

# Homogénéisation en champs complets par FFT pour un matériau énergétique à forte anisotropie cristalline : prise en compte de la microfissuration par une méthode de champ de phase

François Rabette<sup>1,2</sup>, François Willot<sup>1</sup>, Hervé Trumel<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Mines ParisTech, Centre de Morphologie Mathématiques,  
35 rue Saint-Honoré, F-77300 FONTAINEBLEAU, France.

<sup>2</sup>CEA, DAM, Le Ripault, F-37260 MONTS, France

## Résumé

On s'intéresse à une classe de matériaux énergétiques composés de 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène (TATB), et d'une faible proportion d'un liant polymère ( $\sim 5\%$  vol.) faisant office de liant intergranulaire. Ces matériaux ont un comportement thermomécanique quasi-fragile et une dilatation thermique irréversible [3], mais les relations entre réponse macroscopique et mécanismes actifs à l'échelle de la microstructure restent mal comprises. C'est pourquoi un programme visant à se doter d'une capacité d'homogénéisation en champs complets par une méthode de Fourier (FFT) a été entrepris. Les travaux antérieurs [12, 2] ont en particulier montré l'importance de l'anisotropie cristalline du TATB sur le comportement thermoélastique linéaire du matériau. Il s'agit maintenant de prendre en compte un mécanisme non linéaire de déformation, en l'espèce la microfissuration inter- et transgranulaire. On propose pour cela le principe de modélisation de microfissuration diffuse par une méthode de champ de phase issu des travaux de Francfort et Marigo [10] et de Bourdin et al. [6], proposée par Miehe et al. [18]. Ce modèle a été implanté dans le code `Morphom` [27]. On décrit l'algorithme d'intégration de ce modèle, et on donne quelques exemples de résultats de simulation, d'abord sur échantillon homogène pré-entaillé, puis sur massif polycristallin initialement sain, en ne prenant en compte, pour simplifier l'approche, que la microfissuration transgranulaire. Cependant, la forte anisotropie du cristal de TATB se traduit par une variation d'un facteur trois environ de l'énergie de surface du cristal selon son orientation. Il apparaît donc indispensable de prendre en compte cette anisotropie dans la description de la rupture locale. On propose à cet effet une extension anisotrope du modèle basée sur une description tensorielle de la ténacité du cristal de TATB.

**Mots-clés :** FFT, Homogénéisation, Endommagement, Polycristal

## 1 Introduction

Le principe variationnel de Francfort et Marigo [10], reposant, suivant le principe énoncé par Griffith [13], sur une compétition entre énergie élastique et énergie de fracture, et sa résolution par une méthode de champ de phase [7], permettent de simuler l'initiation et la propagation de fissure dans les milieux hétérogènes, en rupture fragile [1]. Ces méthodes ne nécessitent pas de paramétrer explicitement l'orientation des fissures, de leur branchement, ou d'introduire de critère ad-hoc portant sur la géométrie et le mode de chargement pour contrôler leur propagation [24], mais seulement une longueur interne caractéristique de l'étalement du champ de phase [15]. Développés avec succès dans de nombreuses études théoriques, numériques ou expérimentales [14, 21, 20, 6] elles ont jusqu'à présent été utilisées principalement à l'aide d'approches éléments finis [17, 23, 25].

Les faciès de propagation de fissures ont notamment été étudié dans le cas de milieux anisotropes [5] ou de polycristaux [16, 22, 8, 23] notamment pour la prise en compte de la décohésion aux interfaces des grains [28],

L'objectif de ce travail est la mise en place d'une méthode numérique d'initiation et de propagation de fissure dans les milieux hétérogènes par champ de phase à l'aide de schémas numériques reposant sur les transformées de Fourier ("méthodes FFT") [19] qui ne nécessitent pas de maillage de la microstructure mais seulement une image tri-dimensionnelle de celle-ci, et utilisent comparativement moins de mémoire [9, 11].

Dans la suite de cet article, on donne quelques éléments d'informations sur le matériau qui nous intéresse, un comprimé au TATB (Sec. 2), puis on rappelle les principes variationnels qui sous-tendent la méthode par champ de phase, dans le cas de phases élastiques (Sec. 3). On propose ensuite deux schémas numériques FFT utilisés pour simuler numériquement l'initiation et la propagation de fissures dans un milieu hétérogène, qui sont validés dans un cas de milieu entaillé soumis à une déformation plane (Sec. 4). Cette méthode est appliquée à divers matériaux dont un polycristal du type du comprimé au TATB en Sec. 5. Nous concluons en Sec. 6.

## 2 Matériau d'intérêt : polycristal de TATB

Le polycristal de 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène (TATB) est un matériau énergétique constitué de cristaux de TATB et d'un liant de faible fraction volumique ( $\sim 5\%$ .vol). Le tenseur d'élasticité, fortement anisotrope, présente une symétrie quasi hexagonale [4] :

$$\mathbb{C}^T \approx \begin{pmatrix} 65.7 & 18.5 & 4 & -0.2 & -1 & 1 \\ & 62 & 5 & 0.6 & -0.5 & 1 \\ & & 18.3 & 0.2 & -0.4 & -0.4 \\ \text{sym} & & & 1.4 & 0.1 & 0.3 \\ & & & & 0.68 & 0.4 \\ & & & & & 21.6 \end{pmatrix} [\text{GPa}], \quad (1)$$

exprimé en notation de Voigt où  $C_{66}^T = C_{1212}^T$ . Pour étudier le comportement de ce matériau, des essais de chargements cycliques en compression simple ont été effectués au CEA Le Ripault. Ces expérimentations montrent un comportement d'adoucissement de la courbe de contrainte-déformation. L'une des explications possibles de ce comportement est la création ou la propagation de microfissures dans le matériau. L'objectif de cette thèse est de simuler les phénomènes liés à la micro-fissuration se produisant dans le matériau. Pour ce faire, nous allons utiliser l'homogénéisation en champs complets par méthode FFT. Cette méthode a déjà été utilisée par [12] pour étudier l'effet d'une population de fissures ouvertes, inter ou transgranulaires, dans le cas de chargements thermique et mécanique. Nous proposons d'étendre cette méthode à l'étude de la nucléation et de la propagation de fissures, simulée à l'aide d'une méthode par champ de phase. A terme, cette méthode nous permettra d'observer l'influence de la microstructure (liant, porosité, anisotropie) sur son comportement macroscopique.

## 3 Modélisation de la fissuration dans un milieu élastique

Le modèle d'endommagement choisi dans cette étude s'appuie sur le principe variationnel développé dans le cadre du comportement fragile par Francfort et Marigo [10] :

$$(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \Gamma) = \underset{\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathcal{K}, \Gamma \subset \Omega}{\operatorname{arginf}} \{E(\boldsymbol{\varepsilon}, \Gamma)\}, \quad E(\boldsymbol{\varepsilon}, \Gamma) = \int_{\Omega} W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} + g_c \int_{\Gamma} d\mathbf{x}, \quad W(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{x}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (2)$$

où  $\mathcal{K} = \{\boldsymbol{\varepsilon}; \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\Omega} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{\varepsilon} = (\operatorname{grad} \mathbf{u})_{\text{sym}}\}$  est l'espace des champs de déformation admissibles,  $\mathbf{u}$  est le champ de déplacement,  $W$  l'énergie élastique,  $g_c$  est la ténacité,  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  est un champ de déformation appliqué et  $\mathbb{C}(\mathbf{x})$  est le tenseur de rigidité de la phase en  $\mathbf{x}$ . La minimisation est effectuée sur l'ensemble des surfaces incluses dans le domaine d'intérêt  $\Omega$ . Le caractère croissant (au sens de l'inclusion) de la surface  $\Gamma$  assure l'irréversibilité du processus. Pour résoudre cette équation, on considère la formulation approchée de Bourdin et al. [6] et étendue par Miehe et al. [17] :

$$(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x})) = \underset{\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathcal{K}}{\operatorname{arginf}} \{E'(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi)\}, \quad E'(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi) = \int_{\Omega} (1 - \phi)^2 W(\boldsymbol{\varepsilon}) d\mathbf{x} + g_c \int_{\Omega} \left( \frac{\phi^2}{2\ell} + \frac{\ell}{2} \nabla \phi \cdot \nabla \phi \right) d\mathbf{x}, \quad (3)$$

où  $\mathbf{n}$  est la normale au bord du domaine  $\partial\Omega$  et  $\phi(\mathbf{x})$  représente un champ d'endommagement, nul pour un matériau sain et valant 1 pour un matériau complètement endommagé. Le champ de phase est de plus pris croissant en tout point du matériau au cours de la sollicitation. Cette seconde formulation

permet de régulariser l'écriture de l'énergie totale en transformant l'intégrale de surface en intégrale de volume sur tout le domaine. En contrepartie, la surface de fissuration est un champ diffus dont l'épaisseur est de l'ordre de  $\ell$ . En principe, ce nouveau paramètre doit être choisi grand devant la taille du maillage (ou du voxel) et petit devant les longueurs caractéristiques de la microstructure. En prenant la dérivée variationnelle de cette équation par rapport à  $\phi(\mathbf{x})$ , on obtient les équations suivantes :

$$\ell^2 \operatorname{div}(g_c \operatorname{grad} \phi(\mathbf{x}; t)) + 2\ell [1 - \phi(\mathbf{x}; t)] \mathcal{H}(\mathbf{x}; t) - g_c \phi(\mathbf{x}; t) = 0, \quad \mathcal{H}(\mathbf{x}; t) = \max_{0 \leq s < t} W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}; s)), \quad (4)$$

avec la condition aux bords  $\nabla \phi \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0$ , à l'instant  $t \geq 0$ , pour un chargement  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$ . La solution de ce problème dépend de l'histoire du matériau à travers l'énergie  $\mathcal{H}$  qui est strictement croissante. Dans la suite de ce résumé, on omet d'indiquer la dépendance en  $t$  et on note simplement  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$  et  $\phi(\mathbf{x})$  pour  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}; t)$  et  $\phi(\mathbf{x}; t)$ . En prenant la dérivée variationnelle de (3) par rapport à  $\mathbf{u}$  on trouve :

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 0, \quad (5)$$

où  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = [1 - \phi(\mathbf{x})]^2 \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$  est le tenseur des contraintes.

## 4 Méthodes de Fourier pour l'initiation et la propagation de fissures

### 4.1 Discrétisation et schéma numérique

On souhaite résoudre de manière incrémentale le problème (4, 5) dans  $\Omega$  par "méthode FFT" [19] avec conditions aux bords périodiques et chargement en déformation  $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ . Le trajet de déformation est monotone croissant ou décroissant et s'écrit  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = t_i \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0$  avec  $t_0 = 0$ ,  $|t_{i+1} - t_i| = \Delta t$ , le signe de  $t_{i+1} - t_i$  pouvant varier. On définit également  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \Delta t \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^0 = t \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^0$ .

À champ de phase  $\phi(\mathbf{x})$  fixé, l'équation (5) est résolue à l'aide de la méthode employée habituellement en élasticité linéaire, en choisissant comme tenseur d'élasticité  $[1 - \phi(\mathbf{x})]^2 \mathbb{C}$ . On utilise le "schéma direct" [19] avec discrétisation de l'opérateur de Green sur une grille tournée [26] et on considère comme critère de convergence :

$$\int_{\Omega} d\mathbf{x} |\boldsymbol{\varepsilon}^{k+1}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^k(\mathbf{x})| \leq \eta_1, \quad (6)$$

$\boldsymbol{\varepsilon}^k$  étant le champ de déformation à l'itération  $k$ , avec  $\eta_1$  petit. On choisit comme tenseur élastique de référence  $1.01\mathbb{C}$  (voir [26]). Dans le cas où  $\mathbb{C}$  est anisotrope, on prendra le tenseur élastique de référence isotrope  $1.01\langle \mathbb{C} \rangle_{\mathcal{O}}$  obtenu à partir de moyennes sur des orientations uniformes  $\mathcal{O}$  en 3D.

On cherche de plus à résoudre l'équation (4) pour un champ de déformation  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$  et un endommagement  $\mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon})$  donnés, sur une grille régulière. Cette équation étant linéaire en  $\phi$ , on utilise une méthode par gradient conjugué après avoir discrétisé les opérateurs différentiels par :

$$\operatorname{div}(g_c \operatorname{grad} \phi(\mathbf{x})) = g_c \Delta \phi(\mathbf{x}) \approx \frac{g_c}{h^2} \sum_i [\phi(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) + \phi(\mathbf{x} - h\mathbf{e}_i) - 2\phi(\mathbf{x})], \quad (7)$$

$h$  étant la taille d'un voxel,  $(\mathbf{e}_i)_{i=1,\dots,d}$  étant un repère Cartésien aligné avec les directions de la grille de voxels et  $d = 2$  ou  $3$  étant la dimension. Le problème est mis sous la forme  $A \cdot \phi = b$  ( $\phi$  et  $b$  étant vus comme des vecteurs et  $A$  une matrice), la méthode nécessitant seulement de pouvoir calculer  $A \cdot \phi$  pour tout champ  $\phi$ . On utilise  $\|b - A \cdot \phi\| \leq \eta_2$  comme critère d'erreur,  $\|\cdot\|$  étant la norme 2 et  $\eta_2$  un petit paramètre.

La minimisation de l'énergie totale implique ainsi la résolution de deux problèmes : le problème en déformation et le problème en champ de phase. Ces deux problèmes sont couplés, le champ d'endommagement étant calculé à partir du champ de déformation et vice versa. On considère dans la suite de ce travail deux schémas numériques, appelés "implicite" et "séquentiel" illustrés par la figure 1. Dans le premier, on résout de manière itérative les problèmes en déformation et en champ de phase jusqu'à obtenir convergence simultanée des deux champs. On utilise comme critère de convergence la norme  $L_1$  :

$$\int_{\Omega} d\mathbf{x} |\phi^{k+1}(\mathbf{x}) - \phi^k(\mathbf{x})| \leq \eta_3, \quad (8)$$

où  $\phi^k$  est le champ de phase solution de l'algorithme par gradient conjugué à l'itération  $k$ , et  $\eta_3$  est un petit paramètre. Dans le schéma "séquentiel", on se contente de résoudre à chaque pas de chargement le champ de déformation  $\varepsilon$  puis le champ de phase  $\phi$  et on utilise un pas de chargement  $\Delta t$  faible. Pour chaque simulation, on doit donc choisir, en plus de la microstructure, des propriétés matériaux, et de la sollicitation appliquée, les critères d'erreur  $\eta_{1,2,3}$  pour le schéma implicite et  $\eta_{1,2}$  pour le schéma séquentiel, le pas de chargement  $\Delta t$ , la longueur  $\ell$  et enfin la taille du voxel  $h$  ou de manière équivalente le nombre de voxels  $L$  dans chaque direction.

## 4.2 Validation

On souhaite dans un premier temps effectuer une comparaison avec les résultats éléments finis issus de [17] pour un milieu homogène isotrope. On considère un milieu périodique entaillé en déformation plane avec bord libres, dans un repère Cartésien  $(e_x, e_y, e_z)$ , avec  $\bar{\varepsilon}_{xz} = \bar{\varepsilon}_{yz} = \bar{\varepsilon}_{zz} \equiv 0$ . La taille de la cellule élémentaire du milieu périodique est de 1 mm, discrétisée sur une grille de  $L^2 = 140 \times 140$  pixels. Celle-ci présente une entaille de longueur 0.5 mm, et est soumise à un chargement en mode I de sorte que  $\bar{\sigma}_{xx} > 0$ , et  $\sigma \cdot \mathbf{n} = 0$  sur les faces de la cellule parallèle à  $e_x$  et de normale  $\mathbf{n} = \pm e_y$ . Pour appliquer ces conditions de bord libre, on insère dans la cellule élémentaire une phase poreuse d'épaisseur 2 voxels parallèle à  $e_x$  selon la méthode explicitée dans [11]. L'entaille, de longueur 0.5 mm et orientée parallèlement à l'axe  $e_y$ , est modélisée par une rangée de  $L/2 = 70$  pixels vides, dans lesquels  $\mathbb{C}(\mathbf{x}) = 0$ . L'entaille touche à l'une de ses extrémités le bord de la cellule périodique.

On applique la méthode FFT explicitée ci-dessus avec  $\mathbb{C}$  dans le reste du domaine isotrope. Les données matériaux sont  $\lambda = 121,15 \text{ KN mm}^{-2}$  et  $\mu = 80,77 \text{ KN mm}^{-2}$  pour les paramètres de Lamé et module de cisaillement et  $g_c = 2.7 \cdot 10^{-3} \text{ J m}^{-2}$  pour la ténacité du milieu sain. Ce problème est utilisé comme cas test par Miehe et al. [17] qui proposent pour le résoudre différents schémas éléments finis, dont un qui se rapproche de l'algorithme "séquentiel" que nous utilisons. Dans le cadre de la méthode FFT, on choisit  $\ell = h$ ,  $\eta_1 = 10^{-7}$ ,  $\eta_2 = 10^{-8}$ ,  $\eta_3 = 5 \cdot 10^{-7}$  et  $\Delta \bar{\varepsilon}_{11}^0 = 10^{-6}$  ( $\Delta \bar{\varepsilon}_{11}^0 = 2 \cdot 10^{-7}$  pour le second séquentiel). À l'inverse des méthodes éléments finis, nous utilisons un maillage régulier défini par une grille de  $L^2 = 1.96 \cdot 10^5$  pixels.

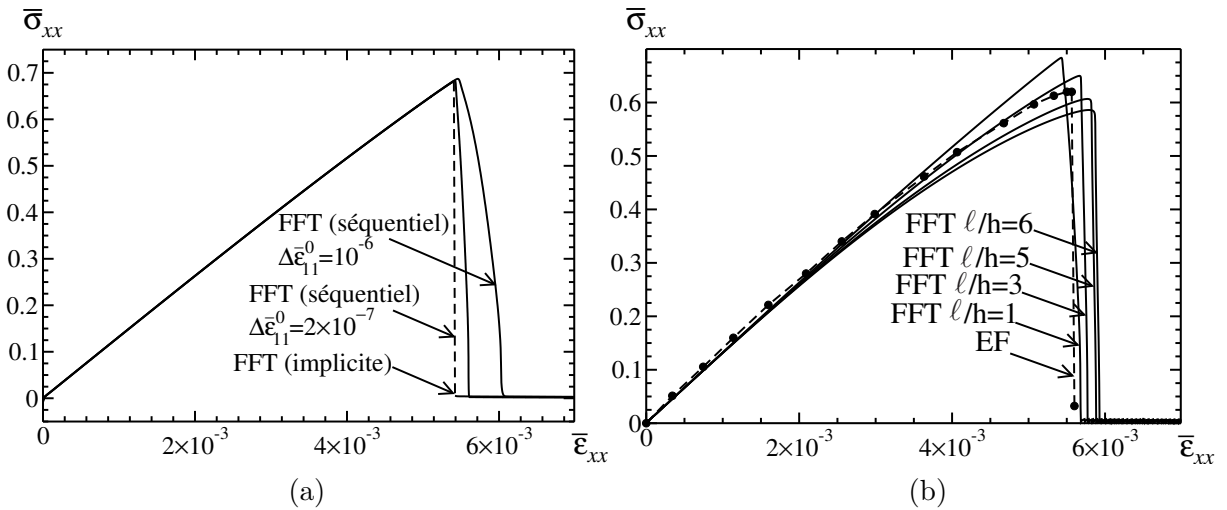


FIGURE 1 – Milieu périodique entaillé en déformation plane, sollicité en mode I, composante  $\bar{\sigma}_{xx}$  du tenseur des contraintes macroscopique en fonction de la déformation macroscopique appliquée  $\bar{\varepsilon}_{xx}$ . (a) Comparaison entre les prédictions des schémas séquentiel, pour deux valeurs du pas de chargement, et implicite, avec  $\ell = h$  dans tous les cas. Il n'y a pas de résultat FFT le long de la courbe en pointillé (schéma implicite). Les courbes se confondent jusqu'à la contrainte max. (b) Comparaison entre les prédictions éléments finis (EF) tirées de [18] et la méthode FFT implicite, pour différents choix de  $\ell$ .

Le comportement macroscopique jusqu'à rupture est donné en Fig. (1). Dans le cas du schéma implicite, la contrainte  $\bar{\sigma}_{xx}$  passe brutalement à zéro lorsque la déformation  $\bar{\varepsilon}_{xx}$  excède une déformation seuil de l'ordre de  $5.5 \cdot 10^{-3}$ , tandis que le schéma séquentiel prédit une rupture moins brutale à partir

de ce même seuil (Fig. 1a). Dans le cas du schéma implicite, aucun calcul FFT ne prédit de point “intermédiaire” lors de la rupture (ligne en pointillé rouge, Fig. 1a). Les prédictions du schéma séquentiel se rapprochent de celles du schéma implicite lorsque le pas de chargement décroît. La Figure (1b) montre le comportement macroscopique prédit par le schéma implicite pour différentes valeurs de  $\ell > 1$ . Le seuil à rupture, de l'ordre de  $5.75 \cdot 10^{-3}$  varie peu lorsque  $\ell$  est choisi entre 2 et 5 et est légèrement supérieur au résultat éléments finis, environ  $5.6 \cdot 10^{-3}$ . Dans le cas des éléments finis, un maillage fin en pointe de fissure est utilisé et l'entaille n'a par ailleurs pas d'épaisseur. Par ailleurs, les temps de calcul sont de 400 secondes pour le schéma FFT séquentiel et de 600 pour le schéma implicite.

## 5 Application : endommagement dans les milieux anisotropes

### 5.1 Milieu périodique à symétrie quasi-hexagonale

On s'intéresse dans cette partie au cas d'un milieu périodique à symétrie quasi-hexagonale de tenseur de rigidité  $\mathbb{C} = \mathbb{C}^T$  identique à celui du TATB (Eq. 1). On choisit comme ténacité  $g_c = 0,2 \text{ J m}^{-2}$ . Cette valeur est choisie arbitrairement et est différente de la ténacité du TATB, qui dépend en particulier de l'orientation du plan de clivage. La microstructure entaillée de taille  $140 \times 140$  pixels et sa discrétisation est identique à celle utilisée en Sec. (4.2). En revanche, contrairement au cas étudié précédemment, on applique au matériau une déformation uniaxiale  $\bar{\varepsilon}_{xx} > 0$  et on impose  $\bar{\varepsilon}_{yy} = \bar{\varepsilon}_{xy} = 0$ . Pour étudier l'influence des directions cristallographiques sur les seuils à rupture en mode I, on considère trois configurations possibles : (i) le plan basal est orienté dans le plan  $(e_x; e_y)$ , (ii) le plan basal est orienté dans le plan  $(e_y; e_z)$ , et (iii) le plan basal est orienté dans le plan  $(e_x; e_z)$ . Ces trois cas sont schématisés dans les encarts de la Fig. (2).

On choisit un schéma séquentiel avec  $\Delta\bar{\varepsilon}_{11}^0 = 5 \cdot 10^{-5}$ ,  $\eta_1 = 10^{-7}$ ,  $\eta_2 = 10^{-9}$ . Les résultats sont indiqués en Fig. (2). Le seuil de déformation avant initiation de la fissure est le plus grand dans le cas où la fissure se propage le long du plan basal (cas ii), les modules d'Young et de cisaillement hors-plan étant environ 3 fois et 20 fois plus faibles respectivement que les modules d'Young et de cisaillement dans le plan. Les seuils de déformation dans les cas (i) et (iii) sont également différents du fait de la sollicitation imposée, la déformation transverse  $\bar{\varepsilon}_{22}^0$ , dans le plan dans le cas (i) et hors-plan dans le cas (iii), étant nulle. Les résultats obtenus sont cohérents avec les simulations éléments finis entrepris dans le cas de cristaux 2D à symétrie orthotrope [5].

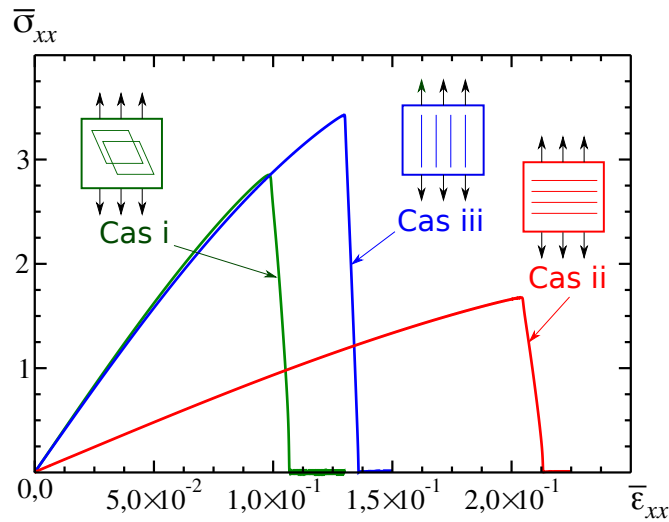


FIGURE 2 – Contrainte de traction  $\sigma_{xx}$  vs. déformation longitudinale  $\varepsilon_{xx}$  dans un cristal homogène avec entaille, avec sollicitation en mode I en déformation plane, pour trois orientations différentes de l'entaille par rapport aux axes de symétrie de la maille cristalline.

## 5.2 Polycristal

On considère une microstructure de Voronoi (Fig. 3a) avec une orientation aléatoire des 500 grains discrétisée sur une grille de  $500^2$  pixels. On ne prend pas en compte la présence de liant aux joints de grains et les interfaces entre les grains sont supposées parfaites. Le polycristal ne présente aucun défaut préexistant, l'initiation de la fissure résultant de l'hétérogénéité des contraintes dans le matériau. On utilise comme en Sec. (5.1) un schéma de résolution explicite avec  $\ell/h = 2$ , et on choisit  $\mathbb{C} = \mathbb{C}^T$  à une rotation aléatoire près dans chaque grain. On fixe la ténacité à  $g_c = 0,12 \text{ Jm}^{-2}$ . Cette valeur est arbitraire et ne correspond pas à la ténacité du cristal de TATB, qui dépend en particulier de l'orientation de la fissure. On impose par ailleurs une déformation uniaxiale avec un pas de chargement  $\Delta \bar{\varepsilon}_{11}^0 = 5 \cdot 10^{-5}$  et on choisit  $\eta_1 = 10^{-7}$ ,  $\eta_2 = \eta_3 = 10^{-8}$ . La nucléation de la fissure intervient lorsque  $\bar{\varepsilon}_{xx}^0 \approx 9.1\%$  (Fig. 3b), au niveau d'un joint triple. La fissure se propage de façon transgranulaire (c-f), avec apparition d'une fissure secondaire (Fig. 3d), dont la croissance s'arrête après un chargement de l'ordre de  $\bar{\varepsilon}_{xx}^0 \approx 9.75\%$ . La fissure se propage dans le matériau jusqu'à rupture (Fig. 3f) avec  $\bar{\sigma}_{xx} \approx 0$ .

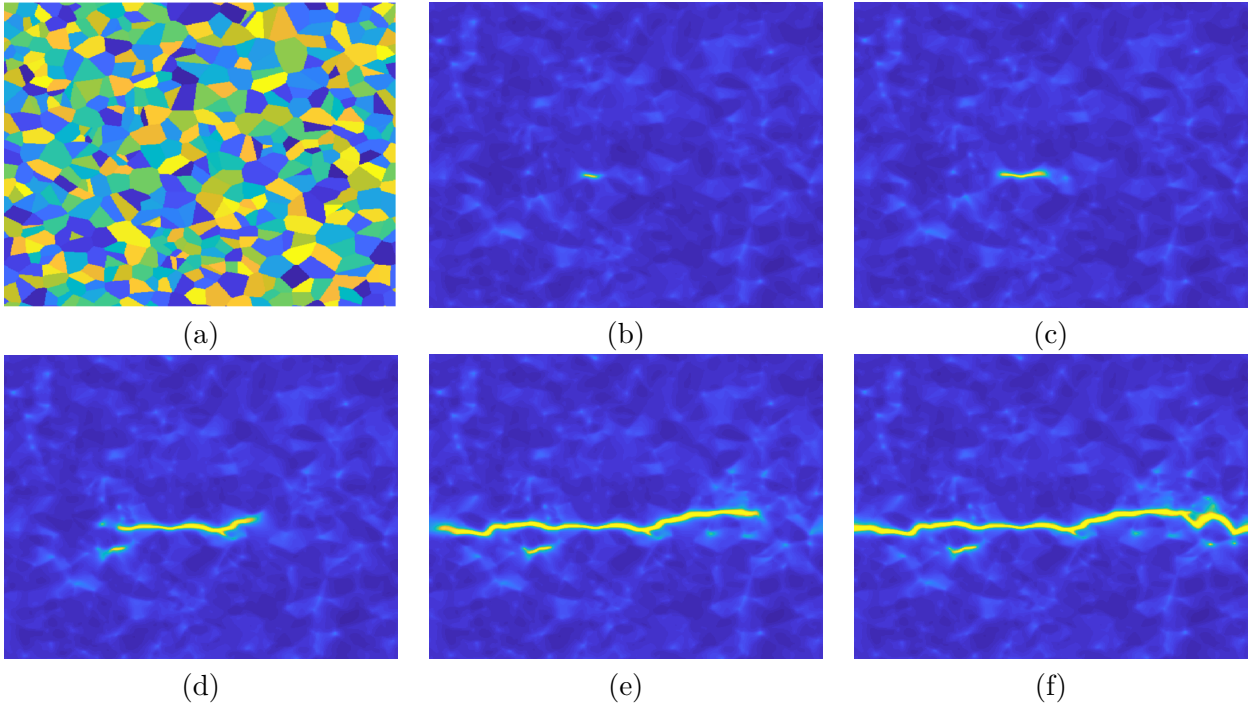


FIGURE 3 – Propagation de fissures dans un polycristal de Voronoi (a) sollicitée en déformation uniaxiale : cartes du champ de phase  $\phi(\mathbf{x})$  pour un chargement macroscopique croissant  $\bar{\varepsilon}_{11}^0 = 9.1, 9.25, 9.5, 9.75, 10\%$  (b-f, resp.). Bleu :  $\phi(\mathbf{x}) = 0$ ; jaune :  $\phi(\mathbf{x}) = 1$ .

## 5.3 Effet unilatéral

Afin de simuler des essais en sollicitations alternées, on implémente dans cette partie une loi de comportement locale prenant en compte l'effet unilatéral des fissures [17] :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^-(\mathbf{x}) + [1 - \phi(\mathbf{x})]^2 \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^+(\mathbf{x}), \quad \boldsymbol{\varepsilon}^\pm(\mathbf{x}) = \mathbf{P}^\pm : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \quad (9)$$

où  $\mathbf{P}^\pm = \mathbf{P}^\pm(\boldsymbol{\varepsilon})$  sont les projecteurs sur l'espace des tenseurs définis positifs et négatifs, et qui s'écrivent, à partir de la décomposition de  $\boldsymbol{\varepsilon}$  en composantes principales :

$$\mathbf{P}^\pm = \sum_{\alpha} \theta(\pm \lambda^{\alpha}) \mathbf{n}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}^{\alpha}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{\alpha} \lambda^{\alpha} \mathbf{n}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}^{\alpha}, \quad (10)$$

$\lambda^{\alpha}$  étant les valeurs propres de  $\boldsymbol{\varepsilon}$ ,  $\mathbf{n}^{\alpha}$  les directions propres associées, et  $\theta(\cdot) = \max(0, \cdot)$  la fonction de Heaviside. On a toujours  $\boldsymbol{\varepsilon}^- + \boldsymbol{\varepsilon}^+ = \boldsymbol{\varepsilon}$ , la fissure transmettant des contraintes dans les directions de sollicitations associées à des déformations en compression ( $\lambda^{\alpha} < 0$ ). Une illustration de l'effet

unilatéral est proposée en Fig. (4) pour un milieu isotrope de module élastiques  $\lambda = 121,15\text{KNmm}^{-2}$  et  $\mu = 80,77\text{KNmm}^{-2}$ , de taille  $50 \times 50$  pixels, en déformation plane. On simule par méthode FFT des conditions de bord libre à l'aide d'une phase de vide fictive sur les bords comme indiqué dans [11]. L'effet Poisson induit un mode d'ouverture en compression (Fig. 4b). Dans le cas d'un chargement en compression ( $\bar{\sigma}_{xx} < 0$ ) avec fissure parallèle à  $e_y$ , la fissure se ferme et le champ est homogène (non indiqué sur la figure).

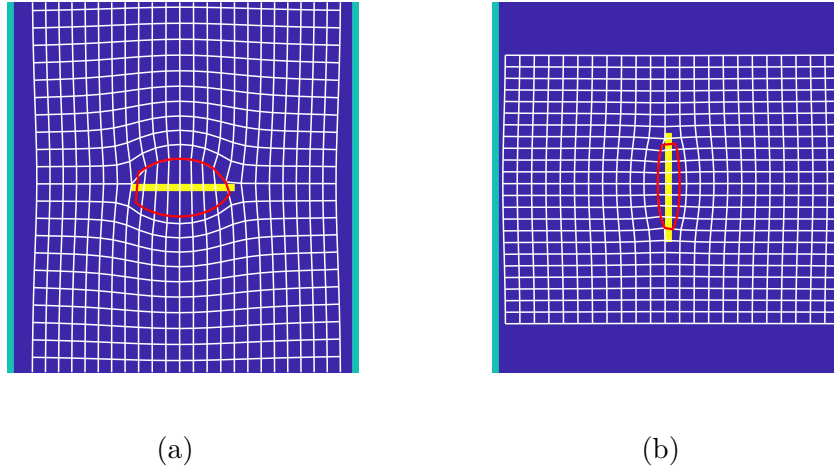


FIGURE 4 – Mode d'ouverture d'une fissure sollicitée en traction ( $\bar{\sigma}_{xx} > 0$ , a) et en compression ( $\bar{\sigma}_{xx} < 0$ , b) dans la direction  $e_x$ , verticale sur l'image. En blanc : déformation de la grille de voxels ; en rouge : déformation des lèvres de la fissure. Les conditions de bord libre sont simulées à l'aide de pixels de vide (zones en bleu ciel à droite et à gauche).

On applique maintenant la méthode FFT avec schéma explicite à une éprouvette entaillée et sollicitée en mode I en déformation plane. La surface de l'éprouvette est de  $1\text{mm}^2$ , discrétisée sur une grille de  $200^2$  pixels et entaillée sur une rangée de 100 pixels. Les modules élastiques sont  $\lambda = 121,15\text{KNmm}^{-2}$  et  $\mu = 80,77\text{KNmm}^{-2}$  et la ténacité vaut  $g_c = 3,5 \cdot 10^3 \text{ Jm}^{-2}$ , et on choisit  $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = 10^{-7}$ ,  $\ell/h = 2$ . On impose des bords libres sur les faces parallèles à  $e_x$  et une déformation uniaxiale  $\bar{\varepsilon}_{xx}$  de telle sorte que l'éprouvette est sollicitée en traction ( $\bar{\sigma}_{xx} > 0$ ,  $\bar{\sigma}_{yy} = 0$ ). Dans un premier temps, la déformation uniaxiale  $\bar{\varepsilon}_{xx}$  croît ( $\Delta\bar{\varepsilon}_{xx}^0 > 0$ ) jusqu'à initiation de la fissuration, puis la déformation imposée est progressivement ramenée à zéro ( $\Delta\bar{\varepsilon}_{xx}^0 < 0$ ,  $\bar{\varepsilon}_{xx} > 0$ ). Dans un second temps, l'éprouvette est sollicitée en compression ( $\bar{\varepsilon}_{xx} < 0$ ). La rigidité du matériau a été restaurée sur la phase de compression (Fig. 5).

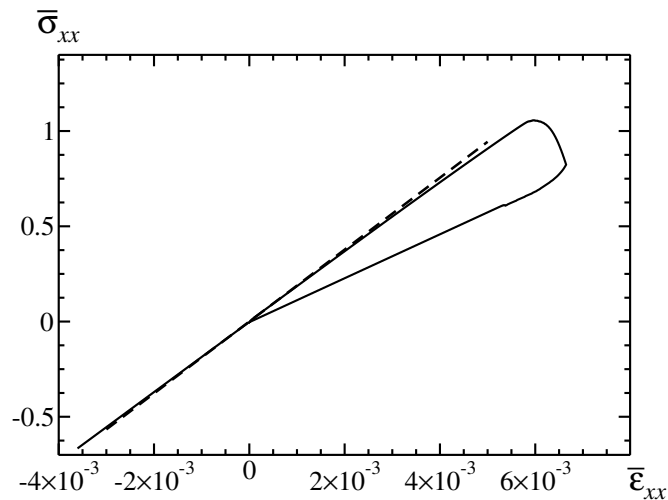


FIGURE 5 – Contrainte de traction  $\bar{\sigma}_{xx}$  vs. déformation uniaxiale imposée  $\bar{\varepsilon}_{xx}$  : cycle de traction-compression dans un milieu isotrope entaillé. Ligne pointillée : tangente à l'origine.

## 6 Conclusion

Dans ce travail, une méthode numérique de simulation de l'initiation et de la propagation de fissure par champ de phase dans les milieux hétérogènes est proposée. Celle-ci repose sur un algorithme FFT traitant séparément le problème en déformation et le problème en champ de phase, et résolu de manière "implicite" ou "séquentielle", les propriétés de convergence étant alors contrôlées par deux ou trois paramètres de convergence. La méthode a été validée par comparaison à des calculs éléments finis dans le cas de déformation plane, et nous présentons une première application à la simulation de l'endommagement dans un polycristal 2D, en traction. On décrit également une implémentation de la méthode permettant de prendre en compte l'effet unilatéral des fissures dans le cas de chargement cycliques ou alternés.

## Références

- [1] M. Ambati, T. Gerasimov, and L. De Lorenzis. A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation. *Computational Mechanics*, 55(2) :383–405, 2015.
- [2] A. Ambos, H. Trumel, F. Willot, D. Jeulin, and M. Biessy. A fast Fourier transform micromechanical upscaling method for the study of the thermal expansion of a TATB-based pressed explosive. In *Proceedings of the 15<sup>th</sup> International Detonation Symposium, San Francisco, CA, July 13-18, 2014*. Online at <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-1097110>.
- [3] A. Ambos, F. Willot, D. Jeulin, and H. Trumel. Numerical modeling of the thermal expansion of an energetic material. *International Journal of Solids and Structures*, 60–61 :125–139, 2015.
- [4] D. Bedrov, O. Borodin, G. D. Smith, T. D. Sewell, D. M. Dattelbaum, and L. L. Stevens. A molecular dynamics simulation study of crystalline 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene as a function of pressure and temperature. *Journal of Chemical Physics*, 131 :224703, 2009.
- [5] J. Bleyer and R. Alessi. Phase-field modeling of anisotropic brittle fracture including several damage mechanisms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 336 :213–236, 2018.
- [6] B. Bourdin, G. A. Francfort, and J. Marigo. The variational approach to fracture. *Journal of elasticity*, 91(1-3) :5–148, 2008.
- [7] B. Bourdin, G. A. Francfort, and J.-J. Marigo. Numerical experiments in revisited brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(4) :797–826, 2000.
- [8] J. D. Clayton and J. Knap. Phase field modeling of directional fracture in anisotropic polycrystals. *Computational Materials Science*, 98 :158–169, 2015.
- [9] F. Dunant, C., B. Bary, B. Giorla, A., C. Péniguel, J. Sanahuja, C. Toulemonde, B. Tran, A., F. Willot, and J. Yvonnet. A critical comparison of several numerical methods for computing effective properties of highly heterogeneous materials. *Advances in Engineering Software*, 58 :1–12, 2013.
- [10] G. A. Francfort and J.-J. Marigo. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(8) :1319–1342, 1998.
- [11] J.-B. Gasnier, F. Willot, H. Trumel, D. Jeulin, and J. Besson. Thermoelastic properties of microcracked polycrystals. Part I : Adequacy of Fourier-based methods for cracked elastic bodies. *International Journal of Solids and Structures*, 155 :248–256, 2018.
- [12] J.-B. Gasnier, F. Willot, H. Trumel, D. Jeulin, and M. Bessy. Thermoelastic properties of microcracked polycrystals. Part II : The case of jointed polycrystalline TATB. *International Journal of Solids and Structures*, 155 :257–274, 2018.
- [13] A. A. Griffith. The phenomena of rupture and flow in solids. *Philosophical transactions of the royal society of london. Series A, containing papers of a mathematical or physical character*, 221(582-593) :163–198, 1921.
- [14] V. Hakim and A. Karma. Laws of crack motion and phase-field models of fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(2) :342–368, 2009.



- [15] C. Kuhn and R. Müller. A continuum phase field model for fracture. *Engineering Fracture Mechanics*, 77(18) :3625–3634, 2010.
- [16] B. Li, C. Peco, D. Millán, I. Arias, and M. Arroyo. Phase-field modeling and simulation of fracture in brittle materials with strongly anisotropic surface energy. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 102(3-4) :711–727, 2015.
- [17] C. Miehe, M. Hofacker, and F. Welschinger. A phase field model for rate-independent crack propagation : Robust algorithmic implementation based on operator splits. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(45-48) :2765–2778, 2010.
- [18] C. Miehe, F. Welschinger, and M. Hofacker. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture : Variational principles and multi-field fe implementations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83(10) :1273–1311, 2010.
- [19] H. Moulinec and P. Suquet. A fast numerical method for computing the linear and non linear mechanical properties of the composites. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences Série II*, 318 :1417–1423, 1994.
- [20] T. Nguyen, J. Yvonnet, M. Bornert, C. Chateau, K. Sab, R. Romani, and R. Le Roy. On the choice of parameters in the phase field method for simulating crack initiation with experimental validation. *International Journal of Fracture*, 197(2) :213–226, 2016.
- [21] T. Nguyen, J. Yvonnet, Q. Zhu, M. Bornert, and C. Chateau. A phase field method to simulate crack nucleation and propagation in strongly heterogeneous materials from direct imaging of their microstructure. *Engineering Fracture Mechanics*, 139 :18–39, 2015.
- [22] T.-T. Nguyen, J. Rethore, J. Yvonnet, and M.-C. Baietto. Multi-phase-field modeling of anisotropic crack propagation for polycrystalline materials. *Computational Mechanics*, 60(2) :289–314, 2017.
- [23] P. Shanthraj, L. Sharma, B. Svendsen, F. Roters, and D. Raabe. A phase field model for damage in elasto-viscoplastic materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312 :167–185, 2016.
- [24] E. Tanné, T. Li, B. Bourdin, J. Marigo, and C. Maurini. Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 110 :80–99, 2018.
- [25] S. Wen. *Identification expérimentale de modèles de zones cohésives à partir de techniques d’imagerie thermomécanique*. PhD thesis, Université Montpellier II-Sciences et Techniques du Languedoc, 2012.
- [26] F. Willot. Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *Comptes Rendus Mécanique*, 343(3) :232–245, 2015.
- [27] F. Willot, B. Abdallah, and Y.-P. Pellegrini. Fourier-based schemes with modified green operator for computing the electrical response of heterogeneous media with accurate local fields. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 98(7) :518–533, 2014.
- [28] J. Yvonnet, T. T. Nguyen, M. Bornert, and C. Chateau. Fissuration dans les microstructures de matériaux cimentaires : outils de simulation par la méthode de champ de phase. In *Colloque national MECAMAT Aussois «Matériaux Numériques»*, 2018.