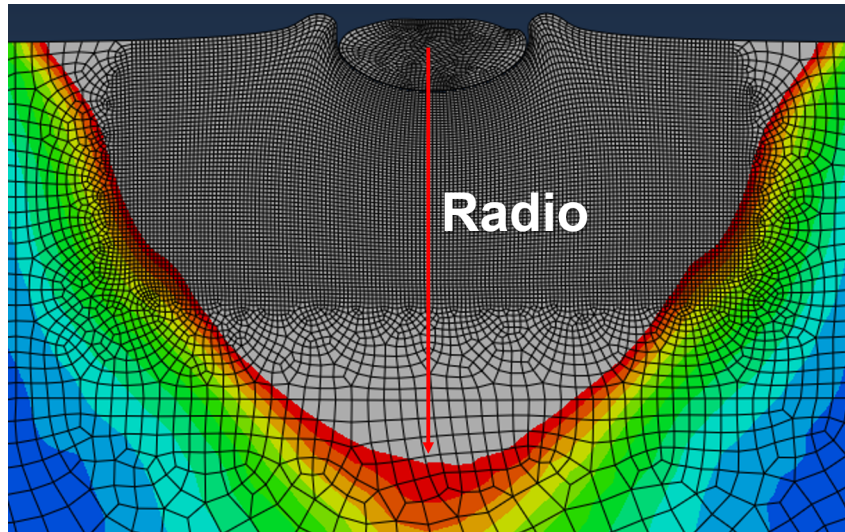


Figura 4.7: Esquema del radio de deformación. Elaboración propia

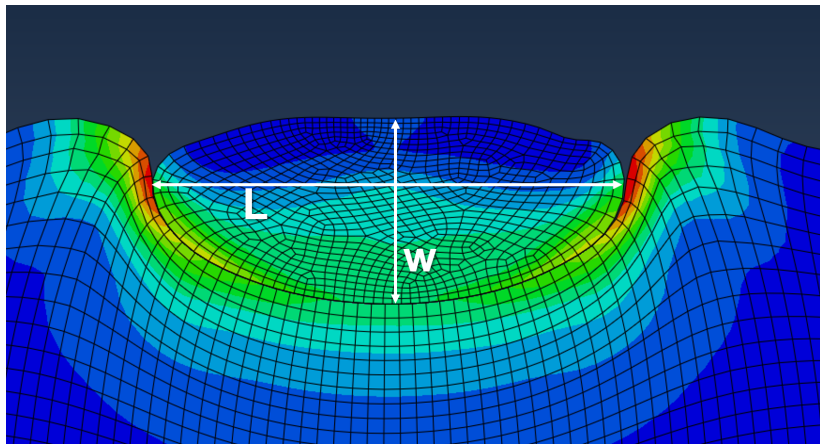


Figura 4.8: Dimensiones partícula deformada. Elaboración propia.

Luego, se estimó el número de partículas necesarias para rellenar cada eje y así determinar el número 'M' de partículas que cubren esta área. Finalmente, para calcular el número 'N' de partículas a simular se debió considerar la eficiencia de adherencia (68%). Así, el número a simular inicialmente será:

$$N = \frac{M}{0.68} \quad (4.1)$$

4.1.9. Sensibilidad de malla

Siguiendo con el desarrollo del modelo de una partícula realizado en la etapa anterior, se realizó un análisis de sensibilidad de malla para escoger el tamaño adecuado de esta, para el modelo definitivo que considera el número total de partículas.

Para este análisis, se siguieron recomendaciones de publicaciones que tratan sobre simulaciones computacionales de *Cold Spray*, en las cuales los tamaños de los elementos varían típicamente entre 1/20 a 1/50 del diámetro de partícula (ϕ_p) [23], [31].

La Tabla 6.1, en la sección de resultados, presenta el resumen de los resultados obtenidos de este análisis, donde la variable estudiada fue el promedio de la deformación plástica equivalente (PEEQ) de la partícula. Esta variable es la estudiada ya que los resultados de simulación serán en cuanto al PEEQ sufrido por el recubrimiento, y por lo tanto, para escoger el tamaño de elemento de malla adecuado se debió considerar tanto el error porcentual entre un tamaño y el siguiente, así como también que no se requirieran recursos computacionales tan significativos para que la simulación fuese viable.

Para calcular el error porcentual entre una tamaño de malla y el siguiente se empleó la fórmula:

$$Error \% = \frac{|PEEQ_{i+1} - PEEQ_i|}{PEEQ_i} \cdot 100 \% \quad (4.2)$$

donde $i = \{ \phi_p/10, \phi_p/20, \phi_p/25, \phi_p/30, \phi_p/35, \phi_p/40 \}$.

4.1.10. Simulación en ABAQUS

Recapitulando, se debió simular el impacto de N partículas esféricas de cobre sobre un sustrato de cobre, en capas de 4 partículas cada una. Las partículas son esféricas de diámetro de 11 μm y con una velocidad de impacto aproximada de 528 m/s . El sustrato para la simulación fue considerado como un rectángulo, cuyo largo es 17 veces el diámetro de la partícula y su espesor 6 veces el diámetro. Lo anterior, se muestra la Figura 4.9, el cual sólo es un esquema ilustrativo de la situación y no presenta la cantidad total de partículas.

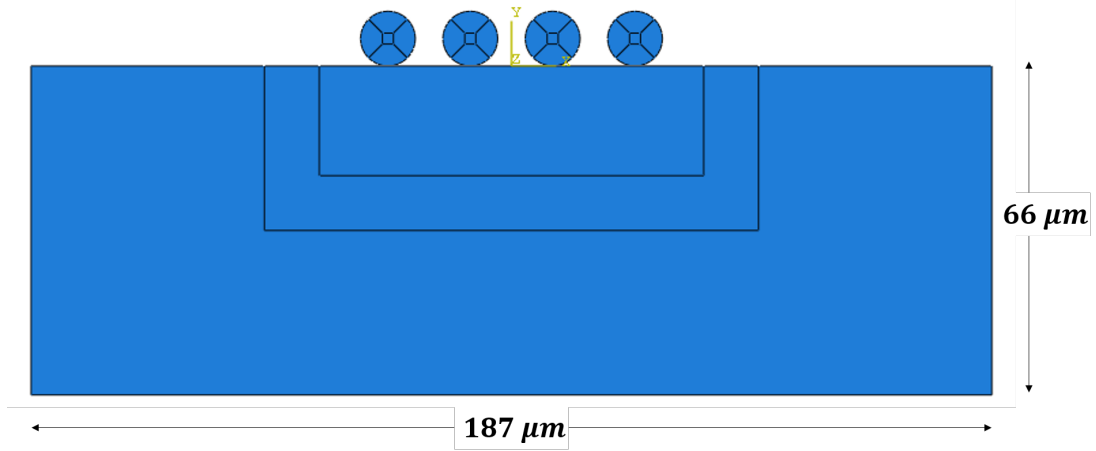


Figura 4.9: Esquema con medidas del sustrato. Elaboración propia.

Interacciones de contacto

Entre los algoritmos de ABAQUS/*Explicit* para modelar interacciones de contacto, se encuentra el de ‘*General Contact*’ y fue el utilizado para simular las interacciones entre partícula-sustrato, partícula-partícula y sustrato-sustrato.

Luego, se tienen tres propiedades de contacto: tangencial, normal y térmico. En el comportamiento tangencial, para modelar la fricción entre los cuerpos participantes, se escogió la formulación de la fricción como tipo penalización, la cual utiliza el modelo clásico isotrópico de fricción de Coulomb. El coeficiente de roce es 0.3 para interacción de Cu-Cu, según Xie [23].

Para el comportamiento normal, se considera la relación de contacto *pressure-overclosure*, escogiendo *Hard Contact* (contacto duro) como modelo. En este comportamiento, también se definen dos relación de contacto de ‘Separación’ y ‘Adhesión’, las cuales en un inicio permitieron simular la eficiencia de deposición de los polvos sobre el sustrato. Así con la condición de ‘Separación’, se permitió a las partículas, que en un experimento real rebotarían, sólo chocar contra el sustrato, separarse de este y no interactuar con las partículas que vendrían luego de esta. Mientras que con la condición ‘Adhesión’, las partículas chocan y se quedan adheridas al sustrato. Cabe destacar, cada partícula sólo puede tener una de estas condiciones.

Para el comportamiento térmico, se escoge generación de calor ‘*Heat generation*’. Ambos parámetros de la fracción de energía disipada por fricción o corriente eléctrica que es convertida en calor, y la fracción de calor distribuida a la superficie esclava es dejada con sus valores por defecto, es decir, 1.0 y 0.5 respectivamente.

A continuación se muestra una tabla resumen con las propiedades de interacción según cada tipo de comportamiento. Estas propiedades fueron utilizadas para los contactos de tipo partícula-sustrato, partícula-partícula y sustrato-sustrato.

Tabla 4.4: Propiedades de interacción. Elaboración propia.

		Propiedades de interacción
Interacción de contacto: <i>General Contact</i>	Comportamiento Tangencial	Formulación de fricción: Penalización Coeficiente de roce: 0.3
	Comportamiento Normal	Relación de contacto: <i>Hard Contact</i> Permitir separación: Sí
	Comportamiento Térmico	<i>Heat generation</i> Fracción de energía disipada: Por defecto (1.0) Fracción de calor distribuida a la superficie: Por defecto (0.5)

Condiciones de borde

El sustrato en la realidad presenta un largo mucho mayor que su espesor, por lo tanto se puede considerar de largo infinito. De esta manera se impusieron las condiciones de bordes de empotrado en tres de los extremos del sustrato como lo ilustra la Figura 4.10.

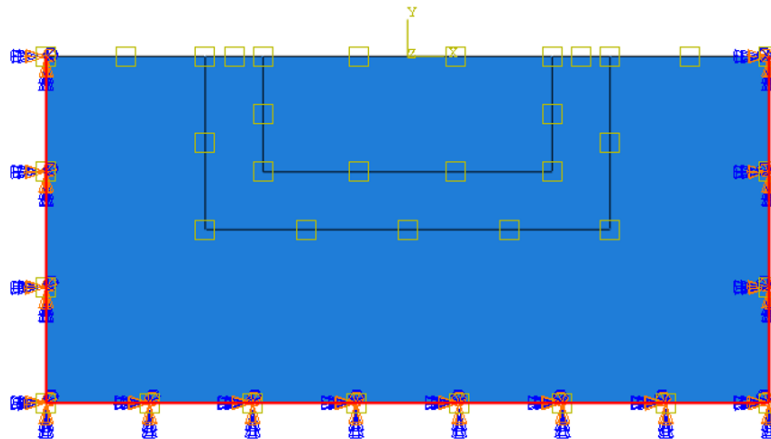


Figura 4.10: Esquematación de las condiciones de bordes aplicadas. Elaboración propia.

Condiciones iniciales

Las condiciones iniciales han sido explicitadas en secciones anteriores y en la Tabla 4.5 estas han sido resumidas.

Tabla 4.5: Condiciones iniciales. Elaboración propia.

	Partícula	Sustrato
Temperatura inicial	373 <i>K</i>	453 <i>K</i>
Velocidad inicial	528 <i>m/s</i>	-

Tipo de elemento

La situación a simular incluye un calentamiento significativo debido a la deformación plástica del material que, a su vez, cambia las propiedades del material. Para este tipo de situaciones ABAQUS/ *Explicit* tiene una opción de un análisis de estrés térmico completamente acoplado (*Fully coupled thermal-stress analysis*) y acople de temperatura-desplazamiento (*coupled temperature-displacement*) para obtener tanto las soluciones térmicas como mecánicas. En específico, para esta simulación se escogió el tipo (*coupled temperature-displacement*).

Además, el tipo de elemento escogido fue CAX4RT (*a 4-node thermally coupled axisymmetric quadrilateral, bilinear displacement and temperature, reduced integration, viscoelastic hourglass control*), el cual define un elemento de malla del tipo cuadrilátero.

Control de mallado

A ambas partes, sustrato y partículas, se les asignó la técnica de mallado libre (*Quad-Free*). También se utilizó el algoritmo del programa que minimiza la transición de la malla (*minimize the mesh transition*) para así reducir la distorsión de la malla cuando la malla cambia de una malla gruesa a una fina.

Tamaño de malla

Como se comentó anteriormente el tamaño de malla usado es $\mathcal{O}_p/30$ para la partícula y la parte central del sustrato (zona fina). Además de este tamaño, se incluyen dos mas que representan el exterior del sustrato (zona gruesa) y zona de la transición entre esta zona fina y la zona gruesa. Esto para obtener resultados más precisos sin ocupar grandes recursos computacionales.

La Figura 4.11 presenta un diagrama con las zonas del sustrato y la Tabla 4.6 especifica el tamaño de malla para cada una.

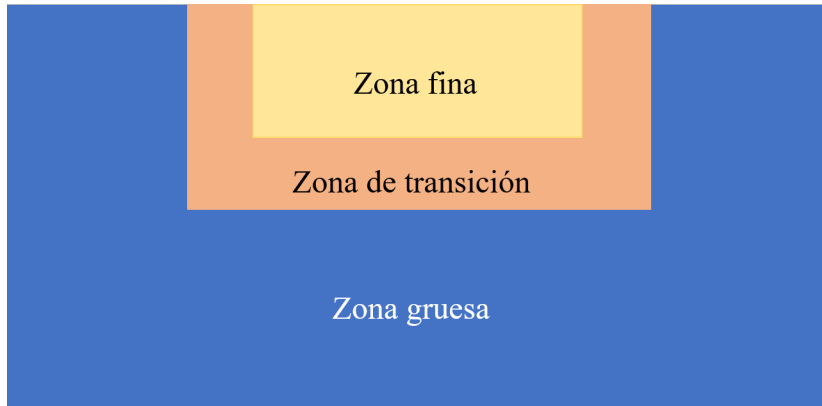


Figura 4.11: Zonas de mado del sustrato. Elaboración propia.

Tabla 4.6: Tamaño de mado y medidas del sustrato. Elaboración propia.

Zona	Tamaño mado	Dimensiones (<i>largo</i> \times <i>ancho</i>)
Fina	$\varnothing_p/30$	$7 \varnothing_p \times 2 \varnothing_p$
Transición	$4 \varnothing_p /30$	$9 \varnothing_p \times 3 \varnothing_p$
Gruesa	$16 \varnothing_p /30$	$17 \varnothing_p \times 6 \varnothing_p$

Malla adaptativa

Durante el proceso de *Cold Spray* se generan deformaciones significantes, lo que en muchos casos dificulta la convergencia del modelo numérico. Para ayudar en este problema, se utilizó una malla adaptativa con la opción de ABAQUS de *ALE adaptive meshing*. Esta herramienta mantiene una malla de calidad, bajo deformaciones severas del material simulado, permitiendo que la malla se mueva y adapte, la mantiene topológicamente similar, es decir, no crea ni elimina nodos, solo los redistribuye.

Esta herramienta se aplicó a las mallas de las partículas participantes y a las áreas de zona fina y de transición del sustrato (Figura 4.11).

Modelo por capas

Para solucionar posibles problemas de no convergencia del modelo, se decidió hacer simulaciones independientes entre capas. Esto consistió en que primero se simuló la primera capa de 4 partículas, como lo muestra la Figura 4.12. Cuando la simulación de este primer impacto finalizó, se obtuvo un promedio de la deformación plástica sufrida por el sustrato y partículas en conjunto, y luego este promedio se ingresó como una condición inicial a la siguiente iteración.

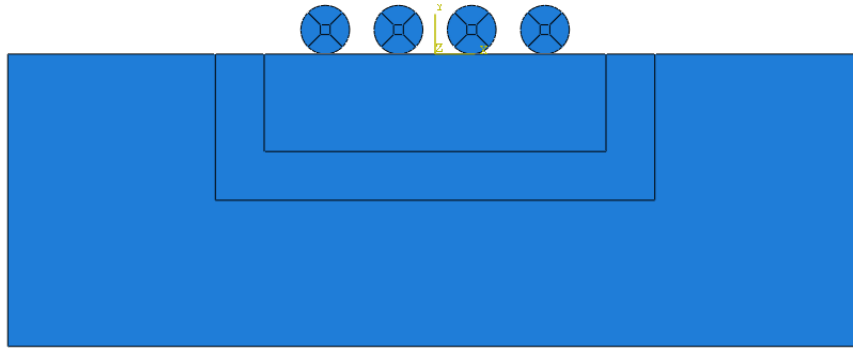


Figura 4.12: Primera capa de partículas. Elaboración propia.

La siguiente iteración consistía en simular la segunda capa de partículas, igualmente compuesta por 4, pero esta vez con un sustrato pre-deformado y un perfil del sustrato que representaban el dejado por las partículas anteriormente depositadas. Así se continuaba hasta completar en número N de partículas calculado.

Este modelo por capas se puede plasmar de manera conceptual en la Figura 4.13, donde se señalan los *inputs* y resultados de cada iteración.

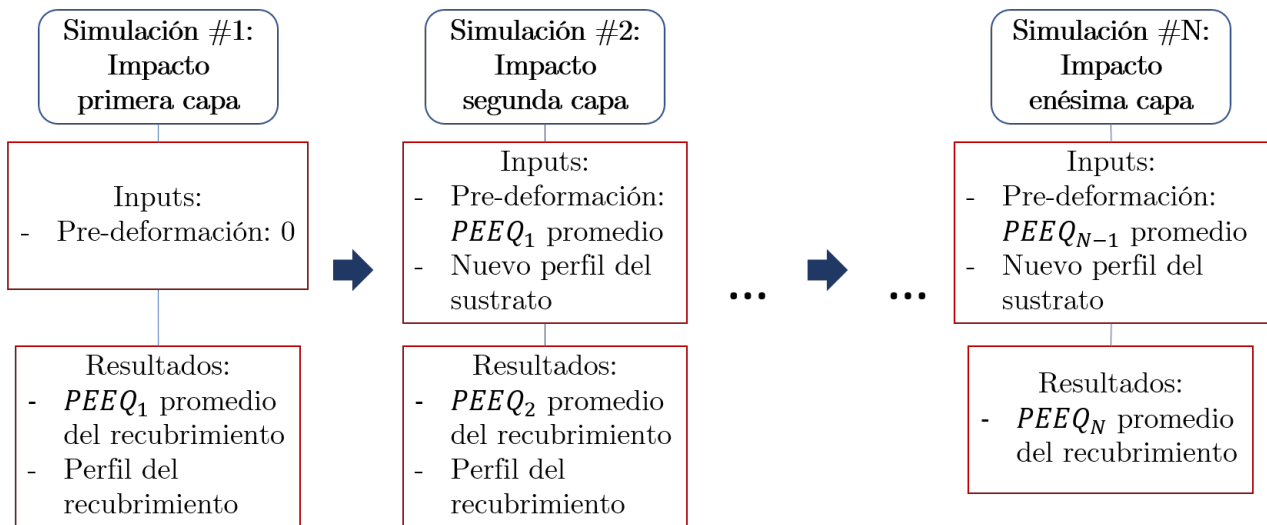


Figura 4.13: Mapa conceptual modelo por capas. Elaboración propia.

En la Figura 4.14 se presentan todos los modelos simulados, hasta llegar a la última capa de partículas. La sección destacada en rojo, es a la cual se le asignaba la condición inicial de pre-deformado y tenía como valor el promedio de la deformación plástica equivalente (PEEQ) resultante de la deposición de la capa anterior. Los valores de promedio de PEEQ de cada capa son presentados en la Tabla 6.9.

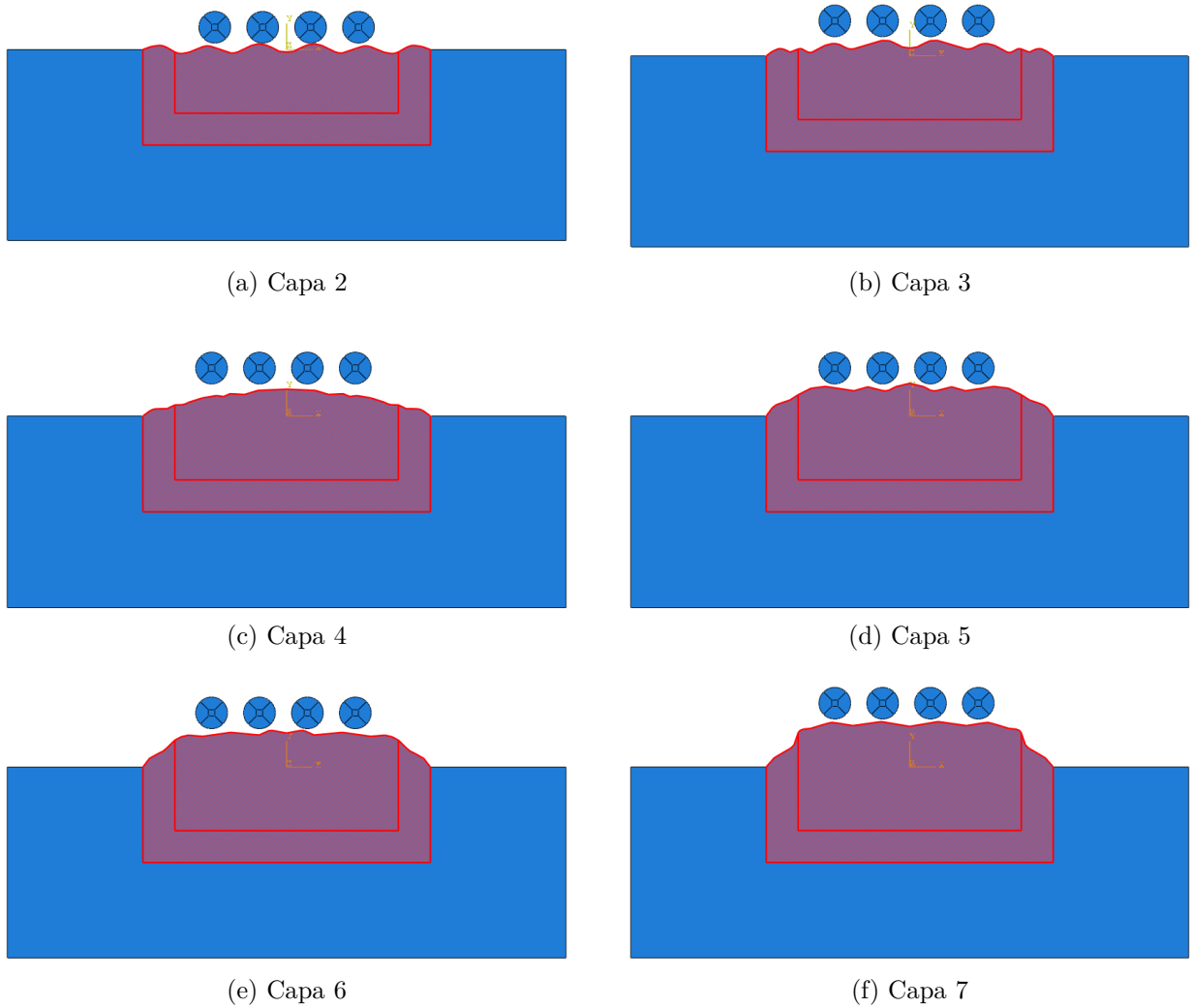


Figura 4.14: Configuración inicial para el modelo de cada capa simulada. Elaboración propia.

Programación del código

Posteriormente, se programó el código de la simulación que integró el número final de partículas a simular, junto con su tamaño y variables del proceso. Para esto se utilizó el software de programación Python, con el cual trabaja el programa ABAQUS. Este código integra todos los parámetros mencionados en los puntos anteriores, para así generar un modelo del problema planteado en esta memoria en el *software* ABAQUS. Este código está adjunto en el Anexo B para mayor detalle.

Post procesamiento

Una vez que las simulaciones en el programa ABAQUS fueron completadas, se debían obtener los resultados de deformación plástica equivalente (PEEQ) del recubrimiento. Para todas las capas, a excepción de la última, el valor de deformación plástica equivalente fue medido considerando la sección formada por las partículas deformadas y parte del sustrato. Esta selección de elementos puede ser observada en las Figuras 6.6, 6.9, 6.12, 6.15, 6.18, 6.21, del capítulo 6 de resultados.

Cabe destacar que la medición de PEEQ de una capa era el *input* de la simulación de la siguiente capa. Y el fin de estos parámetros de entrada de cada simulación, era representar las condiciones a las que se enfrentarían la nueva película de capas al impactar. Luego, estas condiciones eran una capa de partículas previamente depositada, las que ya se encontraban deformadas, al igual que el sustrato. Por lo tanto, se debía conocer el promedio de deformación plástica equivalente de la sección que abarcaba ambos elementos, partículas y sustratos deformados.

Para la medición de deformación plástica de la última capa, es decir, la deformación plástica que iba a representar al recubrimiento final, se intentó representar la sección transversal de medición del ensayo de dureza Vickers, asumiendo una marca de indentación de entre 40 a 50 μm . Se intentó abarcar la mayor cantidad de elementos posibles, y que los recursos computacionales lo permitieran, para que ésta área fuese lo más representativa posible.

4.2. Análisis de datos: Cálculo de dureza

La simulación computacional entregó resultados de la deformación plástica equivalente (PEEQ) del recubrimiento final, valores con los cuales se estimó el esfuerzo de fluencia (σ_y) del material con la ecuación 2.2 del modelo de Johnson-Cook. Los parámetros de entrada de esta ecuación son los de la Tabla 4.1 y 6.9. Además, la medición de dureza se consideró a temperatura ambiente y a una tasa de deformación de plástica ($\dot{\epsilon}$) igual a 1 (1/s). Luego las ecuaciones a resolver fueron:

$$\sigma_y = [90 + 292 \cdot PEEQ^{0.31}] \cdot [1 + 0.025 \cdot \ln(1/1)] \cdot [1 - (T^*)^{1.09}] \quad (4.3)$$

$$T^*[K] = \frac{298 [K] - 298 [K]}{1356 [K] - 298 [K]} \quad (4.4)$$

A continuación, para calcular la dureza del recubrimiento se utilizaron las relaciones para el cobre propuestas por Krishna [29], descritas en la sección de antecedentes.

Para escoger cual relación entre las tres propuestas por el autor, según la razón entre el esfuerzo último y el esfuerzo de fluencia (σ_{UTS}/σ_y), se calcularon estos esfuerzos por separado con el dato experimental de dureza (Tabla 4.2), utilizando las ecuaciones generales 2.16 y 2.17:

$$\sigma_y[MPa] = 2.874 \cdot VHN \quad (4.5)$$

$$\sigma_{UTS}[MPa] = 3.353 \cdot VHN \quad (4.6)$$

donde la dureza VHN , en este caso, es 129.2 kgf/mm^2 .

Con los datos de esfuerzo último y esfuerzo de fluencia, se calculó la razón σ_{UTS}/σ_y .

Finalmente, se debió utilizar la ecuación 2.13 para determinar la dureza del recubrimiento simulado.

Capítulo 5

Validación numérica

La publicación que será la guía de esta validación numérica fue la realizada por Jing Xie [23], titulada ‘*Simulation of the Cold Spray Particle Deposition Process*’, cuyo objetivo es investigar el proceso *Cold Spray*, mediante la deposición de partículas sobre el sustrato utilizando métodos numéricos. Para esto se simulan impactos de partículas esféricas de Aluminio, sobre un sustrato Aluminio, en diferentes condiciones iniciales utilizando cuatro métodos numéricos: Lagrangiano, AL, SPH y CEL. Para esta simulación se utiliza el programa ABAQUS en su módulo *Explicit*.

Para fines de la validación numérica se compararán los resultados de esfuerzo de Von Mises y deformación plástica equivalente (PEEQ) de la combinación partícula y sustrato de Aluminio, utilizando el método Lagrangiano.

5.1. Geometría

La geometría utilizada de la partícula (D_p) es esférica de diámetro $25 \mu m$, con un modelo axisimétrico bidimensional (2D). El sustrato es modelado como un cilindro cuyo radio y altura es 10 veces el radio de la partícula. Lo anterior puede ser observado en la Figura 5.1.

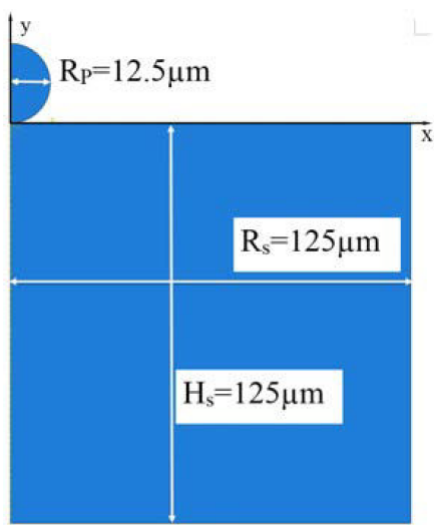


Figura 5.1: Esquema de la geometría del modelo axisimétrico 2D [23].

5.2. Material

Las propiedades y constantes del material Aluminio, utilizado tanto para la partícula como en el sustrato son presentadas en la Tabla 5.1.

Tabla 5.1: Propiedades del aluminio [23].

Propiedades	
Densidad ρ [kg/m^3]	2.7×10^3
Módulo de corte, G [GPa]	27
Conductividad térmica, λ [$W/m \cdot K$]	237.2
Calor específico, c [$J/kg \cdot K$]	898.
Fracción del calor perdido	0.9
Velocidad del sonido, c_o [m/s]	5,386
s	1.339
Coefficiente de Grüneisen, Γ_0	1.97
Esfuerzo de fluencia, A [MPa]	148.4
Constante de endurecimiento, B [MPa]	345.5
Exponente de endurecimiento, n	0.183
Tasa de deformación, C	0.001
Exponente de ablandamiento térmico, m	0.895
Temperatura de fusión, T_m [K]	916
Temperatura de referencia, T_0 [K]	293
Coefficiente de roce, μ	0.3

5.3. Interacciones

En este estudio se utilizó el algoritmo de ABAQUS ‘*contact pair*’ para modelar las interacciones de contacto entre la partícula-sustrato, partícula-partícula y sustrato-sustrato. Para modelar la relación de fricción entre la partícula y el sustrato se utiliza el modelo de fricción isotrópico de ‘Coulomb’.

5.4. Condiciones de borde

Se aplican 3 condiciones de borde mecánicas al modelo a simular. En la base del sustrato se aplica una del tipo empotrado (‘*encastre*’) que no permite el desplazamiento ni la rotación. Además, en la cara interior de la partícula y del sustrato se aplica la condición ‘XSYMM’ que establece al eje X como el eje de simetría del modelo. Estas condiciones de bordes pueden ser observadas en la Figura 5.2.

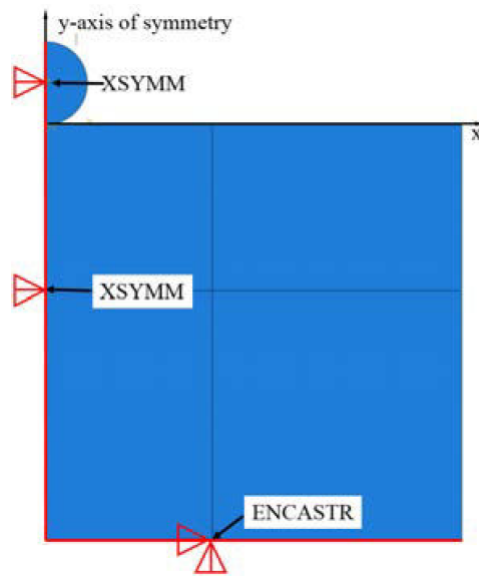


Figura 5.2: Esquema de las condiciones de borde del modelo axisimétrico 2D [23].

5.5. Mallado

El tipo de elemento utilizado es CAX4RT (*4-node thermally coupled axisymmetric quadrilateral, bilinear displacement and temperature, reduced integration, viscoelastic hourglass control*) (12). Además, la forma de los elementos es ‘*Structured Quad*’.

El tamaño del mallado de la partícula y el del cuadrado principal del sustrato es de $0.5 \mu m$ ($1/50 D_p$), lo cual se presenta en la Figura 5.3.

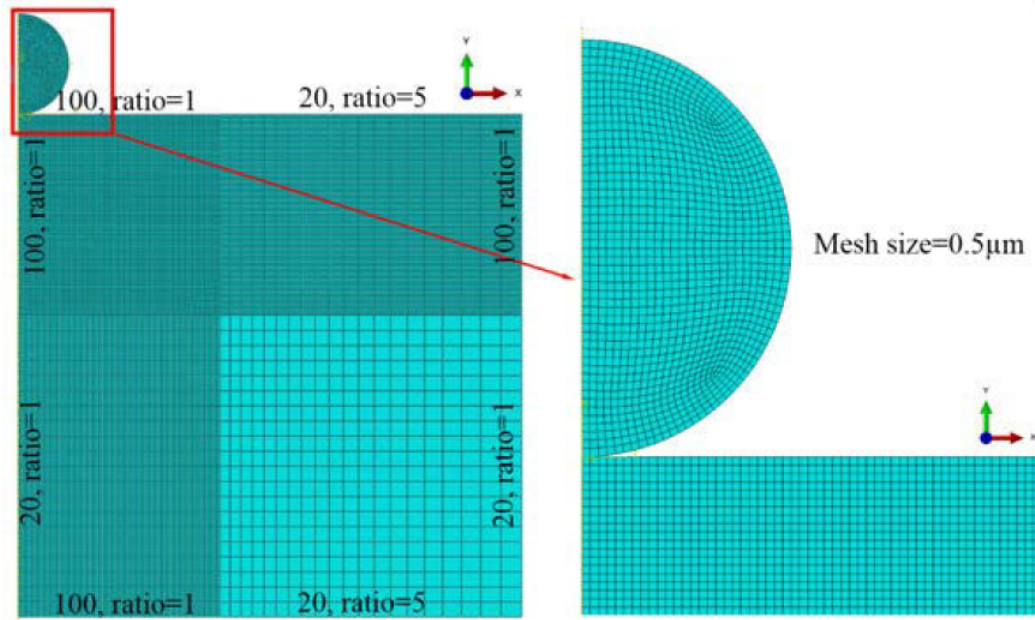


Figura 5.3: Detalles del mallado del modelo axisimétrico 2D [23].

5.6. Condiciones iniciales

La velocidad inicial de la partícula es de 500 m/s . La temperatura inicial de la partícula y del sustrato es 700 K .

5.7. Resultados y análisis

A continuación, se presentan los resultados obtenidos por Xie [23] en su publicación (Figuras 5.4 y 5.6) y las obtenidas al replicar la simulación con fines de la validación numérica. Los resultados a comparar son los de la evolución del esfuerzo de Von Mises y la deformación plástica equivalente (PEEQ) a lo largo del impacto de la partícula sobre el sustrato.

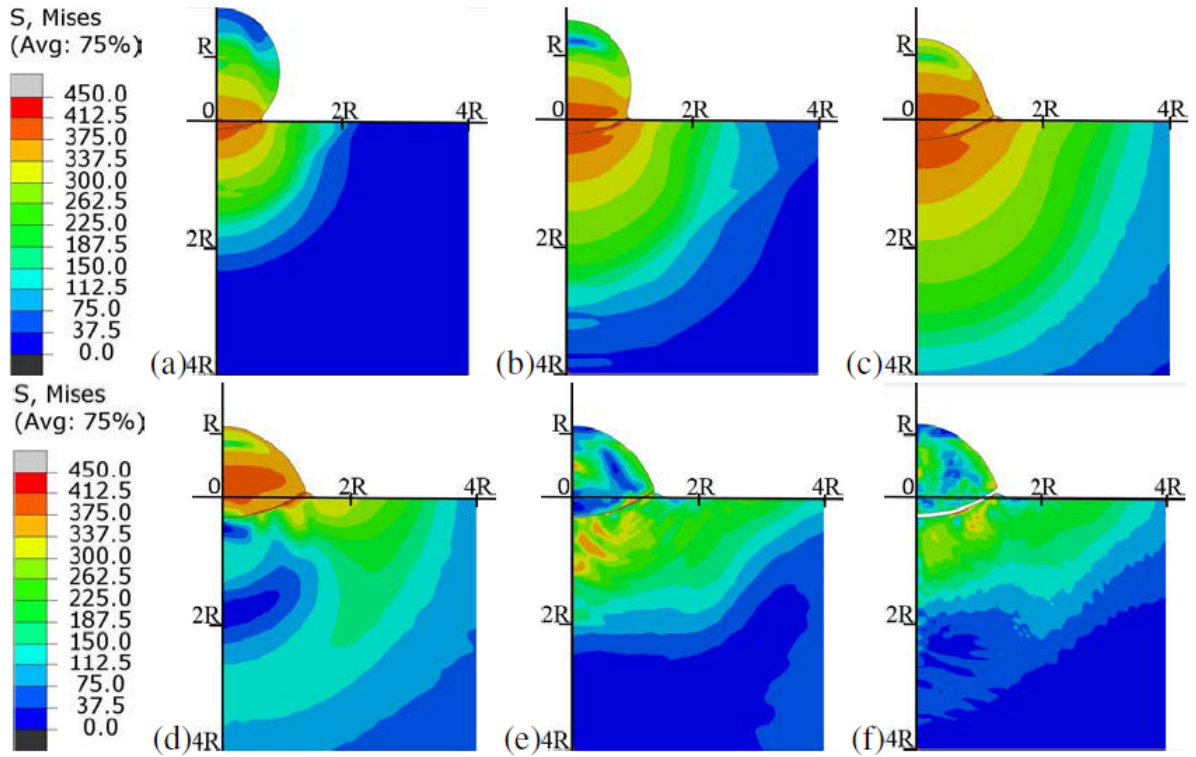


Figura 5.4: Esfuerzos de Von Mises. (a) 5 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 60 ns. [23].

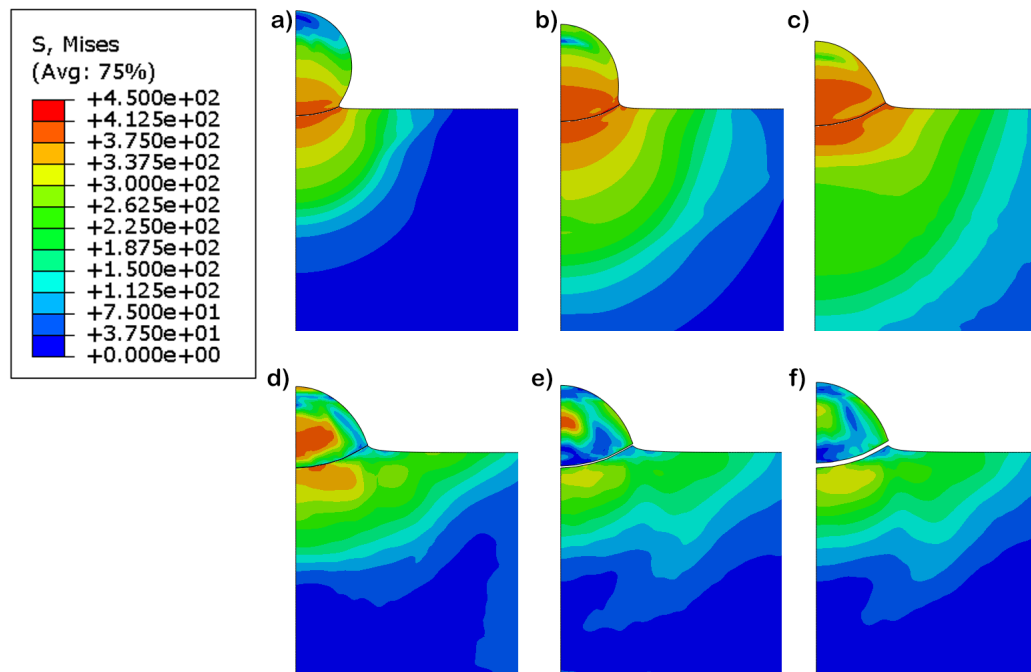


Figura 5.5: Esfuerzos de Von Mises. (a) 5 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 60 ns. Elaboración propia.

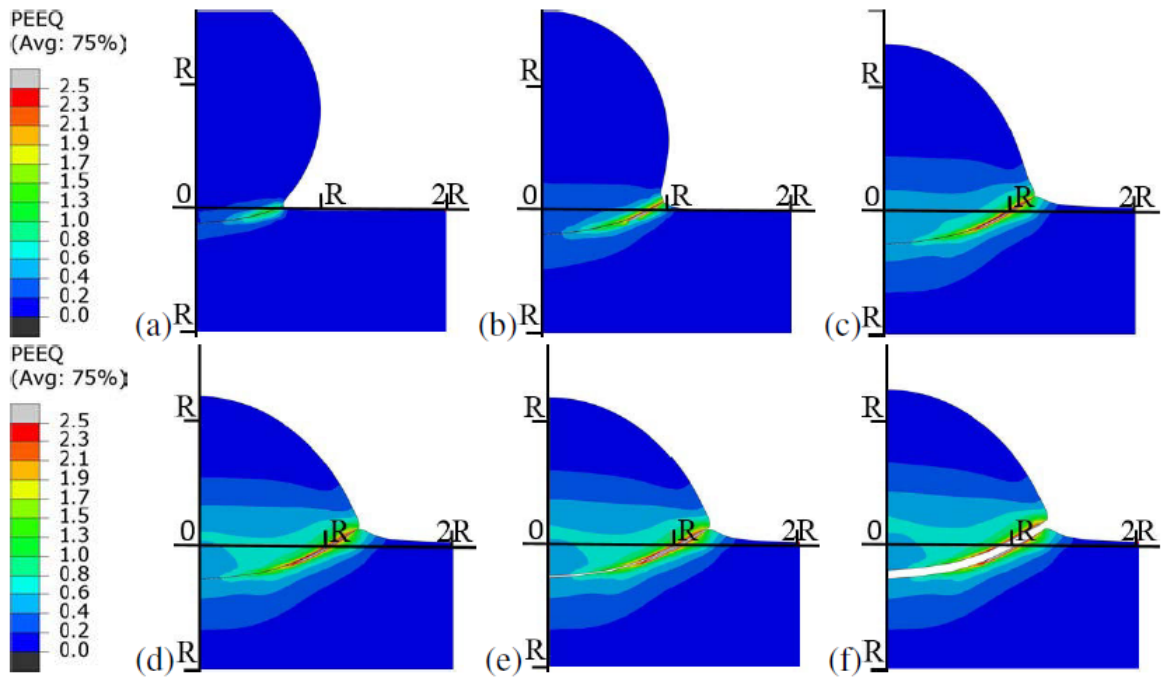


Figura 5.6: Evolución de la deformación plástica equivalente (PEEQ).
 (a) 5 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 60 ns. [23].

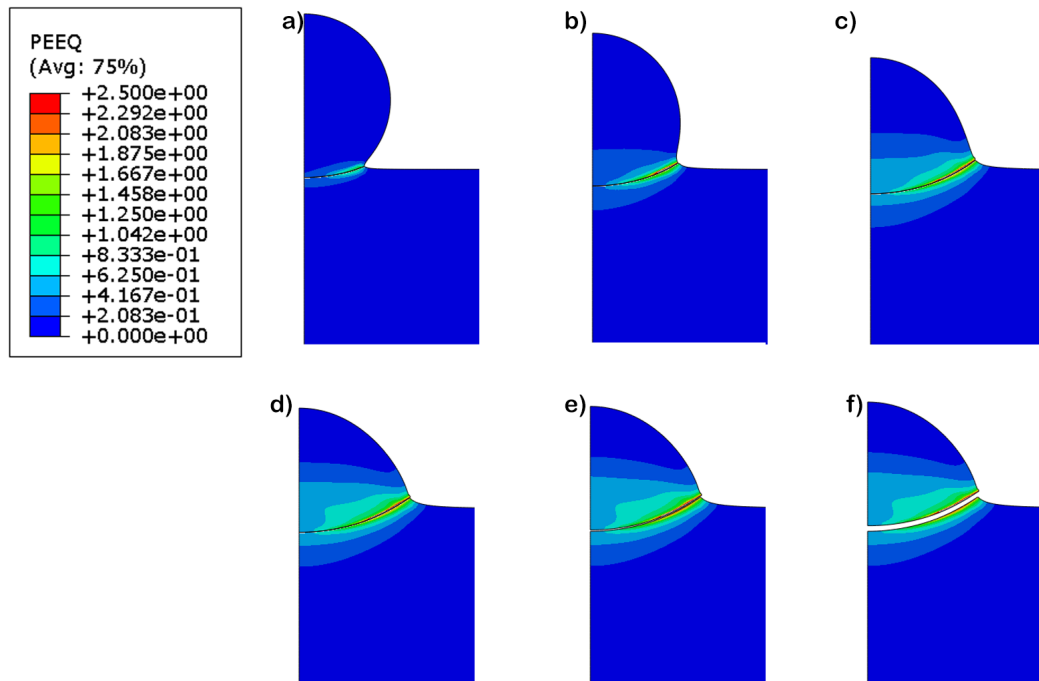


Figura 5.7: Evolución de la deformación plástica equivalente (PEEQ).
 (a) 5 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 60 ns. Elaboración propia.

La Figura 5.5 corresponde a los resultados de esfuerzo de Von Mises y la Figura 5.7 a resultados de PEEQ obtenidos en esta validación. En las figuras nombradas anteriormente se observa que la forma adquiridas por la partícula y el sustrato durante y luego del impacto, además de la distribución de esfuerzos sobre la partícula como el sustrato, son consistentes con las obtenidas por Xie [23] en las Figuras 5.4 y 5.6.

También, se tiene que para ambos resultados, esfuerzo de Von Mises y PEEQ, los órdenes de magnitud son similares. En específico, para el esfuerzo de Von Mises, Xie [23] obtiene valores en torno a los 410 MPa (Figura 5.4), mientras que en esta validación se obtienen valores entorno a los 450 MPa (Figura 5.5).

En cuanto a la deformación plástica equivalente se tiene en la Figura 5.6 valores cercano a los 2.5, es decir un 250% de deformación, al igual que en los obtenidos en la Figura 5.7, correspondiente a la validación.

Las diferencias de los resultados obtenidos en esta validación en comparación a los obtenidos por Xie [23], se podrían deber a que no todos los parámetros de simulación fueron explicitados por el autor, por lo tanto, para fines de esta validación se asumieron algunas condiciones, como por ejemplo no usar '*Distortion Control*', usar las opciones de '*constraint enforcement methods*' que vienen por defecto en el programa ABAQUS, entre otras, lo que podría haber alterado los resultados.

Capítulo 6

Resultados, Análisis y Discusiones

6.1. Número de partículas

El resultado de la primera simulación, que consistió en una partícula impactando sobre el sustrato, se muestra en la Figura 6.1. En esta imagen se puede observar el radio de deformación que causa el impacto de la partícula. Este radio está delimitado por una deformación plástica equivalente (PEEQ) de 0.009, es decir, 0.9 % de deformación.

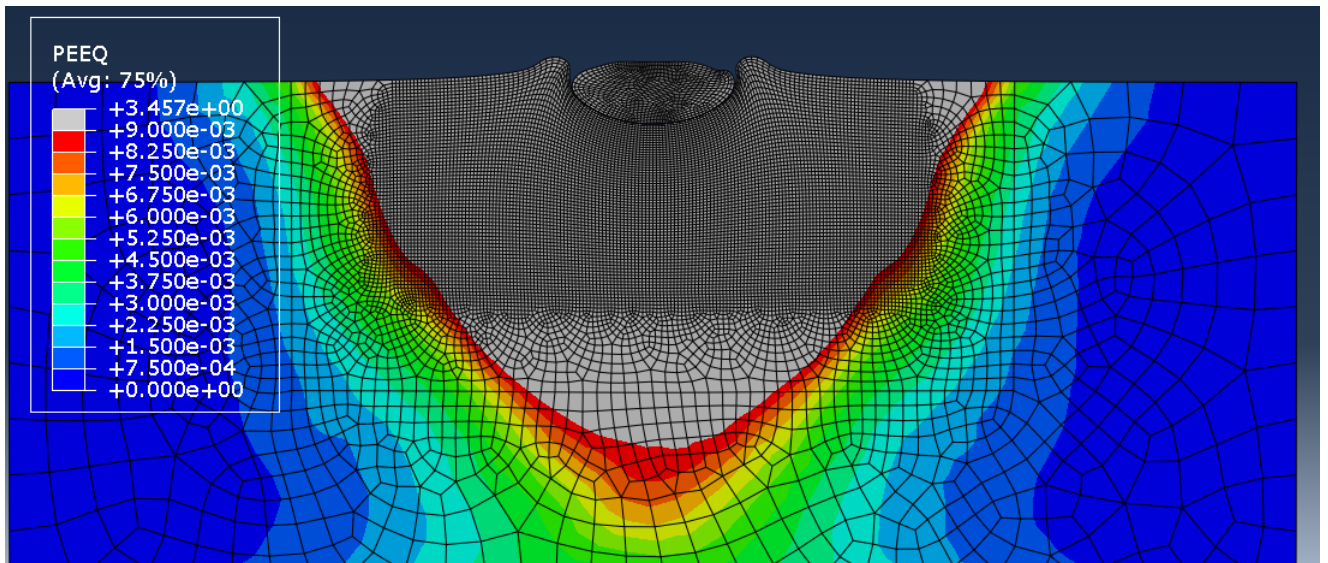


Figura 6.1: Resultado del modelo de 1 partícula. Elaboración propia.

Utilizando el programa de procesamiento de imagen se llegó a que el radio de deformación de la partícula sobre el sustrato es 0.038 mm como lo muestra la Figura 6.2. Mientras que las dimensiones de la partícula deformada (Figura 6.3) son $L = 0.017 \text{ mm}$ y $w = 0.007 \text{ mm}$.

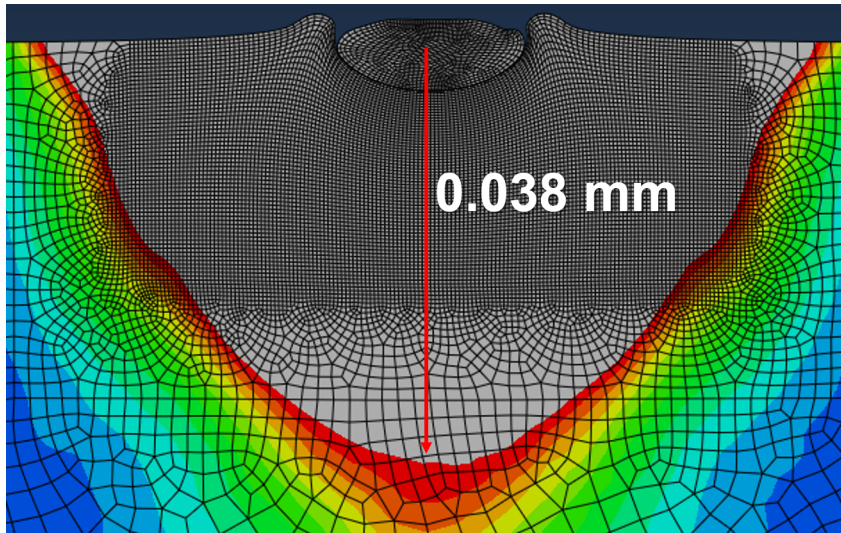


Figura 6.2: Radio de deformación. Elaboración propia

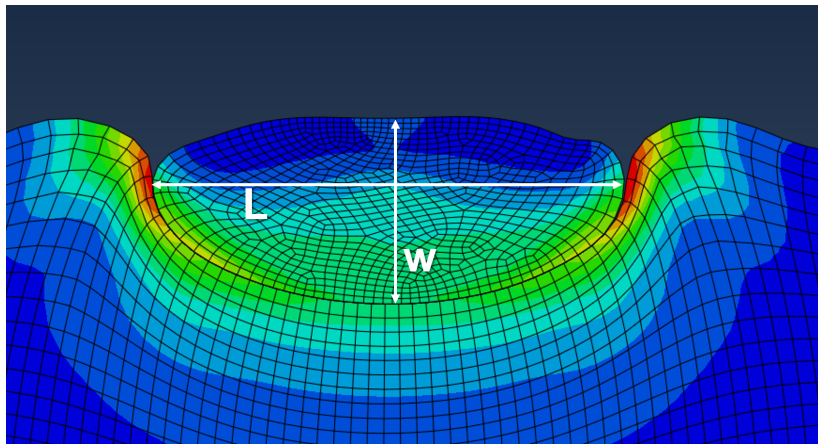


Figura 6.3: Dimensiones partícula deformada. Elaboración propia.

Así, se tiene que para rellenar el eje horizontal se necesitan 4 partículas, mientras que en el eje vertical 5 partículas. Finalmente el número de partículas que cubren esta área son aproximadamente 20. Y como se trabajó con una eficiencia de adherencia (68%), se debió simular alrededor de 30 partículas con el fin de que 20 quedaran adheridas al sustrato. Además, se estableció la simulación de 7 capas compuestas por 4 partículas cada una, lo que totalizó 28 partículas.

6.2. Resultados de análisis sensibilidad de malla

En la Tabla 6.1 se presentan los resultados del análisis de sensibilidad de malla realizado en la primera parte de la metodología para escoger el tamaño de malla adecuado para las simulaciones siguientes. La variable medida fue la deformación plástica equivalente (PEEQ), tanto el valor máximo detectado como el promedio simple de la partícula deformada. La diferencia porcentual fue calculada en base al promedio de PEEQ. El promedio simple de PEEQ fue calculado considerando la deformación sufrida por cada elementos de la partícula y parte del sustrato.

Tabla 6.1: Análisis de sensibilidad de malla. Elaboración propia.

Tamaño de elemento de malla	PEEQ máximo	PEEQ promedio	Diferencia porcentual
$\emptyset_p/10$	2.048	0.4559	-
$\emptyset_p/20$	2.782	0.5115	12.20
$\emptyset_p/25$	2.930	0.5519	7.89
$\emptyset_p/30$	3.457	0.5656	2.48
$\emptyset_p/35$	3.682	0.5346	5.47
$\emptyset_p/40$	3.499	0.5917	10.68

En la Figura 6.4 se gráfica las curvas de la evolución de la deformación plástica que sufrió la partícula al momento del impacto para cada tamaño de malla estudiado.

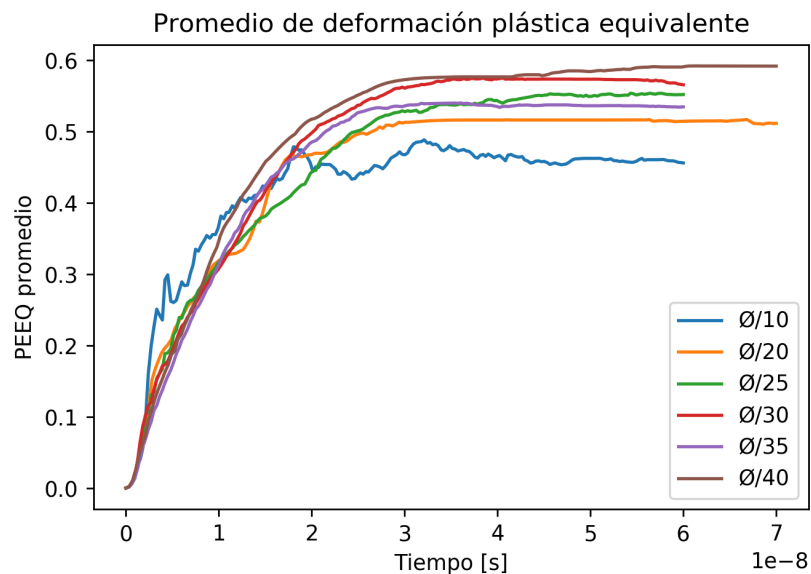


Figura 6.4: Gráfico resumen de las curvas de deformación plástica promedio de cada tamaño de elemento de malla. Elaboración propia.

Además, el Anexo A se presentan las figuras obtenidas al simular con los distintos tamaños de malla.

De la Tabla 6.1 se aprecia que el error porcentual tiende a disminuir a medida que se refina el tamaño de elemento en todos los casos, menos el último tamaño de $\mathcal{O}_p/40$. Este aumento del error en el último valor podría deberse a que en la selección de elementos para medir el PEEQ varió con respecto a la selección de la malla anterior, y así se cubrió una sección que en la medición anterior no se consideró. Esto es un error que es posible que ocurra, debido a la imposibilidad del programa de fijar un área de selección para todas las mediciones, así, esta selección de elementos debe realizarse manualmente en cada medición de PEEQ. A pesar de este aumento, al observar los valores de promedio de deformación plástica, se tiene que para tamaños entre $\mathcal{O}_p/25$ a $\mathcal{O}_p/40$, mantiene el orden de magnitud de 0.5 de deformación.

En la Figura 6.4 se observa el historial de deformación que sufre la partícula. Para la malla más gruesa, es decir, la de un tamaño de elemento de $\mathcal{O}_p/10$, el valor alcanzado es el más bajo y no sigue la tendencia continua de las otras curvas, sino que es más parecido a un comportamiento discreto. Esta inexactitud de los resultados entregados por esta malla, podría deberse a que al existir menos cantidad de elementos, por lo tanto menos nodos, se tienen menos valores arrojados por la simulación en cuanto a PEEQ (o cualquier variable que quiera ser estudiada), lo que lleva a que los promedios sean menos representativos en comparación al caso contrario, donde se tienen más nodos donde evaluar, y por lo tanto se tendrían más datos para obtener un promedio representativo de lo que realmente ocurrió durante la deformación.

La lógica sugiere escoger el tamaño de malla más fino, para obtener resultados más precisos, pero un tamaño de malla con estas características también involucra mayores recursos computacionales y tiempos de simulaciones. Por consiguiente, se escoge un tamaño de elemento de malla medio, es decir, que no signifique grandes recursos computacionales pero que a la vez se obtengan resultados precisos. Así la malla que se adaptaba a estas características fue la de tamaño de elemento de $\mathcal{O}_p/30$.

La elección del tamaño de elemento de malla, se justifica con la la Figura 6.4, donde se aprecia que el comportamiento del tamaño de elemento escogido sigue la misma tendencia que la malla más fina y presenta valores similares, pero implicando menos recursos.

6.3. Resultado de simulaciones

A continuación, se presentan las simulaciones de impacto de cada capa de partículas. Por cada capa simulada se tienen resultados en cuanto al promedio de deformación sufrida por el conjunto de partículas y sustrato, presentados en las Tablas 6.2, 6.3, 6.4, 6.5, 6.6, 6.7 y 6.8.

La sección compuesta por partículas y sustrato que fue considerada para obtener la deformación plástica se muestra destacada en rojo en las Figuras 6.6, 6.9, 6.12, 6.15, 6.18, 6.21 y 6.24. Para calcular el promedio de deformación esta área, se procesó la deformación sufrida por cada elemento que componía esta sección, para luego calcular el promedio de todas estas deformaciones.

También se presenta el perfil resultante luego del impacto de la capa compuesta por 4 partículas y la distribución de deformación en el recubrimiento resultante. Este se aprecia en las Figuras 6.5, 6.8, 6.11, 6.14, 6.17, 6.20 y 6.23.

Finalmente, en las Figuras 6.7, 6.10, 6.13, 6.16, 6.19, 6.22 y 6.25 se muestra el historial de deformación sufrida por el recubrimiento durante el tiempo de impacto de la capa de partículas.

6.3.1. Primera capa de partículas

Tabla 6.2: Promedio deformación plástica capa 1. Elaboración propia.

Deformación plástica equivalente (PEEQ)	
Capa 1	0.6744

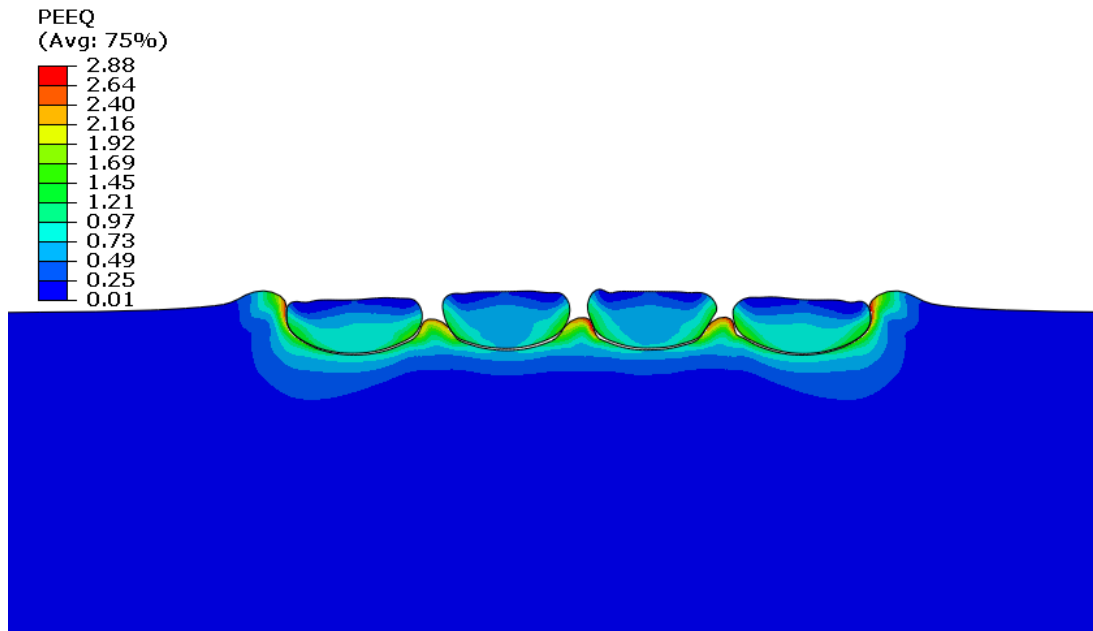


Figura 6.5: Distribución de la deformación plástica en la capa 1 luego del impacto. Elaboración propia.

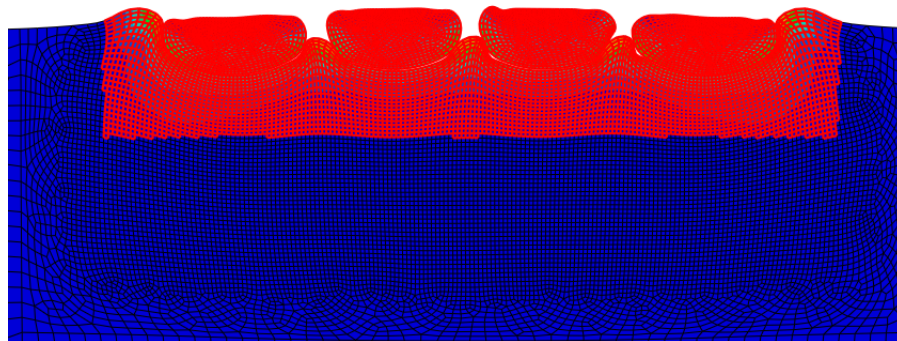


Figura 6.6: Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 1. Elaboración propia.

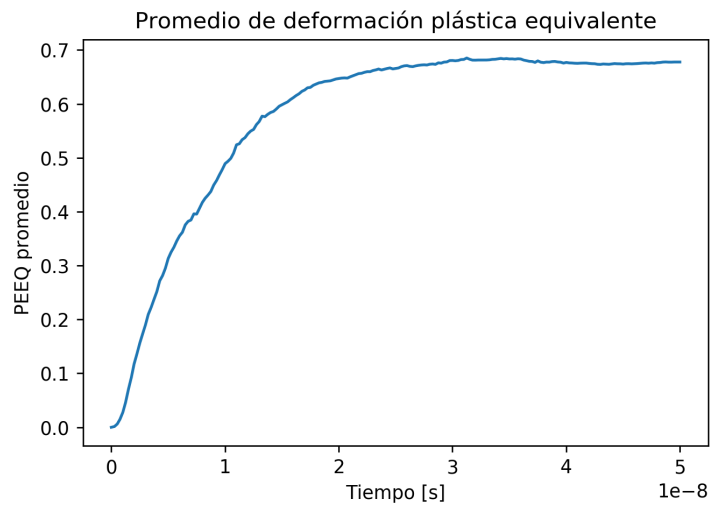


Figura 6.7: Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto (50 ns). Capa 1. Elaboración propia.

6.3.2. Segunda capa de partículas

Tabla 6.3: Promedio deformación plástica capa 2. Elaboración propia.

Deformación plástica equivalente (PEEQ)	
Capa 2	1.0227

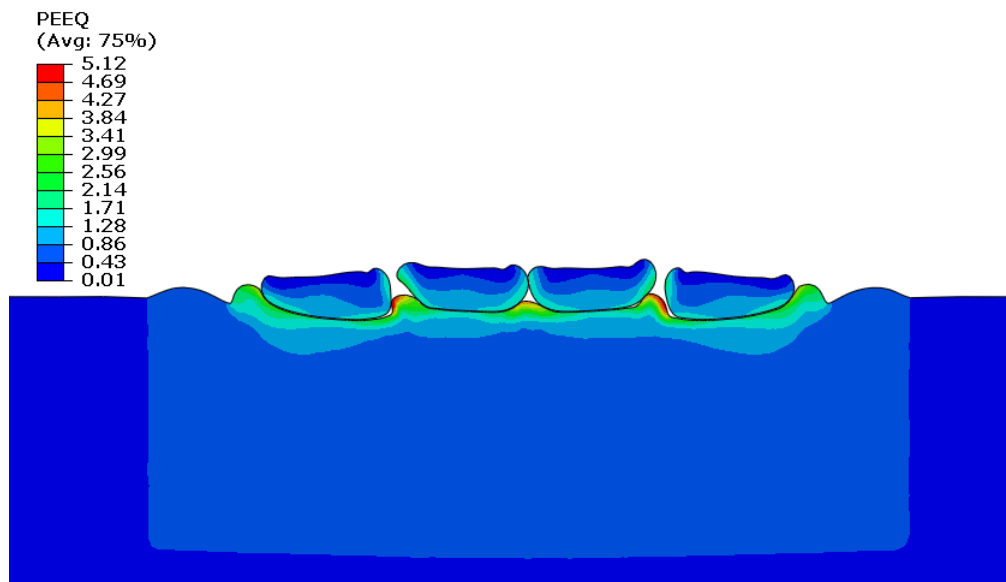


Figura 6.8: Distribución de la deformación plástica en la capa 2 luego del impacto. Elaboración propia.

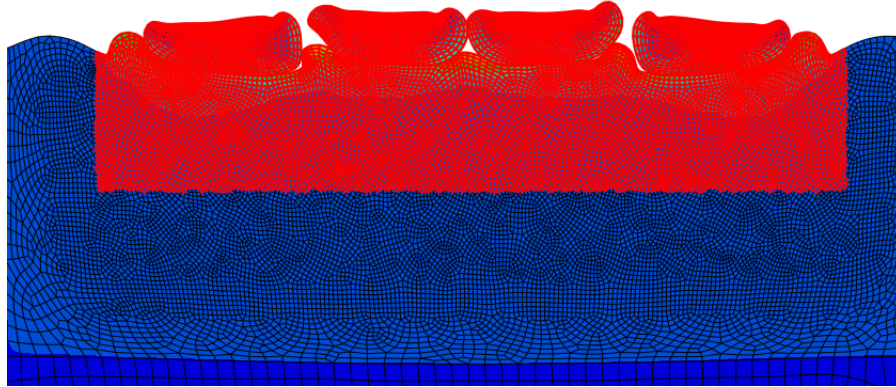


Figura 6.9: Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 2. Elaboración propia.

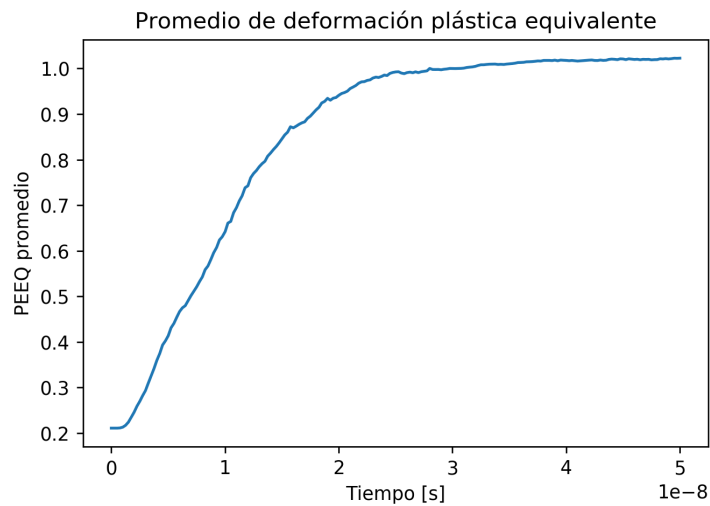


Figura 6.10: Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto (50 ns). Capa 2. Elaboración propia.

6.3.3. Tercera capa de partículas

Tabla 6.4: Promedio deformación plástica capa 3. Elaboración propia.

Deformación plástica equivalente (PEEQ)	
Capa 3	1.1564

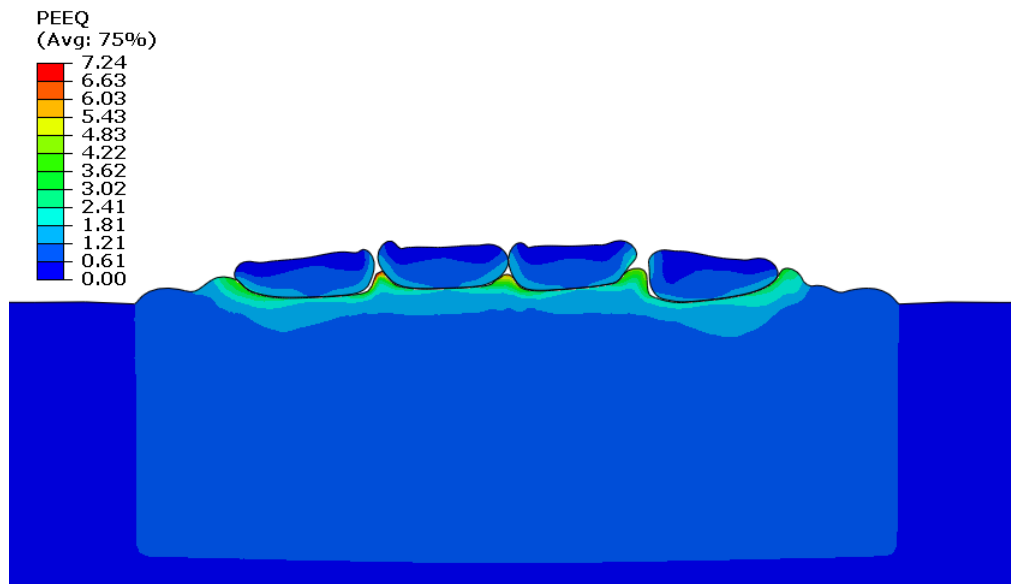


Figura 6.11: Distribución de la deformación plástica en la capa 3 luego del impacto. Elaboración propia.

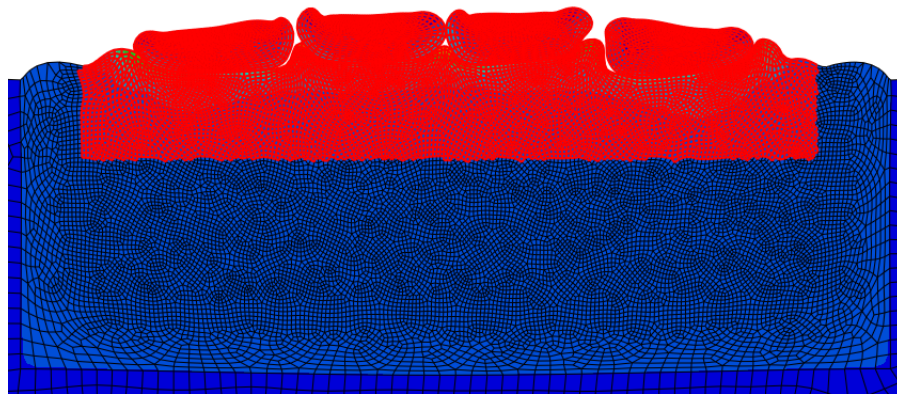


Figura 6.12: Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 3. Elaboración propia.

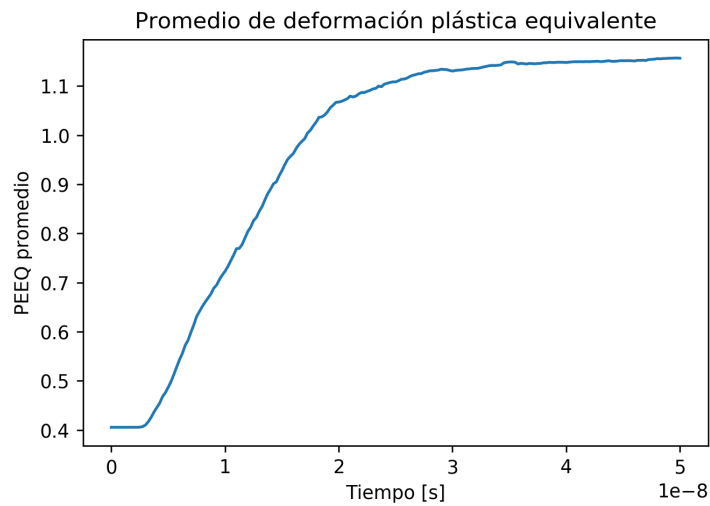


Figura 6.13: Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto (50 ns). Capa 3. Elaboración propia.

6.3.4. Cuarta capa de partículas

Tabla 6.5: Promedio deformación plástica capa 4. Elaboración propia.

Deformación plástica equivalente (PEEQ)	
Capa 4	1.1676

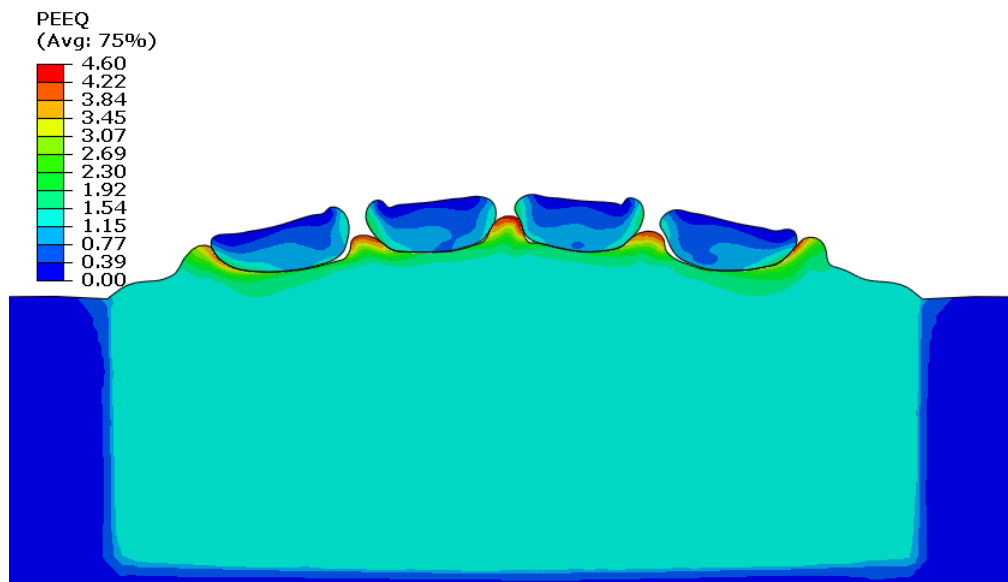


Figura 6.14: Distribución de la deformación plástica en la capa 4 luego del impacto. Elaboración propia.

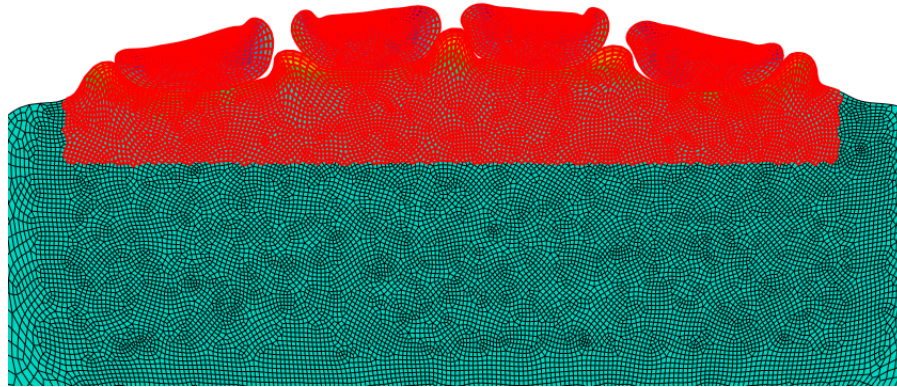


Figura 6.15: Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 4. Elaboración propia.

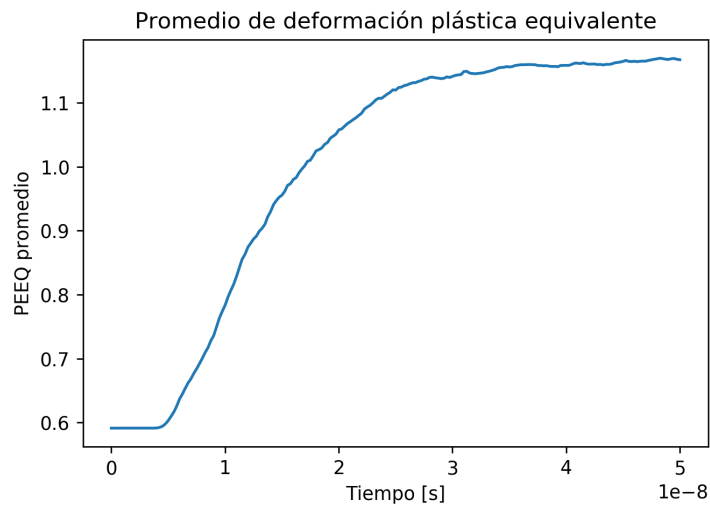


Figura 6.16: Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto (50 ns). Capa 4. Elaboración propia.

6.3.5. Quinta capa de partículas

Tabla 6.6: Promedio deformación plástica capa 5. Elaboración propia.

Deformación plástica equivalente (PEEQ)	
Capa 5	1.1695

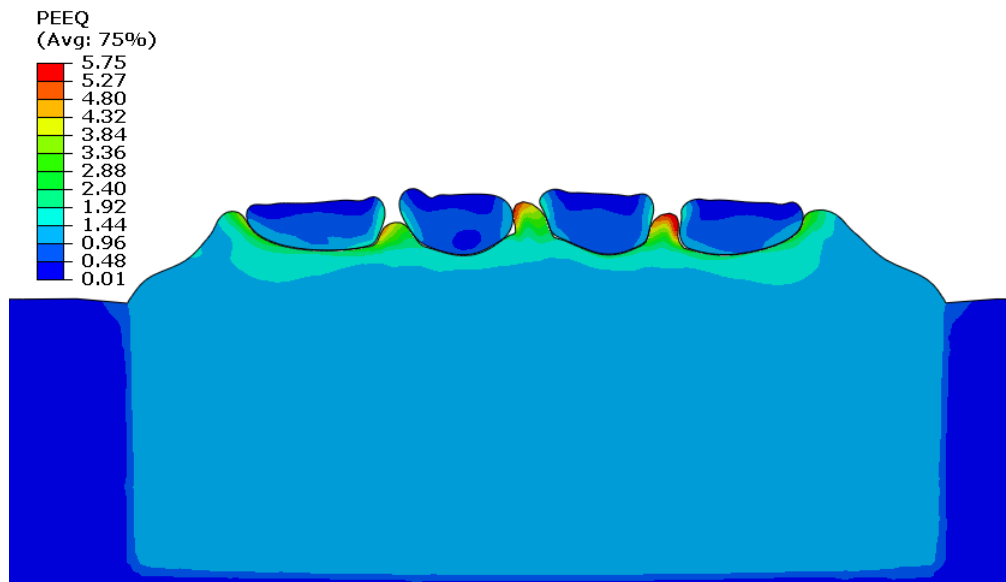


Figura 6.17: Distribución de la deformación plástica en la capa 5 luego del impacto. Elaboración propia.

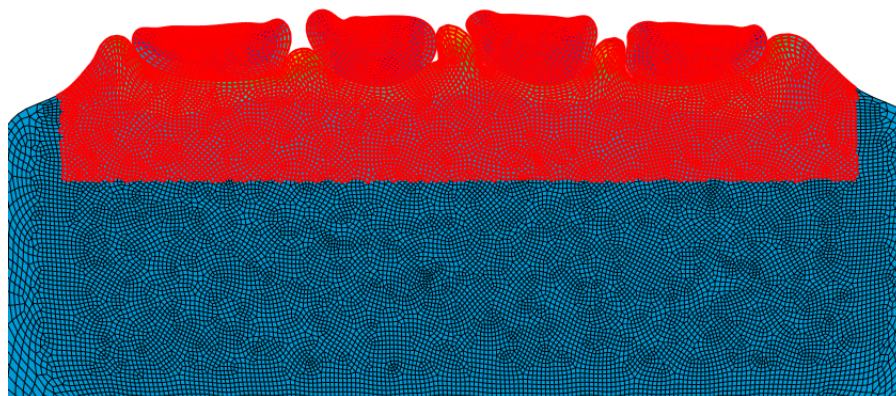


Figura 6.18: Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 5. Elaboración propia.

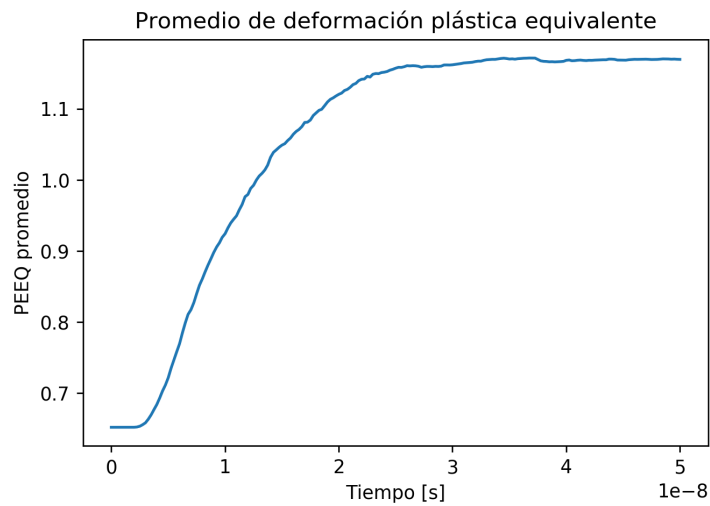


Figura 6.19: Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto (50 ns). Capa 5. Elaboración propia.

6.3.6. Sexta capa de partículas

Tabla 6.7: Promedio deformación plástica capa 6. Elaboración propia.

Deformación plástica equivalente (PEEQ)	
Capa 6	1.1830

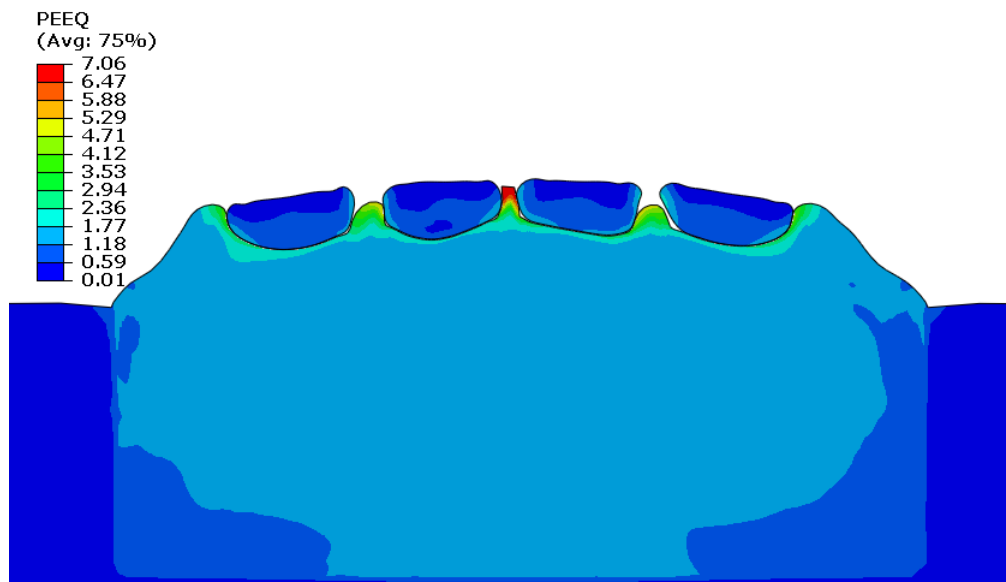


Figura 6.20: Distribución de la deformación plástica en la capa 6 luego del impacto. Elaboración propia.

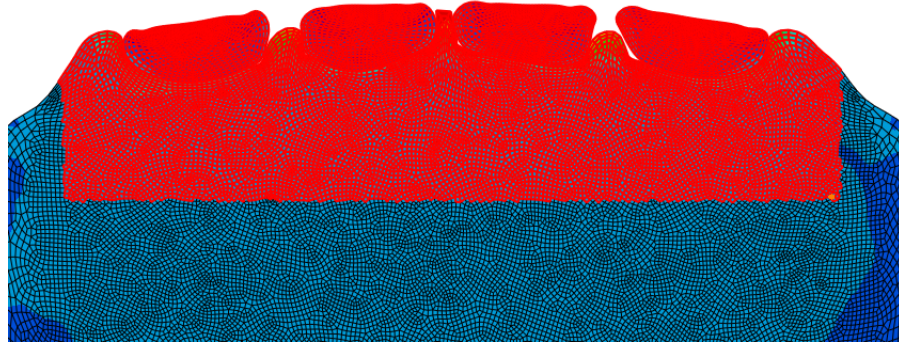


Figura 6.21: Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 6. Elaboración propia.

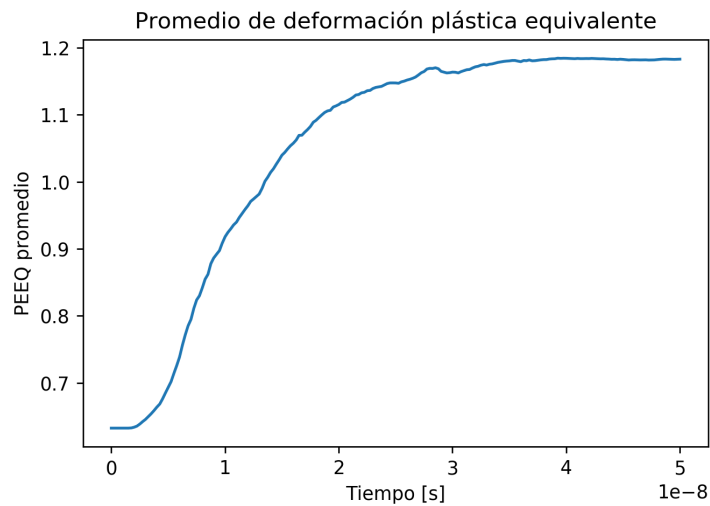


Figura 6.22: Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto (50 ns). Capa 6. Elaboración propia.

6.3.7. Séptima capa de partículas

Tabla 6.8: Promedio deformación plástica capa 7. Elaboración propia.

Deformación plástica equivalente (PEEQ)	
Capa 7	1.2020

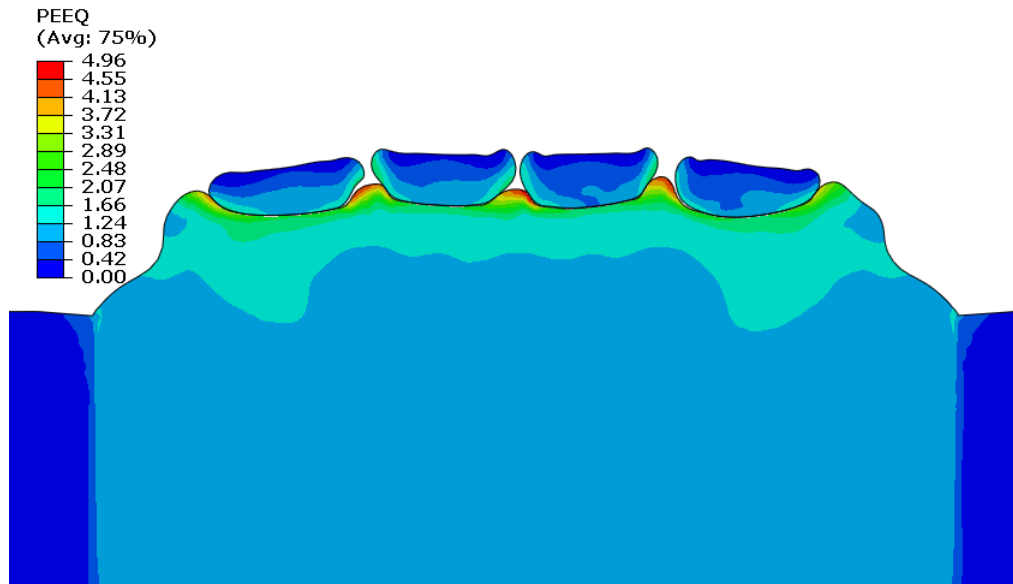


Figura 6.23: Distribución de la deformación plástica en la capa 7 luego del impacto. Elaboración propia.

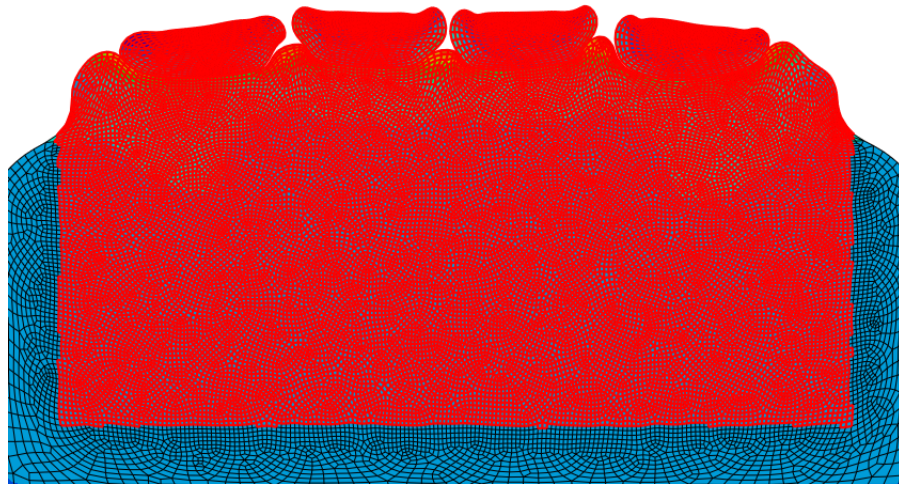


Figura 6.24: Selección de elementos para cálculo de promedio PEEQ. Capa 7. Elaboración propia.

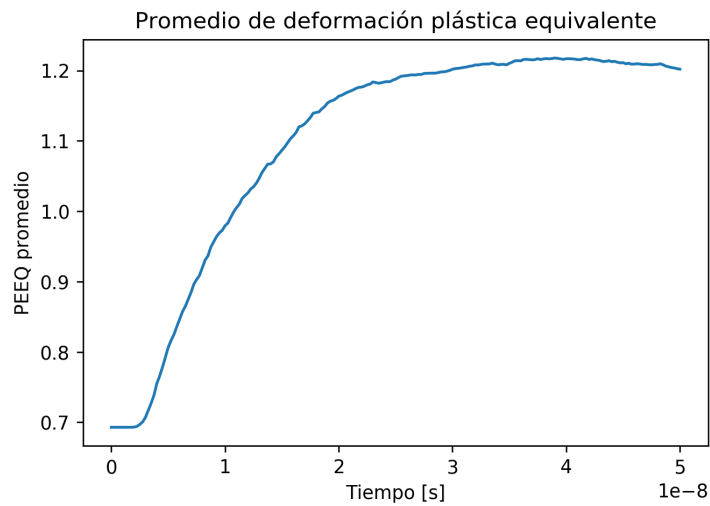


Figura 6.25: Evolución de la deformación plástica promedio durante el tiempo de impacto (50 ns). Capa 7. Elaboración propia.

Los cálculos posteriores de esfuerzo de fluencia y dureza, son realizados con los datos del recubrimiento completo, es decir, luego que la capa 7 se adhiriera. Así, la medición de la deformación de dureza debe ser cuidadosa y lo más representativa posible. Para esto se considera que un indentador de dureza Vickers es de $40 \mu\text{m}$ aproximadamente. Por lo tanto, el área a seleccionar para medir la deformación de la simulación numérica, debe abarcar más elementos que las mediciones de las capas anteriores. Esta selección más amplia de elementos se ve reflejada en la Figura 6.24.

6.3.8. Resumen de resultados de simulaciones

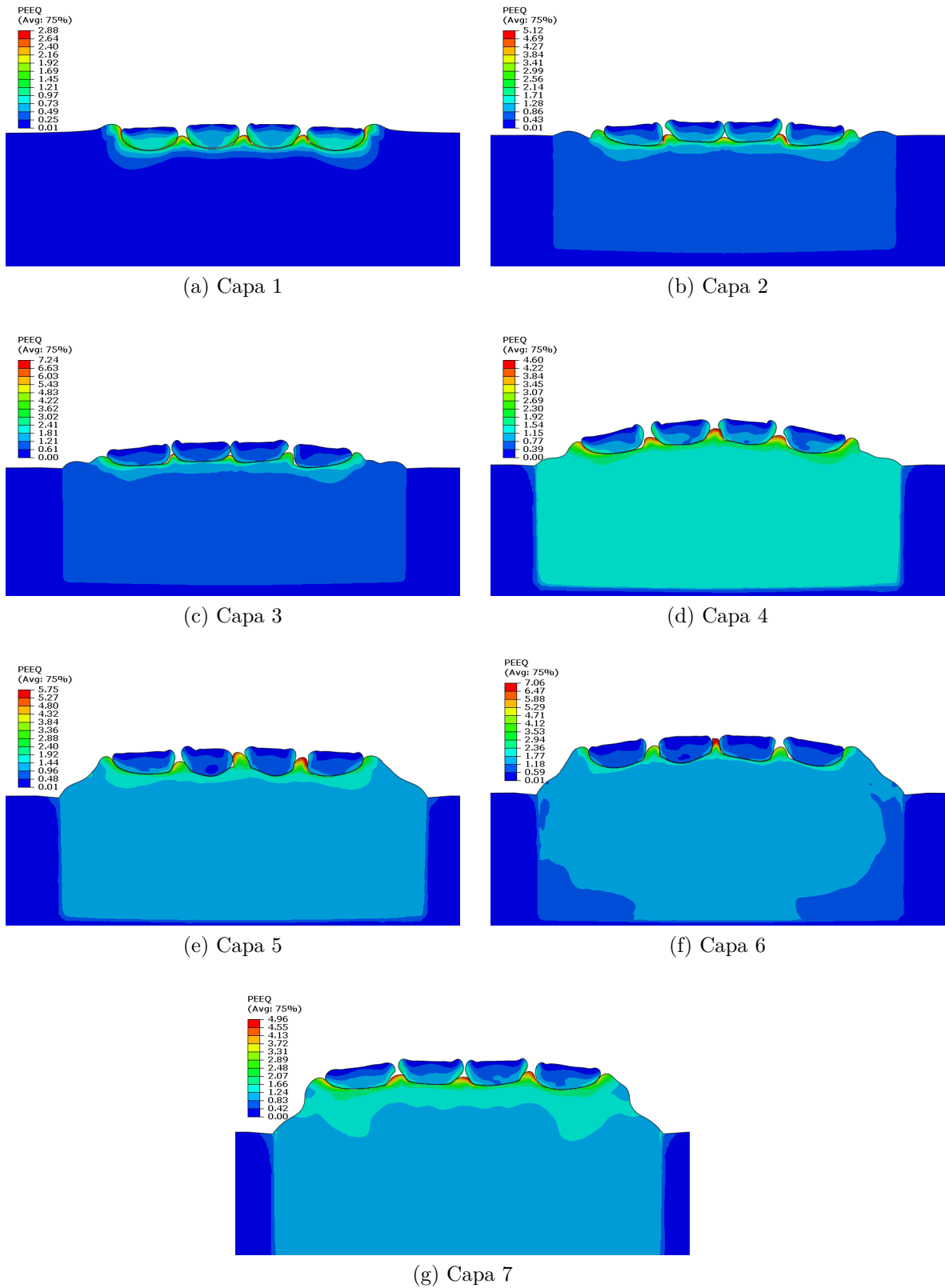


Figura 6.26: Progresión de las simulaciones por capa. Elaboración propia.

En la Figura 6.26 se muestra la progresión de la deposición de las capas y la evolución del crecimiento del recubrimiento.

A continuación, en la Figura 6.27 se muestra una gráfica resumen de la evolución de la deformación plástica de todas las capas del recubrimiento. Y en la Tabla 6.9 se presenta un resumen con los valores obtenidos de deformación plástica por capa.

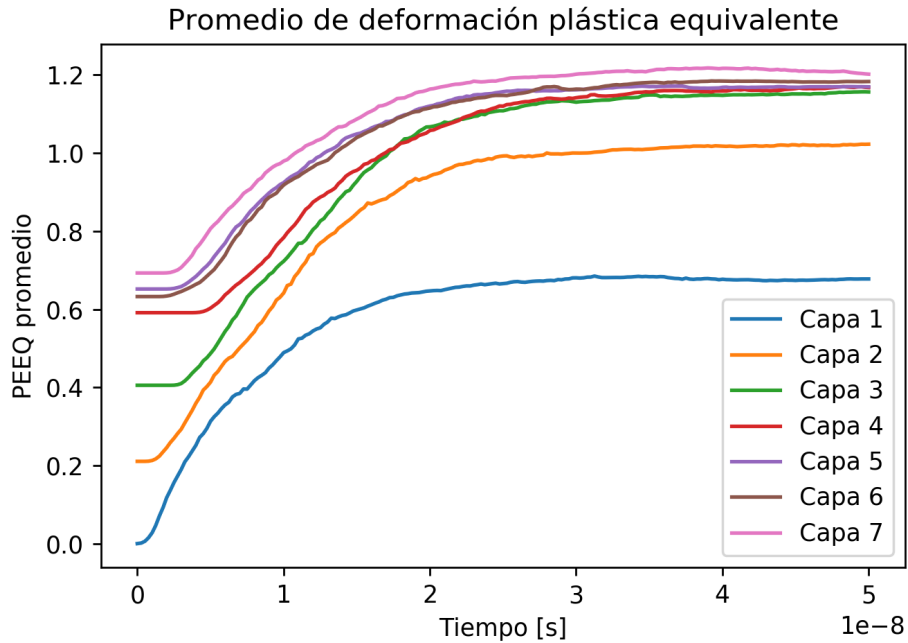


Figura 6.27: Evolución de la deformación plástica promedio de cada capa de partículas. Elaboración propia.

Tabla 6.9: Resumen de promedios de PEEQ por capa de partículas. Elaboración propia.

Deformación plástica equivalente (PEEQ)	
Capa 1	0.6744
Capa 2	1.0227
Capa 3	1.1564
Capa 4	1.1676
Capa 5	1.1695
Capa 6	1.1830
Capa 7	1.2020

En la Figura 6.27 se puede observar que la deformación plástica del recubrimiento aumenta a medida que se depositaban más capas. Esto es parte del resultado esperado, ya que un material blando al impactar sobre uno más duro, transforma mayor porcentaje de su energía cinética en energía de deformación, para superar la resistencia del material más duro a ser deformado. Así, en la primera capa depositada, tanto partículas como sustrato presentaban la misma dureza, pero al impactar la segunda capa de partículas, la dureza del sustrato ya había aumentado debido a la deformación provocada por la primera capa de partículas que se depositó. Por su parte, a medida que se avanzaba en la deposición de las capas, las partículas se encontraban con un sustrato con un mayor nivel dureza.

De la Figura 6.27 y Tabla 6.9 también se puede apreciar que el mayor aumento de deformación plástica fue entre la capa 1 y la capa 2, y luego esta diferencia entre las deformaciones comenzó a disminuir. Esto podría deberse a que a medida que se depositaban las capas, el recubrimiento aumentaba su deformación y su dureza. Así en las últimas capas, la diferencia entre la dureza de las partículas que estaban por ser impactadas con el recubrimiento aumentaba, por lo cual el recubrimiento presentaba una mayor resistencia a la deformación, y por consiguiente la energía cinética transformada en energía de deformación de las partículas, no era suficiente para deformar en gran medida al sustrato. Debemos recordar que la deformación medida, era un promedio de ambas superficies deformadas, es decir, partículas mas recubrimiento, por lo tanto, las partículas sí se deformaban pero el recubrimiento anterior lo hacía cada vez menos, lo que en su conjunto hacía que la deformación promedio de ambos aumentara, pero no de forma significativa.

6.4. Resultado de cálculo de dureza

6.4.1. Esfuerzo de fluencia

El esfuerzo de fluencia del recubrimiento simulado fue calculado siguiendo el modelo de plasticidad de Johnson – Cook (2.2). Los parámetros que considera este modelo se encuentran en la Tabla 4.1, además la deformación plástica utilizada fue el promedio de deformación plástica equivalente arrojado al medirlo en la simulación de la capa 7, es decir, 1.2020 según la Tabla 6.9. Además, en la Tabla 6.10 se presenta la evolución del esfuerzo de fluencia en las capas del recubrimiento.

Tabla 6.10: Esfuerzo de fluencia calculado del recubrimiento. Elaboración propia.

	PEEQ promedio	Esfuerzo de fluencia calculado [MPa]
Capa 1	0.6744	348.43
Capa 2	1.0227	384.04
Capa 3	1.1564	395.46
Capa 4	1.1676	396.37
Capa 5	1.1695	396.52
Capa 6	1.1830	397.62
Capa 7	1.2020	399.14

6.4.2. Dureza

Para calcular la dureza del recubrimiento se utilizaron las relaciones para el cobre propuestas por Krishna [29], descritas en la sección de antecedentes.

Para escoger cual relación entre las tres propuestas por el autor, según la razón entre el esfuerzo último y el esfuerzo de fluencia (σ_{UTS}/σ_y), se calcularon estos esfuerzos con el dato experimental de dureza (Tabla 4.2) utilizando las ecuaciones generales 2.16 y 2.17. Así, se obtuvo: $\sigma_{UTS} = 432.537$ y $\sigma_y = 370.746$, por lo tanto la razón (σ_{UTS}/σ_y) es 1.17. Este resultado indicó una baja relación de σ_{UTS}/σ_y , así se debía utilizar la ecuación 2.13 para determinar la dureza del recubrimiento simulado. Los valores de dureza calculados ocupando la ecuación 2.13 se presentan en la Tabla 6.11.

Tabla 6.11: Dureza Vickers calculada por capa. Elaboración propia.

	PEEQ promedio	Esfuerzo de fluencia calculado [MPa]	Dureza [kgf/mm²]
Capa 1	0.6744	348.43	115.45
Capa 2	1.0227	384.04	127.25
Capa 3	1.1564	395.46	131.03
Capa 4	1.1676	396.37	131.34
Capa 5	1.1695	396.52	131.39
Capa 6	1.1830	397.62	131.75
Capa 7	1.2020	399.14	132.25

De la Tabla 6.11 se puede observar que a medida que la deformación plástica equivalente aumenta, también lo hace el esfuerzo de fluencia, y por lo tanto, la dureza. Esto es lo esperado según el modelo de Johnson-Cook, que plantea que el esfuerzo de fluencia está directamente relacionado con la deformación plástica.

Las ecuaciones 2.14 (relación σ_{UTS}/σ_y media), 2.15 (relación σ_{UTS}/σ_y alta) y 2.16 (relación general) también serán utilizada para calcular la dureza pero sólo para fines comparativos. Para los cuatro casos se empleó el valor calculado del esfuerzo de fluencia de la última capa presentado en la Tabla 6.10.

La Tabla 6.12 presenta los resultados del cálculo de la dureza del recubrimiento (capa 7) y el error porcentual al compararlo con el valor experimental de $129.2 \pm 7.6 HV(kgf/mm^2)$, obtenido de la Tabla 4.2.

Tabla 6.12: Dureza Vickers calculada del recubrimiento. Elaboración propia.

	Dureza Vickers kgf/mm^2	Dureza Vickers MPa	Diferencia porcentual
Relación σ_{UTS}/σ_y baja	132.25	1297.00	2.4 %
Relación σ_{UTS}/σ_y media	153.87	1509.00	19.1 %
Relación σ_{UTS}/σ_y alta	202.61	1986.98	56.8 %
Relación general	138.88	1361.99	7.5 %

En la Tabla 6.12 se observa que la relación de σ_{UTS}/σ_y baja para el cobre (que fue determinada como la indicada para usar), es decir, la ecuación 2.13, es la que muestra mayor similitud con la dureza medida experimentalmente, presentando un 2.4 % de error. Luego le sigue la ecuación 2.16, que es la relación general para el cobre, pero que de todas formas se adapta de manera acertada al presentar un 7.5 % de error con respecto a la dureza empírica. Al evaluar la dureza con las relaciones de σ_{UTS}/σ_y media y alta, el valor obtenido presenta mayores diferencias con respecto al valor de dureza real, obteniendo 19.1 % y 56.8 % de error, respectivamente.

El valor de dureza calculado a partir de las simulación computacional es semejante al experimental, por lo tanto, este modelo numérico podría ser una primera buena aproximación de lo que ocurre durante el proceso de impacto. Sin perjuicio de lo anterior, el modelo presenta varias simplificaciones que de ser variadas podría cambiar el resultado final, por ejemplo:

- Entre la proyección de cada capa, se debió dibujar el perfil que dejaba la capa anterior de partículas depositadas, esto debido a que no se logró hacer una simulación continua, producto a la no convergencia del modelo por las grandes deformaciones sufridas por algunos elementos. El resultado fue que el trazado no era exacto al dejado por la capa anterior, sino una aproximación. Esta simplificación podría haber disminuido la deformación real del recubrimiento, y lo por consiguiente, su dureza, esto porque el

perfil trazado era más suavizado para que algunos elementos no se distorsionasen en exceso y el modelo pudiese converger.

- También podría modificar la dureza obtenida, el variar el arreglo de partículas. En nuestra simulación las partículas impactaban de forma ordenadas en una fila, mientras que en la realidad la posición de impacto de las partículas ocurre de manera aleatoria.
- Las temperaturas de impacto de las partículas y el sustrato fueron estimadas ya que no se contaba con el valor empírico. Si bien la estimación sí fue realizada con el dato experimental de la temperatura del gas, los gráficos con los que evaluó no fueron confeccionados bajo las mismas condiciones que nuestro valor experimental.
- La Figura 4.4 de la temperatura de impacto de partículas fue elaborado para una partícula de cobre de diámetro $25 \mu m$, mientras que el diámetro de la partículas impactadas en nuestra simulación fue $11 \mu m$.
- El gráfico de la Figura 4.5, utilizado para estimar la temperatura del sustrato, fue elaborado con los promedios de los múltiples ensayos de impacto, utilizando partículas de aluminio, zinc y estaño. Mientras tanto nuestras partículas eran de cobre.
- De este modo las temperaturas estimadas podrían haber variado en comparación a las reales, lo que generaría un cambio en las deformaciones del recubrimiento obtenidas. En específico, si estas temperaturas hubiesen sido menor, la deformación también lo habría sido, por lo tanto, se tendría una baja en el valor de dureza. Por el contrario, si estas temperaturas hubiesen sido mayor a la estimada, se presentaría mayor deformación de las partículas, por lo cual, una mayor dureza del recubrimiento.
- La eficiencia de adherencia del modelo computacional también se simplificó. Esto debido a que al implementarla inicialmente, la simulación no convergió, ya que, se generaban grandes deformaciones en algunos elementos. Por esta razón, en el programa se permitió la separación luego del impacto. Sin embargo, para compensar esta simplificación, se consideraron más partículas, para que estas simulasen la deformación que causaría considerar la eficiencia de adherencia en el *software*. De todas maneras, implementar la eficiencia de adherencia dentro del programa, habría significado mayores deformaciones, por ende mayor dureza, ya que se hubiese considerado que las partículas quedaban unidas a otras partículas y/o al sustrato luego del impacto y que estos unidos se seguían deformando.

Capítulo 7

Conclusiones

Después de efectuado un análisis bibliográfico de diversos estudios de impacto de partículas y realizadas las simulaciones del proceso de *Cold Spray* para un recubrimiento de cobre, se pueden establecer las siguientes conclusiones:

En la simulaciones computacionales de elementos finitos, el tamaño de elemento de malla afecta de manera significativa a los valores obtenidos de deformación plástica equivalente (PEEQ). A mayor tamaño de elemento de malla, menos elementos se tienen, por ende, menor número de nodos para evaluar las ecuaciones, y así se obtienen datos con mayor dispersión. Por lo cual, se debe ser cuidadoso al escoger un tamaño de elemento de malla, prefiriendo los que conlleven a una malla más fina pero que a su vez su simulación sea viable con los recursos computacionales disponibles.

La deformación plástica equivalente del recubrimiento aumenta a medida de que las capas de partículas se depositan. Esto debido que a medida que se avanza en deposición de las capas, aumenta la dureza de la superficie con la que se encuentran las partículas al impactar, así la variación de la energía cinética convertida en energía de deformación de las partículas también debe aumentar, presentándose así más deformación plástica en las partículas depositadas.

Se debe tener especial atención con la zona donde se mide la deformación plástica final, ya que esta debe tener como sección mínima la abarcada por un indentador en un ensayo de dureza Vickers, para de este modo obtener datos congruentes con lo experimental.

El dato experimental de la dureza del recubrimiento llevó a escoger la relación de dureza para elementos de cobre que presentan una baja relación de σ_{UTS}/σ_y , ecuación con la cual se obtuvo un valor muy cercano al experimental, siendo sólo un 2.4% de error. Igualmente, al evaluar la dureza con la ecuación general del cobre, se obtuvo una diferencia de 7.5% con respecto al valor empírico. Estos bajos errores porcentuales conducen a que la simulación numérica realizada fue una buena primera aproximación a las propiedades finales de un recubrimiento de cobre producido por *Cold Spray*.

De esta forma, se cumple el objetivo general de esta memoria, que era evaluar la capacidad de una simulación computacional para obtener valores de dureza de un recubrimiento de cobre, se obtuvo valores de dureza cercanos y similares al experimental, mediante la simulación del proceso en ABAQUS.

Se cumplieron los tres objetivos específicos. En efecto, al completar la simulación de impacto de partículas en ABAQUS, se llegó a un valor de deformación plástica del recubrimiento, el cual estaba directamente relacionado con la dureza del material. Y, finalmente, se compararon los valores de dureza de la modelación con los experimentales.

Dentro de las mejoras que se pueden efectuar en un trabajo futuro, se tiene el realizar una simulación continua, con el fin de estudiar la morfología resultante del impacto y compararla con una obtenida experimentalmente mediante *Cold Spray*. De este modo, se podrán establecer más puntos de comparación entre la simulación computacional y la realidad experimental, lo que llevaría a concluir de mejor manera si la simulación mediante método de elementos finitos es una buena representación de los fenómenos que ocurren durante el impacto de las partículas.

Con el mismo fin anterior y con el objetivo de obtener resultados más fidedignos y simular condiciones lo más cercanas a la realidad, se sugiere realizar simulaciones impactando una mayor cantidad de partículas y ver cómo la cantidad de éstas afecta las propiedades del recubrimiento.

Bibliografia

- [1] Victor K. Champagne, Dennis Helfritch, Phillip Leyman, Scott Grendahl, and Brad Klotz. Interface material mixing formed by the deposition of copper on aluminum by means of the cold spray process. *Journal of Thermal Spray Technology*, 14(3):330–334, 2005.
- [2] Hamid Assadi, Frank Gärtner, Thorsten Stoltenhoff, and Heinrich Kreye. Bonding mechanism in cold gas spraying. *Acta Materialia*, 51(15):4379–4394, 2003.
- [3] Anatolii Papyrin, Vladimir Kosarev, Sergey Klinkov, Anatolii Alkimov, and Vasily Fomin. Chapter 1 - discovery of the cold spray phenomenon and its basic features. pages 1 – 32, 2007.
- [4] Hamid Assadi, Heinrich Kreye, F. Gärtner, and Thomas Klassen. Cold spraying – A materials perspective. *Acta Materialia*, 116:382–407, 2016.
- [5] J. R. Davis. *Handbook of Thermal Spray Technology*. ASM International, illustrated edition, 2004.
- [6] Pierre L. Fauchais, Joachim V.R. Heberlein, and Maher I. Boulos. *Thermal Spray Fundamentals: From Powder to Part*. Springer US, 1 edition, 2014.
- [7] Nuria Espallargas. *Future development of thermal spray coatings : types, designs, manufacture and applications*. Woodhead Publishing series in metals and surface engineering no. 65. Woodhead Publishing is an imprint of Elsevier, 2015.
- [8] Victor K. Champagne. *1 - Introduction*. Woodhead Publishing Series in Metals and Surface Engineering. Woodhead Publishing, 2007.
- [9] Thomas Van Steenkiste. The role of particle temperature and velocity in cold spray coating formation. *The cold spray materials deposition process*, pages 127–147, 2007.
- [10] Reza Rokni, Steven Nutt, Christian Widener, Victor Champagne Jr, and R.H. Hrabe. Review of relationship between particle deformation, coating microstructure, and properties in high-pressure cold spray. *Journal of Thermal Spray Technology*, pages 1–48, 06 2017.

- [11] Jeganathan Karthikeyan. The advantages and disadvantages of the cold spray coating process. *The Cold Spray Materials Deposition Process Fundamentals and Applications*, pages 62–71, 2007.
- [12] Alexey Sova, Sergey Grigoriev, A. Kochetkova, and I. Smurov. Influence of powder injection point position on efficiency of powder preheating in cold spray: Numerical study. *Surface and Coatings Technology*, 242:226–231, 02 2014.
- [13] Thomas Van Steenkiste and J R Smith. Evaluation of Coatings Produced via Kinetic and Cold Spray Processes. 13(June):274–282, 2004.
- [14] Anatolii Papyrin, Vladimir Kosarev, Sergey Klinkov, Anatolii Alkimov, and Vasily Fomin. Chapter 5 - current status of the cold spray process. pages 248 – 323, 2007.
- [15] Frank Gärtner, Thorsten Stoltenhoff, Tobias Schmidt, and Heinrich Kreye. The cold spray process and its potential for industrial applications. *Journal of Thermal Spray Technology*, 15:223–232, 06 2006.
- [16] François Raletz. Critical particle velocity under cold spray conditions. 201:1942–1947, 2006.
- [17] Chang-jiu Li, Wen-ya Li, and Hanlin Liao. Examination of the Critical Velocity for Deposition of Particles in Cold Spraying. 15(June):212–222, 2006.
- [18] Julio Villafuerte. *Modern Cold Spray: Materials, Process, and Applications*. Springer International Publishing, 1 edition, 2015.
- [19] M. Kamaraj and V. M. Radhakrishnan. Cold Spray Coating Diagram: Bonding Properties and Construction Methodology. *Journal of Thermal Spray Technology*, 28(4): 756–768, 2019.
- [20] Tobias Schmidt, Hamid Assadi, Frank Gärtner, Horst Richter, Thorsten Stoltenhoff, Heinrich Kreye, and Thomas Klassen. From particle acceleration to impact and bonding in cold spraying. *Journal of Thermal Spray Technology*, 18(5-6):794–808, 2009.
- [21] Wen Ya Li, Chao Zhang, Xueping Guo, Chang Jiu Li, Hanlin Liao, and C. Coddet. Study on impact fusion at particle interfaces and its effect on coating microstructure in cold spraying. *Applied Surface Science*, 254(2):517–526, 2007.
- [22] Tanvir Hussain, David McCartney, Philip Shipway, and D. Zhang. Bonding mechanisms in cold spraying: The contributions of metallurgical and mechanical components. *Journal of Thermal Spray Technology*, 18:364–379, 09 2009.
- [23] Jing Xie. *Simulation of Cold Spray Particle Deposition Process*. PhD thesis, Institut national des sciences appliquées de Lyon, 5 2014.

- [24] Andrew Hulton. Investigation of the effects of particle temperature and spacing on multi-particle impacts in cold spray. (August):122, 2013.
- [25] M. Grujicic, C. L. Zhao, W. S. DeRosset, and D. Helfrich. Adiabatic shear instability based mechanism for particles/substrate bonding in the cold-gas dynamic-spray process. *Materials and Design*, 25(8):681–688, 2004.
- [26] Victor K. Champagne, Dennis J. Helfrich, Matthew D. Trexler, and Brian M. Gabriel. The effect of cold spray impact velocity on deposit hardness. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(6), 2010.
- [27] Esteban Broitman. Indentation Hardness Measurements at Macro-, Micro-, and Nanoscale: A Critical Overview. *Tribology Letters*, 65(1):1–18, 2017.
- [28] R.E. Smallman and A.H.W. Ngan. Chapter 5 - characterization and analysis. pages 159 – 250, 2014.
- [29] S. Chenna Krishna, Narendra Kumar Gangwar, Abhay K. Jha, and Bhanu Pant. On the Prediction of Strength from Hardness for Copper Alloys. *Journal of Materials*, 2013: 1–6, 2013.
- [30] Peng Zhang, S.X. Li, and Zhefeng Zhang. General relationship between strength and hardness. *Materials Science and Engineering A*, 529:62–73, 11 2011.
- [31] Wen Ya Li, Chao Zhang, Chang Jiu Li, and Hanlin Liao. Modeling aspects of high velocity impact of particles in cold spraying by explicit finite element analysis. *Journal of Thermal Spray Technology*, 18(5-6):921–933, 2009.
- [32] Daniel Nélias, Jing Xie, Hélène Walter-Le Berre, Yuji Ichikawa, and Kazuhiro Ogawa. Simulation of the Cold Spray Deposition Process for Aluminum and Copper using Lagrangian, ALE and CEL Methods. *Thermomechanical Industrial Processes: Modeling and Numerical Simulation*, 9781848213:321–358, 2014.
- [33] Justin Dieter Perry. Powder recycling for the production of pin fin heat sinks by cold gas dynamic spray. Master’s thesis, University of Ottawa, 8 2018.
- [34] Jean Gabriel Legoux, E. Irissou, and C. Moreau. Effect of substrate temperature on the formation mechanism of cold-sprayed aluminum, zinc and tin coatings. *Journal of Thermal Spray Technology*, 16(5-6):619–626, 2007.
- [35] Yuji Ichikawa, Ryotaro Tokoro, and Kazuhiro Ogawa. Micro-scale strength evaluation for bonding interface of cold sprayed coatings. *Materials Science Forum*, 879(May): 795–800, 2017.

Anexo A

Análisis de sensibilidad de malla

Tamaño de malla : $\frac{\varnothing}{10}$

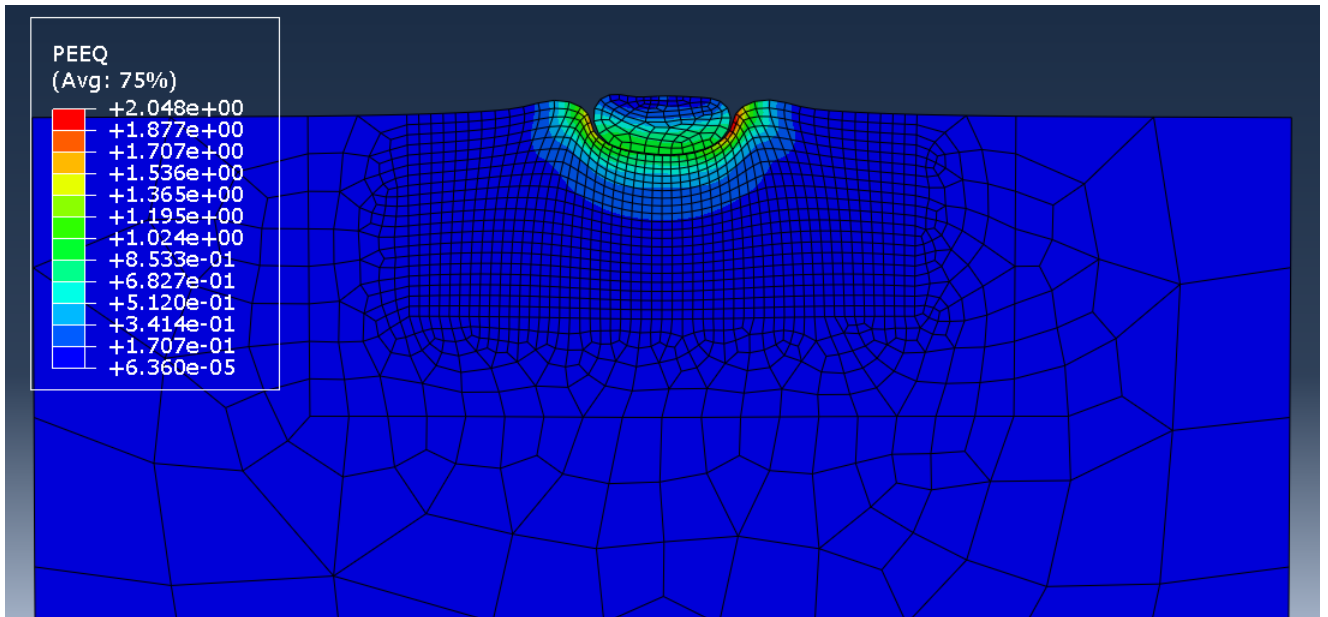


Figura A.1: Resultado simulación tamaño de malla $\frac{\varnothing}{10}$. Elaboración propia.

Tamaño de malla : $\frac{\varnothing}{20}$

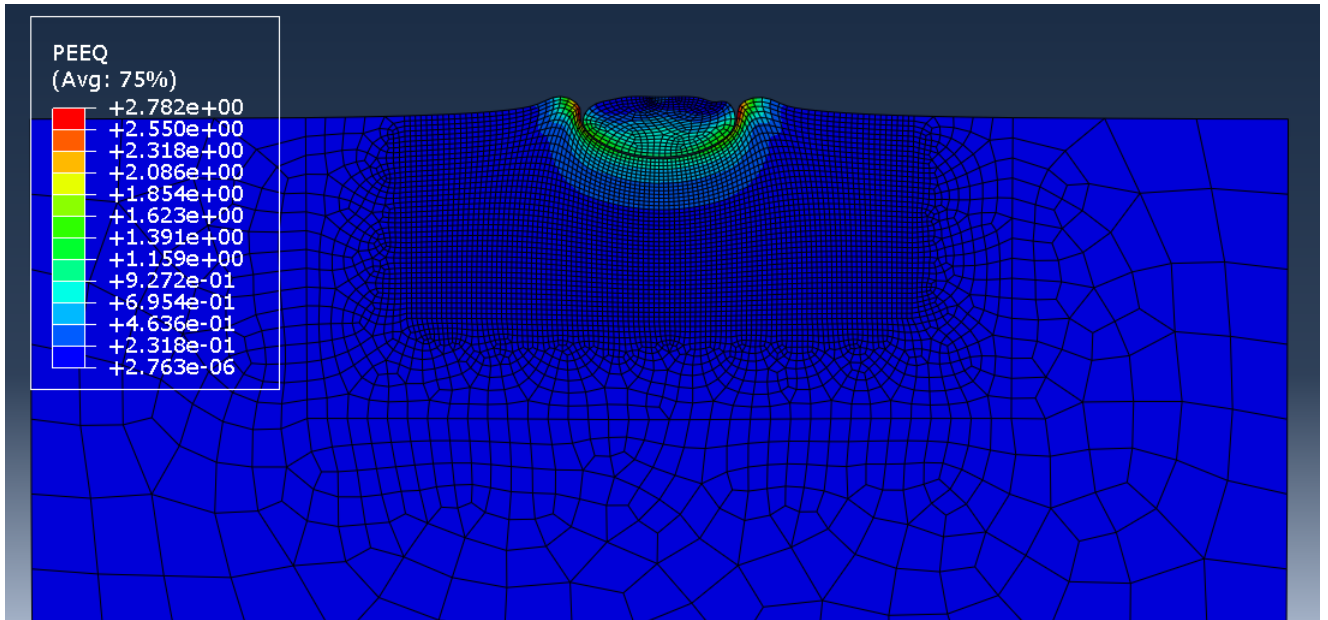


Figura A.2: Resultado simulación tamaño de malla $\frac{\varnothing}{20}$. Elaboración propia.

Tamaño de malla : $\frac{\varnothing}{25}$

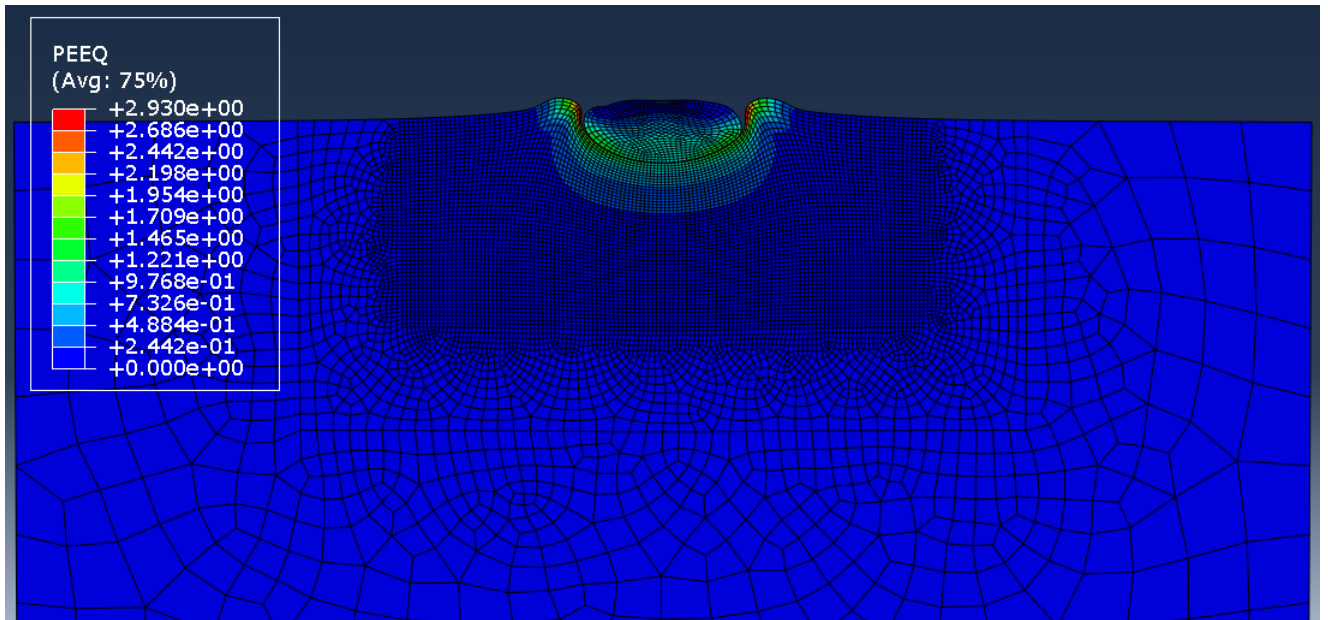


Figura A.3: Resultado simulación tamaño de malla $\frac{\varnothing}{25}$. Elaboración propia.

Tamaño de malla : $\frac{\varnothing}{30}$

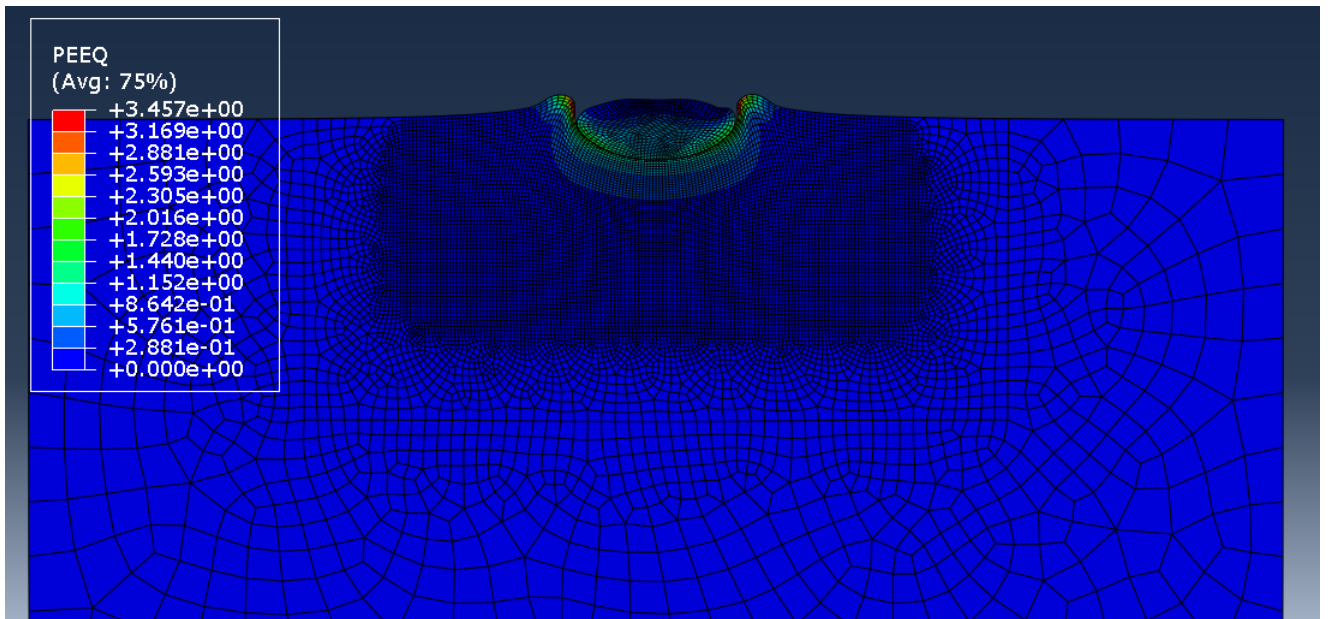


Figura A.4: Resultado simulación tamaño de malla $\frac{\varnothing}{30}$. Elaboración propia.

Tamaño de malla : $\frac{\varnothing}{35}$

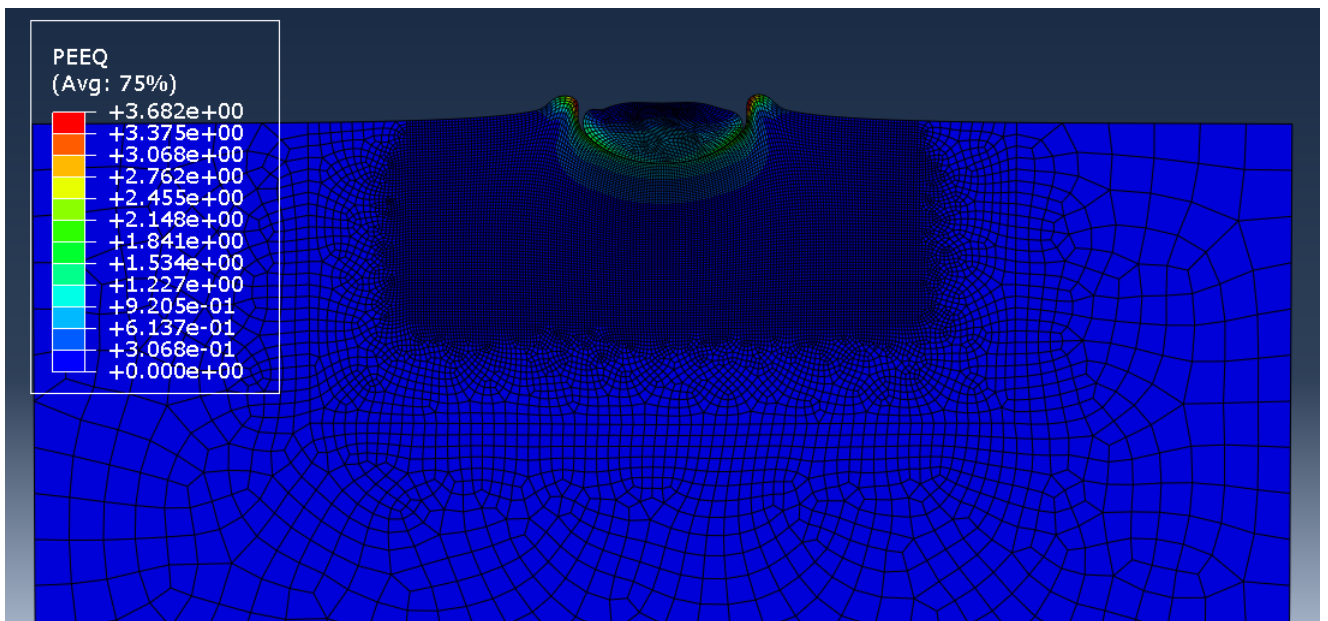


Figura A.5: Resultado simulación tamaño de malla $\frac{\varnothing}{35}$. Elaboración propia.

Tamaño de malla : $\frac{\varnothing}{40}$

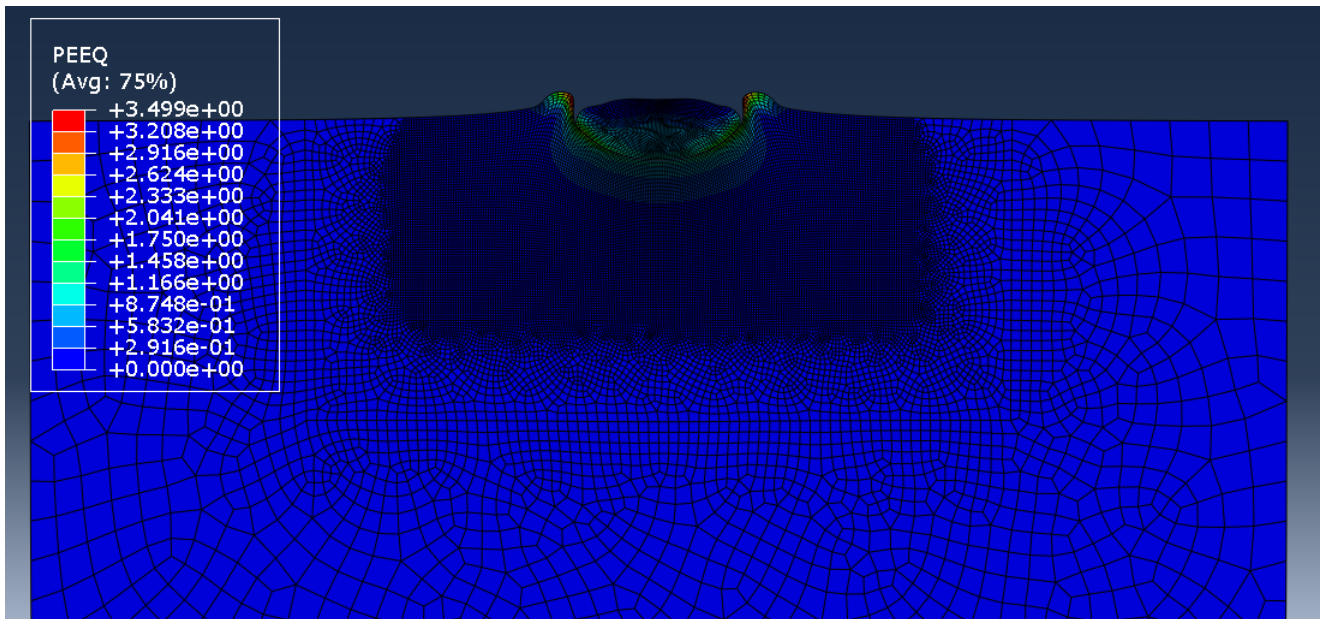


Figura A.6: Resultado simulación tamaño de malla $\frac{\varnothing}{40}$. Elaboración propia.

Anexo B

Código Python

Código B.1: Código modelo 30 partículas.

```
1
2 # coding=utf-8
3 import math
4 import random
5 import time
6 t0 = time.time()
7 import os, re
8 import glob
9 import regionToolset
10 from random import sample
11 from abaqus import *
12 from abaqusConstants import *
13 from part import *
14 from material import *
15 from section import *
16 from assembly import *
17 from step import *
18 from interaction import *
19 from load import *
20 from mesh import *
21 from job import *
22 from sketch import *
23 from visualization import *
24 from connectorBehavior import *
25 from platform import system
26 import displayGroupOdbToolset as dgo
```

```

27 import xyPlot
28 from abaqus import backwardCompatibility
29 backwardCompatibility.setValues(reportDeprecated=False)
30 import numpy as np
31 session .journalOptions.setValues(replayGeometry=COORDINATE, recoverGeometry=
    ↪ COORDINATE)
32
33 # ----- PARAMETROS -----
34
35 #Numero de particulas
36 numPar = 4
37
38 #Eficiencia
39 DE = 0
40
41 #Diametro particulas
42 diam_part = 0.011 #[mm]
43
44 #Velocidad [mm/s]
45 vel = 528000.
46
47 #Temperaturas
48 TempSustrato=373. #100C
49 TempParticula=453. #180C
50
51 #Deformacion promedio
52 PEEQ_mean = 0.6744178144976211
53
54 # ----- MODELO -----
55
56 nombre_modelo = "Cu-numPar-"+str(numPar)
57 mod = mdb.Model(name=nombre_modelo)
58
59
60 # ----- GEOMETRIA SUSTRATO -----
61
62 #Sustrato: parte fina
63 sub_fL = diam_part*7 #largo [mm]
64 sub_fH = diam_part*2 #altura [mm]
65 #Sustrato: zona de transicion

```

```

66 sub_tL = sub_fL + 2*diam_part #largo
67 sub_tH = sub_fH + diam_part    #altura
68 #Sustrato dimensiones totales
69 subL = sub_fL*2.5 #largo
70 subH = sub_fH*3    #altura
71
72
73 # ----- PARTE PARTICULA -----
74
75 #Creacion partes
76
77 #Sketch Particula
78 sketch_P = mod.ConstrainedSketch(name='Particula', sheetSize=subL)
79 sketch_P.CircleByCenterPerimeter(center=(0.0, 0.0), point1=(0.0, diam_part/2.))
80
81 #Parte Particula
82 parte_Partacula = mod.Part(dimensionality=TWO_D_PLANAR, name='Particula', type=
    ↪ DEFORMABLE_BODY)
83 parte_Partacula.BaseShell(sketch=sketch_P)
84 del mod.sketches['Particula']
85
86 #Superficie Particula
87 side1Edges_Part = parte_Partacula.edges.findAt(((0.0, diam_part/2., 0.0), ))
88 parte_Partacula.Surface(side1Edges=side1Edges_Part, name='Particula_Superficie')
89
90 #Sketch para mesh
91 AR=10. #factor para hacer cuadrado interior del mesh
92 sketch1 = mod.ConstrainedSketch(name='sketch1', sheetSize=subL)
93 sketch1.rectangle(point2=(-diam_part/AR, -diam_part/AR), point1=(diam_part/AR,
    ↪ diam_part/AR))
94 sketch1.Line(point1=(diam_part/AR, diam_part/AR), point2= (diam_part/2*sin(pi/4.),
    ↪ diam_part/2*sin(pi/4.)))
95 sketch1.Line(point1=(diam_part/AR, -diam_part/AR), point2= (diam_part/2*sin(pi/4.), -
    ↪ diam_part/2*sin(pi/4.)))
96 sketch1.Line(point1=(-diam_part/AR, -diam_part/AR), point2= (-diam_part/2*sin(pi/4.),
    ↪ -diam_part/2*sin(pi/4.)))
97 sketch1.Line(point1=(-diam_part/AR, diam_part/AR), point2= (-diam_part/2*sin(pi/4.),
    ↪ diam_part/2*sin(pi/4.)))
98
99 parte_Partacula.PartitionFaceBySketch(faces=parte_Partacula.faces, sketch=sketch1)

```

```

100 #del sketch1
101
102 # ----- PARTE SUSTRATO -----
103
104 #Creacion partes
105
106 #Sketch Sustrato
107 sketch_S = mod.ConstrainedSketch(name='Sustrato', sheetSize=subL)
108 sketch_S.rectangle(point2=(-subL/2., 0), point1=(subL/2., -subH))
109
110 #Parte
111 parte_Sustrato = mod.Part(dimensionality=TWO_D_PLANAR, name='Sustrato', type=
    ↪ DEFORMABLE_BODY)
112 parte_Sustrato.BaseShell(sketch=sketch_S)
113 del mod.sketches['Sustrato']
114
115 #Superficie inferior
116 side1Edges_Sub = parte_Sustrato.edges.findAt(((0.0, -subH, 0.0), ))
117 SurfSub = parte_Sustrato.Surface(side1Edges=side1Edges_Sub, name='Superficie_Inferior')
118 #Superficie superior
119 side1Edges_Sup = parte_Sustrato.edges.findAt(((0,0,0),))
120 parte_Sustrato.Surface(side1Edges=side1Edges_Sup, name='Superficie_Superior')
121
122 #Sketch para mesh
123 sketch2 = mod.ConstrainedSketch(name='sketch2', sheetSize=subL)
124 sketch2.rectangle(point2=(-sub_fL/2., 0), point1=(sub_fL/2., -sub_fH)) #Parte fina
125 sketch2.rectangle(point2=(-sub_tL/2, 0), point1=(sub_tL/2, -sub_tH)) #Parte transicion
126 #sketch2.Line(point1=(-subL/2.,-sub_tH), point2=(subL/2.,-sub_tH))
127
128 parte_Sustrato.PartitionFaceBySketch(faces=parte_Sustrato.faces, sketch=sketch2)
129 del sketch2
130
131 #Superficie de impacto
132 side1Edges_Imp = parte_Sustrato.edges.findAt(((0,0,0),))
133 SurfSubImpact = parte_Sustrato.Surface(side1Edges=side1Edges_Imp, name='
    ↪ Superficie_Impacto')
134
135 # ----- MATERIAL -----
136
137 copper = mod.Material(name='Copper')

```

```

138 copper.Conductivity(table=((386.5, ), ))
139 copper.Density(table=((8.9E-009, ), ))
140 copper.Elastic(type=SHEAR, table=((44700.0,)), )
141 copper.Eos(table=((3940000.0, 1.489, 2.02), ), type=USUP)
142 copper.Plastic(hardening=JOHNSON_COOK, table=((90.0, 292.0, 0.31, 1.09, 1356.0, 298.0)
    ↪ , ))
143 copper.plastic .RateDependent(table=((0.025, 1.0), ), type=JOHNSON_COOK)
144 copper.SpecificHeat(table=((383000000.0, ), ))
145 #copper.InelasticHeatFraction(fraction=0.9)
146
147 # ----- SECCIONES -----
148 #Crear secciones y asignar
149
150 #Particula
151 secc_part = mod.HomogeneousSolidSection(material='Copper', name='Particula Section')
152 parte_Partacula.SectionAssignment(region=Region(faces=parte_Partacula.faces),
    ↪ sectionName='Particula Section')
153
154 #Sustrato
155 secc_sub = mod.HomogeneousSolidSection(material='Copper', name='Sustrato Section')
156 parte_Sustrato.SectionAssignment(region=Region(faces=parte_Sustrato.faces), sectionName
    ↪ ='Sustrato Section')
157
158 # ----- MESH -----
159
160 #PARTICULA -----
161
162 meshsize=diam_part/30. #Tamaño mesh
163
164 parte_Partacula.setMeshControls(elemShape=QUAD, technique=FREE, regions=
    ↪ parte_Partacula.faces)
165 #parte_Partacula.setMeshControls(elemShape=TRI, technique=FREE, regions=
    ↪ parte_Partacula.faces)
166 parte_Partacula.seedPart(size=meshsize, deviationFactor=0.1, minSizeFactor=0.1)
167 elemQuad = ElemType(elemCode=CPE4RT, elemLibrary=EXPLICIT,
    ↪ secondOrderAccuracy=OFF)
168 #elemTri = ElemType(elemCode=CPE3T, elemLibrary=EXPLICIT)
169 parte_Partacula.setElementType(elemTypes=(elemQuad,), regions=Region(faces=
    ↪ parte_Partacula.faces))
170 parte_Partacula.generateMesh()

```

```

171
172 #SUSTRATO -----
173 meshsize_f = meshsize      #Parte fina
174 meshsize_t = meshsize_f*4 #Parte transicion
175 meshsize_m = meshsize_t*4 #Parte gruesa
176
177 #MESH PARTE FINA
178 SubFaces_f = parte_Sustrato.faces.findAt(((0,-sub_tH*0.9,0),),)
179 SubEdges_f = parte_Sustrato.edges.findAt(((0,0,0),)((0 , -sub_fH, 0),)((- sub_fL/2., -
    ↪ sub_fH/2., 0), ),((sub_fL/2., -sub_fH/2.,0),)) #Bordes fina
180 parte_Sustrato.seedEdgeBySize(edges=SubEdges_f, size=meshsize_f, constraint=FINER)
181 parte_Sustrato.setMeshControls(elemShape=QUAD, technique=FREE, regions=SubFaces_f)
182 elemQuad = ElemType(elemCode=CPE4RT, elemLibrary=EXPLICIT,
    ↪ secondOrderAccuracy=OFF)
183 #elemTri = ElemType(elemCode=CPE3T, elemLibrary=EXPLICIT, secondOrderAccuracy=
    ↪ OFF, distortionControl=ON, lengthRatio=0.1)
184 parte_Sustrato.setElementType(elemTypes=(elemQuad,), regions=(parte_Sustrato.faces,))
185
186 #MESH TRANSICION
187 SubEdges_t = parte_Sustrato.edges.findAt(((0.9*sub_tL/2.,0,0),)((-0.9*sub_tL/2.,0,0),)
    ↪ ,((0, -sub_tH, 0), ),)((- sub_tL/2., -0.9*sub_tH, 0),)((sub_tL/2., -0.9*sub_tH, 0),))
    ↪ #Bordes transicion
188 parte_Sustrato.seedEdgeBySize(edges=SubEdges_t, size=meshsize_t, constraint=FINER)
189
190 #MESH GRUESO
191 SubEdges_m = parte_Sustrato.edges.findAt(((0.9*subL/2.,0,0),)((-0.9*subL/2.,0,0),)((0, -
    ↪ subH, 0), ),)((- subL/2., -0.9*subH, 0),)((subL/2., -0.9*subH, 0),)) #Bordes
    ↪ transicion
192 parte_Sustrato.seedEdgeBySize(edges=SubEdges_m, size=meshsize_m, constraint=FINER)
193
194 parte_Sustrato.setMeshControls(elemShape=QUAD, technique=FREE, regions=
    ↪ parte_Sustrato.faces)
195 #parte_Sustrato.setMeshControls(elemShape=TRI, technique=FREE, regions=
    ↪ parte_Sustrato.faces)
196 #elemTri = ElemType(elemCode=CPE3T, elemLibrary=EXPLICIT, secondOrderAccuracy=
    ↪ OFF, distortionControl=ON, lengthRatio=0.1)
197 parte_Sustrato.setElementType(elemTypes=(elemQuad,), regions=Region(faces=
    ↪ parte_Sustrato.faces))
198 #parte_Sustrato.setElementType(elemTypes=(elemTri,), regions=(parte_Sustrato.faces,))
199 parte_Sustrato.generateMesh()

```



```

200
201 # ----- STEPS
    ↪ -----
202
203 step=mod.TempDisplacementDynamicsStep(name='Step-1', previous='Initial', timePeriod=5
    ↪ e-08, scaleFactor=1.0, nlgeom=True)
204
205 # ----- OUTPUTS
    ↪ -----
206
207 mod.fieldOutputRequests['F-Output-1'].setValues(variables=('S', 'PE', 'PEEQ', 'TEMP', 'ER'
    ↪ , 'LE', 'U', 'V', 'A', 'RF', 'CSTRESS', 'ENER', 'NT', 'HFL', 'RFL', 'EVOL', '
    ↪ DENSITY'))
208 mod.fieldOutputRequests['F-Output-1'].setValuesInStep(stepName='Step-1', numIntervals
    ↪ =200)
209
210 # ----- INTERACTION PROPERTIES
    ↪ -----
211
212 #ADHESION
213 mod.ContactProperty('Adhesion')
214 mod.interactionProperties['Adhesion'].TangentialBehavior(formulation=PENALTY, table
    ↪ =((0.4, ), ), fraction=0.005, shearStressLimit=None, maximumElasticSlip=
    ↪ FRACTION)
215 mod.interactionProperties['Adhesion'].NormalBehavior(pressureOverclosure=HARD,
    ↪ allowSeparation=OFF)
216 mod.interactionProperties['Adhesion'].HeatGeneration()
217
218 #SEPARACION
219 mod.ContactProperty('Separacion')
220 mod.interactionProperties['Separacion'].TangentialBehavior(formulation=PENALTY, table
    ↪ =((0.4, ), ), fraction=0.005, shearStressLimit=None, maximumElasticSlip=
    ↪ FRACTION)
221 mod.interactionProperties['Separacion'].NormalBehavior(pressureOverclosure=HARD,
    ↪ allowSeparation=ON)
222 mod.interactionProperties['Separacion'].HeatGeneration()
223
224 # ----- ASSEMBLY
    ↪ -----
225

```

```

226 #SUSTRATO -----
227 a = mod.rootAssembly
228 a.DatumCsysByDefault(CARTESIAN)
229 assem_Sustrato = a.Instance(name='Sustrato', part=parte_Sustrato, dependent=ON)
230
231 #BC
232 edges1 = assem_Sustrato.edges.findAt(((0,-subH,0),),)
233 mod.EncastreBC(createStepName='Initial',name='Empotrado inferior', region=Region(edges
    ↪ =edges1))
234 edges2 = assem_Sustrato.edges.findAt((-subL/2,-subH/2,0),),)
235 mod.EncastreBC(createStepName='Initial',name='Empotrado izq', region=Region(edges=
    ↪ edges2))
236 edges3 = assem_Sustrato.edges.findAt(((subL/2,-subH/2,0),),)
237 mod.EncastreBC(createStepName='Initial',name='Empotrado der', region=Region(edges=
    ↪ edges3))
238
239 #CONDICIONES INICIALES
240 mod.Temperature(createStepName='Initial', magnitudes=TempSustrato, name='
    ↪ Temperatura inicial Sustrato', region=Region(faces=assem_Sustrato.faces))
241
242 mod.KinematicHardening(name='Deformacion', region=Region(faces=assem_Sustrato.faces),
    ↪ field='', distributionType=MAGNITUDE, numBackStress=1, equivPlasticStrain=(
    ↪ PEEQ_mean, ), backStress=((1.0, 1.0, 1.0, 0.0,
243     0.0, 0.0), ))
244
245 #INTERACCION SUSTRATO-SUSTRATO
246 mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Step-1', name='Sustrato - Sustrato',
    ↪ interactionProperty='Separacion', master=assem_Sustrato-surfaces[
    ↪ Superficie_Superior'], slave=assem_Sustrato-surfaces[Superficie_Superior'], sliding=
    ↪ FINITE)
247
248
249
250 #PARTICULAS -----
251
252 adheridas = int(math.ceil(DE*numPar)) #Numero de particulas que se adhieren
253 rebotan = (numPar-adheridas) #Numero de particulas que rebotan
254
255 L = list(range(0,numPar)) #crea lista de particulas
256 random.shuffle(L) #baraja la lista

```

```

257 np.savetxt("lista_particulas_malla.txt", L)
258 #L = np.loadtxt("lista_particulas_malla.txt")
259
260 L_adh = L[:adheridas] #crea otra lista con las particulas adheridas
261 L_adh.sort() #ordena la lista
262 L_reb = L[adheridas:numPar] #crea otra lista con las particulas que rebotan
263 L_reb.sort()
264
265
266 facesALEE = assem_Sustrato.faces.findAt(((0,0,0)),)
267 impactW = sub_fL-2*diam_part
268
269 assem_Partacula = []
270 for i in range(numPar):
271     #INSTANCIAS
272     assem_Partacula.append(a.Instance(name='Partacula '+str(i), part=parte_Partacula,
273     ↪ dependent=ON))
274     assem_Partacula[i].translate((-diam_part*9/4.+i*diam_part*3/2., diam_part/2., 0.))
275
276     #CONDICIONES INICIALES
277     mod.Velocity(name='Velocidad'+str(i), region=Region(faces=assem_Partacula[i].faces),
278     ↪ velocity1=0.0, velocity2=-vel, omega=0.0)
279     mod.Temperature(createStepName='Initial', magnitudes=TempPartacula, name='
280     ↪ Temperatura inicial Partacula '+str(i), region=Region(faces=assem_Partacula[i].faces)
281     ↪ )
282
283
284
285 #INTERACCIONES
286 vector_adh = []
287 for i in range(numPar):
288     facesALE=facesALEE+assem_Partacula[i].faces
289
290     #Si se adhiere
291     if i in L_adh:
292         #Interaccion Sustrato - Partacula
293         mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Step-1', name='Sustrato -
294         ↪ Partacula '+ str(i) + ' (adh)', interactionProperty='Adhesion', master=
295         ↪ assem_Partacula[i].surfaces['Partacula_Superficie'], slave=assem_Sustrato.surfaces['
296         ↪ Superficie_Superior'], sliding=FINITE)
297         vector_adh.append(i)

```

```

290
291     #Interaccion con las otras particulas adheridas previamente (Particula - Particula) y
↪ ella misma
292     for j in vector_adh[0:len(vector_adh)]:
293         mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Step-1', name='Particula '+
↪ str(j) + ' - Particula '+ str(i), interactionProperty='Adhesion', master=
↪ assem_Partricula[i].surfaces['Particula_Superficie'], slave=assem_Partricula[j].surfaces
↪ ['Particula_Superficie'], sliding =FINITE)
294
295 #Si se separa
296 if i in L_reb:
297     #Interaccion Sustrato - Particula
298     mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Step-1', name='Sustrato -
↪ Particula '+ str(i) + ' (no adh)', interactionProperty='Separacion', master=
↪ assem_Partricula[i].surfaces['Particula_Superficie'], slave=assem_Sustrato.surfaces['
↪ Superficie_Superior'], sliding =FINITE)
299
300     #Interaccion con las otras particulas adheridas previamente (Particula - Particula)
301     for j in vector_adh[0:len(vector_adh)]:
302         mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Step-1', name='Particula '+str
↪ (j)+' - Particula '+ str(i) + ' (no adh)', interactionProperty='Separacion', master=
↪ assem_Partricula[i].surfaces['Particula_Superficie'], slave=assem_Partricula[j].surfaces
↪ ['Particula_Superficie'], sliding =FINITE)
303
304     #Interaccion con ella misma
305     mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Step-1', name='Particula '+ str(i)
↪ + ' (no adh)'+ ' - Particula '+ str(i) + ' (no adh)', interactionProperty='Separacion',
↪ master=assem_Partricula[i].surfaces['Particula_Superficie'], slave=assem_Partricula[i
↪ ].surfaces['Particula_Superficie'], sliding =FINITE)
306
307
308 mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Step-1', name='Particula 0 - Particula 1
↪ ', interactionProperty='Separacion', master=assem_Partricula[0].surfaces['
↪ Particula_Superficie'], slave=assem_Partricula[1].surfaces['Particula_Superficie'],
↪ sliding =FINITE)
309 mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Step-1', name='Particula 1 - Particula 2
↪ ', interactionProperty='Separacion', master=assem_Partricula[1].surfaces['
↪ Particula_Superficie'], slave=assem_Partricula[2].surfaces['Particula_Superficie'],
↪ sliding =FINITE)
310 mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Step-1', name='Particula 2 - Particula 3

```

```

↪ ', interactionProperty='Separacion', master=assem_Partricula[2].surfaces['
↪ Particula_Superficie'], slave=assem_Partricula[3].surfaces['Particula_Superficie' ],
↪ sliding =FINITE)
311
312 # ----- ALE -----
313
314 #Set controls
315 mod.AdaptiveMeshControl(name='AdaptControl', curvatureRefinement=1.0,
↪ smoothingAlgorithm=GEOMETRY_ENHANCED, volumetricSmoothingWeight=1.0,
↪ laplacianSmoothingWeight=0.0, equipotentialSmoothingWeight=0.0)
316 #Set domains
317 step.AdaptiveMeshDomain(region=Region(faces=facesALE), controls='AdaptControl',
↪ initialMeshSweeps=10, meshSweeps=10,frequency=1)
318
319 # ----- JOB -----
320 nombre_job = str(numPar)+'-Particulas-Fila1'
321 mdb.Job(name=nombre_job, model=nombre_modelo)

```