

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

УДК 539.3:519.6

DOI: <https://doi.org/10.17721/1812-5409.2024/1.10>

Ірина ВАЛЄЄВА, канд. фіз.-мат. наук, ст. наук. співроб.
ORCID ID: 0000-0001-5997-9012
e-mail: valeeva@meta.ua

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ, Україна

Іван ГОРОШКО, канд. фіз.-мат. наук
ORCID ID: 0009-0003-0856-5444
e-mail: igoroshko@ukr.net

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ПРУЖНО-ПЛАСТИЧНОГО ДЕФОРМУВАННЯ ПІД ЧАС СКРЕТЧ-ТЕСТУВАННЯ

Випробування дряпанням (інструментальне скретч-тестування) є важливим методом дослідження в матеріалознавстві. Його застосовують для оцінки механічних властивостей матеріалів і структур, дослідження адгезії покриттів тощо. Роботу присвячено актуальній проблемі реалізації скінченно-елементного моделювання процесу інструментального скретч-тестування засобами пакету ANSYS із застосуванням техніки автоматизованої нелінійної перебудови сітки. Під час скінченно-елементного моделювання процесу скретч-тестування спостерігаємо великі пластичні деформації, які призводять до істотного спотворення (дисторсії) частини скінченних елементів, що викликає аварійне переривання розрахунків. Щоб запобігти цьому, у разі досягнення критичних значень спотворення елементів запускається процедура перебудови сітки із заміною спотворених елементів на нові, з поліпшеними характеристиками. Після цього здійснюється відображення розв'язку на нову сітку для продовження процедури розв'язання задачі. Для моделювання скретч-тестування структури будуватиметься тривимірною скінченно-елементною моделлю. Моделювання скретч-тестування накладає підвищені вимоги до оперативної пам'яті та потребує багато дискового простору для зберігання результатів і допоміжних файлів. З огляду на це для скорочення часу розрахунків і зменшення необхідного місця на диску розмірність тривимірної скінченно-елементної моделі зменшується у процесі врахування симетрії задачі і використання елементів більшого розміру у разі віддалення від контактної зони. Результатом чисельного моделювання процесу скретч-тестування є поле переміщень, напружень і деформацій як на поверхні, так і всередині досліджуваних зразків. Зіставлення результатів скінченно-елементного моделювання процесу скретч-тестування з експериментальними даними може бути використано в подальших дослідженнях для визначення механічних властивостей матеріалів зразка.

Ключові слова: скретч-тестування, скінченно-елементне моделювання, плівка на підкладці, ANSYS, NLAD.

Вступ

Інструментальне скретч-тестування (*scratch test*), або випробування дряпанням, у матеріалознавстві є важливим методом, що надає дослідникам можливість оцінювати механічні властивості різних матеріалів і структур за допомогою скретч-тестерів, які виконують контрольоване дряпання або розрізання поверхні зразків (Ahmeda et al., 2006; Cayer-Barriozza et al., 2006; Li, & Beres, 2006; Panich, & Sun, 2006; Sinha, Reddy, & Gupta, 2006). Скретч-тестування також дає змогу оцінювати адгезію, когезію та зношування матеріалу зразка. Використовуючи цей метод, можуть бути оцінені нові матеріали зі складною структурою. За допомогою цього випробування можна порівняти адгезію різних покриттів і плівок, що дає змогу зрозуміти, який метод нанесення та/або обробки покриттів поліпшує їхню адгезію до підкладки. Огляд потенційних можливостей кількісного виміру адгезії покриттів подано у праці (Bull, & Berasetegui, 2006).

Моделювання та симуляція скретч-тесту допомагає зрозуміти, як саме проходить процес деформування зразка під час скретч-тестування. Найвагомішим параметром є розподіл напружень у матеріалі зразка, що впливає на поведінку матеріалу, його деформування, виникнення пошкоджень і руйнувань матеріалу зразка. Моделювання процесу скретч-тестування зразків, що мають покриття або плівку на підкладці, дає змогу зрозуміти, який саме тип навантаження виникає між підкладкою та покриттям, який тип навантаження впливає на відшарування покриття, де виникають максимальні напруження. З допомогою моделювання та симуляції можна дослідити окремо вплив кожного параметра на результати скретч-тесту.

Аналіз останніх досліджень і публікацій показує, що проблема є актуальною під час дослідження нових матеріалів, адгезії плівок і покриттів до підкладок. У разі використання моделювання можливе визначення механічних властивостей матеріалів (Ahmeda et al., 2006; Panich, & Sun, 2006; Sinha, Reddy, & Gupta, 2006; Tanaka, Gunji, & Katayama, 2007).

Метою та завданням пропонованого дослідження є моделювання скретч-тесту й опис сучасних можливостей скінченно-елементного пакету ANSYS. Чисельне дослідження процесу деформування під час скретч-тестування стикається з проблемами, що спричинені великою розмірністю завдання та спотворенням скінченних елементів у разі деформування. Слід зауважити: якщо за малих і помірних деформацій розв'язання цієї задачі не викликає практично жодних складнощів, то у випадку великих деформацій спостерігаємо істотне спотворення (дисторсію) частини скінченних елементів, що призводить до аварійної зупинки процесу розв'язання. Для подолання цих обчислювальних ускладнень дослідники використовують спеціальні програмні продукти (Ogorodnikov, 2016; Feng, & Liu, 2019). У разі спотворення скінченно-елементної сітки здійснюється перебудова з наступним відображенням розв'язку на нову сітку. Наприклад, в останніх версіях скінченно-елементного пакета ANSYS було додано можливість автоматизованої нелінійної перебудови сітки (NLAD – NonLinear Adaptivity), (ANSYS Academic 2021 R1). Для застосування NLAD визначають область, до якої буде застосовано процедуру перебудови та критерії (величини відношення сторін елементів, величини кутів тощо), за досягнення яких скінченно-елементна сітка у визначеній області у разі нелінійного розв'язання задачі потребуватиме перебудови. У налаштуваннях процедури перебудови сітки вказують такі характеристики сітки, як зміна розміру елементів, градієнт їхнього розміру тощо. Починаючи з ANSYS 19.0, процедура ремешингу NLAD удосконалена і може застосовуватись до квадратичних 10-вузлових тетрадральних елементів, що дає змогу підвищити точність обчислень порівняно із застосуванням лінійних елементів.

© Валєєва Ірина, Горошко Іван, 2024

1. Постановка задачі та побудова скінченно-елементної моделі. Розглянемо задачу дослідження процесу пружно-пластичного деформування у процесі скретч-тестування зразка, що складається з плівки на підкладці, під дією алмазного конічного індентора Роквелла з кутом 120° і радіусом заокруглення його вершини 10 мкм. Випробування на подряпини проводили за лінійно зростаючого зусилля 13 мН/с, прикладеного до індентора вертикально. Зусилля зростало, поки навантаження не досягало 460 мН. Одночасно індентор Роквелла переміщували зі швидкістю 10 мкм/с у горизонтальному напрямку. У процесі моделювання на поверхні контакту між індентором і зразком урахували кулонівське тертя. Коефіцієнт тертя дорівнював 0,2.

Необхідним пунктом під час моделювання процесу деформування є визначення моделей матеріалів, що утворюють зразок. Для опису поведінки матеріалів у скінченно-елементному пакеті ANSYS убудовано різні моделі матеріалів, а також є можливість для користувачів побудувати власну модель матеріалу. Вибір моделей у пакеті ANSYS охоплює лінійні моделі матеріалів: ізотропні й анізотропні, а також нелінійні моделі. У пакеті є спеціалізовані моделі, які краще описують поведінку пластичних матеріалів, матеріалів із поротами, пористих матеріалів, пісків, ґрунтів тощо.

Для опису поведінки матеріалів плівки і підкладки використовуємо модель ізотропного матеріалу зі зміцненням. Пружну поведінку матеріалу визначаємо модулем пружності та коефіцієнтом Пуассона. Для опису пластичної поведінки матеріалів плівки та підкладки було обрано модель ізотропного степеневого зміцнення (ANSYS). Ця модель потребує визначення двох параметрів: межі плинності та показника степеневого закону зміцнення.

Скінченно-елементну модель зразка будують у вигляді паралелепіпеда. Під час моделювання вважаємо, що плівка і підкладка мають ідеальний зв'язок, залишкові напруження в матеріалі плівки відсутні.

Для побудови скінченно-елементної сітки можна застосовувати вбудовану в пакет стандартну процедуру, скінченно-елементна сітка може бути побудована користувачами або можуть бути використані сторонні програмні продукти. Під час побудови сітки враховується, що розмір елементів у зоні контакту має бути достатньо малим, а розміри самої моделі повинні бути вибрані так, щоб подальше збільшення товщини і ширини підкладки не викликало помітного впливу на розподіл напружень і деформацій (рис. 1). Додаткове спрощення полягає в заміні пружного алмазного індентора абсолютно жорстким.

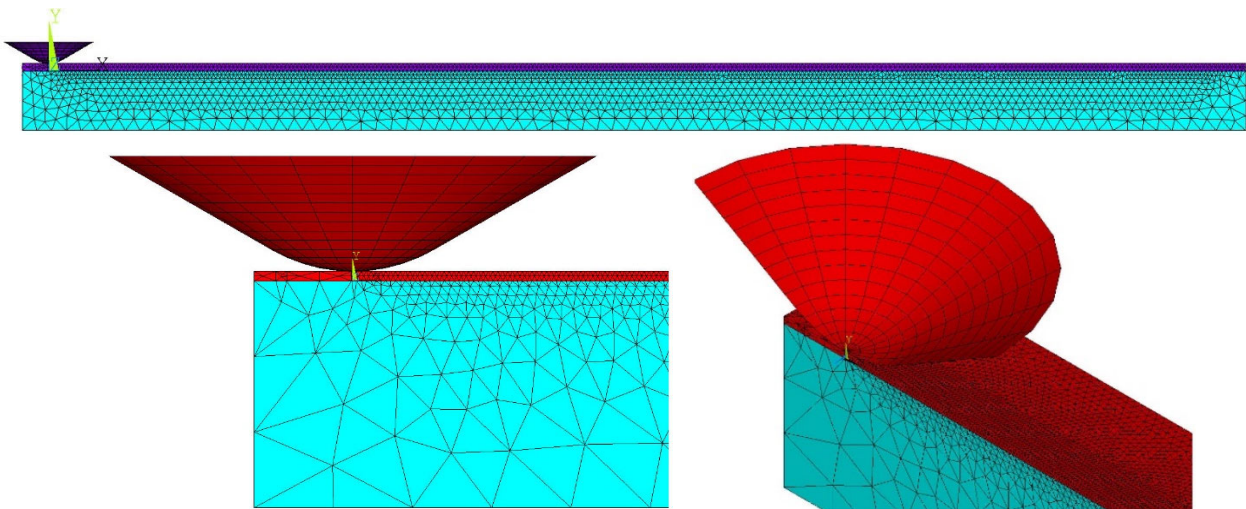


Рис. 1. Приклади скінченно-елементних сіток для моделювання скретч-тесту

Оскільки задача є симетричною, то для зменшення її розмірності і, відповідно, підвищення ефективності обчислень достатньо розглянути лише половину зразка $z \leq 0$ (див. рис. 1). Симетричні граничні умови накладаються на вузли у площині симетрії. Граничні умови, що обмежують переміщення, накладаються на вузли скінченно-елементної сітки, що розміщуються на нижній, задній і двох бокових гранях зразка (паралелепіпеда). Задача моделюється як квазістатична. До пілотного вузла індентора Роквелла прикладаються умови на переміщення та зусилля.

2. Приклад і результати моделювання. Розглянемо моделювання процесу скретч-тестування зразка, що складається із хромової плівки товщиною 2,7 мікрона на підкладці зі сталі. Як критерій плинності обрано критерій фон Мізеса, який вважають найбільш реалістичним для опису пластичної поведінки металевих матеріалів.

Скінченно-елементну модель системи плівка-підкладка побудовано із застосуванням квадратичних тетраедральних елементів SOLID187. Скінченно-елементна сітка для плівки близько зони контакту побудована у вигляді двох шарів тетраедральних елементів, тоді як поза цією зоною для зменшення витрат пам'яті і, відповідно, часу розрахунку величина елементів сітки як для плівки, так і підкладки поступово збільшується (рис. 1). Скінченно-елементна модель містить близько 250 000 елементів. Для моделювання поведінки матеріалів плівки і підкладки обрано модель ізотропного матеріалу зі степеневим законом зміцнення. Пружна поведінка матеріалів відповідно до закону Гука описується двома параметрами: модулем пружності та коефіцієнтом Пуассона. Пластична поведінка матеріалів описується степеневим законом, який теж потребує визначення двох параметрів: межі плинності та показника степеневого закону зміцнення. Дані, що були використані для моделювання та симуляції, подані в табл. 1. Їх величини відповідають наведеному у базах даних для цих матеріалів.

До пілотного вузла індентора Роквелла прикладається вертикальне зусилля, що зростає зі швидкістю 13 мН/с до 460 мН, і переміщення в горизонтальному напрямку зі швидкістю 10 мкм/с.

Під час симуляції з урахуванням великих деформацій і внаслідок нелінійності задачі скінченні елементи поступово спотворюються. Для перебудови скінченно-елементної сітки використовується процедура NLADAPTIVE, що передбачає створення нових вузлів і нових елементів поліпшеної форми замість спотворених елементів.

Таблиця 1

Механічні властивості матеріалів

Назва	Модуль пружності [GPa]	Коефіцієнт Пуассона	Межа плинності [MPa]	Показник степеневого закону зміцнення
Хром (плівка)	348	0,2	430	0,2
Сталь (підкладка)	210	0,29	430	0,1

Унаслідок чисельного моделювання скретч-тесту ми можемо отримати на кожному часовому кроці поле напружень, поле переміщень і деформацій, зону контакту, контактний тиск. На рис. 2 показано поверхню зразка із заглибленням і напливами за максимального переміщення і, відповідно, максимального навантаження на індентор 460 мН. На рис. 3 бачимо розподіл напружень фон Мізеса на верхній поверхні плівки і площині симетрії, на рис. 4 і 5 – розподіл нормальних напружень σ_y і дотичних напружень τ_{yz} на поверхні підкладки відповідно (напруження подані в мегапаскалях).

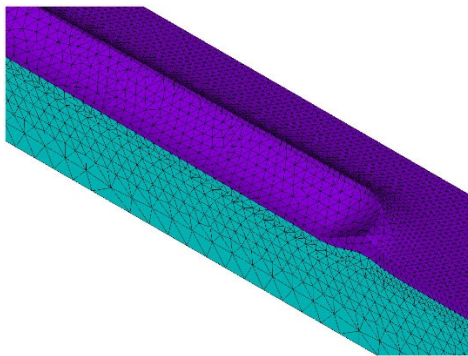


Рис. 2. Деформована скінченно-елементна модель системи плівка – підкладка із заглибленням та напливами за максимального навантаження на індентор

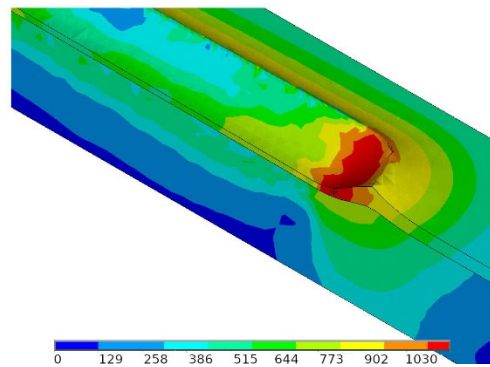


Рис. 3. Розподіл напружень фон Мізеса на верхній поверхні плівки і площині симетрії за максимального навантаження на індентор (МПа)

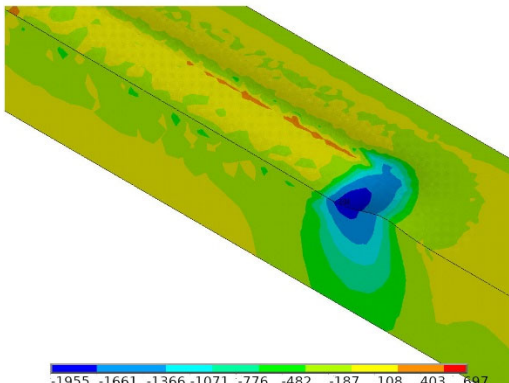


Рис. 4. Розподіл нормальних напружень σ_y на поверхні підкладки (МПа)

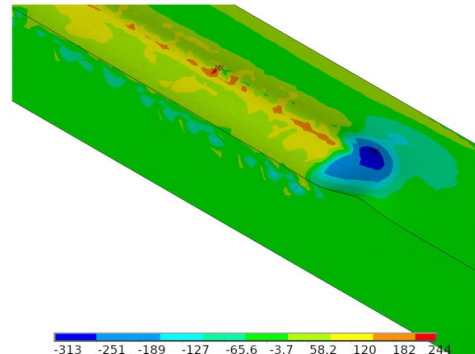


Рис. 5. Розподіл дотичних напружень на поверхні підкладки (МПа) τ_{yz}

На рис. 6 представлено отриману внаслідок чисельного моделювання залежність максимальної глибини подряпини, що залишив індентор на поверхні зразка, від її довжини.

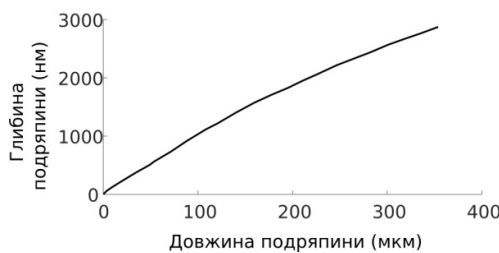


Рис. 6. Залежність глибини подряпини від її довжини, отримана внаслідок скінченно-елементного моделювання скретч-тесту

Для дослідження адекватності застосованого в роботі підходу до моделювання скретч-тесту на основі використання автоматичної нелінійної адаптивної перебудови сітки ANSYS було здійснено тестовий розрахунок за даними, наведеними в роботі (Li, & Beres, 2006). У пропонованій статті було розглянуто моделювання скретч-тесту 5 мкм плівки TiN на підкладці з титанового сплаву з використанням скінченно-елементних програм MSC.Patran, MSC.Marc та ABAQUS. Під час порівняння отриманих результатів, таких як довжина та глибина подряпини, розбіжності не перевищили 5 %.

Адекватність скінченно-елементної моделі скретч-тесту основана на використанні моделей матеріалів, які зазвичай описують деформаційну поведінку металів, з параметрами, наведеними в базах даних для цих матеріалів. Розміри скінченно-елементної моделі обрано так, щоб подальше збільшення її розмірів практично не впливало на розподіл напружень і деформацій. Збіжність результатів моделювання була підтверджена шляхом здійснення обчислень на подрібнених сітках.

Дискусія і висновки

Чисельне моделювання скретч-тесту сумісно з експериментальними даними можна використовувати для визначення механічних властивостей матеріалів зразка. Для цього можуть бути застосовані підходи до розв'язання обернених задач як на основі традиційних методів мінімізації, так і сучасних засобів штучного інтелекту. Для моделювання процесу скретч-тестування побудовано тривимірну скінченно-елементну модель. Моделювання скретч-тесту накладає підвищені вимоги до оперативної пам'яті та потребує багато дискового місця для зберігання результатів моделювання і допоміжних файлів, що пов'язано з великою розмірністю задачі. Для скорочення часу розрахунків та зменшення необхідного дискового простору доцільно зменшувати розмірність скінченно-елементної моделі, використовуючи в разі віддалення від зони контакту елементи більшого розміру. Здійснено оптимізацію скінченно-елементної сітки, що враховує необхідність дрібної сітки в зоні контакту і поблизу та зменшення кількості вузлів у разі віддалення від неї.

Результати скінченно-елементного моделювання показують значне переміщення матеріалу, що виникає у структурі під час випробувань на подряпини. Індентор, що рухається, викликає пластичну течію в матеріалі плівки та в матеріалі підкладки. Матеріал плівки тече навколо індентора, що рухається. У підсумку, під дією індентора на поверхні зразка утворюються канавки та гребені. На поверхні підкладки також з'являються канавки та гребені, але вони нижчі. Їхній профіль залежить від пружно-пластичних властивостей матеріалів. Деформація системи плівка – підкладка за індентором, що рухається, викликає залишкові напруження. За результатами симуляції зрозуміло, що зона стискаючих напружень утворюється перед та під індентором, який рухається, під час випробувань на дряпання. Максимальне еквівалентне напруження (напруження фон Мізеса) виникає перед індентором. Чисельне моделювання показує детальне поле напружень і деформацій, а також зони стиснення та розтягування, які були створені рухомим індентором під час скретч-тесту. Чисельне моделювання дає змогу окремо дослідити вплив кожного параметра на результати скретч-тесту.

Чисельне моделювання скретч-тесту сумісно з експериментальними даними можна використовувати для визначення механічних властивостей матеріалів зразка.

Внесок авторів: Ірина Валєєва – концептуалізація, методологія, проведення розрахунків та аналіз результатів, аналіз джерел; Іван Горошко – концептуалізація, аналіз результатів моделювання.

Список використаних джерел

- Ahmeda, A., Bahadur, S., Cookb, B. A., & Peters, J. (2006). Mechanical properties and scratch test studies of new ultra-hard AlMgB14 modified by TiB2. *Tribology International*, 39, 129–137. <https://www.elsevier.com/locate/triboint>
- ANSYS Academic 2021 R1 [ANSYS, Inc. Products Release 2021 R1. Academic research Mechanical and CFD]. <https://www.ansys.com/academic>
- Bull, S. J., & Berasetegui E. G. (2006). An overview of the potential of quantitative coating adhesion measurement by scratch. *Tribology International*, 39(2), 99–114.
- Cayer-Barrioza, J., Mazuyera, D., Toncka, A. Kapsaa, Ph., & Chateaminois, A. (2006). Nanoscratch and friction: An innovative approach to understand the tribological behaviour of poly(amide) fibres. *Tribology International*, 39, 62–69. <https://www.elsevier.com/locate/triboint>
- Feng, B., & Liu, Z. (2019). Finite element modeling and simulations on indentation and scratch tests on thin films: effects of prestress. *MRS Communications*, 9, 756–763. <https://doi.org/10.1557/mrc.2019.58>
- Li, J., & Beres, W. (2006). Three-dimensional finite element modelling of the scratch test for a TiN coated titanium alloy substrate. *Wear*, 260, 1232–1242. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2005.08.008>
- Ogorodnikov, A. I. (2016). Finite-Element Simulation of Scratching on a Coated Brittle Plate. *AIP Conference Proceedings*, 1785, 030020. <https://doi.org/10.1063/1.4967041>
- Panich, N., & Sun, Y. (2006). Mechanical characterization of nanostructured TiB2 coatings using microscratch techniques. *Tribology International*, 39, 138–145. <https://www.elsevier.com/locate/triboint>
- Sinha, S. K., Reddy, S. U., & Gupta, M. (2006). Scratch hardness and mechanical property correlation for Mg/SiC and Mg/SiC/Ti metal-matrix composites. *Tribology International*, 39, 184–189. <https://www.elsevier.com/locate/triboint>
- Tanaka, K., Gunji, K., & Katayama, T. (2007). Nanoscratch evaluation of adhesive strength of Cu/PI films. *WIT Transactions on Engineering Sciences*, 55. www.witpress.com, ISSN 1743-3533 (on-line). <https://doi.org/10.2495/SECM070291>

References

- Ahmeda, A., Bahadur, S., Cookb, B. A., & Peters, J. (2006). Mechanical properties and scratch test studies of new ultra-hard AlMgB14 modified by TiB2. *Tribology International*, 39, 129–137. <https://www.elsevier.com/locate/triboint>
- ANSYS Academic 2021 R1 [ANSYS, Inc. Products Release 2021 R1. Academic research Mechanical and CFD]. <https://www.ansys.com/academic>
- Bull, S. J., & Berasetegui E. G. (2006). An overview of the potential of quantitative coating adhesion measurement by scratch. *Tribology International*, 39(2), 99–114.
- Cayer-Barrioza, J., Mazuyera, D., Toncka, A. Kapsaa, Ph., & Chateaminois, A. (2006). Nanoscratch and friction: An innovative approach to understand the tribological behaviour of poly(amide) fibres. *Tribology International*, 39, 62–69. <https://www.elsevier.com/locate/triboint>
- Feng, B., & Liu, Z. (2019). Finite element modeling and simulations on indentation and scratch tests on thin films: effects of prestress. *MRS Communications*, 9, 756–763. <https://doi.org/10.1557/mrc.2019.58>
- Li, J., & Beres, W. (2006). Three-dimensional finite element modelling of the scratch test for a TiN coated titanium alloy substrate. *Wear*, 260, 1232–1242. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2005.08.008>
- Ogorodnikov, A. I. (2016). Finite-Element Simulation of Scratching on a Coated Brittle Plate. *AIP Conference Proceedings*, 1785, 030020. <https://doi.org/10.1063/1.4967041>
- Panich, N., & Sun, Y. (2006). Mechanical characterization of nanostructured TiB2 coatings using microscratch techniques. *Tribology International*, 39, 138–145. <https://www.elsevier.com/locate/triboint>
- Sinha, S. K., Reddy, S. U., & Gupta, M. (2006). Scratch hardness and mechanical property correlation for Mg/SiC and Mg/SiC/Ti metal-matrix composites. *Tribology International*, 39, 184–189. <https://www.elsevier.com/locate/triboint>
- Tanaka, K., Gunji, K., & Katayama, T. (2007). Nanoscratch evaluation of adhesive strength of Cu/PI films. *WIT Transactions on Engineering Sciences*, 55. www.witpress.com, ISSN 1743-3533 (on-line). <https://doi.org/10.2495/SECM070291>

Отримано редакцією журналу / Received: 25.01.24

Прорецензовано / Revised: 16.04.24

Схвалено до друку / Accepted: 23.05.24

Irina VALEEVA, PhD (Phys. & Math.), Senior Researcher
ORCID ID: 0000-0001-5997-9012
e-mail: valeeva@meta.ua
Frantsevitch Institute for Problems of Materials Science NASU, Kyiv, Ukraine

Ivan GOROSHKO, PhD (Phys. & Math.)
ORCID ID: 0009-0003-0856-5444
e-mail: igoroshko@ukr.net
Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

SIMULATION OF ELASTO-PLASTIC DEFORMATION AT SCRATCH TEST

Scratch test is an important investigation method in materials science. It is used to evaluate the mechanical properties of materials and structures, adhesion of coatings, etc. The article is devoted to the actual problem of implementing finite element simulation of scratch tests using ANSYS software with automated nonlinear remeshing. Large plastic deformation occurs at scratch test simulation, which leads to significant distortion of some finite elements and, consequently, to interruption of calculations. When critical values of element distortion are reached, remeshing procedure is launched. That procedure replaces the distorted elements with new ones with improved characteristics. The solution is mapped to a new mesh. A three-dimensional finite element model is built to simulate scratch test of structure. Scratch test simulation requires a large amount of RAM and a lot of disk space to store results and auxiliary files. Therefore, to reduce the calculation time and the required disk space, the dimension of three-dimensional finite element model is reduced by taking into account the symmetry of the problem and using larger elements further from the contact zone. The fields of displacement, stress, and strain on the surface and inside the tested samples were obtained as a result of scratch test simulation. Comparison of the results of scratch test simulation with experimental data can be used in further study to determine the mechanical properties of materials and structures.

K e y w o r d s : *scratch test, finite element simulation, film on substrate, ANSYS, NLAD.*

Автори заявляють про відсутність конфлікту інтересів. Спонсори не брали участі в розробленні дослідження; у зборі, аналізі чи інтерпретації даних; у написанні рукопису; в рішенні про публікацію результатів.

The authors declare no conflicts of interest. The funders had no role in the design of the study; in the collection, analyses or interpretation of data; in the writing of the manuscript; in the decision to publish the results.