



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

**SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE DEPOSICIÓN DE PARTÍCULAS Y  
EVALUACIÓN DE LA DUREZA DE UN RECUBRIMIENTO DE COBRE Y  
ALUMINIO PRODUCIDO POR COLD SPRAY**

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO

**JOSÉ ANTONIO GUTIÉRREZ SALAZAR**

PROFESOR GUÍA:  
RUBÉN FERNÁNDEZ URRUTIA

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:  
RODRIGO PALMA HILLERNS  
AQUILES SEPÚLVEDA OSSES

SANTIAGO DE CHILE  
2021

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR  
AL TÍTULO INGENIERO CIVIL MECÁNICO  
POR: JOSÉ ANTONIO GUTIÉRREZ SALAZAR  
FECHA: 2021  
PROF. GUÍA: RUBÉN FERNÁNDEZ URRUTIA

## **SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE DEPOSICIÓN DE PARTÍCULAS Y EVALUACIÓN DE LA DUREZA DE UN RECUBRIMIENTO DE COBRE Y ALUMINIO PRODUCIDO POR COLD SPRAY**

*Cold Spray* es una técnica de manufactura aditiva cuyo fin es producir un recubrimiento, ya sea para restaurar o manufacturar una pieza. Para esto se utilizan micropartículas las que se aceleran con gas impactando en el sustrato a alta velocidad. Dado que en el proceso no se eleva la temperatura (relativa al material a depositar) para depositar el recubrimiento final posee una baja tasa de producción de óxido.

Dado la naturaleza de la deposición, los efectos de deformación y posterior adherencia de las partículas ocurren en escala nanotemporal; por lo cual es muy complejo evidenciar experimentalmente el proceso. Por esta razón se recurre a la simulación numérica para evaluar y/o predecir las propiedades de un recubrimiento. Bajo esta premisa de evaluar nace el título de este trabajo en el cual se estudia la dureza Vickers de un recubrimiento de cobre y aluminio depositado sobre un sustrato de aluminio 6061-T6.

El objetivo de este trabajo fue evaluar la capacidad de una simulación computacional para obtener la dureza de un recubrimiento cobre- aluminio. Para lograr este objetivo se utilizó el programa ABAQUS simulando la deposición de partículas de Cobre y Aluminio. Para dicha simulación se disponía de información experimental de la deposición, la que se complementó con estudios previos para realizar una validación inicial con un modelo de similares características. Posteriormente se simuló la deposición de partículas esféricas de un diámetro de aluminio y cobre de  $25\mu m$  y  $10\mu m$  respectivamente; esta nos entregó resultados de las deformaciones plástica que sufren las partículas. A partir del modelo de esfuerzo-deformación de Hollomon se estimó el esfuerzo de fluencia para finalmente por medio de relaciones empíricas calcular la dureza del recubrimiento.

Al comparar los resultados numéricos con los experimentales, se obtuvieron diferencias del orden de 4% y 2.8%. Entre las principales conclusiones se obtuvo que a mayor deformación plástica de las partículas mayor es el esfuerzo de fluencia y a su vez es mayor la dureza del recubrimiento. De esta manera es posible realizar simulaciones numéricas que entreguen aproximaciones sobre la dureza de los recubrimientos multi-material obtenidos mediante *Cold Spray*.

*Dedicado a mis Padres*

# Agradecimientos

Quiero agradecer a mi familia. Mamá y Papá los cuales me apoyaron e impulsaron a seguir adelante hasta el día de hoy. A mis hermanos Rubén y Nacho, ellos siempre me levantan el ánimo y me sacan una sonrisa. También doy gracias a mis padrinos Luisa y Vicente, que alegraron mi infancia y me entregaron mucho amor y cariño.

Quiero agradecer a Camilita por acompañarme y apoyarme en el proceso, entregándome palabras de ánimo y escuchándome dándome energía en los momentos en los que perdía la fuerza y las ganas para continuar.

A mi profesor guía Rubén, siempre estuvo presente para resolver cualquier duda, por su buena voluntad y apoyo que entregó no solo a mi, sino que a todo el grupo de memoristas en pandemia. Agradezco a mis profesores co-guía e integrante, Rodrigo y Aquiles, me ayudaron a completar la memoria y estuvieron presentes frente a cualquier infortunio.

Agradezco a todas las amistades que desarrolle durante mi paso por la universidad, en plan común a los miembros del escuadrón vikingo o algo relacionado. Un Grupo en el cual el principal objetivo era reírse y comer, gracias a ellos tengo y tendré grandes recuerdos de los primeros años. Ahora ya en especialidad me encuentro con el grupo “Gente bonita del cuarto”, en este grupo el apoyo y la comprensión son las piedras angulares, pude encontrar un espacio entre odiar las tareas y darnos animo mutuamente para terminar los semestres generando grandes recuerdos y amigos.

De forma especial agradezco a Landa y Erick, aún me cuesta entender cómo siendo muchas veces tan distintos en ideas y formas de enfrentar situaciones de alguna forma encajamos a la perfección, gracias por ayudarme a ver las cosas de otra forma, a pensar desde otros puntos de vista, esto contribuyó a mi desarrollo tanto personal como profesional.

Concluyendo agradezco a todos los cuales me ayudaron por el paso en la universidad, fueron muchas las personas que conocí y que me marcaron de una u otra forma, encontré apoyo y comprensión, una red de personas maravillosas, entre todos superamos lo que significa estudiar lejos de la casa.

# Tabla de Contenido

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Objetivos . . . . .	1
1.1.1. Objetivo general . . . . .	1
1.1.2. Objetivos específicos . . . . .	2
1.2. Alcances . . . . .	2
<b>2. Antecedentes</b>	<b>3</b>
2.1. <i>Thermal spray</i> . . . . .	3
2.2. Cold Spray . . . . .	4
2.2.1. Mecanismos de adhesión . . . . .	5
2.2.2. Gas portador . . . . .	6
2.3. Simulación numérica . . . . .	7
2.3.1. Enfoques del problema . . . . .	8
2.3.2. Ecuaciones de estado . . . . .	8
2.3.3. Controles Adaptativos . . . . .	10
2.3.4. Control de Hourglass . . . . .	10
2.4. Dureza . . . . .	11
2.4.1. Mecanismos de endurecimiento en metales . . . . .	11
2.4.2. Dureza Vickers . . . . .	12
<b>3. Metodología</b>	<b>13</b>
3.1. Elaboración Experimental del Recubrimiento de Aluminio-Cobre sobre sustrato de Aluminio . . . . .	13
3.2. Modelo computacional . . . . .	15
3.2.1. Validación computacional . . . . .	15
3.2.2. Modelo físico . . . . .	15
3.2.3. Tamaño de las partículas . . . . .	16
3.2.4. Parámetros de materiales . . . . .	17
3.2.5. Temperatura de partículas . . . . .	17
3.2.6. Temperatura de sustrato . . . . .	18
3.2.7. Número de partículas . . . . .	19
3.2.8. Simulación Abaqus . . . . .	20
3.3. Cálculo de dureza . . . . .	24
3.3.1. Cálculo esfuerzo de fluencia . . . . .	24
3.3.2. Cálculo de Dureza . . . . .	25
<b>4. Validación</b>	<b>26</b>
4.1. Geometría . . . . .	26

4.2. Condiciones de borde . . . . .	27
4.3. Mallado . . . . .	27
4.4. Condiciones iniciales y propiedades del material . . . . .	28
4.5. Resultados y análisis . . . . .	29
<b>5. Resultados</b>	<b>31</b>
5.1. Resultado sensibilidad de malla . . . . .	31
5.2. Resultados Simulaciones . . . . .	33
<b>6. Discusión y Conclusiones</b>	<b>37</b>
6.1. Discusión de Resultados . . . . .	37
6.2. Conclusiones . . . . .	38
<b>Bibliografía</b>	<b>40</b>
<b>Anexo A. Código Python</b>	<b>42</b>

# Índice de Tablas

2.1.	Velocidades críticas de diferentes material para partícula de 20 $\mu m$ [8]. . . . .	7
3.1.	Parámetros de proceso de Cold-Spray . . . . .	14
3.2.	Parámetros Johnson-Cook y Mie-Grüneisen para los materiales utilizados. . . . .	17
3.3.	Parámetros composición de muestra durante el proceso. [19] . . . . .	19
3.4.	Parámetros de composiciones utilizadas en las simulaciones. Elaboración propia. . . . .	20
3.5.	Parámetros de condiciones iniciales utilizados en la simulación. Elaboración propia. . . . .	21
3.6.	Propiedades de interacción utilizada en la simulación. Elaboración propia. . . . .	23
3.7.	Tamaño de mallado y medidas del sustrato. Elaboración propia. . . . .	23
3.8.	Parámetros modelo Hollomon. . . . .	25
4.1.	Propiedades del aluminio [7]. . . . .	28
5.1.	Evolución del PEEQ 1 <sup>a</sup> partícula de cobre. Elaboración propia. . . . .	31
5.2.	Evolución del PEEQ 1 <sup>a</sup> partícula de aluminio. Elaboración propia. . . . .	31
5.3.	PEEQ 1 <sup>a</sup> partícula de aluminio. Elaboración propia. . . . .	32
5.4.	PEEQ 1 <sup>a</sup> partícula de Cobre. Elaboración propia. . . . .	32
5.5.	Deformación plástica y volumen para partículas efectivamente adheridas en ambos modelos. Elaboración propia. . . . .	34
5.6.	Esfuerzo de fluencia y Dureza calculado por medio del modelo de Hollomon. Elaboración propia. . . . .	35
5.7.	Esfuerzo de fluencia y Dureza calculado por medio del modelo de Johnson-Cook. Elaboración propia. . . . .	35
5.8.	Dureza ponderada por volumen para cada modelo. Elaboración propia . . . . .	36

# Índice de Ilustraciones

2.1.	Comparación en temperatura y velocidad de diferentes procesos de aspersión térmica [1]. . . . .	3
2.2.	Esquema proceso HVOF [1]. . . . .	4
2.3.	Esquema del proceso [2]. . . . .	5
2.4.	Fotografía de la interfaz cobre aluminio [6], en la cual se muestra entrecruzamiento	6
2.5.	Tipos de enfoques. Elaboración propia. . . . .	8
2.6.	Comparación de control adaptativo [10]. . . . .	10
2.7.	Ejemplos de deformación de un elemento. . . . .	11
3.1.	Polvos utilizados en la manufactura de recubrimiento. (a) Aluminio [20] y en (b) Cobre[21] . . . . .	14
3.2.	Microscopia electrónica recubrimiento Cu-Al [19] . . . . .	15
3.3.	Esquema de Modelo computacional de impacto. Elaboración propia. . . . .	16
3.4.	Distribución de tamaños de partículas . . . . .	16
3.5.	Temperatura de impacto de partículas en función de la presión y temperatura del gas [8] . . . . .	18
3.6.	Temperatura máxima de sustrato en función de temperatura del gas de proceso [23] . . . . .	19
3.7.	Esquema del los casos a simular. Elaboración propia . . . . .	20
3.8.	Condiciones de borde aplicadas en el sustrato. Elaboración propia . . . . .	21
3.9.	Zonas de mallado del sustrato. Elaboración propia. . . . .	23
4.1.	Esquema de la geometría del modelo axisimétrico 2D [7]. . . . .	26
4.2.	Condiciones de borde descritas por [7]. Elaboración propia. . . . .	27
4.3.	Mallado descrito por Xie [7]. Elaboración propia. . . . .	27
4.4.	Perfil de esfuerzo plástico equivalente. Tiempo evaluado desde el impacto. . . . .	29
4.5.	Perfil de temperatura. Tiempo evaluado desde el impacto. . . . .	29
4.6.	Esfuerzo plástico equivalente en sustrato y partícula. . . . .	30
5.1.	Evolución de PEEQ de la primera partícula. . . . .	32
5.2.	Configuración modelo 1. . . . .	33
5.3.	Configuración modelo 2. . . . .	34

# Capítulo 1

## Introducción

*Cold Spray* (CS) se posiciona como una técnica con grandes posibilidades de aplicaciones tanto de restauración como de manufactura. Esto se debe principalmente a la baja tasa de producción de óxidos en el proceso junto con su deposición laminar que puede ser de altos espesores y la posibilidad de depositar una mezcla de materiales. Bajo esta última característica nace la relevancia de este trabajo: simular la deposición de dos materiales, en particular cobre y aluminio, para posteriormente evaluar su dureza.

Actualmente existe la necesidad de poseer mejores propiedades o mayor control sobre la exactitud o predicción de estas. Esto se puede obtener por medio de mayores controles en los procesos de producción, nuevos materiales, o la combinación de materiales y proceso de producción. En particular en la aleación de cobre aluminio, existe en aplicaciones en el campo de la aeronáutica, marítima y de control biológico (antibacterial).

La finalidad de este trabajo de título es simular la deposición cobre aluminio con el fin de predecir las propiedades mecánicas, en específico la dureza, con el fin de tener una mejor aplicación. Esto se debe a que no se posee la tecnología para realizarlo experimentalmente, debido a que el proceso ocurre en la escala de los nanosegundos, además realizar la deposición es incurrir en un alto costo relacionado con las materias primas del recubrimiento.

Para la realización de está simulación se debe de realizar por medio de un programa de elemento finito el que trasforma un problema continuo un muchos problemas de pequeño tamaño, permitiendo discretizar las fuerzas y así se obtiene un resultado aproximado a la realidad.

### 1.1. Objetivos

#### 1.1.1. Objetivo general

Evaluar la capacidad de una simulación computacional para obtener valores de dureza de un recubrimiento de Cobre y Aluminio generado por *Cold Spray*.

### 1.1.2. Objetivos específicos

Para lograr el objetivo se plantean los siguientes puntos:

- Simular computacionalmente la deposición de partículas con programa de elementos finitos ABAQUS.
- Determinar el esfuerzo de fluencia a partir de la deformación plástica obtenida de las simulaciones.
- Relacionar el esfuerzo de fluencia con la dureza para ambos materiales
- Determinar la dureza del recubrimiento simulado y comparar con resultados experimentales.

## 1.2. Alcances

El alcance de este trabajo de título se limita a la simulación numérica de impactos de múltiples partículas de cobre y aluminio en un sustrato de aluminio.

El método de análisis de elemento finitos es explícito de enfoque lagrangiano en el software ABAQUS.

Las partículas se consideran esféricas con un diámetro fijo, el proceso se considera adiabático. El resultado de la simulación es determinar la deformación plástica y temperatura de la partícula para luego determinar la dureza del recubrimiento.

Los datos experimentales se contrastaran con una muestra manufacturada gracias al apoyo de la Universidad de Ottawa. A la cual se realizo la medición experimental de dureza en un trabajo previo.

# Capítulo 2

## Antecedentes

### 2.1. *Thermal spray*

*Thermal spray* o aspersión térmica (AS) es una técnica de manufactura aditiva, en la cual un gas porta partículas de un material a depositar, este puede estar calentado en diferentes temperaturas, dejando la posibilidad de que el material a depositar se encuentre en diferentes estados físicos. Esta técnica posee diferentes subtipos, tales como *wire flame*, Plasma, HVOF, entre otros como se muestra en la figura 2.1. La principal diferencia entre cada técnica es la temperatura y la velocidad de deposición. Un punto crítico de la aspersión térmica es el entorno (medio) en el cual se desarrolla la aplicación y la temperatura del material; debido a que a elevadas temperaturas y en presencia de oxígeno se produce una alta tasa de oxidación en el recubrimiento, lo cual cambia las propiedades mecánicas del recubrimiento.

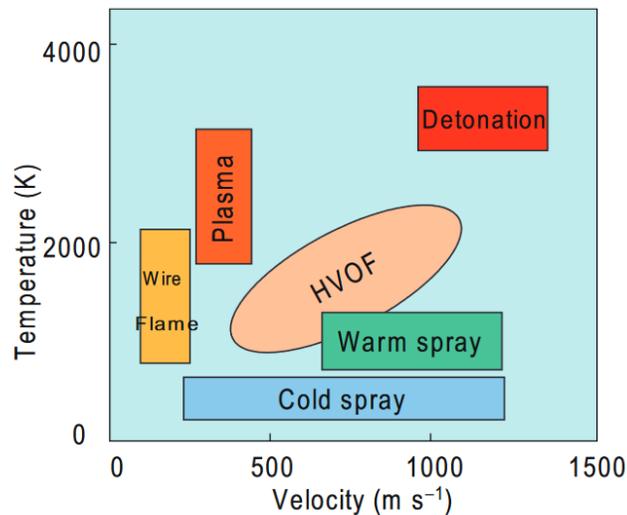


Figura 2.1: Comparación en temperatura y velocidad de diferentes procesos de aspersión térmica [1].

*Wire flame* es el proceso de aspersión térmica más antiguo, este fue desarrollado entre el año 1910 al 1920 [1]. En este proceso el material tiene forma inicial de alambre, que es fundido a través de la combustión de oxígeno y acetileno, para luego ser impulsado por medio de aire comprimido en la superficie del sustrato, generando así el recubrimiento.

Luego en la década de 1970 con la generación del arco eléctrico de alta energía se generó un nuevo método de aspersión térmica conocido como "Plasma"[1]. A diferencia del método anterior en este es necesario que el material a depositar se encuentre en forma de polvo. El proceso consiste en que luego de cargar el polvo en el gas portador este pasa a través del arco para ser fundido y finalmente ser depositado en el sustrato.

Durante la década de 1980 fue desarrollado un nuevo proceso llamado "*High Velocity Oxy-Fuel* (HVOF)"[1]. Este consiste en una combustión continua entre un combustible gaseoso y oxígeno, los gases resultantes de la combustión son dirigidos hacia una tobera convergente-divergente donde se agregan las partículas en forma de polvo deseadas de depositar, luego es disparado para generar el recubrimiento en el sustrato. Este proceso se puede visualizar en el esquema del proceso en la figura 2.2. Esta técnica es una de las mejores en la deposición de Cermet y otros recubrimientos resistentes a la corrosión como acero inoxidable y aleaciones en base a níquel.

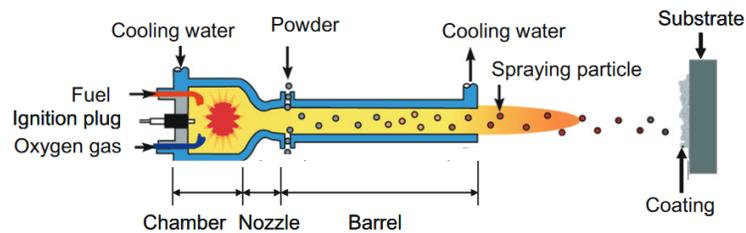


Figura 2.2: Esquema proceso HVOF [1].

## 2.2. Cold Spray

*Cold Spray* (CS) es un proceso de manufactura aditiva en el cual un gas portador acelera las partículas a velocidades supersónicas, las cuales impactan en el sustrato donde estas pueden adherirse generando un recubrimiento. El proceso se muestra en la figura 2.3, con respecto a esto existen dos configuraciones para el proceso: la primera en la figura 2.3(a), en la que se puede observar cómo una porción del gas portador es cargado con partículas mientras el resto en forma paralela es calentado, para luego converger en el inicio de la tobera, la cual es del tipo laval convergente divergente; en esta parte del proceso se produce el último aumento de velocidad para que las partículas sean proyectadas al sustrato [2]. Este método es conocido como *High pressure cold spray* y es utilizado en materiales de alta densidad y los gases portadores preferidos para este método son nitrógeno o helio. La segunda configuración mostrada en la figura 2.3(b) es conocida como *low pressure cold spray*. En esta los polvos de material son agregados en la zona divergente de la tobera lo que produce una menor velocidad final. Esta técnica es utilizada para materiales más livianos y el gas portador puede ser aire o nitrógeno.

*Cold Spray* utilizada como una técnica de aspersión térmica posee una ventaja significativa con respecto a las otras técnicas dentro de la categoría, esto debido a que la temperatura de la partícula a depositar no supera la temperatura de fusión del metal, reduciendo así la posibilidad de creación de óxidos en el recubrimiento; permitiendo que la composición y microestructura se mantenga similar a los polvos originales, generando un recubrimiento limpio en la estructura final.

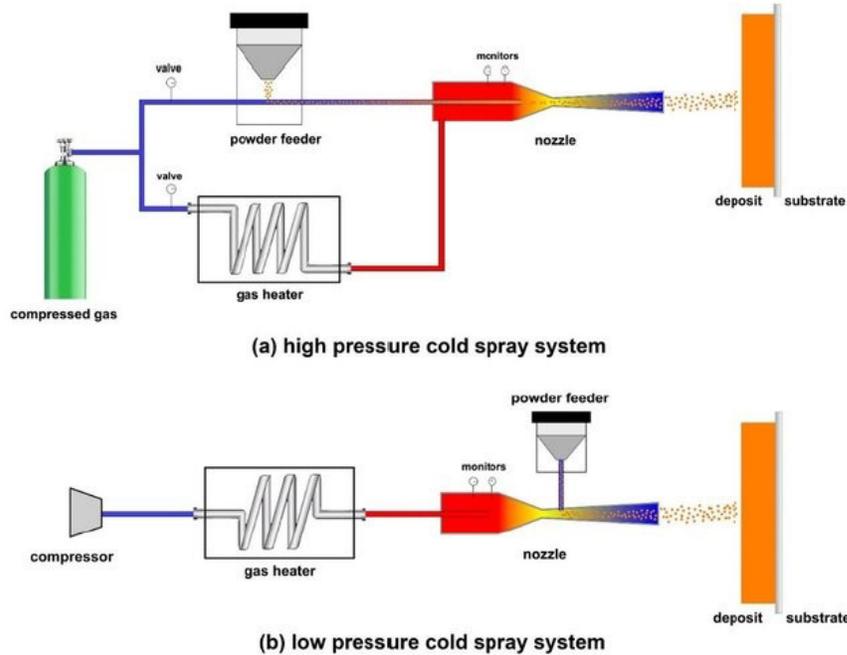


Figura 2.3: Esquema del proceso [2].

En la figura 2.3 se observa como el gas portador ingresa al calentador, el que puede alcanzar una temperatura máxima de  $500^{\circ}\text{C}$  para posteriormente pasar en conjunto a los polvos del material a la tobera convergente divergente. En la superficie de interacción se observa la creación de una unión mecánica dada por la deformación plástica de las partículas, ya que estas portan alta energía cinética.

### 2.2.1. Mecanismos de adhesión

Para que ocurra la adhesión existen variados mecanismos de unión descritos según diferentes autores. Un mecanismo propone la interacción mecánica entre sustrato y partícula a nivel nano y micrométrico, generando así una penetración en el sustrato, calentamiento interfacial y jet líquido debido al impacto de alta velocidad [3].

Un segundo mecanismo de adhesión es la adhesión metalúrgica, esta actúa por medio de Adiabatic Shear Inestability (ASI) [4]. Este se genera por medio del impacto de una partícula con el sustrato o con una partícula ya adherida, produciendo que se eleve su temperatura hasta casi el punto de fusión generando un enlace metálico [5]. Lo anterior se logra dado que se transforma la energía cinética en energía térmica en un corto período de tiempo.

Estos dos métodos se pueden clasificar en: entrecruzamiento mecánico y adhesión metalúrgica, siendo la primera la más importante según Hussain [6], esta describe la deformación plástica producida entre el sustrato/partícula y partícula/partícula en la que se crean interacciones mecánicas. En la figura 2.4 se muestra una fotografía de la interacción. Este método será la principal adherencia entre los materiales para generar el recubrimiento. El segundo método puede estar presente junto al primero, pero es necesario que localmente las partículas alcancen la temperatura de fusión en superficie y que la interacción en el impacto rompa la posible capa superficial de óxido presente en las partículas, permitiendo el contacto entre materiales. En el caso de pulir la muestra y ser recocida la interacción metalúrgica contribuye más según Hussain [6].

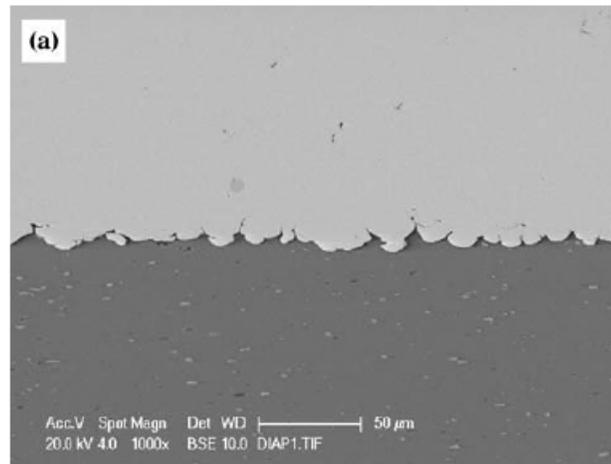


Figura 2.4: Fotografía de la interfaz cobre aluminio [6], en la cual se muestra entrecruzamiento

### 2.2.2. Gas portador

El gas portador es el encargado de la deposición de los polvos para generar el recubrimiento. Este definirá las características del recubrimiento que están establecidos por diversos parámetros, tales como peso molecular del gas, presión del gas, temperatura del gas, interacción del gas con las partículas, tamaño de la partícula, tiempo de residencia de la partícula en el gas de alta velocidad, interacción de la partícula con la onda de choque del chorro en la superficie del sustrato, largo de la tobera, entre otros [7]. Dichos parámetros controlan la velocidad con la que la partícula metálica impacta en el sustrato; estableciendo el grado de porosidad del recubrimiento y el grado de adhesión, si supera la velocidad crítica.

Si se desea asegurar una adecuada deposición de partículas a través de una buena tasa de adherencia, se debe asegurar como mínimo cumplir con las velocidades críticas descritas en la tabla 2.1, la cual nos asegura poseer la energía suficiente para poder efectuar la deformación y/o temperatura requerida para realizar la adhesión. Esta velocidad esta relacionada con los parámetros antes descritos, además tenemos que asegurar de forma paralela la semejanza antes de aplicarla como criterio para la eficiencia de la deposición.

Tabla 2.1: Velocidades críticas de diferentes material para partícula de 20  $\mu m$  [8].

Material	Velocidad Critica[m/s]
Aluminio	620-660
Cobre	460-500
Titanio	700-890
Niquel	610-680
Zinc	360-380

La velocidad máxima del gas portador queda descrita por la ecuación 2.1 [9].

$$v = (\gamma * RT/M_m)^{1/2} \quad (2.1)$$

Donde  $\gamma$  es el coeficiente de dilatación adiabática, R es la constante de los gases ideales, T la temperatura del gas y  $M_m$  es el peso molecular del gas.

Desde la ecuación 2.1 se establece que existen dos métodos para aumentar la velocidad. El primero es aumentar la temperatura del gas, la cual siempre se debe de encontrar alejada del punto de fusión en el caso de CS. El segundo método consiste en disminuir el peso molecular del gas portador, lo que nos daría como opción utilizar Helio, sin embargo este elemento posee un costo más elevado, por lo cual su uso no es tan masificado.

## 2.3. Simulación numérica

Para la simulación del proceso de *Cold Spray* se necesita la utilización del método de elementos finitos, esta es una técnica computacional que resuelve un problema continuo por medio de la subdivisión de este en varios problemas pequeños lo que se conoce como discretizar. Cuando se trata de problemas físicos el proceso de discretizar un cuerpo genera elementos, estos elementos interactúan por medios de nodos y esta red de nodos se conoce como malla. Estos son los parámetros iniciales de la simulación, lo que permite separar el problema con diversas condiciones de estado en pequeños problemas bien definidos.

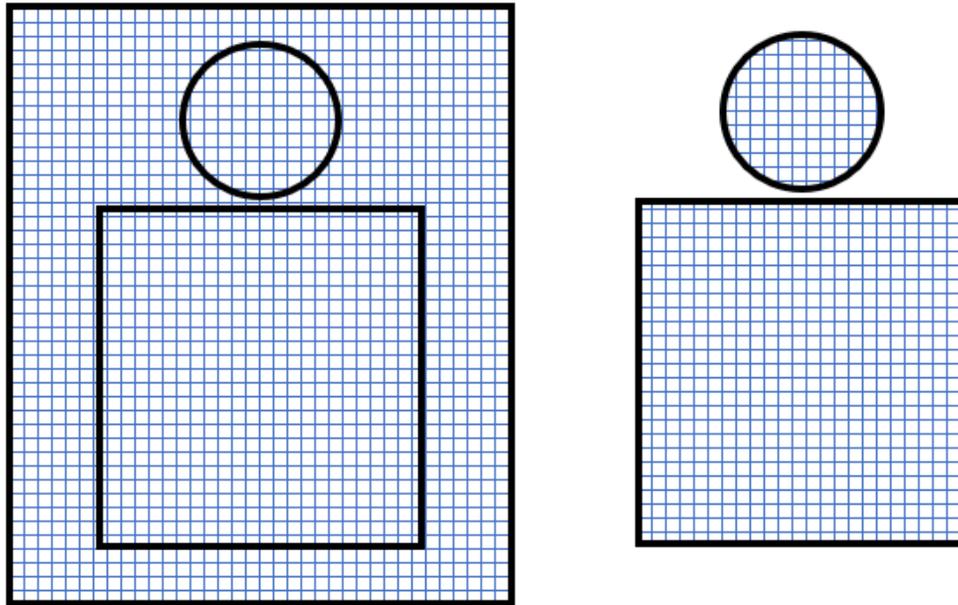
Para la interacción de dichos elementos es necesario indicar cuáles son sus propiedades físicas, ecuaciones de estado, condiciones de borde e iniciales.

Para la resolución de estos problemas numéricos se utilizan dos métodos de resolución, el primero es el método explícito el cual se basa en resolver cada paso de tiempo según la información del paso de tiempo anterior, esto dependerá directamente del estado de la solución desde su condición inicial. A diferencia con el segundo método, que es implícito, es que en este busca resolver el problema de tal forma que sea posible obtener la solución en cualquier escala de tiempo, es decir, desde su fase inicial hasta la final. Por definición el método implícito es el recomendado para problemas estáticos, donde las fuerzas se encuentran en equilibrio y el método explícito para problemas donde existen cargas dinámicas.

### 2.3.1. Enfoques del problema

Para la resolución de problemas existen diferentes tipos de enfoques o acercamientos al problema, cada uno con sus ventajas y desventajas. Uno de estos enfoques es el número de dimensiones, las que pueden ser en dos, tres dimensiones o axisimétrico, este último es el que menos recursos consume y es válido para partículas apiladas o solo un impacto. El modelo de dos dimensiones permite la posibilidad de impacto a lo largo de un plano, siendo posible mayor interacción de las diferentes partículas. Finalmente el modelo de tres dimensiones posee la ventaja de ser la simulación más cercana a la realidad dado que se puede simular la interacción de las partículas en el espacio, sin embargo requiere mayor cantidad de recursos computacionales y tiempo.

Por otra parte esta la forma de modelar el problema, este puede ser Lagrangiano o Euleriano. Los problemas Lagrangiano consisten en que la malla está fija en el material y esta se desplaza durante el proceso. En el enfoque Euleriano la malla se encuentra fija en el sistema y el movimiento de la partícula ocurre a través de esta. Las dos formas de presentar el problema se muestra en la figura 2.5.



(a) Euleriano

(b) Lagrangiano

Figura 2.5: Tipos de enfoques. Elaboración propia.

### 2.3.2. Ecuaciones de estado

#### Modelo de elasticidad

Para el moldeamiento de impactos de velocidad baja a moderada se postula que el modelo de Mie–Gruneisen es el más difundido [4]. Esta es una ecuación de estado que modela la respuesta elástica de un material en forma lineal. Relaciona la presión del material en función de la energía interna y de su densidad, según la siguiente ecuación [10]:

$$P - P_H = \rho \cdot \Gamma (E_m - E_H). \quad (2.2)$$

En la cual  $P_H$  y  $E_H$  son la presión y energía específica de Hugoniot,  $E_m$  es la energía interna específica del material,  $P$  es la presión,  $\rho$  es la densidad y  $\Gamma$  es la razón de Grüneisen, definida como:

$$\Gamma = \Gamma_0 \frac{\rho_0}{\rho} \quad (2.3)$$

Donde  $\Gamma_0$  es una constante del material y  $\rho_0$  es la densidad de referencia[10]. La energía de Hugoniot esta relacionada con la presión de Hugoniot por la siguiente ecuación:

$$E_H = \frac{P_H \cdot \eta}{2\rho_0} \quad (2.4)$$

Donde  $\eta = 1 - \rho_0/\rho$  es la deformación volumétrica nominal en compresión[10]. Una forma de ajustar los datos relacionados con la presión de Hugoniot es por la siguiente ecuación [10]:

$$P_H = \frac{\rho_0 c_0^2 \eta}{(1 - s\eta)^2}. \quad (2.5)$$

Donde  $c_0$  y  $s$  son definidos como la relación lineal entre la velocidad de choque  $U_s$  y la velocidad de la partícula  $U_p$  por:

$$U_s = c_0 + s \cdot U_p. \quad (2.6)$$

Reemplazando los valores en la ecuación 2.2, llegamos a la siguiente expresión para la presión:

$$P = \frac{\rho_0 c_0^2 \eta}{(1 - s\eta)^2} \left(1 - \frac{\Gamma_0 \eta}{2}\right) + \Gamma_0 \rho_0 E_m \quad (2.7)$$

Donde  $\rho_0 c_0^2$  es el módulo de compresibilidad (*elastic bulk modulus*) a bajos esfuerzos nominales [10].

### Modelo de plasticidad

Dada la alta energía del impacto del proceso de CS, ocurre el efecto de endurecimiento por deformación tanto en la partícula como en el sustrato. Para modelar esta alta tasa de deformación plástica existen diversos métodos [11], el primero y de mayor uso en simulación es el modelo de Johnson-Cook (JC), el que considera efectos de endurecimiento y ablandamiento isentrópico, representado en la ecuación 2.8.

$$\sigma = [A + B \cdot \epsilon^n] \cdot [1 + C \cdot \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0)] \cdot [1 - (T^*)^m] \quad (2.8)$$

Donde  $\sigma$  es el esfuerzo de fluencia,  $\epsilon$  es la deformación plástica,  $\dot{\epsilon}$  la tasa de deformación plástica, y  $\dot{\epsilon}_0$  es el factor de normalización, que normalmente es  $1 [s^{-1}]$ .

Los parámetros  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $m$  y  $n$  son valores empíricos, que se obtienen de manera experimental para cada material con el fin de ajustar el modelo.  $A$ , corresponde al esfuerzo de fluencia inicial del material,  $B$  aporta con la relación de endurecimiento por deforma-

ción plástica,  $C$  está relacionado con la tasa de deformación,  $n$  es la constante relacionada con el endurecimiento por deformación y  $m$  con el ablandamiento térmico. Además  $T^*$  es la temperatura homóloga que se define de la siguiente forma:

$$T^* = \frac{T - T_{ambiente}}{T_{fusión} - T_{ambiente}} \quad (2.9)$$

En la cual  $T$ [K] es la temperatura del material,  $T_{fusión}$ [K] la temperatura de fusión del material y  $T_{ambiente}$ [K] la temperatura ambiental o de referencia.

### 2.3.3. Controles Adaptativos

Debido a los parámetros de la simulación el impacto de las partículas a alta velocidad se ven afectas por una alta tasa de deformación las cuales pueden generar casos de deformación excesiva de la malla. Para esta clase de problemas existen técnicas para asegurar un mallado de calidad a lo largo de toda la simulación, en particular existe la técnica de mallado Euleriano-Lagrangiano arbitrario (ALE, por sus siglas en inglés). El cual combina características del análisis Lagrangiano puro y técnicas de análisis Euleriano puro.

El proceso de ALE no afecta la topología del mallado en lo que se refiere a los elementos y la conexión entre ellos, sino que se limita a realizar un reordenamiento de la malla en el cuerpo a deformar.

El efecto de reordenamiento se aprecia en la dos imágenes presentes en la figura 2.6, este es un rectángulo que es sometido a una deformación inducida por un hilo sinusoidal rígido; en la parte inferior de la curva se aprecia el cambio en la calidad de mallado entre el caso Lagrangiano puro presente en la figura 2.6 (a), y la figura 2.6 (b) que tiene activado el proceso ALE.

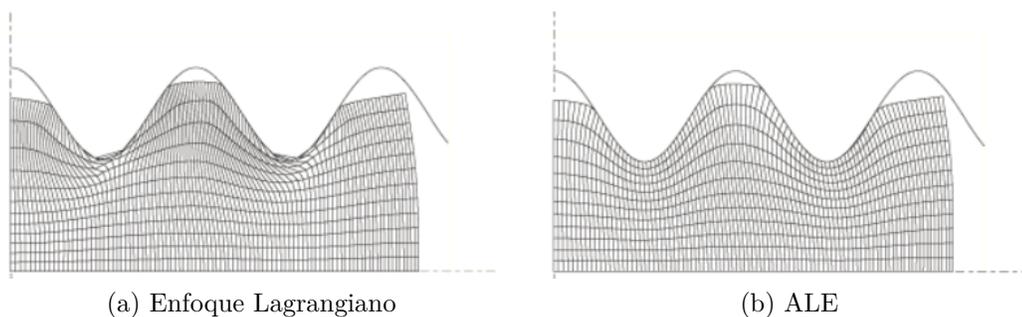


Figura 2.6: Comparación de control adaptativo [10].

### 2.3.4. Control de Hourglass

Al momento de resolver un problema de elementos finitos se puede utilizar una técnica conocida como integración reducida; esta integración utiliza un promedio de los 4 nodos que posee un elemento para calcular la solución, en vez de utilizar los 8 nodos que posee. La aproximación resultante puede inducir un error directo que es conocido como el problema de *Hourglass* (el problema del reloj de arena).

El problema de *Hourglass* se puede ver como la baja nodal local de la resistencia del material, lo que genera deformaciones locales. Lo anterior se observa en la figura 2.7, siendo a) el elemento inicial, b) El elemento con la deformación errónea, producto de un esfuerzo ficticio generado por hourglass y c) con una deformación aceptable.

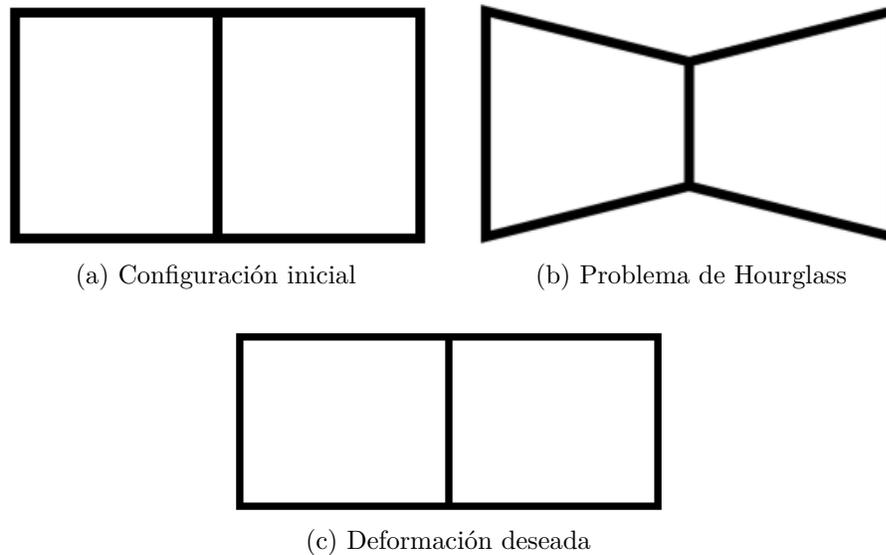


Figura 2.7: Ejemplos de deformación de un elemento.

Existen diferentes métodos para ejercer control del *Hourglass*, siendo algunos: método de rigidez, viscoso y combinado. El método de rigidez se basa en una respuesta lineal de un elemento frente al esfuerzo al que es sometido, el método viscoso es la respuesta al cambio de rigidez del elemento y se basa en una respuesta lineal con el cambio de esfuerzo en el tiempo. Por último, el método combinado es una ponderación lineal directa entre ambos métodos[10].

## 2.4. Dureza

La Dureza es una propiedad del material que mide la deformación plástica que sufre un material al ser cargado o rayado con otro material. Por la naturaleza del concepto es un término relativo entre materiales en el cual uno indenta (o raya) a otro a un nivel determinado nivel de carga.

Se ha convenido nombrar a esta medida como una propiedad mecánica de un material y existen distintas escalas estandarizadas que miden distintos tipos de dureza para ciertos grupos de materiales. Por nombrar algunas, está la dureza Rockwell, Vickers, Mohs, entre otras.

### 2.4.1. Mecanismos de endurecimiento en metales

En metales, existen diversos mecanismos a través de los cuales un material puede endurecerse: deformación plástica, precipitación, transformación de fase, entre otras. Dependiendo del material y de su composición, predomina un mecanismo sobre otro o alguna combinación de ellos se puede observar en el material [12].

Los metales que poseen granos en su estructura cristalina tienen dislocaciones. Los mecanismos de endurecimiento poseen como base impedir o dificultar el movimiento de las dislocaciones, esto genera un aumento en la dureza. El nombre del mecanismo de endurecimiento depende de su origen, por ejemplo, si un metal se induce una deformación plástica (Trabajo en frío) se genera un aumento en el número de dislocaciones, lo que eventualmente provocará un punto en el que las dislocaciones se interponen entre sí y cada vez cuesta más moverlas, dificultando su movimiento relativo y con ello aumentando el límite de fluencia y dureza [13].

Existen modelos para describir la relación entre comportamiento del endurecimiento frente a la deformación plástica, uno de los más utilizados es el modelo Ludwik-Hollomon o Hollomon [14][15][16], este describe por medio de la ecuación 2.10 el comportamiento entre el nuevo esfuerzo de fluencia y la deformación experimentada. En el cual  $\sigma_y$  es el esfuerzo de fluencia (típicamente en unidades de [MPa]),  $\epsilon$  es la deformación plástica total,  $K$  y  $n$  son constante del material que están relacionada con la intensidad, la velocidad del endurecimiento y proceso de manufactura.

$$\sigma_y = K \cdot \epsilon^n \quad (2.10)$$

## 2.4.2. Dureza Vickers

El test de Vickers fue desarrollado por una compañía británica en 1925 [17], esta consta de dos sub-escalas de dureza: macro y microdureza Vickers. Dependiendo del tamaño de la pieza y de su microestructura, se utiliza una u otra sub-escala. La microdureza Vickers es considerada cuando se mide con cargas entre 10 *gf* a 1000 *gf* y macrodureza se considera por sobre 1 *kgf* [17].

Para la realización de este ensayo se utiliza un equipo llamado durómetro, el cual posee un indentador sobre un husillo con lentes ópticos para observar la indentación, una mesa de apoyo regulable para la muestra a medir, un banco de perillas para regular las distancias y un contrapeso que proporciona la carga deseada para ejercer sobre la pieza. Actualmente los durómetros incluyen un control automático para aplicar la carga.

En este tipo de dureza, el indentador tiene forma piramidal cuyo ángulo es de 136° y es fabricado en diamante. Una vez que se retira la carga y conociendo el largo de las diagonales se calcula la dureza Vickers de acuerdo a la relación presentada en la ecuación 2.11 [18].

$$HV = 1854.4 \cdot \frac{P}{d^2} \quad (2.11)$$

Donde  $HV$  [*kgf/mm<sup>2</sup>*], corresponde a la dureza Vickers,  $P$  [*kgf*] es la fuerza aplicada por el indentador y  $d$ [mm] corresponde al promedio de las dos diagonales de la marca de indentación.

Es importante destacar que la ecuación 2.11 rige solo para la ensayo de dureza Vickers preparador según la norma ASTM E384. La que describe los procedimientos de tratamiento superficial, calibración del equipo y velocidad de aplicación de carga.

# Capítulo 3

## Metodología

La metodología general del trabajo desarrollado es simular computacionalmente la deposición de un recubrimiento. Para posteriormente poder comparar con información experimental.

La sección experimental fue desarrollada por Javiera Troncoso en su trabajo de título "Estudio de la evolución microestructural y propiedades de recubrimientos cobre-aluminio producidos por cold-spray sometidas a tratamientos térmico" [19], desde el cual se extrajeron los información para poder realizar la estimaciones necesarias de los parámetros requeridos para desarrollar la simulación de deposición.

Luego se desarrollo la simulación donde se obtuvo la deformación plástica para estimar la dureza.

### 3.1. Elaboración Experimental del Recubrimiento de Aluminio-Cobre sobre sustrato de Aluminio

Para la elaboración de la muestra se utilizó como sustrato una barra de 1" de ancho, 6" de largo y 1/4" de espesor de Aluminio 6061-T6.

Para la deposición de las partículas se utilizó el equipo *Ep Series SST Low Pressure Cold Spray System* (Centerline Ltd., Windsor, Ontario, Canadá), utilizando una boquilla de polímero tipo divergente de 120 mm de largo con una garganta de 2 mm de diámetro. Los parámetros utilizados para realizar el recubrimiento se detallan en la Tabla 3.1.

En el caso del recubrimiento a depositar se utilizaron polvos comerciales distribuidos por Centerline (Windsor) Ltd. Windsor, Ontario, Canadá. Para el aluminio se comercializa con el código SST-A5001 el cual posee una composición del 99,5 % Aluminio, en el caso de cobre se comercializa bajo el código SST-C5003 el cual posee una composición del 99,7 % Cobre. La composición en la mezcla utilizada en la deposición es de 60 % Cobre y 40 % Aluminio, con una tasa de alimentación de 17.4 g/min.

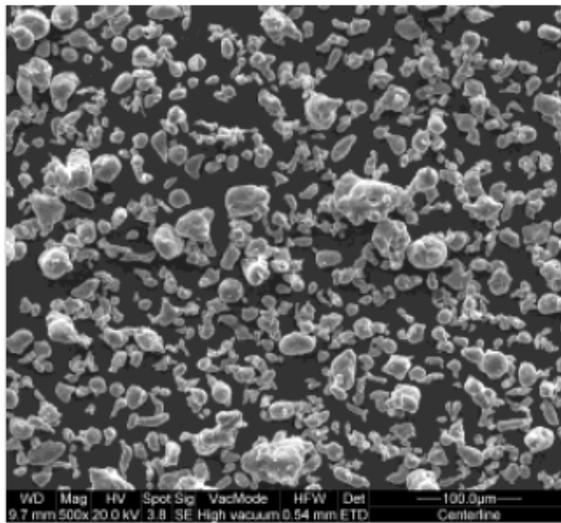
Tabla 3.1: Parámetros de proceso de Cold-Spray

Parámetro	Valor	Unidad
Distancia de separación	15	mm
Tamaño del paso	1	mm
Números de pasos	60	pasos
Superposición de pasos	1	-
Velocidad de Transversal	100	mm/s
Rueda de Alimentación	Grande	-
Tasa de gas del Alimentador	30	SCFH <sup>a</sup>
Gas	N <sub>2</sub>	-
Tipo de Boquilla	Polímero	-
Temperatura de estancamiento <sup>b</sup>	350	°C
Presión de estancamiento	500	psi

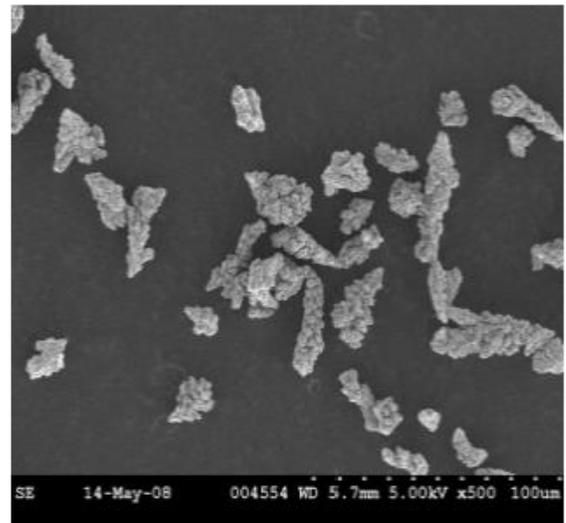
<sup>a</sup> Pies cúbicos estándar por minuto

<sup>b</sup> Estancamiento: zona de menor diámetro en tobera

En la figura 3.1 se puede observar las imágenes microscópicas electrónicas realizadas por el distribuidor de los materiales a depositar.



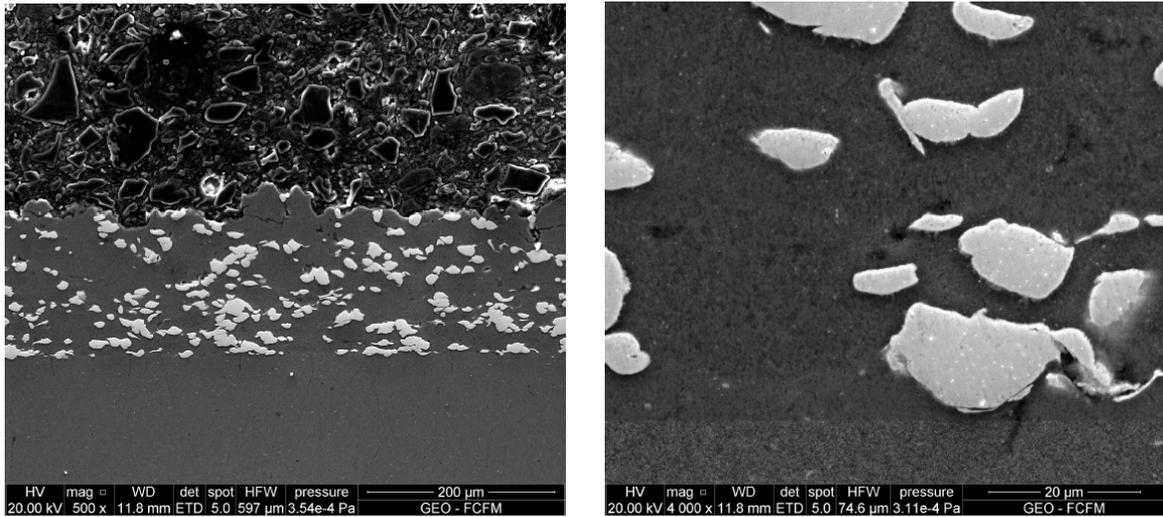
(a)



(b)

Figura 3.1: Polvos utilizados en la manufactura de recubrimiento. (a) Aluminio [20] y en (b) Cobre[21]

En la figura 3.2 se puede observar las imágenes microscópicas electrónicas realizadas al recubrimiento. El aluminio son las zonas de un gris oscuro y el cobre son las zonas claras en la imagen.



(a) Aumento 500X

(b) Aumento 4000X

Figura 3.2: Microscopia electrónica recubrimiento Cu-Al [19]

## 3.2. Modelo computacional

El modelo desarrollado corresponde al impacto que tienen dos materiales en el sustrato con el fin de estudiar su interacción y posterior dureza. Para simular el problema se planteo como un modelo bidimensional con un enfoque Lagrangiano para así poder estudiar la interacción entre superficies y cuerpos del sustrato y partículas.

### 3.2.1. Validación computacional

El paso inicial fue realizar una simulación computacional de una investigación ya desarrollada; se utilizó el trabajo realizado por Jing Xie, titulado "*Simulation of the Cold Spray Particle Deposition Process*"[7]. Los resultados de dicho trabajo se presentan en el Capítulo 4. La finalidad de esto fue corroborar el manejo en el software ABAQUS.

### 3.2.2. Modelo físico

Se utilizó un modelo bidimensional con partículas esféricas que impactan el sustrato, se presenta un esquema en la figura 3.3. El sustrato representado por el color celeste se encuentra empotrado en las paredes externas las cuales se presentan en color rojo y en la zona superior del sustrato es donde impactan las partículas de aluminio y cobre que son representadas por el color gris y naranja, respectivamente. Al impactar las partículas solo poseen una velocidad en la dirección normal de la superficie del sustrato.

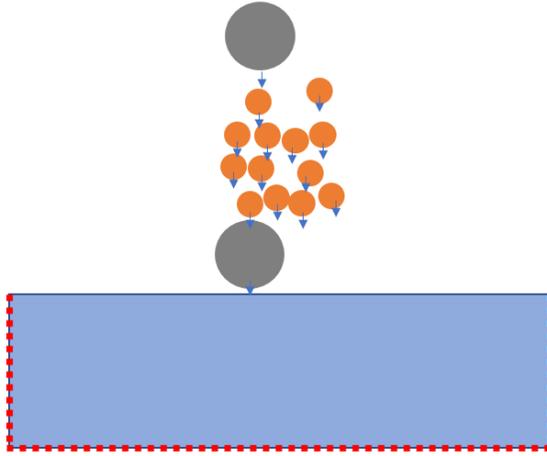


Figura 3.3: Esquema de Modelo computacional de impacto. Elaboración propia.

Dada la alta velocidad de impacto en las superficies de las partículas y sustrato no existe una transferencia de calor efectiva, lo anterior considerando paredes con frontera adiabática, lo que se respalda por lo expuesto por Assadi [4].

### 3.2.3. Tamaño de las partículas

Dado el proceso de fabricación de las partículas utilizadas en la manufactura del recubrimiento, se observó que poseen diferentes granulometrías. Esto se aprecia de manera inicial en las imágenes de microscopía de la figura 3.1

Se realizaron estudios previos sobre la distribución del tamaño de las partículas utilizando la técnica de difracción láser, los resultados se presentan en la figura 3.4.

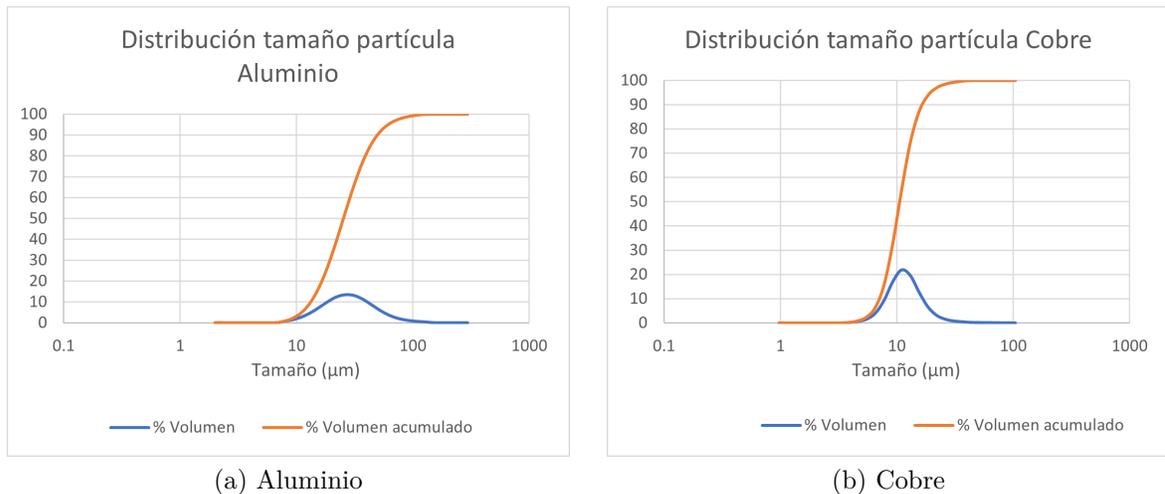


Figura 3.4: Distribución de tamaños de partículas

En el caso del aluminio se determinó que el diámetro promedio basado en el volumen fue de  $25.35\mu\text{m}$ , y para fines de simulación se escoge un tamaño de partícula de  $25\mu\text{m}$ . En el caso del cobre, utilizando la misma técnica se obtiene un promedio de  $10.58\mu\text{m}$  y para fines de simulación se escoge  $10\mu\text{m}$  de diámetro.

### 3.2.4. Parámetros de materiales

Los parámetros que definen las propiedades de los materiales para el estudio fueron extraídos desde el trabajo realizado por Xie [7], en este documento se encontraron las propiedades de polvos de aluminio y cobre. Para el caso del sustrato se extrajo de una publicación Saleh [22]. A continuación en la tabla 3.2 se muestra el resumen de las propiedades utilizadas.

Tabla 3.2: Parámetros Johnson-Cook y Mie-Grüneisen para los materiales utilizados.

Parámetro	Unidad	Aluminio	Cobre	Aluminio 6061-T6
<b>A</b>	[M pa]	148.4	90	324
<b>B</b>	[M pa]	345.5	292	112
<b>n</b>	-	0.183	0.31	0.42
<b>m</b>	-	0.895	1.09	1.34
<b>C</b>	-	0.001	0.025	0.002
$\epsilon_0$	-	1	1	1
$\Gamma_0$	-	1.97	2.02	1.97
$C_0$	[m/s]	5386	3940	5240
<b>s</b>	-	1.339	1.489	1.4
$T_m$	<b>K</b>	916	1356	925
<b>k</b>	[W/mK]	237.2	386.5	167
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	2700	8900	2710
<b>G</b>	[GPa]	27	44.7	26
$C_p$	[J/kgK]	898.2	383	900
<b>Coficiente de roce</b>	-	0.3		

### 3.2.5. Temperatura de partículas

Como el proceso de deposición ocurre en escala de tiempo de los nanosegundos no se dispone de la suficiente instrumentación para medir la temperatura en el instante, creando la necesidad de estimar un valor ya que se utiliza en la ecuación 2.8 del modelo de Johnson-Cook 2.8, que cumple con la función de reducción de esfuerzo de fluencia por efectos térmicos, es decir, influye en la deformación plástica.

Se realizó una búsqueda en trabajos previos sobre la relación de temperatura para las partículas; se usó una aproximación en base a la investigación previa de Schmidt [8], en la que se realizó la simulación de deposición de partículas de cobre y como gas portador nitrógeno, en esta, por medio de métodos computacionales se recrearon las condiciones de impacto llegando a plasmar las temperaturas en la figura 3.5.

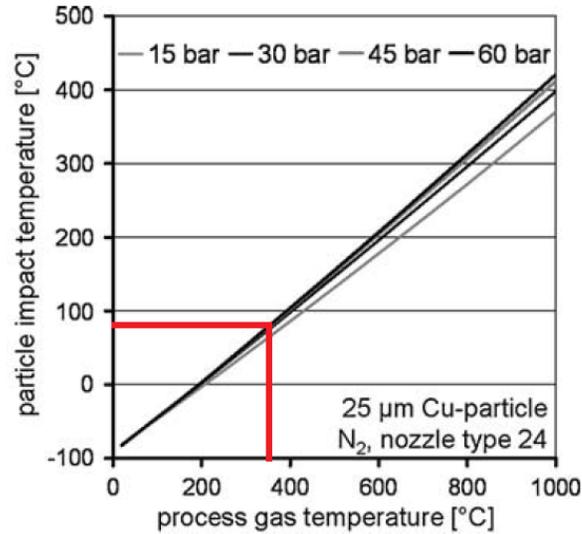


Figura 3.5: Temperatura de impacto de partículas en función de la presión y temperatura del gas [8]

Según las condiciones experimentales bajo las que trabajaron, que se presentan en la tabla 3.1, tenemos que la temperatura en el punto de estancamiento es de 350°C y con una presión de 500 psi o 34.5 bar, aproximando a 30 bar para ingresar en el gráfico presentado en la figura 3.5, nos indica que las partículas poseen una temperatura de 90°C al momento del impacto.

Es importante recalcar que existen aproximaciones fuertes al momento de realizar la estimación, en primera instancia en el caso del aluminio, si bien posee el mismo radio nominal, tienen diferentes capacidades térmicas y conductivas. La conductividad del cobre es de 385  $W/mK$  y su capacidad térmica es de 390  $J/kgK$ , mientras que la conductividad y capacidad térmica y la conductividad del aluminio a temperatura ambiente es de 205  $W/mK$  y 880  $J/kgK$  respectivamente. En una segunda instancia en el caso del cobre, si bien es el mismo material posee diferente diámetro nominal 25μm en el trabajo previo y 10μm en el presente proyecto.

A pesar de que estas diferencias afectarán el resultado final, dado el acotado número de investigaciones sobre la temperatura inicial de las partículas, se hace necesario extrapolar dicho valor. Para fines de esta simulación computacional se asumió que la temperatura se distribuye de forma homogénea dentro de la partícula, como propone Schmidt[8].

### 3.2.6. Temperatura de sustrato

En relación a la temperatura en el sustrato al momento de la deposición, este es otro parámetro del que no se posee registro y afecta directamente el modelo computacional trabajado, dado que afecta la ecuación Johnson-Cook que domina el modelo de plasticidad.

Existen investigaciones previas con las cuales se puede estimar esta temperatura en particular, en el desarrollo de este proyecto se utilizó la investigación de Legoux [23], donde empíricamente obtuvo relaciones entre la temperatura del gas que impulsa a las partículas y la temperatura de la superficie del sustrato al momento del impacto.

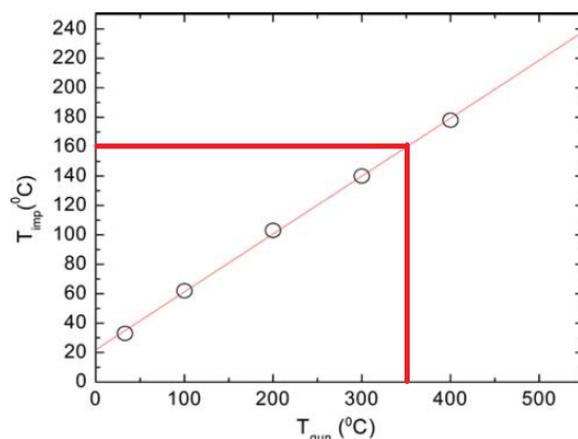


Figura 3.6: Temperatura máxima de sustrato en función de temperatura del gas de proceso [23]

En la figura 3.6 se presentan los resultados obtenidos por Legoux, los cuales son una relación lineal entre la temperatura del sustrato al momento del impacto ( $T_{imp}$ ) y la temperatura del gas ( $T_{gun}$ ). En Rojo se ingresan al gráfico los valores del presente trabajo, por medio de la información de la tabla 3.1; de esta manera se estimó la temperatura del sustrato al momento del impacto, siendo esta de 160°C.

### 3.2.7. Número de partículas

El número de partículas que interactuaron en la simulación fueron obtenidas según las estimaciones realizadas a partir de los datos de recopilación del trabajo anterior realizado por Troncoso [19], los resultados se resumen en la tabla 3.3.

Tabla 3.3: Parámetros composición de muestra durante el proceso. [19]

Parámetro	unidad	Material	valor
Porcentaje inicial en peso	%	Cobre	60
		Aluminio	40
Porcentaje final en volumen	%	Cobre	33
		Aluminio	77
Eficiencia deposición	%	Ambos	25.83
Desviación estándar eficiencia deposición	-	Ambos	4.35

Para la selección final del número de partículas a utilizar, se definió la necesidad de un número finito de partículas, para esto se probaron diferentes combinaciones y se eligió la que diera una combinación con valores cercanos a la realidad, según los descritos en la tabla 3.4.

Tabla 3.4: Parámetros de composiciones utilizadas en las simulaciones. Elaboración propia.

Parámetro	Material	Valor	
		Modelo1	Modelo 2
Número de partículas	Cobre	25	24
	Aluminio	3	4
Número de partículas adheridas	Cobre	7	7
	Aluminio	1	1
Porcentaje inicial en peso	Cobre	64	56
	Aluminio	36	44
Porcentaje final en volumen	Cobre	31	31
	Aluminio	69	69
Eficiencia deposición	Ambos	30	27

### 3.2.8. Simulación Abaqus

Sintetizando los temas expuestos anteriormente, se concluye que debe simular el impacto de un máximo total de 29 partículas, entre aluminio y cobre. Para ambos materiales se suponen partículas completamente esféricas, en el caso del aluminio con un diámetro de  $25\mu m$  y en el caso de cobre la partícula posee un diámetro de  $10\mu m$ .

El sustrato considerado como un rectángulo largo tiene 12 veces el diámetro de la partícula de aluminio y el espesor es 15 veces el diámetro de la partícula de aluminio. Los modelos se presentan en la figura 3.7, en rojo las partículas que efectivamente se depositan para formar el recubrimiento.

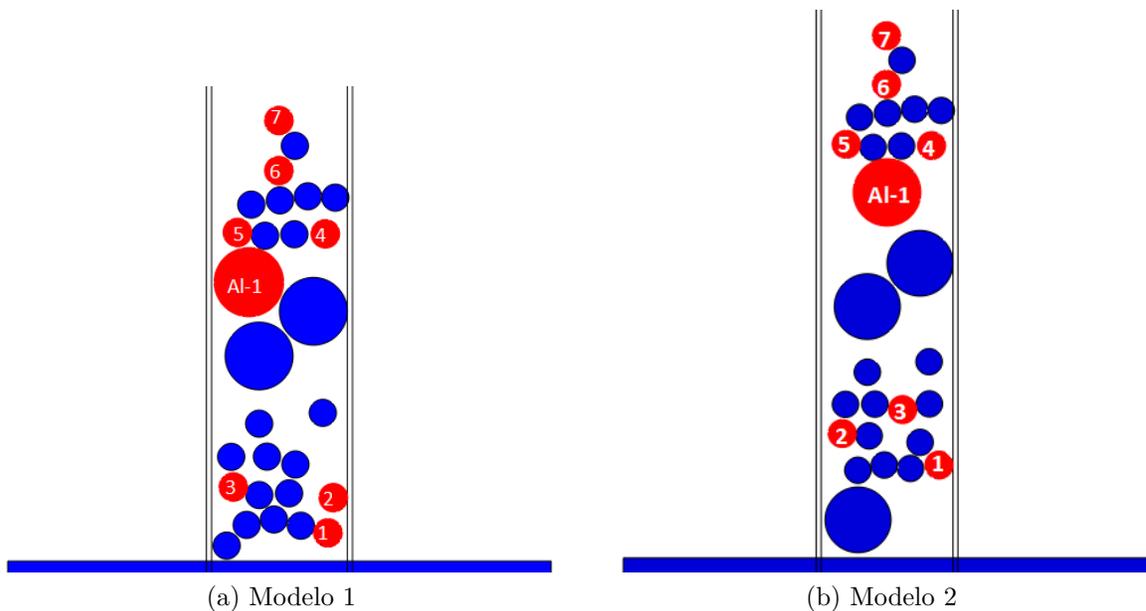


Figura 3.7: Esquema de los casos a simular. Elaboración propia

## Condiciones de borde

Dado que el sustrato en realidad posee dimensiones que son superiores a la consideradas en la simulación se considera condición de borde empotrada como se muestra en las líneas rojas de la figura 3.8.

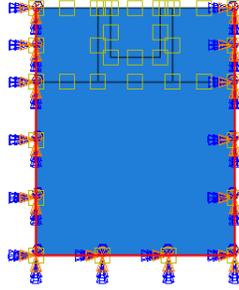


Figura 3.8: Condiciones de borde aplicadas en el sustrato. Elaboración propia

## Condiciones iniciales

Las condiciones iniciales de deposición se mostraron al inicio de este capítulo en la tabla 3.1, con esos valores se estimó la temperatura del sustrato y partículas a depositar. Además al momento de realizar la deposición se realizó la medición de la velocidad de las partículas. En la tabla 3.5 un resumen de las condiciones iniciales.

Tabla 3.5: Parámetros de condiciones iniciales utilizados en la simulación. Elaboración propia.

	Unidad	Cobre	Aluminio	Sustrato
Temperatura inicial	K	363	363	433
Velocidad inicial [19]	m/s	460	510	-

## Sensibilidad de malla

Dado que realizar el análisis de sensibilidad de malla al modelo final significa un mayor gasto computacional y tiempo se optó por realizar un análisis para cada material en la condición límite, siendo esta el momento del impacto de todas las partículas de un material que poseen condiciones de adherencia.

El primer paso fue determinar el número de partículas a adherir de cada material; se realizó a través de un proceso iterativo en el cual se impactaba un set de partículas y se estudiaba el cambio de la deformación plástica en la primera partícula impactada. El tamaño de malla para los elementos se consideró fijo tanto para sustrato como para la partícula, siendo este extraído de la literatura como  $D_{particula}/20$ .

Los resultados sobre el número mínimo de partículas a simular en el caso crítico para cada material se presenta en la tabla 5.1 y 5.2. Entregando como resultado que para ambos casos de materiales se requiere simular 6 partículas.

Una vez determinado el número mínimo de partículas necesarias se estudió la sensibilidad de malla, en el cual se prueban diferentes tamaños de elemento. Iniciando por el caso del aluminio, los resultados se presentan en la tabla 5.3. Dando como resultado que para el tamaño de elemento de  $0.63\mu m$  se presenta la menor diferencia porcentual, dicho tamaño está asociado a  $D_{Al}/40$ , este valor se dejó fijo para el sustrato. En el caso del cobre, los resultados se presentan en la tabla 5.4 esta indica que el tamaño del elemento de  $0.4\mu m$  es el que presenta la menor diferencia porcentual; dicho tamaño está asociado a  $D_{Al}/25$ .

### Interacciones de contacto

En los mecanismos presentes en ABAQUS/*explicit* para modelar interacciones de contacto se dispone de "*surface to surface contact*" la que fue utilizada para la interacción partícula-partícula, partícula-sustrato y sustrato-sustrato.

Es necesario especificar las propiedades de la interacción de contacto, las cuales son: tangencial, térmica y normal. La componente tangencial está asociada a la fricción de los cuerpos participantes, se escogió la formulación de la fricción del tipo penalización, la cual cuenta con el modelo de fricción de Coulomb. El coeficiente de roce es 0.3 para interacción de Cobre-Cobre, Cobre-Aluminio y Aluminio-Aluminio según Xie [7].

Para el comportamiento normal, se consideró la relación de contacto *pressure-overclosure: Hard Contact (contacto duro)* como modelo, este minimiza la penetración entre las superficies, además de no permitir la trasferencias de esfuerzos de tracción[10]. Uno de sus parámetros "permite separación: si/no", y en este modelo se utilizó la separación.

En el caso de las propiedades térmicas, se escogió generación de calor '*Heat generation*' que posee los parámetros de fracción de energía disipada, por fricción o corriente eléctrica que es convertida en calor, y el parámetro fracción de calor distribuida a la superficie esclava. Para ambos parámetros se utilizaron los valores por defecto, que son 1.0 y 0.5 respectivamente.

Para simular el efecto de tasa de adherencia (que esta ligado con no permitir la separación) se entregó una etiqueta a cada partícula para así diferenciar entre partículas adheridas y las que rebotan. Las partículas que se adhirieron interactúan con todas, por otra parte las que rebotan solo interactúan con las partículas previamente proyectadas o depositadas que poseen la etiqueta de adherencia y el sustrato si corresponde.

En la tabla 3.6, se muestra un resumen de todas las propiedades utilizadas en cada comportamiento de la interacción; lo siguiente se aplicó para la interacción de las partículas de cobre y aluminio entre sí y de ellas con el sustrato de aluminio.

Tabla 3.6: Propiedades de interacción utilizada en la simulación. Elaboración propia.

	Comportamiento	Propiedades de interacción
Interacción de contacto: "surface to surface contact"	Tangencial	Formulación de fricción: penalización
		Coefficiente de roce: 0.3
	Normal	relación de contacto: Hard contact
		Permitir separación: si
	Térmico	Fracción de energía disipada: por defecto (1.0)
		Fracción de calor distribuida a la superficie: por defecto (0.5)

### Tamaño de malla

A lo largo del desarrollo del proyecto se utilizaron diferentes mallados: en el caso de las partículas de cobre se utilizó un tamaño de malla de  $D_{Cu}/25$ . Para el caso de las partículas de aluminio se utilizó un tamaño de  $D_{Al}/40$ . Por último para el sustrato se usaron diferentes tamaños de malla: una fina donde ocurre el impacto, una de transición que conecta la zona fina con la zona gruesa y finalmente una zona gruesa, la que trasmite y disipa la energía del impacto. Esto se realizó con el fin de reducir el uso de recursos computacionales asociados con el análisis del sustrato.

En la figura 3.9 y tabla 3.7 se muestran los diferentes tamaños de malla presentes en el sustrato.

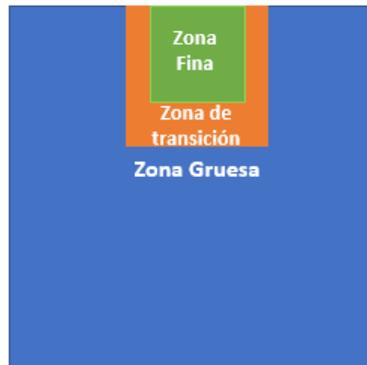


Figura 3.9: Zonas de mallado del sustrato. Elaboración propia.

Tabla 3.7: Tamaño de mallado y medidas del sustrato. Elaboración propia.

Zona	Forma del elemento	Tamaño mallado	Dimensiones (Largo x Ancho)
Fina	Cuadrado	$D_{Al}/40$	$2D_{Al} \times 2D_{Al}$
Transición	Triangular	$3.5D_{Al}/40$	$3D_{Al} \times 3D_{Al}$
Gruesa	Cuadrado	$7D_{Al}/40$	$12D_{Al} \times 15D_{Al}$

## Tipo elemento

Durante el desarrollo de la simulación se utilizó un análisis del desplazamiento de las partículas junto al análisis de temperatura; parámetros que determinan la deformación. Para estos requerimiento ABAQUS/*explicit* dispone de un análisis acoplado de temperatura- desplazamiento (*coupled temperature-displacement*) el que brinda soluciones en el análisis térmico y mecánico.

Tomando en cuenta el tipo de problema simulado se escogió como elemento CPE4RT (*a 4-node plane strain thermally coupled quadrilateral, bilinear displacement and temperature, reduced integration, hourglass control*) para las partículas, zona gruesa y fina del sustrato. Este elemento define una malla de tipo cuadrilátero, además tiene por defecto activado el "*distortion length ratio*", este es un tipo de control que evita que en situaciones de compresión un elemento se distorsione demasiado[10]. En el caso de la zona de transición del sustrato el tipo de elemento utilizado fue CPE3T (*a 3-node plane strain thermally coupled triangle, linear displacement and temperature*) el cual define una malla del tipo triangular.

## Control de mallado

Para el mallado de partículas de cobre y aluminio junto con el sustrato en las zonas finas y gruesas, se le asignó la técnica de mallado estructurado (*Quad-Structured*), además se entregó un factor de desviación de 0.1 y el factor de tamaño mínimo igualmente se fijó en 0.1. En el caso en la zona de transición del sustrato se utilizó mallado libre (*Tri-Free*).

## Programación del código

Posteriormente se utilizó el software de programación Python 2.7 que tiene compatibilidad con el programa ABAQUS, de esta forma se crearon los modelos finales, automatizando la cantidad de partículas a modelar y ajustando las propiedades a cada partícula a simular. Este código se encuentra detallado en el anexo A.1.

## 3.3. Cálculo de dureza

La simulación computacional de ambos modelos entrega como resultado la deformación plástica equivalente, con este valor se puede estimar el esfuerzo de fluencia y finalmente calcular la dureza.

### 3.3.1. Cálculo esfuerzo de fluencia

Los resultados de la simulación se extraer la deformación plástica equivalente (*PEEQ*) del recubrimiento final, con dichos Valores se estimó el esfuerzo de fluencia ( $\sigma_y$ ) del material utilizando la ecuación 2.10 del modelo de Hollomon y la ecuación 2.8 del modelo de Johnson-Cook, ambas de forma independiente.

En el caso de utilizar el modelo de Hollomon, cada material posee valores de ajuste específicos, en particular se aproximó la deposición de *Cold Spray* a trabajo en frío para la determinación de los valores los cuales se presentan a modo de resumen en la tabla 3.8.

Tabla 3.8: Parámetros modelo Hollomon.

Parámetro	Aluminio [15][24]	Cobre [16]	unidades
<b>k</b>	155	256	[Mpa]
<b>n</b>	0.25	0.085	-

Reemplazando los valores de la tabla 3.8 en la ecuación 2.10 nos queda la relación para aluminio y cobre descrita por las siguientes ecuaciones:

$$\sigma_y = 155 \cdot \epsilon^{0.25} \quad (3.1)$$

$$\sigma_y = 256 \cdot \epsilon^{0.085} \quad (3.2)$$

Existe un segundo método con el cual se estimó el esfuerzo de fluencia, este fue utilizando el modelo de Johnson-Cook por medio de la ecuación 2.8. Como evaluamos la dureza luego del proceso de deposición tenemos que la temperatura homóloga es 0, y para la tasa de deformación esta se aproximó a 0.001 según estudios anteriores [25], utilizando los valores presente en la tabla 3.2 para cada material, se cuenta con las siguientes ecuaciones para aluminio y cobre:

$$\sigma = [148.4 + 345.5 \cdot \epsilon^{0.183}] \cdot [1 + 0.001 \cdot \ln(0.001)] \cdot [1 - (0)^{0.895}] \quad (3.3)$$

$$\sigma = [90 + 292 \cdot \epsilon^{0.31}] \cdot [1 + 0.025 \cdot \ln(0.001)] \cdot [1 - (0)^{1.09}] \quad (3.4)$$

### 3.3.2. Cálculo de Dureza

Para realizar el cálculo de la dureza en función del esfuerzo de fluencia se utiliza un ajuste clásico entre estas dos propiedades mostrada en la ecuación 3.5 [26]:

$$\sigma_y [Mpa] \approx 3HV [kgf/mm^2] \quad (3.5)$$

La ecuación 3.5 es una aproximación en la que el factor ronda a ser 3.

En el caso del aluminio en el trabajo realizado por Tiryakioğlu [24] se concluyó que el valor de esta relación es de 2.61. Para el caso del cobre según el trabajo realizado por Krishna [27] esta relación se cumple cuando se ajusta con el valor de 3.018.

# Capítulo 4

## Validación

La publicación utilizada como guía para el desarrollo de la validación es un artículo titulado "*Simulation of the Cold Spray Particle Deposition Process*" [7], realizado por: Jing Xie, Kazuhiro Ogawa, Daniel Nelias y Yuji Ichikawa. Este artículo trata sobre la deposición de partículas en CS por medio de simulaciones numéricas utilizando métodos numéricos con el módulo *Explicit* que se encuentra en ABAQUS.

Para fines de la validación se consideró el caso de deposición de una partícula de Al en un sustrato de Al, considerando un problema axisimétrico Lagrangiano. Las variables a comparar son PEEQ y la temperatura de la partícula durante la deposición.

### 4.1. Geometría

Como antecedente la geometría utilizada en el presente trabajo corresponde a una partícula de  $25 \mu m$  de diámetro que impacta el sustrato que posee un radio y altura 10 veces el radio de la partícula. En la figura 4.1 se observa el modelo axisimétrico bidimensional utilizado.

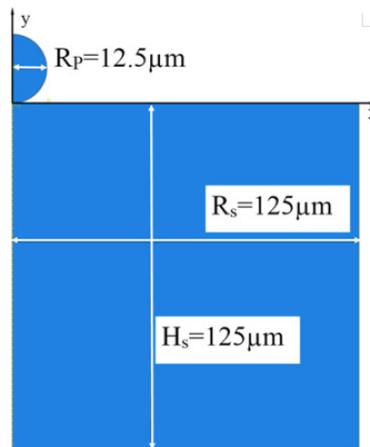


Figura 4.1: Esquema de la geometría del modelo axisimétrico 2D [7].

## 4.2. Condiciones de borde

Al tratarse de un problema axisimétrico es necesaria la utilización de condiciones de borde especiales. Para esto en los bordes izquierdos de la partícula y sustrato se imponen las condiciones de simetría y en la base del sustrato se impone la condición de encastre, bloqueando de esta forma su desplazamiento.

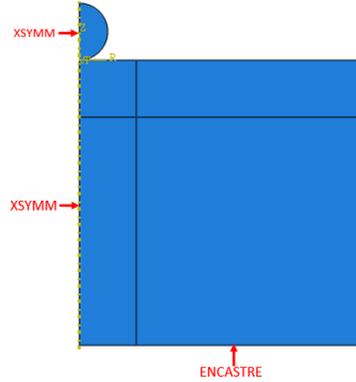


Figura 4.2: Condiciones de borde descritas por [7]. Elaboración propia.

## 4.3. Mallado

En el trabajo realizado por Xie [7], se utilizó un mallado por sectores, en este la partícula y la zona de impacto del sustrato poseen los sectores más finos, con un tamaño de malla de  $D_{Al}/50$ , el sector restante con un tamaño de malla del doble. En la figura 4.3 se aprecia el mallado de la zona fina y partícula. Se utilizó el elemento CAX4RT (*4-node thermally coupled axisymmetric quadrilateral, bilinear displacement and temperature, reduced integration, viscoelastic hourglass control*) y un control de mallado del tipo 'Structured Quad'.

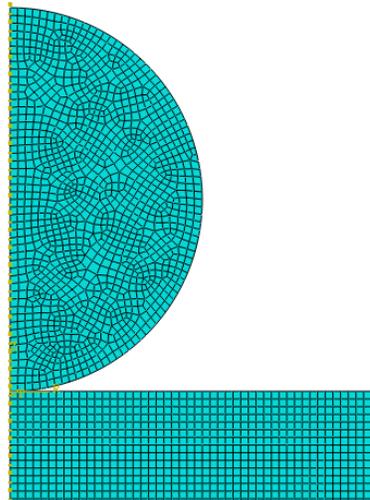


Figura 4.3: Mallado descrito por Xie [7]. Elaboración propia.

## 4.4. Condiciones iniciales y propiedades del material

En la tabla 4.1 se describen las propiedades requeridas para definir las propiedades del aluminio, junto con indicar las condiciones iniciales tanto de velocidad como de temperatura.

Tabla 4.1: Propiedades del aluminio [7].

<b>Parámetro</b>	<b>Unidad</b>	<b>Aluminio</b>
<b>A</b>	[Mpa]	148.4
<b>B</b>	[Mpa]	345.5
<b>n</b>	-	0.183
<b>m</b>	-	0.895
<b>C</b>	-	0.001
$\Gamma_0$	-	1.97
$C_0$	[m/s]	5386
<b>s</b>	-	1.339
$T_m$	<b>K</b>	916
<b>k</b>	[W/mK]	237.2
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	2700
<b>G</b>	[GPa]	27
$C_p$	[J/kgK]	898.2
<b>Coficiente de roce</b>	-	0.3
<b>Temperatura partícula y sustrato</b>	<b>K</b>	300
<b>Velocidad inicial partícula</b>	[m/s]	700

## 4.5. Resultados y análisis

Para efectos de este proyecto los parámetros relacionados con el resultado final son la temperatura y la deformación plástica equivalente (PEEQ), esto se debe a la importancia que tienen en la ecuación 2.8. Son estos los valores en los cuales se centro la validación. En las figuras 4.4, 4.5 y 4.6 se pueden observar los valores obtenidos tanto del estudio [7] como los simulados.

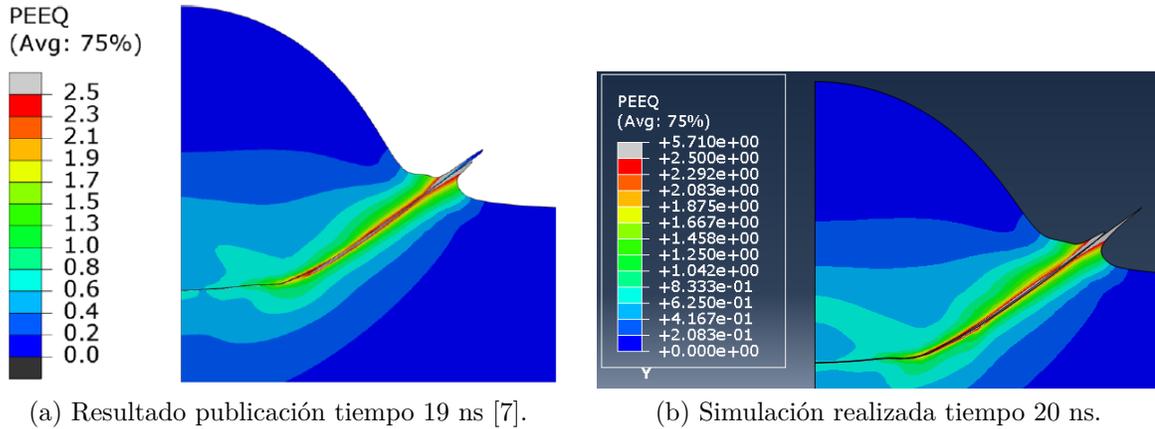


Figura 4.4: Perfil de esfuerzo plástico equivalente. Tiempo evaluado desde el impacto.

Se puede apreciar en la figura 4.4 que el resultado de la simulación es similar al resultado de la publicación descrita previamente; se sospecha que la diferencia que poseen es porque son computadas en tiempos diferentes. Este efecto se produjo debido a que la simulación realizada para la validación posee una tasa de muestreo menor a la realizada por los autores de la publicación. Este parámetro no se especifica en la publicación de Xie, sin embargo, para efectos de validación se cumple con el comportamiento de perfil PEEQ.

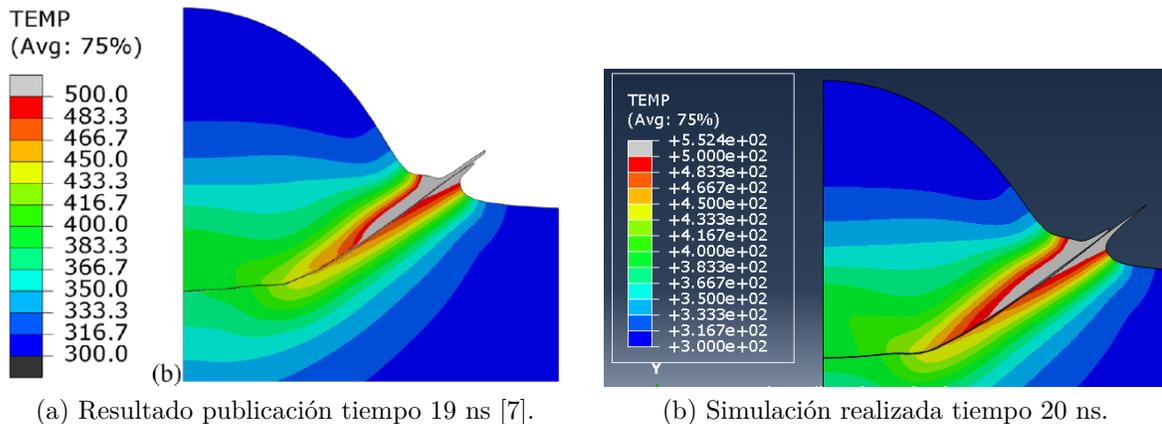


Figura 4.5: Perfil de temperatura. Tiempo evaluado desde el impacto.

En cuanto a la comparación de los perfiles de temperatura en la partícula y en el sustrato presentes en la figura 4.5, podemos concluir que estos son similares y poseen la misma forma. Se aprecia que la partícula simulada en 4.5(b) posee un jet mayor; esto se puede deber a la diferencia de tiempo que existe entre el presente trabajo y el trabajo publicado [7]. La zona que está cercana al jet y se encuentra en ambas simulaciones es una zona que posee una

temperatura mayor a  $500^{\circ}$  K. Se aprecia que en ambos casos esta zona de alta temperatura posee la misma forma, por lo que para efectos de validación se logró simular correctamente el perfil de temperaturas.

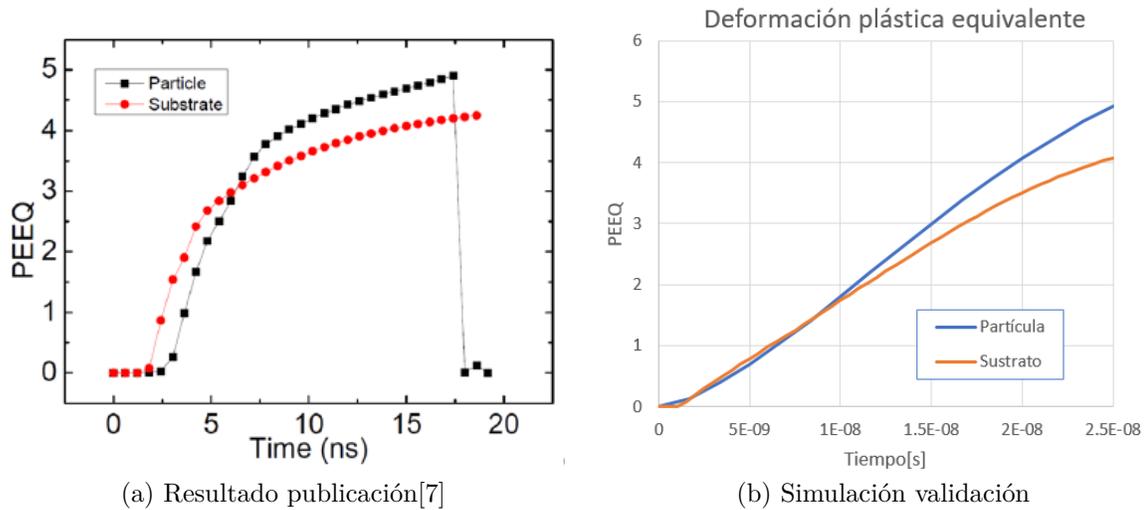


Figura 4.6: Esfuerzo plástico equivalente en sustrato y partícula.

En la figura 4.6 al comparar los gráficos a) y b), se observa que no poseen la misma forma, sin embargo, sí poseen el mismo comportamiento (intersecciones) y llegan a puntos máximos similares. Esto nos indica que si bien la metodología aplicada en la simulación es correcta, existen parámetros que no están especificados en la publicación que afectan el resultado en función del tiempo, pero no el resultado final. En particular, el parámetro de tasa de muestreo utilizado en la publicación y la simulación es diferente, lo que afecta directamente la forma de la curva presentada en la figura 4.6(b). Si bien no se logró replicar completamente el cambio en el tiempo del PEEQ, se obtuvo un PEEQ máximo comparable, lo que para efectos del presente trabajo en el cual se busca estudiar un PEEQ final para el cálculo de la dureza, el resultado obtenido es aceptable.

Concluyendo, se logró replicar de forma correcta la metodología del trabajo desarrollado por Xie [7]; en cuanto a la simulación entre calidad de mallado, interacción y resultado final es aceptable para las variables a estudiar en este trabajo.

# Capítulo 5

## Resultados

### 5.1. Resultado sensibilidad de malla

Se presentan los resultados del análisis de sensibilidad de malla descrito en el capítulo 3. En las tablas 5.1 y 5.2 se muestran los resultados para determinar el número mínimo de partículas a evaluar en el análisis de sensibilidad de malla. Luego en las tablas 5.3 y 5.4, se presentan los resultado de simulaciones para realizar el análisis de sensibilidad.

Tabla 5.1: Evolución del PEEQ 1<sup>a</sup> partícula de cobre. Elaboración propia.

Número de partículas de cobre	PEEQ prom 1 <sup>a</sup> parti	Diferencia porcentual
4	1.250	-
5	1.343	7.4 %
6	1.355	0.9 %
7	1.333	1.6 %

En la tabla 5.1 se presentan los resultado de las simulaciones realizadas para determinar el número mínimo de partículas a utilizar, el tamaño de malla utilizado es de  $D_{Cu}/20$ . Se puede apreciar que la menor variación se da en el paso entre 5 a 6 partículas, siendo este último el número de partículas a evaluar posteriormente.

Tabla 5.2: Evolución del PEEQ 1<sup>a</sup> partícula de aluminio. Elaboración propia.

Número de partículas de aluminio	PEEQ prom 1 <sup>a</sup> parti	Diferencia porcentual
3	0.935	-
4	0.961	2.8 %
5	0.989	2.9 %
6	0.995	0.7 %
7	0.996	0.0 %

En la tabla 5.2 se presentan los resultado para el caso del aluminio, donde el tamaño del elemento fue  $D_{Al}/20$ . Al igual que el caso previo del cobre la menor variación de produce de 5 a 6 partículas, lo que nos deja finalmente utilizando el mismo número de partículas a evaluar en ambos materiales.

Tabla 5.3: PEEQ 1ª partícula de aluminio. Elaboración propia.

Tamaño de Elemento [ $\mu m$ ]	PEEQ 1ª partícula	Diferencia porcentual
1.25	0.989	-
0.83	0.979	1.0 %
0.63	0.972	0.7 %
0.50	1.016	4.5 %

En la tabla 5.3 se presentan los resultado de sensibilidad: en el caso de aluminio la menor variación porcentual ocurre para el tamaño de malla de  $0.63 \mu m$  que corresponde  $D_{Al}/40$ .

Tabla 5.4: PEEQ 1ª partícula de Cobre. Elaboración propia.

Tamaño de Elemento [ $\mu m$ ]	PEEQ 1ª partícula	Diferencia porcentual
0.67	1.159	-
0.50	1.215	4.9 %
0.40	1.215	0.0 %
0.33	1.216	0.1 %

En la tabla 5.4 se presentan los resultado de sensibilidad para el caso del aluminio, donde la menor variación porcentual ocurre para el tamaño de malla de  $0.4 \mu m$  que corresponde  $D_{Cu}/25$ .

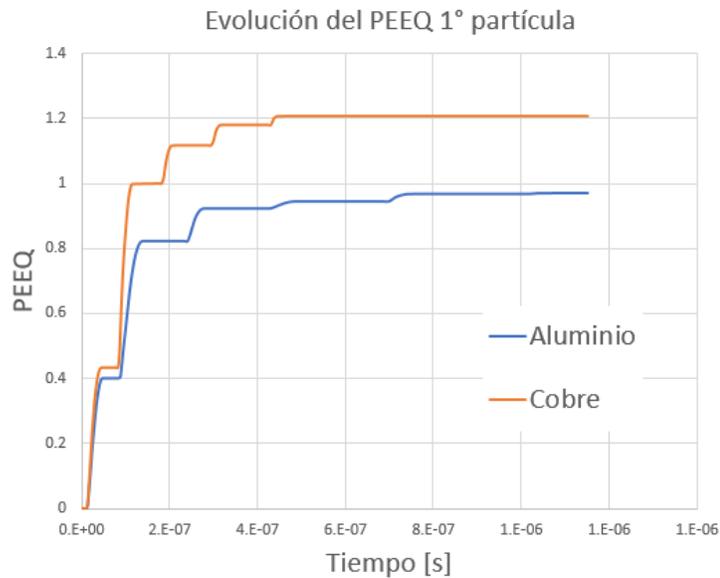


Figura 5.1: Evolución de PEEQ de la primera partícula.

En la figura 5.1 se presenta el cambio en la deformación plástica para la primera partícula de cada material. Se logra apreciar que al final, la última partícula en impactar no afecta la deformación plástica total de la primera partícula.

## 5.2. Resultados Simulaciones

A continuación se presentan los resultados de la simulaciones para ambos modelos en las figuras 5.2 y 5.3 Se presentan las partículas adheridas deformadas. En la tabla 5.5 se presentan los valores de deformación para cada partícula en cada modelo.

Luego en la tabla 5.6 se presenta el esfuerzo de fluencia calculado con el modelo de Hollomon y su equivalencia en dureza. En la tabla 5.7 se presenta el esfuerzo de fluencia calculado con el modelo de Johnson-Cook y su equivalencia en dureza. Finalmente en la tabla 5.8 se presenta la dureza para cada recubrimiento simulado.

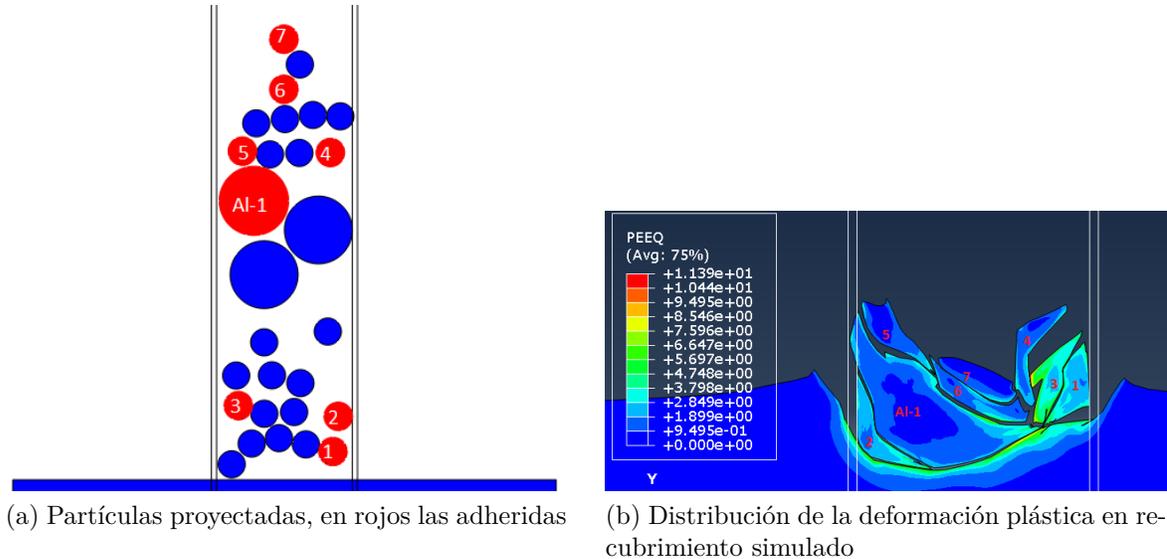


Figura 5.2: Configuración modelo 1.

Podemos observar en la figura 5.2 b) una alta deformación en las partículas, en especial en las de cobre lo que está directamente relacionado con la alta cantidad de partículas que impactan en la formación del recubrimiento. La partícula de Aluminio depositada posee un núcleo con baja deformación plástica a diferencia de las de cobre, en las que todas poseen una deformación uniforme en todo el cuerpo, con la única excepción de la partícula número 7, que es la última partícula en impactar.

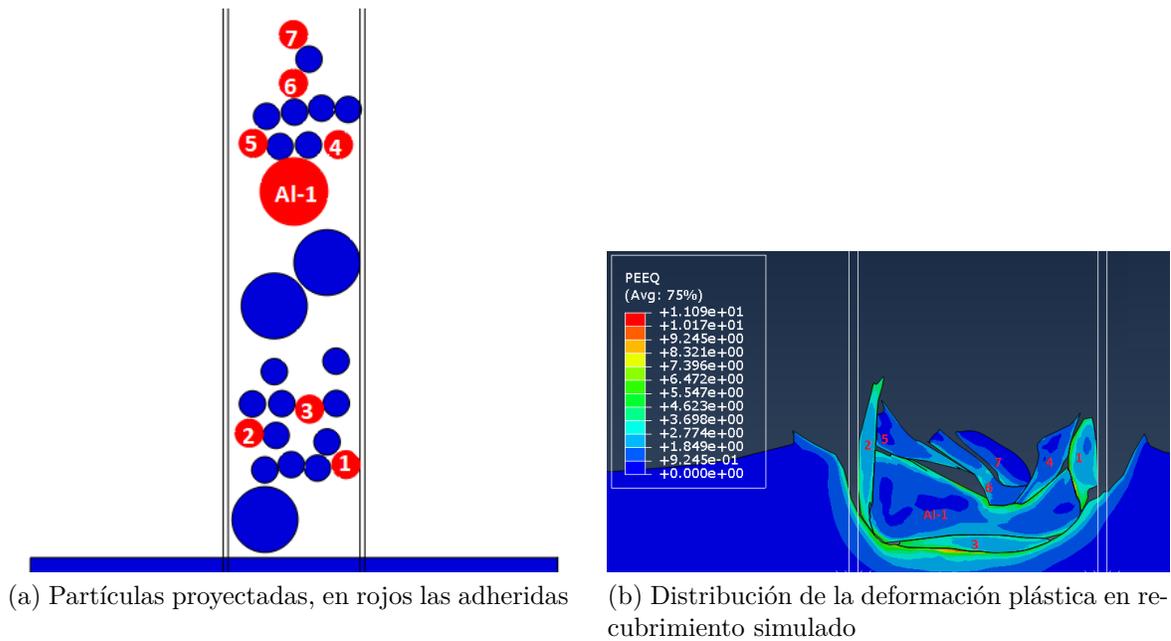


Figura 5.3: Configuración modelo 2.

Se aprecia en la figura 5.3 b) que a diferencia del modelo anterior este posee mayor deformación plástica en el sustrato, lo cual afecta directamente a las primeras partículas que impactan en él, en este caso las partículas cu-1, cu-2 y cu-3 que corresponden a material de cobre generan mayor deformación con respecto al caso anterior. Además la partícula de Aluminio Al-1 posee una mayor deformación plástica, a diferencia del primer modelo, esto está relacionado con el número y la forma en la cual las partículas de cobre impactan sobre la partícula Al-1 .

Tabla 5.5: Deformación plástica y volumen para partículas efectivamente adheridas en ambos modelos. Elaboración propia.

Partícula	Modelo 1			Modelo 2		
	PEEQ	Temperatura [K]	Volumen [mm <sup>3</sup> ]	PEEQ	Temperatura [K]	Volumen [mm <sup>3</sup> ]
Al-1	1.56	557	5.25.E-04	1.80	584	5.26.E-04
Cu-1	2.94	741	8.80.E-05	3.27	788	8.82.E-05
Cu-2	2.65	725	8.80.E-05	3.15	777	8.82.E-05
Cu-3	4.33	913	8.88.E-05	3.32	790	8.82.E-05
Cu-4	1.32	528	8.72.E-05	1.52	564	8.73.E-05
Cu-5	1.87	606	8.75.E-05	1.67	575	8.73.E-05
Cu-6	1.94	614	8.75.E-05	1.67	581	8.73.E-05
Cu-7	0.96	480	8.70.E-05	0.84	467	8.68.E-05
<b>Promedio</b>	<b>1.96</b>	<b>612</b>	<b>1.42.E-04</b>	<b>2.02</b>	<b>619</b>	<b>1.42.E-04</b>

En los datos expuestos en la tabla 5.5 para ambos modelos se presenta una pequeña diferencia en lo que respecta al volumen final de cada partícula, sin embargo, esto está relacionado con los mecanismos de control de deformación de los elementos, explicado previamente en el apartado de metodología. Se reafirma la suposición anterior de que en el modelo 2 las primeras partículas en impactar en el sustrato poseen mayor deformación plástica en promedio. De igual manera es importante destacar que dado el orden de impacto de las partículas en el

modelo 1, la partícula 3 de cobre es la partícula con mayor deformación en ambos modelos. Es destacable que en ambos modelos ocurre un aumento de temperatura en las partículas, sin embargo, este aumento no es suficiente como para producir la fusión de la partícula completa.

Tabla 5.6: Esfuerzo de fluencia y Dureza calculado por medio del modelo de Hollomon. Elaboración propia.

Partícula	Modelo 1		Modelo 2	
	Esf. de fluencia [Mpa]	Dureza [kgf/mm <sup>2</sup> ]	Esf. de fluencia [Mpa]	Dureza [kgf/mm <sup>2</sup> ]
Al-1	175	67	182	70
Cu-1	281	93	284	94
Cu-2	279	92	283	94
Cu-3	290	96	284	94
Cu-4	263	87	266	88
Cu-5	271	90	268	89
Cu-6	272	90	268	89
Cu-7	257	85	254	84
<b>Promedio</b>	<b>228</b>	<b>79.8</b>	<b>230.7</b>	<b>80.8</b>

De la tabla 5.6 tenemos que el mayor esfuerzo lo poseen las partículas de cobre que se depositan en ambos modelos. En contraparte la partícula adherida de aluminio presentó el menor esfuerzo, esto se encuentra acorde a las propiedades de cada material, en particular que el aluminio posee mejor dureza.

Tabla 5.7: Esfuerzo de fluencia y Dureza calculado por medio del modelo de Johnson-Cook. Elaboración propia.

Partícula	Modelo 1		Modelo 2	
	Esf. de fluencia [Mpa]	Dureza [kgf/mm <sup>2</sup> ]	Esf. de fluencia [Mpa]	Dureza [kgf/mm <sup>2</sup> ]
Al-1	519	199	529	202
Cu-1	391	130	403	133
Cu-2	382	126	399	132
Cu-3	432	143	404	134
Cu-4	321	106	332	110
Cu-5	350	116	340	113
Cu-6	353	117	340	113
Cu-7	298	99	289	96
<b>Promedio</b>	<b>434</b>	<b>156.1</b>	<b>437</b>	<b>157.4</b>

De la tabla 5.7 tenemos que el mayor esfuerzo lo posee la partícula de aluminio que se deposita en ambos modelos; esta es la partícula dominante en el proceso por su volumen, lo que representa una abrupta elevación del resultado final de la dureza.

Tabla 5.8: Dureza ponderada por volumen para cada modelo. Elaboración propia

	<b>Modelo 1</b>	<b>Modelo 2</b>
<b>Dureza simulación modelo Hollomon</b> [kgf/mm <sup>2</sup> ]	79.8	80.8
<b>Dureza simulación modelo Johnson-Cook</b> [kgf/mm <sup>2</sup> ]	156.1	157.4
<b>Dureza experimental [19]</b> [kgf/mm <sup>2</sup> ]	83.1 ± 4.8	
<b>Diferencia porcentual modelo Hollomon</b>	4.0 %	2.8 %
<b>Diferencia porcentual modelo Johnson-Cook</b>	87.8 %	89.4 %

En la tabla 5.8 se presenta el resumen de todos los datos simulados e igualmente comparados con el caso experimental. Primero analizando los casos simulados para ambas simulaciones se poseen durezas similares, a pesar de poseer diferentes cantidad y orden de deposición de las partículas de cobre y aluminio. Lo cual nos indica que el número mínimo de partículas a simular es el correcto, y que es una simulación representativa. En segunda instancia analizando el método por el cual se evalúa el esfuerzo de fluencia tenemos que el modelo de Johnson-Cook entrega valores considerablemente más altos, lo que afecta directamente el resultado de dureza del recubrimiento.

# Capítulo 6

## Discusión y Conclusiones

### 6.1. Discusión de Resultados

Los resultados obtenidos, en lo que se refiere a efectos de la alta deformación que se aprecia en la figura 5.2 y 5.3, son acertados a los problemas de CS, y al comparar estos con el resultado experimental de la figura 3.2 se aprecia de igual manera las partículas con una alta deformación.

Existe una diferencia entre el valor experimental y el valor simulado como se puede apreciar en la tabla 5.8, este efecto puede provenir de diferentes razones. En el caso de utilizar el modelo de Hollomon el principal factor son los valores de endurecimiento para cada material con el modelo de esfuerzo-deformación representado en la ecuación 2.10 los que en este caso analizado se aproximaron a los parámetros ajustados para el proceso de trabajo en frío.

En el caso de estimar el esfuerzo de fluencia por medio del modelo de Johnson-Cook, se nos presentó en sí un mayor esfuerzo final, especialmente en el caso del aluminio. Esto proviene por la base del ajuste en la que se describe el modelo el cual posee un mínimo distinto de cero, eso se evidencia en la ecuación 3.3. Además el modelo posee componentes térmicos y de tasa de PEEQ, ambos valores fueron estimados, de forma que la evolución por efectos de recuperación no se consideran.

No obstante pueden existir más razones sobre la diferencia entre el valor de la simulación computacional y el valor de la experimental. Un parámetro que afecta directamente la deformación es el orden en el que ocurre la deposición, puede ocurrir que las primeras partículas que rebotan induzcan un endurecimiento en el sustrato, afectando de esta forma la deposición de las siguientes partículas. También puede ocurrir en el caso de que impacte una partícula de aluminio que posea mayor energía y aumente la deformación total. A pesar de lo anterior los resultados presenten en las tablas 5.6 y 5.7 nos indican que son parámetros de segundo orden.

En particular al comparar modelos de deposición, podemos concluir que el modelo 2 es el que posee mayor deformación en el sustrato y esto coincide con una mayor deformación plástica en las primeras partículas adheridas, sin embargo se generó un recubrimiento de mayor dureza. Esto indica que la deformación del sustrato es un parámetro de segundo orden y no afecta significativamente al recubrimiento.

Como en este trabajo solo se realizó la simulación computacional, los errores relacionados con la obtención de la dureza: como la zona donde se realizó la indentación y cuánta porosidad posee la muestra estudiada no se cuantificó ni se utilizó en el presente estudio, tampoco se simularon dichos casos con porosidad, lo cual es una fuente de variabilidad del resultado final.

El efecto de adherencia se trabajó bajo una condición impuesta, pero esto puede diferir en la realidad dado que el efecto de adherencia principalmente proviene de la componente mecánica, y este por su naturaleza ocurre de forma azarosa. Además puede ocurrir una adhesión metalúrgica dada la alta temperatura de trabajo de algunas partículas como se aprecia en las tablas 5.5, este efecto se podría presentar en los bordes de las partículas.

Cabe destacar que el efecto de adherencia se simplificó y se utilizó la condición que permite el deslizamiento entre las partículas, para esto se complementó el modelo con paredes para que las partículas solo sean depositadas en la zona de impacto. A esto se agrega que el efecto de adherencia ocurre solo con partículas que poseen la etiqueta, es decir que las partículas que rebotan no interactúan entre ellas y solo interactúan con las adheridas previamente, a diferencia del caso real en el cual todas las partículas interactúan entre si presentando mayor complejidad a la simulación y fuente de variabilidad.

La aproximación de partículas esféricas a diferencia de las reales presentadas en la figura 3.1 y el hecho de que no se considere daño o fractura en las partículas ya depositadas, afecta el resultado final. En el caso del cobre las partículas poseen una relación de aspecto alargada, el efecto de forma y daño puede alterar la deposición, lo cual afectaría directamente el resultado final.

## 6.2. Conclusiones

Luego de realizado el análisis bibliográfico y posterior a realización de las simulaciones se obtuvieron las siguientes conclusiones:

Es posible realizar una simulación de la deposición de partículas de múltiples materiales con un enfoque lagrangiano explícito. Esto será replicable para casos en los que los materiales posean propiedades y geometrías similares.

Para el método numérico utilizado es importante el tamaño de malla dado que este puede afectar el resultado final, es necesario realizar una buena elección de ésta. Este parámetro está relacionado directamente con la resolución de la deformación plástica simulada.

Utilizar la condición de deslizamiento para simular la deposición es más acertado que utilizar la condición de no deslizamiento, dado que las partículas previo a realizar la adhesión mecánica tienden a deslizarse.

La eficiencia de la adherencia es un parámetro que es clave en la simulación, debido a que en un punto la deformación plástica de las partículas tiende a un máximo asintótico. En el caso extremo de alta adherencia la simulación sería válida sólo con simular un caso.

Dada la condición de deposición de materiales múltiples que posean puntos de fusión muy

diferentes se pueden presentar efectos térmicos, como una recuperación, es posible que este efecto se presente en el aluminio y reduzca la dureza del recubrimiento.

Los parámetros de JC son muy importantes tanto para la deformación plástica, junto con los parámetros del modelo de Hollomon para el cálculo del esfuerzo de fluencia. Un uso o aplicación equivocada de los parámetros puede inducir grandes errores tanto en la simulación, como en el cálculo de la dureza.

En el caso de evaluar con el modelo de Johnson-Cook, dado que este no solo considera la deformación plástica sino efectos térmicos en la tasa de deformación, es aconsejable considerar efectos secundarios que se puedan presentar, como la recuperación del material, dejando este método como una opción muy útil para evaluar la dureza en el instante de la deposición.

De esta forma se cumple el objetivo general de este proyecto, el cual era evaluar la capacidad de una simulación computacional para obtener valores de dureza de un recubrimiento de cobre y aluminio, ante esto se obtuvieron valores de dureza cercanos al resultado experimental a través de la simulación del proceso en ABAQUS.

Se cumplieron los objetivos específicos, lo que eran completar la simulación en ABAQUS para extraer los valores de deformación. Estos valores fueron posteriormente relacionados con el esfuerzo de fluencia y finalmente con la dureza. Se cumplieron los objetivos para cada material planteado por lo que podemos concluir que se puede simular la deposición de partículas y es válido como medio de estimación de dureza del recubrimiento por medio del modelo de Hollomon.

Existe mejoras posibles a aplicar en el trabajo desarrollado actualmente, estas quedan como propuestas para un trabajo futuro. Dentro de las posibilidades tenemos un estudio más detallado para así poder evaluar distintos parámetros o situaciones, algunas de las cuales podrían ser el efecto de recuperación que se puede presentar en el aluminio, esto a través de una simulación del esfuerzo al momento de depositar y luego estudiar su cambio en el tiempo. Además se podrían evaluar los parámetros de tasa de deposición, puesto que ahora solo se evaluó un caso.

Teniendo presente lo propuesto anteriormente y con el fin de obtener resultados más precisos, se puede simular con condiciones más reales, esto quiere decir considerar el caso en tres dimensiones, tomando en cuenta los efectos de daño en el material, considerar la distribución de tamaño de las partículas y generación de un recubrimiento poroso.

# Bibliografía

- [1] S. Kuroda, J. Kawakita, M. Watanabe, and H. Katanoda, “Warm spraying—a novel coating process based on high-velocity impact of solid particles,” *Science and Technology of Advanced Materials*, vol. 9, p. 033002, jul 2008.
- [2] S. Yin, P. Cavaliere, B. Aldwell, R. Jenkins, H. Liao, W. li, and R. Lupoi, “Cold spray additive manufacturing and repair: Fundamentals and applications,” *Additive Manufacturing*, vol. 21, 04 2018.
- [3] V. Champagne Jr, D. Helfrich, P. Leyman, S. Grendahl, and B. Klotz, “Interface material mixing formed by the deposition of copper on aluminum by means of the cold spray process,” *Journal of Thermal Spray Technology*, vol. 14, pp. 330–334, 01 2005.
- [4] H. Assadi, F. Gärtner, T. Stoltenhoff, and H. Kreye, “Bonding mechanism in cold gas spraying,” *Acta Materialia*, vol. 51, pp. 4379–4394, 09 2003.
- [5] M. Grujicic, C. Zhao, W. DeRosset, and D. Helfrich, “Adiabatic shear instability based mechanism for particles/substrate bonding in the cold-gas dynamic-spray process,” *Materials Design*, vol. 25, no. 8, pp. 681 – 688, 2004.
- [6] T. Hussain, D. McCartney, P. Shipway, and D. Zhang, “Bonding mechanisms in cold spraying: The contributions of metallurgical and mechanical components,” *Journal of Thermal Spray Technology*, vol. 18, pp. 364–379, 09 2009.
- [7] J. Xie, D. Nelias, H. Berre, K. Ogawa, and Y. Ichikawa, “Simulation of the cold spray particle deposition process,” *Journal of Tribology*, vol. 137, pp. 041101–041101, 10 2015.
- [8] T. Schmidt, H. Assadi, F. Gärtner, H. Richter, T. Stoltenhoff, H. Kreye, and T. Klassen, “From particle acceleration to impact and bonding in cold spraying,” *Journal of Thermal Spray Technology*, vol. 18, pp. 794–808, 12 2009.
- [9] J. Xie, *Simulation of cold spray particle deposition process*. PhD thesis, 2014. Thèse de doctorat dirigée par Nélias, Daniel Génie mécanique Lyon, INSA 2014.
- [10] Simulia, *Abaqus Online Documentation*. Dassault Systèmes, 2016 ed., 2015.
- [11] S. Rahmati and A. Ghaei, “The use of particle/substrate material models in simulation of cold-gas dynamic-spray process,” *Journal of Thermal Spray Technology*, vol. 23, 11 2013.
- [12] H. Wiedersich, “Hardening mechanisms and the theory of deformation,” *JOM - Journal of the Minerals, Metals and Materials Society*, vol. 16, pp. 425–430, May 1964.
- [13] M. Ashby, *Materiales para ingeniería 1. Introducción a las propiedades, las aplicaciones y el diseño*. No. v. 1 in *Materiales para ingeniería 1. Introducción a las propiedades, las aplicaciones y el diseño*, Reverte Editorial Sa, 2008.

- [14] D. Askeland and P. Phulé, *Ciencia e ingeniería de los materiales*. Thomson, 2004.
- [15] V. Champagne Jr, D. Helfrich, M. Trexler, and B. Gabriel, “The effect of cold spray impact velocity on deposit hardness,” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 18, p. 065011, 08 2010.
- [16] K. Shinohara, “Relationship between work-hardening exponent and load dependence of vickers hardness in copper,” *Journal of Materials Science*, vol. 28, pp. 5325–5329, 1993.
- [17] G. Vander Voort and R. Fowler, “Low-load vickers microindentation hardness testing,” *Advanced Materials and Processes*, vol. 170, pp. 28–33, 04 2012.
- [18] “Astm e384-17, standard test method for microindentation hardness of materials, astm international, west conshohocken, pa, 2017, www.astm.org,”
- [19] J. Troncoso, “Estudio de la evolución microestructural y propiedades de recubrimientos cobre-aluminio producidos por cold-spray sometidas a tratamientos térmicos,” 2019.
- [20] C. Liimied, *Technical Data Sheet SST-A5001*. Supersonic Spray Technologies, 2020 ed., 2020.
- [21] C. Liimied, *Technical Data Sheet SST-C5003*. Supersonic Spray Technologies, 2020 ed., 2020.
- [22] M. Saleh, V. Luzin, and K. Spencer, “Analysis of the residual stress and bonding mechanism in the cold spray technique using experimental and numerical methods,” *Surface and Coatings Technology*, 05 2014.
- [23] J. Legoux and E. Irissou, “Effect of substrate temperature on the formation mechanism of cold-sprayed aluminum, zinc and tin coatings,” *Journal of Thermal Spray Technology*, vol. 16, pp. 619–626, 01 2007.
- [24] M. Tiryakioglu, J. Robinson, M. Salazar-Guapuriche, Y. Zhao, and P. Eason, “Hardness-strength relationships in the aluminum alloy 7010,” *Materials Science and Engineering A*, vol. 631, pp. 196–200, 04 2015.
- [25] A. Bahri, M. Ellouz, M. Klöcker, T. Kordisch, and K. Elleuch, “Brinell indentation behavior of the stainless steel x2crni18-9: Modeling and experiments,” *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 163, p. 105142, 2019.
- [26] P. Zhang, S. Li, and Z. Zhang, “General relationship between strength and hardness,” *Materials Science and Engineering: A*, vol. 529, pp. 62 – 73, 2011.
- [27] S. C. krishna, N. Gangwar, A. Jha, and B. Pant, “On the prediction of strength from hardness for copper alloys,” *Journal of materials*, vol. 2013, 04 2013.

# Anexo A

## Código Python

Código A.1: Código creación modelos

```
1 #importando librerias
2
3 import time
4 t0 = time.time()
5 import os, re
6 import glob
7 import regionToolset
8 import load
9 from random import sample
10 from abaqus import *
11 from abaqusConstants import *
12 from part import *
13 from material import *
14 from section import *
15 from assembly import *
16 from step import *
17 from interaction import *
18 from load import *
19 from mesh import *
20 from job import *
21 from sketch import *
22 from visualization import *
23 from connectorBehavior import *
24 from platform import system
25 import displayGroupOdbToolset as dgo
26 import xyPlot
27 import random
28 from abaqus import backwardCompatibility
29 backwardCompatibility.setValues(reportDeprecated=False)
30 import numpy as np
31
32 def sim(ALE1,frec,messw,initialms,cr) :
33
34     #creacion de un nuevo modelo
35     Mdb()
36     backwardCompatibility.setValues(reportDeprecated=False)
```

```

37 #Creacion de vetor de random
38 RN=np.random.rand(100)
39 np.savetxt("rand.txt",RN)
40 #parametros ALE
41 ALE=ALE1
42 frec=frec
43 meshsw=messw
44 initialmS=initialms
45 CR=cr
46
47 #parametro de hourgalss control combi
48 WF=0.1
49 #especificanto numero de particulas a disparar y depositar
50 nAl=0
51 ndAl=0
52
53 nCu=5
54 ndCu=0
55 #numero total de particulas
56 nPar=nAl+nCu
57
58 partiAl=np.ones([nAl,2])# listado de particulas que son aluminio
59
60 partiCu=np.ones([nCu,2])*2# listado de particulas que son cobre
61 # caso alumino
62 for i in range (nAl):
63     if i <ndAl:
64         partiAl[i,1]=0# indica que esta depositado
65     else:
66         partiAl[i,1]=1# indica que esta rebota
67
68 # caso cobre
69 for i in range (nCu):
70     if i <ndCu:
71         partiCu[i,1]=0# indica que esta depositado
72     else:
73         partiCu[i,1]=1# indica que esta rebota
74
75 #particulas a depositar
76 depo=np.concatenate((partiAl,partiCu), axis=0)
77 print(depo)
78 #desordenado el orden de las particulas
79 np.random.shuffle(depo)
80 print(depo)
81 #creando vector que me indica que tipo de material es cada particula de la lista
82 tipo=[]
83 for k in range(len(depo)) :
84     tipo.append(int(depo[k][0]))
85
86 # crecion de vector que ordenas partoculas y indica cuando se aplica condicion de
87     ↪ velocidad
orden=np.zeros(nPar+1)

```

```

88 #definiendo divisor para tamaño de elemento
89 smcu=25#divisor de casos cobre
90 smal=40#divisor de caso aluminio
91
92 # creando el arreglo de particulas de cobre y de aluminio
93
94 suffix='numero particulas '+str(nPar)
95
96 partR1=0.025 #Diametro de la particula de Aluminioen mm
97 partR2=0.01 # Diametro de la particula de cobre en mm
98 #Tamaño elemento
99 meshsize=partR1/smal#caso de aluminio
100 meshsize1=partR2/smcu#caso cobre
101 #velocidad de deposicion
102 vel1=510000. # velcidad de la particula de aluminio en mm/s
103 vel2=460000. #velocidad de la particula de cobre en mm/s
104 velp=(vel1+vel2)/2.
105
106
107 #Temperatura
108 TemperSub=423 #temperatura sustrato en K #revisado
109 TemperPar=363. #temperatura Particula en K
110
111
112 #
113 modname = suffix # definiendo el nombre del modelo
114 jobname = '1H'+suffix # definiedno el nombre del job
115 #-----
116 #creado modelo
117 mod = mdb.Model(name=modname)
118 #vfac = sqrt(vel/500000.) # revisar para que es esto
119 #-----
120
121 #Parametros geometricos [mm]
122
123 partR=max(partR1,partR2)
124 partr=min(partR1,partR2)
125
126 #Sustrato
127 #zana fina
128 sub_fL = partR*2 #largo y ancho
129 sub_fH = partR*2
130 #sustrato, zona transicion
131 sub_tL = sub_fL+partR #largo y ancho (absolute)
132 sub_tH = sub_fH+partR #Altura (absolute)
133 #Cuerpo completo
134 subL = sub_fL*4 #largo y ancho
135 subH = sub_fH*5 #altura
136
137 #-----
138 #Creando partes
139

```

```

140 #Part 1: aluminio
141 #Dibujo
142 sketchParticle1 = mod.ConstrainedSketch(name='Particula1', sheetSize=subL) # crear
    ↳ nombre de la partícula y el tamaño de la hoja
143 sketchParticle1.CircleByCenterPerimeter(center=(0.0, 0.0), point1=(0.0, partR1/2.)) #
    ↳ dibujar un círculo para la partícula
144
145 #Crear la parte (PART)
146 partParticle1 = mod.Part(dimensionality=TWO_D_PLANAR, name='Particula1', type=
    ↳ DEFORMABLE_BODY) # tipo de partícula, nombre y si es deformable
147 partParticle1.BaseShell(sketch=sketchParticle1)# dibujar en base al sketch
148
149
150 #Part 2: cobre
151 #Dibujo
152 sketchParticle2 = mod.ConstrainedSketch(name='Particula2', sheetSize=subL) # crear
    ↳ nombre de la partícula y el tamaño de la hoja
153 sketchParticle2.CircleByCenterPerimeter(center=(0.0, 0.0), point1=(0.0, partR2/2.)) #
    ↳ dibujar un círculo para la partícula
154
155 #Crear la parte (PART)
156 partParticle2 = mod.Part(dimensionality=TWO_D_PLANAR, name='Particula2', type=
    ↳ DEFORMABLE_BODY) # tipo de partícula, nombre y si es deformable
157 partParticle2.BaseShell(sketch=sketchParticle2)# dibujar en base al sketch
158
159
160 SurfPart1 = partParticle1.Surface(side1Edges=partParticle1.edges, name='SurfacePart1')
    ↳ #definir la superficie de la partícula aluminio
161 SurfPart2 = partParticle2.Surface(side1Edges=partParticle2.edges, name='SurfacePart2')
    ↳ #definir la superficie de la partícula cobre
162
163 #Part 3: Substrate
164 #Dibujo
165 sketchSub = mod.ConstrainedSketch(name='Substrate', sheetSize=subL)
166 sketchSub.rectangle(point2=(-subL/2., 0), point1=(subL/2., -subH)) # dibujar rectangulo
    ↳ de sustrato
167 #Part
168 partSub = mod.Part(dimensionality=TWO_D_PLANAR, name='Substrate', type=
    ↳ DEFORMABLE_BODY)
169 partSub.BaseShell(sketch=sketchSub)
170 del mod.sketches['Substrate']
171 #sub SURFACE toda la superficie
172 SurfSub = partSub.Surface(side1Edges=partSub.edges, name='SurfaceSub')
173 #Top Surface
174 TopEdge = partSub.edges.findAt(((0,0,0)),((sub_fL/2.,-sub_fH/2.,0)),((0,-sub_fH,0)),((-
    ↳ sub_fL/2.,-sub_fH/2.,0)))
175 SurfSubTop = partSub.Surface(side1Edges=TopEdge, name='TopSurface')
176
177
178 #Part 3: Paredes Aluminio
179 #Sketch
180 sketchWall = mod.ConstrainedSketch(name='Wall', sheetSize=subL)

```

```

181 sketchWall.Line(point2=(0, 0), point1=(0, nPar/2*partR*1.2))
182 #Part
183 partWall = mod.Part(dimensionality=TWO_D_PLANAR, name='Wall', type=
    ↪ DISCRETE_RIGID_SURFACE)
184 partWall.BaseWire(sketch=sketchWall)
185 RefWall=partWall.ReferencePoint(point=(0,0,0),)
186 #del mod.sketches['Wall']
187 RP=partWall.referencePoints
188 partWall.Set(referencePoints=(RP[2], ), name='RefWall')
189 SurfWall = partWall.Surface(side1Edges=partWall.edges, name='SurfaceWall')
190 SurfWall2 = partWall.Surface(side2Edges=partWall.edges, name='SurfaceWall2')
191
192
193 #Part 3: Paredes Cobre
194 #Sketch
195 sketchWallcu = mod.ConstrainedSketch(name='Wallcu', sheetSize=subL)
196 sketchWallcu.Line(point2=(0, 0), point1=(0, nPar/2*partR))
197 #Part
198 partWallcu = mod.Part(dimensionality=TWO_D_PLANAR, name='Wallcu', type=
    ↪ DISCRETE_RIGID_SURFACE)
199 partWallcu.BaseWire(sketch=sketchWallcu)
200 RefWallcu=partWallcu.ReferencePoint(point=(0,0,0),)
201 #del mod.sketches['Wall']
202 RPcu=partWallcu.referencePoints
203 partWallcu.Set(referencePoints=(RPcu[2], ), name='RefWallcu')
204 SurfWallcu = partWallcu.Surface(side1Edges=partWallcu.edges, name='SurfaceWallcu')
205 SurfWallcu2 = partWallcu.Surface(side2Edges=partWallcu.edges, name='SurfaceWallcu2')
206
207
208
209 #-----
210 #Dibujadno la particion de los cuerpos
211
212 #Aluminio
213
214 AR=5. # Parametro para particion de particulas
215 s1 = mod.ConstrainedSketch(name='s1', sheetSize=subL)
216 s1.rectangle(point2=(-partR1/AR, -partR1/AR), point1=(partR1/AR, partR1/AR))
217 s1.Line(point1=(-partR1/2., 0), point2=(partR1/2., 0))
218 s1.Line(point1=(-partR1/AR, partR1/AR), point2=(-sqrt(2)*partR1/4.,sqrt(2)*partR1/4.)
    ↪ )
219 s1.Line(point1=(partR1/AR, partR1/AR), point2=(sqrt(2)*partR1/4.,sqrt(2)*partR1/4.))
220 s1.Line(point1=(partR1/AR, -partR1/AR), point2=(sqrt(2)*partR1/4.,-sqrt(2)*partR1/4.)
    ↪ )
221 s1.Line(point1=(-partR1/AR, -partR1/AR), point2=(-sqrt(2)*partR1/4.,-sqrt(2)*partR1
    ↪ /4.))
222 s1.Line(point1=(0,-partR1/2.), point2=(0,partR1/2.))
223
224 #Separando caras
225 pickedFaces = partParticle1.faces
226 partParticle1.PartitionFaceBySketch(faces=pickedFaces, sketch=s1)
227

```

```

228
229 #Cobre
230
231 s2 = mod.ConstrainedSketch(name='s2', sheetSize=subL)
232 s2.rectangle(point2=(-partR2/AR, -partR2/AR), point1=(partR2/AR, partR2/AR))
233 s2.Line(point1=(-partR2/2., 0), point2=(partR2/2., 0))
234 s2.Line(point1=(-partR2/AR, partR2/AR), point2=(-sqrt(2)*partR2/4.,sqrt(2)*partR2/4.)
    ↪ )
235 s2.Line(point1=(partR2/AR, partR2/AR), point2=(sqrt(2)*partR2/4.,sqrt(2)*partR2/4.))
236 s2.Line(point1=(partR2/AR, -partR2/AR), point2=(sqrt(2)*partR2/4.,-sqrt(2)*partR2/4.)
    ↪ )
237 s2.Line(point1=(-partR2/AR, -partR2/AR), point2=(-sqrt(2)*partR2/4.,-sqrt(2)*partR2
    ↪ /4.))
238 s2.Line(point1=(0,-partR2/2.), point2=(0,partR2/2.))
239
240 #ISeparando caras
241 pickedFaces = partParticle2.faces
242 partParticle2.PartitionFaceBySketch(faces=pickedFaces, sketch=s2)
243
244
245
246 #-----
247 #Sustrato
248 #Dibujo
249 s3 = mod.ConstrainedSketch(name='s3', sheetSize=subL)
250 s3.rectangle(point2=(-sub_fL/2., 0), point1=(sub_fL/2., -sub_fH))
251 s3.rectangle(point2=(-sub_tL/2., 0), point1=(sub_tL/2., -sub_tH))
252 s3.Line(point1=(-subL/2.,-sub_tH), point2=(subL/2.,-sub_tH))
253 #PSeparando Caras
254 pickedFaces = partSub.faces
255 partSub.PartitionFaceBySketch(faces=pickedFaces, sketch=s3)
256
257 ##Creando la zona de impacto.
258 ImpactEdge = partSub.edges.findAt(((0,0,0)),((sub_fL/2.5,-sub_fH/2.5,0)),((0,-sub_fH
    ↪ /2.5,0)),((-sub_fL/2.5,-sub_fH/2.5,0)))
259 SurfSubImpact = partSub.Surface(side1Edges=ImpactEdge, name='ImpactSurface')
260 #-----
261 #Asignando nombres.
262 SubPartEdges_f = partSub.edges.findAt(((0,0,0)),((sub_fL/2.,-sub_fH/2.,0)),((0,-sub_fH
    ↪ ,0)),((-sub_fL/2.,-sub_fH/2.,0)))
263 SubPartEdges_t1 = partSub.edges.findAt(((sub_tL/2.*0.9,0,0)),)
264 SubPartEdges_t2 = partSub.edges.findAt((-sub_tL/2.*0.9,0,0)),)
265 SubPartEdges_b = partSub.edges.findAt(((subL/2.*0.9,0,0)),((subL/2.,-sub_fH,0)),((0,-
    ↪ subH,0)),((-subL/2.,-sub_fH,0)),((-subL/2.*0.9,0,0)),((-sub_tL/2.,-sub_tH*0.9,0),
    ↪ ,((sub_tL/2.,-sub_tH*0.9,0)),((0,-sub_tH,0)),)
266
267
268 #-----
269 #Definiendo materiales
270
271 #Aluminio
272 matAl = mod.Material(name='Aluminio')

```

```

273 matAl.Density(table=((0.0000000027, ), ))
274 matAl.Elastic(type=SHEAR, table=((27000.0,)), )
275 matAl.Plastic(hardening=JOHNSON_COOK, table=((148.4, 345.5, 0.183, 0.895, 916.0,
    ↪ 293.0), ))
276 matAl.plastic.RateDependent(table=((0.001, 1.0), ), type=JOHNSON_COOK)
277 matAl.Conductivity(table=((237.2, ), ))
278 matAl.SpecificHeat(table=((898200000.0,)), )
279 matAl.Eos(table=((5386000.0, 1.339, 1.97), ), type=USUP)
280
281
282 #Cobre
283 matCu = mod.Material(name='Cobre')
284 matCu.Density(table=((0.00000000896, ), ))
285 matCu.Elastic(type=SHEAR, table=((44700.0,)), )
286 matCu.Plastic(hardening=JOHNSON_COOK, table=((90.0, 292.0, 0.31, 1.09, 1356.15,
    ↪ 283.15), ))
287 matCu.plastic.RateDependent(table=((0.025, 1.0), ), type=JOHNSON_COOK)
288 matCu.Conductivity(table=((400.0, ), ))
289 matCu.SpecificHeat(table=((383000000.0, ), ))
290 matCu.Eos(table=((3972000.0, 1.478, 2.0), ), type=USUP)
291
292
293
294
295 #-----
296 #Creando secciones
297 secParticle1 = mod.HomogeneousSolidSection(material='Aluminio', name='Particle 1
    ↪ Section')
298 secParticle2 = mod.HomogeneousSolidSection(material='Cobre', name='Particle 2 Section'
    ↪ )
299 secSubstrate = mod.HomogeneousSolidSection(material='Aluminio', name='Substrate
    ↪ Section')
300 #-----
301 #AAsignando secciones
302 partParticle1.SectionAssignment(region=Region(faces=partParticle1.faces), sectionName='
    ↪ Particle 1 Section')
303 partParticle2.SectionAssignment(region=Region(faces=partParticle2.faces), sectionName='
    ↪ Particle 2 Section')
304 partSub.SectionAssignment(region=Region(faces=partSub.faces), sectionName='Substrate
    ↪ Section')
305
306 #-----
307
308
309 #####Creando el mallado
310
311
312 partWall.seedPart(meshsize, deviationFactor=0.1, minSizeFactor=0.1)
313 partWall.generateMesh()
314
315 partWallcu.seedPart(meshsize, deviationFactor=0.1, minSizeFactor=0.1)
316 partWallcu.generateMesh()

```

```

317
318
319
320 #Particula
321 pmeshsize = meshsize#aluminio
322 pmeshsize1 = meshsize1#coobre
323 pratio = partr/pmeshsize
324 #particula de aluminio
325 partParticle1.setMeshControls(elemShape=QUAD, technique=STRUCTURED, regions=
    ↪ partParticle1.faces)
326 partParticle1.seedPart(size=pmeshsize, deviationFactor=0.1, minSizeFactor=0.1)
327 partParticle1.generateMesh()
328
329 #particula de cobre
330 partParticle2.setMeshControls(elemShape=QUAD, technique=STRUCTURED, regions=
    ↪ partParticle2.faces)
331 partParticle2.seedPart(size=pmeshsize1, deviationFactor=0.1, minSizeFactor=0.1)
332 partParticle2.generateMesh()
333
334
335 #Sustrato
336 smeshsize = (meshsize+meshsize1)
337 ssize1 = smeshsize
338 ssize2 = smeshsize*7.
339 subratio1 = partR/ssize1
340 subratio2 = partR/ssize2
341 TriMeshedFaces = partSub.faces.findAt(((0,-sub_tH*0.9,0),),)
342 partSub.setMeshControls(elemShape=QUAD, technique=STRUCTURED, regions=
    ↪ partSub.faces)
343 partSub.setMeshControls(elemShape=TRI, technique=FREE, regions=TriMeshedFaces)
344 partSub.seedEdgeBySize(edges=SubPartEdges_f, size=ssize1, constraint=FIXED)
345 partSub.seedEdgeBySize(edges=SubPartEdges_b, size=ssize2, constraint=FINER)
346 partSub.seedEdgeByBias(biasMethod=SINGLE, minSize=ssize1, maxSize=ssize2,
    ↪ end2Edges=SubPartEdges_t1, constraint=FINER)
347 partSub.seedEdgeByBias(biasMethod=SINGLE, minSize=ssize1, maxSize=ssize2,
    ↪ end1Edges=SubPartEdges_t2, constraint=FINER)
348 pickedRegions = partSub.faces.findAt(((0,0,0),),)
349 partSub.generateMesh(regions=pickedRegions)
350 pickedRegions = partSub.faces.findAt(((subL/2.*0.9,-sub_fH*0.9,0),)((subL/2.*0.9,-
    ↪ sub_fH*0.9,0),),)
351 partSub.generateMesh(regions=pickedRegions)
352 pickedRegions = partSub.faces.findAt(((0,-subH*0.9,0),),)
353 partSub.generateMesh(regions=pickedRegions)
354 pickedRegions = partSub.faces.findAt(((0,-sub_tH*0.9,0),),)
355 partSub.generateMesh(regions=pickedRegions)
356
357
358 #-----
359 ###SDefiniendo el tipo de elemento
360 elemTri = ElemType(elemCode=CPE3T, elemLibrary=EXPLICIT)
361 elemQuad = ElemType(elemCode=CPE4RT, elemLibrary=EXPLICIT,
    ↪ secondOrderAccuracy=ON, hourglassControl=COMBINED, distortionControl=

```

```

↪ DEFAULT, weightFactor=WF)
362
363 elemQuad1 = ElemType(elemCode=CPE4RT, elemLibrary=EXPLICIT,
↪ secondOrderAccuracy=ON, hourglassControl=COMBINED, distortionControl=
↪ DEFAULT, weightFactor=WF)
364
365 elemQuad1 = ElemType(elemCode=CPE4RT, elemLibrary=EXPLICIT,
↪ secondOrderAccuracy=ON, distortionControl=DEFAULT)
366 partParticle1.setElementType(elemTypes=(elemQuad,), regions=(partParticle1.faces,))#
↪ aluminio
367
368 partParticle2.setElementType(elemTypes=(elemQuad1,), regions=(partParticle2.faces,))#
↪ cobre
369
370 partSub.setElementType(elemTypes=(elemQuad1,), regions=Region(faces=partSub.faces))
371 partSub.setElementType(elemTypes=(elemTri,), regions=(TriMeshedFaces,))
372
373 #-----
374 ###Crenado las interacciones de contacto
375
376
377 interactionProp=mod.ContactProperty('Bounce Contact')
378 interactionProp.TangentialBehavior(formulation=PENALTY, fraction=0.005,
↪ maximumElasticSlip=FRACTION,table=((0.4, ), ))
379 interactionProp.NormalBehavior(pressureOverclosure=HARD)
380 interactionProp.HeatGeneration()
381
382 interactionProp2=mod.ContactProperty('Stick Contact')
383 interactionProp2.TangentialBehavior(formulation=PENALTY, fraction=0.005,
↪ maximumElasticSlip=FRACTION,table=((0.5, ),))
384 interactionProp2.NormalBehavior(pressureOverclosure=HARD)#,allowSeparation=OFF)
385 interactionProp2.HeatGeneration()
386
387 interactionProp3=mod.ContactProperty('Stick Contact1')
388 interactionProp3.TangentialBehavior(formulation=PENALTY, fraction=0.005,
↪ maximumElasticSlip=FRACTION,table=((0.5, ),))
389 interactionProp3.NormalBehavior(pressureOverclosure=HARD,allowSeparation=OFF)#,
↪ allowSeparation=OFF
390 interactionProp3.HeatGeneration()
391
392 interactionProp3=mod.ContactProperty('Wall Contact')
393 interactionProp3.NormalBehavior(pressureOverclosure=HARD)
394 interactionProp3.TangentialBehavior(formulation=FRICITIONLESS)
395
396
397
398
399 ###Pasos de tiempo
400 stepImpact=mod.TempDisplacementDynamicsStep(name='Impact0', previous='Initial',
↪ timePeriod=1e-8, scaleFactor=0.5, nlgeom=True)
401 #-----
402 #Creando ensamble

```

```

403
404 ### Sustrato
405
406 #Añadiendo susutrato y paredes
407 mar=2.5
408 marcu=3.5
409 ass = mod.rootAssembly
410 ass.DatumCsysByDefault(CARTESIAN)
411 instSub = ass.Instance(name='Substrate', part=partSub, dependent=ON)
412
413 instWall1 = ass.Instance(name='Wall1', part=partWall, dependent=ON)
414 instWall1.translate((-partR*mar/2)/2,-partR1,0.)
415 instWall2 = ass.Instance(name='Wall2', part=partWall, dependent=ON)
416 instWall2.translate(((partR/2*mar)/2,-partR1,0.))
417
418 instWallcu1 = ass.Instance(name='Wallcu1', part=partWallcu, dependent=ON)
419 instWallcu1.translate((-partR2*marcu)/2,-partR1,0.)
420 instWallcu2 = ass.Instance(name='Wallcu2', part=partWallcu, dependent=ON)
421 instWallcu2.translate(((partR2*marcu)/2,-partR1,0.))
422
423 #Aplicando las condiciones de borde
424
425 # Encastre
426 pickedEdges = instSub.edges.findAt(((0,-subH,0),),)
427 mod.EncastreBC(createStepName='Initial',name='Fixed bottom', region=Region(edges=
    ↪ pickedEdges))
428 mod.EncastreBC(createStepName='Initial',name='FixRefWall1',region=instWall1.sets[
    ↪ RefWall'])
429 mod.EncastreBC(createStepName='Initial',name='FixRefWall2',region=instWall2.sets[
    ↪ RefWall'])
430 mod.EncastreBC(createStepName='Initial',name='FixRefWallcu1',region=instWallcu1.sets[
    ↪ 'RefWallcu'])
431 mod.EncastreBC(createStepName='Initial',name='FixRefWallcu2',region=instWallcu2.sets[
    ↪ 'RefWallcu'])
432
433 #temperatura inicial
434 mod.TemperatureBC(createStepName='Impact0',name='FixTempWall1',region=instWall1.
    ↪ sets['RefWall'],fixed=OFF, distributionType=UNIFORM, magnitude=TemperSub)
435 mod.TemperatureBC(createStepName='Impact0',name='FixTempWall2',region=instWall2.
    ↪ sets['RefWall'],fixed=OFF, distributionType=UNIFORM, magnitude=TemperSub)
436 mod.TemperatureBC(createStepName='Impact0',name='FixTempWallcu1',region=
    ↪ instWallcu1.sets['RefWallcu'],fixed=OFF, distributionType=UNIFORM, magnitude=
    ↪ TemperSub)
437 mod.TemperatureBC(createStepName='Impact0',name='FixTempWallcu2',region=
    ↪ instWallcu2.sets['RefWallcu'],fixed=OFF, distributionType=UNIFORM, magnitude=
    ↪ TemperSub)
438
439 #Condiciones inicial
440 mod.Temperature(createStepName='Initial', magnitudes=TemperSub, name='Initial
    ↪ Substrate Temperature', region=Region(faces=instSub.faces))
441 mod.Temperature(createStepName='Initial', magnitudes=TemperSub, name='Initial Wall1
    ↪ Temperature', region=Region(edges=instWall1.edges))

```

```

442 mod.Temperature(createStepName='Initial', magnitudes=TemperSub, name='Initial Wall2
    ↳ Temperature', region=Region(edges=instWall2.edges))
443 mod.Temperature(createStepName='Initial', magnitudes=TemperSub, name='Initial
    ↳ Wallcu1 Temperature', region=Region(edges=instWallcu1.edges))
444 mod.Temperature(createStepName='Initial', magnitudes=TemperSub, name='Initial
    ↳ Wallcu2 Temperature', region=Region(edges=instWallcu2.edges))
445
446
447 #creadno lista de elemento que posee ALE
448 facesALE=[]
449 particula=[]
450 facesALE.append(instSub.faces.findAt(((0,0,0),),))
451 print('bien')
452
453
454 # Agregando particulas de cobre y aluminio
455 impactW=sub_fL-partR
456 insPar=[]
457 stepvel=[]
458 stepI=[]
459 tras=0
460 tras1=0
461 angu1=90
462 angu2=60
463 ref=(partR2*marcu)/2
464
465 DepCu=[]
466 DepAl=[]
467
468 #creacion de multiples STEPS
469 for k in range(int(max(orden))+1) :
470     stepvel.append(mod.TempDisplacementDynamicsStep(name='vel'+str(k), previous='
    ↳ Impact'+str(k), timePeriod=1e-9, scaleFactor=1, nlgeom=True))
471     if tipo[k]==1:
472         tras1+=partR1
473     elif tipo[k]==2:
474         tras1+=partR2
475
476     stepI.append(mod.TempDisplacementDynamicsStep(name='Impact'+str(k+1), previous
    ↳ ='vel'+str(k), timePeriod=5e-8+(tras1/velp), scaleFactor=0.1, nlgeom=True))
477
478
479 # ciclo para agregar particulas al ensamble
480 for k in range(len(depo)):# iterando en el rango de particulas
481     if depo[k,0]==1:# condicion que sea aluminio
482         # seleccionadno material
483         secParticle1 = mod.HomogeneousSolidSection(material='Aluminio', name='Particle 1
    ↳ Section')
484         #insertando particula en ensamble
485         insPar.append(ass.Instance(name='Particle-Al-dep-'+str(k), part=partParticle1,
    ↳ dependent=ON))
486         #ajutando traslacion para que no existan particulas juntan en un inicio

```

```

487     tras+=partR1/2+0.001
488     #seleccionamos modelo para rotar particula
489     a1 = mdb.models[suffix].rootAssembly
490     if depo[k,1]==0:# condicion de que queda depositado
491         # rotamos en 45 para poder identifiarlo despues
492         a1.rotate(instanceList=('Particle-Al-dep-'+str(k), ), axisPoint=(0.0, 0.0, 0.0),
↪ axisDirection=(0.0, 0.0, 1.0), angle=angul1)
493     if depo[k,1]==1:# condicion que rebota
494         # rotando en 60
495         a1.rotate(instanceList=('Particle-Al-dep-'+str(k), ), axisPoint=(0.0, 0.0, 0.0),
↪ axisDirection=(0.0, 0.0, 1.0), angle=angu2)
496         # donde se traslada la particula
497         insPar[k].translate((0.,tras,0.))#seteando la posicion de la particula de forma "random
↪ ", por el txt generado
498         tras+=partR1/2+0.001
499         #condicion inicial de velocidad requerida
500         mod.Velocity(name='Initial Particle Velocity-state'+str(k), omega=0.0, region=Region
↪ (faces=insPar[k].faces), velocity1=0.0, velocity2=-0.00001)
501         #Ci temperatura
502         mod.Temperature(createStepName='Initial', magnitudes=TemperPar, name='Initial
↪ Particle Temperature-state'+str(k), region=Region(faces=insPar[k].faces))
503         # agregar faces a control de ALE
504         facesALE.append(facesALE[k]+insPar[k].faces)
505         particula.append(insPar[k].faces)
506
507         #lista de particulas a analizar
508         if depo[k,1]==0:
509             DepAl.append(insPar[k].faces)
510         elif depo[k,0]==2:# condicion que sea cobre
511             # seleccionando material
512             secParticle2 = mod.HomogeneousSolidSection(material='Cobre', name='Particle 2
↪ Section')
513             #insertando particula al ensamble
514             insPar.append(ass.Instance(name='Particle-Cu-'+str(k), part=partParticle2,
↪ dependent=ON))
515             tras+=partR2/2+0.001
516             a1 = mdb.models[suffix].rootAssembly
517             if depo[k,1]==0:# condicion de que queda depositado
518                 a1.rotate(instanceList=('Particle-Cu-dep-'+str(k), ), axisPoint=(0.0, 0.0, 0.0),
↪ axisDirection=(0.0, 0.0, 1.0), angle=angul1)
519             if depo[k,1]==1:# condicion de que queda depositado
520                 a1.rotate(instanceList=('Particle-Cu-dep-'+str(k), ), axisPoint=(0.0, 0.0, 0.0),
↪ axisDirection=(0.0, 0.0, 1.0), angle=angu2)
521             insPar[k].translate((RN[k%100]*ref-ref/2.,tras,0.))#seteando la posicion de la
↪ particula de forma "random", por el txt generado
522             tras+=partR2/2+0.001
523             mod.Velocity(name='Initial Particle Velocity-state'+str(k), omega=0.0, region=Region
↪ (faces=insPar[k].faces), velocity1=0.0, velocity2=-0.00001)
524             mod.Temperature(createStepName='Initial', magnitudes=TemperPar, name='Initial
↪ Particle Temperature-state'+str(k), region=Region(faces=insPar[k].faces))
525             facesALE.append(facesALE[k]+insPar[k].faces)
526             particula.append(insPar[k].faces)

```

```

527     if depo[k,1]==0:
528         DepCu.append(insPar[k].faces)
529
530
531     #ajustando las interacciones
532
533     mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Initial', name='Substrate-Substrate
↵ ', interactionProperty='Bounce Contact', master=instSub-surfaces['TopSurface'], slave
↵ =instSub-surfaces['TopSurface'], sliding=FINITE)
534
535     if depo[k,0]==1:# en el caso que sea aluminio
536         surfP=insPar[k].surfaces['SurfacePart1']
537         surfS=instSub-surfaces['TopSurface']
538         ###Interactions!!!
539         if depo[k,1]==0:# interacciondes caso adherencia
540             #Sticked particles itneract with:
541             #Substrates
542             mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(orden[k])+1),
↵ name='Substrate-Particle-s- Al'+str(k), interactionProperty='Stick Contact', master
↵ =surfP, slave=instSub-surfaces['TopSurface'], sliding=FINITE)
543
544             #Wall and
545             mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Initial', name='Wall-1-Particle-
↵ s-Al'+str(k), interactionProperty='Wall Contact', master=surfP, slave=instWall1.
↵ surfaces['SurfaceWall'], sliding=FINITE)#, mechanicalConstraint=PENALTY)
546             mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Initial', name='Wall-2-Particle-
↵ s-Al'+str(k), interactionProperty='Wall Contact', master=surfP, slave=instWall2.
↵ surfaces['SurfaceWall2'], sliding=FINITE)#, mechanicalConstraint=PENALTY)
547             # creando interaccion con particulas previamente depositadas
548             for j in range(len(depo)):
549                 if depo[j,0]==1:#condicion que particula de aluminio
550                     if depo[j,1]==0:#condicion que se adhiera
551                         if j<=k:#condicion que solo sea contacto con particulas previamente
↵ depositada
552                             mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(
↵ orden[k])+1), name='Particle-Al'+str(k)+'-Particle-Impact-s-Al'+str(j),
↵ interactionProperty='Stick Contact', master=surfP, slave=insPar[j].surfaces['
↵ SurfacePart1'], sliding=FINITE)
553                             else:# en el caso que sea cobre
554                                 if depo[j,1]==0:#Condicion que este ya este adherida
555                                     if j<=k:# condicion que sea previamente depositada
556                                         mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(
↵ orden[k])+1), name='Particle Al'+str(k)+'-Particle-Impact-s-Cu'+str(j),
↵ interactionProperty='Stick Contact', master=surfP, slave=insPar[j].surfaces['
↵ SurfacePart2'], sliding=FINITE)
557
558                                 elif depo[k,1]==1: #condicion de rebote
559                                     #sustrato
560                                     mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(orden[k])+1),
↵ name='Substrate-Particle Al-b'+str(k), interactionProperty='Bounce Contact',
↵ master=surfP, slave=instSub-surfaces['ImpactSurface'], sliding=FINITE)
561

```

```

562     for j in range(len(depo)):
563         if depo[j,0]==1:#condicion que particula de aluminio
564             if depo[j,1]==0:#condicion que se adhiera
565                 if j<=k:#condicion que solo sea contacto con particulas previamente
↪ depositada
566                     mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(
↪ orden[k])+1), name='Particle Al-'+str(k)+'-Particle-Impact-b-Al'+str(j),
↪ interactionProperty='Bounce Contact', master=surfP, slave=insPar[j].surfaces['
↪ SurfacePart1'], sliding=FINITE)
567                 elif depo[j,0]==2:# en el caso que sea cobre
568                     if depo[j,1]==0:#Condicion que este ya este adherida
569                         if j<=k:# condicion que sea previamente depositada
570                             mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(
↪ orden[k])+1), name='Particle Al-'+str(k)+'-Particle-Impact-b-Cu'+str(j),
↪ interactionProperty='Bounce Contact', master=surfP, slave=insPar[j].surfaces['
↪ SurfacePart2'], sliding=FINITE)
571
572     # # caso que sea cobre
573     if depo[k,0]==2:
574         surfP=insPar[k].surfaces['SurfacePart2']
575         surfS=instSub.surfaces['TopSurface']
576
577     if depo[k,1]==0:# creando condiciones de adherencia
578
579         mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(orden[k])+1),
↪ name='Substrate-Particle-s-Cu'+str(k), interactionProperty='Stick Contact', master
↪ =surfP, slave=instSub.surfaces['TopSurface'], sliding=FINITE)
580         mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Initial', name='Wallcu-1-
↪ Particle-s-Cu'+str(k), interactionProperty='Wall Contact', master=surfP, slave=
↪ instWallcu1.surfaces['SurfaceWallcu'], sliding=FINITE)#, mechanicalConstraint=
↪ PENALTY)
581         mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Initial', name='Wallcu-2-
↪ Particle-s-Cu'+str(k), interactionProperty='Wall Contact', master=surfP, slave=
↪ instWallcu2.surfaces['SurfaceWallcu2'], sliding=FINITE)#, mechanicalConstraint=
↪ PENALTY)
582     for j in range(len(depo)):
583         if depo[j,0]==1:
584             if depo[j,1]==0:
585                 if j<=k:
586                     mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(
↪ orden[k])+1), name='Particle Cu-'+str(k)+'-Particle-Impact-s-Al'+str(j),
↪ interactionProperty='Stick Contact', master=surfP, slave=insPar[j].surfaces['
↪ SurfacePart1'], sliding=FINITE)
587                 elif depo[j,0]==2:
588                     if depo[j,1]==0:
589                         if j<=k:
590                             mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(
↪ orden[k])+1), name='Particle Cu-'+str(k)+'-Particle-Impact-s-Cu'+str(j),
↪ interactionProperty='Stick Contact', master=surfP, slave=insPar[j].surfaces['
↪ SurfacePart2'], sliding=FINITE)
591
592     elif depo[k,1]==1: #condicion de rebote

```

```

593     mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(orden[k])
↪ +1), name='Substrate-Particle Cu-b-'+str(k), interactionProperty='Bounce Contact',
↪ master=surfP, slave=instSub-surfaces['ImpactSurface'], sliding=FINITE)
594     for j in range(len(depo)):
595         if depo[j,0]==1:
596             if depo[j,1]==0:
597                 if j<=k:
598                     mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(
↪ orden[k])+1), name='Particle Cu-'+str(k)+'-Particle-Impact-b-Al'+str(j),
↪ interactionProperty='Bounce Contact', master=surfP, slave=insPar[j].surfaces['
↪ SurfacePart1'], sliding=FINITE)
599
600                 if depo[j,0]==2:
601                     if depo[j,1]==0:
602                         if j<=k:
603                             mod.SurfaceToSurfaceContactExp(createStepName='Impact'+str(int(
↪ orden[k])+1), name='Particle Cu-'+str(k)+'-Particle-Impact-b-Al'+str(j),
↪ interactionProperty='Bounce Contact', master=surfP, slave=insPar[j].surfaces['
↪ SurfacePart2'], sliding=FINITE)
604
605
606 for k in range(len(orden)-1) :
607     if int(depo[k][0])==1:# condicion que sea aluminio
608         mod.VelocityBC(createStepName='vel'+str(int(orden[k])), name='velocidad-de-
↪ particula'+str(k), region=Region(faces=insPar[k].faces),v2=-1*vel1,amplitude=SET)
609     elif int(depo[k][0])==2:# condicion que sea aluminio
610         mod.VelocityBC(createStepName='vel'+str(int(orden[k])), name='velocidad-de-
↪ particula'+str(k), region=Region(faces=insPar[k].faces),v2=-1*vel2,amplitude=SET)
611
612
613
614 for ind in range(nPar):
615     mdb.models[suffix].boundaryConditions['velocidad-de-particula'+str(ind)].deactivate('
↪ Impact'+str(int(orden[k])+1))
616
617 #-----
618 #ALE
619 #definiedno Controles
620 mod.AdaptiveMeshControl(name='AdaptControl', curvatureRefinement=CR,
↪ smoothingAlgorithm=GEOMETRY_ENHANCED, volumetricSmoothingWeight=0.3,
↪ laplacianSmoothingWeight=0.5, equipotentialSmoothingWeight=1)
621 mod.AdaptiveMeshControl(name='AdaptControlsus', curvatureRefinement=1.5,
↪ smoothingAlgorithm=GEOMETRY_ENHANCED, volumetricSmoothingWeight=0.4,
↪ laplacianSmoothingWeight=0.5, equipotentialSmoothingWeight=0.1)
622
623 #Dominios donde aplica ALE
624
625 a = mdb.models[suffix].rootAssembly
626
627 if ALE:
628     for i in range(max(orden)):
629         stepI[i].AdaptiveMeshDomain(region=Region(faces=facesALE[i+2]), controls='

```

```

↪ AdaptControl', initialMeshSweeps=initialmS, meshSweeps=meshsw,frequency=frec)
630
631     a.Set(faces=facesALE[i+2], name='ALE'+str(i))
632     a.Set(faces=particula[i], name='particula'+str(i))
633     print('parti'+str(i))
634
635     # particuas depositadas
636     DepoAl=[]
637     DepoCu=[]
638
639     for i in range(len(DepAl)):
640         if i==0:
641             DepoAl.append(DepAl[i])
642         else:
643             DepoAl.append(DepoAl[i-1]+DepAl[i])
644     for i in range(len(DepCu)):
645         if i==0:
646             DepoCu.append(DepCu[i])
647         else:
648             DepoCu.append(DepoCu[i-1]+DepCu[i])
649
650
651
652     if ndAl>0:
653         a.Set(faces=DepoAl[len(DepoAl)-1], name='partiAl')
654     if ndCu>0:
655         a.Set(faces=DepoCu[len(DepoCu)-1], name='partiCu')
656
657
658     a = mdb.models[suffix].rootAssembly
659     if depo[0,0]==1:#condicion que particula de aluminio
660         f1 = a.instances['Particle-Al-dep-0'].faces
661     if depo[0,0]==2:#condicion que particula de cobre
662         f1 = a.instances['Particle-Cu-dep-0'].faces
663     faces1 = f1.getSequenceFromMask(mask=('[#fff ]', ), )
664     a.Set(faces=faces1, name='Set-1')
665
666     # definiendo datos de salida
667     tot_numInterv = 1*nPar
668     mod.fieldOutputRequests['F-Output-1'].setValues(variables=('S', 'PE', 'PEEQ', 'TEMP',
↪ ER', 'LE', 'U', 'V'))
669
670     mod.fieldOutputRequests['F-Output-1'].setValuesInStep(stepName='Impact1',
↪ numIntervals=tot_numInterv)
671
672     #Job
673     ident = 'nparti'+str(nPar)+'-cu-d-'+str(smCu)+'-Al-d-'+str(smal)
674     jobImpact=mdb.Job(name=ident, model=modname,numDomains=4,
↪ activateLoadBalancing=False, numCpus=4)
675
676     sim(False,2,4,1,0.8)# modelo a generar

```