

CALIBRAÇÃO E MODELAGEM EM ELEMENTOS FINITOS DA COMPACTAÇÃO DE PZT USANDO O MODELO DRUCKER-PRAGER/CAP

Calibration and modeling in finite elements of PZT compaction using the Drucker-Prager/cap model

Mateus M. Morais¹, Caiuã C. Melo², Rodrigo B. Canto³, Carlos A. Fortulan⁴

Resumo: O projeto de moldes de peças cerâmicas com geometrias complexas apresenta desafios quanto à previsibilidade da dimensão e da densidade da peça compactada. Tal dificuldade pode ser contornada pelo uso de simulação computacional por meio do método dos elementos finitos. O modelo constitutivo Drucker-Prager/cap, usado em simulações de materiais em pó, utiliza curva de encruamento que relaciona a compressão hidrostática e a respectiva deformação plástica volumétrica. Para calibrar essa curva, discos de dois lotes de pós de cerâmica PZT foram pré-conformados uniaxialmente e, em seguida, foram prensados isostaticamente em sete patamares de pressão variando de 20 a 200 MPa. Foi realizada a validação do modelo por meio de comparação entre simulação de elementos finitos no software ABAQUS e medidas experimentais, resultando em diferenças máximas de 3,4% na dimensão e 0,2% na densidade das peças compactadas. Em função da boa aproximação dos resultados, o modelo calibrado poderá ser aplicado em geometrias complexas.

Palavras-chave: Elementos finitos. Titanato zirconato de chumbo. Prensagem de pó.

Abstract: The design of molds for ceramic parts with complex geometries presents challenges in predicting the dimensions and density of the compacted part. Such difficulty can be overcome by using computer simulation with the finite element method. The Drucker-Prager/cap constitutive model, used in simulations of powder materials, has a hardening curve that relates the hydrostatic pressure and the respective volumetric plastic strain. In order to calibrate the hardening curve, disks of two batches of ceramic PZT powder were uniaxially pressed and then isostatically pressed at seven pressure stages varying from 20 to 200 MPa. Model validation was performed by comparing finite element simulation in ABAQUS software and experimental measurements, resulting in maximum differences of 3.4% in dimension and 0.2% in density of compacted parts. Due to the great similarity of the results, the calibrated model may be applied to more complex geometries.

Keywords: Finite elements. Lead zirconate titanate. Powder pressing.

1. Mestre em Engenharia Mecânica pela Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo. Doutorando em Engenharia Mecânica pela Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo - São Carlos, SP - Brasil. E-mail: mateus.morais@usp.br

2. Mestre em Engenharia de Materiais pela Universidade Federal de São Carlos. Doutorando em Engenharia de Materiais pela Universidade Federal de São Carlos - São Carlos, SP - Brasil. E-mail: caiua.caldeira@gmail.com

3. Doutor em Engenharia Mecânica pela Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo e École Normale Supérieure de Paris. Professor Adjunto do Departamento de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de São Carlos - São Carlos, SP - Brasil. E-mail: rbcanto@ufscar.br

4. Doutor em Engenharia Mecânica pela Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo. Professor Associado do Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo - São Carlos, SP - Brasil. E-mail: fortulan@usp.br

1. INTRODUÇÃO

O projeto de moldes para prensagem de peças cerâmicas com geometrias complexas não é simples, especialmente em aplicações que exigem geometria precisa e densidade homogênea, como hidrofones e outros tipos de sensores e atuadores piezoelétricos. O projeto de moldes por tentativa e erro pode ser muito oneroso e ineficiente. Nesse contexto, a simulação numérica utilizando o método dos elementos finitos (MEF) é uma ferramenta útil, pois permite melhor previsão da dimensão da peça após a prensagem, assim como análise da distribuição de densidade na peça, evidenciando regiões críticas mais suscetíveis a trincas ou geradoras de deformações durante a sinterização, o que possibilita obter uma peça de mais qualidade com menos iterações (MORAIS et al., 2016; CUNNINGHAM; LAMARCHE; ZAVALIANGOS, 2017).

Para realizar a simulação, é necessário identificar um modelo constitutivo para cada material envolvido na prensagem e calibrar os parâmetros desses modelos experimentalmente (MORAIS et al., 2016). Para a simulação de pós-cerâmicos, como o PZT, o modelo Drucker-Prager/cap é adequado, uma vez que é utilizado em simulações de compactação de materiais granulados, como solos, pós de comprimidos farmacêuticos e pós metálicos (HAN et al., 2008; DASSAULT SYSTÈMES, 2014; ZHOU, 2017). O modelo é definido por três superfícies: A superfície de Drucker-Prager, que define o escoamento em função do cisalhamento, a superfície *cap* que modela um mecanismo de encruamento inelástico, representando a natureza plástica da compactação, e uma superfície de transição que une suavemente os dois segmentos anteriores para facilitar a implementação numérica. As equações que definem essas superfícies são funções da tensão equivalente de Von Mises q e da tensão normal média p (DASSAULT SYSTÈMES, 2014). Na Figura 1, é ilustrado o modelo Drucker-Prager/cap no diagrama q vs. p .

Além das constantes que determinam cada uma das três superfícies, é preciso obter experimentalmente a curva de encruamento da superfície *cap* que relaciona a tensão de compressão hidrostática de escoamento p_b e à respectiva deformação plástica volumétrica ε_{vol}^{pl} (HAN et al., 2008; MELO et al., 2018).

O objetivo deste trabalho é descrever a calibração experimental da curva de encruamento do modelo de *Drucker-Prager/cap* de dois lotes de PZT e validar esse modelo por meio da simulação de elementos finitos no software ABAQUS.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

Para os ensaios de compactação, foram preparados dois lotes de PZT (do fabricante *Sparkler Piezoceramic Powder*, grade: SP-4, sem ligante) adicionando-se 0,8% em peso de Polivinil butiral (PVB) como ligante. Ambos lotes (denominados A e B) foram moídos por 24 horas em um moinho de bolas. O lote B foi posteriormente moído por 96 horas em um moinho vibratório. O lote A é composto de 50% em peso de partículas menores que 3,1 μm , enquanto, para o lote B, esse valor é de 0,85 μm .

O ensaio de prensagem isostática foi utilizado para calibrar o encruamento (*hardening*) do modelo constitutivo do PZT. Cada lote de pó foi pré-conformado uniaxialmente em um molde de 41 mm de diâmetro com tensão axial de 10 MPa e, em seguida, foi prensado isostaticamente nas seguintes pressões: 20, 40, 60, 80, 120, 160 e 200 MPa. Após cada estágio de prensagem, as dimensões das pastilhas foram medidas, e a densidade foi calculada utilizando-se a massa inicial de cada pastilha. A relação entre a pressão e a deformação plástica volumétrica macroscópica foi ajustada por uma relação exponencial. Os demais parâmetros necessários à simulação foram adotados com base em literatura sobre alumina (MELO et al., 2018). Apesar de terem sido obtidos de outro material cerâmico, esses dados têm menor influência no resultado da simulação da prensagem isostática, em relação à curva de encruamento.

Para validação, foi realizada a simulação do ensaio de compactação dos lotes A e B no *solver standard* do *software* ABAQUS. Em virtude da simetria axial do problema, a modelagem é representada em duas dimensões por meio da superfície de revolução

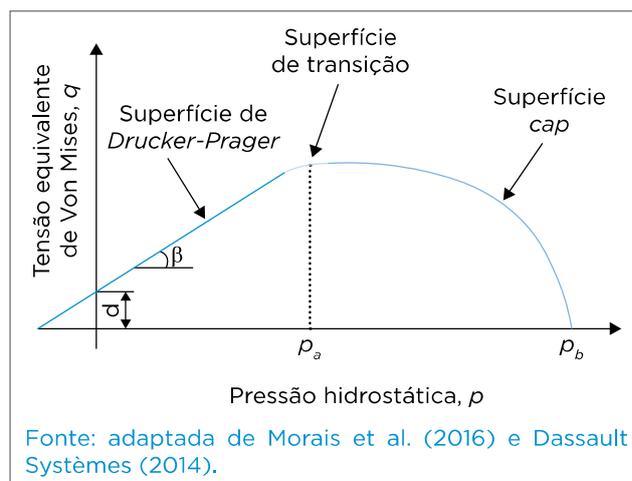


Figura 1. Modelo Drucker-Prager/cap.

da seção transversal da pastilha. A malha foi constituída de elementos contínuos quadrilaterais axissimétricos de primeira ordem com integração reduzida (CAX4R). As paredes do molde e as superfícies dos pistões foram modeladas como superfícies rígidas, com modelo de contato com coeficiente de atrito de 0,3. As etapas da simulação estão esquematizadas na Figura 2.

3. RESULTADOS E CONCLUSÕES

Na Figura 3 é apresentado o perfil de densidade da seção axissimétrica da pastilha do lote B obtido na simulação. Na Tabela 1 é apresentada a comparação entre as dimensões e as densidades medidas no ensaio de compactação

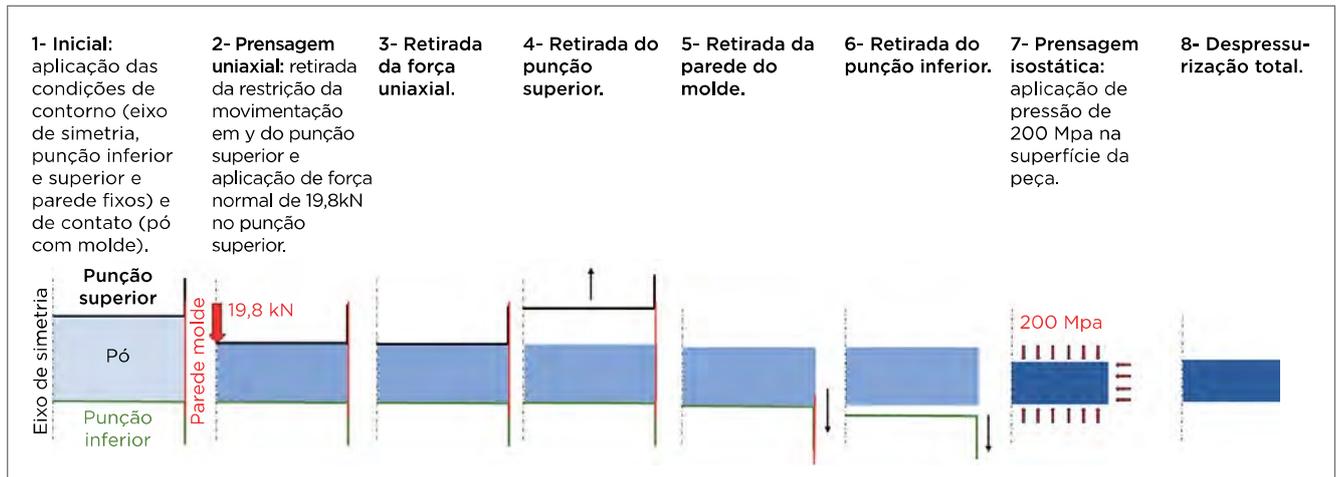


Figura 2. Etapas da simulação de elementos finitos.

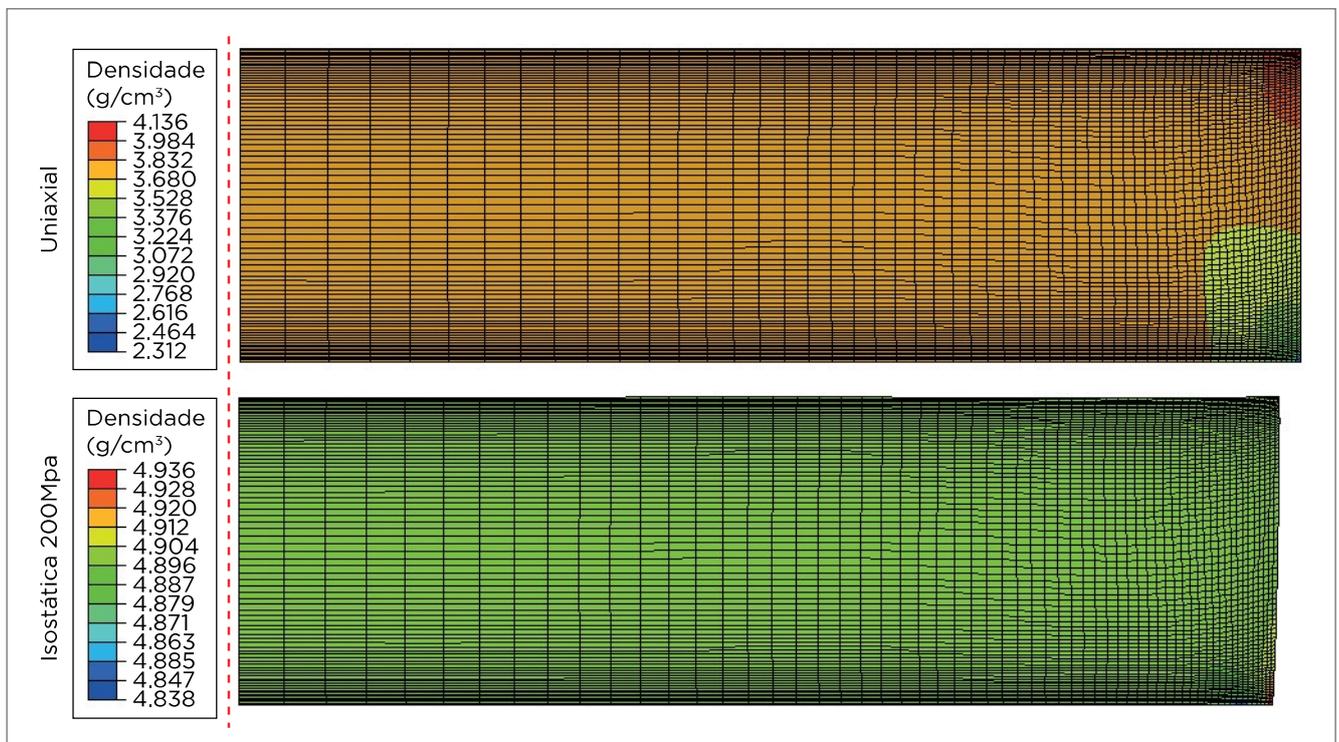


Figura 3. Perfis de densidade da seção transversal axissimétrica do modelo da pastilha do lote B simulada por elementos finitos da etapa de prensagem uniaxial e isostática. Eixo de simetria axial em vermelho.

Tabela 1. Comparação entre dados da simulação computacional e dos ensaios experimentais nos lotes A e B, após a prensagem isostática final (200 MPa).

	Lote A			Lote B		
	Experimental	Simulação computacional	Diferença (%)	Experimental	Simulação computacional	Diferença (%)
Altura (mm)	6,3	6,4	1,6	5,8	5,6	-3,4
Diâmetro (mm)	38,4	38,5	0,3	36,6	37,3	-0,8
Densidade (g/cm ³)	5,20	5,19	-0,2	4,91	4,92	0,2

e os valores obtidos pela simulação. A granulometria dos pós influenciou na compactação das peças, o que é evidenciado pelas densidades distintas entre os lotes. Essa metodologia de calibração apresentou ótima aproximação entre os resultados experimentais e numéricos nessa geometria simples. Em virtude desse resultado favorável, o modelo calibrado pode ser utilizado de forma preliminar em trabalhos futuros para simular geometrias mais complexas, como hidrofones ou outros tipos de sensores e atuadores de PZT. Os resultados poderão ser aprimorados por meio

de outros ensaios mecânicos para calibrar os demais parâmetros do modelo constitutivo.

Agradecemos às agências financiadoras Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) e Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) (processos nº 2018/07928-2 e 2018/02801-4) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) (processo nº 131685/2018-0). As opiniões, hipóteses, conclusões ou recomendações expressas neste material são de responsabilidade dos autores e não necessariamente refletem a visão dessas agências.

REFERÊNCIAS

CUNNINGHAM, J.; LAMARCHE, K.; ZAVALIANGOS, A. Modeling of powder compaction with the drucker-prager cap model. *In*: PANDEY, P.; BHARADWAJ, R. (orgs.). *Predictive Modeling of Pharmaceutical Unit Operations*. Cambridge Woodhead Publishing, 2017. p. 205-227.

DASSAULT SYSTÈMES. Abaqus 6.14 Online Documentation - Abaqus Analysis User's Guide. Dassault Systèmes, 2014.

HAN, L.H.; ELLIOTT, J.A.; BENTHAM, A.C.; MILLS, A.; AMIDON, G.E.; HANCOCK, B.C. A Modified Drucker-Prager Cap Model for Die Compaction Simulation of Pharmaceutical Powders. *International Journal of Solids and Structures*, v. 45, n. 10, p. 3088-3106, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2008.01.024>

MELO, C. C.; MORAES, A.L.I.; ROCCO, F.O.; MONTILHA, F.S.; CANTO, R.B. A Validation Procedure for Numerical Models of Ceramic Powder Pressing. *Journal of the European Ceramic Society*, v. 38, n. 8, p. 2928-2936, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2018.01.009>

MORAIS, M.M.; FORTULAN, C.A.; PURQUERIO, B.M.; PEDROSO, M.P.G. Modelagem da densificação de esferas cerâmicas verdes prensadas isostaticamente. *In*: CONGRESSO BRASILEIRO DE CERÂMICA, 60., 2016, Águas de Lindoia. Anais [...]. Águas de Lindoia, 2016.

ZHOU, M.; HUANG, S.; HU, J.; LEI, Y.; XIAO, Y.; LI, B.; YAN, S.; ZOU, F. A Density-Dependent Modified Drucker-Prager Cap Model for Die Compaction of Ag57.6-Cu22.4-Sn10-In10 Mixed Metal Powders. *Powder Technology*, v. 305, p. 183-196, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.09.061>