

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

粗糙表面之吸引彈塑性分析

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC93-2212-E-034-003-

執行期間：93年08月01日至94年07月31日

執行單位：中國文化大學機械工程學系

計畫主持人：吳俊仲

計畫參與人員：蘇幸吟

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 94年9月21日

粗糙表面之吸引彈塑力分析

計畫類別： 個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：NSC - 93 - 2212 - E34 - 003 -

執行期間：93年8月1日至 94年7月31日

計畫主持人：吳俊仲

共同主持人：

計畫參與人員： 蘇幸吟

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告 完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：

赴國外出差或研習心得報告一份

赴大陸地區出差或研習心得報告一份

出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份

國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、
列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年 二年後可公開查詢

執行單位：中國文化大學機械系

中 華 民 國 94 年 9 月 21 日

粗糙表面之吸引彈塑力分析

Analysis on the Elastic-Plastic Adhesive Contact between Rough

Surfaces

計劃編號：NSC 92-2212-E034-002

執行期限：93 年 8 月 1 日至 94 年 7 月 31 日

主持人：吳俊仲 中國文化大學 機械工程學系

中文摘要

本研究使用 FFT、inexact Newton preconditional Bi-CGSTAB method 與 path following method 等方法，在直角座標系上求解粗糙表面的彈塑性吸引接觸力。結果發現，越平滑的表面，引力、斥力越大，接觸面積也越大，但是塑性變形的面積較小。彈塑性變形在 Tabor parameter 大時，也有 bifurcation 的現象。

關鍵詞：粗糙表面、吸引接觸、彈塑性變形

Abstract

A numerical method for the adhesive contact between rough surfaces in rectangular coordinate is proposed. FFT, inexact Newton preconditional Bi-CGSTAB method and path following method are employed to find the elastic-plastic adhesive contact for rough surfaces in rectangular coordinate. It is found that adhesive and repulsive forces and contact area are larger for smoother surface. But the area for plastic contact is small for smooth surface. There is bifurcation for large Tabor parameters, too.

Keywords: Rough surface, adhesive contact

1. Introduction

本研究採用連續力學的方法，加入分子間之作用力，來分析粗糙表面之彈塑性吸引接觸力。

目前連續力學的吸引接觸力學，多限於彈性接觸的分析，且限於球體的接觸分析。例如：1970 年，Johnson 等人提出的 JKR model [1]，1975 年 Derjaguin 等人提出的 DMT model[2]，1992 年，Maugis 使用 Dugdale model，找出整合兩種 model 的解析解[3]，2005 年 Johnson 與 Greenwood 研究橢圓接觸[4]。但是上述研究都只是近似解。

在數值解方面，在 1992 年，Attard 等人[5]使用 Lennard Jones Law，提出數值方法分析。1997 年 Greenwood [6]有進一步的研究。Feng[7]於 2000 年提出更詳盡且較佳數值解。

在彈塑性吸引接觸上，Johnson 等人曾進行分析[8]，但他們使用 JKR model，所以僅是近似值。

大體來說，國際上在這方面的研究，都採用軸對稱的公式來計算。因此，這方面的數值分析方法無法推廣至其他形狀。

吳[9]提出直角座標之解法，研究粗糙表面之吸引接觸現象。本研究就是採用吳的方法，研究粗糙表面的彈塑性吸引接觸力。

2. Adhesive Elastic-Plastic Contact Problem

首先我們推導與吸引接觸有關的數學式。

2.1 Displacement Due to Force

點作用力加於無限半平面，位移為[10]：

$$u_z = \frac{1-\nu}{2\pi G} \frac{P}{r}$$

因此，平面上所有的力，對 (x, y) 點所產生的總位移為：

$$u_z(x, y) = \frac{1-\nu^2}{\pi E} \iint_{\Omega} \frac{p(x', y') dx' dy'}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}}$$

2.2 Displacement due to Adhesive Contact

在微奈米接觸時，需考慮分子之間的作用力。根據 Lennard-Jones Law，且考慮塑性變形時，分子間的作用力如下式[7]：

$$\begin{cases} p(h) = \frac{8\Delta\gamma}{3\varepsilon} \left[\left(\frac{\varepsilon}{h}\right)^3 - \left(\frac{\varepsilon}{h}\right)^9 \right] \\ \text{if } p(h) > \sigma_y \text{ then } p = \sigma_y \end{cases} \quad (1)$$

因此，在微奈米級球體與平面接近或接觸時，需滿足下式：

$$h = -\alpha + \varepsilon + h_0 + \frac{1}{E^*} \iint \frac{p(h) dx' dy'}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}} \quad (2)$$

其中，

h_0 表面的原始形態

α 平面與球最低點的距離，零點為 $h = \varepsilon$.

ε 原子間的距離

h 球體與平面中線之距離

E^* 楊氏係數， $\frac{1}{E^*} = \frac{1-\nu_1^2}{E_1} + \frac{1-\nu_2^2}{E_2}$

兩粗糙表面之接觸，可假設為一粗糙表面與一平面接觸。一般而言，我們假設粗糙表面的 auto-correlation function(ACF)為[11]

$$R(\tau) = \sigma^2 \exp\left(-\frac{\tau}{b}\right) \quad (3)$$

如此，可用 Wu [12]的方法推導出表面高度。

對(1)、(2)與(3)式作無因次化，

$$\begin{aligned} H &= \frac{h}{\varepsilon} - 1 & A &= \frac{\alpha}{\varepsilon} & H_0 &= \frac{h_0}{\varepsilon} & \mu &= \left(\frac{b\Delta\gamma}{E^* \varepsilon^2} \right)^{2/3} \\ X &= \frac{x}{b} & Y &= \frac{y}{b} & S &= \frac{\sigma}{\varepsilon} & P &= \frac{p\varepsilon}{\Delta\gamma} & K &= \frac{\sigma_y \varepsilon}{\Delta\gamma} \end{aligned}$$

則方程式(1)與(2)可寫成

$$\begin{cases} F(H) = H + A - H_0 + \frac{32\mu^{3/2}}{3\pi} \iint \frac{P(X', Y') dX' dY'}{\sqrt{(X - X')^2 + (Y - Y')^2}} \\ P(X', Y') = \left[\frac{1}{(H+1)^3} - \frac{1}{(H+1)^9} \right] \end{cases} \quad (4)$$

粗糙表面的無因次 ACF 為

$$C(\tau) = S^2 \exp(-\sqrt{X^2 + Y^2}) \quad (5)$$

無因次合力可由下式算出

$$W = \iint P dX dY$$

2.3 Rectangular Analysis

在直角座標中，格點化後，假設每一方格中，力量均相同，則某點的位移可寫成

$$(\bar{u}_z)_l = \frac{1 - \nu^2}{\pi E} \sum_{k=1}^M \left\{ \iint_{\Omega} \frac{p(x', y') dx' dy'}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2}} \right\} P_x = \sum_{k=1}^M C_{kl} P_k$$

位移常數為[13]

$$\begin{aligned} C_{kl} = \frac{1}{\pi E^*} & \left\{ (x+a) \ln \left[\frac{(y+b) + \sqrt{(y+b)^2 + (x+a)^2}}{(y-b) + \sqrt{(y-b)^2 + (x+a)^2}} \right] \right. \\ & + (y+b) \ln \left[\frac{(x+a) + \sqrt{(y+b)^2 + (x+a)^2}}{(x-a) + \sqrt{(y+b)^2 + (x-a)^2}} \right] \\ & + (x-a) \ln \left[\frac{(y-b) + \sqrt{(y-b)^2 + (x-a)^2}}{(y+b) + \sqrt{(y+b)^2 + (x-a)^2}} \right] \\ & \left. + (y-b) \ln \left[\frac{(x-a) + \sqrt{(y-b)^2 + (x-a)^2}}{(x+a) + \sqrt{(y-b)^2 + (x+a)^2}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

所以方程式(4)可寫成

$$\begin{cases} F(H_i) = H_i + A - \frac{(X_i^2 + Y_j^2)}{2} + \frac{32\mu^{3/2}}{3\pi} \sum C_{ij} P_j \\ P_j = \left[\frac{1}{(H_j+1)^3} - \frac{1}{(H_j+1)^9} \right] \end{cases} \quad (7)$$

本研究就是用疊代法解方程式(7)。

3. Numerical Procedure

本研究使用吳[9]的方法，就是 inexact Newton pre-conditional Bi-CGSTAB method with FFT。簡述如下：

3.1 FFT and Convolution

前述式(7)中矩陣乘積 $\sum C_{ij}P_j$, 可用 convolution 及 FFT 來計算[14]。簡單說, 如果我們

要計算

$$u_i = \sum C_{ij}P_j$$

則可在 C 與 P 數列加上 0 , 變成新的數列。則 u 可用 FFT 求得 :

$$\mathbf{U} = \text{IFFT}\{\text{FFT}(\mathbf{C}) \cdot \text{FFT}(\mathbf{P})\}$$

其中 ,

$$\mathbf{P} = \{p_1, p_2, p_3, p_4, 0, 0, 0, 0\}$$

$$\mathbf{C} = \{C_0, C_1, C_2, C_4, 0, C_3, C_2, C_1\}$$

$$\mathbf{U} = \{u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6, u_7, u_8\}$$

這個方法可以計算(7)式之二維數列。

3.2 Inexact Newton-Bi-CGSTAB Method

本研究主要是求解(7)式。因為(7)式為非線性, 一般多以牛頓法求解, 然而(7)式中, 矩陣過於龐大, 不可能求出其 Jacobian。因此, 需用 Inexact Newton-Bi-CGSTAB method。這個方法分述如下列章節。

3.2.1 Inexact Newton Method

一般而言, 一非線性方程式,

$$F_i(h_1, h_2, \Lambda, h_N) = 0 \quad i = 1, 2, \Lambda, N$$

則

$$\mathbf{F}(\mathbf{h} + \delta\mathbf{h}) = \mathbf{F}(\mathbf{h}) + \mathbf{J} \cdot \delta\mathbf{h} + O(\delta\mathbf{h}^2)$$

其中, \mathbf{J} 為 Jacobian, $J_{ij} \equiv \frac{\partial F_i}{\partial h_j}$

若 Jacobian 或其 inverse matrix 無法求得時, 可使用 Inexact Newton method[15]:

起始: 初猜值 H_0 , 求 $F(H_0)$

Outer iteration, 直至 $|F(H_n)| > \epsilon$

Inner iteration: 求 dH , 使其滿足

$$F'(H_n)dH = -F(H_n) + R_k$$

其中 $\|R_k\| / \|F(H_n)\| \leq \eta_k$

End of inner iteration

$$H_{n+1} = H_n + dH$$

求 $F(H_{n+1})$

End of outer iteration

其中, inner iteration 不限定何種方法。目前有很多種方法發展出來, 下一小節所說的 Bi-CGSTAB, 是其中之一。

3.2.3 Bi-CGSTAB Method

解 $AX = B$ 時，若矩陣 A 是 non-symmetric，則可用 Bi-CGSTAB [16]法。這個方法是用疊代法求解，且不必求任何 inverse matrix，也不必用高斯消去法，所以在僅能算出矩陣乘法時特別有用。在本研究，Inexact Newton method 中的 inner iteration，求解 $F'(H_n)dH = -F(H_n)$ 時，正好可用這個方法 因此，在每一個 inexact Newton method 的 iteration 中，假設

$$A = F'(H_n), B = -F(H_n), X = dH$$

則使用 Bi-CGSTAB 所求出的解正好是 dH 。

3.2.4 Preconditioner

Bi-CGSTAB 雖可以解出上述的問題，但當矩陣並非 diagonally dominant，必須使用 preconditioner 來加速收斂[17]。

Precondition 的概念就是，當 $AX = B$ 當中的 A ，不是 diagonally dominant 時，找出 $M^{-1} \approx A$ 則 $MA \approx I$ ，因此 $MAX = MB$ 會比較容易求出解答。

在求解(7)式過程中， $A = F'(H_n)$ 這個矩陣很大，而且並非 diagonally dominant，因此需要找出 approximate inverse。

因為 A 這個矩陣來自接觸力對應變的影響，而每一點對該點與週遭四點的影響最大。因此，我們取這五點的影響參數，矩陣的其它元素取為零，則可形成一 five-diagonal 新矩陣，對這新矩陣求 approximate inverse matrix M 即可。

3.2.4 Keller's Path Following Method

在解非線性問題時，如果所得之解有 bifurcation 的現象，也就是說解的線有倒彎曲現象，這時可使用 Keller 的 path following method[7、18]。這個方法的精神，是有已知之點來沿著解的線，去求下一點。

這個方法下 Keller 定義一個新的函數

$$N = H_s(s_0) \cdot [H(s) - H(s_0)] + A_s(s_0) \cdot [A(s) - A_s(s_0)] - (s - s_0) \quad (8)$$

則解下列方程式

$$\begin{bmatrix} F_H & F_A \\ N_H & N_A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta H \\ \delta A \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F \\ N \end{bmatrix} \quad (9)$$

則沿曲線的每一小步，及其解可求得。

其步驟如下，先解 H_A ，

$$F'(H)H_A = -1$$

則

$$N_A = A_s(s_0) = \pm [1 + H_A \cdot H_A]^{-1/2} \quad (10)$$

$$N_H = H_s = A_s H_A = N_A H_A \quad (11)$$

如 Feng[18]所述，對每個 Newton iteration，可以解

$$F'(H)Y = F_A(s_0)$$

$$F'(H)Z = -F(s_0)$$

則

$$dA = \frac{N_H \cdot Z + N}{N_H \cdot Y - N_A} \quad (12)$$

$$dH = Z - dAY$$

3.2.5 Numerical Scheme

總之，本研究所用的方法如下：

- 1、由(6)式，算出 C_{ij} 。
- 2、已知 A ，用 path following method 及 Inexact Newton method 求解。
 - (1)起始值 H_0, A_0
 - 由 eq(7)算出 $F(H_0, A_0)$
 - 由 eq(8)算出 $N(H_0, A_0)$
 - 由 eq(10、11)算出 N_H
 - 找出 $M \approx F'(X_0)^{-1}$
 - (2)疊代直到 H_n, A_n 收斂
 - 用 Bi-CGSTAB 與 preconditioner
 - a、求 $\begin{cases} MF'(H_n)Y = MF_A(s_0) \\ MF'(H_n)Z = -MF(s_0) \end{cases}$
 - b、代入(12)式算出 $dA、dH$ 。
 - c、求得 $\begin{cases} H_{n+1} = H_n + dH \\ A_{n+1} = A_n + dA \end{cases}$
 - d、求 $F(X_{n+1}, A_{n+1}), N(X_{n+1}, A_{n+1})$
- 3、重覆 2，解下一個 A 。

4. Result

本研究使用高速網路計算中心的 IBM P690 電腦，配合 Fortran 90 與 IMSL 作計算。

本研究假設兩個 steel 接觸，材料的性質取 Maugis 之研究的數據[3]，因此， $E^* = 110$ GPa， $H = 4$ GPa， $\Delta\gamma = 0.1$ J/m²， $\varepsilon = 0.3$ nm， $K = 12$ 。

本研究首先用 Wu[12]的方法模擬 $S = 1$ 之 256×256 點的粗糙表面，如圖 1。如果是 $S = 2$ 或 3，則坡峰與坡谷較大，但是整體的形狀相同。

我們研究 $\mu = 1$ ， $S = 1$ 壓力分佈，如圖 2，由此可以看出應力集中的情形。

其次我們研究不同粗糙度的影響， $\mu = 1$ ， $S = 1、2、3$ 的 A 與 W 關係，如圖 3。由圖中，可以知道，越粗糙的表面，吸引力越小，越平滑的表面吸引力越大；越粗糙的表面，很遠就開始作用，越平滑的表面，開始作用的距離較近。

圖 4 是 $S = 1$ ， $\mu = 0.1、1、3$ 的 A 與 W 關係。可以看出， μ 越大，很遠就有引力， μ 越小，距離較近才有引力；最大引力則是差不多。

圖 5 是接觸面積，可以看出越粗糙的表面，越遠就有接觸面積；但是距離較近時，越平滑的表面，接觸面積越大。

圖 6 是塑性變形的面積，由研究的結果發現，越粗糙的表面，塑性變形的面積越多；越平滑的表面，幾乎都是彈性接觸。

跳接觸的現象雖不在本研究的範圍，但由圖 4 可看出， μ 越大越容易有跳接觸的現象。

5. Conclusion

本研究使用直角座標系方法求解粗糙表面之彈塑性吸引接觸力分析。從本研究探討的 case 中發現，平滑的表面，吸引力與斥力均較大，接觸面積也較大，但是塑性變形的面積較小。 μ 越大的表面有 bifurcation 的現象，塑性變形的面積很小。

未來可與實驗作比較，可進一步了解對微奈米接觸現象。

誌謝

本計畫感謝高速網路計算中心提供電腦設備。

Reference:

1. Johnson, K.L., Kendal, K. and Roberts, A.D., "Surface energy and the contact of elastic solids", Proc. R. Soc. London, A. 324, pp. 301-313, 1971.
2. Derjaguin, B.V., Muller, V.M. and Toporov, Yu.P., "Effect of contact deformations on the adhesion of particles", Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 53, No. 2, pp. 314-326, 1973.
3. Maugis, D., "Adhesion of spheres: the JKR-DMT transition using Dugdale model", J. Coll. Interf. Sci., Vol. 150, pp.243-269, 1992.
4. Johnson, K.L. and Greenwood, J.A., "An approximate JKR theory for elliptical contacts", Journal of Physics D: Applied Physics, Vol. 38, No.7, pp. 1042-1046
5. Attard, P. and Parker, J.L., "Deformation and adhesion of elastic bodies in contact", Phys. Rev. A, Vol. 46, No. 12, pp. 7975-7971, 1992.
6. Greenwood, J.A., "Adhesion of elastic spheres", Proc. R. Soc. London, Vol. A 453, pp. 1277-1297, 1997
7. Feng, J.Q., "Contact behavior of spherical elastic particles: a computational study of particle adhesion and deformations", Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, Vol. 172, pp. 175-198, 2000.
8. Mesarovic, S.Dj. and Johnson, K.L., "Adhesive contact of elastic-plastic spheres", Journal of Mechanics and Physics of Solids, vol. 48, pp. 2009-2033.
9. 吳俊仲，「粗糙表面之吸引及彈性接觸接觸之數值分析」，國科會計畫 NSC 92-2212-E034-002。
10. Johnson, K.L., Contact Mechanics, Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
11. Mulvaney, D.J., Newland, D.E. and Gill, K.F., "A complete description of surface texture profiles", Wear, Vol. 132, pp. 173-182, 1989.
12. Wu, J.-J., "Simulation of rough surfaces with FFT", Tribology International, Vol. 33, pp. 47-58, 2000.
13. Love, A.E.H., "The stress produced in a semi-infinite solid by pressure on part of the boundary", Phil. Trans. Roy. Soc. (London) Series A, Vol. 228, pp.377-420, 1929.

14. Liu, S.B., Wang, Q. and Liu, G., “A versatile method of discrete convolution and FFT (DC-FFT) for contact analyses”, *Wear*, Vol. 243, No. 1-2, pp. 101-110, 2000.
15. Dembo, R.S., Stanley, C.E., Eisenstat, C. and Steihaug, T., “Inexact Newton methods”, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 19, No.2, pp. 400-408, 1982.
16. Van Der Vorst, H.A., “Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems”, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 13, No. 2, pp. 631-644, 1992.
17. Benzi, M., “Preconditioning techniques for large linear systems: a survey”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 182, pp.418-477, 2002.
18. Keller, H.B. “Numerical solution of bifurcation and non-linear eigenvalue problems”, in: Rabinowitz, P. (ed.), *Applications of Bifurcation Theory*, pp. 359-384, Academic Press, New York, 1997.

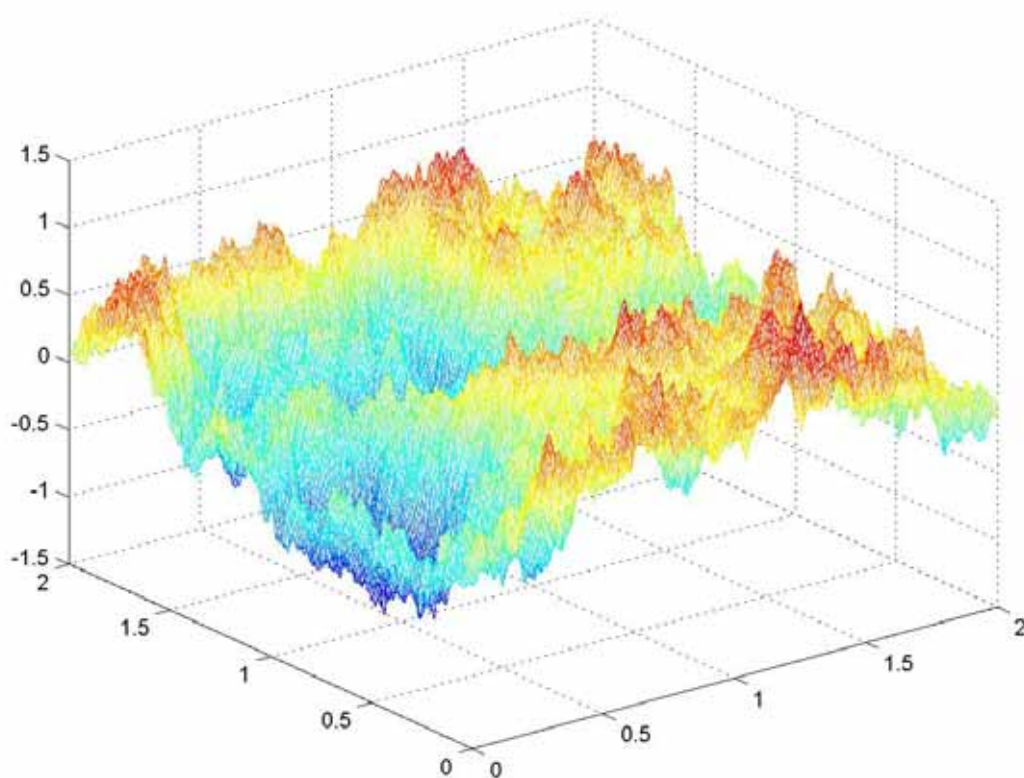


圖 1、粗糙表面

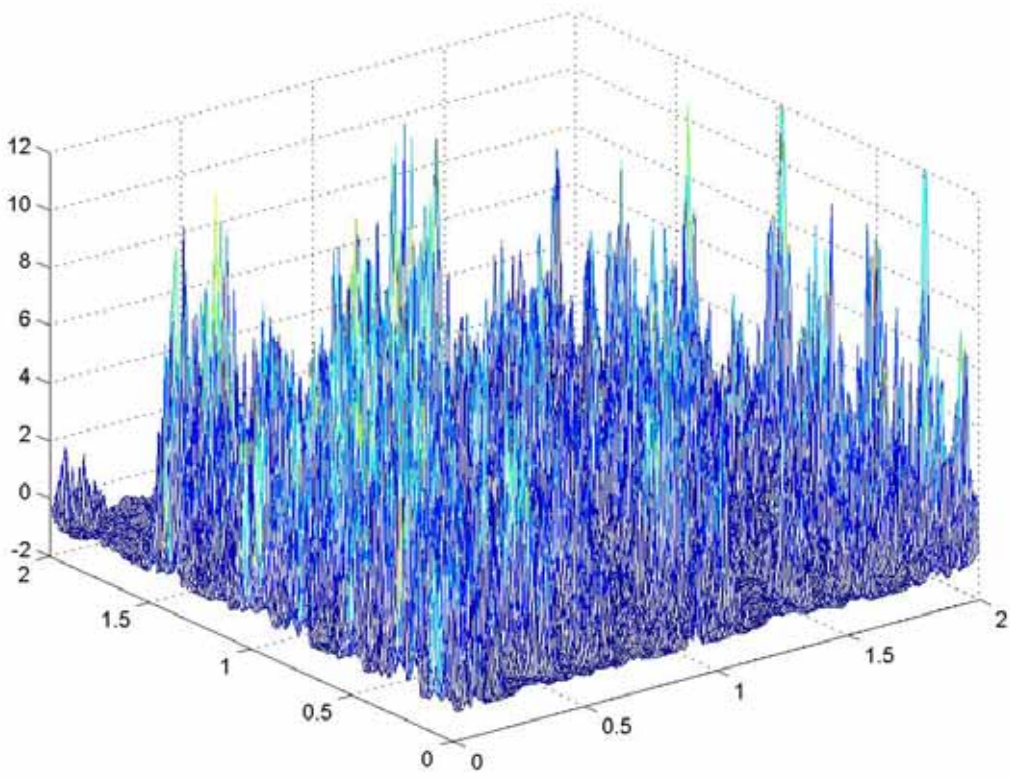


圖 2、壓力分佈

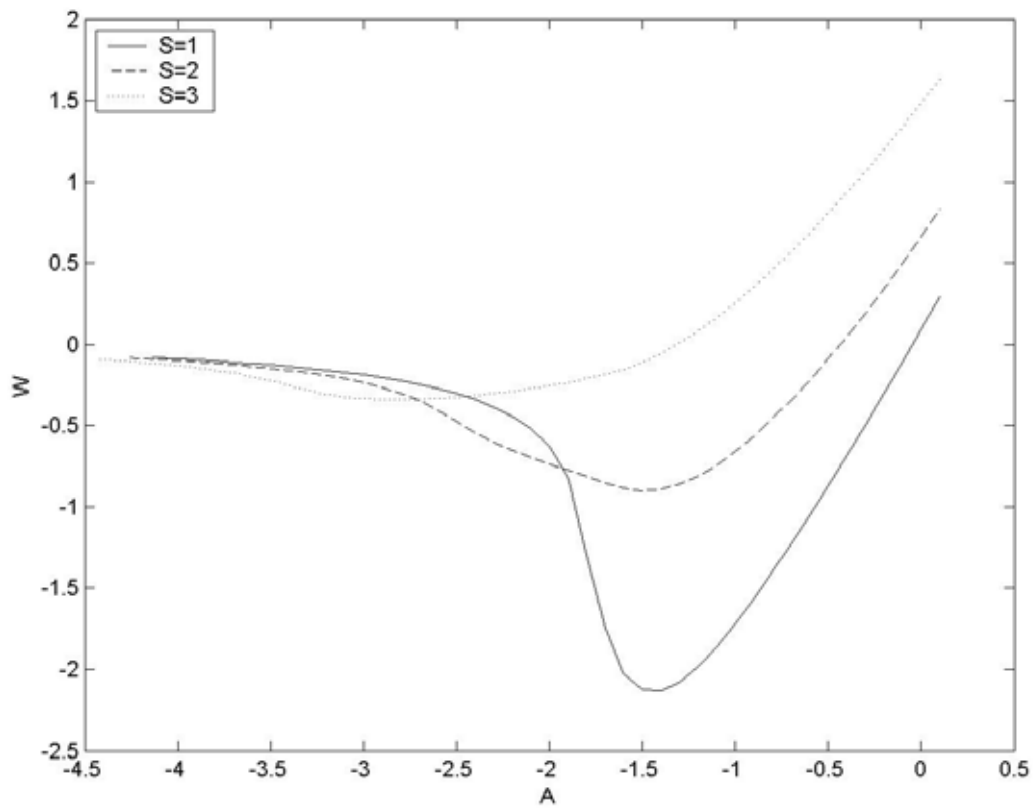


圖 3 , A vs. P for $\mu = 1, S = 1, 2, 3$

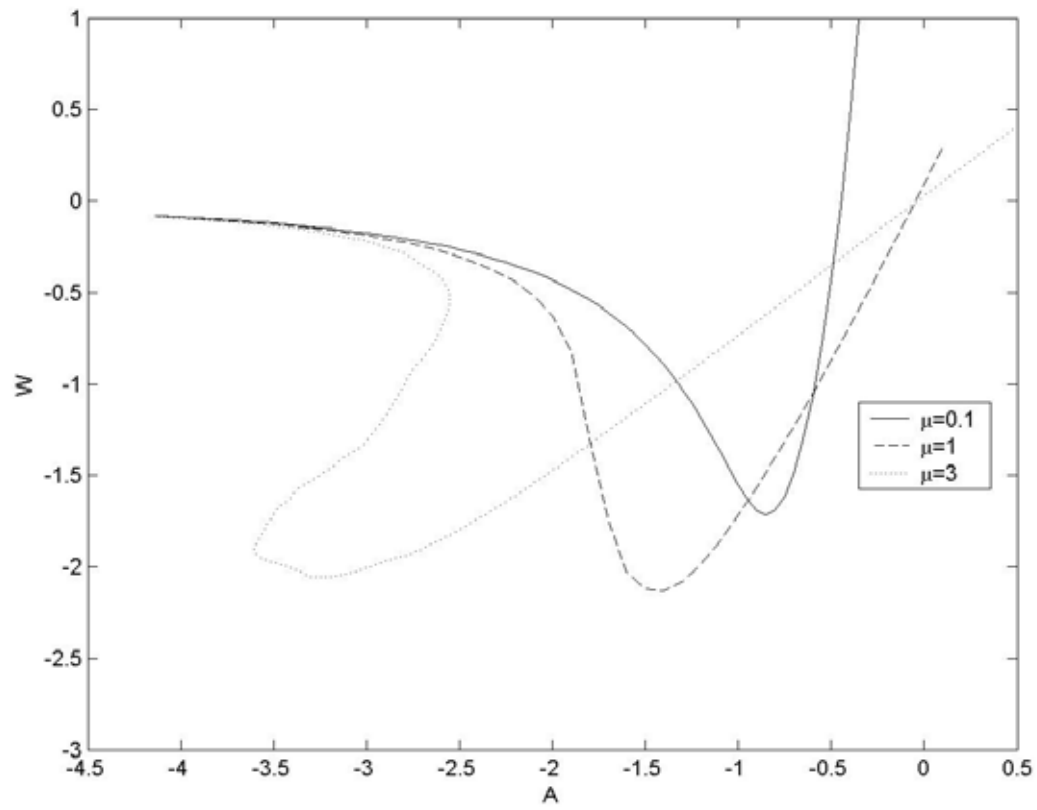


圖 4 , A vs. P for $S = 1$, $\mu = 0.1, 1, 3$

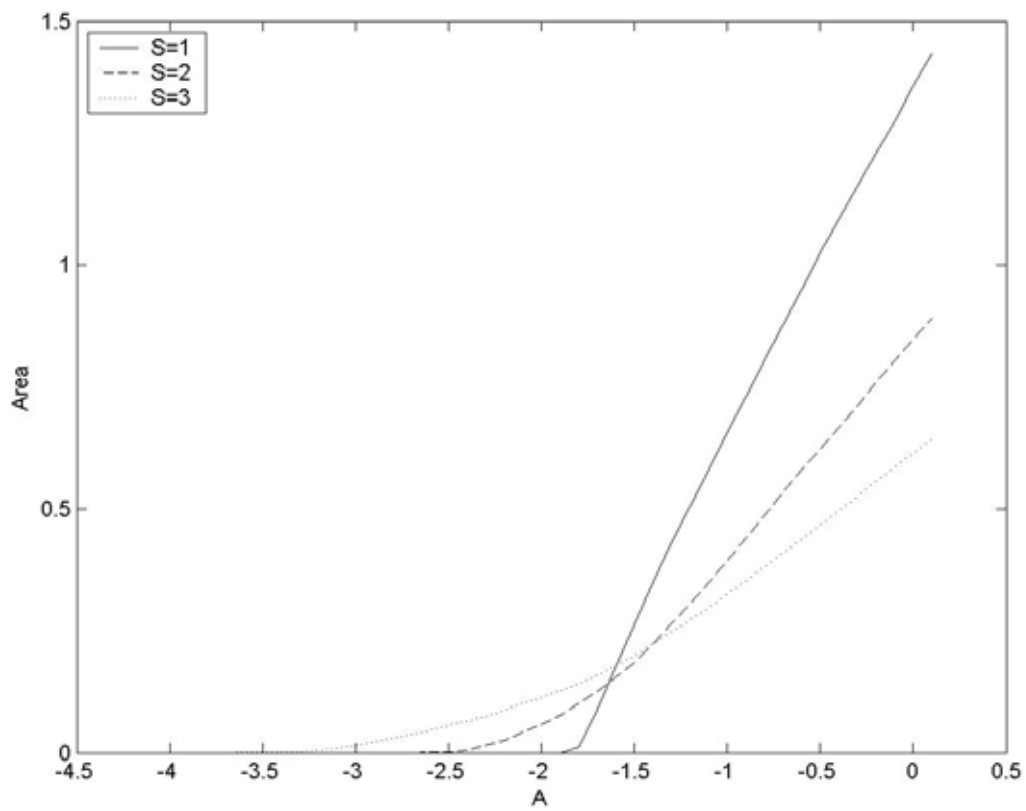


圖 5、接觸面積 for $\mu = 1$, $S = 1, 2, 3$

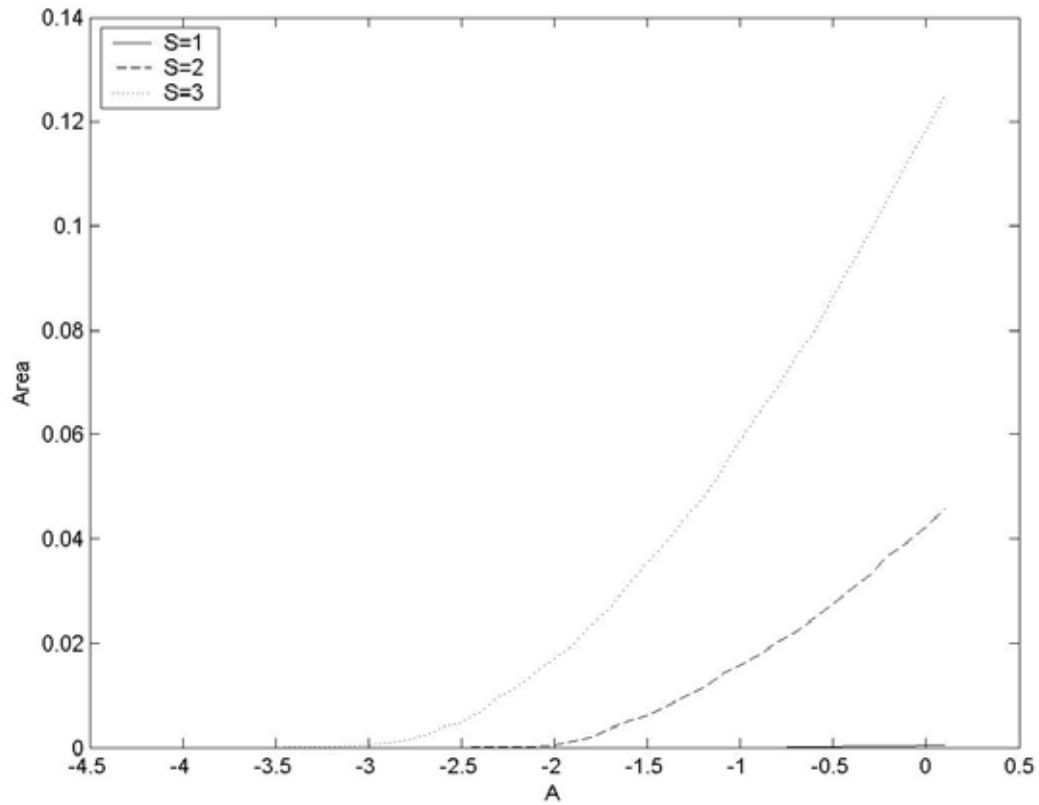


圖 6、塑性變形面積 for $\mu = 1$, $S = 1, 2, 3$

6. 計劃成果自評：

1. 本計畫成果符合預期，不過對於較粗糙之表面，收斂仍問題，還有很多探討的空間。
2. 本研究成果將投稿於國外 SCI 期刊。
3. 本研究為基礎理論研究，不適合專利發表。
4. 未來需與實驗作驗證。