Modélisation numérique de problèmes de contacts rugueux et adhésifs

L. Leconte-Blanche¹, H. Ben Dhia¹

 $^1 {\it MSSMat, Ecole \ CentraleSup{}'elec, \{laurent.leconte-blanche, hachmi.ben-dhia\}@centralesupelec.fr}$

Résumé — Un modèle de contact micro, rugueux et adhésif entre solides est développé ici. On y utilise un potentiel d'interaction de Lennard-Jones comme loi d'interface. Le problème faible-fort de contact est formulé dans le cadre multi-échelle Arlequin afin de localiser les modélisations fines des zones d'intérêts, tout en réduisant les coûts de calculs. Une méthodologie originale développée dans [3] est adaptée et améliorée pour le traitement de complexités additionnelles, liées à la micro-rugosité des interfaces. Des résultats numériques pour un cas test avec des rugosités éclairent la pertinence de l'approche. **Mots clés** — Contact rugueux, adhésion, cadre Arlequin.

1 Introduction

La prise en compte des rugosités des faces des inter-faces des structures (micro).(nano)scopiques est déterminante pour le calcul numérique précis des efforts d'interactions de ces structures. Elle permet, en pratique, l'amélioration de la maîtrise du fonctionnement et de la tenue de systèmes dans des secteurs industriels stratégiques. Cela concerne, par exemple, le secteur des MEMS ou des NEMS en électronique, celui de la micro-manipulation en robotique ou encore l'AFM. Dans ces problèmes, la maîtrise des gaps inter-faciaux est essentielle, notamment pour la détection des zones adhésives de l'inter-face de contact. Or, ces gaps ne sont généralement pas accessibles analytiquement et le sont difficilement, voire de façon impossibles, expérimentalement. Cela rend nécessaire le passage par des modélisations et simulations numériques. Pour quelques références sur la modélisation et la simulation de ces problèmes de contact rugueux et adhésifs, nous renvoyons à [7, 6, 3, 5] et les références dans ces références.

Les travaux que nous élaborons ici font suite à ceux publiés dans [3], utilisant un potentiel de Lennard-Jones, dans le cas où le paramètre de Tabor [8] est faible. Ceci induit une inter-face raide. Dans [3], deux des difficultés numériques résultant de la nature du potentiel de LJ ont été surmontées par le développement d'un algorithme original. Cet algorithme, rappelé dans la sous-section 2.2.3, y a été appliqué à la résolution de problèmes de contacts sans rugosité. Le modèle d'inter-actions considéré ici prend en compte la rugosité, de manière pragmatique dans cette première phase. Par ailleurs, la formulation faible du problème de contact micro est écrite dans le cadre multi-échelle Arlequin [1, 2] afin de localiser les modélisations fines des zones d'intérêts, les traiter de manière appropriée et ainsi réduire significativement les coûts des calculs. Les formulations faibles-fortes du problème, ainsi que la méthodologie de résolution numérique, sont présentées brièvement. Des résultats de simulations pour le cas de contact entre un solide élastique et un autre rigide, ayant une rugosité fractale au niveau de sa surface potentielle de contact, sont donnés et commentés à travers leurs performances.

2 Position et formulation du problème de contact rugueux

Nous considérons deux solides microscopiques \mathcal{B}_1 et \mathcal{B}_2 . Ces solides occupent l'adhérence des domaines notés $\Omega_{1,rug}$ et $\Omega_{2,rug}$ respectivement. Nous notons Ω_1 et Ω_2 les domaines lissés associés. Nous supposons que ces domaines sont inclus dans \mathbb{R}^2 , muni d'un repère euclidien orthonormé ($\underline{0}, \underline{e}_1, \underline{e}_2$). Pour $s \in \{1, 2\}$, la frontière de $\Omega_{s,rug}$ est partitionnée en $\Gamma_{s,u}$ où un déplacement $u_{s,0}$ est imposé, $\Gamma_{s,t}$ où une force surfacique notée \underline{t}_s est appliquée et $\Gamma_{s,c,rug}$ (voir Figure 1a). Par ailleurs, la normale sortante à chaque Ω_s est notée \underline{n}_s et nous appelons inter-face potentielle de contact rugueux le couple ($\Gamma_{1,c,rug}$, $\Gamma_{2,c,rug}$).

Dans la suite de cette section, nous formulons le problème de contact rugueux en procédant par étape.



 $\Gamma_{2,c,rug} \xrightarrow{\overline{X}_{rug}} \overline{\overline{X}}_{rug}$ $\Gamma_{1,c,rug} \xrightarrow{\Pi_{1}}$ $\Gamma_{1,c} \xrightarrow{X_{rug}} \underline{X}$

(b) Surfaces potentielles de contact : les courbes vertes et noires représentent les surfaces lisses et leurs rugosités respectives

FIGURE 1 – Problème de contact entre deux solides élastiques

2.1 Formulation incomplète du problème de contact (\mathcal{P}_s)

Pour $s \in \{1,2\}$, nous écrivons le problème d'équilibre statique local de chacun des solides, avec les Hypothèses de Petites Perturbations (HPP), comme suit :

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\sigma}}_s = \underline{0} \qquad \qquad \text{dans } \Omega_s \qquad (1a)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_{s} = \underline{\underline{R}}_{s} \underline{\underline{\underline{s}}}_{s} \qquad \qquad \text{dans } \Omega_{s} \qquad \qquad (1b)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{s} = \frac{1}{2} (\underline{\nabla u}_{s} + (\underline{\nabla u}_{s})^{T}) \qquad \text{dans } \Omega_{s} \qquad (1c)$$

où Ω_s , $\underline{\underline{\sigma}}_s$, $\underline{\underline{R}}_s$, $\underline{\underline{\varepsilon}}_s$, $\underline{\underline{u}}_s$ et $\underline{\underline{n}}_s$ représentent, pour chaque solide \mathcal{B}_s , le domaine dérivé de $\Omega_{s,rug}$ par lissage de la surface $\Gamma_{s,c,rug}$ (voir Figure 1a), les tenseurs des contraintes, des rigidités élastiques et des déformations linéarisées, les champs des déplacements et des normales unitaires à $\partial\Omega_s$, extérieures à Ω_s , respectivement. Par ailleurs, $R_{n,1,rug}$ représente la densité d'efforts de contact de \mathcal{B}_2 sur \mathcal{B}_1 et $R_{n,2,rug}$ représente la réaction de \mathcal{B}_1 sur \mathcal{B}_2 .

Incomplet, ce problème est complété dans la suite de la section par l'introduction d'éléments définissant des modèles, dont celui microscopique de Lennard-Jones, mais également d'autres qui sont très utiles à notre méthodologie de résolution des problèmes de contact rugueux et adhésifs.

2.2 Modèles de contact utilisés

Pour avoir les distances normales signées d_n entre les deux solides rugueux, dans leurs positions déformées, nous devons évaluer les gaps initiaux.

2.2.1 Calcul du champ des distances signées d_n et $d_{n,rug}$

Pour accéder à d_n entre les deux surfaces potentiellement en contact après déformation (voir Figure 1b), nous apparions d'abord les surfaces "lissées" en prenant $\Gamma_{2,c}$ comme surface géométrique ou maîtresse et $\Gamma_{1,c}$ comme surface cinématique ou esclave. Nous noterons parfois la première Γ_g . La seconde sera notée Γ_c et sa normale unitaire, extérieure à Ω_1 , \underline{n} . L'opérateur d'appariement n'étant pas unique (projection d'un point $\underline{x} \in \Gamma_c$ sur Γ_g ou, le long d'une direction de recherche admissible, émanant de $\underline{x} \in \Gamma_c$, trouver le point de croisement le plus proche de \underline{x} , sur Γ_g), nous supposons que, pour tout $\underline{x} \in \Gamma_c$, nous avons déterminé son apparié $\overline{\underline{x}} \in \Gamma_g$.

Pour rendre compte de la rugosité dans l'évaluation des gaps initiaux (donc des distances initiales normales signées), entre points appariés sur les surfaces rugueuses, nous calculons la distance selon la

normale <u>n</u> entre $\Gamma_{s,c,rug}$ et $\Gamma_{s,c}$ (surface lissée de $\Gamma_{s,c,rug}$) et la notons $f_{s,rug}$. Elle est définie par :

$$\forall (\underline{x}_{s}, \underline{x}_{s,rug}) \in \Gamma_{s,c} \times \Gamma_{s,c,rug}, \ f_{s,rug}(\underline{x}_{s}) = (\underline{x}_{s,rug} - \underline{x}_{s}) \cdot \underline{n}$$
(2)

où $\underline{x}_{s,rug}$ est la projection de \underline{x}_s selon \underline{n} sur $\Gamma_{s,c,rug}$.

De ce fait, la distance signée entre les deux surfaces potentiellement en contact devient :

$$\forall \underline{x} \in \Gamma_c, \ d_{n,rug}(\underline{x},\underline{u}) = (\underline{u} - \underline{\bar{u}}) \cdot \underline{n} - g_{0,r}$$
(3a)

$$g_{0,r} = f_{2,rug}(\underline{\bar{x}}) - f_{1,rug}(\underline{x}) - (\underline{x} - \underline{\bar{x}}) \cdot \underline{n}$$
(3b)

où $g_{0,r}$ est le gap perturbé par les rugosités.

Avec cet appariement, nous pouvons déjà rajouter au problème de contact incomplet le Principe d'Action et de Réaction généralisé sur $\Gamma_{c,rug}$:

$$R_{n,1,rug}(\underline{x})\underline{n}\mathrm{d}S_1 = R_{n,2,rug}(\underline{\bar{x}})\underline{n}\mathrm{d}S_2 \tag{4}$$

Pour fermer le problème, nous pouvons choisir différents types de lois macro et/ou micro. Celles utilisées dans ce travail sont rappelées dans ce qui suit.

2.2.2 Modèle macroscopique de pénalisation

Il s'écrit :

$$R_{n,s,rug}(d_{n,rug}) = \begin{cases} Kd_{n,rug} & \text{si } d_{n,rug} \ge 0\\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$
(5)

où K est un paramètre de pénalisation. Nous verrons l'utilité de ce modèle dans la suite.

2.2.3 Modèle microscopique de Lennard-Jones et son Approximation adaptative

Pour représenter le comportement de l'inter-face (ici surfacique) des solides microscopiques, la loi en pression suivante, basée sur le potentiel de Lennard-Jones, est utilisée (voir Figure 2) :

$$p_{LJ}(d_{n,rug}) = \frac{8\Delta\gamma}{3d_0} \left[\left(\frac{d_0}{d_{n,rug}} \right)^9 - \left(\frac{d_0}{d_{n,rug}} \right)^3 \right]$$
(6)

Ce potentiel, dans le cas d'un Tabor faible [8], comprend 3 difficultés numériques significatives : i) la très forte raideur là où $d_{n,rug}$ est strictement négatif et très proche de zéro, ii) l'absence de définition de pression de contact, pour $d_{n,rug} \ge 0$ et iii) la présence de plages extrêmement localisées dans Γ_c avec des densités d'efforts attractives (pouvant induire des cohésions inter-faciales). Les deux premières difficultés ont été traitées dans [3] grâce à un algorithme original, à deux niveaux imbriqués d'itérations. Le premier niveau construit, par étapes, une suite de modèles de contact pour approcher le modèle Full-LJ : i) nous nous donnons un champ de gaps η^0 initial à l'itération N = 0 et pour $\eta^N = \eta^0$, nous construisons un premier modèle de contact (simplifiant et approchant celui Full - LJ) par des partition de modèles de contact $(LJ) - (LJ)_{tang(\eta^N)}$ (cf. Figure 2, avec $\eta = \eta^0 = d_0$ et où $(LJ) - (LJ)_{tang(\eta)}$ est à substituer à LJR). ii) Nous résolvons le problème de contact \mathcal{P}^N associé à $(LJ) - (LJ)_{tang(\eta^N)}$ pour avoir \underline{u}_N et en tirer p_N . iii) La "projection locale" de p_N sur le modèle Full-LJ (cf. section 3), permet de calculer analytiquement le champ de shift ajusté η^{N+1} . iv) Un test relatif de convergence est réalisé. Ce test oriente soit vers l'arrêt de l'algorithme, soit vers une nouvelle itération N = N + 1 utilisant une approximation adaptée de la partition de modèles $(LJ) - (LJ)_{tang(\eta^{N+1})}$ et ce jusqu'à convergence de l'algorithme. Signalons que chacun des problèmes \mathcal{P}^N est résolu, après discrétisation par la MEF, par la Méthode de Newton. Rappelons et relevons des faits marquants concernant la méthodologie de résolution ci-dessus :

— La convergence de la suite des solutions des problèmes \mathcal{P}^N , associés aux modèles $(LJ) - (LJ)_{tang(\eta^N)}$ construits adaptativement, vers la solution du problème de contact Full-LJ, démontrée dans [3], s'est avérée remarquablement rapide en pratique, même pour les problèmes de contact rugueux étudiés ici. Chaque problème \mathcal{P}^N est résolu (après discrétisation, par la MEF) par l'algorithme de Newton, avec une convergence au bout d'un nombre faible d'itérations (cf. Table 1).

 Ces deux performances sont en contraste raide avec les performances de l'algorithme de Newton lorsqu'il est utilisé directement pour la résolution du problème de contact Full-LJ.

Pour notre problème et pour un champ de shift η^N donné, la partition de modèles $(LJ) - (LJ)_{tang(\eta^N)}$ (cf. Figure 2), s'écrit : $\forall \underline{x} \in \Gamma_c$,

$$R_{n,s,rug}^{N}(d_{n,rug}(\underline{x})) = p_{N}(d_{n,rug}(\underline{x})) = \begin{cases} p_{LJ}(d_{n,rug}(\underline{x})) & \text{si } d_{n,rug}(\underline{x}) \leq \eta^{N}(\underline{x}) \\ p_{LJ}(\eta^{N}(\underline{x})) + p\prime_{LJ}(\eta^{N}(\underline{x}))(d_{n,rug}(\underline{x}) - \eta^{N}(\underline{x})) & \text{sinon} \end{cases}$$

$$(7)$$

Dans la suite, nous noterons S_{η}^{N} le champ du signe, défini sur Γ_{c} par : $S_{\eta}^{N} = \mathbb{1}_{\mathbb{R}^{-}}(\eta^{N} - d_{n,rug})$ (où $\mathbb{1}_{\mathcal{K}}(x)$ vaut 1 si $x \in \mathcal{K}$, 0 sinon).



FIGURE 2 – Pression $(LJ) - (LJ)_{tang(\eta)}$

Dans sa partie attractive, la pression LJ tend très rapidement vers 0 lorsque $d_{n,rug}(\underline{x})$ tend vers - ∞ (cf. Figure 2). De ce fait, il peut être judicieux de négliger la pression LJ dans les zones où $d_{n,rug} < kd_0$, k étant un nombre entier faible.

3 Formulation faible du problème dans un cadre multi-échelle

Afin de traiter finement la troisième difficulté liée à la forte localisation des zones de contacts attractifs pouvant générer des adhésions, la méthode Arlequin [1, 2] est utilisée. Cherchant à pousser plus loin les travaux publiés dans [3, 5] (élaborés dans le cadre de la thèse [4]), nous plaçons des patches Arlequin très raffinés au voisinage des "arêtes" potentielles de contact, tout en incorporant les voisinages des sommets des aspérités, potentiellement avec contacts-significativement actifs. Ces voisinages constituent les zones d'intérêt de notre problème. La "géo-localisation" de ces zones critiques est facilitée par la résolution amont d'un problème de contact macroscopique rugueux, utilisant ici le modèle de contact pénalisé défini par (5). Ce dernier fournit une bonne estimation de l'emplacement de ces zones critiques, facilitant le positionnement de patches de tailles adéquates, et donc réduisant les coûts de calculs.

Ce premier calcul effectué, nous résolvons notre séquence de problèmes de contact en fabriquant itérativement une suite de champ de paramètres (shifts) η^N pour chaque <u>x</u> de Γ_c . Pour cela nous utilisons un algorithme itératif dans lequel, partant d'un champ initial $\eta^0 = d_0 \operatorname{sur} \Gamma_c$, pour chaque itération N et tout <u>x</u> avec $\eta^N(\underline{x})$, $S_{\eta}^N(\underline{x})$ et $p_N(\underline{x})$ connus, nous définissons :

$$\forall \underline{x} \in \Gamma_c,$$

$$\eta^{N+1}(\underline{x}) = \begin{cases} \eta^N(\underline{x}) & \text{si } S^N_{\eta}(\underline{x}) = 0 \\ \text{Resoudre } p_{LJ}(\eta^{N+1}(\underline{x})) = p_N(d_{n,rug}(\underline{x})) & \text{sinon} \end{cases}$$
(8)

Et nous avons convergence de notre problème lorsque le critère suivant est atteint :

$$\max_{\underline{x}\in\Gamma_c} \frac{|\eta^{N+1}(\underline{x}) - \eta^N(\underline{x})|}{\eta^N(\underline{x})} < \varepsilon_{\eta}$$
(9)

où ε_{η} est une tolérance choisie.

La formulation Arlequin de notre suite de problèmes de contact, avec n_p patches pour chacun des solides \mathcal{B}_s , $s \in \{1,2\}$, occupant des domaines notés Ω_{s,l_i} , $j = 1, ..., n_p$ (sans superposition entre eux), s'écrit, à chaque itération N sur le champ du shift η^N :

Pour
$$s \in \{1,2\}$$
, trouver $(\underline{u}_{s,g}^{N}, \underline{u}_{s,l_{1}}^{N}, ..., \underline{u}_{s,l_{n_{p}}}^{N}, \underline{\Phi}_{s,l_{1}}^{N}, ..., \underline{\Phi}_{s,l_{n_{p}}}^{N}) \in \prod_{i=g,l_{1},...,n_{p}} \mathbb{V}_{s,i} \times \prod_{j=1}^{n_{p}} \mathbb{M}_{s,l_{j}}$
et $(S_{\eta,g}^{N}, S_{\eta,l_{1}}^{N}, ..., S_{\eta,l_{n_{p}}}^{N},) \in L^{\infty}(\Gamma_{c,g}) \times L^{\infty}(\Gamma_{c,l_{1}}) \times ... \times L^{\infty}(\Gamma_{c,l_{n_{p}}})$
 $\forall (\underline{v}_{s,g}, \underline{v}_{s,l_{1}}, ..., \underline{v}_{s,l_{n_{p}}}, \underline{\Psi}_{s,l_{1}}, ..., \underline{\Psi}_{s,l_{n_{p}}}) \in \prod_{i=g,l_{1},...,l_{n_{p}}} \mathbb{V}_{s,i} \times \prod_{j=1}^{n_{p}} \mathbb{M}_{s,l_{j}}$
 $\sum_{s=1}^{2} \left[\sum_{i=g,l_{1},...,l_{n_{p}}} \left[G_{s,i}^{int}(\underline{u}_{s,i}^{N}, \underline{v}_{s,i}, \alpha_{s,i}) - G_{s,i}^{ext}(\underline{v}_{s,i}, \alpha_{s,i}) \right] + \sum_{j=1}^{n_{p}} \left[C(\underline{v}_{s,g}, \underline{v}_{s,l_{j}}, \underline{\Phi}_{s,l_{j}}^{N}) \right] \right]$
 $- \sum_{i=g,l_{1},...,l_{n_{p}}} \left[G_{\eta,i}^{c}(S_{\eta,i}^{N}, \underline{u}_{1,i}^{N}, \underline{v}_{1,i}, \underline{v}_{2,i}) \right] = 0$ (10a)

$$C(\underline{u}_{s,g}^{N}, \underline{u}_{s,l_{j}}^{N}, \underline{\Psi}_{s,l_{j}}) = 0 \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, n_{p}\}$$

$$S_{n}^{N} = \mathbb{1}_{\mathbb{R}^{-}}(\mathbf{n}^{N} - d_{n rug \, i})$$
(10b)
(10c)

$$\mathfrak{I}_{\mathfrak{\eta},i}^{N} = \mathbb{1}_{\mathbb{R}^{-}}(\mathfrak{\eta}^{N} - d_{n,rug,i})$$

$$(10c)$$

où g et l_j réfèrent respectivement aux entités globales et locales, $\mathbb{V}_{s,i}$ est l'espace des champs cinématiquement admissibles dans $\Omega_{s,i}$, \mathbb{M}_{s,l_j} sont les espaces médiateurs des multiplicateurs de Lagrange, définis dans les sous-domaines de couplage du j^{eme} patch du s^{eme} solide. $\underline{\Phi}_{s,l_j}^N$ sont les champs de multiplicateurs de Lagrange et $\underline{\Psi}_{s,l_i}$ sont les champs virtuels. Les $\alpha_{s,i}$ réfèrent aux partitions des énergies Arlequin des travaux virtuels. Les quantités $G_{s,i}^{int}$ (travaux virtuels des forces internes), $G_{s,i}^{ext}$ (travaux virtuels des forces externes), C (opérateur de couplage Arlequin en volume) et $G_{n,i}^c$ (travail virtuel des densités d'efforts de contact) sont respectivement définies par :

$$G_{s,i}^{int}(\underline{u}_{s,i}^{N},\underline{v}_{s,i},\alpha_{s,i}) = \int_{\Omega_{s,i}} \alpha_{s,i} \underline{\underline{\sigma}}_{s}(\underline{u}_{s,i}^{N}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_{s}(\underline{v}_{s,i}) d\Omega_{s,i}$$
(11a)

$$G_{s,i}^{ext}(\underline{v}_{s,i}, \alpha_{s,i}) = \int_{\Gamma_{s,i}} \alpha_{s,i} \underline{t}_{s} \cdot \underline{v}_{s,i} \mathrm{d}S$$
(11b)

$$C(\underline{u}_{s,g}^{N}, \underline{u}_{s,l_{j}}^{N}, \underline{\Psi}_{s,l_{j}}) = \int_{\Omega_{s,C,l_{j}}} \underline{\underline{\sigma}}_{s}(\underline{u}_{s,g}^{N} - \underline{u}_{s,l_{j}}^{N}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_{s}(\underline{\Psi}_{s,l_{j}}) + \frac{1}{t_{s,l_{j}}^{2}}(\underline{u}_{s,g}^{N} - \underline{u}_{s,l_{j}}^{N}) \cdot \underline{\Psi}_{s,l_{j}} d\Omega_{s,l_{j}}$$
(11c)

$$G_{\eta,i}^{c}(S_{\eta,i}^{N},\underline{u}_{1,i}^{N},\underline{v}_{1,i},\underline{v}_{2,i}) = \int_{\Gamma_{c}} p_{N}(d_{n,rug,i})(\underline{v}_{1,i}-\underline{v}_{2,i}).\underline{n}\mathrm{d}S$$
(11d)

où t_{s,l_i} est l'épaisseur de chaque zone de couplage Ω_{s,C,l_i} (nous couplons, en volume, le modèle local défini dans Ω_{s,l_i} au modèle global défini dans $\Omega_{s,g}$). Les champs de partitions des pressions sont définis par : $\forall \underline{x} \in \Gamma_c$,

$$p_N(d_{n,rug,i}(\underline{x})) = S_{\eta}^N(\underline{x}) \left(p_{LJ}(\eta^N(\underline{x})) + p'_{LJ}(\eta^N(\underline{x}))(d_{n,rug,i}(\underline{x}) - \eta^N(\underline{x})) \right) + (1 - S_{\eta}^N(\underline{x})) p_{LJ}(d_{n,rug,i}(\underline{x}))$$
(12)

Application dans le cas d'un contact adhésif avec aspérités fractales 4

Nous considérons le cas d'un problème d'interaction de type contacts micro entre 2 solides en déformations planes (cf. Figure 1a). Le solide \mathcal{B}_1 est supposé être élastique de module de Young E_1 égal à 10 GPa. Sa surface potentielle de contact est supposée être lisse. \mathcal{B}_1 est indenté par un solide \mathcal{B}_2 dont le module E_2 est 1000 fois supérieur à celui du premier. La rugosité suivante, de type fractale, notée f, de type Weierstrass-Mandelbrot (WM), est considérée pour la surface potentielle de contact de \mathcal{B}_2 :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_n}x\right)$$
(13)



FIGURE 3 – Schéma représentatif de notre problème de contact rugueux avec WM pour une échelle de fractalité

où $A_n = A_0 \gamma^{(D-2)n}$ et $\lambda_n = \frac{\lambda}{\gamma^n}$ sont l'amplitude et la longueur d'onde de chaque échelle de longueur $n \in \mathbb{N}$ respectivement. $\gamma > 1$ est un paramètre sans dimension et *D* est la dimension fractale du profil (1 < D < 2). En pratique, la somme est tronquée à une valeur n_{max} .

Ici, nous utilisons les paramètres utilisés dans [6], donnés plus loin. Pour chaque solide, nous prenons un maillage carré de côté λ , avec des éléments quadrangles répartis uniformément. Une condition limite de symétrie est imposée sur les côtés verticaux gauches des solides. Par ailleurs, le solide \mathcal{B}_1 est encastré à sa base et un déplacement δ_0 est imposé au côté haut du second solide (voir Figure 3). Observons que le potentiel de contact utilisé dans [6] est un *ersatz* du potentiel d'inter-action LJ. Il est donné par :

$$p_{PR}(d_{n,rug}) = \begin{cases} \frac{24\varepsilon}{\kappa} \left[2\left(\frac{\kappa}{d_{n,rug} - d_0}\right)^{13} - \left(\frac{\kappa}{d_{n,rug} - d_0}\right)^7 \right] & \text{si } d_{n,rug} \le 0\\ K d_{n,rug} & \text{sinon} \end{cases}$$
(14)

où κ est assimilée à une distance d'équilibre du potentiel LJ et K est un paramètre de pénalisation.

Dans notre modèle, nous reprenons la pression définie dans l'équation (7) et nous remplaçons la pression p_{LJ} donnée dans l'équation (6) par :

$$p_{LJ}(d_{n,rug}) = \frac{24\varepsilon}{\kappa} \left[2\left(\frac{\kappa}{d_{n,rug}}\right)^{13} - \left(\frac{\kappa}{d_{n,rug}}\right)^7 \right]$$
(15)

Les paramètres de rugosité sont D = 1,25, $\gamma = 5$, $\frac{A_0}{\lambda} = 0,0025$. Pour le potentiel de Lennard-Jones, nous prenons $\varepsilon = 1 \times 10^{-3} N.m^{-1}$ et $\frac{\kappa}{\lambda} = -2,57 \times 10^{-4}$.

Un premier calcul macro est effectué pour n_{max} variant de 0 à 2 et pour $K = -\frac{10E_2}{\lambda}$ afin de localiser les zones de transition entre contact et non-contact, ce qui conditionnera la position des patches lors du calcul du contact microscopique. Pour cela, nous plaçons un patch d'épaisseur 60 nm et de taille d'élément de 2,5 nm, sur toute la zone potentielle de contact sur les deux solides. La taille d'élément du maillage grossier est de 50 nm et la zone de collage a une épaisseur de 10 nm.

Les résultats de pressions et de distances normales sur les surfaces potentielles de contact, sont dans la Figure 4 pour un déplacement imposé de $\delta_0 = 2, 4 \times A_0$. Pour $n_{max} = 0$, la transition contact/non contact a lieu en x = 255 nm et x = 750 nm (voir Figure 4a), ce qui permet, lorsque nous faisons un calcul microscopique, d'estimer la zone d'adhésion autour de ces coordonnées. Dans ce cas, il sera judicieux d'effectuer un raffinement à ces endroits lors du calcul microscopique, qui constitueront les zones

d'intérêt où sera localisée l'adhésion. En effectuant la même démarche pour les autres résultats, nous procédons à un placement de deux patches entre les abscisses 0 et 350 nm et entre 650 et 1000 nm pour le cas $n_{max} = 0$, tandis que nous prenons les intervalles [0 nm; 300 nm] et [700 nm; 1000 nm] pour les cas $n_{max} = 1$ ou 2.



FIGURE 4 – Résultats de notre problème de contact macroscopique

Remarque : nous avons pris des maillages uniformes pour les calculs dans le cas microscopique. Pour améliorer les coûts de calculs, il est plus judicieux d'augmenter progressivement les tailles d'élément au niveau des répulsions qui ne nécessitent pas un raffinement conséquent. Cela peut être effectué dans les cas $n_{max} = 0$ et 1, mais il est difficile de le faire dans le cas $n_{max} = 2$, tant les répulsions ont une largeur étroite.



FIGURE 5 - Résultats de notre problème de contact microscopique avec deux patches réduits

La Figure 5 représente les résultats dans le cas du contact microscopique de pression et de distance, obtenus pour n_{max} variant de 0 à 2 et pour un déplacement imposé de $2, 4 \times A_0$. Observons dans un premier temps que nous captons bien les phénomènes adhésifs sur la Figure 5a au delà de la transition attraction-répulsion sur toutes les courbes, ceci grâce la méthode Arlequin. Notons que les distances normales représentées sur la Figure 5b sont celles calculées sur les patches et donc en dehors de celle-ci, ces distances sont plus grandes.

La Figure 6 montre la contrainte σ_{yy} pour différentes valeurs de n_{max} . Les phénomènes adhésifs ($\sigma_{yy} > 0$) très localisés sont captés de façon précise grâce au cadre multi-échelle Arlequin. De plus, la répulsion est de plus en plus marquée au niveau des aspérités les plus hautes lorsque n_{max} augmente, ce qui est normale car ayant un rayon de courbure de plus en plus petit, elles supportent des charges de plus en plus conséquentes.

Enfin, la Table 1 montre le nombre d'itérations réalisé dans le modèle microscopique. Nous observons un nombre faible d'itérations de systèmes inversés jusqu'à convergence. Ceci est lié à l'utilisation d'une approche multi-échelle (rapport de taille entre les maillages macro et micro de 20) et en exploitant l'idée de tirer profit d'un calcul macro comme indicateur des zones d'intérêt.



FIGURE 6 – Contrainte σ_{yy} au niveau du solide élastique avec patches réduits

	$(LJ) - (LJ)_{tang(\eta^N)}$	
n _{max}	degrés de libertés	itérations
0	15382	8+2
1	13382	8+2
2	13382	8+2

TABLE 1 – Nombre d'itérations et de degrés de libertés de chaque solide pour les calculs de contact macro et micro

5 Références bibliographiques

Références

- H. Ben Dhia. <u>Multiscale mechanical problems : the Arlequin method</u>, Comptes Rendus De L'Academie Des Sciences Serie II Fascicule B-mecanique Physique Astronomie, 899-904, 1998.
- [2] H. Ben Dhia. <u>Numerical modelling of multiscale problems</u> : the Arlequin method, Proceedings of the First Conference in Computational Mechanics, Munchen, Germany, 1999.
- [3] H. Ben Dhia, S. Du. <u>A model-adaptivity method for the solution of Lennard-Jones based adhesive contact</u> problems, Computational Mechanics, Springer, 1543–1562, 2018.
- [4] S. Du. Investigations numériques multi-échelle et multi-niveau des problèmes de contact adhésif à l'échelle microscopique, 2018.
- [5] S. Du, H. Ben Dhia. <u>An asymptotic numerical method to solve compliant Lennard-Jones-based contact</u> problems involving adhesive instabilities, Computational Mechanics, Springer, 1261–1281, 2019.
- [6] M. Paggi, J. Reinoso. <u>A variational approach with embedded roughness for adhesive contact problems</u>, Mechanics of Advanced Materials and Structures, Taylor and Francis, 1731-1747, 2018.
- [7] R.A Sauer. <u>A survey of computational models for adhesion</u>, The Journal of Adhesion, Taylor and Francis, 81-120, 2016.
- [8] D. Tabor. <u>Surface forces and surface interactions</u>, Journal of Colloid and interface Science, Elsevier, 2-13, 1977.