

Modélisation de la lubrification : de l'échelle continue à l'échelle moléculaire

N. Fillot

Université de Lyon, CNRS, INSA Lyon, LaMCoS UMR 5259, 69621 Villeurbanne, France, nicolas.fillot@insa-lyon.fr

Résumé — Le but de cette étude est de proposer une approche originale dans la modélisation des contacts lubrifiés élastohydrodynamiques, en combinant un modèle classique dérivé de la mécanique des milieux continus (basé sur la méthode Eléments Finis) et une investigation à l'échelle nanométrique grâce à des simulations Dynamique Moléculaire. On montre en particulier comment le glissement du lubrifiant le long des surfaces solides peut être quantifié à l'échelle nano puis intégré dans un modèle composite à plus grande échelle.

Mots clefs — Lubrification, Multi échelle, Simulation numérique.

1 Contexte

Les contraintes industrielles sont aujourd'hui très forte en ce qui concerne les contacts lubrifiés. Alors que plus de puissance doit être transmise dans les liaisons mécaniques, les pertes d'énergie doivent être minimisées. Les mécanismes doivent être de plus en plus légers et petits, et les contraintes environnementales imposent l'utilisation de moins de lubrifiant et l'interdiction de certains additifs classiques, ce qui implique que les épaisseurs de lubrifiant entre les surfaces en contact deviennent ultraminces. Cette épaisseur du film, devenant du même ordre de grandeur que la taille des molécules qui composent le lubrifiant, remet en cause toute l'approche continue classique. Le but de cette étude est donc de fournir des indications sur la façon d'intégrer les effets particuliers qui se produisent à l'échelle nanométrique dans un modèle continu d'un contact lubrifié.

2 Modèle continu d'un contact lubrifié

Nous réduisons ici l'étude au cas d'un cylindre infiniment long sur un plan. Les deux solides en contact sont en cuivre et le lubrifiant choisi est le n-octane (représentant des fluides qui peuvent se rencontrer dans des applications réelles, pris comme lubrifiant bien qu'ils n'aient pas été conçus pour une telle fonction). Le calcul du champ de pression et d'épaisseur de film dans ce type de contact (élastohydrodynamique) est réalisé par une approche Eléments Finis qui ne sera pas détaillée ici (voir [3]). L'idée principale est de résoudre simultanément les deux physiques impliquées : la déformation (élastique) des solides en contact, et le problème hydrodynamique (l'équation de Reynolds, posée comme condition aux limites). Avec un rayon de cylindre de $5 \cdot 10^{-3}$ m, une charge linéique de $5 \cdot 10^5$ N/m, et une vitesse moyenne des surfaces de 1 m/s, le calcul donne une épaisseur centrale de lubrifiant de $3,75 \cdot 10^{-9}$ m. En conséquence, les effets nanométriques doivent être examinées plus en détail pour mettre en lumière la nature discrète du film fluide à cette échelle ainsi que son interaction avec les surfaces solides. Dans la suite, l'accent sera mis en particulier sur le glissement du fluide près des surfaces solides (totalement négligé dans les approches continues classiques).

3 Investigation à l'échelle nanométrique

Des simulations locales du comportement du n-octane proche des parois solides (modélisées localement par un réseau cristallin d'oxyde de cuivre) sont réalisées en utilisant la méthode Dynamique Moléculaire (voir [1]), tel que représenté sur la Fig. 1. Les forces d'interactions entre les différents constituants sont déduites des champs de force AMBER96 et OPLS (voir [2] pour plus de

détail). Différentes pressions normales p , vitesses des solides u_1 et u_2 et épaisseurs h de lubrifiant sont imposées pour permettre de représenter chaque situation rencontrée dans la modélisation continue.

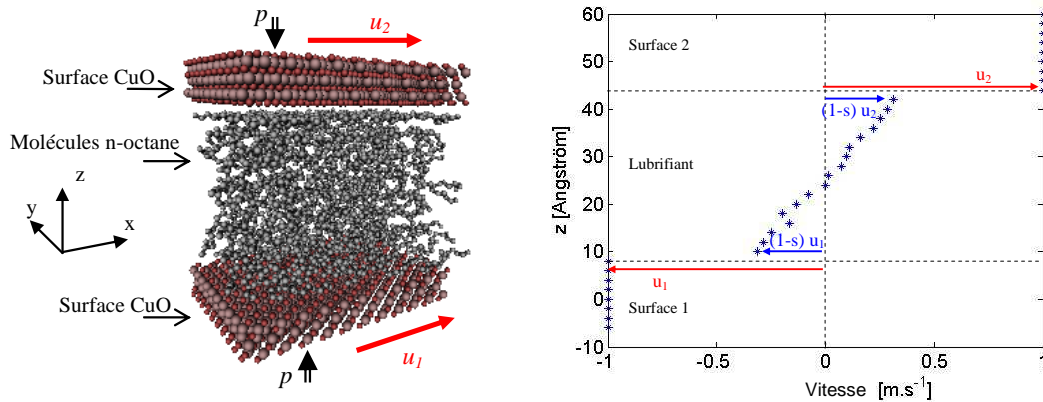


FIG. 1 – Représentation discrète d’une partie élémentaire de l’aire de contact, et un exemple de profil de vitesse dans l’épaisseur du film, ici pour $p = 1.5$ GPa, $h = 3,6$ nm, $u_1 = -u_2 = 1$ m/s.

4 Intégration du glissement à l’échelle nano dans le modèle continu

Il est alors possible de déduire des différentes simulations en Dynamique Moléculaire un comportement générique du phénomène de glissement, qui peut s’écrire comme une expression semi analytique des différents paramètres étudiés. L’intégration de cette expression dans le modèle continu (Eléments Finis), conduit à des profils d’épaisseur de film totalement différents du cas classique, sans glissement du fluide aux surfaces (Fig. 2).

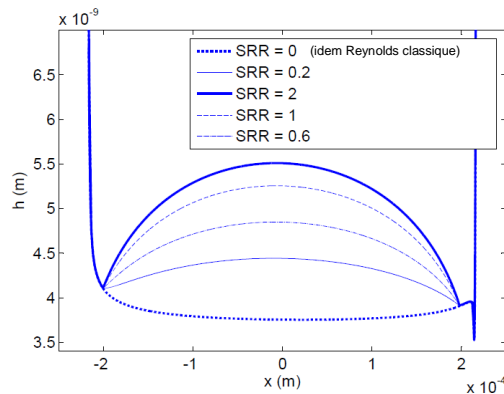


Fig. 2 – Profils d’épaisseur de lubrifiant, avec et sans prise en compte du glissement à l’échelle nanométrique.

Alors que l’épaisseur minimale de film n’est pas affectée par le glissement, la zone centrale est nettement modifiée. En augmentant le taux de glissement (noté SRR sur la Fig. 2), le profil d’épaisseur de film adopte une courbure opposée, appelée « dimple », observée par ailleurs dans les études expérimentales.

Références

[1] M.P. Allen, D.J. Tildesley. *Computer Simulations of Liquids*, Clarendon Press, 1987.
 [2] H. Berro. *A Molecular Dynamics Approach to Nano-scale Lubrication*, Ph.D. thesis, INSA de Lyon, 2010.
 [3] W. Habchi. *A Full-System Finite Element Approach to Elastohydrodynamic Lubrication Problem: Application to Ultra-Low Viscosity Fluids*, Ph.D. thesis, INSA Lyon, 2008.