



**HAL**  
open science

# Prise en compte de phénomènes microscopiques dans une approche multi-échelle du contact

Hachmi Ben Dhia, Du Shuimiao

► **To cite this version:**

Hachmi Ben Dhia, Du Shuimiao. Prise en compte de phénomènes microscopiques dans une approche multi-échelle du contact. 12e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2015, Giens, France. hal-01516630

**HAL Id: hal-01516630**

**<https://hal.science/hal-01516630v1>**

Submitted on 2 May 2017

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Public Domain

# Prise en compte de phénomènes microscopiques dans une approche multi-échelle du contact

H. Ben Dhia<sup>1</sup>, D. Shuimiao<sup>2</sup>

<sup>1</sup> MSSMat, UMR 8579, Ecole Centrale-Supélec, hachmi.ben-dhia@ecp.fr

<sup>2</sup> MSSMat, UMR 8579, Ecole Centrale-Supélec, shuimiao.du@ecp.fr

**Résumé** — Dans ce travail, nous nous intéressons à la modélisation et la simulation de phénomènes de contact entre deux solides, en intégrant des aspects physiques microscopiques des interfaces de contact. Le cadre Multi-échelle Arlequin est utilisé à cet effet pour coupler des modélisations macroscopiques à des modélisations microscopiques de chacun des solides. Les interactions de contact sont régies par des modèles d'efforts d'interaction, dérivant de potentiels physiques d'interactions. La formulation Arlequin du problème considéré est développée. Des résultats numériques obtenus par approximation de ce problème et utilisation d'algorithmes de résolution sont donnés et comparés à des résultats de contact macroscopique.

**Mots clés** — contact, multi-échelle, méthode Arlequin.

## 1 Introduction

L'omniprésence et l'importance des phénomènes de contact dans la vie de tous les jours a fait de la résolution des problèmes de contact une thématique d'intérêt majeur pour l'ingénierie de multiples secteurs industriels, mais également pour l'ingénierie biomécanique. Si des approches macroscopiques de ces problèmes sont quasiment arrivées à maturité aujourd'hui et sont implémentées dans des codes de référence, la considération de phénomènes d'interface, intégrant davantage la physique de ces interfaces, reste peu pratiquée par la communauté de la mécanique numérique du contact. Ce raffinement est pourtant une nécessité dès lors que les systèmes mécaniques en interactions sont miniaturisés. Le raffinement est également nécessaire lorsque l'on s'intéresse à l'évaluation précise de l'usure des interfaces, à leur mouillabilité ou encore à des problématiques de fuite dans des robinetteries critiques.

Ce travail est une contribution à la modélisation et la simulation numérique de ces phénomènes d'interfaces entre structures d'ingénieurs. Conscient de l'impossibilité de traiter ces interactions à l'échelle à laquelle on souhaite quantifier les phénomènes d'interfaces, nous proposons une méthodologie hybride. Elle repose sur le cadre de modélisation multi-échelle et modèle Arlequin [1][2].

## 2 Position et formulation d'un problème modèle

### 2.1 Ecritures classiques macroscopiques du problème de contact dans le cadre Arlequin

Nous considérons le problème de contact entre deux solides  $S^1$  et  $S^2$ , occupant respectivement l'adhérence des domaines  $\Omega_1^G$  et  $\Omega_2^G$  de  $R^d$ ,  $d = 1, 2, 3$ , en pratique (cf. figure 1a). Notons, pour ( $i = 1, 2$ ),  $\Gamma_i^G$  la frontière du domaine  $\Omega_i^G$ . Nous supposons que chaque frontière est composée de trois parties disjointes, notées  $\Gamma_{iu}^G$ ,  $\Gamma_{ig}^G$  et  $\Gamma_{ic}^G$  telles que :

$$\Gamma_i^G = \bar{\Gamma}_{iu}^G \cup \bar{\Gamma}_{ig}^G \cup \bar{\Gamma}_{ic}^G \quad (1)$$

où :

- $\Gamma_{iu}^G$  est la partie où le déplacement est imposé.
- $\Gamma_{ig}^G$  est la partie sur laquelle des densités de force  $g_i$  (supposées connues) sont appliquées.
- $\Gamma_{ic}^G$  est la partie potentielle de contact macroscopique.

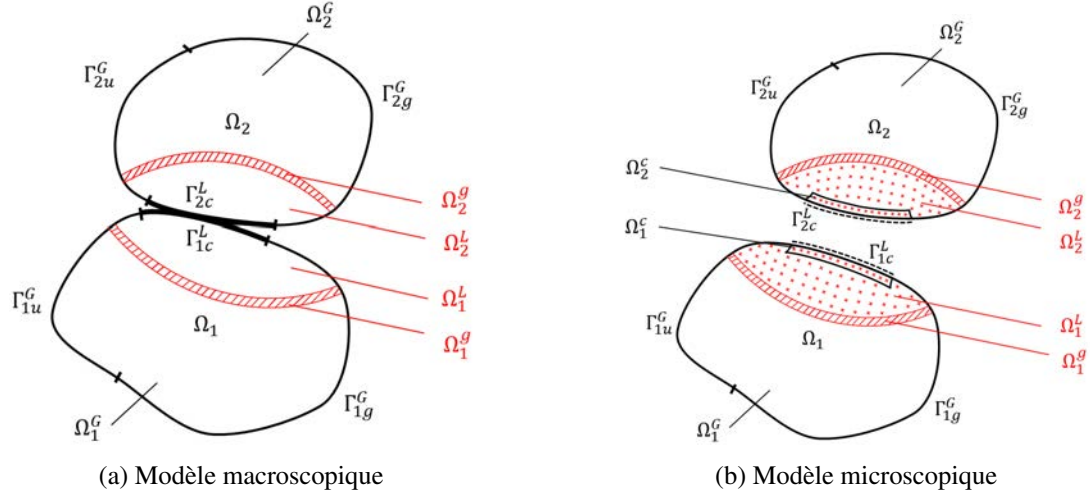


FIGURE 1 – Modèle macroscopique et microscopique de contact

Dans le cadre du contact macroscopique, le contact se produit entre les deux faces potentielles de contact. La méthode Arlequin a déjà été utilisée pour formuler de tels problèmes (cf. [3] en statique, [4] en dynamique). Cela consiste, en statique, à superposer à chacun des deux solides, au sens de Arlequin, un patch occupant le domaine  $\Omega_i^L$ , avec comme contrainte que la frontière potentielle de contact  $\Gamma_{ic}^G$  soit contenue dans la frontière de  $\Omega_i^L$  (cf. figure 1a). Ces patches sont couplés en volume en général, aux substrats solides. La zone de collage est notée  $\Omega_i^g$ . En suivant la démarche de la méthode Arlequin, le problème s'écrit alors comme suit :

$$\begin{aligned} & \text{Trouver } (u_i^G, u_i^L, \lambda, R) \in CA(\Omega_i^G) \times CA(\Omega_i^L) \times M \times \mathfrak{R}, \\ & \text{tel que pour } \forall (w_i^G, w_i^L, \mu) \in CA(\Omega_i^G) \times CA(\Omega_i^L) \times M, \end{aligned}$$

$$\begin{cases} G_i^{int}(u_i^G, u_i^L, w_i^G, w_i^L; \alpha_i) + G_i^{Arl}(w_i^G, w_i^L, \lambda) = G_i^{ext}(w_i^G; \beta_i) + (-1)^i G_i^c(R, w_i^L) \\ G_i^{Arl}(\mu, u_i^G, u_i^L) = 0 \end{cases} \quad (2)$$

où  $u_i$  et  $\lambda$  sont les champs de déplacement et champs de multiplicateur de Lagrange. Les quantités  $\alpha$ ,  $\beta$  sont des fonctions de pondération des travaux virtuels. Les espace  $CA(\Omega_i)$ ,  $M$  et  $\mathfrak{R}$  sont ceux cinématiquement admissibles, l'espace médiateur et l'espace des efforts de contact, respectivement et où :

- $G_i^{int}(u_i^G, u_i^L, w_i^G, w_i^L; \alpha_i)$  est la partition des travaux internes virtuels.
- $G_i^{ext}(w_i^G; \beta_i)$  est la partition des travaux virtuels externes.
- $G_i^{Arl}(\lambda, w_i^G, w_i^L)$  est relié au couplage Arlequin.
- $(-1)^i G_i^c(R, w_i^L)$  est relié aux travaux virtuels des efforts de contact.

Pour que le problème soit complet, il faut adjoindre des relations de comportement (de l'élasticité, par exemple) et des lois de contact (de Signorini et de Coulomb, par exemple).

## 2.2 Ecritures microscopiques du problème de contact dans le cadre Arlequin

Dans le cadre microscopique ("atomistique"), le contact est supposé être actif dans tout l'espace. En tenant compte d'un seuil de coupure pour la force "inter-atomique", nous supposons que les régions de contact sont réduites à des couronnes tronquées, potentielles de contact, notées  $\Omega_i^c$  (cf. figure 1b). Ces régions potentielles d'interactions de contact sont désormais des volumes dans lesquels des modélisations microscopiques discrètes sont utilisées. En suivant la démarche développée dans [5] (cf. aussi [6] et [7]), ces modélisations microscopiques sont alors couplées à des modélisations macroscopiques, dans le cadre Arlequin pour effectuer une analyse multi-échelle, similaire à celle présentée ci-dessus, avec toutefois, l'usage d'un potentiel  $\phi$  d'interactions atomistiques, par exemple de type Lenard-Jones :

$$\phi(r) = \varepsilon \left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} - 2\varepsilon \left(\frac{r_0}{r}\right)^6 \quad (3)$$

avec  $r_0$  et  $\varepsilon$  des constantes matériaux.

Observons ici que le cadre Arlequin permet, dans ce cas, de réduire la zone critique à coûts de calcul très élevés, avec une grande flexibilité, surtout si on imagine des scénarios de contact avec très grands déplacements.

### 3 Exemple modèle

Nous considérons une poutre de longueur  $L$ , encadrée à un bout et soumise à une force de tirage  $F$ . Notons  $E$  son module d'Young. Elle est susceptible de rentrer en contact avec un obstacle rigide se situant à l'abscisse  $x_0$ . La distance initiale entre la poutre et l'obstacle est  $g_0$ . Pour faire une analyse multi-échelle en utilisant la méthode Arlequin, cette poutre est modélisée par deux modèles superposés : un modèle grossier dans  $[0, l_2]$  et un autre plus fin entre  $[l_1, L]$ . La zone  $\Omega_2^S = [l_1, l_2]$  est celle de collage (cf. figure 2).

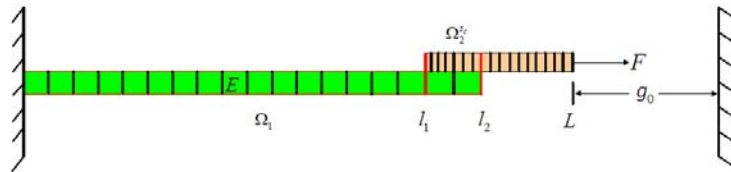


FIGURE 2 – Modèle de poutre

#### 3.1 Premier résultat

Le problème est discrétisé avec la méthode des éléments finis. En tenant compte de la non-linéarité, la méthode de Newton a été appliquée pour la résolution numérique. Une algorithmique plus avancée sera exposée pendant le colloque.

Les données numériques sont :  $L = 1, l_1 = 0.8, l_2 = 0.6, h_1 = 0.1, h_2 = 0.01, E = 10^8, F = 1, \alpha_1 = \alpha_2 = 0.5, l = 1, r_0 = 10^{-9}, g_0 = 4r_0(\text{gap initial}), Tol = 10^{-8}$ , où  $h_i$  est la taille de maillage pour le modèle  $\Omega_i$ ,  $Tol$  est la tolérance des itérations pour la méthode de Newton et  $l$  est un paramètre du terme de couplage de type  $H^1$  [8]. Le couplage est de type fort. Le champ de déplacement et le champ de multiplicateur de Lagrange sont approchés par des champs  $P_1P_1$ . La solution numérique est représentée sur les figures suivantes. On compare un résultat obtenu avec un modèle de contact macro (analytique) à un résultat obtenu avec le modèle de contact micro dans lequel on note les actions à distance et non linéaires de contact, ainsi que les forces de Van der Waals. D'autres résultats numériques plus illustratifs des contacts microscopiques seront présentés durant le colloque.

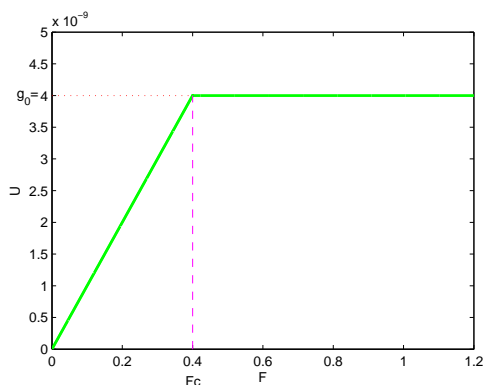


FIGURE 3 – Déplacement macro (analytique)

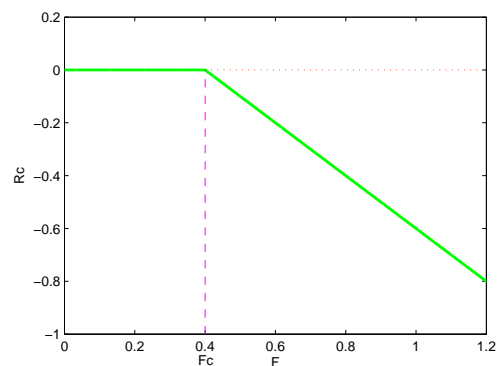


FIGURE 4 – Force de contact macro (analytique)

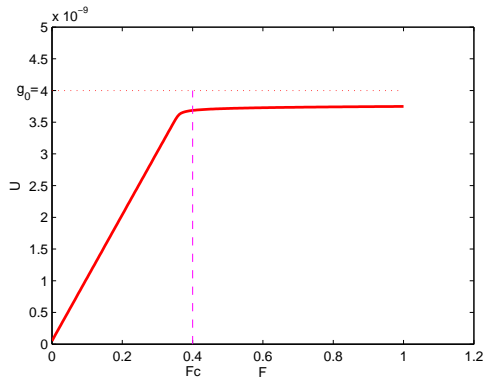


FIGURE 5 – Déplacement micro (Arlequin)

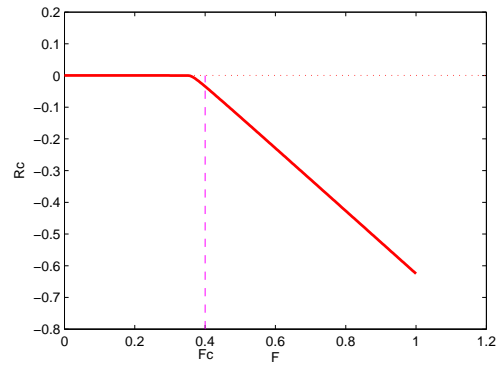


FIGURE 6 – Force de contact micro (Arlequin)

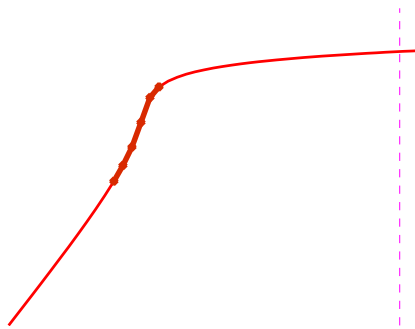


FIGURE 7 – Déplacement micro (zoom)

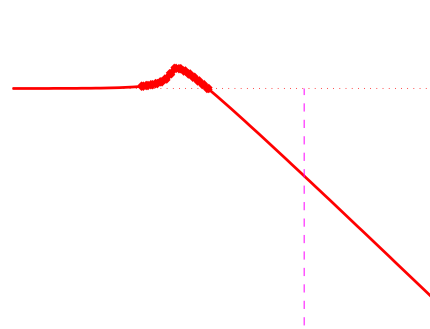


FIGURE 8 – Force de contact micro (zoom)

## Références

- [1] Ben Dhia, H. *Multiscale mechanical problem : the Arlequin method*, CRAS, Paris, (1998).
- [2] Ben Dhia, H. *Numerical modelling of multiscale problems : the Arlequin method*, CD Proceedings of ECCM'99, Munchen, (1999).
- [3] Ben Dhia, H., Zarroug, M. *Contact in the Arlequin framework*, In Contact mechanics, Springer Netherlands, 403-410, (2002).
- [4] Ben Dhia, H., Zammali, C. *Level-Sets fields, placement and velocity based formulations of contact-impact problems*, International journal for numerical methods in engineering, 69(13), 2711-2735, (2007).
- [5] Ben Dhia, H., Elkhodja, N. *Coupling of atomistic and continuum models in the Arlequin framework*, Proceedings of the 8eme Congrès de Mécanique, April 17-20, El Jadida, Maroc, 133-135, (2007).
- [6] Bauman, P. T., Ben Dhia, H., Elkhodja, N., Oden, J. T., Prudhomme, S. *On the application of the Arlequin method to the coupling of particle and continuum models*, Computational mechanics, 42(4), 511-530, (2008).
- [7] Prudhomme, S., Ben Dhia, H., Bauman, P. T., Elkhodja, N., Oden, J. T. *Computational analysis of modeling error for the coupling of particle and continuum models by the Arlequin method*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 197(41), 3399-3409, (2008).
- [8] Ben Dhia, H., Rateau, G. *The Arlequin method as a flexible engineering design tool*, International journal for numerical methods in engineering, 62(11), 1442-1462, (2005).