



HAL
open science

Prédiction de la microfissuration par champ de phase et méthode FFT pour les matériaux énergétiques comprimés

François Rabette

► **To cite this version:**

François Rabette. Prédiction de la microfissuration par champ de phase et méthode FFT pour les matériaux énergétiques comprimés. Physique [physics]. Université Paris sciences et lettres, 2021. Français. NNT : 2021UPSLM009 . tel-03354946

HAL Id: tel-03354946

<https://pastel.hal.science/tel-03354946v1>

Submitted on 27 Sep 2021

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.

THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PSL

Préparée à MINES ParisTech

Prédiction de la microfissuration par champ de phase et méthode FFT pour les matériaux énergétiques comprimés.

Soutenue par

François RABETTE

Le 26 mars 2021

École doctorale n°621

ISMME

Spécialité

Morphologie mathématique

Composition du jury :

Yann Monerie Professeur des universités, Université Montpellier	<i>Président</i>
Julien Réthoré Directeur de recherche au CNRS, École Centrale de Nantes	<i>Rapporteur</i>
Lionel Gélébart Ingénieur chercheur, CEA Paris-Saclay	<i>Rapporteur</i>
Dominique Leguillon Directeur de recherche au CNRS émérite	<i>Examineur</i>
Jacques Besson Directeur de recherche au CNRS, MINES Paristech	<i>Examineur</i>
Sophie Dartois Maître de Conférences, Université Pierre et Marie Curie	<i>Examinatrice</i>
François Willot Chargé de recherche, MINES Paristech	<i>Directeur de thèse</i>
Hervé Trumel Directeur de recherche, CEA Le Ripault	<i>Co-directeur de thèse</i>

Table des matières

1	Introduction	5
1.1	Contexte	5
1.1.1	Les matériaux énergétiques	5
1.1.2	Comportement thermomécanique	6
1.1.3	Point de vue microstructural	10
1.2	Modélisation multi-échelles	11
1.2.1	Modélisation des constituants	12
1.2.2	Modélisation des microstructures	13
1.2.3	Représentativité	14
1.2.4	Modélisations en champs moyens	14
1.2.5	Modélisations en champs complets	16
1.3	Objectifs de la thèse et méthodologie	18
1.3.1	Travaux antérieurs	19
1.3.2	Objectifs de la thèse	21
1.3.3	Méthodologie et plan du mémoire	22
2	Le matériau d'étude	25
2.1	Procédé de fabrication	25
2.2	Microstructure	25
2.3	Comportement des constituants	27
2.3.1	Le cristal de TATB	28
2.3.2	Le liant	31
2.4	Comportement du composite	34
2.4.1	Comportement en compression et en traction	34
2.4.2	Comportement en compression hydrostatique	35
2.4.3	Comportement en dilatation thermique	36
3	Modélisation de la rupture	41
3.1	Introduction	41
3.2	Choix de l'approche de modélisation	42
3.3	Modélisation par champ de phase	43
3.3.1	Le modèle de Griffith	43
3.3.2	Le modèle variationnel de Francfort et Marigo	44

3.3.3	Régularisation du problème de minimisation	45
3.3.4	Représentation régularisée des fissures	46
3.3.5	Minimisation de l'énergie potentielle	47
3.3.6	Un premier modèle	49
3.3.7	Le modèle « standard »	50
3.4	État de l'art	51
3.4.1	La fonction d'adoucissement g	52
3.4.2	La densité de surface de fissure	55
3.4.3	Contrainte maximale, seuil et longueur interne	57
3.4.4	Contact unilatéral	59
3.4.5	Anisotropie	66
3.4.6	Thermoélasticité et autres couplages	68
3.4.7	Compléments	69
3.4.8	Validations	86
3.4.9	Applications	93
3.5	Le modèle retenu	98
3.5.1	Choix du modèle	98
3.5.2	Le modèle de Nguyen et al.	98
4	Méthode FFT pour la rupture	101
4.1	Problème à résoudre	101
4.2	Schéma numérique	103
4.2.1	Principe de la méthode FFT	103
4.2.2	Résolution du problème en champ de phase	105
4.3	Validation	108
4.3.1	Effet unilatéral	108
4.3.2	Milieu homogène entaillé	109
4.4	Prise en compte de l'anisotropie élastique	111
4.4.1	Milieu périodique à symétrie quasi-hexagonale	111
4.4.2	Polycristal	113
4.4.3	Conclusion	113
5	Étude paramétrique	117
5.1	Microfissuration transgranulaire	117
5.1.1	Étude d'un cas	117
5.1.2	Étude paramétrique	125
5.1.3	Bilan	138
5.2	Microfissuration intergranulaire	139
5.2.1	Méthodologie	139
5.2.2	Épaisseur d'interphase et résolution	139
5.2.3	Critère de convergence en déformation	140
5.2.4	Paramètre de régularisation k	142
5.2.5	Variabilité statistique	146
5.3	Mise en œuvre simultanée des deux mécanismes	146

6	Volumes élémentaires représentatifs	149
6.1	Introduction	149
6.2	Microfissuration transgranulaire	151
6.2.1	Résultats de simulation	151
6.2.2	Étude du champ de microfissures	152
6.2.3	Volume élémentaire représentatif	156
6.2.4	Distributions	159
6.3	Microfissuration intergranulaire	162
6.3.1	Résultats de simulation	162
6.3.2	Volume élémentaire représentatif	165
6.3.3	Distributions	167
6.4	Conclusion	168
7	Application au matériau d'étude	173
7.1	Méthodologie	173
7.1.1	Description de la microstructure	173
7.1.2	Propriétés thermoélastiques	174
7.1.3	Propriétés de rupture	176
7.2	Simulations bidimensionnelles	177
7.2.1	Microstructures	177
7.2.2	Identification du paramètre d'interphase	180
7.2.3	Identification des paramètres de ténacité des grains et de l'interphase	181
7.2.4	Influence de la microstructure	181
7.3	Simulations tridimensionnelles	186
7.3.1	Rôle de la microstructure	186
7.3.2	Rôle des défauts	188
8	Conclusion et perspectives	193
8.1	Prise en compte de la plasticité	193
8.1.1	Modèle de plasticité et microstructure	193
8.1.2	Cas des basses températures	194
8.1.3	Cas des températures supérieures à l'ambiante	195
8.2	La compression	198
8.2.1	Compression simple	198
8.2.2	Compression confinée	200
8.2.3	Prise en compte de la plasticité	201
8.3	Pistes d'amélioration du modèle	202
8.3.1	Choix de la fonction de densité	203
8.3.2	Anisotropie de ténacité	204
8.3.3	Contact unilatéral et frottement	205
8.3.4	Mixité de modes et sensibilité à la pression	205
8.3.5	Longueur interne et taille des simulations	205
8.4	Extension du domaine d'applicabilité	206

8.4.1	Viscoélasticité	206
8.4.2	Rupture	206
8.4.3	Aspects microstructuraux	206
8.5	Conclusion générale	207
9	Annexes	211
9.1	Tenseur d'élasticité du cristal de TATB	211
9.1.1	Estimation du module de compressibilité	211
9.1.2	Une autre méthode	214
9.1.3	Analyse des données de Plisson et al.	216
9.1.4	Résultats	219
9.2	Tenseur de dilatation thermique du cristal de TATB	220

Chapitre 1

Introduction

On montre que le comportement thermomécanique des explosifs est fortement influencé par la microstructure interne du matériau et qu'il est nécessaire d'adopter une approche multiéchelle pour traiter les différents mécanismes d'endommagement. On rappelle les principaux obstacles et difficultés à surmonter. On décrit ensuite quelques méthodes de type champs moyens utilisées pour traiter ces problèmes. On justifie ensuite l'intérêt d'une modélisation « champ complet », et le choix d'un outil d'homogénéisation numérique par méthode FFT pour étudier la micro-fissuration. Enfin, on expose les principaux objectifs de la thèse, en lien avec les résultats expérimentaux et les études précédentes.

1.1 Contexte

1.1.1 Les matériaux énergétiques

Les matériaux énergétiques solides (explosifs, propergols, poudres) sont avant tout conçus pour produire, à l'instant souhaité, de grandes quantités de gaz chauds, soit quasi-instantanément (détonation des explosifs), soit de façon régulière sous pression constante (combustion des propergols), soit rapidement à volume constant (déflagration des poudres pour armes). Ils existent sous quatre formes principales. Les **poudres pour armes** ont la nitrocellulose pour base, et sont généralement fabriquées par extrusion. Les **explosifs coulés-fondus** sont mis en œuvre par coulée et tirent parti de la propriété du TNT (trinitro-toluène), quasiment unique parmi les matériaux énergétiques, de présenter une phase liquide stable à relativement basse température (80°C).

Les deux autres catégories de matériaux énergétiques solides sont les **propergols solides et explosifs composites** et les **explosifs comprimés**, ces derniers faisant plus particulièrement l'objet de cette thèse. Elles ont en commun d'utiliser un **liant** polymérique, pour assurer leur cohésion. Les

composites sont fabriqués en mélangeant une poudre oxydo-réductrice (souvent un mélange de perchlorate ou de nitrate d'ammonium et d'aluminium), une résine liquide (souvent un polybutadiène à terminaison hydroxy) et un réticulant (souvent un polyol). Le mélange est malaxé, coulé sous vide, puis réticulé à basse température. C'est la technologie de type propergols solides. On obtient ainsi des matériaux isotropes, de caractéristiques mécaniques modestes mais résistants à l'endommagement, et présentant un excellent compromis entre puissance et sécurité d'emploi. Ils peuvent être produits en grandes dimensions et en forts tonnages. Ils équipent notamment les boosters des grands lanceurs spatiaux actuels. Pour être coulables, ils doivent comporter au moins de l'ordre de 15% en volume de liant, ce qui réduit leurs performances énergétiques.

Si l'on souhaite maximiser les performances, il est nécessaire de réduire la fraction volumique de liant. Dans ce cas, la poudre (explosive) est enrobée par le liant (de l'ordre de 5% en volume) en phase liquide, séchée, puis pressée en bain d'huile (pressage isostatique) ou en moule (pressage uniaxial) à haute pression et température modérée. C'est la technologie de type explosif comprimé. On obtient ainsi des matériaux isotropes en pressage isostatique, texturés en pressage uniaxial, alliant caractéristiques mécaniques et puissance, mais qui ne peuvent être produits en grandes dimensions ni en grandes quantités.

Malgré la différence de leurs modes de fabrication, il existe une certaine continuité entre ces deux types de matériaux énergétiques. Etant donné la faible teneur en liant, il est nécessaire, sauf exception, d'optimiser la distribution granulométrique de la poudre. Les microstructures obtenues sont donc assez proches, comme l'illustre la figure 1.1. Les matériaux de type propergols solides, difficiles à polir du fait de la nature caoutchoutique de leur liant, peuvent être imagés par microtomographie X (vue de gauche), tandis que les explosifs comprimés sont difficiles à imager en microtomographie, du fait de leur faible contraste d'absorption, mais peuvent être facilement polis et imagés en microscopie optique (vue de droite) ou électronique.

Les matériaux de type propergols solides présentent généralement très peu de porosité intergranulaire, contrairement aux explosifs comprimés, dont la porosité est le plus souvent de l'ordre de 1 à 3%. Deux explosifs comprimés sont bien documentés dans la littérature spécialisée. Ce sont le PBX 9501, à base de HMX (octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine), l'un des explosifs les plus puissants connus, et le PBX 9502, à base de TATB (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène), moins puissant mais d'une sécurité d'emploi exceptionnelle.

1.1.2 Comportement thermomécanique

La production de gaz chauds ne représente que le stade ultime de la vie de ces matériaux. Depuis leur fabrication, ils sont susceptibles de subir des

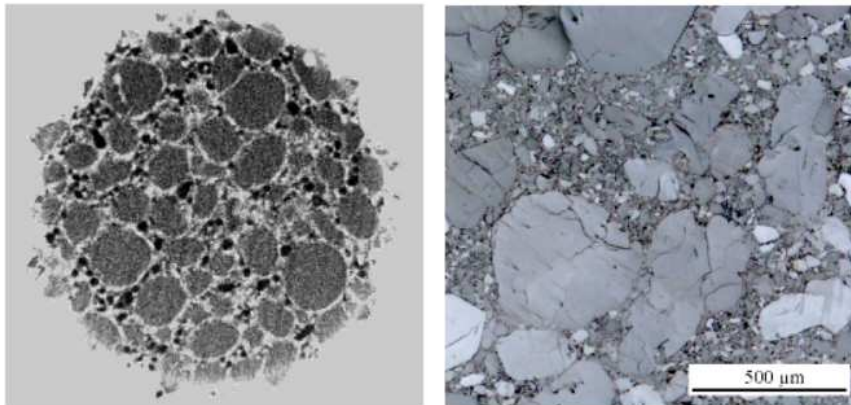


FIGURE 1.1 – Exemples de microstructures de matériaux énergétiques. Vue de gauche : matériau de type propergol solide, imagé par microtomographie X. Les gros grains de perchlorate d’ammonium sont d’environ 200 microns. Les zones noires correspondent aux grains d’aluminium, plus petits (d’après [1]). Vue de droite : explosif comprimé à base de HMX (d’après [2]).

sollicitations thermomécaniques variées, qu’ils doivent supporter sans modifications de leurs propriétés (cas des sollicitations de service), et sans présenter de dangers (cas des sollicitations accidentelles). Garantir ces deux fonctions complémentaires, d’intégrité et de sécurité, suppose de bien connaître et de maîtriser leur réponse à des sollicitations telles que vibrations, cycles thermiques, pressurisation, impacts, incendies, etc. Dans ce qui suit, on se limite aux sollicitations thermomécaniques. On réalise des campagnes expérimentales de caractérisation, paramétrées par la température, la vitesse de déformation, et la triaxialité des contraintes (cette dernière se limitant en général à leur composante hydrostatique).

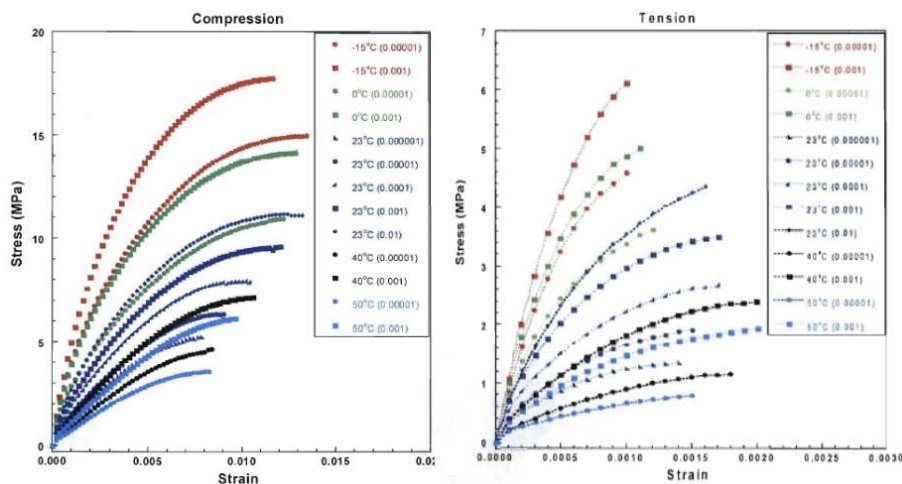


FIGURE 1.2 – Réponse du PBX 9501 en compression (à gauche) et en traction (à droite) uniaxiales quasi-statiques en fonction de la température (d’après [3]).

Les données obtenues montrent systématiquement un comportement complexe, comprenant deux volets principaux. D'une part, ces matériaux sont sensibles à la triaxialité des contraintes. Sous faible triaxialité, c'est-à-dire lorsque la pression hydrostatique reste modérée, ces matériaux s'endommagent et rompent pour des niveaux de contrainte et de déformation modestes (voir par exemple [4–7]). Ce comportement est proche de celui des bétons ou des roches tendres, avec en particulier une résistance bien moindre en traction qu'en compression (uniaxiale). La figure 1.2 illustre le cas du PBX 9501. L'effet de la vitesse de sollicitation, non représenté ici, est l'inverse de celui de la température.

Lorsque la pression hydrostatique croît, l'endommagement est progressivement inhibé, et ils deviennent capables de supporter des niveaux de contraintes beaucoup plus élevés [2, 8]. C'est la transition fragile-ductile. La figure 1.3 illustre les réponses en compression triaxiale quasi-statique du PBX 9501 [3] (vue de gauche), et de l'EDC37 [8], un explosif analogue, contenant un peu plus de liant (vue de droite).

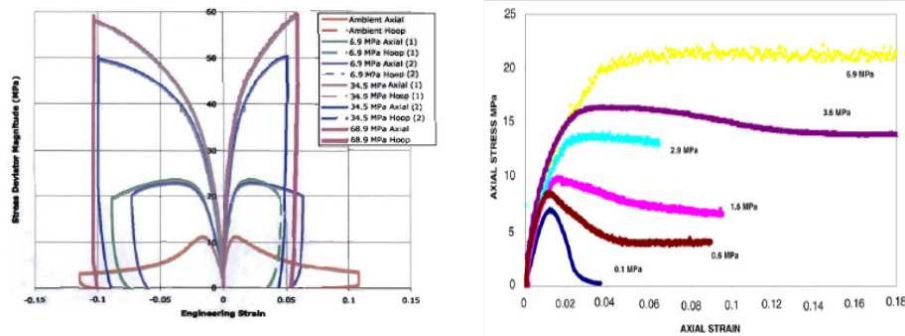


FIGURE 1.3 – Réponse du PBX 9501 (à gauche, d'après [3]) et de l'EDC37 (à droite, d'après [8]) en compression triaxiale quasi-statique.

D'autre part, ces matériaux sont sensibles à la vitesse de sollicitation et à la température, même à de très faibles niveaux de contrainte ou de déformation : c'est le phénomène de viscoélasticité (voir par exemple [9–12]). La figure 1.4 donne les modules de cisaillement réel et imaginaire et la tangente de l'angle de perte du PBX 9501, construits à partir de mesures de DMA, c'est-à-dire à des sollicitations harmoniques de très faible amplitude, à l'aide du principe d'équivalence temps-température [13]. Ces courbes, données en fonction de la température, peuvent également se lire en fonction de l'inverse de la fréquence.

Notons enfin une particularité des explosifs comprimés à base de TATB (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène) dont il sera question dans cette thèse : l'irréversibilité de leur dilatation thermique. De nombreux auteurs (voir notamment [14, 15]) ont montré que, sous l'effet de sollicitations cycliques lentes, ces matériaux voient leur densité décroître jusqu'à une valeur asymptotique qui dépend de la température maximale imposée et de la température

de transition vitreuse du liant. C'est l'effet dit de « ratchet growth ». La figure 1.5 donne un exemple de thermogramme en dilatométrie sur PBX 9502 [15].

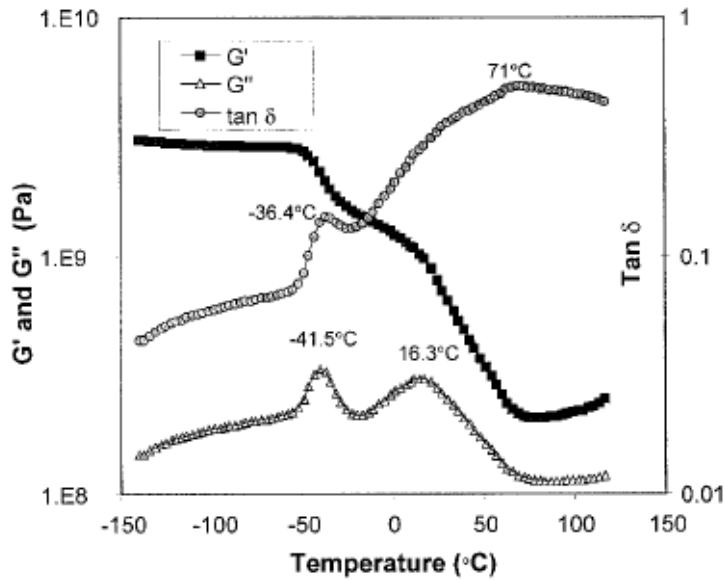


FIGURE 1.4 – Modules de cisaillement réel et imaginaire et tangente de l'angle de perte du PBX 9501 (d'après [9]).

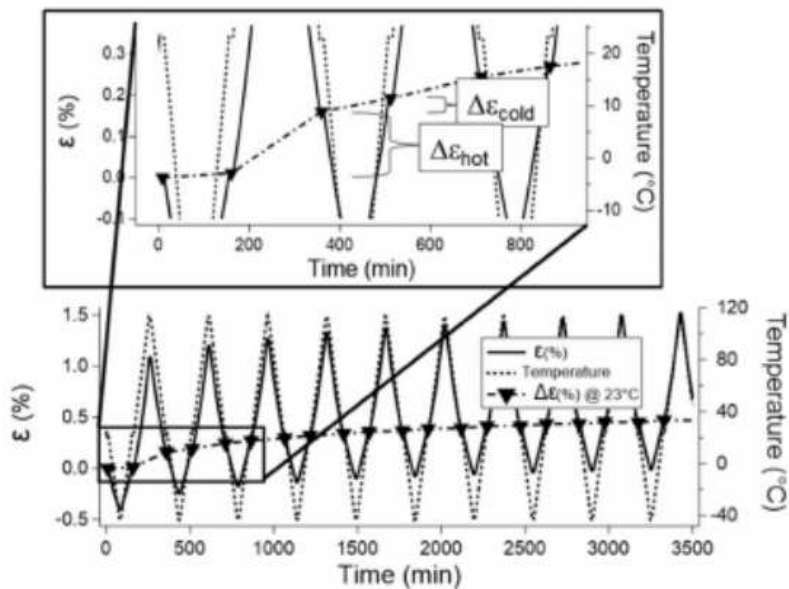


FIGURE 1.5 – Exemple de réponse en dilatométrie pour des sollicitations thermiques cycliques lentes sur PBX 9502 (d'après [15]).

1.1.3 Point de vue microstructural

Les matériaux énergétiques à liant polymère sont des composites qui peuvent être vus plutôt comme des polycristaux jointoyés, pour les très faibles fractions volumiques de liant (cas des explosifs comprimés), ou plutôt comme des polymères fortement chargés, pour les fractions volumiques de liant plus élevées (cas des propergols solides). Les effets viscoélastiques sont très prononcés dans les propergols solides, plus atténués dans les explosifs comprimés, mais sont présents pour les deux types de matériaux, dont la température de transition vitreuse constitue une caractéristique très importante. Les deux types de matériaux sont également sensibles à l'endommagement, soit par décohésion des interfaces liant-charge, soit par microfissuration des grains (voir par exemple [2, 16, 17]). La figure 1.6, extraite de [17], donne deux exemples post-mortem de rupture du PBX 9501 en compression diamétrale (essai brésilien) quasi-statique. Lorsque l'essai est mené au-dessus de la transition vitreuse du liant, la fissuration est intergranulaire. Elle est transgranulaire dans le cas contraire.

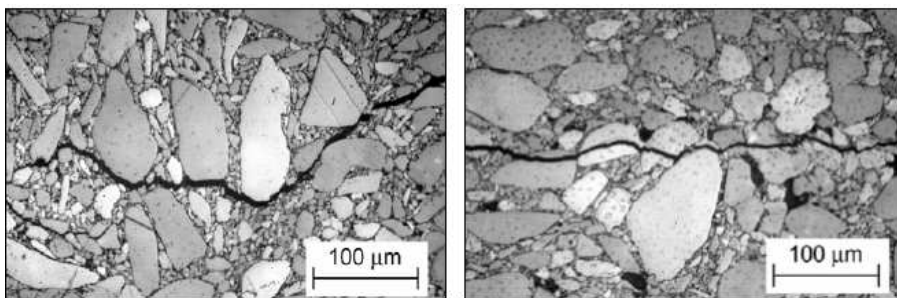


FIGURE 1.6 – Exemples de fissuration dans le PBX-9501 après rupture en compression diamétrale (essai brésilien). Vue de gauche : l'essai a été mené au-dessus de la transition vitreuse, la fissuration est intergranulaire. A droite : l'essai a été mené au-dessous de la transition vitreuse, la fissuration est transgranulaire (d'après [17]).

Récemment, Yuan et al. [18] ont réalisé une série d'essais brésiliens en température sur un explosif à base de TATB. Une imagerie par microtomographie X a permis des mesures de champs de déplacement et de déformation par corrélation d'images volumiques, et les surfaces de rupture ont été observées post-mortem en microscopie électronique à balayage. Les auteurs confirment les conclusions précédentes (voir la figure 1.6).

Il faut également noter que, sous forte pression hydrostatique, les grains peuvent être susceptibles de déformations irréversibles, comme l'illustre la figure 1.7, montrant la microstructure du matériau de la figure 1.1 après une compression triaxiale à 800 MPa [2]. Les grains sont tous allongés, et contiennent une densité de bandes de déformation, probablement des macles, nettement supérieure à l'état initial.

Dans tous les cas, le liant joue le rôle de transmetteur de contraintes entre les grains. A haute température, faible vitesse de sollicitation et faible

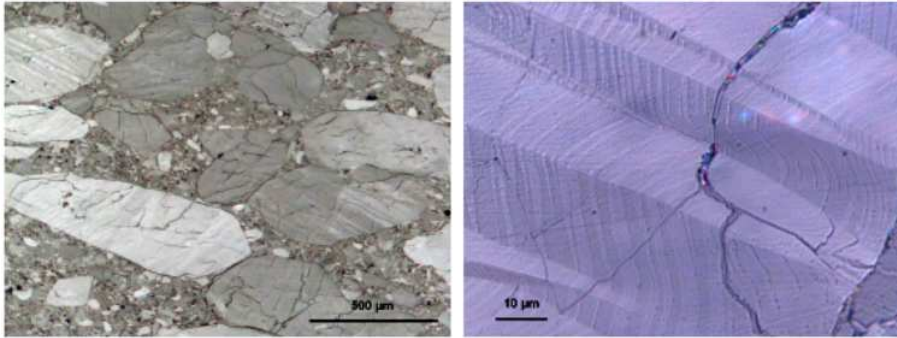


FIGURE 1.7 – Microstructure de l’explosif comprimé de la vue de droite de la figure 1.1, après compression triaxiale (d’après [2]). A gauche : vue d’ensemble montrant des grains allongés dans une direction préférentielle (le sens de compression est vertical). A droite : détail d’un grain montrant deux échelles de bandes de déformation, probablement des macles.

pression, le liant est mou. Il ne transmet que des contraintes faibles, accomode la déformation d’ensemble, et les grains ne se déforment quasiment pas. Dans ce cas, le seul mécanisme d’endommagement possible est la décohésion des interfaces liant-charge. A contrario, à basse température, grande vitesse de sollicitation et/ou forte pression, le liant franchit sa transition vitreuse, durcit et transmet les contraintes aux grains. Selon leur nature et la sollicitation, les grains peuvent alors rompre et/ou se déformer. Ceci montre que le comportement du liant, même s’il n’est présent qu’en très faible quantité, est d’une importance cruciale.

1.2 Modélisation multi-échelles

Cet éclairage offre un premier niveau de compréhension du comportement des matériaux considérés, et permet d’entrevoir le gain potentiel d’une approche multi-échelles. La possibilité d’atteindre une compréhension approfondie du comportement, de faire des prédictions quantitatives, d’interpréter les données expérimentales disponibles, de décrire et d’orienter les procédés de fabrication, d’aider à concevoir de nouveaux matériaux, sont autant de gains envisageables. Par approche multi-échelles, on entend une démarche d’homogénéisation, permettant de déterminer la réponse effective et d’accéder aux champs locaux, à partir de la connaissance de la microstructure, du comportement individuel des constituants, et de la sollicitation macroscopique imposée.

Les matériaux énergétiques ont fait l’objet de nombreuses approches multi-échelles, numériques pour la plupart. Depuis les travaux fondateurs de Baer [19], elles sont dans leur grande majorité destinées à prédire les conditions de démarrage des réactions chimiques sous l’effet d’auto-échauffements induits par impacts (voir par exemple [20–23] pour quelques travaux récents), et sortent du présent cadre. Les approches destinées à prédire la

réponse thermomécanique sous sollicitations quasi-statiques ou dynamiques sont beaucoup moins nombreuses. Sans prétention d'exhaustivité, quelques unes sont évoquées dans ce qui suit.

1.2.1 Modélisation des constituants

La caractérisation et la modélisation du comportement des constituants peut poser d'importantes difficultés. D'abord, le liant se trouve sous forme de couches minces, surtout s'il se trouve en faible proportion. Dans ce cas, son comportement peut être altéré, notamment si son épaisseur se trouve au-dessous de 10-100 nm selon sa nature (voir par exemple [24]). Le liant peut également contenir une partie des solvants utilisés lors de la fabrication du matériau, avec d'éventuels effets plastifiants. Hors de ces effets potentiels, une caractérisation standard reste possible, et se trouve largement pratiquée dans les faits (voir notamment [10, 12]).

Il faut cependant noter que le comportement des polymères est particulièrement complexe. Les polymères peuvent avoir un comportement viscoplastique, au-dessous de leur transition vitreuse, viscoélastique au voisinage de la transition, caoutchoutique au-delà, voire purement visqueux dans le régime d'écoulement très au-delà de la transition vitreuse. Leur comportement est fortement non linéaire, et leurs modules (visco)-élastiques peuvent varier notablement, même dans le régime vitreux, sous l'effet de transitions secondaires. La caractérisation complète est délicate, mais la mise au point de modèles capables de décrire l'ensemble de ces effets reste un problème ouvert à ce jour (voir par exemple [25, 26]). La difficulté augmente encore pour les polymères semi-cristallins, comme le Kel F-800 [27] du PBX 9502. C'est pourquoi la plupart des auteurs se limitent à des modélisations multi-échelles dans un régime restreint. Arora et al. [28], par exemple, utilisent un modèle visco-hyperélastique relativement élaboré, mais ne tentent d'atteindre ni le régime vitreux, ni le régime d'écoulement visqueux.

Ensuite, les grains d'explosif ou d'oxydant sont souvent mal connus. Une caractérisation expérimentale peut être conduite s'il est possible d'obtenir des monocristaux de taille suffisante. C'est notamment le cas du HMX, dont le comportement est aujourd'hui relativement bien connu [29, 30], mais pas de celui du TATB, dont le comportement mécanique est essentiellement abordé par dynamique moléculaire [31–33], éventuellement complétée par la technique de nano-indentation [34]. Une difficulté supplémentaire se présente lorsque ces cristaux sont susceptibles de transitions de phase polymorphiques, comme dans le cas du HMX [35] ou du perchlorate d'ammonium [36], par exemple.

Il reste ensuite à caractériser et modéliser les interfaces., pour lesquelles un certain nombre de travaux ont été effectués. Palmer et al. [37] et Walters et al. [38] déterminent directement la loi cohésive liant-HMX à partir d'un essai de délaminage en traction sur un assemblage de deux cristaux de HMX

séparés d'une couche de liant.

Tan et al. [39] réalisent des mesures d'ouverture de fissures par corrélation d'images sur une éprouvette CT en traction sur PBX 9501. Leurs résultats sont compatibles avec une loi cohésive bilinéaire à l'échelle macroscopique. En utilisant le modèle de Mori-Tanaka [40] en contexte purement élastique linéaire, ils parviennent à déterminer complètement les paramètres de la loi cohésive entre liant et grains de HMX.

Notons également les travaux originaux de Hu et al. [41], qui étudient un système constitué d'une particule de perchlorate d'ammonium encapsulée dans une matrice PBHT. Ils soumettent ce système à une sollicitation dynamique au moyen d'une mini-barre d'Hopkinson, et réalisent une imagerie temps réel en microtomographie à contraste de phase en synchrotron. Les résultats sont ensuite utilisés pour calibrer, par méthode inverse, un modèle cohésif. Mentionnons pour terminer que l'étude par dynamique moléculaire du comportement des interfaces [42, 43] donne également des résultats quantitatifs.

1.2.2 Modélisation des microstructures

Au plan topologique, la caractérisation et la modélisation des microstructures se heurtent à deux difficultés principales. D'abord, comme on l'a dit plus haut, la plupart des matériaux énergétiques à liant polymère utilisent des poudres à large distribution de tailles de grains. De ce fait, ils comprennent des grains de petite taille, qu'il n'est souvent même pas possible d'imager, du fait de la résolution limitée des instruments (microtomographie X ou microscopie optique) ou de la qualité de préparation des échantillons (le polissage en particulier). Il en va de même des modèles de microstructures virtuelles, pour raisons de résolution numérique et de taille des simulations. Pour les mêmes raisons, la distribution du liant est soumise aux mêmes incertitudes.

L'un des moyens de surmonter ces obstacles consiste à fixer un seuil au-dessous duquel les grains ne sont pas résolus. On définit alors une matrice composite, constituée du liant et des grains non résolus (appelée « dirty binder »). Il est alors nécessaire de construire le modèle de comportement de cette matrice, ce qui revient à pratiquer une homogénéisation à deux échelles. Ce modèle peut être simplifié en profitant du fait que la décohesion, et probablement la rupture des grains, se produit d'abord sur les grains les plus gros, puis se propage progressivement aux grains plus petits (voir par exemple [16, 28]). C'est la voie retenue par Arora et al. [28] et par Li-Mayer et al. [44].

D'autre part, se pose la question de la distribution d'orientations cristallographiques lorsque certains constituants sont anisotropes, ce qui est particulièrement le cas pour les matériaux énergétiques à base de TATB, et qui sera également le cas pour cette thèse. A l'heure actuelle, la technique

de microdiffraction spatialement résolue n'est pas suffisamment mûre pour être appliquée en routine sur matériaux énergétiques, même si elle commence à être pratiquée [45]. De même, l'utilisation de la technique de diffraction d'électrons rétrodiffusés (EBSD) reste difficile à mettre en œuvre pour des cristaux à basse symétrie, comme le TATB notamment.

Deux solutions sont couramment pratiquées. Certains auteurs font l'hypothèse de distribution aléatoire d'orientations cristallographiques [46–48], raisonnable compte tenu du mode de fabrication. D'autres font l'hypothèse d'isotropie locale, qui semble forte si l'anisotropie est très marquée comme, de nouveau, dans le cas du TATB [28].

1.2.3 Représentativité

Liu [49] s'attache à déterminer expérimentalement la taille du volume élémentaire représentatif du PBS 9501, un équivalent inerte du PBX 9501 dans lequel le HMX a été remplacé par du sucre, toutes choses égales par ailleurs. À cet effet, il réalise des expériences de compression uniaxiale (lubrifiée, afin de conserver l'homogénéité macroscopique des champs) et de dilatation thermique. Il prend des images des échantillons déformés à chaque stade de la sollicitation, et réalise des mesures des champs de déformation par corrélation d'images sur une matrice de 160 points distribués sur la surface de l'échantillon, en faisant varier, pour chaque point de mesure, la taille de la zone de mesure.

La figure 1.8 présente le cas de la compression simple du PBX 9501 [49] dans le domaine élastique. La vue de gauche indique la moyenne de chaque composante des déformations dans le plan et leurs écart-types en fonction de la taille de la zone d'analyse, tandis que la vue de droite montre comment la valeur moyenne de ces composantes tend vers une asymptote lorsque la taille de la zone de mesure croît. Dans les deux cas, la taille du VER est estimée à 1,5 mm pour le PBX 9501.

1.2.4 Modélisations en champs moyens

Clements et Mas [50, 51] développent un modèle d'homogénéisation en transformations finies d'élastomères viscoélastiques chargés en particules élastiques. Ce modèle est basé sur une extension [52] du modèle d'Eshelby [53] au cas viscoélastique en utilisant le principe de correspondance par transformée de Laplace-Carson de Hashin [54], et emploie la méthode d'homogénéisation de Mori-Tanaka [40]. Les auteurs conçoivent en outre une méthode analytique de représentation de la transformée de Laplace-Carson inverse adaptée au cas d'une matrice élastomère, qui se trouve de ce fait bien adaptée au PBX 9501, et accélère considérablement les calculs.

Les auteurs utilisent par la suite cette approche pour construire un modèle de matrice composite mentionné ci-dessus, qu'ils utilisent dans le cadre d'une

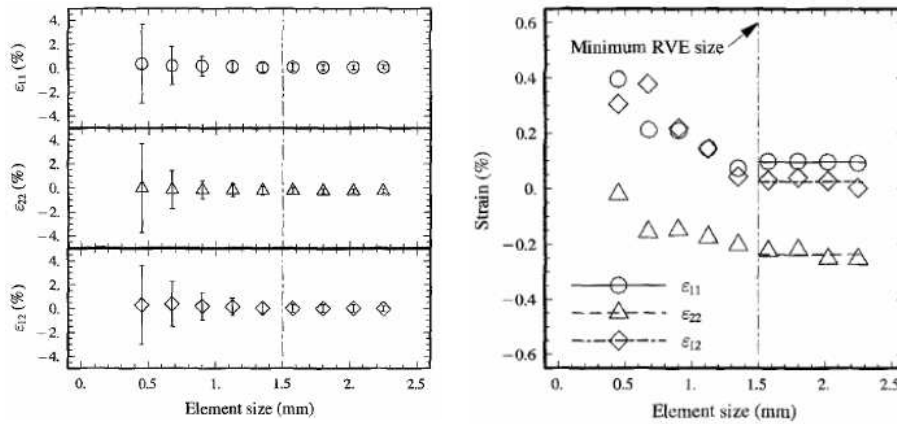


FIGURE 1.8 – Estimation de la taille du VER en compression simple, dans le régime élastique, pour le PBX 9501. Vue de gauche : variation de la moyenne et de l'écart-type des composantes de déformation avec la taille de la zone de mesure par corrélation d'images. Vue de droite : Convergence de la moyenne des composantes de la déformation vers une valeur asymptotique, atteinte pour une taille de la zone d'analyse de l'ordre de 1,5 mm (d'après [49]).

méthode semi-analytique (dite « Method Of Cells ») pour homogénéiser le comportement du PBX 9501. Cette méthode suppose que l'endommagement est dû à la fracturation des grains de HMX, et incorpore donc une élasticité isotrope et une loi de fissuration pour ce dernier. Cette méthode semble bien fonctionner dans un cadre viscoélastique endommageable.

Tan et al. [55–57] utilisent également la méthode de Mori-Tanaka pour construire un modèle viscoélastique avec décohésion à l'interface liant-charge, et l'appliquent notamment au PBX 9501. Le liant est décrit par une loi viscoélastique linéaire et l'interface liant-charge par une loi cohésive. Bien que le cadre des petites transformations limite fortement le domaine d'emploi du modèle, on notera qu'il prend en compte explicitement la taille de grains, ce qui représente un avantage considérable.

Nadot-Martin et son équipe utilisent une méthode semi-analytique alternative à celle d'Eshelby [53], due à Christoffersen [58], qui propose une description polygonisée de la géométrie et de la cinématique de polycristaux jointoyés, et l'appliquent aux matériaux de type propergols solides, d'abord dans un cadre purement viscoélastique en transformations infinitésimales [59], puis en présence d'interfaces liant-charge décollées [60], puis en transformations finies [61], puis avec décohésion progressive [62, 63].

L'équipe de Luscher et Bennett [64–66] construit un modèle de thermoélasticité non linéaire en modifiant la méthode auto-cohérente [67], pour l'appliquer aux explosifs comprimés à base de TATB, et notamment au PBX 9502, dans le contexte général de non linéarité et d'irréversibilité de la dilatation thermique de ces matériaux (ratchet growth).

Willet et al. [48, 68] construisent un modèle de type auto-cohérent destiné à décrire les propriétés thermoélastiques effectives d'explosifs comprimés vus

comme des polycristaux microfissurés. Ce modèle n'est bien sûr applicable que dans une gamme de température située bien au-dessous de la transition vitreuse du liant.

Notons pour terminer que des modèles de type auto-cohérents sont également utilisés pour construire des modèles de matrice composite liant-petits grains [28, 69].

1.2.5 Modélisations en champs complets

Propergols solides

Matous et al. [70] cherchent à reproduire le comportement élastique endommageable de propergols solides en petites déformations, en utilisant une loi cohésive pour décrire les interfaces liant-charge, et réalisent des simulations sur microstructures composées de sphères polydisperses, à l'aide d'un algorithme de type germination-croissance [71, 72]. Les positions des germes sont tirées aléatoirement, et chaque germe est associé à une vitesse de croissance linéaire également aléatoire. Une dynamique simplifiée empêche les collisions entre sphères. Un raffinement de cet algorithme a été proposé par Gallier et Hiernard [1]. Ce type de microstructure est bien adapté aux propergols solides, les grains de perchlorate d'ammonium étant le plus souvent de forme proche de la sphère.

Areias et Matous étendent ensuite leurs travaux au cas viscoélastique endommageable en transformations finies [73], en utilisant une loi de comportement sophistiquée pour le liant [74], la même loi cohésive pour les interfaces, et un algorithme adapté aux milieux quasi-incompressibles. Il ne l'appliquent cependant qu'à de petits agrégats de sphères polydisperses. Zhi et al. [75] proposent une approche très similaire, qui ne sera pas commentée ici.

Récemment, Toulemonde et al. [76] ont réalisé une série de travaux mêlant expériences et modélisation multi-échelles par éléments finis pour progresser dans la compréhension du comportement des propergols solides. Ces travaux se limitent (i) à des microstructures à base de sphères monodisperses, et (ii) à un comportement élastique, de type néo-Hookéen, pour le liant. Dans un effort visant à comprendre le rôle des agents adhésifs ajoutés au liant pour améliorer la résistance à la décohésion, les auteurs identifient par AFM les propriétés d'une interphase créée par l'agent adhésif, et réalisent les simulations correspondantes, en ajoutant cette interphase autour de chaque sphère. En faisant varier l'épaisseur et la rigidité de l'interphase, les auteurs montrent comment cette dernière peut percoler, et améliorer simultanément la déformation et la contrainte à rupture du matériau.

Exposifs comprimés

On trouve d'abord une série de travaux dédiés au PBX 9501, ou des matériaux similaires à base de HMX. Banerjee et Adams [77] tentent de

déterminer les modules élastiques effectifs du PBX 9501. Ils constatent d'abord que, pour des sollicitations lentes, le contraste entre les modules élastiques du HMX et du liant est très élevé, ce qui pose une difficulté forte pour toute méthode d'homogénéisation. Les auteurs réalisent alors un grand nombre de simulations bidimensionnelles par éléments finis sur des microstructures telles qu'illustrées sur la figure 1.9 (vue de droite), tout en cherchant à garder des coûts de simulations raisonnables. Ils ne parviennent pas à des prédictions quantitatives, mais constatent que les meilleurs résultats sont obtenus lorsque les microstructures autorisent les contacts directs entre grains (ce que les auteurs appellent « stress bridging »), ce qui constitue un problème de percolation, illustré sur la figure 1.9.

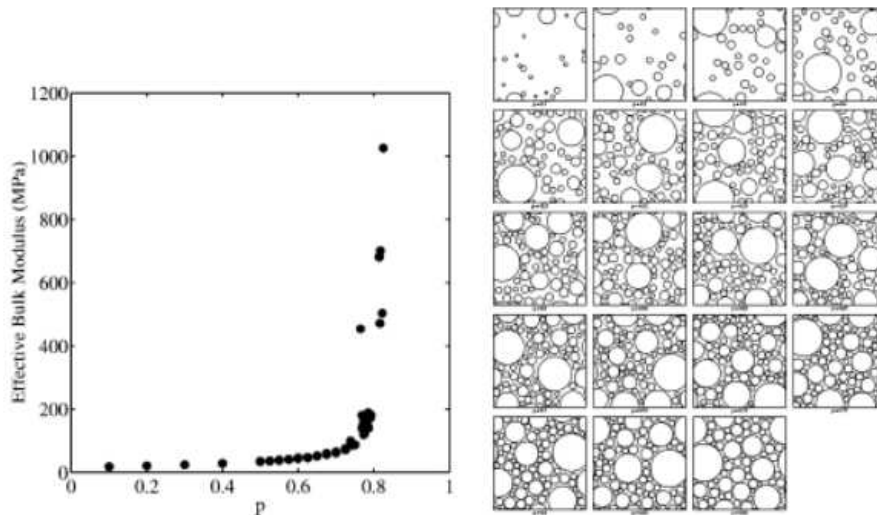


FIGURE 1.9 – Evolution du module de compressibilité en fonction de la fraction volumique de grains (vue de gauche), pour des microstructures bidimensionnelles à base de particules circulaires cherchant à imiter la distribution granulométrique du PBX 9501 (d'après [77]).

Wu et Huang [78] et Kang et al. [79] proposent une méthode, dite « numerical manifold method », qu'ils appliquent au PBX 9501. Le matériau est vu comme un assemblage de Voronoï de particules, elles-mêmes composées de grains de HMX. Ces particules peuvent plastifier en compression, et s'endommager en traction. Entre chaque particule, des zones cohésives viscoélastiques décrivent la décohésion. Les auteurs simulent des essais de traction et de compression simple et un essai brésilien.

Barua et ses collaborateurs [80] proposent une démarche similaire à celle de Areia et Matous [70]. Le liant, viscoélastique linéaire, est décrit par une série de Prôny, les grains sont élastiques linéaires isotropes, une loi cohésive simple décrit les interfaces, et le frottement est pris en compte. Les auteurs testent de nombreuses microstructures, en faisant varier la fraction volumique de liant et la distribution de tailles des grains. L'originalité de ce travail réside dans la simulation d'essais de compression simple dynamique, et dans

la détermination du champ de température.

En ce qui concerne les explosifs comprimés à base de TATB, Seidel et al. [81] approchent le LX-17 (un explosif très proche du PBX 9502) par un polycristal (de Voronoï) de TATB, supposé élastique isotrope, jointoyé par des zones cohésives viscoélastiques représentant le liant (Kel-F 800). Ils réalisent des simulations bidimensionnelles par éléments finis en traction simple à diverses vitesses de sollicitation. Ils retrouvent la pente initiale des courbes expérimentales, ainsi que les tendances qualitatives de la partie non linéaire de ces mêmes courbes.

Les travaux de Arora et al. [28] sont les plus aboutis sur explosifs comprimés au TATB. Les auteurs considèrent les grains de TATB élastiques, linéaires et isotropes, proposent une formulation visco-hyperélastique en transformations finies pour le liant, et un modèle cohésif standard pour les interfaces liant-charge. Ils considèrent des microstructures bidimensionnelles (et des simulations en déformations planes) issues d'images réelles, mais remarquent que les grains les plus petits sont perdus dans le processus d'imagerie-segmentation-maillage. Ils construisent en conséquence un modèle de liant chargé (« dirty binder ») purement viscoélastique, tirant profit du fait que les grains fins ne subissent pas de décohésion. Li-Mayer et al. [44] réalisent un travail analogue, en adoptant un modèle élasto-viscoplastique pour le liant.

Mentionnons pour terminer les travaux de Gee et al. [42], spécifiquement dédiés à l'étude de la dilatation thermique du PBX 9502. Les auteurs utilisent une méthode dérivée de la dynamique moléculaire pour construire une microstructure simplifiée, avec liant élastique, grains de TATB élastiques anisotropes et loi cohésive aux interfaces. Ils réalisent des simulations pour des sollicitations thermiques lentes, et confirment les hypothèses de Kolb et Rizzo [82]. Du fait de leur distribution aléatoire d'orientations, les grains de TATB ne peuvent se dilater librement, ce qui induit des contraintes internes, qui croissent jusqu'à induire des décohésions et la création de porosités aux interfaces liant-grains.

1.3 Objectifs de la thèse et méthodologie

La présente thèse se situe dans cette optique multi-échelles, et constitue le deuxième volet d'une approche menée en étroite collaboration entre le Centre de Morphologie Mathématique de Mines ParisTech, et le Centre du Ripault du Commissariat à l'Énergie Atomique. Ce projet consiste à construire un outil d'homogénéisation, adapté à une classe particulière de matériaux énergétiques, les explosifs comprimés, et plus particulièrement à un matériau à base de TATB et d'une faible fraction volumique d'un liant polymère amorphe. Le matériau, sa microstructure et son comportement sont décrits au chapitre 2.

1.3.1 Travaux antérieurs

Le choix a d'abord été fait de construire un outil d'homogénéisation numérique en champs complets par méthode de Fourier (FFT), et de restreindre l'approche aux sollicitations quasi-statiques. Compte tenu de la multiplicité des mécanismes de déformation à prendre en compte, une stratégie pas-à-pas a été adoptée.

On a vu, dans ce qui précède, que le caractère d'élastomère du liant pose de nombreuses difficultés. Toutefois, les liants ne sont pas tous des élastomères, et les élastomères eux-mêmes ne le sont que dans une gamme donnée de températures, vitesses de sollicitation, et triaxialité des contraintes. Les travaux antérieurs à la présente thèse [48], détaillés ci-après, se démarquent par la prise en compte du liant, de nature thermoplastique, dans son domaine vitreux.

On a d'abord développé un premier outil en thermoélasticité linéaire, dans un contexte très simplifié, dans lequel le liant et tous les défauts ont été négligés, les grains étant supposés homogènes, les joints de grains infiniment résistants et les distributions d'orientations cristallographiques aléatoires. Un ensemble de modèles de pavage aléatoire a été évalué, successivement de Voronoï, de Laguerre et de Johnson-Mehl, en vue de restituer au mieux la distribution granulométrique du matériau étudié [46]. En vue d'améliorer la représentation de la distribution de tailles de grains, d'une part, de la forme des grains, d'autre part, un nouveau modèle, de type Johnson-Mehl à croissance anisotrope, a été construit et identifié [47]. La figure 1.10 compare la microstructure réelle du matériau (vue de gauche) à une coupe plane d'une réalisation du modèle (vue de droite).

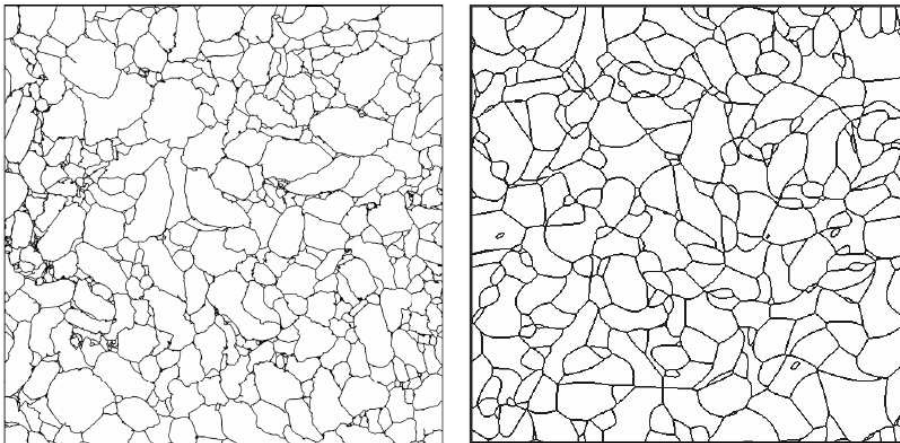


FIGURE 1.10 – Comparaison entre une image segmentée à partir d'une micrographie MEB du matériau étudié (vue de gauche), et une coupe plane d'une réalisation du modèle de Johnson-Mehl à croissance anisotrope (d'après [47]).

Les propriétés thermoélastiques linéaires effectives ont ensuite été évaluées par FFT [46, 47], en attribuant aux grains des propriétés anisotropes issues de la littérature (voir le chapitre 2), et ont été confrontées avec succès avec des théories de type auto-cohérent. En premier lieu, elles sont quasiment insensibles aux détails de la microstructure, ce qui est un résultat bien connu (voir par exemple [83]) pour les faibles contrastes. Une étude de représentativité a montré que la précision de l'évaluation des propriétés effectives est de quelques pourcents pour des simulations tridimensionnelles sur microstructures 512^3 voxels comportant de l'ordre de 3000 grains, avec une résolution d'environ $1,3 \mu\text{m}$ par voxel. Le coefficient de dilatation thermique volumique est prédit précisément, mais les modules élastiques sont largement surestimés.

On note que le coefficient de dilatation thermique volumique est de près de 40% inférieur à celui du monocristal de TATB (voir le chapitre 2). Ce dernier étant doté d'une dilatation thermique extrêmement anisotrope, et les cristaux étant orientés aléatoirement au sein du composite, chaque cristal s'oppose à la dilatation libre de ses voisins, ce qui donne naissance à de fortes contraintes internes. Ce constat est en accord avec l'hypothèse formulée par Kolb et Rizzo [82], elle-même vérifiée par l'approche multi-échelles de Gee et al. [42], mentionnée au paragraphe 1.2.5. Ce point très important servira de base aux travaux ultérieurs.

Les causes de la surestimation des modules élastiques effectifs ont ensuite été recherchées [48, 84]. Dans un premier temps, on a évalué l'impact du liant et de la porosité. A ce stade, une première difficulté s'est présentée. En effet, la morphologie du liant au sein du matériau n'est pas connue précisément, mais il paraît raisonnable (voir le chapitre 2) de supposer qu'il enrobe les grains. Il se trouve donc en couches minces, d'une épaisseur moyenne de l'ordre de 200 nm, ce qui est largement inférieur à la taille de voxel employée pour les simulations. Cet obstacle, rencontré par d'autres auteurs, comme nous l'avons mentionné au paragraphe 1.2.5, a été levé par l'emploi de la théorie des interfaces imparfaites, qui consiste à représenter les couches de liant par une interphase épaisse aux propriétés adaptées, sur laquelle nous reviendrons au chapitre 7. Les simulations, réalisées sur des microstructures du type de celles de la figure 1.11, ont montré que l'impact de la porosité et du liant sur les modules élastiques effectifs, sans être négligeable, n'explique pas, et de loin, la surestimation observée.

En se basant sur un ré-examen de données expérimentales en compression hydrostatique cyclique, la suite des travaux s'est orientée vers les effets de la microfissuration. Gasnier et al. [48, 84] ont introduit des populations de microfissures inter- ou transgranulaires de densités variables, disposées aléatoirement dans la microstructure de la figure 1.10 (vue de droite), comme l'illustre la figure 1.12.

Les auteurs ont estimé les propriétés thermoélastiques effectives en fonction de la densité de chaque type de microfissures. Ils ont pu montrer

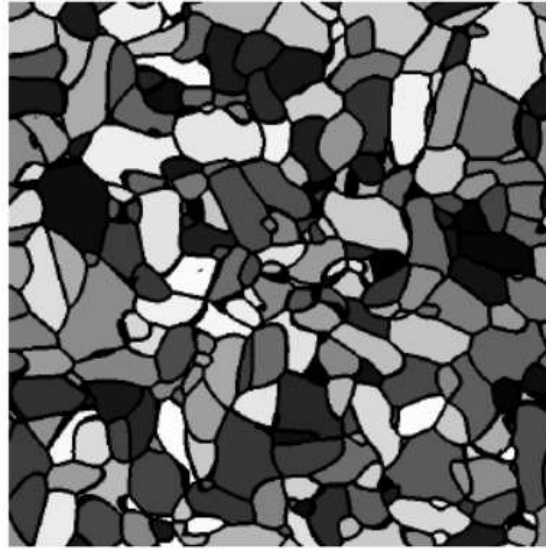


FIGURE 1.11 – Microstructure polycristalline avec interphase (en noir) d'une épaisseur de 4 voxels pour représenter le liant (d'après [47]).

(figure 1.13) qu'il est possible de trouver une densité de microfissures intergranulaires compatibles avec les valeurs expérimentales des modules thermoélastiques effectifs. Ils en ont conclu que le matériau étudié, dans son état initial, contient une population de microfissures intergranulaires dont ils ont pu évaluer la densité.

Il est remarquable d'observer que ces populations ont un effet très marqué sur les modules élastiques effectifs, mais un effet négligeable sur le coefficient de dilatation thermique effectif. Les auteurs ont ensuite montré (figure 1.14) que, pour obtenir un effet marqué sur ce dernier, il est nécessaire que l'orientation des microfissures soit corrélée avec l'orientation cristallographique des grains. Un tel effet étant constaté sous sollicitations thermiques à basse température, ils en ont déduit que les contraintes internes générées par la sollicitation thermique induit une microfissuration transgranulaire dans des plans préférentiels du cristal de TATB.

1.3.2 Objectifs de la thèse

Les travaux décrits ci-dessus ont pointé le rôle de la microfissuration, tant à l'état initial que lors de sollicitations thermiques. C'est également le cas des sollicitations mécaniques (voir le paragraphe 1.3.3) Cependant, toutes les simulations réalisées jusqu'ici l'ont été dans un cadre thermoélastique linéaire. L'objectif de la présente thèse est de sortir de ce cadre, et de permettre à l'outil de simulation mentionné plus haut de décrire les processus allant jusqu'à la rupture du matériau, pour des sollicitations thermomécaniques quasi-statiques.

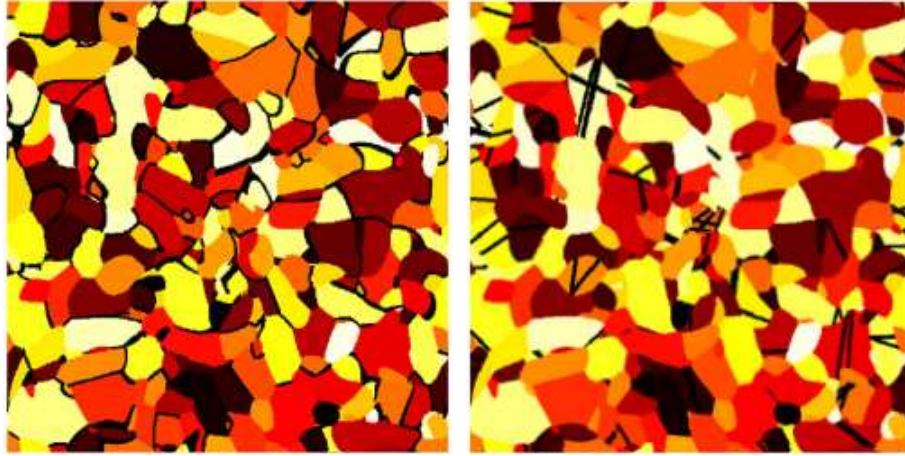


FIGURE 1.12 – Microstructure polycristalline avec microfissures intergranulaires (vue de gauche) ou transgranulaires (vue de droite), d'une densité donnée, et réparties aléatoirement (d'après [47]).

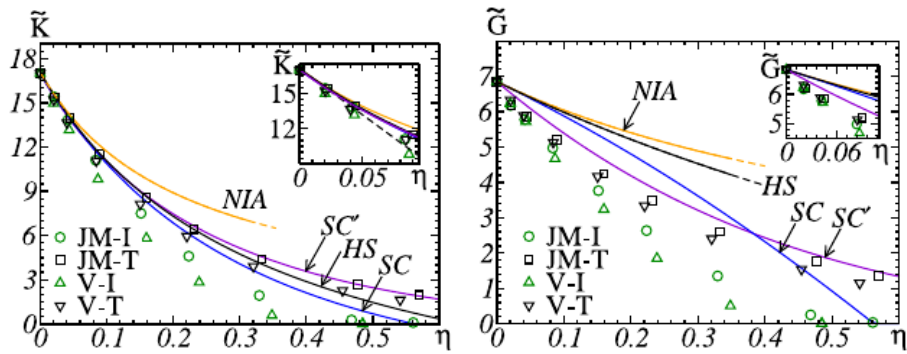


FIGURE 1.13 – Modules de compressibilité (vue de gauche) et de cisaillement (vue de droite) effectifs en présence de densités variables de microfissures. V : polycristal de Voronoï. JM : polycristal de Johnson-Mehl à croissance anisotrope. I : microfissures intergranulaires. T : microfissures transgranulaires. NIA, SC', HS et SC : prédictions de modèles de type auto-cohérent (d'après [47]).

Il s'agit donc de choisir un (ou des) modèle(s) de fissuration approprié(s), de l'(ou les) implanter dans le code FFT, et de déterminer ses (leurs) capacités à reproduire la réponse macroscopique du matériau considéré pour ce type de sollicitations. La validation de ses prédictions à l'échelle de la microstructure n'entre pas dans les objectifs de cette thèse, et fera l'objet de travaux ultérieurs.

1.3.3 Méthodologie et plan du mémoire

Des travaux complémentaires, réalisés dans un autre cadre, ont porté sur la rupture du matériau décrit au chapitre 2. Un échantillon, rompu à température ambiante en compression simple quasi-statique, a fait l'objet d'une étude post-mortem en microscopie optique. La figure 1.15 présente la

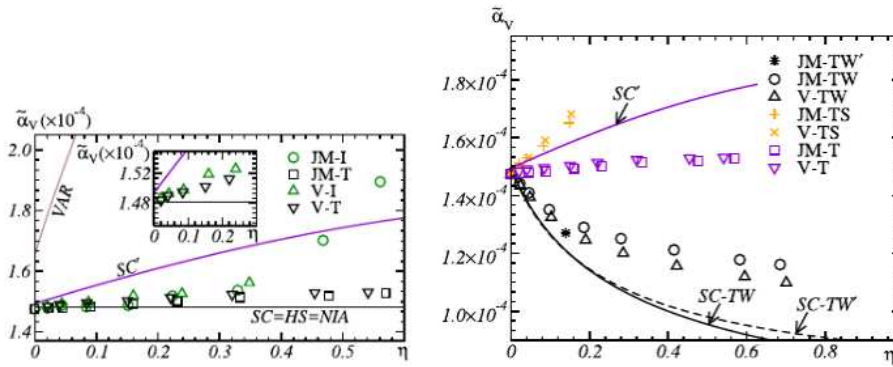


FIGURE 1.14 – Coefficient de dilatation thermique volumique effectif en présence de microfissures inter et transgranulaires. V : polycristal de Voronoï. JM : polycristal de Johnson-Mehl à croissance anisotrope. Vue de gauche : microfissures disposées aléatoirement. VI et VT : polycristal de Voronoï avec fissures inter- et transgranulaires. JMI et JMT : polycristal de Johnson-Mehl à croissance anisotrope avec fissures inter- et transgranulaires. I : microfissures intergranulaires. T : microfissures transgranulaires. NIA, VAR, HS et SC : prédictions de modèles de type auto-cohérent. Vue de droite : microfissures transgranulaires à orientation corrélée avec l'orientation cristallographique des grains. T : orientation aléatoire. TW et TW' : fissures disposées dans le plan de plus faible module de cisaillement. TS : dans un plan orthogonal (d'après [47]).

topologie d'une fissure non débouchante dans cet échantillon. Cette fissure, interrompue par endroits, apparaît alternativement inter- et transgranulaire. Il est donc clair que les deux mécanismes de (micro)-fissuration doivent être pris en compte, et doivent pouvoir être mis en œuvre simultanément.

Un examen approfondi de la littérature spécialisée a montré que, parmi les voies de modélisation et de simulation existantes pour décrire le phénomène de fissuration, l'approche de la rupture par champ de phase, actuellement en plein essor, apparaît à la fois comme la plus prometteuse, et la plus simple à mettre en œuvre. Comme nous le verrons au chapitre 3, cette méthode, compatible avec l'approche énergétique de Griffith [85], permet de décrire l'amorçage, la propagation, la bifurcation et le branchement des fissures automatiquement, sans nécessiter de techniques numériques élaborées.

Les travaux décrits ci-après s'appuieront sur l'hypothèse générale de rupture fragile. Cette hypothèse est retenue par souci de simplicité, mais semble appropriée, au moins pour la fissuration transgranulaire, et sera partiellement justifiée au chapitre 2. Dans un premier temps, un modèle de rupture fragile par champ de phase est choisi et implanté dans le code FFT. Ses capacités à reproduire la réalité expérimentale sont étudiées pour les sollicitations thermiques à basse température, qui représentent, au moins en première approximation, des conditions pour lesquelles la microfissuration est le seul phénomène de déformation irréversible, comme on le montre au chapitre 3.

Dans un second temps, les conditions pour mettre en œuvre le même modèle pour décrire la fissuration intergranulaire sont étudiées. L'implémentation numérique est modifiée en conséquence, et l'ensemble est validé, d'une

part pour des sollicitations thermiques autour de la température ambiante, loin au-dessous de la transition vitreuse, d'autre part en traction simple.

Pour terminer, on discute des avantages et inconvénients de la méthode, et on envisage les moyens de remédier à ses défauts.



FIGURE 1.15 – Micrographie d'une zone d'un échantillon rompu en compression simple quasi-statique à température ambiante, contenant une fissure non débouchante.

Chapitre 2

Le matériau d'étude

On présente le matériau qui fait l'objet de ce mémoire, dénommé « composite » dans la suite de l'étude, qui est un explosif comprimé à base de TATB et qui contient en outre une faible fraction volumique d'un polymère amorphe faisant office de liant et une phase poreuse. Son procédé de fabrication est évoqué brièvement en section 2.1, et sa microstructure détaillée en section 2.2. Le comportement mécanique du liant et des grains fait l'objet de la section 2.3. La section 2.4 donne un aperçu du comportement thermomécanique du composite, à l'échelle macroscopique.

2.1 Procédé de fabrication

Le liant est d'abord dissout dans un mélange d'eau et de solvant. La poudre de TATB est ensuite ajoutée, et le mélange est distillé pour en extraire le solvant. N'étant pas soluble dans l'eau, le liant précipite alors à la surface du TATB. La poudre enrobée est ensuite séchée, puis pressée sous vide en bain d'huile, à température modérée, et en ajustant la pression (plusieurs centaines de bars) pour obtenir la porosité souhaitée, inférieure à 3%. Enfin, on procède à un traitement thermique de détensionnement.

On obtient à l'issue un solide isotrope, de bonne tenue mécanique, facile à usiner et à polir par procédés standards, ce qui permet d'observer sa microstructure en microscopie optique aussi bien qu'électronique à balayage.

2.2 Microstructure

Une tentative d'imagerie par microtomographie X de laboratoire (Skyscan 1172) a été réalisée sur un échantillon de 1,15 mm de diamètre, à la résolution de 1,3 μm par voxel. La figure 2.1 présente une coupe après reconstruction. On constate que le contraste est insuffisant, et ne permet pas d'imager correctement la microstructure. Ceci provient surtout du fait que le

contraste d'absorption entre le TATB et le liant est faible, ces deux matériaux organiques ayant des numéros atomiques moyens voisins.

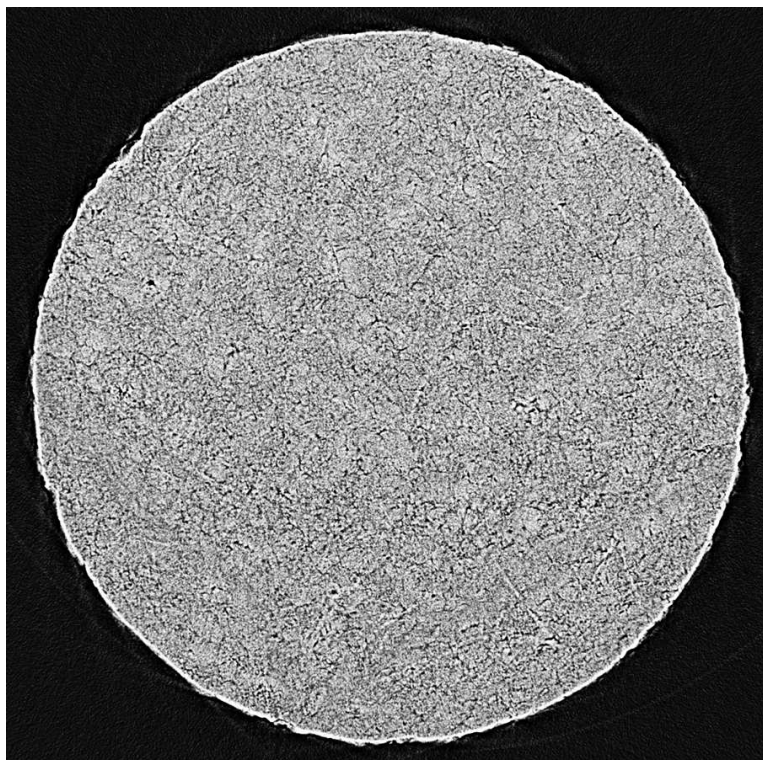


FIGURE 2.1 – Exemple de coupe obtenue par microtomographie X (travaux réalisés au CEA Gramat par Patrick Rey et Alain Fanget).

C'est pourquoi on se tourne vers l'imagerie bidimensionnelle sur coupes polies. La figure 2.2 donne un aperçu de la microstructure du composite en microscopie optique en réflexion sous lumière polarisée. Il y apparaît comme un polycristal de TATB dont les joints de grains ne sont pas toujours faciles à discerner. Les grains sont généralement des mono-, bi- ou tri-cristaux contenant des pores (cercles sur la figure 2.2), des bandes plus ou moins rectilignes, et quelques microfissures intra- ou transgranulaires. Les éventuelles microfissures intergranulaires ne sont pas visibles à cette échelle, et c'est également le cas du liant. On observe également que de petit grains sont souvent présents aux joints des grains les plus gros, le plus souvent aux joints multiples. Les bandes, absentes de la poudre de TATB dans son état initial, sont manifestement dues au procédé de fabrication. Il s'agit vraisemblablement de macles de déformation, mécanisme mis récemment en évidence par Lafourcade et co-auteurs [32, 33]. Ce point montre clairement que le TATB subit une déformation irréversible au pressage.

En microscopie électronique à balayage, l'imagerie en électrons secondaires donne un contraste pratiquement nul, est n'est pas illustrée ici. Comme

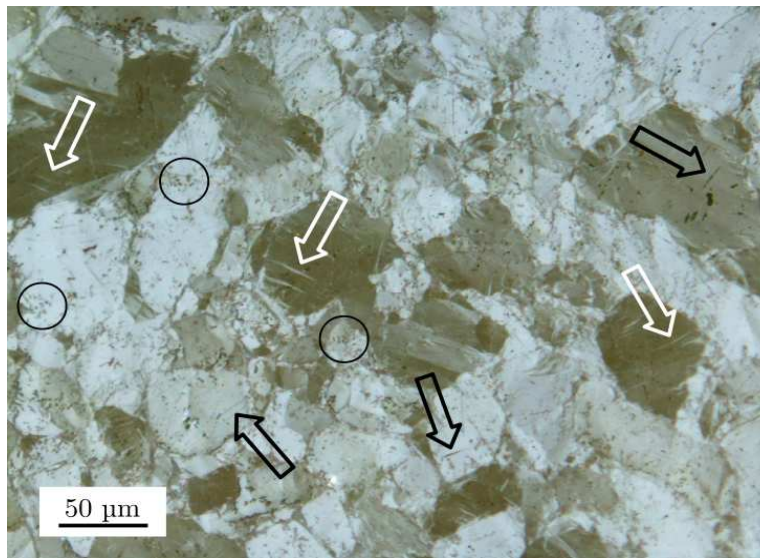


FIGURE 2.2 – Micrographie du composite obtenue en microscopie optique en réflexion sous lumière polarisée. Cercles : pores – Flèches blanches : macles de déformation – Flèches noires : fissures intra- ou transgranulaires (micrographie réalisée par Philippe Lambert).

l'illustre la figure 2.3 en microtomographie, le composite est relativement peu contrastant. Les grains de TATB apparaissent en gris clair, et le liant en gris plus foncé. On note l'existence de pores remplis de liant dans pratiquement tous les grains, ainsi que de quelques pores vides, qui apparaissent en noir sur la figure 2.3. Les macles ne sont pas visibles, et les joints de grains sont souvent difficiles à discerner. Les fissures inter- et transgranulaires sont clairement visibles, contrairement aux microfissures intergranulaires, très difficiles à distinguer des joints de grains eux-mêmes. De très petits grains sont souvent présents aux joints des grains plus gros, notamment aux joints multiples. Notons que, dans le cas du PBX-9502, très proche du composite étudié ici, la littérature signale l'existence de deux populations de pores (voir par exemple [86]), l'une centrée autour de 10 nm, l'autre entre 0,1 et quelques microns. Les pores visibles sur la figure 2.3 pourraient correspondre à cette deuxième population.

2.3 Comportement des constituants

Comme on l'a dit au paragraphe 1.3.3, les présents travaux se limitent à la gamme de température située bien en-deçà de la transition vitreuse (nous choisissons de rester au-dessous de 60°C), aux faibles triaxialités, et aux petites déformations quasi-statiques. De ce fait, tous les modes de déformation des constituants ne sont pas activés, comme la plasticité du cristal de TATB ou la viscoélasticité du liant, qui ne seront donc pas évoqués ici.

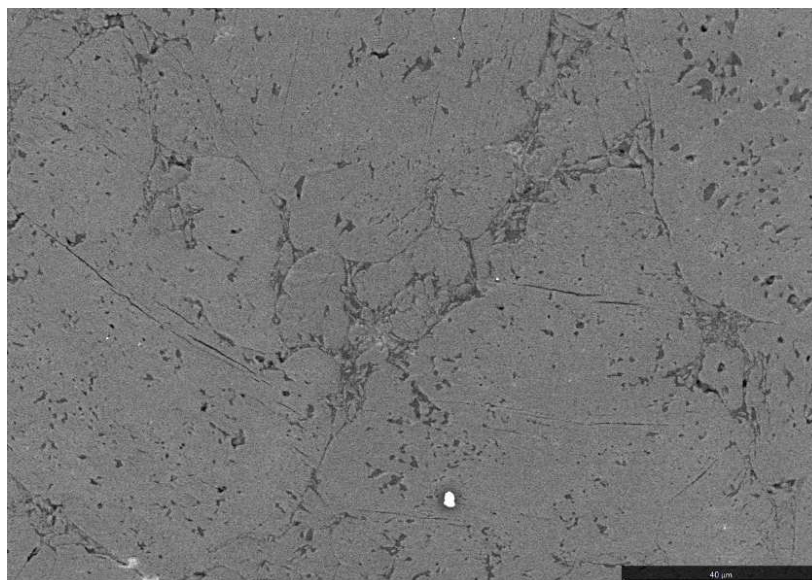


FIGURE 2.3 – Micrographie du composite obtenue au MEB en électrons rétro-diffusés et en mode environnemental. Micrographie réalisée au CEA Le Ripault par Alexandre Forzy et Alexandre Lecardeur. Pour une meilleure lisibilité, on a légèrement renforcé le contraste de l'image.

2.3.1 Le cristal de TATB

La molécule de TATB est présentée sur la figure 2.4 (vue de gauche). Elle est quasi-plane, constituée d'un noyau benzénique portant alternativement des fonctions amino- (NH_2) et des fonctions nitro- (NO_2). Les molécules s'assemblent en établissant des liaisons hydrogènes entre groupements nitro- et amino- pour former des plans moléculaires à symétrie hexagonale. Ces plans s'assemblent à leur tour en formant des liaisons de van der Waals (figure 2.4, vue de gauche) [87]. Le cristal de TATB est ainsi formé de plans graphitiques dont la cohésion interne, due aux liaisons hydrogènes, est plus forte que les liaisons de van der Waals entre plans graphitiques. Ceci explique la forte anisotropie de ce cristal.

La maille cristalline, comprenant deux molécules, est triclinique [87], comme l'illustre la figure 2.5. Ses paramètres de maille, déterminés pour la première fois par Cady et Larson [87], sont indiqués dans le tableau 2.1.

a	b	c	α	β	γ
Å	Å	Å	°	°	°
9,01	9,028	6,812	108,59	91,82	119,97

TABLE 2.1 – Paramètres de maille du cristal de TATB (d'après [87]).

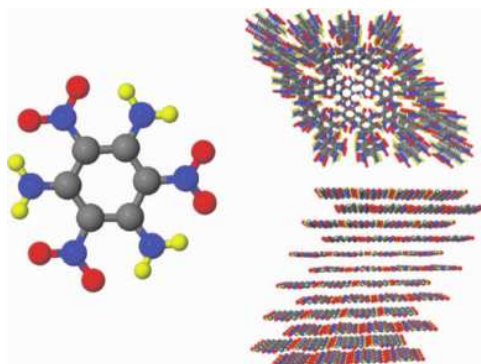


FIGURE 2.4 – A gauche : molécule de TATB. A droite : cristal de TATB (d'après [31]).

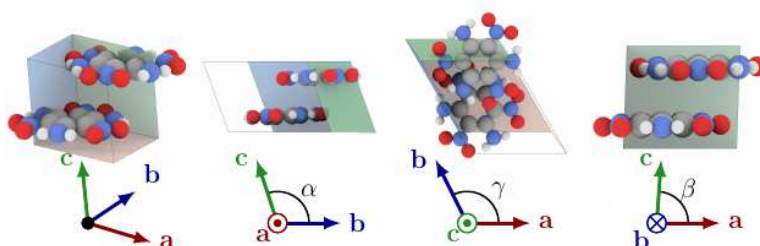


FIGURE 2.5 – Maille cristalline du TATB (d'après [33]).

Le TATB est quasiment insoluble dans tous les solvants connus, et il est extrêmement difficile d'obtenir des mono-cristaux pouvant servir à la caractérisation thermomécanique. De ce fait, les données disponibles dans la littérature spécialisée ont été obtenues soit par diffraction de poudre [82, 88–90], soit par dynamique moléculaire [31, 32, 34, 91–93], pour ne citer que les références les plus récentes.

Tenseur d'élasticité anisotrope

Pour la raison exposée plus haut, les seules données disponibles pour le tenseur d'élasticité du cristal de TATB ont été calculées par dynamique moléculaire, à partir de champs de force interatomiques empiriques identifiés sur des résultats de simulations *ab initio*, et validées sur la structure du cristal. A notre connaissance, cinq jeux complets de constantes élastiques sont disponibles [31, 32, 34, 92], ce qui nécessite d'opérer un choix.

Il n'existe à notre connaissance aucune donnée expérimentale permettant un tel choix pour l'ensemble des constantes élastiques du cristal de TATB. Il est toutefois possible d'obtenir une validation partielle à l'aide de résultats d'expériences de compression en enclumes de Bridgman [94] ou en cellules à enclumes de diamant [88, 90] avec mesures de paramètres de la maille cristalline par diffraction X en synchrotron.

La démarche, détaillée dans l'Annexe 9.1, est appliquée aux données très récentes de Plisson et al. [90], et conduit à retenir l'ensemble des observations que Bedrov et al. [31] ont obtenues à l'aide de leur champ de force dit « non polarisable », données ci-dessous en notation de Voigt :

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 57,7 & 16,2 & 3,2 & -0,2 & -0,9 & 0,0 \\ & 58,0 & 5,7 & 0,6 & -0,5 & 2,0 \\ & & 17,0 & -0,1 & -0,3 & -1,0 \\ & & & 1,0 & 0,01 & -0,5 \\ \text{sym.} & & & & 0,6 & 0,1 \\ & & & & & 20,3 \end{pmatrix} \text{ GPa} \quad (2.1)$$

Tenseur de dilatation thermique anisotrope

Trois sources de données, obtenues en diffraction X [82, 89] et en diffraction de neutrons [95] sont disponibles. Kolb et al. [82] et Sun et al. [89] donnent in extenso les évolutions des paramètres de maille avec la température. A contrario, Yeager et al. [95] ne donnent que les paramètres de fonctions ajustées sur leurs données expérimentales. C'est pourquoi nous ne les prendrons pas en compte ici. Notons cependant que, selon les auteurs, elles sont très proches de celles de Sun et al. [89].

L'Annexe 9.2 indique comment extraire les composantes du tenseur de dilatation thermique anisotrope à partir des données expérimentales. A partir des données de Kolb et al. [82], on obtient [46] :

$$\boldsymbol{\alpha}^{\text{Kolb}} = \begin{pmatrix} 8,28 & 3,34 & -26,14 \\ & 29,04 & 0,41 \\ \text{sym.} & & 267,7 \end{pmatrix} \times 10^{-6} \text{ K}^{-1} \quad (2.2)$$

tandis qu'à partir des données de Sun et al. [89], on obtient, à température ambiante (voir l'Annexe 9.2) :

$$\boldsymbol{\alpha}^{\text{Sun}} = \begin{pmatrix} 11,29 & -0,48 & 9,71 \\ & 9,57 & -2,83 \\ \text{sym.} & & 169,01 \end{pmatrix} \times 10^{-6} \text{ K}^{-1} \quad (2.3)$$

Ces deux tenseurs se démarquent avant tout par la valeur de la composante α_{33} . Deux arguments militent en faveur des données de Sun et al [89]. D'une part, les données de Yeager [95] sont très proches de celles de Sun et al. [89].

D'autre part, les travaux antérieurs à cette thèse [96] ont déterminé le coefficient de dilatation thermique volumique du composite, vu comme un polycristal, par homogénéisation numérique à l'aide des données de Sun et al. [89], et ont trouvé une valeur très proche de celle obtenue expérimentalement. Ils ont par ailleurs montré que la prise en compte du liant, de la porosité et d'éventuelles microfissures intergranulaires ne modifient pas ce résultat de façon significative. Les mêmes simulations, réalisées avec les données de

Kolb et al. [82], donnent un coefficient de dilatation thermique effectif du composite beaucoup plus élevé, très différent de sa valeur expérimentale pour le composite réel.

En conclusion, les données de Sun et al. [89], a priori plus fiables que celles de Kolb et al. [82], seront utilisées dans les présents travaux.

Ténacité anisotrope du cristal de TATB

Compte tenu de l'hypothèse de rupture fragile émise au paragraphe 1.3.3, les caractéristiques de rupture du cristal de TATB se réduisent à sa ténacité, en l'espèce assimilée à son énergie de surface (voir par exemple [85, 97] et le chapitre 3). Le cristal de TATB est toutefois très anisotrope, comme l'ont montré les paragraphes précédents, et l'énergie de surface dépend très vraisemblablement de l'orientation cristallographique de la surface considérée.

A notre connaissance, il n'existe qu'une seule source donnant des valeurs d'énergie de surface du cristal de TATB. Il s'agit des travaux de Bidault et Pineau [93], qui obtiennent, par méthode de calcul atomistique, trois valeurs de l'énergie de surface pour les orientations [100], [010] et [001] respectivement. Les auteurs donnent les valeurs suivantes :

$$\begin{cases} E_a = 280,8 \text{ mJ.m}^{-2} \\ E_b = 260,3 \text{ mJ.m}^{-2} \\ E_c = 96,7 \text{ mJ.m}^{-2} \end{cases} \quad (2.4)$$

2.3.2 Le liant

Le liant est un polymère thermoplastique amorphe isotrope dont la température de transition vitreuse est de l'ordre de 100°C. Compte tenu de la gamme de températures retenue, on se limite au comportement du polymère dans le domaine vitreux, ce qui exclut la viscoélasticité, mais peut inclure la viscoplasticité.

Ce matériau a fait l'objet d'une campagne d'essais de traction simple sur éprouvettes plates, de compression simple sur plots cylindriques, et de cisaillement simple sur éprouvettes papillon, dans la gamme de températures [0 - 60°C], et de vitesses de déformation [10^{-5} - 10^{-3}], ainsi que d'essais ultrasonores et d'essais de dilatation thermique par TMA.

Elasticité

Les modules de compressibilité $K(T)$ et de cisaillement $G(T)$ sont donnés en GPa par :

$$\begin{cases} K(T) = 5,06 - 2,22 \times 10^{-3}(T - T_0) \\ G(T) = 0,89 - 3,05 \times 10^{-3}(T - T_0) \end{cases} \quad (2.5)$$

où la température est exprimée en °C et où $T_0 = 20^\circ\text{C}$.

Dilatation thermique

Le coefficient de dilatation thermique *volumique* est donné en K^{-1} par :

$$\alpha_v = 1,935 \times 10^{-4} + 7,982 \times 10^{-5}(T - T_0) \quad (2.6)$$

où la température est de nouveau exprimée en °C et où $T_0 = 20^\circ\text{C}$.

Viscoplasticité

La figure 2.6a illustre la réponse du liant en compression simple aux grandes déformations, à température ambiante et à deux vitesses de sollicitation. Cette réponse est typique d'un polymère amorphe dans le domaine vitreux. La courbe contrainte-déformation commence par une partie élastique, passe par un pic de contrainte, subit ensuite un adoucissement et passe par un minimum avant la phase ultime d'écroutissage. Par convention, le pic de contrainte est appelé limite d'écoulement. Cette limite dépend de la température, de la vitesse de sollicitation, et de la triaxialité des contraintes. La dépendance aux deux premiers paramètres est illustrée par la figure 2.6b dans un domaine de déformations plus restreint.

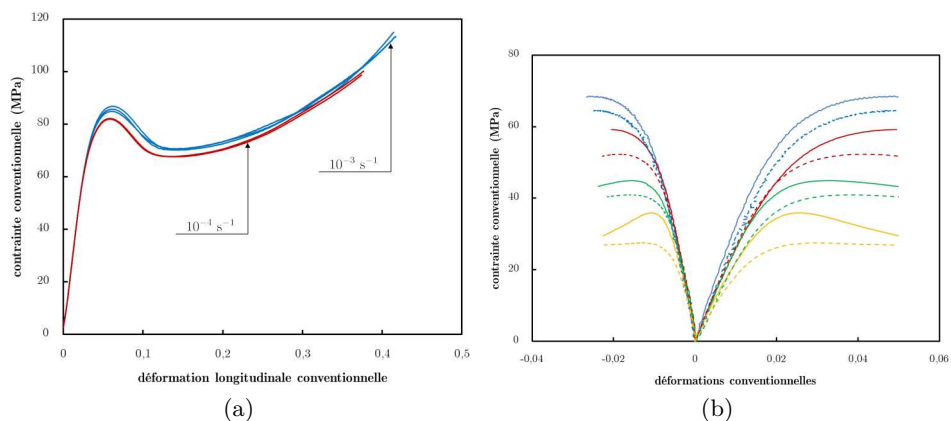


FIGURE 2.6 – (a) Exemples de résultats de compression simple à deux vitesses de déformation (essais réalisés au CEA Le Ripault par Jean-Luc Brigolle et Christophe Pompon).

(b) Résultats de traction simple. Bleu : 0°C ; rouge : 20°C ; vert : 40°C ; orange : 60°C . Traits continus : 10^{-3} s^{-1} ; traits pointillés : 10^{-4} s^{-1} (essais réalisés à l'ISAE-ENSMA par David Mellier).

La dépendance de la limite d'écoulement à la triaxialité des contraintes est illustrée par la figure 2.7. On constate que la limite d'écoulement dépend linéairement de la composante hydrostatique des contraintes.

Les résultats des essais de compression, traction et cisaillement simples à toutes les températures et vitesses de sollicitation ont été utilisés pour

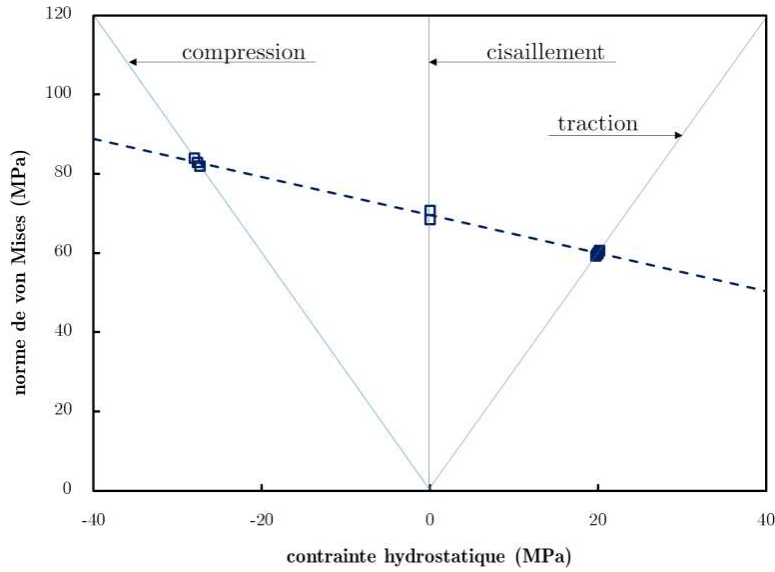


FIGURE 2.7 – Limite d'écoulement en traction, compression et cisaillement, mesurée à température ambiante et à la vitesse de 10^{-3} s^{-1} .

identifier le modèle d'Arruda et Boyce [98]. Sans rappeler le modèle complet, la limite d'écoulement est donnée par :

$$\tau = \tilde{S} \left[1 + \frac{T}{A\tilde{S}} \ln \left(\frac{\dot{\gamma}^p}{\dot{\gamma}_0} \right) \right]^{\frac{6}{5}} \quad (2.7)$$

où $\tau = \sqrt{\frac{1}{2}s_{ij}s_{ij}}$ est la contrainte équivalente, \mathbf{s} est le déviateur des contraintes, T est la température absolue, $\dot{\gamma}^p$ est la vitesse de déformation plastique équivalente, \tilde{S} est défini par :

$$\tilde{S} = S_0 + \frac{1}{3}\beta\sigma_{kk} \quad (2.8)$$

et où σ est le tenseur de contraintes. Les constantes A , $\dot{\gamma}_0$, S_0 et β sont données par :

$$\begin{cases} A = 215,44 \text{ K.MPa}^{-1} \\ \dot{\gamma}_0 = 1,50 \times 10^{31} \text{ s}^{-1} \\ S_0 = 156,86 \text{ MPa} \\ \beta = -0,35 \end{cases} \quad (2.9)$$

2.4 Comportement thermomécanique du composite

Le composite a fait l'objet d'essais de compression uniaxiale et triaxiale sur échantillons cylindriques, de traction uniaxiale sur éprouvettes à section carrée, et d'essais de dilatation thermique sur échantillons parallélépipédiques. On donne dans ce qui suit un aperçu du comportement thermomécanique du composite, puis un bref panorama de sa réponse en dilatation thermique.

2.4.1 Comportement en compression et en traction

La figure 2.8a compare la réponse du composite en traction simple et en compression simple cyclées à température ambiante, et la figure 2.8b compare les réponses du composite en compression simple et en compression triaxiale, pour une pression de confinement de 200 MPa. Chaque cycle comprend une phase de relaxation (à déformation longitudinale fixée) et une phase de recouvrance (à contrainte nulle).

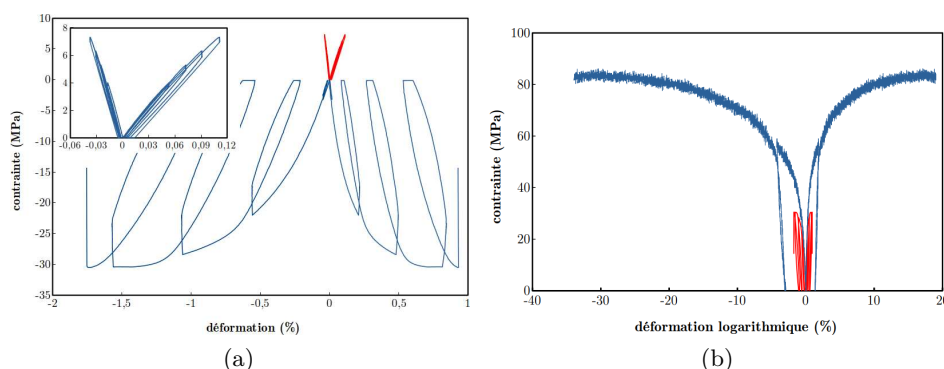


FIGURE 2.8 – (a) Réponse du composite en traction (en rouge) et en compression (en bleu) simples à température ambiante et vitesse de sollicitation de 10^{-4} s^{-1} . Insert : réponse en traction. Par convention, les contraintes et déformations sont positives en traction (essais réalisés au CEA Le Ripault par Christophe Pompon et Didier Picart).

(b) Réponse du composite en compression simple (en rouge) et en compression triaxiale à 200 MPa de pression de confinement (en bleu). Pour une meilleure lisibilité, les contraintes sont positives en compression (essai triaxial réalisé au CEA Gramat par Philippe Bortoluzzi et Patrick Rey).

Sous faible triaxialité (traction et compression simples), la rupture intervient à des niveaux de déformations faibles. De plus, la contrainte maximale en compression est environ quatre fois plus élevée qu'en traction simple, ce qui est typique d'un comportement quasi-fragile. On observe des effets de relaxation, et de recouvrance non négligeables, ce qui indique une forte dépendance au temps, ainsi que des déformations résiduelles relativement importantes, qui suggèrent des effets de plasticité appréciables, probablement imputables au liant, ou de frottement sur les lèvres des microfissures.

Sous forte triaxialité (ici une pression de confinement de 200 MPa), le

caractère quasi-fragile disparaît, le composite devient ductile et sa contrainte maximale est presque trois fois plus élevée qu'en compression simple. Ce résultat est typique d'une transition fragile-ductile, elle-même typique des matériaux quasi-fragiles.

L'origine de ces effets réside vraisemblablement dans l'effet inhibiteur de la pression sur l'ouverture de fissures. Cette inhibition ralentit l'apparition des fissures et leur effet adoucissant. Les niveaux de contrainte augmentent, et peuvent atteindre la contrainte d'écoulement du cristal de TATB, expliquant ainsi le caractère ductile observé en compression triaxiale. La phénoménologie est la même que celle observée sur un composite à base d'octogène [2].

2.4.2 Comportement en compression hydrostatique

Un essai de compression hydrostatique cyclique a été réalisé à température ambiante jusqu'à une pression de 950 MPa. La figure 2.9 ne montre le résultat des cycles que jusqu'à 600 MPa, pour une meilleure lisibilité. On observe que le matériau se compacte progressivement sous l'effet de la pression imposée, la compaction (déformation volumique résiduelle après décharge) n'évoluant plus au-dessus de 600 MPa.

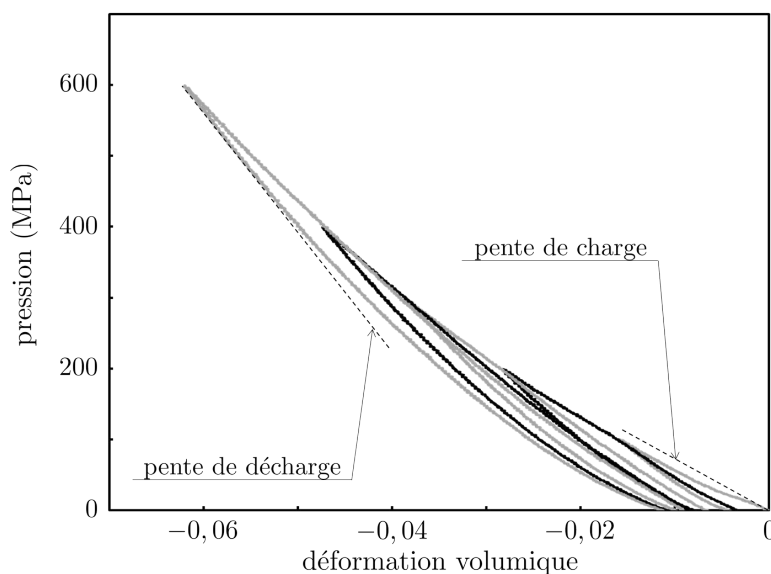


FIGURE 2.9 – Réponse du composite en compression hydrostatique cyclique (essai réalisé au CEA Gramat par Philippe Bortoluzzi et Patrick Rey).

Si l'on mesure la pente des courbes de charge et de décharge de chaque cycle comme indiqué sur la figure 2.9, on obtient les résultats de la figure 2.10. Il apparaît d'abord que les pentes initiales de tous les cycles sont approximativement identiques. On constate ensuite que les pentes de décharge présentent deux régimes. Le régime non linéaire observé au-dessus de 600 MPa est

interprété comme l'effet de la compaction. Au-dessus de 600 MPa, on observe une asymptote oblique, que l'on interprète comme la dépendance du module de compressibilité à la pression. De ce fait, l'ordonnée à l'origine de l'asymptote oblique (ligne pointillée sur la figure 2.10) s'interprète comme le module de compressibilité du matériau totalement compacté, mesuré à pression atmosphérique.

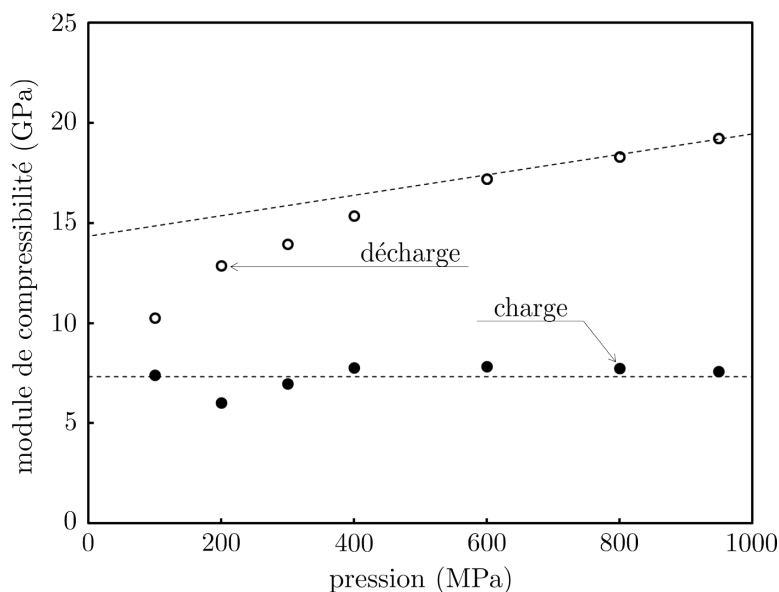


FIGURE 2.10 – Evolution des pentes de charge et de décharge (voir figure 2.9) avec la pression maximale de chaque cycle.

Les travaux antérieurs [48, 96] ont suggéré que le composite contient, à l'état initial, une population de microfissures ouvertes, vraisemblablement intergranulaires, qui expliquent la compaction et le régime non linéaire de la figure 2.10. Ces microfissures se ferment à la compression, et s'ouvrent de nouveau à la décharge, expliquant la forte courbure des courbes de décharge de la figure 2.9 au voisinage de la pression ambiante.

2.4.3 Comportement en dilatation thermique

Les essais de dilatation thermique cyclique ont été réalisés à une vitesse de chauffe et de refroidissement de $\pm 10^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$, afin d'être aussi proche que possible de l'équilibre thermique. La figure 2.11 illustre la réponse du composite à des cycles thermiques à chaud (en rouge) et à froid (en bleu). Dans les deux cas, on observe une dilatance, toutefois nettement plus faible pour les essais à froid.

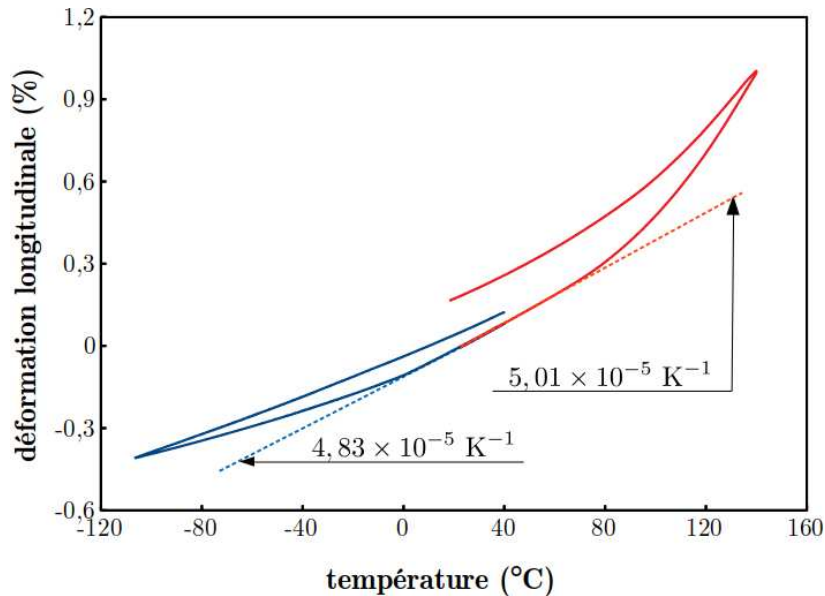


FIGURE 2.11 – Réponse du composite en dilatation thermique cyclique. En rouge : à chaud, en bleu : à froid (essais réalisés au CEA Le Ripault par Maxime Biessy et Thomas Peyres).

La zone linéaire dans le domaine $[10 - 77^\circ\text{C}]$ correspond au domaine de réversibilité, associé à un coefficient de dilatation thermique volumique de $1,455 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ (écart-type $0,028 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$). Cette valeur est inférieure à celles des coefficients de dilatation thermique volumique des deux constituants (voir les paragraphes 2.3.1 et 2.3.2).

Dans son état initial, le composite est constitué de cristaux très anisotropes orientés aléatoirement, ce qui induit des incompatibilités de déformation thermique à la chauffe ou au refroidissement. Si l'on admet que le liant est majoritairement présent aux interfaces entre les grains de TATB, on peut distinguer les deux situations suivantes :

- à l'extrémité basse du domaine linéaire, le liant est « dur », ce qui induit des contraintes internes qui réduisent localement la dilatation thermique [48, 96]. Si l'on néglige la dépendance des propriétés thermoélastiques des constituants à la température, ces contraintes thermiques croissent linéairement avec l'élévation de température, et peuvent atteindre un niveau au-delà duquel le seuil d'écoulement du liant, le seuil de rupture du cristal et/ou le seuil de rupture interfaciale peuvent être atteints,
- à l'extrémité haute du domaine linéaire, le liant se « ramollit » et ne peut plus transmettre de contraintes importantes. Rien ne s'oppose aux incompatibilités de déformations thermiques entre grains d'orientations différentes, ce qui oblige le liant à se déformer tant que l'adhésion est maintenue, et des microfissures intergranulaires à se développer dans le cas contraire.

Ces deux scénarios expliquent la différence de phénoménologie entre les résultats à chaud et à froid, et suggèrent que les phénomènes irréversibles se produisant au-delà du seuil évoqué plus haut ne sont pas de même nature.

La figure 2.12 donne le détail d'un essai à chaud avec cycles intermédiaires. On observe que les refroidissements sont quasi-confondus avec les chauffages ultérieurs, et que la pente du début des phases de chauffe augmente de façon monotone. La dilatance augmente également de façon monotone avec la température.

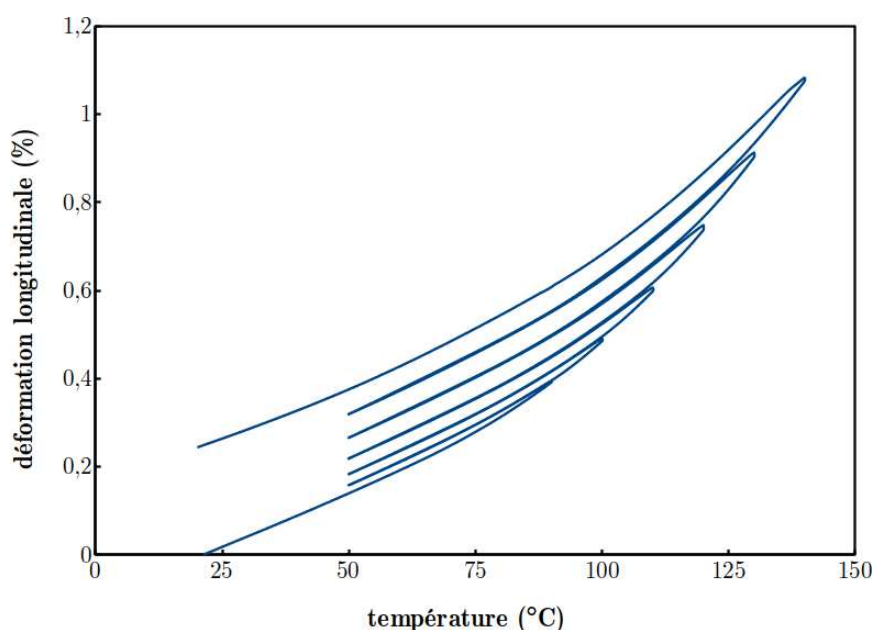


FIGURE 2.12 – Réponse du composite en dilatation thermique cyclique au-dessus de la température ambiante (essai réalisé au CEA Le Ripault par Maxime Biessy et Thomas Peyres).

La figure 2.13 superpose le résultat de deux essais à froid avec cycles intermédiaires. On observe que les phases de chauffe commencent par une partie linéaire montrant que le coefficient de dilatation thermique décroît avec la température minimale du cycle précédent. Ce coefficient augmente ensuite progressivement jusqu'à revenir à la valeur correspondant au matériau initial. La dilatance est faible, mais croît continûment au cours des cycles successifs.

Si l'on trace les pentes des parties linéaires des phases de chauffe, on constate qu'elles se croisent approximativement en un point unique, que l'on dénomme « origine commune » dans ce qui suit. Les pentes des diverses phases de chauffe des deux essais de la figure 2.13 et les coordonnées de l'origine commune sont calculées par optimisation, et le résultat est indiqué sur la figure 2.14.

Les travaux antérieurs [48, 96] ont montré que la diminution du coefficient de dilatation thermique effectif est vraisemblablement dû au développement de microfissures dont la normale est orthogonale au plan graphitique des

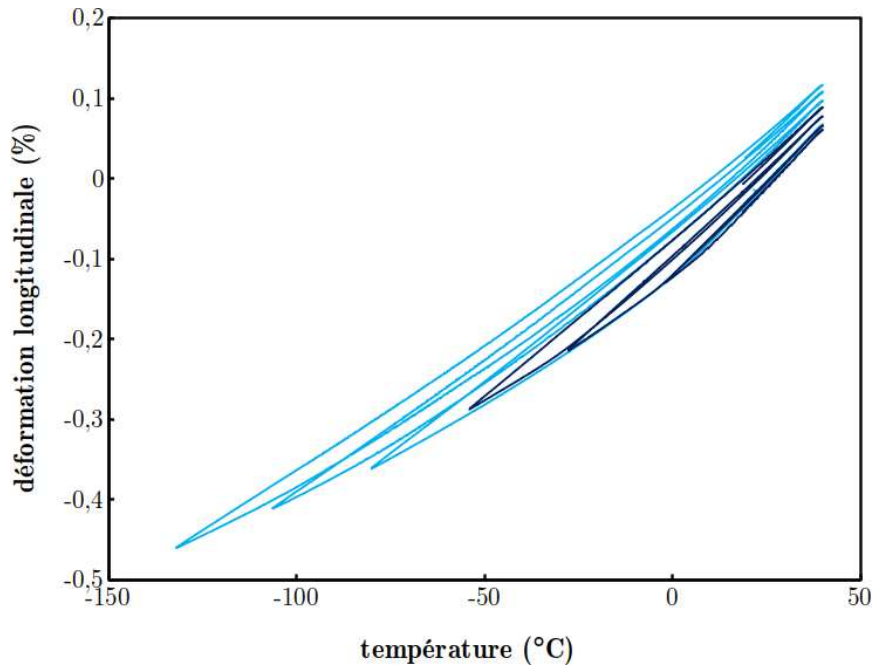


FIGURE 2.13 – Superposition de deux essais distincts illustrant la réponse du composite en dilatation thermique cyclique au-dessous de la température ambiante (essais réalisés au CEA Le Ripault par Thomas Peyres et Maxime Biessy).

cristaux de TATB. On interprète le concept d'origine commune de la façon suivante. Si l'on excepte temporairement les manifestations non linéaires au cours des phases de réchauffement, la phénoménologie est celle d'un matériau élastique endommageable, la non linéarité au refroidissement étant uniquement due au développement (apparition, croissance et possiblement coalescence) de microfissures transgranulaires principalement orientées dans le plan graphitique des cristaux de TATB. Le fait que l'origine commune ne se situe pas à température ambiante est interprété comme le signe de la présence de contraintes internes à l'état initial.

De ce fait, le seul phénomène dissipatif reste la microfissuration, et aucune plasticité (liant et cristaux de TATB) n'est invoquée (ce point est évoqué brièvement au § 8.4). Par ailleurs, les non linéarités constatées lors des phases de chauffe après un passage à basse température sont interprétées comme étant dues à la refermeture progressive des microfissures, et la dilatance à une refermeture incomplète de ces dernières, vraisemblablement due à leur rugosité, ce qui souligne le rôle du frottement.

Il est clair que ce raisonnement ne s'applique qu'aux essais thermiques à froid. En effet, la contrainte d'écoulement du liant décroît fortement avec la température, et doit nécessairement être atteinte en-deçà de la température de transition vitreuse du liant. De ce fait, la plasticité de ce dernier doit être invoquée aux températures supérieures à l'ambiante. Lorsqu'il devient

« mou », il ne peut transmettre que des contraintes très faibles, insuffisantes pour fissurer les cristaux. Il apparaît donc vraisemblable que la dilatance constatée à haute température soit associée à un mécanisme de fissuration intergranulaire.

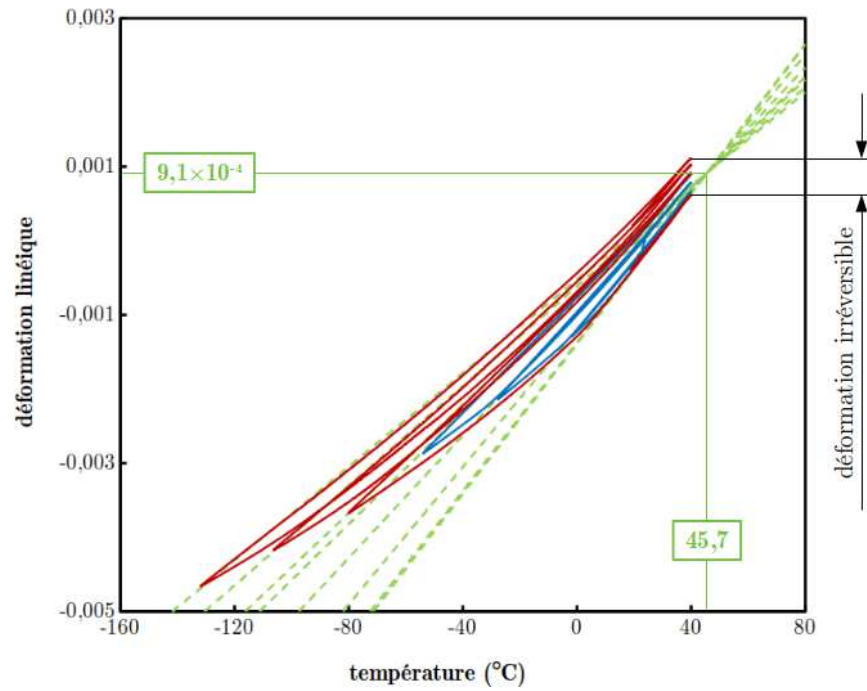


FIGURE 2.14 – Réponse du composite en dilatation thermique cyclique au-dessous de la température ambiante.

Chapitre 3

Modélisation de la rupture par champ de phase

Ce chapitre décrit différentes méthodes numériques permettant de modéliser la rupture fragile et les principes sur lesquels celles-ci reposent. On rappelle le principe variationnel de minimisation de l'énergie totale de Francfort et Marigo, et on présente la méthode de résolution numérique par champ de phase. On décrit ensuite quelques développements importants de la méthode, portant notamment sur les lois de comportement unilatérales, les extensions anisotropes, la prise en compte de la thermoélasticité, la prise en compte de différents mécanismes de fissuration, les transformations finies et la rupture ductile. On justifie le choix d'un modèle particulier de champ de phase utilisé dans la suite de ce mémoire.

3.1 Introduction

L'objectif de cette thèse est de se doter de la capacité à prédire l'apparition, la croissance et la nucléation de microfissures intra- et intergranulaires. On a vu au paragraphe 1.3.3 que l'on se limite ici aux sollicitations de faible triaxialité, correspondant aux régimes de traction et de compression uniaxiales quasi-statiques, ainsi qu'aux sollicitations thermiques de type dilatométrie. De ce fait, on néglige tout effet de déformation irréversible des cristaux de TATB. On a vu au paragraphe 2.4 que les expériences de dilatométrie au-dessous de la température ambiante n'invoquent vraisemblablement que la thermoélasticité des constituants et la microfissuration des cristaux de TATB, mais pas la plasticité du liant, ni la rupture intergranulaire. Pour ce type de sollicitations, l'hypothèse de rupture fragile du TATB, faite au chapitre 1, apparaît donc fondée. Cette hypothèse sera étendue aux sollicitations mécaniques de faible triaxialité. Elle sera également étendue à la rupture intergranulaire, en première approximation, et pourra être relaxée au cours de travaux ultérieurs.

Il s'agit donc dans ce chapitre de choisir une voie de modélisation de la rupture fragile des cristaux de TATB et des interfaces TATB-liant. Le développement d'un modèle de rupture n'entre pas dans les objectifs de la présente thèse, pour laquelle on se contentera de choisir un modèle particulier à partir d'une analyse bibliographique aussi complète que possible, en vue de l'implanter dans un code de Fourier. Le paragraphe 3.2 indique pourquoi c'est la voie de modélisation de la rupture fragile par champ de phase qui est retenue. Le paragraphe 3.3 présente les bases de l'approche de la rupture fragile par champ de phase. Le paragraphe 3.4 dresse un bref état de l'art des avancées récentes, et inclut les questions cruciales du contact unilatéral et de l'anisotropie. Le choix final du modèle est fait et justifié au paragraphe 3.5, tandis que les questions relatives aux aspects algorithmiques seront abordées au chapitre suivant.

3.2 Choix de l'approche de modélisation

Deux approches de modélisation sont a priori possibles, la mécanique de l'endommagement quasi-fragile, et la mécanique de la rupture fragile.

La mécanique de l'endommagement quasi-fragile prend en compte les populations de microfissures *implicitement*, à l'aide d'une (ou plusieurs) variable(s) interne(s), dite(s) d'endommagement, généralement tensorielle(s), agissant sur les propriétés élastiques [99]. La voie de modélisation la plus intéressante (voir par exemple [100–102]) cherche à relier la variable d'endommagement aux populations de microfissures par homogénéisation. A cet effet, le milieu est généralement considéré comme une matrice homogène, éventuellement anisotrope, dans laquelle les microfissures sont dispersées, et les rares modèles à matrice polycristalline [68, 103] ne décrivent que l'effet des populations de microfissures sur les propriétés élastiques effectives mais pas l'évolution des populations de microfissures. De ce fait, cette voie de modélisation n'est pas adaptée aux présents besoins, et ne sera pas retenue ici.

La mécanique de la rupture fragile prend en compte les (micro)-fissures *explicitement*. Ses fondements remontent aux travaux de Griffith [85], qui formule un critère énergétique d'amorçage limité aux fissures pré-existantes (voir le § 3.3.1). Francfort et Marigo [97] lèvent cette limitation au moyen d'une formulation variationnelle consistant à minimiser la somme de l'énergie élastique et de l'énergie de surface (voir le § 3.3.2). Cependant, la résolution numérique de ce problème de minimisation se heurte à la nature discontinue des fissures. Bourdin et al. [104] lèvent cette difficulté en proposant une méthode de régularisation transformant une formulation discontinue de la fissuration en une formulation dite « par champ de phase » (voir le § 3.3.3). Cette formulation est bien adaptée au problème posé dans cette thèse et sera retenue ici, même si certains aspects doivent faire l'objet de développements

complémentaires, notamment pour permettre la description de la rupture en compression.

3.3 Modélisation de la rupture fragile par champ de phase

On décrit dans ce paragraphe l'enchaînement des idées conduisant à un modèle de rupture fragile par champ de phase simple et robuste que nous qualifierons de standard. Les développements récents permettant à la fois de maîtriser la modélisation et de l'adapter à des besoins précis, font l'objet du paragraphe suivant.

3.3.1 Le modèle de Griffith

Considérons pour fixer les idées une plaque homogène d'épaisseur B contenant une fissure de longueur $2a$, soumise à une contrainte loin de la fissure σ , selon le schéma de la figure 3.1 [105].

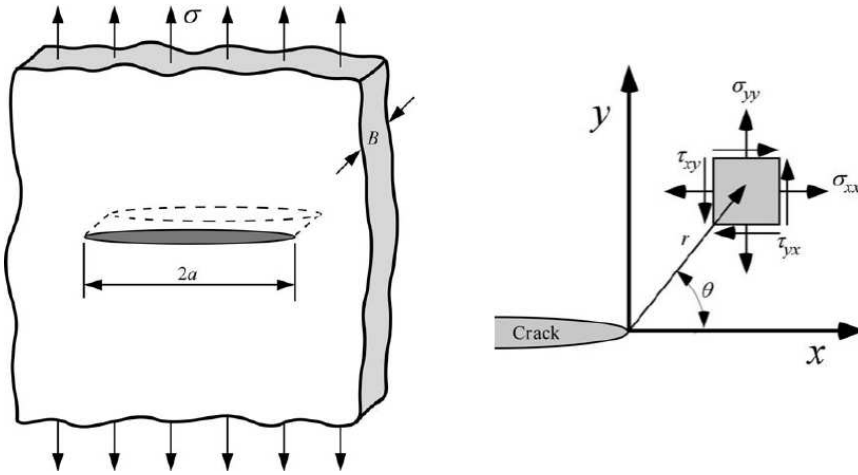


FIGURE 3.1 – Plaque fissurée chargée en traction. A gauche : géométrie. A droite : champ de contraintes près de la pointe de fissure (d'après [105]).

On sait que le champ de contraintes est singulier en pointe de fissure (voir par exemple [13]), et peut s'écrire :

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right] \\ \sigma_{yy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[1 + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right] \\ \sigma_{xy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{3\theta}{2}\right) \end{cases} \quad (3.1)$$

où le facteur d'intensité des contraintes (en mode I) K_I s'écrit :

$$K_I = \sigma\sqrt{\pi a} \quad (3.2)$$

De ce fait, les contraintes en pointe de fissure sont infinies pour toute valeur non nulle de la contrainte appliquée, et un critère d'amorçage en contraintes prédirait l'amorçage dès le début du chargement.

C'est pourquoi Griffith [85] propose un critère d'amorçage énergétique. Son hypothèse est que l'aire de la fissure ne peut augmenter que si l'énergie potentielle du système est suffisante pour compenser le travail nécessaire à la création des nouvelles surfaces, ce qui se met sous la forme :

$$\frac{\delta W^s}{\delta S} + \frac{\delta \Pi}{\delta S} = 0 \quad (3.3)$$

où δW^s est le travail nécessaire pour créer une surface δS de fissures et $\delta \Pi$ la variation de l'énergie potentielle du système lors de l'accroissement d'aire de la fissure. Le premier terme s'écrit :

$$\frac{\delta W^s}{\delta S} = 2\gamma \quad (3.4)$$

où γ est l'énergie spécifique de surface du milieu considéré. Le second terme peut être vu comme le taux de restitution d'énergie critique g_c , ce qui permet d'écrire :

$$g_c = 2\gamma \quad (3.5)$$

Le paramètre g_c est appelé ténacité, et s'assimile au double de l'énergie de surface du milieu considéré.

3.3.2 Le modèle variationnel de Francfort et Marigo

Griffith [85] a montré que le taux de restitution d'énergie s'écrit :

$$\frac{\delta \Pi}{\delta S} = -\frac{\pi\sigma^2 a}{E} \quad (3.6)$$

où E est le module d'Young du milieu considéré, dans l'hypothèse des contraintes planes. En reportant dans l'expression 3.3, on obtient :

$$\sigma_r = \sqrt{\frac{2E\gamma}{\pi a}} \quad (3.7)$$

où σ_r est la valeur minimale de la contrainte appliquée pour provoquer la propagation de la fissure. On observe que si le milieu ne contient aucune fissure ($a = 0$), cette contrainte est infinie. En d'autres termes, le critère de Griffith ne permet pas de prédire l'apparition de nouvelles fissures, et ne peut être utilisé que si des fissures pré-existent.

Pour remédier à ce défaut, Francfort et Marigo [97] proposent une extension du modèle de Griffith, la théorie variationnelle de la rupture fragile. Considérons un domaine Ω , pouvant (ou non) contenir un ensemble de fissures noté collectivement Γ , chargé en volume par des forces de volume \mathbf{f} et sur la partie $\partial\Omega_t$ de sa frontière extérieure par une densité surfacique d'effort imposée $\bar{\mathbf{t}}$, et soumis sur la partie complémentaire de sa frontière $\partial\Omega_u$ à un déplacement imposé $\bar{\mathbf{u}}$. Définissons l'énergie potentielle $\mathcal{P}(\mathbf{u}, \Gamma)$ par :

$$\mathcal{P}(\mathbf{u}, \Gamma) = W^e(\mathbf{u}, \Gamma) + W^s(\Gamma) - W^{\text{ext.}}(\mathbf{u}) \quad (3.8)$$

avec

$$\begin{cases} W^e(\mathbf{u}, \Gamma) = \int_{\Omega \setminus \Gamma} w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) dV \\ W^s(\Gamma) = \int_{\Gamma} g_c dS \\ W^{\text{ext.}}(\mathbf{u}) = \int_{\partial\Omega_t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} dS + \int_{\partial\Omega_u} \mathbf{t} \cdot \bar{\mathbf{u}} dS + \int_{\Omega \setminus \Gamma} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} dV \end{cases} \quad (3.9)$$

où $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$, $\boldsymbol{\sigma}$ et \mathbf{n} étant respectivement le tenseur des contraintes et la normale extérieure à la frontière $\partial\Omega_u$. Dans ces expressions, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \text{sym}(\nabla \mathbf{u})$ est le tenseur des déformations infinitésimales, W^e est l'énergie élastique du système, W^s son énergie de surface, et $W^{\text{ext.}}$ le travail des efforts extérieurs.

La théorie variationnelle de la rupture fragile stipule qu'à tout instant, l'énergie potentielle est un minimum pour tous les champs de déplacement admissibles, c'est-à-dire vérifiant l'équilibre et les conditions aux limites, et pour tout champ de fissures admissible, c'est-à-dire dont la surface cumulée ne peut décroître, ce qui s'écrit :

$$(\mathbf{u}^{\text{sol.}}, \Gamma^{\text{sol.}}) = \arg \min_{\substack{\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ sur } \partial\Omega_u \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \text{ sur } \partial\Omega_t \\ \dot{S}(\Gamma) \geq 0}} \mathcal{P}(\mathbf{u}, \Gamma) \quad (3.10)$$

où $(\mathbf{u}^{\text{sol.}}, \Gamma^{\text{sol.}})$ est la solution du problème de minimisation.

3.3.3 Régularisation du problème de minimisation

Cependant, la mise en œuvre de ce modèle nécessite de localiser les frontières des fissures et de gérer les sauts de déplacement, l'ensemble représentant des inconnues du problème variationnel. Cette gestion étant connue pour être complexe, on opte pour la théorie variationnelle *régularisée* de la rupture fragile, proposée initialement par Bourdin et al. [104].

Travaillant sur un problème de segmentation d'images, Mumford et Shah [106] définissent une fonctionnelle à minimiser analogue à la relation (3.8), dans laquelle les frontières des objets à segmenter sont l'analogue des fissures. L'une des principales difficultés de cette proposition réside dans le

fait que ces frontières (ou les fissures) sont à la fois un domaine d'intégration et une inconnue du problème. Pour résoudre le problème numériquement, Ambrosio et Tortorelli [107] proposent une méthode basée sur le concept de *champ de phase*. En s'inspirant fortement de ces travaux, Bourdin et al. [104, 108, 109], puis Kuhn et Muller [110, 111], Kuhn [112], Miehe et al. [113, 114] ont donné une formulation régularisée de la relation (3.8) de la façon suivante.

On peut représenter une fissure par une variable de champ $\phi(\mathbf{x})$ prenant les valeurs 0 (hors de la fissure) ou 1 (dans la fissure), de façon analogue à la fonction caractéristique, ou fonction de phase. Il peut dès lors être vu comme une variable d'endommagement. Le principe consiste à « diffuser la fissure », c'est-à-dire à faire varier le champ de phase de façon continue ($0 \leq \phi(\mathbf{x}) \leq 1$) sur un petit domaine, appelé domaine de diffusion. Il s'agit donc d'approximer l'énergie potentielle comme suit :

$$\mathcal{P}(\mathbf{u}, \Gamma) \approx \mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \phi) = W_\ell^e(\mathbf{u}, \phi) + W_\ell^s(\phi) - W^{ext.}(\mathbf{u}) \quad (3.11)$$

que l'on peut également mettre sous la forme intégrale générique :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \phi) = & \int_{\Omega} w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi) dV + \int_{\Omega} g_c \gamma(\phi, \nabla \phi) dV - \int_{\Omega} \bar{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{u} dV \\ & - \int_{\partial\Omega_f} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} dS - \int_{\partial\Omega_u} \mathbf{t} \cdot \bar{\mathbf{u}} dS \end{aligned} \quad (3.12)$$

Dans cette expression, la variable ϕ intervient dans le premier terme pour réduire l'énergie élastique et jouer un rôle régularisé de restitution d'énergie élastique, le deuxième terme étant une version régularisée de l'énergie de surface, que nous définirons au paragraphe suivant. On note que dans la relation (3.12), les trois premières intégrales s'étendent sur tout le domaine Ω : on a remplacé l'inconnue Γ , de nature topologique, par la variable de champ ϕ .

3.3.4 Représentation régularisée des fissures

On se base ici sur l'exposé de Miehe et al. [114]. Pour fixer les idées, considérons le cas unidimensionnel d'une fissure positionnée en $x = 0$. Pour une fissure réelle, le champ de phase est donné par :

$$\phi(x) = \delta(0) \quad (3.13)$$

où δ est la fonction de Dirac. Approximons maintenant la fonction de Dirac par une exponentielle décroissante :

$$\phi(x) \simeq e^{-\frac{|x|}{\ell}} \quad (3.14)$$

qui satisfait à la condition $\phi(0) = 1$, indiquant que le milieu est totalement endommagé au centre de la fissure.

La relation (3.14) est solution de l'équation différentielle :

$$\phi(x) - \ell^2 \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = 0 \quad (3.15)$$

qui elle-même est la solution du problème unidimensionnel de minimisation de la fonctionnelle $\Gamma_\ell(\phi)$:

$$\Gamma_\ell(\phi) \equiv \frac{1}{2\ell} \int_\Omega \left(\phi^2 + \ell^2 \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \right) dV \quad (3.16)$$

On généralise (3.16) au cas tridimensionnel de la façon suivante :

$$\Gamma_\ell(\phi) \equiv \frac{1}{2\ell} \int_\Omega \left(\phi^2 + \ell^2 \nabla \phi \cdot \nabla \phi \right) dV \quad (3.17)$$

La dimension de $\Gamma_\ell(\phi)$ est celle d'une surface. Elle tend donc vers la surface de fissure lorsque $\ell \rightarrow 0$:

$$\lim_{\ell \rightarrow 0} \Gamma_\ell = \int_\Gamma dS = \Gamma \quad (3.18)$$

De ce fait, la fonction $\gamma(\phi, \nabla \phi)$ définie dans la relation (3.12), est donnée par :

$$\gamma(\phi, \nabla \phi) = \frac{1}{2\ell} \left(\phi^2 + \ell \nabla \phi \cdot \nabla \phi \right) \quad (3.19)$$

et représente la densité locale de fissures, ou leur surface spécifique (par unité de volume) locale, et s'exprime en m^{-1} , ou en $m^2.m^{-3}$.

Inversement, si l'on connaît la surface de fissure $\Gamma = \{\bar{\mathbf{x}} : \phi(\bar{\mathbf{x}}) = 1\}$, on peut reconstruire le champ de phase $\phi(\mathbf{x})$ en résolvant l'équation différentielle (3.15) sous la condition de Dirichlet $\phi(\mathbf{x}) = 1$ pour $\mathbf{x} \in \Gamma$. Ce point est par exemple utile pour représenter une entaille à l'aide d'un champ de phase.

3.3.5 Minimisation de l'énergie potentielle

Le présent exposé se base sur les travaux de Miehe et al. [113], dérivés de ceux de Bourdin et al., [104] et de Bourdin [108]. Il s'agit de remplacer le principe de minimisation donné au paragraphe 3.3.2 par le principe suivant : *l'énergie potentielle est un minimum pour tous les champs de déplacement admissibles, c'est-à-dire vérifiant l'équilibre et les conditions aux limites, et pour tout champ de phase admissible, c'est-à-dire vérifiant les conditions aux limites et dont la surface cumulée régularisée ne peut décroître, ce qui s'écrit :*

$$(\mathbf{u}_\ell^{\text{sol.}}, \phi_\ell^{\text{sol.}}) = \arg \min_{\substack{\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ sur } \partial\Omega_u \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \text{ sur } \partial\Omega_f \\ \phi = \bar{\phi} \text{ sur } \partial\Omega_\phi \\ \Gamma_\ell \geq 0}} \mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \phi) \quad (3.20)$$

Dans cette expression, on a ajouté une condition aux limites à vérifier par le champ de phase sur la partie $\partial\Omega_\phi$ de la frontière extérieure du domaine. La variation de l'énergie potentielle (3.12) s'écrit :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \phi) &= \int_\Omega \frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)}{\partial \varepsilon_{ij}} \delta \varepsilon_{ij} dV - \int_\Omega \bar{f}_i \delta u_i dV - \int_{\partial\Omega_f} \bar{t}_i \delta u_i dS \\ &+ \int_\Omega \frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)}{\partial \phi} \delta \phi dV + \int_\Omega g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi} \delta \phi dV \\ &+ \int_\Omega g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial (\nabla \phi)_i} \delta (\nabla \phi)_i dV = 0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

En utilisant (i) la loi d'état mécanique $\frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)}{\partial \varepsilon_{ij}} = \sigma_{ij}$, (ii) la définition de la variation du tenseur des déformations $\delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\delta u_{i,j} + \delta u_{j,i})$ et la symétrie du tenseur des contraintes, et (iii) la définition du gradient $(\nabla \phi)_i = \phi_{,i}$, cette relation se transforme en :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \phi) &= \int_\Omega \sigma_{ij} \delta u_{i,j} dV - \int_\Omega \bar{f}_i \delta u_i dV - \int_{\partial\Omega_f} \bar{t}_i \delta u_i dS \\ &+ \int_\Omega \frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)}{\partial \phi} \delta \phi dV + \int_\Omega g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi} \delta \phi dV \\ &+ \int_\Omega g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_{,i}} \delta \phi_{,i} dV = 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

On intègre par parties le premier et le dernier termes du membre de droite, on utilise le théorème de la divergence, et le fait que $\delta u_i = 0$ sur $\partial\Omega_u$, pour obtenir :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \phi) &= \int_{\partial\Omega_f} \sigma_{ij} n_j \delta u_i dS + \int_\Omega \sigma_{ij,j} \delta u_i dV - \int_\Omega \bar{f}_i \delta u_i dV - \int_{\partial\Omega_f} \bar{t}_i \delta u_i dS \\ &+ \int_\Omega \frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)}{\partial \phi} \delta \phi dV + \int_\Omega g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi} \delta \phi dV \\ &+ \int_{\partial\Omega_\nabla} g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_{,i}} n_i \delta \phi dS + \int_\Omega g_c \left(\frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_{,i}} \right)_{,i} \delta \phi dV = 0 \end{aligned} \quad (3.23)$$

Dans cette expression, $\partial\Omega_\nabla = \partial\Omega \setminus \partial\Omega_\phi$. On regroupe terme à terme :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \phi) &= \int_{\partial\Omega_f} (\sigma_{ij} n_j - \bar{t}_i) \delta u_i dS + \int_\Omega (\sigma_{ij,j} - \bar{f}_i) \delta u_i dV \\ &+ \int_\Omega \left(\frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)}{\partial \phi} + g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi} + g_c \left(\frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_{,i}} \right)_{,i} \right) \delta \phi dV \\ &+ \int_{\partial\Omega_\nabla} g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_{,i}} n_i \delta \phi dS = 0 \end{aligned} \quad (3.24)$$

La minimisation de l'énergie potentielle pour toute valeur du déplacement et du champ de phase conduit donc au système d'égalités suivant :

$$\begin{cases} \sigma_{ij,j} - \bar{f}_i = 0 \text{ sur } \Omega \\ \sigma_{ij}n_j - \bar{t}_i = 0 \text{ sur } \partial\Omega_f \\ \frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)}{\partial \phi} + g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi} - g_c \left(\frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_i} \right)_{,i} = 0 \text{ sur } \Omega \\ \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_i} n_i = 0 \text{ sur } \partial\Omega_\nabla \end{cases} \quad (3.25)$$

L'équation (3.25)₁ est simplement l'équation de l'équilibre. L'équation (3.25)₂ est la condition aux limites en contraintes. L'objectif de la présente démarche est la relation (3.25)₃, qui représente la loi d'évolution du champ de phase, sur laquelle nous reviendrons longuement dans ce qui suit. Notons que la restriction sur la non régression de fissure n'est pas traduite dans ce système. Enfin, l'équation (3.25)₄ est la condition aux limites sur la portion de frontière extérieure $\partial\Omega_\nabla$ sur laquelle le champ de phase n'est pas spécifié.

3.3.6 Un premier modèle

La relation (3.25)₃ est pour l'instant générale. Pour lui donner une expression analytique, il faut spécifier la forme de l'énergie de déformation $w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)$. Comme on le verra au paragraphe 3.4.4, de nombreux auteurs proposent la forme générique suivante :

$$w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi) = g(\phi)w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + w^{pas.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \quad (3.26)$$

En dérivant par rapport au champ de phase, on obtient :

$$\frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)}{\partial \phi} = g'(\phi)w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \quad (3.27)$$

Notons que le terme $w^{pas.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$ n'intervient pas dans l'expression (3.27), d'où l'appellation « d'énergie passive » vis-à-vis de l'évolution du champ de phase. Nous y reviendrons en détail. Notons par ailleurs que les termes $w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$ et $w^{pas.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$ sont relatifs à l'énergie de déformation du milieu *non dégradé*. En utilisant les expressions (3.19) et (3.26), la relation (3.25)₃ devient :

$$g_c \left(\frac{\phi}{\ell} - \ell \Delta \phi \right) = -g'(\phi)w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \quad (3.28)$$

où Δ représente l'opérateur Laplacien. Dans cette expression, le membre de gauche est le terme de diffusion, tandis que le terme de droite représente la force motrice d'évolution du champ de phase (ou de l'endommagement).

De nombreux auteurs choisissent :

$$g(\phi) = (1 - \phi)^2 \quad (3.29)$$

C'est l'expression la plus simple permettant (i) d'avoir $g(0) = 1$ (pas d'influence du champ de phase s'il est nul), (ii) $g(1) = 0$ (partie active de l'énergie de déformation nulle pour le matériau totalement endommagé, c'est-à-dire fissuré), et (iii) $g'(1) = 0$, qui permet à la force motrice d'évolution du champ de phase de s'annuler dans le cas totalement fissuré, et donc au champ de phase de ne pas dépasser la valeur de 1. Dans ce cas, l'expression (3.28) devient :

$$g_c \left(\frac{\phi}{\ell} - \ell \Delta \phi \right) = 2(1 - \phi) w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \quad (3.30)$$

Notons que le terme de droite est toujours positif, et qu'il diminue à mesure que le champ de phase augmente. Ceci s'interprète par le fait que l'énergie élastique disponible pour la fissuration diminue à mesure que le matériau s'affaiblit.

3.3.7 Le modèle « standard »

Jusqu'ici, la formulation ne prend pas en compte l'irréversibilité du processus de fissuration. Au plan physique, la fissuration est d'abord un phénomène de rupture de liaisons chimiques (covalentes, métalliques, ioniques) ou physico-chimiques (hydrogène ou de van der Waals). On ne considère ici que les conséquences mécaniques de ces ruptures de liaisons. Notons cependant que dans certains cas, ces liaisons peuvent se reformer. Ce phénomène, connu sous le nom de « cicatrisation » (« crack-healing » en anglais), notamment dans les polymères (voir par exemple Wool et O'Connor [115]) et certaines céramiques (voir par exemple Lee et al. [116]) se produit essentiellement à haute température. Il n'est donc pas impossible pour l'adhésion liant-explosif, mais ne sera néanmoins pas pris en compte dans ce qui suit, dans la mesure où l'on ne s'intéresse dans ce travail qu'aux températures inférieures à la transition vitreuse.

En suivant Griffith [85], Francfort et Marigo [97] prennent en compte le phénomène d'irréversibilité de la rupture en spécifiant que la surface de rupture ne peut qu'augmenter au cours d'une évolution. Au plan numérique, cette condition a été prise en compte par diverses méthodes de pénalisation (voir en particulier Gerasimov et de Lorenzis [117]).

Miehe et al. [113, 114] traduisent cette irréversibilité par une condition de croissance locale (en tout point) de la surface (régularisée) de rupture :

$$\dot{\phi} \geq 0 \quad \frac{\delta \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\delta \phi} \geq 0 \quad (3.31)$$

La première de ces relations exprime le fait que le champ de phase ne peut pas décroître (le matériau ne peut pas se cicatriser). La seconde exprime le fait que la surface de fissure ne peut que croître. La relation (3.28) décrivant l'évolution du champ de phase satisfait la condition de croissance de la surface

de rupture (3.31)₂ à la charge dès lors que $g'(\phi) \leq 0$, ce qui est naturel pour une fonction d'adoucissement (de dégradation).

Cependant, cette relation indique également que le champ de phase décroît à la décharge. Pour prendre en compte la condition de non-décroissance du champ de phase (3.31)₁, la relation (3.28) doit être complétée comme suit :

$$g_c \left(\frac{\phi}{\ell} - \ell \Delta \phi \right) = -g'(\phi) \psi(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \implies \dot{\phi} \geq 0 \quad (3.32)$$

qui représente la condition de charge (processus de fissuration actif), et réciproquement :

$$g_c \left(\frac{\phi}{\ell} - \ell \Delta \phi \right) > -g'(\phi) \psi(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \implies \dot{\phi} = 0 \quad (3.33)$$

qui représente la condition de décharge (processus de fissuration inactif). Miehe et al., (2010a, b) proposent de condenser les relations (3.32) et (3.33) sous la forme :

$$g_c \left(\frac{\phi}{\ell} - \ell \Delta \phi \right) = -g'(\phi) \mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \quad (3.34)$$

où l'histoire de chargement local \mathcal{H} est définie par :

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), t) = \max_{0 \leq s \leq t} w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), s) \quad (3.35)$$

De la sorte, en cas de décharge locale, la fonction \mathcal{H} n'évolue pas, ce qui laisse la relation (3.28) inchangée, et permet d'assurer que le champ de phase n'évolue pas. Remarquons, à l'instar de Gerasimov et de Lorenzis [118], que cette formulation *ne dérive plus d'une approche variationnelle*, et sort donc du cadre défini par Bourdin et al. [104].

Exprimons la relation 3.34 sous la forme plus générale suivante :

$$\frac{\delta \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\delta \phi} = -g'(\phi) \mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.36)$$

dans laquelle la dépendance de $\boldsymbol{\varepsilon}$ au déplacement \mathbf{u} a été omise pour plus de clarté.

Dans ce qui suit, la relation (3.36) sera qualifiée de « modèle standard ». Cette appellation est arbitraire, mais traduit le fait qu'il fonctionne pour les matériaux élastiques fragiles, isotropes, et pour les chargements monotones.

3.4 État de l'art

Dans ce paragraphe, on décrit en détail diverses variantes du modèle standard concernant la fonction d'adoucissement g , la forme de la fonction γ , la prise en compte du contact unilatéral sur les lèvres des fissures, la prise

en compte de l'anisotropie matérielle, la nature de la longueur interne ℓ , et enfin le couplage thermoélastique.

Pour terminer, on évoque succinctement divers aspects concernant la prise en compte de mécanismes multiples, la rupture en modes mixtes, l'admissibilité thermodynamique, la Γ -convergence, les grandes déformations, la rupture ductile, la rupture cohésive, et la rupture fragile dynamique. On conclut ce paragraphe par une brève revue des validations de la méthode par comparaison avec un certain nombre de résultats expérimentaux, puis par ses principales applications.

3.4.1 La fonction d'adoucissement g

Divers auteurs ont proposé différentes fonctions d'adoucissement. Toutes doivent au minimum posséder les caractéristiques suivantes :

- $g(0) = 1$: lorsque le milieu n'est pas endommagé, la fonction n'a pas d'effet sur l'énergie élastique ;
- $g(1) = 0$: lorsque le matériau est rompu, il perd complètement sa rigidité ;
- $g'(1) = 0$: la force motrice de fissuration s'annule lorsque le milieu est fissuré ;
- $0 \leq -g'(\phi) < +\infty$: la force motrice de fissuration est toujours positive et reste finie.

Shanthraj et al. [119] sont, à notre connaissance, les seuls auteurs à opter pour une fonction linéaire :

$$g(\phi) = 1 - \phi \quad (3.37)$$

Cette formulation rappelle fortement la mécanique de l'endommagement [120], et présente l'inconvénient d'induire une force motrice de fissuration indépendante de la valeur du champ de phase. Intuitivement, on s'attend plutôt à voir cette force motrice décroître à mesure que le milieu s'endommage.

Pour pallier cet inconvénient, la grande majorité des auteurs proposent une forme quadratique :

$$g(\phi) = (1 - \phi)^2 \quad (3.38)$$

Karma [121], Henry et Levine [122], et Hakim et Karma [123] optent pour la forme suivante :

$$g(\phi) = 4(1 - \phi)^3 - 3(1 - \phi)^4 \quad (3.39)$$

Borden [124] et Hesch et al. [125] proposent également la forme :

$$g(\phi) = s \left[(1 - \phi)^3 - (1 - \phi)^2 \right] + 3(1 - \phi)^2 - 2(1 - \phi)^3 \quad (3.40)$$

dans laquelle le paramètre s permet de régler la pente de la fonction $g(\phi)$ pour $\phi = 1$ (on retrouve la relation (3.39) pour $s = 2$).

Borden [124] compare les résultats obtenus avec (3.38) et (3.40) dans le cas unidimensionnel homogène, c'est-à-dire en négligeant le gradient du champ de phase dans la relation (3.34). Dans ce cas, il obtient le résultat illustré par la figure 3.2. Il montre que, dans le cas quadratique, le champ de phase évolue même pour des niveaux de contrainte très faibles, induisant une réponse non linéaire. L'effet de la fonction de dégradation est donc très important.

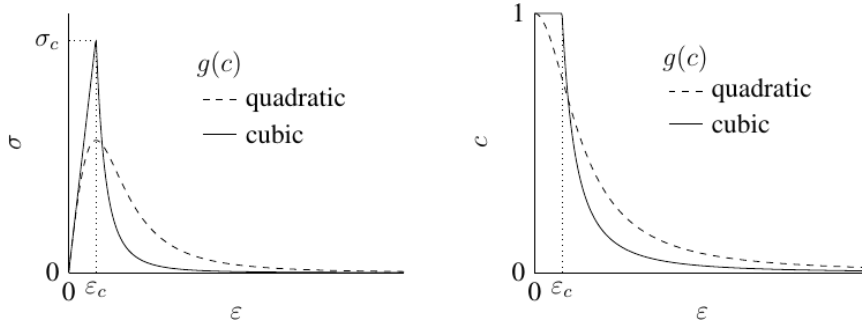


FIGURE 3.2 – Evolution de la contrainte (à gauche) et du champ de phase (à droite) dans le cas unidimensionnel homogène pour les fonctions de dégradation quadratique (3.38) et cubique (3.40) (d'après [124]).

Kuhn et al. [126] procèdent à une analyse plus détaillée de la question, en comparant trois fonctions de dégradation, à savoir la fonction quadratique (3.38), la fonction cubique :

$$g(\phi) = 3(1 - \phi)^2 - 2(1 - \phi)^3 \quad (3.41)$$

qui correspond à la relation (3.40) avec $s = 0$, et la fonction dite « quartique » :

$$g(\phi) = 4(1 - \phi)^3 - 3(1 - \phi)^4 \quad (3.42)$$

Les auteurs considèrent d'abord le cas unidimensionnel d'une barre en traction, et cherchent la solution homogène ($\phi_{,x} = 0$) au problème constitué de l'équation d'équilibre ($\sigma_{,x} = 0$) et de la relation :

$$g_c \left(\phi - \ell^2 \phi_{,xx} \right) + \frac{1}{2} \ell g'(\phi) E \varepsilon^2 = 0 \quad (3.43)$$

où E désigne le module d'Young de la barre. L'équation de l'équilibre indique que la contrainte est homogène dans la barre, de même que la déformation et le champ de phase. Pour la fonction de dégradation quadratique, ce dernier est donné par :

$$\phi = 1 - \frac{g_c}{2\ell E \varepsilon + g_c} \quad (3.44)$$

Cette solution est valable ($0 \leq \phi \leq 1$) pour toute valeur de la déformation, et croît de façon monotone avec le chargement. Les fonctions de dégradation cubique et quartique, quant à elles, satisfont à la condition $g'(0) = 0$. De ce

fait, $\phi = 0$ est solution du problème, et le champ de phase reste constant à mesure que le chargement augmente. Contrairement au cas quadratique, le champ de phase n'évolue pas, et la réponse de la barre est linéaire, ce qui est conforme à son caractère supposé fragile.

Pour ces deux fonctions de dégradation, une deuxième solution existe, mais n'est possible qu'au-delà d'une déformation critique. Une fois cette déformation critique dépassée, le champ de phase évolue. La figure 3.3a montre cette évolution, et la figure 3.3b montre l'évolution correspondante de la contrainte, qui passe par un maximum légèrement au-delà de la déformation critique. Les auteurs résolvent ensuite numériquement le problème non homogène constitué de l'équation d'équilibre et de la relation (3.43). Le résultat est illustré par la figure 3.4, dans laquelle la solution numérique figure en traits épais, et la solution homogène en traits fins. On observe que les solutions homogène et non homogène coïncident pratiquement jusqu'au maximum de contrainte, puis que la solution non homogène bifurque brutalement en se localisant : c'est le phénomène de fissuration. Les auteurs mentionnent le fait que, pour les fonctions de dégradation cubique et quartique, le passage de la solution homogène à la solution non homogène se traduit par un saut d'origine numérique difficile à éviter.

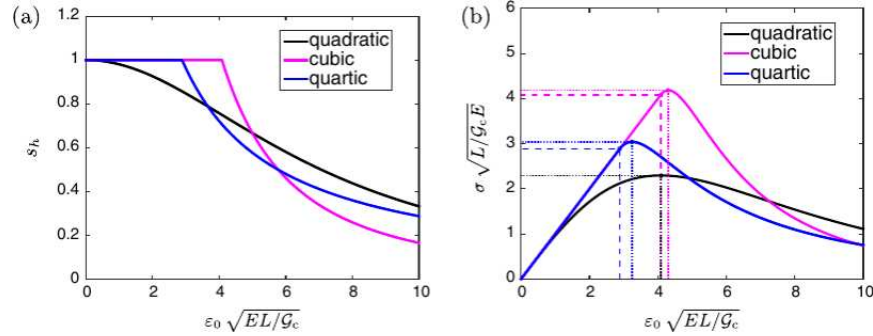


FIGURE 3.3 – Evolution du champ de phase et de la contrainte normalisée en fonction de la déformation normalisée, pour la solution homogène d'une barre unidimensionnelle en traction monotone pour les fonctions de dégradation quadratique (noir), cubique (rose) et quartique (bleu) (d'après [126]).

Quelle que soit la fonction de dégradation, la valeur de la contrainte maximum dépend du paramètre ℓ , qui apparaît donc à la fois comme un paramètre de régularisation et comme une constante caractéristique du matériau considéré (voir le § 3.4.3). Ces travaux mettent clairement en évidence le défaut de la fonction de dégradation quadratique, pourtant communément utilisée, qui induit une assez forte non linéarité de la réponse du matériau. Cet effet est dû à la condition $g'(0) \neq 0$.

Sargado et al. [127] proposent la fonction suivante :

$$g(\phi) = (1 - w) \frac{1 - e^{-k(1-\phi)^n}}{1 - e^{-k}} + w f_c(\phi) \quad (3.45)$$

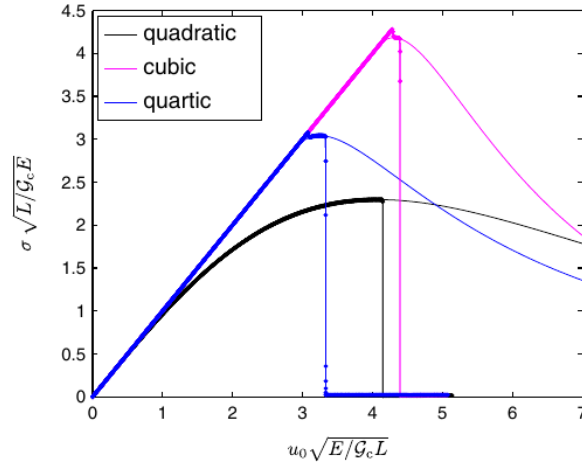


FIGURE 3.4 – Evolution du champ de phase et de la contrainte normalisée en fonction de la déformation normalisée, pour la solution non homogène d'une barre unidimensionnelle en traction monotone pour les fonctions de dégradation quadratique (noir), cubique (rose) et quartique (bleu) (d'après [126]).

Cette fonction, nettement plus complexe que les formes (3.38), (3.39) ou (3.40), comporte trois paramètres et une fonction ajustable. L'objectif est de limiter la dégradation élastique au-dessous de la contrainte à rupture, d'éviter l'effet de snap-back¹, et de permettre de conserver au paramètre ℓ son statut de longueur de diffusion. On ne rentre pas ici dans le détail, mais les auteurs montrent comment choisir les paramètres k , n et w et la fonction f_c en fonction de ℓ .

3.4.2 La densité de surface de fissure γ

Jusqu'à présent, nous n'avons considéré que la forme (3.19) de l'énergie de surface. Généralisons maintenant cette expression sous la forme :

$$\gamma(\phi, \nabla\phi) = \frac{1}{c} \left(\frac{1}{\ell} \alpha(\phi) + \ell \nabla\phi \cdot \nabla\phi \right) \quad (3.46)$$

où $c = \int_0^1 \sqrt{\alpha(s)} ds$ est une constante de normalisation, calculée de façon à retrouver la surface de fissure lorsque $\ell \rightarrow 0$, et où $\alpha(\phi)$ est appelée fonction géométrique de surface de fissure. Avec cette expression générique, la relation (3.28) devient :

$$\frac{g_c}{c} \left(\frac{\alpha'(\phi)}{\ell} - \ell \Delta\phi \right) = -g'(\phi) \mathcal{H}(\varepsilon(\mathbf{u})) \quad (3.47)$$

1. L'effet de snap-back se rencontre lorsque contrainte et déformation décroissent simultanément lors de la charge. Il s'agit d'une instabilité très forte, difficile à mettre en évidence expérimentalement, et également difficile à restituer numériquement.

Diverses formes ont été considérées. Karma et al. [121] ont considéré la fonction à double puits de Landau :

$$\alpha(\phi) = 16\phi^2(1 - \phi)^2 \quad (3.48)$$

avec $c = \frac{3}{8}$, qui justifie véritablement l'appellation de « champ de phase » de ce modèle. La fonction quadratique a été introduite par Bourdin et al. [104], avec $c = 2$, tandis que Pham et al. [128], Tanné et al. [129], Bleyer et Alessi [130] et Jeulin [131] adoptent la forme linéaire :

$$\alpha(\phi) = \phi \quad (3.49)$$

avec $c = \frac{3}{8}$. D'autres formes ont été considérées (voir Alessi et al. [132] et Wu [133, 134]). L'intérêt de la forme linéaire est de présenter un seuil de contrainte (ou de déformation) au-dessous duquel le champ de phase n'évolue pas, contrairement à la forme quadratique pour laquelle le champ de phase évolue dès le début du chargement (voir également le paragraphe suivant).

Borden et al. [124, 135] proposent une théorie de champ de phase du quatrième ordre, en vue d'augmenter la régularité des champs. A cet effet, ils proposent une extension de la relation (3.19) sous la forme :

$$\gamma_\ell(\phi, \nabla\phi, \nabla^2\phi) = \frac{1}{4\ell} \left[\phi^2 + 2\ell^2 \nabla\phi \cdot \nabla\phi + \ell^4 \nabla^2\phi : \nabla^2\phi \right] \quad (3.50)$$

qui fait intervenir le second gradient du champ de phase. Pour cette expression de la densité de fissure, la répartition spatiale du champ de phase dans le cas unidimensionnel s'écrit :

$$\phi(x) = e^{-\frac{|x|}{\ell}} \left(1 + \frac{|x|}{\ell} \right) \quad (3.51)$$

et satisfait les conditions $\phi(0) = 1$ et $\phi'(0) = 0$, cette dernière permettant d'obtenir un gradient de champ de phase à *dérivée continue dans la fissure* et, de ce fait, une plus grande régularité des champs solution.

La minimisation de l'énergie totale proposée au paragraphe 3.3.5 permet d'obtenir la relation d'évolution du champ de phase analogue à (3.28) :

$$g_c \left(\frac{\phi}{4\ell} - \frac{\ell\Delta\phi}{2} + \frac{\ell^3\Delta(\Delta\phi)}{4} \right) = -g'(\phi)w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \quad (3.52)$$

qui fait intervenir la dérivée quatrième du champ de phase, et deux conditions aux limites pour le champ de phase, analogues à (3.25)₄ :

$$\begin{cases} \Delta\phi = 0 \\ \nabla \left(\ell^2\Delta\phi - 2(\phi - 1) \right) \cdot \mathbf{n} = 0 \end{cases} \quad (3.53)$$

sur $\partial\Omega_\phi$.

Les auteurs montrent que cette extension permet d'améliorer très sensiblement la vitesse de convergence, ainsi que la précision des résultats. Cette extension se limite au cas isotrope, mais peut également s'appliquer au cas anisotrope, comme nous le verrons au paragraphe 3.4.5.

3.4.3 Contrainte maximale, seuil et longueur interne

Reprenons le développement des deux paragraphes précédents, et examinons le cas unidimensionnel homogène, avant localisation du champ de phase et de la déformation, pour la fonction d'adoucissement quadratique et les fonctions géométriques de fissuration quadratique et linéaire successivement (Tanné et al. [129]). Pour cette étude, on ne considère pas d'effet unilatéral, et on se contente de chargements monotones ne nécessitant pas la prise en compte de la fonction \mathcal{H} .

On peut donc écrire $\mathcal{H}(\varepsilon) = \frac{1}{2}E\varepsilon^2$, tandis que la loi de comportement est donnée par $\sigma = (1 - \phi)^2 E\varepsilon$. De ce fait, la relation (3.47) devient :

$$g_c \alpha'(\phi) - \ell c(1 - \phi)E\varepsilon^2 = 0 \quad (3.54)$$

Pour la fonction géométrique quadratique $\alpha(\phi) = \phi^2$ (c'est-à-dire la version standard du modèle de champ de phase proposée par Miehe et al. [114]), avec $c = 2$, cette relation s'écrit :

$$g_c \phi - \ell(1 - \phi)E\varepsilon^2 = 0 \quad (3.55)$$

Le champ de phase est alors donné par :

$$\phi = \frac{\ell E \varepsilon^2}{g_c + \ell E \varepsilon^2} \quad (3.56)$$

solution admissible pour toute valeur de la déformation, qui reste bien comprise entre 0 et 1. Comme on l'a dit plus haut, le champ de phase commence à évoluer dès le début du chargement. La contrainte est donnée par :

$$\sigma = E \left(\frac{g_c}{g_c + \ell E \varepsilon^2} \right)^2 \varepsilon \quad (3.57)$$

La valeur maximale de la contrainte ($\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = 0$) est obtenue pour :

$$\sigma_{\max.} = \frac{9}{16} \sqrt{\frac{g_c E}{3\ell}} \quad (3.58)$$

On peut donc accéder directement à la valeur de ℓ dès lors que σ_{\max} est connu :

$$\ell = \frac{27}{256} \frac{g_c E^2}{\sigma_{\max.}} \quad (3.59)$$

Pour la fonction géométrique linéaire $\alpha(\phi) = \phi$ avec $c = \frac{3}{8}$, la relation (3.47) devient :

$$\ell = \frac{27}{256} \frac{g_c E^2}{\sigma_{\max.}} \quad (3.60)$$

ce qui permet d'écrire :

$$\phi = 1 - \frac{3g_c}{8\ell c E \varepsilon^2} \quad (3.61)$$

On constate tout d'abord qu'il n'existe pas de solution pour $\varepsilon = 0$, c'est-à-dire au début du chargement. Contrairement au cas quadratique, il existe un seuil d'endommagement, noté $\varepsilon_{\text{seuil}}$, obtenu pour $\phi = 0$:

$$\varepsilon_{\text{seuil}} = \sqrt{\frac{3g_c}{8\ell E}} \quad (3.62)$$

La contrainte correspondante est :

$$\sigma_{\text{seuil}} = \sqrt{\frac{3g_c E}{8\ell}} \quad (3.63)$$

Au-delà de ce seuil, la contrainte est donnée par :

$$\sigma = \frac{9g_c^2}{64\ell^2 E \varepsilon^3} \quad (3.64)$$

et décroît continûment vers zéro au cours du chargement (monotone). Le chargement se traduit donc par :

- une phase élastique linéaire jusqu'au seuil (3.62),
- une contrainte maximale (3.63) atteinte au seuil,
- une décroissance de la contrainte à partir du seuil et jusqu'à annulation asymptotique.

A nouveau, si la contrainte seuil est connue, on peut identifier la longueur interne :

$$\ell = \frac{3g_c E}{8\sigma_{\text{seuil}}^2} \quad (3.65)$$

Tanné et al. [129] ont réalisé un ensemble de simulations à l'aide de la fonction géométrique linéaire $\alpha(\phi) = \phi$, et cherché à réaliser des simulations sur des matériaux fragiles pour lesquels la contrainte à rupture (sur éprouvette non entaillée) est connue. Pour ces matériaux, ils fixent la longueur interne à l'aide de la relation (3.65), et simulent des essais sur éprouvettes avec entailles en V de différents angles au sommet. Pour cette géométrie, où ω est l'angle au sommet, la partie singulière de la contrainte circonférentielle s'écrit :

$$\sigma_\theta = K_V r^{\lambda(\omega)-1} F(\theta) \quad (3.66)$$

en tout point repéré par ses coordonnées polaires par rapport à la pointe d'entaille et à son plan de symétrie. Dans cette relation, K_V est le facteur d'intensité des contraintes généralisé, et $\lambda(\omega)$ et $F(\theta)$ sont des fonctions de la géométrie. Les auteurs comparent les facteurs d'intensité des contraintes généralisés critiques (à l'initiation de la propagation) obtenus par simulation à des résultats d'expériences. La confrontation est excellente, et s'applique également pour d'autres géométries, telles que des éprouvettes avec entaille en U ou avec entaille intérieure ellipsoïdale. Ces résultats montrent clairement que la longueur interne des modèles de champ de phase de rupture fragile

possède également une signification physique, et non pas seulement une valeur de constante de régularisation.

Wu [133, 134], Wu et Nguyen [136] et Wu et al. [137] proposent un modèle insensible à la longueur interne ℓ . Le principe consiste à rendre la fonction de dégradation $g(\phi)$ dépendante de ℓ .

3.4.4 Contact unilatéral

Fondamentalement, le modèle (3.25)₃ proposé par Bourdin et al. (2000) ne s'applique qu'aux fissures ouvertes. Or les sollicitations cycliques ou alternées (compression-traction, par exemple) se traduisent généralement par des phénomènes de refermeture de fissures, qui s'accompagnent d'une restauration, partielle ou totale, des propriétés élastiques.

La non prise en compte de ces phénomènes se traduit par des aberrations numériques, attribuables à l'effet de l'interpénétration des lèvres de fissures, notamment. Ambati et al. [138] mettent clairement en évidence ce point en simulant le cisaillement d'un massif homogène pré-entaillé sans contact unilatéral. La figure 3.5 illustre le résultat de la simulation du cisaillement d'un massif homogène pré-entaillé, soumis à un déplacement horizontal vers la droite de son bord supérieur. On observe deux fissures symétriques se propageant à partir de la pré-entaille. La fissure supérieure implique très clairement l'interpénétration des lèvres.

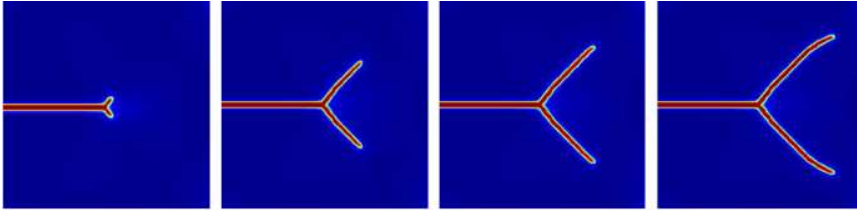


FIGURE 3.5 – Simulation sans contact unilatéral du cisaillement d'un massif pré-entaillé. Le bord supérieur du massif est soumis à un déplacement horizontal vers la droite (d'après [138]).

C'est la raison d'être de la décomposition de l'énergie élastique (3.26), que nous examinons maintenant en détail. Les travaux récents font état de diverses propositions pour prendre en compte le contact unilatéral, de façon à restaurer la transmission des contraintes normales à la refermeture des fissures, d'une part, à interdire l'interpénétration, d'autre part. Le principe commun à la plupart de ces propositions consiste à (i) modifier la fonction d'énergie de déformation (3.26), et (ii) à modifier la loi d'évolution du champ de phase (3.25)₃.

En premier lieu, on reprend l'expression (3.26) pour définir la fonction d'énergie de déformation :

$$w(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi) = g(\phi)w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}) + w^{pas.}(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.67)$$

Cette relation traduit le fait que la fissuration (le champ de phase) ne dégrade que la partie $w^{act.}$ de l'énergie de déformation, la partie $w^{pas.}$ restant inchangée. La façon de décomposer l'énergie de déformation varie selon les auteurs (voir plus bas).

Amor et al. [139], et d'autres auteurs à leur suite (Freddi et Royer-Carfagni [140, 141], Clayton et Knap [142], Ambati et al. [138], Nguyen et al. [143–145], May et al. [146], Chakraborty et al. [147, 148], Zhang et al. [149, 150]), proposent une décomposition en parties volumique et déviatorique de la déformation :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{3}\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{1} + \boldsymbol{\varepsilon}^{dev.} \quad (3.68)$$

où $\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})$ est la trace du tenseur des déformations, ou partie volumique de la déformation, $\mathbf{1}$ est le tenseur unité, et $\boldsymbol{\varepsilon}^{dev.}$ est le déviateur des déformations, qui caractérise l'état de cisaillement. Amor et al. [139] définissent alors la décomposition de l'énergie de déformation comme suit :

$$\begin{cases} w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2}K\langle\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\rangle_+^2 + \mu\boldsymbol{\varepsilon}^{dev.}:\boldsymbol{\varepsilon}^{dev.} \\ w^{pas.}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2}K\langle\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\rangle_-^2 \end{cases} \quad (3.69)$$

où K et μ sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement du milieu (isotrope) considéré, et où $\langle\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\rangle_+$ et $\langle\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\rangle_-$ désignent respectivement les parties positive et négative de la déformation volumique. Le tenseur des contraintes s'écrit donc :

$$\boldsymbol{\sigma} = g(\phi) \left[K\langle\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_+\mathbf{1} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}^{dev.} \right] + K\langle\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_-\mathbf{1} \quad (3.70)$$

En l'absence de fissure ($\phi = 0$), cette relation devient :

$$\boldsymbol{\sigma} = K\langle\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_+\mathbf{1} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}^{dev.} + K\langle\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_-\mathbf{1} = K\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{1} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}^{dev.} \quad (3.71)$$

ce qui coïncide avec la loi de Hooke relative au matériau sain. En présence de fissure ($\phi = 1$), la contrainte s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} = K\langle\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_-\mathbf{1} \quad (3.72)$$

ce qui montre que la rigidité de cisaillement est annulée et la rigidité volumique conservée, la totalité de la rigidité étant conservée si la fissure est fermée. On notera qu'il reste possible que certaines composantes du tenseur des déformations soient positives (traction) alors qu'on se trouve en compression volumique, et réciproquement, ce qui représente une ambiguïté. Nous y reviendrons.

Miehe et al. [114] proposent une autre voie. En tant que tenseur du second ordre symétrique, le tenseur de déformation admet la décomposition spectrale suivante :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{a=1}^3 \varepsilon^{(a)} \mathbf{n}^{(a)} \otimes \mathbf{n}^{(a)} \quad (3.73)$$

où les $\varepsilon^{(a)}$ sont les déformations propres et les $\mathbf{n}^{(a)}$ sont les directions propres du tenseur des déformations. On peut alors définir la partie positive des déformations comme suit :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^+ = \mathbb{P}^+(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{a=1}^3 \langle \varepsilon^{(a)} \rangle_+ \mathbf{n}^{(a)} \otimes \mathbf{n}^{(a)} \quad (3.74)$$

où $\langle \varepsilon^{(a)} \rangle_+$ est la partie positive de $\varepsilon^{(a)}$, et leur partie négative par :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^- = \mathbb{P}^-(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{a=1}^3 \langle \varepsilon^{(a)} \rangle_- \mathbf{n}^{(a)} \otimes \mathbf{n}^{(a)} \quad (3.75)$$

Les auteurs proposent de modifier l'énergie de déformation comme suit :

$$w^{\text{act. pas.}} = \frac{1}{2} \lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_{\pm}^2 + \mu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_{\pm} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\pm}) \quad (3.76)$$

où λ et μ sont les coefficients de Lamé du milieu considéré. Le tenseur des contraintes s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} = g(\phi) \left[\lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+ \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}^+ \right] + \left[\lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_- \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}^- \right] \quad (3.77)$$

En présence de fissure ($\phi = 1$), cette relation devient :

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_- \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}^- \quad (3.78)$$

ce qui montre que les composantes en traction ne participent plus à la rigidité du milieu endommagé, toutes les composantes en compression étant préservées. De ce fait, la possibilité de fissuration sur une composante en compression n'est pas possible pour ce modèle.

Wu et al. [134] et Wu et Cervera [151] proposent une alternative en contraintes. Ils décomposent la contrainte de la même façon que Miehe et al. [114] pour la déformation, et définissent l'énergie de déformation par :

$$\begin{cases} w^{\text{act.}}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^+ : \mathbf{S} : \boldsymbol{\sigma}^+ \\ w^{\text{pas.}}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^- : \mathbf{S} : \boldsymbol{\sigma}^- \end{cases} \quad (3.79)$$

où \mathbf{S} est le tenseur de souplesse du milieu sain. Le tenseur des contraintes s'exprime par :

$$\boldsymbol{\sigma} = g(\phi) \boldsymbol{\sigma}^+ + \boldsymbol{\sigma}^-, \quad (3.80)$$

ce type de décomposition ayant par ailleurs été étudié par Ortiz [152]. Il est important de noter que l'élasticité résultant du contact unilatéral est fortement non linéaire, ce qui a des effets non négligeables au plan algorithmique (voir section 4.2). Zhang et al. [153] proposent d'atténuer la brutalité de l'effet unilatéral, à l'aide d'une approximation continue du critère d'ouverture-fermeture des fissures, contrôlée par un petit paramètre. Cet artifice de calcul

permet, selon les auteurs, d'accélérer considérablement la convergence de l'algorithme.

Il est important de noter que la prise en compte de l'effet unilatéral, élastique fortement non linéaire, ne permet pas de garantir a priori l'existence et l'unicité de la solution, comme l'ont démontré Amor et al. [139]. En effet, il n'existe pas, à ce jour, de théorème connu d'existence et d'unicité pour ce cas.

Plusieurs auteurs (voir Strobl et Seelig [154, 155], Zhang et al. [156], Steinke et Kaliske [157]) remarquent que la prise en compte de l'effet unilatéral par une relation de type (3.26) implique que :

$$w(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi \rightarrow 1) = w^{pas.}(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.81)$$

De ce fait, les contraintes ne s'annulent pas dans la fissure, et la condition $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$ (non transmission du vecteur contrainte normal au travers des lèvres d'une fissure ouverte) n'est pas remplie, ce qui peut facilement entraîner des résultats non physiques.

Strobl et Seelig [154] proposent la démarche suivante, restreinte au cas isotrope. La condition unilatérale sur les lèvres d'une fissure s'écrit :

$$\sigma_{nn} \leq 0 \quad (3.82)$$

où $\sigma_{nn} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$, \mathbf{n} étant le vecteur normal au plan de fissure. Cette relation stipule que la contrainte normale est négative ou nulle si la fissure est fermée, nulle si elle est ouverte.

Dans le repère $(\mathbf{n}, \mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2)$ lié à la fissure, où \mathbf{t}_1 et \mathbf{t}_2 forment une base orthonormée dans le plan de fissure (vecteurs tangents), le tenseur des déformations est diagonal, et ses vecteurs propres sont ε_{nn} , $\varepsilon_{t_1 t_1}$ et $\varepsilon_{t_2 t_2}$. On peut donc réécrire la condition unilatérale en fonction des déformations :

$$\varepsilon_{nn} \leq -\frac{\lambda(\varepsilon_{t_1 t_1} + \varepsilon_{t_2 t_2})}{\lambda + 2\mu} = \tilde{\varepsilon} \quad (3.83)$$

où λ et μ sont les paramètres de Lamé du matériau élastique linéaire isotrope non fissuré, cette relation étant valable à la surface de la fissure. L'égalité suivante est toujours vraie :

$$\varepsilon_{nn} = \langle \varepsilon_{nn} - \tilde{\varepsilon} \rangle - \langle \tilde{\varepsilon} - \varepsilon_{nn} \rangle + \tilde{\varepsilon} \quad (3.84)$$

où $\langle x \rangle = \frac{|x|+x}{2}$ est la partie positive de x . Afin de garantir :

- que la loi de comportement en compression ne soit pas affectée,
- que seule la partie du tenseur élastique produisant des contraintes positives soit affectée,
- que les contraintes de cisaillement dans le plan de la fissure ne soient pas affectées,

— et que les autres contraintes de cisaillement s'annulent (glissement sans frottement),

on écrit :

$$\begin{cases} \sigma_{nn} = (\lambda + 2\mu) \left[(1 - \phi)^2 \langle \varepsilon_{nn} - \tilde{\varepsilon} \rangle - \langle \tilde{\varepsilon} - \varepsilon_{nn} \rangle + \tilde{\varepsilon} \right] + \lambda(\varepsilon_{t_1 t_1} + \varepsilon_{t_2 t_2}) \\ \sigma_{t_\alpha t_\alpha} = \lambda \left[(1 - \phi)^2 \langle \varepsilon_{nn} - \tilde{\varepsilon} \rangle - \langle \tilde{\varepsilon} - \varepsilon_{nn} \rangle + \tilde{\varepsilon} \right] + \lambda(\varepsilon_{t_1 t_1} + \varepsilon_{t_2 t_2}) + 2\mu \varepsilon_{t_\alpha t_\alpha} \\ \sigma_{t_1 t_2} = 2\mu \varepsilon_{t_1 t_2} \\ \sigma_{nt_\alpha} = (1 - \phi)^2 2\mu \varepsilon_{nt_\alpha} \end{cases} \quad (3.85)$$

avec $1 \leq \alpha \leq 2$. A partir de cette expression, il est possible de formuler l'énergie de déformation et le tenseur élastique dégradé comportant l'effet unilatéral directionnel (Strobl et Seelig [154, 155, 158]). Pour valider la démarche, les auteurs implantent ce modèle dans un code aux éléments finis, et simulent la compression d'un bloc homogène isotrope comportant une fissure. La figure 3.6 montre clairement l'existence de zones en compression avec la décomposition volumique-déviatorique [139] et spectrale [114], alors que la fissure est fermée en compression, tandis qu'avec la proposition de Strobl et Seelig [154], le champ de contraintes est bien homogène. Les auteurs notent que la normale à la fissure peut être déterminée par la direction du gradient du champ de phase :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \quad (3.86)$$

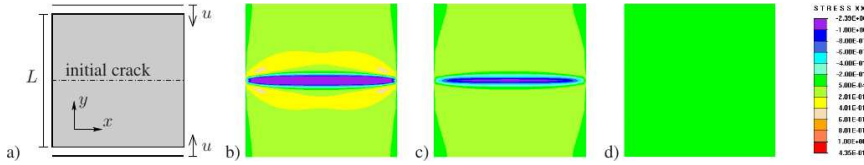


FIGURE 3.6 – Simulation (par éléments finis) de la compression d'un bloc homogène isotrope contenant une fissure horizontale a) géométrie b) décomposition volumique-déviatorique c) décomposition spectrale d) décomposition proposée (d'après [154]).

Ils remarquent cependant que le gradient n'est pas clairement défini en pointe de fissure. Ce modèle n'est donc pas utilisable en l'état.

Bryant et Sun [159], dans un contexte analogue, proposent d'ajouter un algorithme de recherche de la direction permettant de maximiser l'énergie dissipée par fissuration, au prix d'un net ralentissement des simulations.

Steinke et Kaliske [157] proposent un modèle plus abouti, formulé en contraintes, et basé sur les hypothèses suivantes :

- annulation de la contrainte normale lorsque la fissure est ouverte,
- transmission de la contrainte normale lorsque la fissure est fermée,
- annulation de la contrainte de cisaillement dans le plan (glissement sans frottement),

— et transmission des autres contraintes de cisaillement.

Ces hypothèses n'étant rigoureusement valables qu'une fois la fissure formée ($\phi = 1$), les auteurs reprennent la formule d'interpolation (3.80) :

$$\boldsymbol{\sigma} = g(\phi)\boldsymbol{\sigma}^+ + \boldsymbol{\sigma}^- \quad (3.87)$$

où, comme précédemment, $\boldsymbol{\sigma}^+$ et $\boldsymbol{\sigma}^-$ sont respectivement les parties « active » et « passive » du tenseur des contraintes. Ces dernières sont définies comme suit :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}^+ = \langle \sigma^{rr} \rangle_+ \mathbf{M}^{rr} + \boldsymbol{\sigma}^{rs} + \boldsymbol{\sigma}^{sr} + \boldsymbol{\sigma}^{rt} + \boldsymbol{\sigma}^{tr} \\ \boldsymbol{\sigma}^- = \langle \sigma^{rr} \rangle_- \mathbf{M}^{rr} + \boldsymbol{\sigma}^{ss} + \boldsymbol{\sigma}^{tt} + \boldsymbol{\sigma}^{st} + \boldsymbol{\sigma}^{ts} \end{cases} \quad (3.88)$$

Dans cette expression, les auteurs se placent dans le repère local de la fissure $(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \mathbf{t})$, \mathbf{r} étant le vecteur normal à la fissure, et définissent les projecteurs :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{rr} &= \mathbf{r} \otimes \mathbf{r} & \mathbf{M}^{rs} &= \mathbf{r} \otimes \mathbf{s} & \mathbf{M}^{rt} &= \mathbf{r} \otimes \mathbf{t} \\ \mathbf{M}^{sr} &= \mathbf{s} \otimes \mathbf{r} & \mathbf{M}^{ss} &= \mathbf{s} \otimes \mathbf{s} & \mathbf{M}^{st} &= \mathbf{s} \otimes \mathbf{t} \\ \mathbf{M}^{tr} &= \mathbf{t} \otimes \mathbf{r} & \mathbf{M}^{ts} &= \mathbf{t} \otimes \mathbf{s} & \mathbf{M}^{tt} &= \mathbf{t} \otimes \mathbf{t} \end{aligned} \quad (3.89)$$

De la sorte, les composantes du tenseur des contraintes dans le repère local de la fissure s'écrivent :

$$\begin{aligned} \sigma^{rr} &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{rr} & \sigma^{rs} &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{rs} & \sigma^{rt} &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{rt} \\ \sigma^{sr} &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{sr} & \sigma^{ss} &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{ss} & \sigma^{st} &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{st} \\ \sigma^{tr} &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{tr} & \sigma^{ts} &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{ts} & \sigma^{tt} &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{tt} \end{aligned} \quad (3.90)$$

ce qui permet de définir les contraintes normales et de cisaillement agissant sur la fissure entrant dans l'expression (3.88) :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{rr} &= \sigma^{rr} \mathbf{M}^{rr} & \boldsymbol{\sigma}^{rs} &= \sigma^{rs} \mathbf{M}^{rs} & \boldsymbol{\sigma}^{rt} &= \sigma^{rt} \mathbf{M}^{rt} \\ \boldsymbol{\sigma}^{sr} &= \sigma^{sr} \mathbf{M}^{sr} & \boldsymbol{\sigma}^{ss} &= \sigma^{ss} \mathbf{M}^{ss} & \boldsymbol{\sigma}^{st} &= \sigma^{st} \mathbf{M}^{st} \\ \boldsymbol{\sigma}^{tr} &= \sigma^{tr} \mathbf{M}^{tr} & \boldsymbol{\sigma}^{ts} &= \sigma^{ts} \mathbf{M}^{ts} & \boldsymbol{\sigma}^{tt} &= \sigma^{tt} \mathbf{M}^{tt} \end{aligned} \quad (3.91)$$

Les auteurs définissent également l'énergie « active » comme :

$$w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^+ : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.92)$$

Comme précédemment, tout le problème consiste alors à déterminer la direction normale à la fissure. Les auteurs proposent de la choisir comme la direction de contrainte principale maximale positive. De ce fait, ce modèle ne fonctionne qu'en mode I (ouverture). Notons qu'il serait également possible d'adopter la proposition de Bryant et Sun [159], bien sûr au prix d'un ralentissement notable de l'algorithme.

Steinke et Kaliske [157] ajoutent un développement intéressant. La rupture a pour effet de relaxer la contrainte normale au plan de fissure. Mais elle

doit également relaxer les contraintes tangentielles induites par effet Poisson. Ils modifient donc la relation (3.88) de la façon suivante :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}^+ = \langle \sigma^{rr} \rangle_+ \mathbf{M}^{rr} + \boldsymbol{\sigma}^{rs} + \boldsymbol{\sigma}^{sr} + \boldsymbol{\sigma}^{rt} + \boldsymbol{\sigma}^{tr} + \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \langle \sigma^{rr} \rangle_+ (\mathbf{M}^{ss} + \mathbf{M}^{tt}) \\ \boldsymbol{\sigma}^- = \langle \sigma^{rr} \rangle_- \mathbf{M}^{rr} + \boldsymbol{\sigma}^{ss} + \boldsymbol{\sigma}^{tt} + \boldsymbol{\sigma}^{st} + \boldsymbol{\sigma}^{ts} - \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \langle \sigma^{rr} \rangle_+ (\mathbf{M}^{ss} + \mathbf{M}^{tt}) \end{cases} \quad (3.93)$$

Cette correction est limitée au cas isotrope, mais l'approche employée par les auteurs peut facilement être étendue au cas anisotrope.

Zhang et al. [156] adoptent la démarche de modélisation par champ de phase à une classe de matériaux possédant des modules élastiques différents en traction et en compression, pour application aux bio-matériaux et à certains polymères, tels que le PET. Ils développent un modèle en transformations finies (voir le § 3.4.7), et définissent un effet unilatéral voisin de celui de Miehe et al. [114]. Tang et al. [160] développent un modèle de champ de phase adapté aux élastomères (voir également le paragraphe 3.4.7), et proposent des extensions aux transformations finies des modèles unilatéraux de Amor et al. [139] et de Miehe et al. [114]. Ces modèles ne seront pas développés ici.

Fan et al. [161] proposent un modèle proche de celui de Steinke et Kaliske [157], destiné à une formulation en modes mixtes (voir le § 3.4.7).

L'effet unilatéral se traduit par une brutale variation de rigidité élastique, et donc par une très forte non linéarité élastique. De ce fait, la convergence numérique de l'algorithme de résolution de la relation (3.25)₁ est beaucoup plus lente que dans le cas linéaire (voir le chapitre 4). Ambati et al. [138] et, à leur suite, You et al. [162], proposent (i) de conserver la relation (3.69), ce qui permet d'interdire la fissuration en compression, mais (ii) de conserver la loi élastique linéaire, c'est-à-dire de ne pas introduire de décomposition des contraintes ou des déformations dans la loi de comportement élastique, de façon à ne pas ralentir l'algorithme. Ce dernier point présente cependant le gros inconvénient de ne pas interdire l'interpénétration des lèvres de la fissure en compression. Ils proposent alors d'ajouter une condition supplémentaire :

$$\text{si } w^{act.} < w^{pas.} \implies \phi = 0 \quad (3.94)$$

Il s'agit d'un artifice de calcul que l'on peut interpréter par la figure 3.7. On considère un massif élastique homogène fissuré (figure 3.7a), que l'on soumet (figure 3.7b) à une traction (trajet A), suivie d'une décharge (trajet B), puis une charge inverse de compression (trajet C), puis une décharge (trajet D), et enfin d'une charge inverse de traction (trajet E). La prise en compte de la loi élastique linéaire et de la relation (3.69) se traduit par le trajet rouge, qui indique une non-restauration de la rigidité élastique en compression, autrement dit une interpénétration des lèvres de la fissure. L'introduction de l'artifice ci-dessus permet d'obtenir le trajet noir, c'est-à-dire l'effet unilatéral attendu. Les auteurs montrent que, sans retrouver

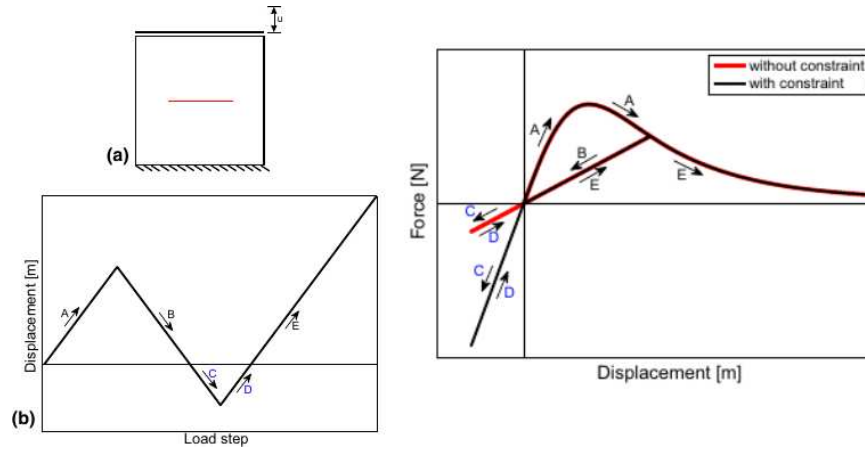


FIGURE 3.7 – Illustration de l'effet unilatéral. Cas d'un massif homogène pré-entailé soumis à une traction (trajet A), puis une décharge (trajet B), une compression (trajet C), une décharge (trajet D), et une recharge en traction (trajet E) (d'après [138]).

exactement l'effet unilatéral provenant de la décomposition de tenseur des déformations ou des contraintes, les prédictions du modèle qu'ils proposent en sont très proches.

Fei et Choo [163, 164] incorporent le frottement dans la description du contact unilatéral, en version bidimensionnelle. Dittman et al. [165] proposent un modèle de contact mécanique et thermique en transformations finies avec frottement et couplage thermique. Leur modèle n'empêche pas l'interpénétration à proprement parler, mais la pénalise à l'aide d'une loi de type Lennard-Jones. Ce modèle souffre néanmoins, comme les précédents, du problème de définition de la normale à la fissure diffuse.

3.4.5 Anisotropie

Le modèle standard permet sans difficulté particulière de prendre en compte l'anisotropie élastique. L'anisotropie de ténacité (c'est-à-dire la dépendance de l'énergie de surface à l'orientation cristallographique), en revanche, doit faire l'objet de développements particuliers. Li et al. [166], Li [167], Clayton et Knapp [142], Teichtmeister et Miehe [168], Teichtmeister et al. [169], Shanthraj et al. [119], Nguyen et al. [170, 171] et Gultekin et al. [172] ont proposé d'inclure cet effet dans l'expression de l'énergie de surface régularisée. Tous ces auteurs ont utilisé de diverses façons la théorie des fonctions scalaires à arguments tensoriels.

Clayton et Knapp [142] proposent la forme suivante, reprise notamment par Nguyen et al. [170, 171] :

$$\gamma(\phi, \nabla\phi) = \frac{1}{2\ell} \left(\phi^2 + \ell^2 \nabla\phi \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla\phi \right) \quad (3.95)$$

qui représente l'extension la plus simple possible de l'expression (3.19). Le

tenseur du second ordre $\boldsymbol{\omega}$ (à ne pas confondre avec le potentiel ω définissant la loi de comportement) contient l'information d'anisotropie de ténacité du cristal, ainsi que la condition d'invariance :

$$\gamma(\phi, \mathbf{Q} \cdot \nabla \phi) = \gamma(\phi, \nabla \phi) \quad (3.96)$$

pour toute rotation \mathbf{Q} appartenant au groupe de symétrie du cristal considéré. Pour prendre en compte un plan de clivage préférentiel de normale \mathbf{m} , les auteurs proposent d'exprimer $\boldsymbol{\omega}$ sous la forme :

$$\boldsymbol{\omega} = \omega_0 [\mathbf{1} + \beta(\mathbf{1} - \mathbf{m} \otimes \mathbf{m})] \quad (3.97)$$

Dans le cas de la symétrie isotrope transverse, Teichtmeister et al. [169] proposent :

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{1} + \alpha \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \quad (3.98)$$

Dans ces deux cas équivalents, la ténacité du cristal considéré est caractérisée par g_c et par un scalaire (α ou β) représentant le degré d'anisotropie de ténacité du cristal.

Cependant, l'expression (3.95) ne permet pas de représenter tous les types d'anisotropie de ténacité, qui nécessitent au moins un tenseur du quatrième ordre. Pour remédier à cela, Li et al. [166], Teichtmeister et Miehe [168], Teichtmeister et al. [169], et Li et Maurini [173] procèdent par analogie avec le phénomène de cristallisation de matériaux à forte anisotropie (Eggleston et al. [174], Taylor et Cahn [175]). Li et al. [166] proposent une démarche générale en utilisant les travaux de Cahn et Hilliard [176] donnant une expression au quatrième ordre en gradient du champ de phase de l'énergie interfaciale entre deux phases distinctes :

$$\begin{aligned} \gamma(\phi, \nabla \phi, \nabla^2 \phi, \dots) &= f(\phi) + \sum_{i,j} \kappa_{ij}^{(1)} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \kappa_{ij}^{(2)} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \\ &+ \frac{1}{24} \sum_{i,j,k,l} \lambda_{ijkl}^{(1)} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \frac{\partial \phi}{\partial x_l} + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l} \lambda_{ijkl}^{(2)} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \frac{\partial \phi}{\partial x_l} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \lambda_{ijkl}^{(3)} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_k \partial x_l} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \lambda_{ijkl}^{(4)} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \frac{\partial \phi}{\partial x_l} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \lambda_{ijkl}^{(5)} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k \partial x_l} + \dots \end{aligned} \quad (3.99)$$

Les auteurs réduisent cette expression, pour des raisons de symétrie, à la forme suivante :

$$\begin{aligned} \gamma(\phi, \nabla \phi, \nabla^2 \phi) &= f(\phi) + \sum_{i,j} \kappa_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} + \sum_{i,j,k,l} \alpha_{ijkl} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \frac{\partial \phi}{\partial x_l} \\ &+ \sum_{i,j,k,l} \beta_{ijkl} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \frac{\partial \phi}{\partial x_l} + \sum_{i,j,k,l} \gamma_{ijkl} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_k \partial x_l} \end{aligned} \quad (3.100)$$

Cette forme est générale, mais complexe. C'est pourquoi divers auteurs [168, 169, 173] proposent de la simplifier. Sans entrer dans le détail, Li et Maurini [173] proposent :

$$\gamma(\phi, \nabla\phi, \nabla^2\phi) = \frac{1}{2\ell} \left(\phi^2 + \frac{\ell^4}{16} \nabla^2\phi : \mathbf{W} : \nabla^2\phi \right) \quad (3.101)$$

et testent cette formulation dans le cas bidimensionnel pour le cas de très fortes anisotropies de ténacité. Ils montrent que certaines directions de propagation sont « interdites », ce qui permet de retrouver des résultats expérimentaux de bifurcation de fissures se propageant en zig-zag dans des milieux fortement anisotropes (voir notamment Takei et al. [177] et Yuse et Sano [178]).

Le modèle de champ de phase anisotrope au second ordre permet donc de prendre en compte de très fortes anisotropies de ténacité, et de bien restituer des résultats expérimentaux. Les auteurs montrent cependant que, pour certains chargements, des évolutions discontinues peuvent se produire, ce qui pose de grosses difficultés numériques (voir Chambolle et al. [179] et Li et Maurini [173]).

Gultekin et al. [172] proposent un modèle original destiné aux matériaux biologiques tels que les parois artérielles, constituées de fibres anisotropes dans une matrice isotrope.

3.4.6 Thermoélasticité et autres couplages

Bourdin et al. [180] et Miehe et al. [181] étendent la modélisation de la rupture fragile à la thermoélasticité. Bourdin et al. [180], s'inspirant des travaux de Sicsic et al. [182], reprennent le modèle standard, avec $\alpha(\phi) = \phi$, à l'aide d'une décomposition additive de la déformation :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^{th} \quad (3.102)$$

avec $\boldsymbol{\varepsilon}^{th} = \alpha(T - T_0)\mathbf{1}$. En l'absence de contact unilatéral, l'énergie élastique est définie par :

$$w(\boldsymbol{\varepsilon}) = g(\phi) \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^e : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e \quad (3.103)$$

La propagation de chaleur est prise en compte à l'aide de la loi de Fourier, dans laquelle la conductivité thermique n'est pas affectée par la fissuration, et de l'équation de la chaleur standard. La figure 3.8 compare le résultat de la simulation bidimensionnelle (contraintes planes) d'un choc thermique sur une éprouvette de céramique à ceux de l'expérience de Shao et al. [183]. La figure 3.9 montre l'organisation des fissures de surface en cellules de nid d'abeille. Miehe et al. [181] propose une formulation analogue, mais

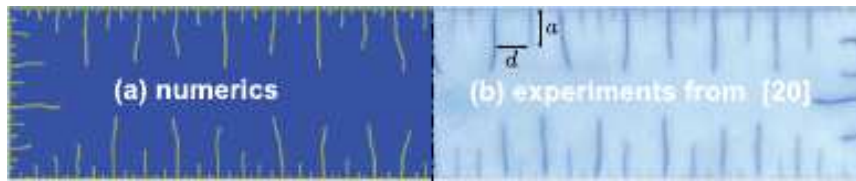


FIGURE 3.8 – Expérience de choc thermique sur céramique. A gauche : résultats de simulation bidimensionnelle (contraintes planes) – à droite : résultat de l'expérience de Shao et al. [183] (d'après [180]).

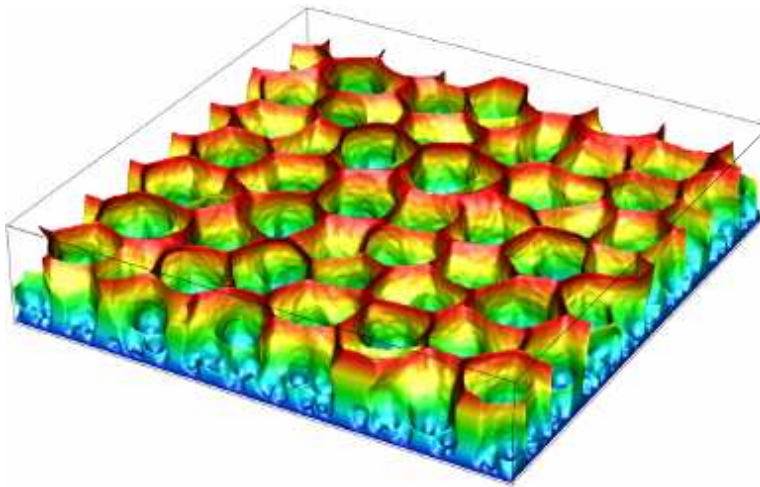


FIGURE 3.9 – Vue tridimensionnelle en surface de l'échantillon simulé sur la figure 3.8 (d'après [180]).

beaucoup plus élaborée, autorisant le couplage entre le champ de phase et la conductivité thermique, pour interdire progressivement le passage du flux de chaleur au travers des lèvres des fissures. L'ensemble est formulé en transformations finies pour une application à des élastomères.

Nguyen et al. [184] s'intéressent à la fissuration induite par l'hydratation de la phase cimentaire d'un béton, connue d'une part pour provoquer une densification, d'autre part pour constituer une réaction chimique exothermique.

Miehe et al. [185] et Abdollahi et Arias [186] proposent respectivement des modèles de champ de phase pour décrire la rupture de cristaux piézo-électriques et ferroélectriques.

3.4.7 Compléments

Prise en compte de plusieurs mécanismes de fissuration

Nguyen et al. [170, 171] et Bleyer et Alessi [130] proposent d'utiliser plusieurs champs de phase, les premiers en relation avec des polycristaux dont les grains peuvent présenter plusieurs plans de clivage, les seconds plutôt

pour décrire la fissuration de milieux macroscopiquement anisotropes, tels que des composites orthotropes, par exemple. Cette proposition constitue une alternative relativement simple aux modèles du quatrième ordre cités au paragraphe précédent.

Pour cela, on étend la relation (3.12) comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \boldsymbol{\phi}) = & \int_{\Omega} w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \boldsymbol{\phi}) dV + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} g_c^i \gamma(\phi_i, \nabla \phi_i) dV \\ & - \int_{\Omega} \bar{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{u} dV - \int_{\partial\Omega_f} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} dS - \int_{\partial\Omega_u} \mathbf{t} \cdot \bar{\mathbf{u}} dS \end{aligned} \quad (3.104)$$

où ϕ_i désigne les n champs de phase, considérés comme variables internes indépendantes, notés collectivement $\boldsymbol{\phi}$. A l'aide de la même procédure que précédemment, on obtient n équations d'évolution des champs de phase, par exemple sous la forme générique suivante :

$$\frac{\partial w(\mathbf{u}, \phi_i)}{\partial \phi_i} + g_c^i \frac{\delta \gamma_i}{\delta \phi_i} = 0 \quad (3.105)$$

où :

$$\gamma(\phi_i, \nabla \phi_i, \boldsymbol{\omega}_i) = \frac{1}{2\ell} \left(\phi_i^2 + \frac{\ell^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \boldsymbol{\omega}_i \cdot \nabla \phi_i \right) \quad (3.106)$$

La démarche de Bleyer et Alessi [130] est similaire, mais limitée à la symétrie orthotrope dans une approche bidimensionnelle. Les auteurs ne retiennent que deux champs de phase ϕ_1 et ϕ_2 , et mettent le tenseur d'élasticité du milieu fissuré, en notations de Voigt, sous la forme :

$$\mathbf{C}(\boldsymbol{\phi}) = \begin{pmatrix} (1 - \phi_1)^2 \mathbb{C}_{11} & (1 - \phi_1)(1 - \phi_2) \mathbb{C}_{12} & 0 \\ & (1 - \phi_2)^2 \mathbb{C}_{22} & 0 \\ \text{sym.} & & (1 - \phi_1)(1 - \phi_2) \mathbb{C}_{66} \end{pmatrix} \quad (3.107)$$

ce qui autorise certains couplages entre champs de phase.

Modes mixtes

Plusieurs auteurs [130, 149, 159, 161] ont travaillé à prendre en compte simultanément les modes d'ouverture (mode I) et de glissement (mode II), en vue d'une application aux roches. Zhang et al. [149] proposent une extension du modèle de base isotrope, en reprenant la loi de fissuration (3.25₃) sous la forme :

$$\phi - \ell^2 \Delta \phi = 2\ell(1 - \phi) \frac{\mathcal{H}^+}{g_c} \quad (3.108)$$

et en y modifiant la définition (isotrope) de la fonction \mathcal{H}^+ comme suit :

$$\phi - \ell^2 \Delta \phi = 2\ell(1 - \phi) \left(\frac{\mathcal{H}_I^+}{g_c^I} + \frac{\mathcal{H}_{II}^+}{g_c^{II}} \right) \quad (3.109)$$

avec $\mathcal{H}_I^+ = \lambda \langle \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_+^2$ et $\mathcal{H}_{II}^+ = \mu \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_+^2) \rangle$. Cette formulation n'introduit qu'une constante matériau supplémentaire, la ténacité en glissement g_c^{II} .

Bryant et Sun [159] reprennent la formulation de Zhang et al. [149], et l'étendent au cas anisotrope. Pour commencer, ils proposent le potentiel élastique sous la forme :

$$w(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi) = g_c^I(\phi) w_I(\boldsymbol{\varepsilon}) + g_c^{II}(\phi) w_{II}(\boldsymbol{\varepsilon}) + w_-(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.110)$$

et proposent, à partir d'arguments thermodynamiques, d'étendre la relation (3.25)₃ comme suit :

$$\phi - \ell^2 \nabla \phi : \boldsymbol{\omega} : \nabla \phi = \ell \left(g_I'(\phi) \frac{w_I(\boldsymbol{\varepsilon})}{g_c^I} + g_{II}'(\phi) \frac{w_{II}(\boldsymbol{\varepsilon})}{g_c^{II}} \right) \quad (3.111)$$

Il reste maintenant à définir les deux fonctions w_I et w_{II} . Les auteurs optent pour une définition directionnelle. Ils définissent les vecteur unitaires d'ouverture \mathbf{n} et de saut de glissement \mathbf{m} (tels que $\mathbf{n} \cdot \mathbf{m} = 0$), et construisent :

$$\mathbf{m}_I = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad \mathbf{m}_{II} = \frac{1}{2} (\mathbf{n} \otimes \mathbf{m} + \mathbf{m} \otimes \mathbf{n}) \quad (3.112)$$

L'énergie w_I relative au mode d'ouverture est donnée par :

$$w_I = \begin{cases} \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_0 : \mathbf{m}_I) \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{m}_I) & \text{si } \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{m}_I \geq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.113)$$

et l'énergie w_{II} relative au mode de cisaillement par :

$$w_{II} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_0 : \mathbf{m}_{II}) \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{m}_{II}) \quad (3.114)$$

Cette formulation présente le gros avantage de faire le lien entre la déformation et la direction locale d'ouverture et de glissement. En revanche, elle a le gros inconvénient de devoir mettre en œuvre un algorithme de recherche de la direction d'ouverture qui minimise les énergies d'ouverture et de cisaillement. Par ailleurs, on a vu au paragraphe 3.4.3 que, dans le modèle standard, la constante ℓ ne peut être vue comme une simple constante de régularisation, puisqu'elle induit un effet macroscopique sur la contrainte maximale en traction, par exemple. Les relations (3.113) et (3.114) constituent une façon relativement simple d'y remédier.

Admissibilité thermodynamique

Le modèle de champ de phase discuté jusqu'à présent se base sur l'approche variationnelle [104], n'aborde l'admissibilité thermodynamique de la description de la rupture par champ de phase que d'une façon partielle, en

supposant le processus entièrement dissipatif. De plus, elle ne peut déboucher que sur une formulation indépendante du temps.

De nombreux auteurs ont abordé cette question [113, 114, 126, 133, 134, 143, 159], en utilisant l'approche classique de Coleman et Gurtin [187], ou l'approche de Gurtin [188] à base de microforces associées au gradient du champ de phase. Les formulations obtenues débouchent sur divers principes variationnels sur lesquels se fondent les méthodes numériques d'intégration (voir le chapitre 4).

Sans entrer dans le détail, on se contente ici de suivre le développement exposé par Nguyen [143] basé sur l'approche classique de Coleman et Gurtin [187], qui permet de retrouver la formulation variationnelle, mais aussi d'obtenir une formulation visqueuse, également proposée par d'autres équipes (voir plus bas). Les auteurs, à l'instar de Bryant et Sun [159], considèrent l'énergie de surface comme partie intégrante de l'énergie libre, qu'ils postulent sous la forme :

$$\psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi, \nabla\phi) = w(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi) + g_c \gamma(\phi, \nabla\phi) \quad (3.115)$$

Le second principe, mis sous forme de l'inégalité de Clausius-Duhem et appliqué au cas isotherme (quasi-statique), s'écrit :

$$\mathcal{D} = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} dV - \int_{\Omega} \dot{\psi} dV \geq 0 \quad (3.116)$$

On applique alors la démarche standard de Coleman et Gurtin [187] :

$$\mathcal{D} = \int_{\Omega} \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{\varepsilon}} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} dV + \int_{\Omega} \mathcal{A} \cdot \dot{\phi} dV \geq 0 \quad (3.117)$$

où \mathcal{A} est l'affinité thermodynamique associée au champ de phase, ou force thermodynamique d'endommagement, définie par :

$$\mathcal{A} = -\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = -\frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi)}{\partial\phi} - g_c \frac{\delta\gamma(\phi, \nabla\phi)}{\delta\phi} \quad (3.118)$$

Puisque, par hypothèse, ni $\boldsymbol{\sigma}$ ni $\frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{\varepsilon}}$ ne dépendent de $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$, il s'ensuit que :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \mathcal{A} \cdot \dot{\phi} \geq 0 \end{cases} \quad (3.119)$$

L'une des formes les plus communément admises pour la loi d'évolution du champ de phase est la suivante :

$$\dot{\phi} = \dot{\phi}(\mathcal{A}) \quad (3.120)$$

Dans le contexte d'une évolution indépendante du temps, les auteurs proposent l'existence d'un seuil d'endommagement sous la forme :

$$\mathcal{F}(\mathcal{A}) = \mathcal{A} \leq 0 \quad (3.121)$$

puis postulent un principe de dissipation maximale. Ils formulent alors un Lagrangien sous la forme :

$$\mathcal{L}(\mathcal{A}, \lambda) = \mathcal{A}\dot{\phi} + \lambda\mathcal{F}(\mathcal{A}) \quad (3.122)$$

où λ est un multiplicateur de Lagrange. La maximisation du Lagrangien permet d'obtenir :

$$\dot{\phi} = \lambda \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{A}} \quad (3.123)$$

avec la condition de Kuhn-Tucker :

$$\begin{cases} \lambda \geq 0 \\ \mathcal{F} \leq 0 \\ \lambda \cdot \mathcal{F} = 0 \end{cases} \quad (3.124)$$

La première de ces relations stipule que le champ de phase ne peut pas croître, la deuxième que le seuil d'endommagement ne peut pas être dépassé (non viscosité), et la troisième que le champ de phase n'évolue que si l'on se trouve exactement sur le seuil.

Il est également possible de formuler une loi visqueuse d'évolution du champ de phase, en postulant :

$$\dot{\phi} = \frac{1}{\eta} \mathcal{A} = -\frac{1}{\eta} \frac{\delta \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\delta \phi} \quad (3.125)$$

où η est un paramètre de viscosité, ce qui correspond à une formulation de type Ginzburg-Landau (voir également [110, 113, 189]). Ceci revient à compléter la relation (3.28) comme suit :

$$g_c \left(\frac{\phi}{\ell} - \ell \Delta \phi \right) + \eta \dot{\phi} = 2(1 - \phi) w^{act.}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \quad (3.126)$$

Cette formulation permet de prendre en compte des phénomènes dissipatifs non nécessairement identifiés, confinés en pointe de fissure, tout en restant dans un cadre de rupture fragile, ou de régulariser des évolutions très brutales, comme dans le cas du chargement en mode I d'un massif pré-entaillé, ou de la flexion d'une éprouvette de type Charpy, par exemple. La figure 3.10 illustre l'effet de l'ajout d'une viscosité sur la réponse macroscopique d'une éprouvette pré-entaillée, chargée en mode I [190]. On observe que la viscosité n'a aucun effet, pour des valeurs « raisonnables » de la viscosité, tant que la propagation de fissure n'a pas démarré (contrainte croissante), mais diminue la rapidité de chute de la contrainte lors de la propagation.

Bilgen et Weinberg (2019) n'optent pas pour la relation (3.120), mais pour une forme plus générale :

$$\dot{\phi} = \dot{\phi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi) \quad (3.127)$$

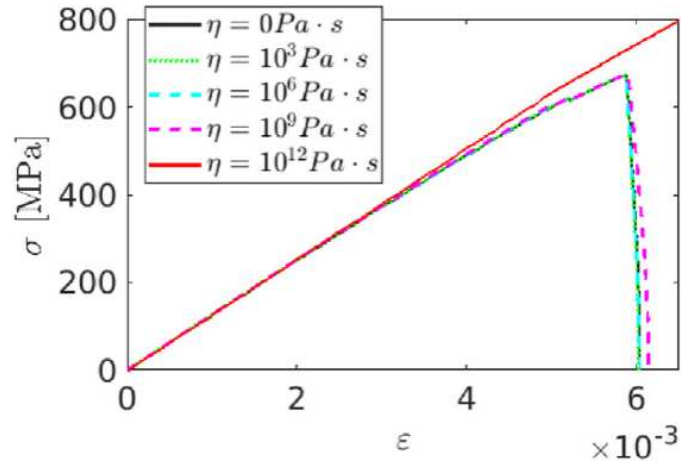


FIGURE 3.10 – Effet du paramètre de viscosité sur la réponse macroscopique d'un massif pré-entailé chargé en mode I (d'après [190]).

qui permet d'envisager l'utilisation de critères de rupture non énergétiques (et, bien sûr, non variationnels), tels que seuils de contrainte ou de déformation principale maximale. Ce choix n'est pas communément répandu, car il n'est pas compatible avec le critère de Griffith [85].

On notera que d'autres auteurs [113, 114, 133, 134] considèrent, comme pour l'approche variationnelle, que l'énergie de surface est entièrement dissipée, et n'entre donc pas dans l'expression de l'énergie libre.

Γ -convergence

Etant donné que les fissures sont représentées par le gradient d'une fonction approchée, la question se pose de savoir à quelles conditions l'expression (3.12) tend vers la relation (3.8) lorsque $\ell \rightarrow 0$. Le problème est abordé par Ambrosio et Tortorelli [107] à l'aide du concept de Γ -convergence. Brièvement, la propriété de Γ -convergence garantit que la solution de (3.20) tend vers la solution de (3.10) lorsque $\ell \rightarrow 0$. Le lecteur intéressé peut se référer à Braides [191].

Bourdin et al. [104] et Chambolle [192] ont prouvé l'existence (mais pas l'unicité) d'une solution et la propriété de Γ -convergence pour le modèle de base sans effet unilatéral. Negri [193] a prouvé la Γ -convergence pour le modèle d'ordre supérieur (second gradient du champ de phase). Amor et al. [139] suggèrent que la violation de la Γ -convergence est possible en présence d'effet unilatéral, mais Chambolle et al. [194] ont récemment invalidé cette suggestion pour la formulation unilatérale proposée par Amor et al. [139].

Notons par ailleurs que les propriétés de Γ -convergence n'ont été établies que pour les modèles variationnels. Les modèles non variationnels ne présentent donc aucune garantie de convergence vers la (ou les) fissure(s) réelle(s) lorsque $\ell \rightarrow 0$.

Plusieurs auteurs (Borden et al. [135], Vignollet et al. [195], May et al. [146]) ont étudié la question par voie numérique. Borden et al. [135] montrent la Γ -convergence pour un cas simple pour lequel la surface de fissure est connue. May et al. [146] montrent en revanche, pour un cas analogue, qu'il y a bien convergence, mais pas vers la valeur attendue. Il semble, bien que les auteurs ne mentionnent pas clairement ce point, que ce hiatus soit lié au type de conditions aux limites imposées aux bords des domaines des simulations (voir le chapitre suivant). Vignollet et al. [195] et May et al. [146] en soulignent l'extrême importance sur la solution.

Transformations finies

Les modèles exposés jusqu'ici se limitent au cas des transformations infinitésimales (« petites déformations »), en général enregistrées dans les matériaux fragiles usuels tels que les verres, les céramiques ou les bétons. Cependant, la description de la fissuration des élastomères, des tissus biologiques et, plus généralement des matériaux à élasticité non linéaire, puis celle de la rupture ductile (voir le paragraphe 3.4.7) nécessitent l'extension au cas des transformations finies, tout en restant dans le domaine fragile.

Del Piero [196] étend les travaux de Bourdin et al. [104] au cas de l'élasticité en transformations finies. Clayton et Knapp [142] développent un modèle en transformations finies, en vue d'incorporer une élasticité non linéaire isotrope à la formulation standard développée plus haut, tout en tenant compte d'une anisotropie de ténacité. L'objectif des auteurs est, à terme, d'utiliser cette modélisation dans un objectif de génie des nanocomposites. Omatuku-Ngongo [197] s'intéresse à la rupture dynamique de la glace, en vue de la modélisation de la fragmentation de la banquise antarctique, et développe un modèle très proche du précédent, mais isotrope.

Divers auteurs se sont intéressés à la rupture fragile des élastomères. Hesch et Weinberg [198], Tang et al. [160] et Zhang et al. [156] développent des modèles très proches de ceux de Clayton et Knapp [142] et Omatuku-Ngongo [197], mais l'appliquent, en version isotrope, au caoutchouc naturel (poly-isoprène) vulcanisé, ou à des élastomères artificiels. Ils considèrent une formulation néo-Hookéenne ou de Mooney-Rivlin de l'énergie de déformation, modulée d'une part par la fonction de dégradation, sous sa forme quadratique, et par une transposition des modèles de Amor et al. [139] ou de Miehe et al. [114] pour le contact unilatéral, d'autre part.

Sans entrer dans le détail (voir en particulier Miehe et Schanzel [199]), ces modèles emploient la cinématique classique des transformations finies. Tout point matériel est repéré par ses coordonnées X_I dans le repère de référence et par ses coordonnées x_i dans l'état déformé, et on définit le gradient de

transformation par :

$$F_{iI}(\mathbf{u}) = \frac{\partial x_i}{\partial X_I} = \delta_{iI} + \frac{\partial u_i}{\partial X_I} = \sum_{\alpha=1}^3 \lambda_{\alpha} n_i^{\alpha} N_I^{\alpha} \quad (3.128)$$

où les λ_{α} sont les extensions propres, et les \mathbf{n}^{α} et les \mathbf{N}^{α} sont les directions propres de \mathbf{F} . On définit ensuite le tenseur de Cauchy-Green gauche $\mathbf{C}(\mathbf{u})$ par :

$$C_{IJ}(\mathbf{u}) = F_{iI}(\mathbf{u})F_{iJ}(\mathbf{u}) = (\mathbf{F}(\mathbf{u})^T \mathbf{F}(\mathbf{u}))_{IJ} = \sum_{\alpha=1}^3 \lambda_{\alpha}^2 N_I^{\alpha} N_J^{\alpha} \quad (3.129)$$

où \mathbf{F}^T est la transposée de \mathbf{F} . Le modèle néo-Hookéen définit l'énergie de déformation par :

$$w(\mathbf{C}(\mathbf{u})) = \frac{1}{2}\mu(I_1 - 3 - 2 \ln J) + \frac{1}{2}K(\ln J)^2 \quad (3.130)$$

et le modèle de Mooney-Rivlin par :

$$w(\mathbf{C}(\mathbf{u})) = \frac{1}{2}C_1(I_1 - 3 - 2 \ln J) + C_2(I_2 - 3) + \frac{1}{2}K(\ln J)^2 \quad (3.131)$$

avec :

$$\begin{cases} I_1 = \text{tr } \mathbf{C} = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 \\ I_2 = \text{tr } \mathbf{C}^{-1} = \frac{1}{\lambda_1^2} + \frac{1}{\lambda_2^2} + \frac{1}{\lambda_3^2} \\ J = \det \mathbf{F} \end{cases} \quad (3.132)$$

A partir des expressions (3.130) ou (3.131), les contraintes de Piola-Kirchhoff \mathbf{S} , reliées aux contraintes (classiques) de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ par $\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J}\mathbf{S} \cdot \mathbf{F}^T$, sont données par :

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial w(\mathbf{C}(\mathbf{u}))}{\partial \mathbf{C}} \quad (3.133)$$

Dans le cadre de la formulation néo-Hookéenne (3.130), Clayton et Knap [142] proposent de mettre le contact unilatéral sous la forme :

$$\begin{cases} K = K_0(1 - \phi)^2 & \text{si } J > 1 \\ K = K_0 & \text{si } J < 1 \\ \mu = \mu_0(1 - \phi)^2 \end{cases} \quad (3.134)$$

qui constitue une extension aux transformations finies du modèle de contact unilatéral (3.70) de Amor et al. [139]. Le reste du modèle, c'est-à-dire la loi d'évolution du champ de phase, n'est pas modifié.

La figure 3.11 illustre le cas de la traction d'une éprouvette bi-entaillée, simulée par Miehe et Schantzel [199], pour un élastomère doté d'un module de cisaillement de 0,2 MPa, d'un coefficient de Poisson de 0,45, et d'une

ténacité de 2670 J.m^{-2} . Il apparaît clairement que le processus de rupture s'accompagne d'une très forte déformation. Miehe et Schanzel [199] et Li et Bouklas [200] cherchent à exprimer l'énergie de déformation et la ténacité sous un angle plus physique par une approche moléculaire. Constatant que les modèles standards d'élasticité non linéaire des élastomères rendent l'algorithme de champ de phase moins stable que la loi de Hooke, Hesch et al. [125] cherchent une formulation alternative de l'énergie de déformation à l'aide du concept de polyconvexité.

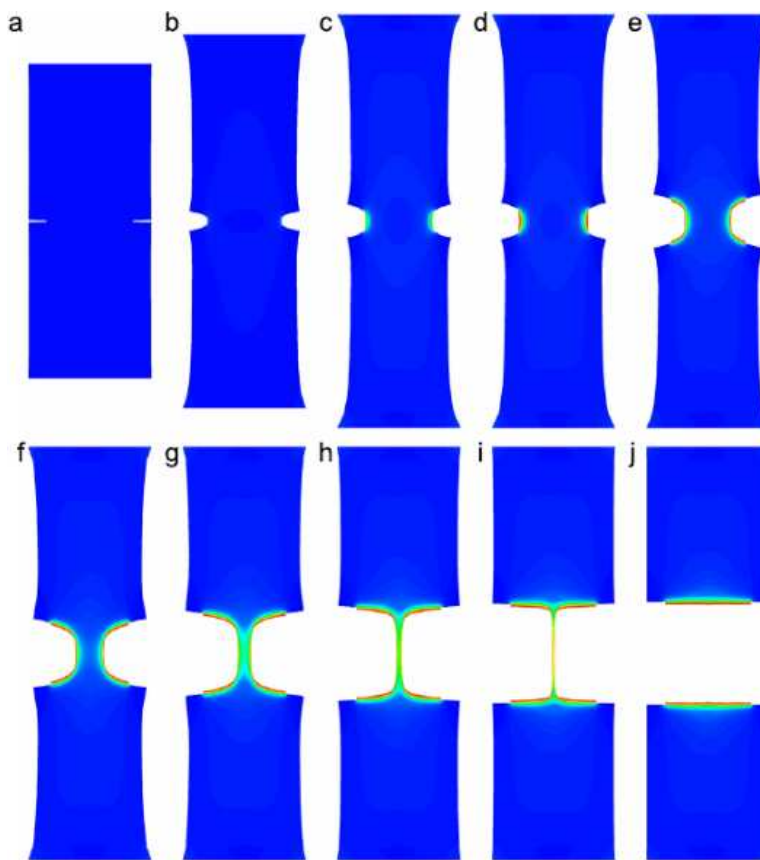


FIGURE 3.11 – Simulation de la traction jusqu'à rupture d'une éprouvette bi-entallée d'un élastomère (d'après [199]).

Ces diverses modifications sont destinées à améliorer la description des énergies de déformation et de rupture des élastomères, mais ne remettent pas en cause l'ossature du modèle de champ de phase, qui n'est pas modifiée.

Rupture ductile

Pour la rupture ductile, la déformation plastique se produit en avant du front de fissure, et la dissipation combine rupture et plasticité. La rupture est progressive, et fait intervenir l'apparition, la croissance puis la coalescence de micro-cavités, invoquant une forte dissipation plastique. On peut parler de zone d'élaboration de la rupture en avant du front de fissure.

La littérature est abondante dans ce domaine (Duda et al. [201], Shanthraj et al. [119, 202], Diehl et al. [203], Ambati et al. [138, 204], Badnava et al. [205], Alessi et al. [206, 207], Arriaga et Weisman [208, 209], Borden et al. [210], Kuhn et al. [126, 211], Miehe et al. [212–214], Aldakheel et al. [215], Dittmann et al. [216], de Lorenzis et al. [217], Choo et Sun [218]), et ne sera évoquée que brièvement dans ce qui suit.

Duda et al. [201] et Shanthraj et al. [119, 202] proposent des modèles de rupture fragile dans les milieux élasto-plastiques. Le modèle proposé par Duda et al. [201] constitue l'extension la plus simple du modèle standard, sous la forme :

$$\mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \boldsymbol{\varepsilon}^p, \phi, \alpha) = \int_{\Omega} w^e(\boldsymbol{\varepsilon}^e(\mathbf{u}), \phi) dV + \int_{\Omega} w^p(\alpha) dV + \int_{\Omega} g_c \gamma(\phi, \nabla \phi) dV \quad (3.135)$$

dans laquelle le travail des efforts extérieurs a été omis par souci de simplicité. Pour cette expression, ont été ajoutées la déformation plastique $\boldsymbol{\varepsilon}^p$, la variable d'écrouissage α , et l'énergie stockée par écrouissage $w^p(\alpha)$. De plus, la forme usuelle de l'énergie de déformation élastique devient $w^e(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)$. Ici, on adopte la décomposition usuelle $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p$, dans le cadre des transformations infinitésimales.

Ambati et al. [204] reprennent cette formulation, mais introduisent un couplage fort en exprimant l'énergie élastique sous la forme :

$$w(\boldsymbol{\varepsilon}^e, \phi) = g(\phi, p) w_+^e(\boldsymbol{\varepsilon}^e) + w_-^e(\boldsymbol{\varepsilon}^e) \quad (3.136)$$

avec $g(\phi, p) = (1 - \phi)^{2p}$, où p est une fonction croissante de la déformation plastique cumulée. L'idée sous-jacente est de faire en sorte que les déformations élastiques ne soient plus dominantes dans les premiers stades de la rupture, qui se voit donc « retardée » par les processus de plasticité. La loi d'évolution du champ de phase devient :

$$\frac{\phi}{2\ell} + 2\ell \Delta \phi = \frac{2\phi^{2p-2}}{g_c} p \cdot w_+^e(\boldsymbol{\varepsilon}^e) \quad (3.137)$$

On constate clairement que le champ de phase évolue peu tant que p est proche de zéro. La figure 3.12 donne l'exemple d'une éprouvette de traction en déformations planes. Le modèle de Duda et al. [201] ne donne pas le résultat expérimental de Xue [219], contrairement au modèle proposé par Ambati et al. [204], qui étendent par ailleurs leur formulation aux transformations finies. De Lorenzis et al. [217] étendent cette formulation aux

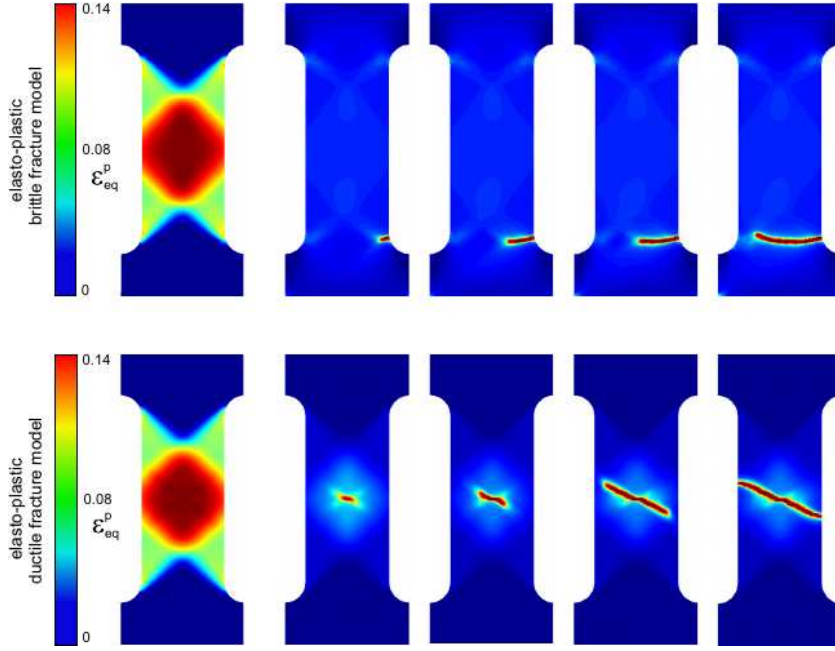


FIGURE 3.12 – TrACTION d'une éprouvette en déformations planes. A gauche : déformation plastique cumulée. A droite : Champ de phase à quatre instants. En haut : modèle de Duda et al. [201]. En bas, modèle couplé, (d'après [204]).

monocristaux anisotropes en transformations finies, en utilisant une loi de plasticité cristalline.

Kuhn et al. [211] proposent une formulation dans laquelle le couplage s'exerce entre le champ de phase et l'énergie stockée par écrouissage :

$$\mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \boldsymbol{\varepsilon}^p, \phi, \alpha) = \int_{\Omega} w^e(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi) dV + \int_{\Omega} w^p(\alpha, \phi) dV + g_c \int_{\Omega} \gamma(\phi, \nabla \phi) dV \quad (3.138)$$

Dans cette expression, la fonction d'adoucissement est appliquée à l'énergie élastique, sous forme classique, et à l'énergie d'écrouissage :

$$\begin{cases} w^e(\boldsymbol{\varepsilon}^e, \phi) = g(\phi)w_+^e(\boldsymbol{\varepsilon}^e) + w_-^e(\boldsymbol{\varepsilon}^e) \\ w^p(\alpha, \phi) = g(\phi)w_0^p(\alpha) = g(\phi) \left(\sigma_Y + \frac{1}{2}H\alpha \right) \alpha \end{cases} \quad (3.139)$$

où l'écrouissage isotrope est supposé linéaire. De ce fait, l'énergie d'écrouissage intervient dans la force motrice de rupture :

$$\frac{\phi}{2\ell} + 2\ell\Delta\phi = g'(\phi)(w_+^e(\boldsymbol{\varepsilon}^e) + w^p(\alpha)) \quad (3.140)$$

et la contrainte d'écoulement diminue au cours du développement du champ de phase. Badnava et al. [205] et Alessi et al. [206] utilisent également ce modèle. Arriaga et Waisman [208, 209] l'étendent au cas dynamique,

et Borden et al. [210] aux transformations finies, en ajoutant une énergie d'écroutissage sensible à la triaxialité des contraintes. D'autres modèles plus complexes, ont été proposés [206, 207, 212–216, 218], faisant notamment intervenir une plasticité non locale à gradient.

Rupture cohésive et fissuration interfaciale

On aborde ici le cas de la rupture interfaciale. Ce cas est traité par divers auteurs (Verhoosel et de Borst [220], Vignollet et al. [195], May et al. [146], Nguyen et al. [171]) sous la forme d'une extension du modèle standard dérivée des modèles de zones cohésives largement utilisés en simulation par éléments finis.

Le domaine Ω est doté d'une (ou plusieurs) interface(s) Γ^β , le long de laquelle (ou desquelles) la rupture est susceptible de se produire. De ce fait, la principale différence avec la rupture fragile réside dans le fait que l'interface Γ^β *n'est plus une inconnue du problème*. La rupture est supposée progressive, et la ténacité $g_c = 2\gamma$ est remplacée par une fonction \mathcal{G} . La relation (3.8) devient alors [220] :

$$\mathcal{P}(\mathbf{u}, \llbracket \mathbf{u} \rrbracket) = \int_{\Omega \setminus \Gamma^\beta} w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) dV + \int_{\Gamma^\beta} \mathcal{G}(\llbracket \mathbf{u} \rrbracket) dS - W^{\text{ext.}}(\mathbf{u}) \quad (3.141)$$

et prend en compte une nouvelle variable de champ, l'ouverture $\llbracket \mathbf{u} \rrbracket$ de la fissure. La contrainte cohésive \mathbf{t} , représentant la capacité à transmettre les contraintes au travers de la fissure, est donnée par :

$$\mathbf{t} = \frac{\partial \mathcal{G}(\llbracket \mathbf{u} \rrbracket)}{\partial \llbracket \mathbf{u} \rrbracket} \quad (3.142)$$

La relation $\mathbf{t}(\llbracket \mathbf{u} \rrbracket)$ est appelée « loi cohésive » (ou loi « traction-séparation »). Cette fonction doit être vue comme caractéristique du comportement de l'interface. On donne sur la figure 3.13 deux exemples de lois cohésives. En traits pleins, le comportement de l'interface est de type rigide-adoucissant, souvent qualifié de « cohésif » ou extrinsèque. En traits pointillés, le comportement est élastique adoucissant, souvent qualifié d'« adhésif » ou intrinsèque. L'énergie de rupture (ténacité) correspond à la surface sous la courbe de la vue de droite. Ces courbes sont le plus souvent construites en mode I, et associent la composante normale du vecteur contrainte $t_{nn} = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$ au saut de déplacement normal $\llbracket u_n \rrbracket = \llbracket \mathbf{u} \rrbracket \cdot \mathbf{n}$, mais il est possible d'étendre la formulation aux modes mixtes ouverture/glisement. Le principe du modèle

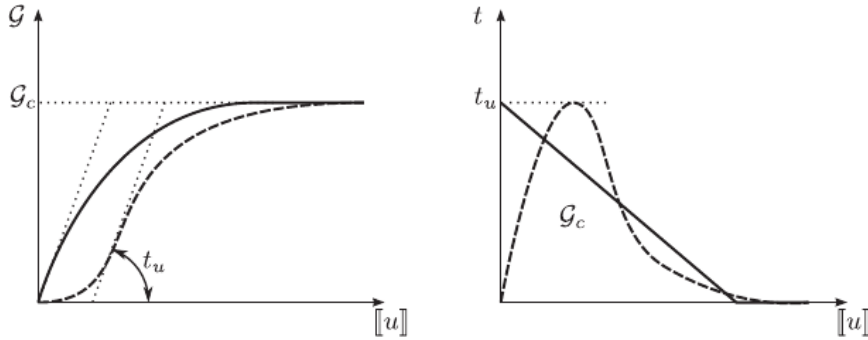


FIGURE 3.13 – Exemples de lois cohésives, donnant la ténacité (à gauche) et le vecteur contrainte (à droite) selon la relation (3.142). En traits pleins, loi de type cohésive. En traits pointillés, loi de type adhésive (d'après [220]).

initialement proposé par Verhoosel et de Borst [220] consiste à diffuser l'interface. A cet effet, on construit un champ (de phase) β solution du système différentiel suivant :

$$\begin{cases} \beta - \ell^2 \Delta \beta = 0 & \text{sur } \Omega \\ \beta = 1 & \text{sur } \Gamma^\beta \\ \nabla \beta \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (3.143)$$

On observe que ce champ de phase est construit sur le même principe que le champ ϕ des paragraphes précédents, mais que la relation (3.143)₁ ne contient pas de force motrice. En effet, ce champ ne sert qu'à délocaliser l'interface, et non à décrire un endommagement évolutif. L'endommagement n'est décrit que par la décroissance de la contrainte cohésive \mathbf{t} à mesure que l'ouverture $[[\mathbf{u}]]$ de la fissure interfaciale augmente.

De façon analogue à la description régularisée des fissures décrite au paragraphe 3.3.4, l'interface Γ^β est approximée par :

$$\Gamma^\beta \simeq \Gamma_\ell^\beta = \int_\Omega \gamma(\beta, \nabla \beta) dV \quad (3.144)$$

où $\gamma(\beta, \nabla \beta)$ est la densité spécifique de surface d'interface, donnée par :

$$\gamma(\beta, \nabla \beta) = \frac{1}{4\ell} \beta^2 + \ell \nabla \beta \cdot \nabla \beta \quad (3.145)$$

De ce fait, il est possible d'écrire une version régularisée de la relation (3.141), sous la forme :

$$\mathcal{P}(\mathbf{u}, [[\mathbf{u}]]) \simeq \mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, [[\mathbf{u}]]) = \int_\Omega w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) dV + \int_\Omega \mathcal{G}([[\mathbf{u}]]) \gamma(\beta, \nabla \beta) dV - W^{\text{ext.}}(\mathbf{u}) \quad (3.146)$$

Cependant, cette relation ne peut être utilisée telle quelle, car le saut de déplacement interfacial $[[\mathbf{u}]]$ n'est défini que sur l'interface, non sur sa version régularisée. Il devient donc nécessaire de régulariser le saut de déplacement

interfacial. Pour cela, on utilise un champ auxiliaire \mathbf{v} , défini comme suit. Considérons un point \mathbf{x}_c de l'interface, de normale locale \mathbf{n} , et définissons la coordonnée normale $x_n = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \cdot \mathbf{n}$. On définit alors :

$$\llbracket \mathbf{u} \rrbracket(\mathbf{x}_c) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{v}(x_n) \gamma(\beta, \nabla \beta) dx_n \quad (3.147)$$

soumis à la condition :

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x_n} = \mathbf{0} \quad (3.148)$$

Dans ces conditions, on obtient :

$$\llbracket \mathbf{u} \rrbracket(\mathbf{x}_c) = \mathbf{v}(\mathbf{x}_c) \quad (3.149)$$

et :

$$\begin{cases} \mathcal{G}(\llbracket \mathbf{u} \rrbracket) \simeq \mathcal{G}(\mathbf{v}) \\ \mathbf{t}(\llbracket \mathbf{u} \rrbracket) \simeq \mathbf{t}(\mathbf{v}) \end{cases} \quad (3.150)$$

de sorte que la relation (3.141) devient :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\mathbf{u}, \llbracket \mathbf{u} \rrbracket) \simeq \mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &= \int_{\Omega} w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) dV + \int_{\Omega} \mathcal{G}(\llbracket \mathbf{u} \rrbracket) \gamma(\beta, \nabla \beta) dV \\ &+ \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \left| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x_n} \right|^2 - W^{\text{ext.}}(\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (3.151)$$

Il est toutefois nécessaire de remarquer que l'ouverture locale de la fissure interfaciale modifie la cinématique locale, et qu'il est nécessaire de découpler la déformation élastique hors de la fissure et la déformation induite par l'ouverture de la fissure, sous la forme :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \text{sym}(\nabla \mathbf{u}) - \gamma(\beta, \nabla \beta) \text{sym}(\mathbf{v} \otimes \mathbf{n}) \quad (3.152)$$

On peut alors obtenir la forme finale de l'énergie potentielle régularisée :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\mathbf{u}, \llbracket \mathbf{u} \rrbracket) \simeq \mathcal{P}_\ell(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &= \int_{\Omega} w(\boldsymbol{\varepsilon}^e(\mathbf{u}, \mathbf{v})) dV + \int_{\Omega} \mathcal{G}(\llbracket \mathbf{u} \rrbracket) \gamma(\beta, \nabla \beta) dV \\ &+ \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \left| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x_n} \right|^2 - W^{\text{ext.}}(\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (3.153)$$

La minimisation de cette énergie potentielle conduit au système suivant :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \\ \gamma(\beta, \nabla \beta) [\mathbf{t}(\mathbf{v}) - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}] = \alpha \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial x_n^2} \end{cases} \quad (3.154)$$

Paggi et Reinoso [221] utilisent une version très proche de ce modèle pour étudier le comportement d'une fissure arrivant sur une interface cohésive.

Carollo et al. [222] l'étendent aux transformations finies pour étudier le délaminage d'assemblages.

Nguyen et al. proposent de combiner un modèle de champ de phase fragile isotrope et un modèle de champ de phase cohésif pour représenter simultanément la rupture transgranulaire et intergranulaire dans un mortier [223]. Ils combinent ensuite un modèle fragile à deux champs et un modèle cohésif pour représenter les deux types de rupture dans un polycristal à anisotropie forte [171]. La figure 3.14 montre un exemple de résultat de simulation en traction uniaxiale.

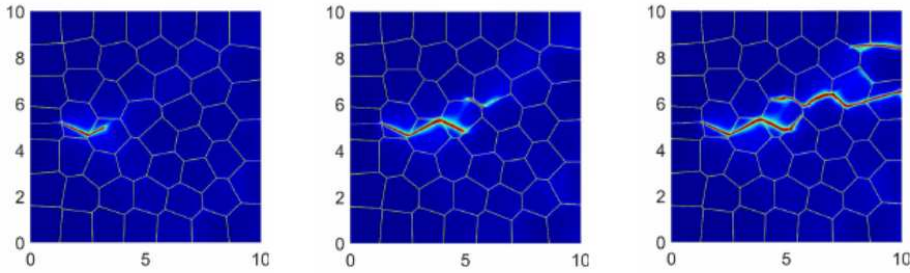


FIGURE 3.14 – Simulation de la rupture inter- et transgranulaire d'un polycristal à anisotropie forte (d'après [171]).

Rupture fragile dynamique

La communauté physicienne [121–123, 189, 224–226] a été la première à appliquer la méthode des champs de phase à la rupture fragile dynamique.

Pour la communauté mécanicienne, à notre connaissance, les sollicitations dynamiques ont commencé à être prises en compte avec les travaux de Bourdin et al. [227], Borden et al. [124] et de Hofacker et Miehe [228]. Bourdin et al. [227] et Borden et al. [124] ont simplement repris la démarche de Bourdin et al. [104] en ajoutant l'énergie cinétique à l'énergie potentielle totale. Hofacker et Miehe [228] y ont ajouté la puissance des efforts extérieurs. De ce fait, on peut reprendre la démarche du paragraphe 3.3.5, en définissant le Lagrangien comme extension de la relation (3.8) :

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Gamma) = E^{cin.}(\dot{\mathbf{u}}) + \mathcal{P}(\mathbf{u}, \Gamma) \quad (3.155)$$

dont la forme régularisée s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Gamma) \approx \mathcal{L}_\ell(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \phi) &= \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} dV + \int_{\Omega} w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi) dV \\ &+ g_c \int_{\Omega} \gamma(\phi, \nabla \phi) dV - \int_{\Omega} \bar{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{u} dV - \int_{\partial\Omega_f} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} dS \end{aligned} \quad (3.156)$$

Il suffit ensuite de minimiser ce Lagrangien par rapport au déplacement \mathbf{u} , à la vitesse $\dot{\mathbf{u}}$ et au champ de phase ϕ :

$$(\mathbf{u}_\ell^{sol.}, \dot{\mathbf{u}}_\ell^{sol.}, \phi_\ell^{sol.}) = \arg \min_{\substack{\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ sur } \partial\Omega_u \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \text{ sur } \partial\Omega_f \\ \dot{\Gamma}_\ell \geq 0}} \mathcal{L}_\ell(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \phi) \quad (3.157)$$

On obtient alors une extension du système (3.25) :

$$\begin{cases} \sigma_{ij,j} - \bar{f}_i = \rho \ddot{\mathbf{u}} \text{ sur } \Omega \\ \sigma_{ij} n_j - \bar{t}_i = 0 \text{ sur } \partial\Omega_f \\ \frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi)}{\partial \phi} + g_c \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi} + g_c \left(\frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_{,i}} \right)_{,i} = 0 \text{ sur } \Omega \\ \frac{\partial \gamma(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_{,i}} n_i = 0 \text{ sur } \partial\Omega_\phi \end{cases} \quad (3.158)$$

Les expressions de l'énergie de déformation w (incluant le contact unilatéral) et de l'énergie de surface $g_c \gamma$ décrites plus haut sont reprises telles quelles, et l'expression de γ peut également être étendue à l'ordre supérieur (voir le paragraphe 3.4.2) dans le cas dynamique [210]).

Schlüter et al. [229, 230] l'utilisent pour étudier la rupture transsonique, et sont capables de reproduire les simulations de dynamique moléculaire de Gao et al. [231] et les expériences de Rosakis et al. [232]. Agrawal et Dayal [233] montrent que la ténacité prédite par le modèle ci-dessus dépend de la vitesse de propagation de la fissure. Doan et al. [234] réalisent des simulations de propagation dynamique de fissures dans le PMMA. Ils montrent qu'il est nécessaire d'introduire un terme visqueux pour reproduire les données expérimentales et la vitesse de propagation de fissure.

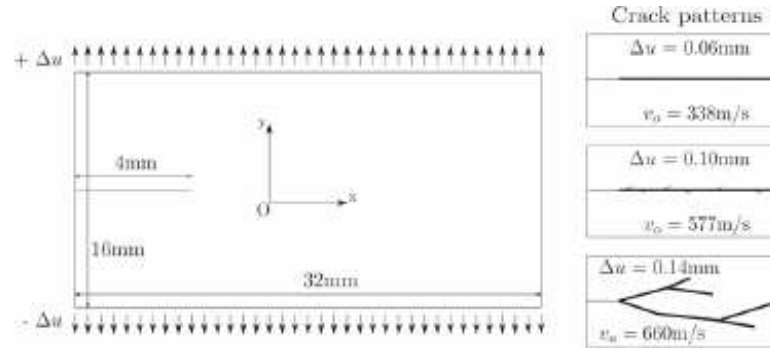


FIGURE 3.15 – Expériences de Zhou et al. [235]. Une plaque de grande largeur est chargée statiquement (vue de gauche), puis une amorce de rupture est pratiquée sur la partie gauche de l'éprouvette. La vue de droite montre la topologie des fissures en fonction de leur vitesse de propagation (d'après [236]).

Bleyer et Molinari [236] et Bleyer et Alessi [130] utilisent également la formulation ci-dessus pour étudier la propagation dynamique de fissures dans

des milieux fragiles dans le domaine transonique, en mettant l'accent sur les phénomènes de bifurcation et de branchement de fissures, que l'on sait étroitement liés à la limitation de vitesse de propagation à une fraction de la célérité des ondes de Rayleigh. Afin d'autoriser l'existence d'un domaine élastique, les auteurs choisissent $\alpha(\phi) = \phi$, puis simulent les expériences de Zhou et al. [235], illustrées sur la figure 3.15.

Ils montrent qu'ils reproduisent les résultats qualitativement, bien qu'ils surestiment la vitesse de propagation des fissures. Ils mettent en évidence le phénomène d'épaississement de la fissure à mesure que la propagation s'accélère, et l'existence d'une vitesse limite de propagation inférieure à la célérité des ondes de Rayleigh, quasi-indépendante du branchement des fissures, comme l'illustre la figure 3.16. Ils montrent en outre que le branchement intervient lorsque le taux de dissipation d'énergie atteint le double de la ténacité statique du matériau. Ces travaux, réalisés en configuration bidimensionnelle, sont ensuite étendus par Bleyer et Molinari [130] au cas tridimensionnel, avec les mêmes conclusions.

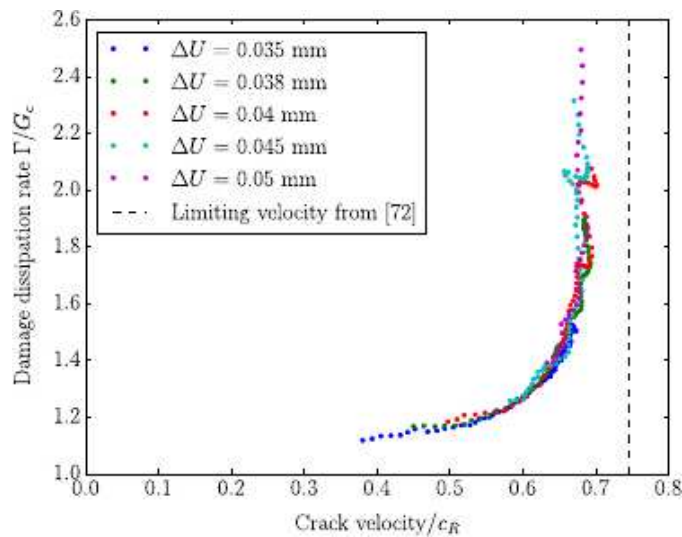


FIGURE 3.16 – Taux de dissipation d'énergie en fonction de la vitesse de propagation de la fissure (d'après [236]). ΔU est le déplacement statique imposé à la plaque avant de pratiquer l'entaille.

Kamensky et al. [237] étendent le modèle de Borden et al. [124] en ajoutant un terme proportionnel à $\ddot{\phi}$ dans la relation d'évolution du champ de phase (3.28). L'objectif est de rendre cette équation hyperbolique, pour obtenir une compatibilité avec la condition de stabilité de Courant-Friedrich-Lévy (CFL) utilisée en simulation explicite, et de réduire significativement le temps de calcul. Les auteurs montrent la validité de l'approche en comparant leurs résultats avec ceux de Borden et al. [124] et de Bleyer et Alessi [130].

3.4.8 Validations

Parmi les travaux mentionnés jusqu'ici, nombreux sont ceux qui comparent les prédictions de leurs modèles à des résultats expérimentaux bien établis, en grande partie dans le domaine de la rupture fragile de milieux considérés comme homogènes. Ces comparaisons sont d'autant plus intéressantes que, pour la plupart des modèles de rupture fragile décrits plus haut, la seule constante ajustable est la longueur interne ℓ , à condition bien sûr d'être en mesure de déterminer expérimentalement la ténacité du milieu. Nous verrons au § 4.7 que, selon les choix de modélisation, la longueur interne peut devoir être considérée comme paramètre ajustable. De ce fait, les validations portent davantage sur les trajets de fissures que sur la prédiction de courbes force-déplacement.

Rupture fragile sous sollicitations quasi-statiques d'éprouvettes entaillées

L'une des expériences fréquemment invoquée est la flexion trois points d'une éprouvette de PMMA entaillée asymétrique « à trous » [238]. La figure 3.17 présente la géométrie de l'expérience et le trajet de la fissure observé expérimentalement, ainsi que des cartes de champ de phase à quatre instants de la propagation, simulés par Miehe et al. (2010b). La simulation reproduit fidèlement le trajet de fissure expérimental. Des résultats très proches ont été obtenus par Msekh et al. [239], Molnar et Gravouil [240], Wu et Nguyen [134], et Mandal et al. [241]. Ambati et al. [138] réalisent et simulent des expériences sur éprouvette de béton entaillée dotée d'un trou asymétrique. La figure 3.18 compare les trajets de fissure obtenus lors de l'expérience et de la simulation. Zhang et al. [149] étudient un problème d'un grand intérêt pour la communauté géomécanicienne, à savoir le comportement de fissures inclinées sous chargements de compression, et utilisent à cet effet le modèle standard modifié pour prendre en compte les modes mixtes (voir le paragraphe 3.4.7) pour simuler les expériences d'Ingrafea et Heuze [242] sur des éprouvettes de roches, illustrées sur la figure 3.19. La figure 3.20 présente le résultat des simulations, quasi-parfaitement en accord avec l'expérience. Santillan et al. [243] simulent les expériences de Thomas et Pollard [244] sur éprouvettes de PMMA doublement entaillées sous sollicitations multiaxiales. Comme l'illustre la figure 3.21, les trajets des fissures sont parfaitement respectés par la simulation. Wu [133] et Wu et Nguyen [136] simulent les expériences de flexion asymétrique trois points de Galvez et al. [245] sur béton. L'intérêt de ces expériences est la mixité de mode de la propagation des fissures. Les auteurs utilisent le modèle atypique évoqué au paragraphe 3.4.3, et reproduisent quasi-parfaitement les trajets de fissures observés expérimentalement, comme l'illustre la figure 3.22, ainsi que les courbes effort-déplacement, ce qui est notable. Feng et Wu [246]

reproduisent également très fidèlement, avec le même type de modèle, les courbes effort-déplacement obtenues expérimentalement sur béton en flexion trois points d'éprouvettes entaillées. Tanné et al. [129] examinent la validité des prédictions du modèle standard avec dans le cas d'éprouvettes avec singularités faibles, c'est-à-dire des entailles en V, avec angle d'ouverture variable, ou en U, avec rayon d'entaille variable. Ces travaux se placent dans l'optique de la mécanique linéaire de la rupture. On donne ici l'exemple d'éprouvettes avec entaille en V. Les auteurs déterminent le facteur critique d'intensité des contraintes généralisé (voir le paragraphe 3.4.3), déterminé à l'instant d'apparition du saut d'énergie de surface, et le comparent (figure 3.23) aux données expérimentales disponibles de Strandberg et al. (2002) sur acier, et de Seweryn (1994), sur duralumin et PMMA. Pour ces simulations, la longueur interne est déterminée par l'équation (3.60) (voir le § 3.4.3). La confrontation est d'excellente qualité. Le lecteur intéressé trouvera également dans Tanné et al. (2018) d'autres confrontations de qualité similaire.

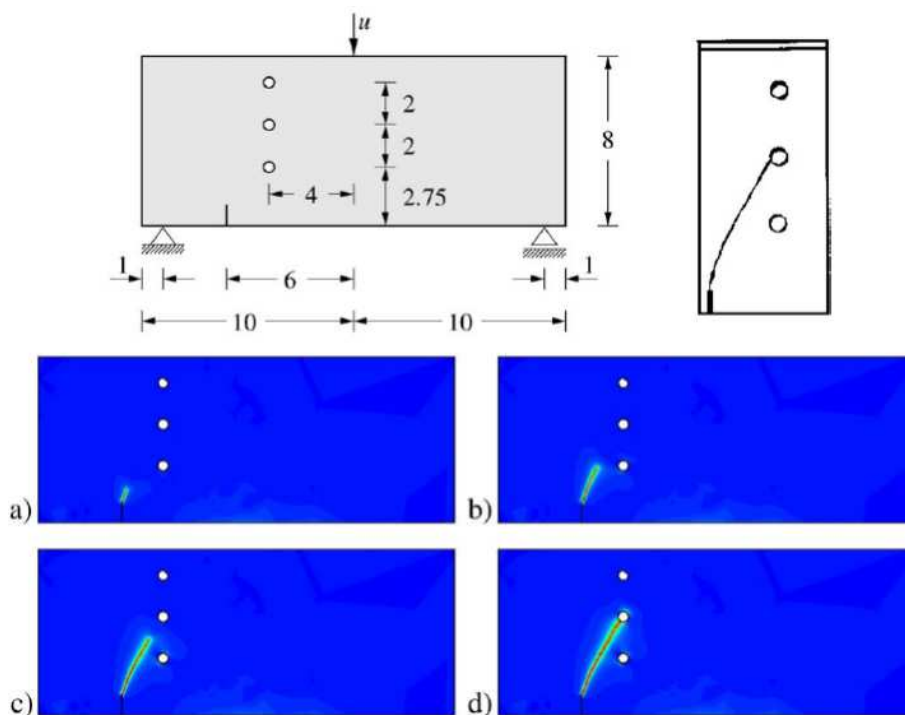


FIGURE 3.17 – Expérience de flexion d'une éprouvette de PMMA entaillée asymétrique "à trous". En haut : géométrie et trajet de fissure expérimental (d'après [238]). En bas, simulations de Miehe et al. [114]).

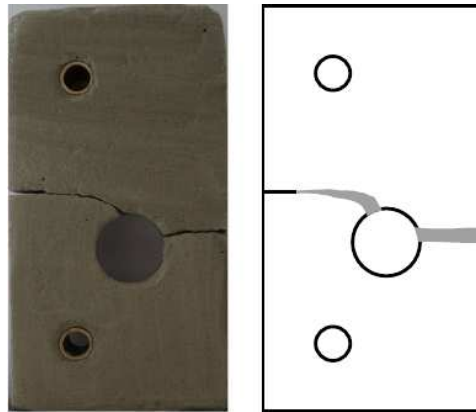


FIGURE 3.18 – Expérience sur éprouvette de béton entaillée et dotée d'un trou asymétrique. Comparaison entre les trajets de fissure expérimentale, à gauche, et simulée, à droite (d'après [138]).

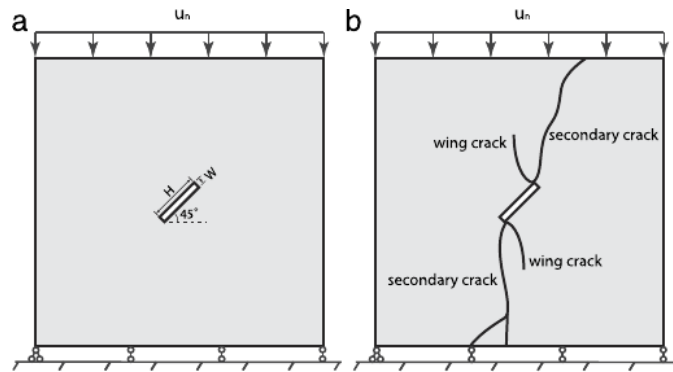


FIGURE 3.19 – Expérience de compression uniaxiale sur éprouvette de roche avec entaille oblique de Ingrafea et Heuze [242]. A gauche : géométrie. A droite : trajet des fissures (d'après [149]).

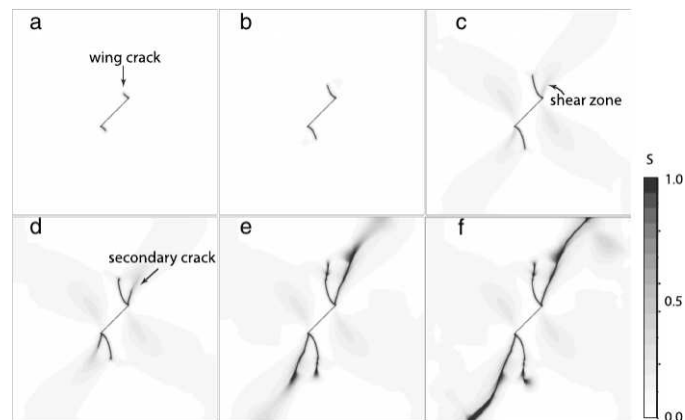


FIGURE 3.20 – Simulation de l'expérience d'Ingrafea et Heuze [242]. Trajet des fissures à divers stades du chargement (d'après [149]).

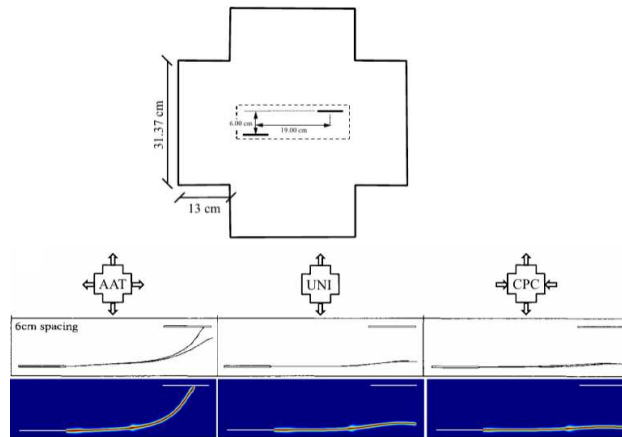


FIGURE 3.21 – Simulation des expériences de Thomas et Pollard [244] sur épouvettes de PMMA doublement entaillées sous sollicitations multiaxiales. En haut : géométrie. Au milieu : trajets expérimentaux des fissures. En bas : trajets simulés (d'après [243]).

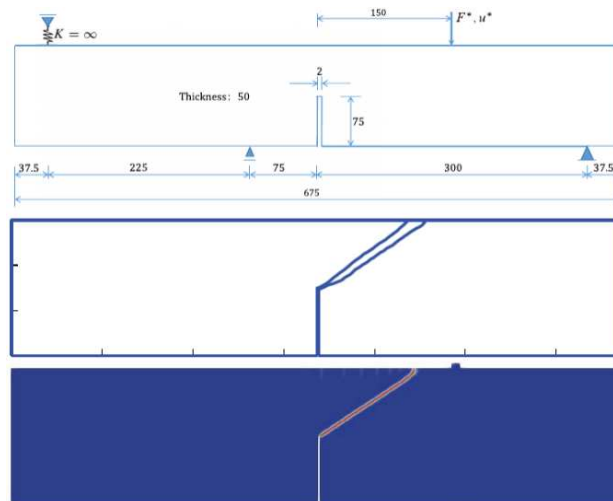


FIGURE 3.22 – Expérience de flexion trois points asymétrique sur béton de Galvez et al. [245]. En haut : géométrie. Au milieu : résultat expérimental. En bas : résultat de simulation (d'après [134]).

Rupture fragile sous sollicitations dynamiques

Kalthoff et Winckler [249] ont réalisé une expérience de fissuration sous impact qui fait référence dans la communauté dynamique. La figure 3.24 illustre la comparaison des trajets de fissure observés par Kalthhoff et Winckler [249] et prédits par Hofacker et al. [228].

Bleyer et al. [236] simulent les expériences de Zhou et al. [235]. Comme le montre la figure 3.15 (voir le paragraphe 3.4.7), le trajet de fissure est parfaitement reproduit par la simulation.

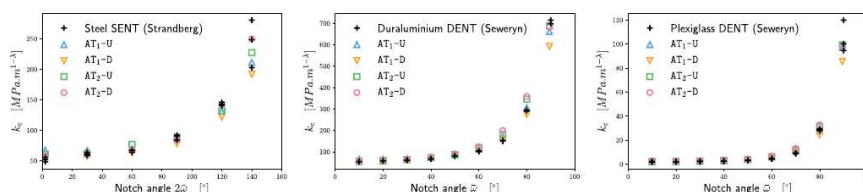


FIGURE 3.23 – Facteur d'intensité des contraintes généralisé critique pour des éprouvettes avec entaille en V d'angle au sommet . Comparaison des résultats expérimentaux de Strandberg [247] sur acier et de Seweryn [248] sur duralumin et PMMA. Les résultats numériques correspondant au modèle indiqué dans le texte portent la mention "AT1-U" (d'après [129]).

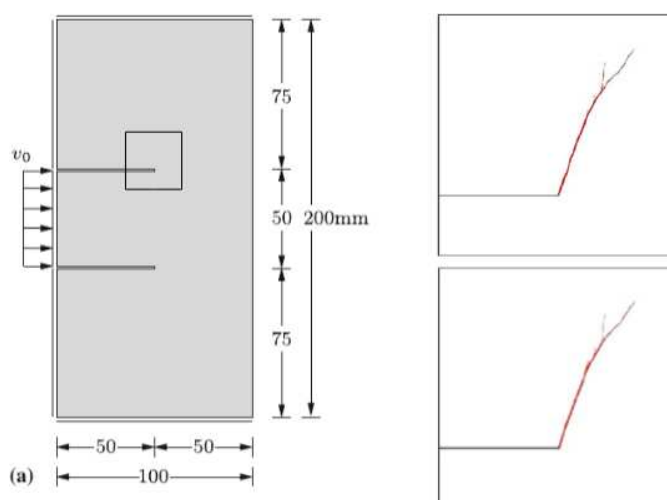


FIGURE 3.24 – Expérience de Kalthoff et Winkler [249]. A gauche : schéma de l'expérience. En haut à droite : fissures observées expérimentalement. En bas à droite : trajet de fissure prédit par Hofacker et al. [228]).

Rupture ductile et autres cas

Dans le domaine de la rupture ductile, Ambati et al. [204] réalisent une série de simulations pour valider le modèle évoqué au paragraphe 3.4.7. On présente ci-dessous l'exemple des expériences réalisées par Guo [250] sur éprouvette aluminium. La figure 3.25 présente la géométrie et l'éprouvette à plusieurs stades du chargement. On constate que la déformation plastique se localise entre le fond d'entaille et le trou le plus proche avant l'initiation de la fissure. La figure 3.26 présente les résultats de simulation, conformes à ce constat. Cependant, la courbe effort-déplacement montre que le couplage entre écoulement et endommagement n'est pas tout à fait correctement restitué.

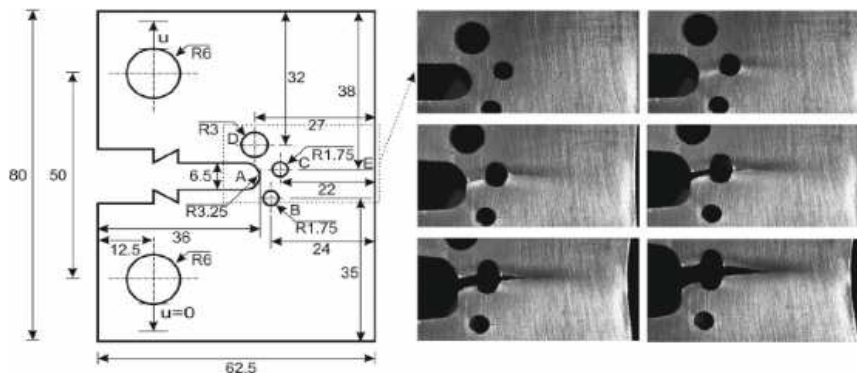


FIGURE 3.25 – Expérience de déchirure ductile d'un alliage d'aluminium de Guo [250]. A gauche : géométrie. A droite : éprouvette à divers stades du chargement (d'après [204]).

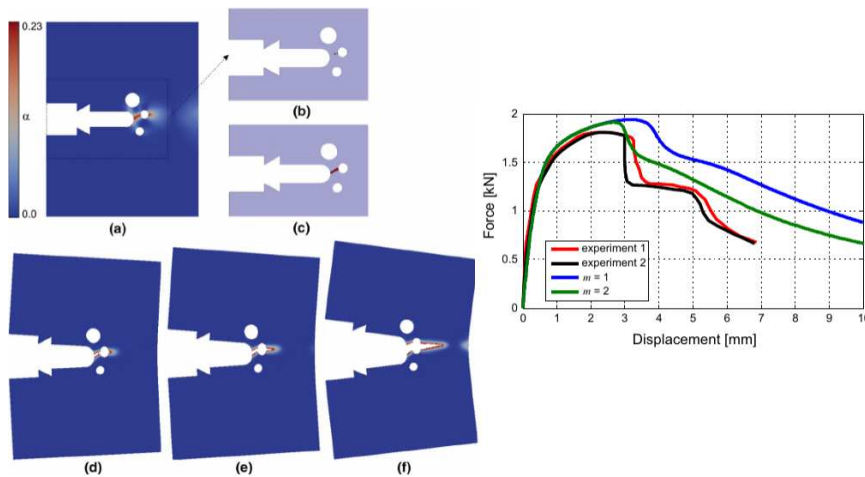


FIGURE 3.26 – Simulation de l'expérience de Guo [250]. (a) : champ de déformation plastique (b)-(f) : champ de phase à divers stades du chargement. A droite : courbe effort-déplacement pour deux valeurs du module d'écouissage de l'alliage d'aluminium (d'après [204]).

Champ de phase et dynamique moléculaire

Patil et al. [251] tentent une comparaison entre la simulation de la rupture en mode I d'une éprouvette doublement entaillée par champ de phase et par dynamique moléculaire. Leur objectif est de tenter d'attribuer une signification physique claire aux paramètres du modèle de champ de phase, et considèrent pour ce faire le cas de l'aragonite, une céramique de carbonate de calcium extrêmement fragile. Les simulations de dynamique moléculaire sont réalisées sur trois éprouvettes monocristallines (voir la figure 3.27) de même orientation cristallographique, à l'aide d'un potentiel interatomique approprié. On note que les fonds d'entailles ne sont pas aigus, du fait de la petite taille des éprouvettes. Enfin, la traction est contrôlée en force. Les simulations en champ de phase utilisent un modèle très proche du modèle standard décrit plus haut, mais utilisent une loi d'évolution visqueuse

du champ de phase (voir plus bas). La figure 3.28 donne un exemple de propagation de fissure dans l'une des éprouvettes simulées par dynamique moléculaire. Les auteurs montrent que le modèle de Griffith [85] est fidèlement reproduit, avec une ténacité très proche de celle indiquée dans la littérature pour l'aragonite, et ce malgré le fait que le modèle de dynamique moléculaire donne une réponse non linéaire de l'élasticité de l'aragonite, contrairement au cas du modèle de champ de phase linéaire. Enfin, les auteurs étudient la zone de transition de fonds d'entaille (figure 3.29). Ils comparent l'évolution de la densité d'atomes (normalisée par rapport à la densité du solide), pour les simulations de dynamique moléculaire, à celle du champ de phase, et montrent une corrélation frappante, qui permet d'estimer le paramètre du modèle de champ de phase.

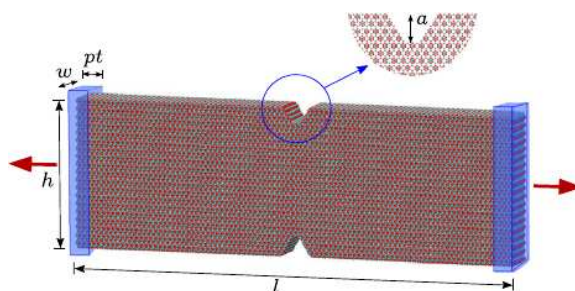


FIGURE 3.27 – Représentation de l'éprouvette utilisée pour les simulations de dynamique moléculaire (d'après [251]).

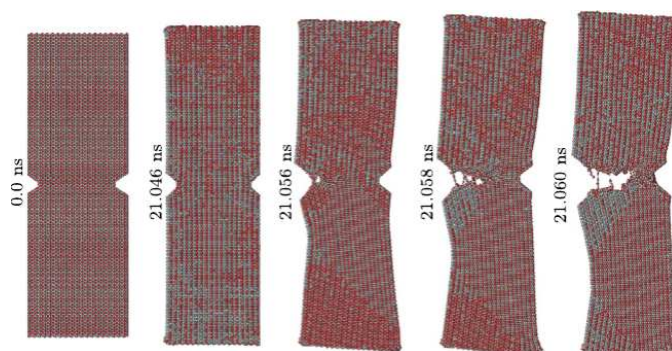


FIGURE 3.28 – Exemple de propagation de fissure dans l'une des éprouvette d'aragonite doublement entaillée (d'après [251]).

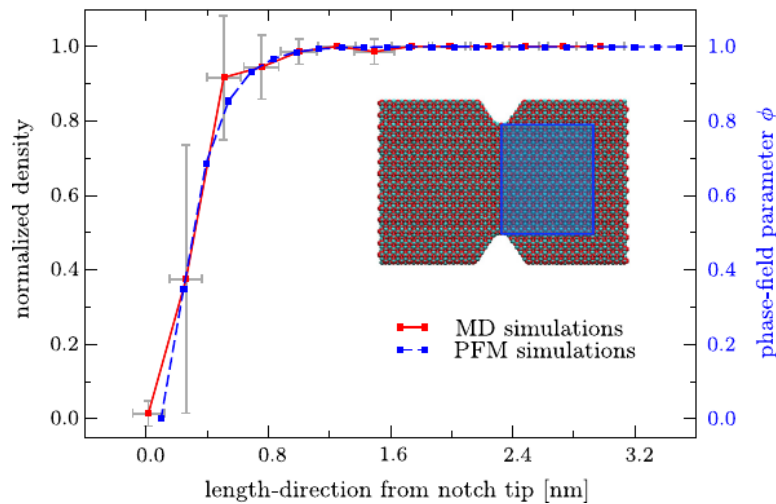


FIGURE 3.29 – Evolution de la densité atomique et du champ de phase le long de la surface joignant les entailles (d'après [251]).

3.4.9 Applications

Application aux structures

Lancioni et Royer-Carfagni [252] utilisent le modèle standard pour étudier la rupture de pierres de maçonnerie du Panthéon de Paris. Mesgarnejad et al. [253] simulent les expériences de Winkler et al. [254] sur éprouvettes de béton en L. La figure 3.30 donne la géométrie de l'expérience, et compare le trajet de fissure qu'il prédit (ligne continue) avec les trajets expérimentaux (zone grise). Les auteurs signalent que la pente de la fissure issue du coin intérieur de l'éprouvette est sensible aux conditions aux limites choisies pour le champ de phase. Gerasimov et de Lorenzis [117, 118] et Wu [133] réalisent les mêmes simulations, avec le même succès. Cette expérience a également été simulée par Nguyen et al. [184], mais en considérant le matériau comme hétérogène (un mortier).

Borden et al. [210] s'intéressent à la déchirure ductile d'une plaque boulonnée soumise à un effet de souffle sous-marin. Ils utilisent le modèle évoqué au paragraphe 3.4.7, et simulent les expériences de Webster [255]. L'expérience et la comparaison des résultats expérimentaux et de simulation font l'objet de la figure 3.31. Ils montrent en particulier que la prise en compte de la triaxialité des contraintes est indispensable pour retrouver les résultats expérimentaux. Tian et al. [256] simulent une expérience de traction sur éprouvette entaillée d'élastomère présentant une interface faible, et reproduisent parfaitement le résultat expérimental de Lee et al. [257], comme le montre la figure 3.32. Nguyen et al. [258] étudient la rupture de structures stratifiées d'alumine, en combinant un modèle de rupture fragile pour représenter la rupture des couches d'alumine, et un modèle cohésif

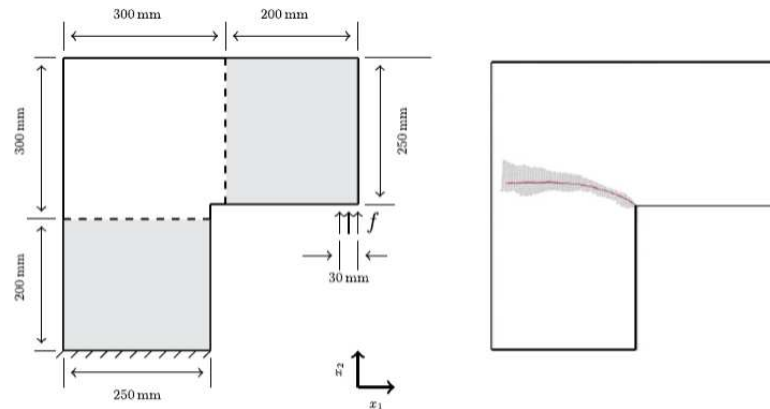


FIGURE 3.30 – Expérience sur éprouvette de béton en L de Winkler et al. [254]. A gauche : géométrie de l'expérience. A droite : comparaison entre le trajet de fissure prédit (ligne continue) et observé expérimentalement (zone grise) (d'après [253]).

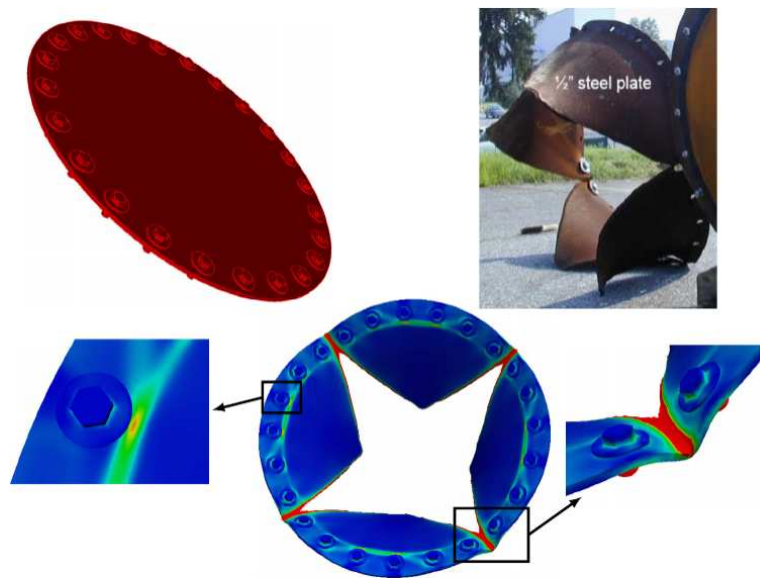


FIGURE 3.31 – Expérience de souffle sous-marin sur plaque d'acier boulonnée de Webster [255]. En haut à gauche : géométrie. En haut à droite : résultat expérimental. En bas : résultat de simulation (d'après [210]).

destiné à représenter la rupture interfaciale. Comme le montre la figure 3.33, les auteurs reproduisent les résultats expérimentaux de Sevecek et al. [259]. Mentionnons également les expériences de choc thermique de Shao et al. [183], très bien reproduites par Bourdin et al. [180], et illustrées par les cartes de champ de phase des figures 3.8 et 3.9. Comme l'illustre la figure 3.34, les auteurs sont également capables de reproduire les distributions de longueur des fissures mesurées expérimentalement.

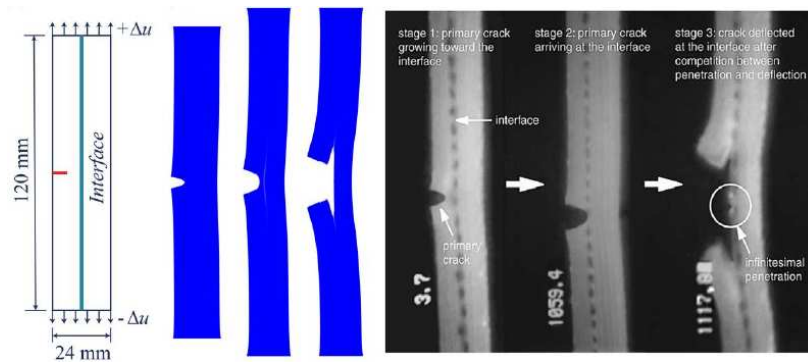


FIGURE 3.32 – Expérience de traction sur éprouvette d'élastomère présentant une interface faible de Lee et al. [257]. A gauche : géométrie. Au centre : résultats de simulation. A droite : résultat expérimental (d'après [256]).

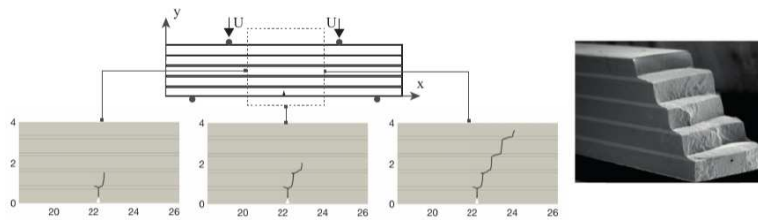


FIGURE 3.33 – Expérience de flexion quatre points sur éprouvette multi-couche d'alumine de Sevecek et al. [259]. A gauche : résultats de simulation. A droite : faciès de rupture (d'après [258]).

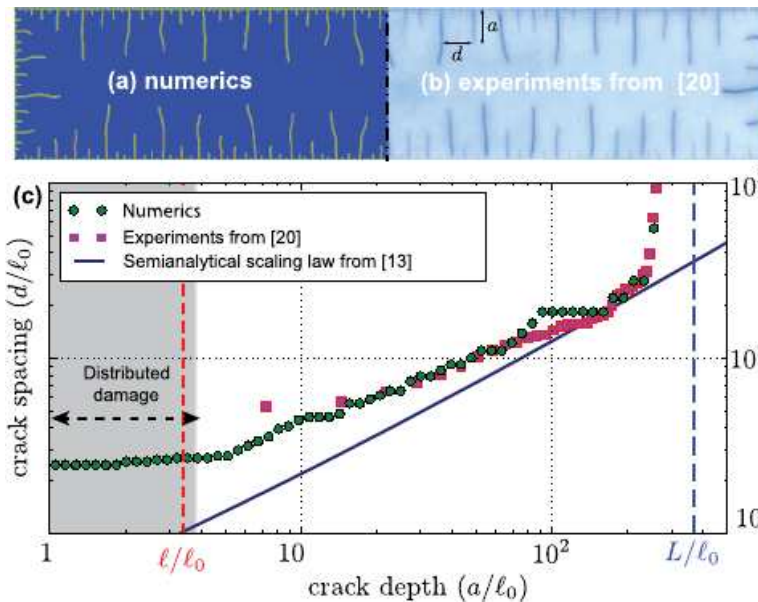


FIGURE 3.34 – Expériences de choc thermique de Shao et al. [183]. En haut : comparaison des champs de fissures simulé (à gauche) et expérimental (à droite). En bas : comparaison entre les distributions d'espacement des fissures en fonction de leur longueur (d'après [180]).

Application aux milieux hétérogènes

Carollo et al. [260] ont récemment proposé une recension partielle des travaux de la communauté internationale dans le domaine des milieux hétérogènes.

Chakraborty et al. [147] s'intéressent au comportement à rupture d'un graphite à usage nucléaire. A cet effet, ils génèrent des volumes élémentaires de graphite, supposé homogène et isotrope, dotés de distributions log-normales de tailles de pores. Ils reproduisent les variations observées expérimentalement de contrainte à rupture en fonction de la taille des pores, ainsi que la surface de rupture dans l'espace des contraintes principales, pour des chargements biaxiaux. Ils procèdent à des travaux similaires [148] sur oxyde d'uranium.

Nguyen et al. [143, 223] s'intéressent à la microfissuration d'un mortier, et réalisent des simulations sur microstructures directement issues de microtomographies. Nguyen et al. [145] réalisent des expériences de compression sous microtomographe sur échantillons de plâtre et de mortier, et les simulations tridimensionnelles correspondantes. La figure 3.35 illustre cette comparaison sur un échantillon de plâtre, dans lequel une hétérogénéité a été introduite sous la forme de billes de polystyrène expansé, représentées comme des pores. Alessi et Freddi [261] réalisent des simulations sur composites stratifiés, et cherchent à suivre plusieurs modes d'endommagement, et leur effet sur le comportement effectif du composite.

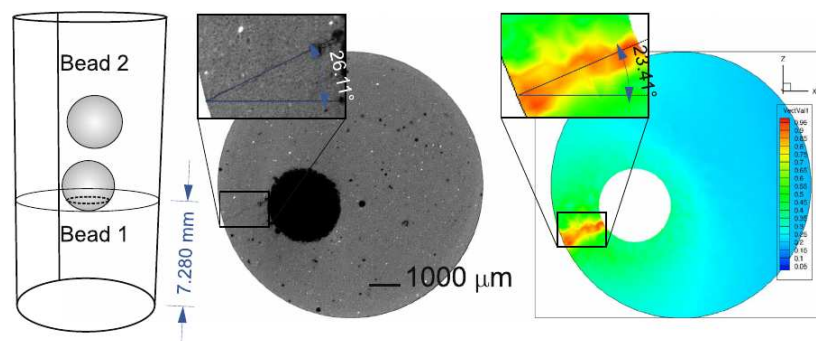


FIGURE 3.35 – Expérience de compression sous micro-tomographe d'une éprouvette de plâtre contenant deux billes (« beads ») de PS expansé (vue de gauche). Vue centrale : exemple de coupe. Vue de droite : résultat de simulation dans la même coupe (d'après [145]).

Ambati et al. [204] réalisent une étude détaillée, en rupture ductile, visant à comparer des résultats expérimentaux aux simulations correspondantes dans le cas d'essais de traction sur éprouvettes homogènes, puis hétérogènes, comportant des entailles et/ou des trous diversement disposés.

Nguyen et al. [170] s'intéressent à la rupture de polycristaux, sous l'angle de la compétition entre rupture inter- et transgranulaire, et emploient simultanément un modèle de champ de phase fragile pour la rupture transgranulaire, et un modèle cohésif pour la rupture intergranulaire. Shanthraj

et al. [119] s'intéressent à la rupture fragile dans les polycristaux (voir le paragraphe 3.4.7), et notamment au couplage entre plasticité et clivage pour des cristaux anisotropes.

Nguyen et al. [171] simulent la propagation « en zig-zag » de fissures dans les nids d'abeille fragiles, fortement anisotropes.

Gultekin et al. [172] simulent le comportement à rupture de parois artérielles, vues comme composites de deux familles de fibres de collagène, l'une isotrope, l'autre anisotrope, toutes deux élastiques non linéaires et fragiles.

Espadas-Escalante et al. [262] réalisent une étude détaillée des modes de rupture fragile de composites unidirectionnels, par simulation sur volumes élémentaires statistiques à l'aide du modèle standard, pour des sollicitations de traction simple. Ils montrent (figure 3.36) d'une part que ce modèle donne des résultats identiques à ceux d'autres méthodes numériques, mais surtout, d'autre part, que les deux modes principaux de décomposition de la déformation destinés à prendre en compte le contact unilatéral, ne donnent pas les mêmes trajets de fissures au sein du composite. La comparaison avec des résultats expérimentaux (Gamsted et Sjogren [263]) montre également que les trajets simulés sont réalistes. Msekh et al. [264] déterminent la

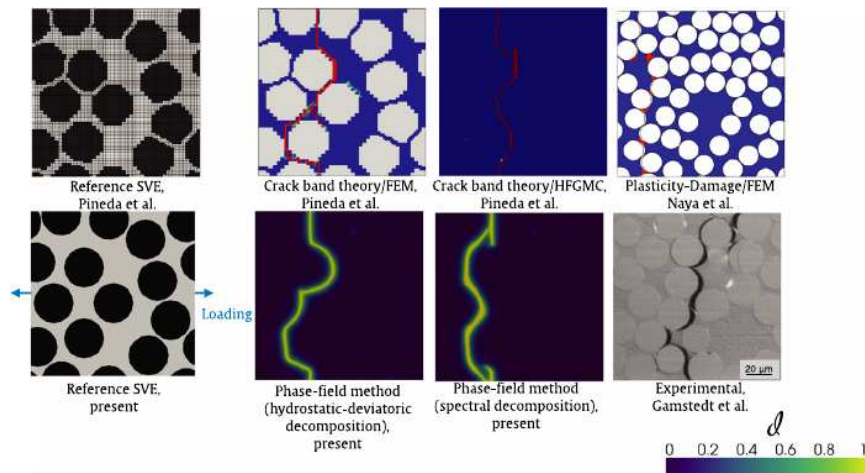


FIGURE 3.36 – Traction sur volumes élémentaires statistiques d'un composite unidirectionnel. En haut : résultats antérieurs, obtenus à l'aide de méthodes alternatives. En bas (sauf vue de droite) : résultats de simulation par champ de phase. En bas à droite : résultat expérimental de Gamsted et Sjogren [263] (d'après [262]).

contrainte à rupture et la ténacité effectives de résines époxy renforcées par des nano-plaquettes d'argile. Ils utilisent à cet effet un modèle de champ de phase fragile appliqué à la matrice époxy et une interphase représentant l'interface diffuse entre matrice et renforts. Ils simulent un essai de traction sur éprouvette doublement entaillée (symétrique), et déterminent le taux de restitution critique à l'initiation des fissures.

3.5 Le modèle retenu

3.5.1 Choix du modèle

Comme on le voit, la modélisation de la rupture par champ de phase s'est considérablement développée depuis son apparition dans les années 2000, et de nombreuses variantes du modèle « standard » sont disponibles. Dans le cadre exploratoire de la présente thèse, il ne s'agit pas de développer une nouvelle variante, mais de choisir le modèle le plus approprié à la description de la microfissuration du composite étudié ici.

On rappelle que l'on cherche un modèle permettant de décrire les mécanismes de microfissuration trans- et intergranulaire, pour des sollicitations quasi-statiques, cycliques, faiblement triaxiales, ne faisant pas intervenir de déformations irréversibles de la phase cristalline, et dans une gamme de température située nettement au-dessous de la transition vitreuse du liant. Dans ce qui suit, on conserve l'hypothèse de rupture fragile, quitte à y revenir ultérieurement, et on se limite au cadre cinématique des petites transformations. Dans ce cadre restreint, les points les plus cruciaux sont la prise en compte de l'anisotropie et du contact unilatéral.

En ce qui concerne le premier point, les travaux passés en revue au paragraphe 3.4.5 montrent clairement que la prise en compte d'une anisotropie générale de ténacité nécessite un modèle de champ de phase du second ordre, qui présente un risque d'instabilité numérique. Cette voie de modélisation ne sera donc pas retenue ici, et on se limitera aux modèles de champ de phase du premier ordre. On a cependant vu au paragraphe 3.4.7 qu'il est possible, si besoin est, de construire des modèles permettant de prendre en compte plusieurs directions de clivage à l'aide de plusieurs champs de phase. C'est cette voie qui sera donc privilégiée ici.

En ce qui concerne le contact unilatéral, on a vu au paragraphe 3.4.4 que plusieurs formulations sont possibles. Les formulations d'Amor et al. [139] et de Miehe et al. [114] ne satisfont pas les conditions de contact unilatéral sur les fissures, et ne permettent pas de décrire la microfissuration pour des sollicitations de compression simple. Cependant, les formulations plus avancées de Strobl et Seelig [155] et surtout de Steinke et Kaliske [157] ne sont pas encore arrivées à maturité, et ne seront donc pas retenues ici.

C'est pourquoi on choisit dans ce qui suit le modèle de Nguyen et al. [171], dans une version restreinte développée au paragraphe suivant.

3.5.2 Le modèle de Nguyen et al.

Le modèle de Nguyen et al. [171] a été conçu pour décrire la microfissuration, supposée non visqueuse, de polycristaux, à la fois dans les grains et entre les grains, en prenant en compte l'anisotropie cristalline et le contact unilatéral. Il comprend un modèle de champ de phase pour décrire la rupture

fragile des grains, et un modèle de champ de phase cohésif pour décrire la rupture intergranulaire.

Le composite étudié ici est un polycristal jointoyé par une interphase de liant d'épaisseur non nulle. La partie cohésive du modèle de Nguyen et al. [171] n'est donc pas appropriée. On fait ici le choix de représenter le liant par une interphase décrite au chapitre suivant, et de représenter la rupture intergranulaire par le même modèle de champ de phase que dans les grains, mais avec des propriétés différentes. De ce fait, on ne retient du modèle de Nguyen et al. [171] que sa partie relative à la rupture transgranulaire, que l'on développe ci-dessous.

La rupture est décrite par n champs de phase ϕ_i , tels que $0 \leq \phi_i \leq 1$, notés collectivement ϕ . Les densités d'énergie élastique et de surface sont postulées sous la forme :

$$\begin{cases} w^e(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C}(\phi) : \boldsymbol{\varepsilon} \\ w^s(\phi, \nabla \phi) = g_c \sum_i \gamma_i(\phi_i, \nabla \phi_i) \end{cases} \quad (3.159)$$

Dans l'expression de l'énergie élastique, le tenseur d'élasticité dégradé par les champs de phase s'écrit :

$$\mathbf{C}(\phi) = g(\phi) \mathbf{C}^0 + K_0 \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} [1 - g(\phi)] \operatorname{sgn}_-(\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.160)$$

où \mathbf{C}^0 et K_0 sont respectivement le tenseur élastique et le module de compressibilité du milieu sain, et où :

$$\begin{cases} \operatorname{sgn}_-(x) = 1 & \text{si } x < 0 \\ \operatorname{sgn}_-(x) = 0 & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad (3.161)$$

L'expression (3.160) est une adaptation du modèle unilatéral d'Amor et al. [139] au cas anisotrope. La fonction $g(\phi)$ est donnée par :

$$g(\phi) = \prod_i (1 - \phi_i)^2 + k \quad (3.162)$$

où $0 \leq k \ll 1$ est une petite constante permettant d'éviter la singularité du tenseur élastique. Le tenseur des contraintes est donné par :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}(\phi) : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.163)$$

Dans la densité d'énergie de surface, la fonction $\gamma(\phi_i, \nabla \phi_i)$ est donnée par :

$$\gamma(\phi_i, \nabla \phi_i) = \frac{1}{2\ell} \phi_i^2 + \frac{\ell}{2} \boldsymbol{\omega} : (\nabla \phi_i \otimes \nabla \phi_i) \quad (3.164)$$

avec :

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{1} + \alpha(\mathbf{1} - \mathbf{m} \otimes \mathbf{m}) \quad (3.165)$$

où \mathbf{m} est la normale au plan de clivage préférentiel, assimilé ici au plan graphitique du cristal de TATB, et où α est le facteur d'anisotropie de ténacité.

Le calcul de variation de l'énergie totale permet d'obtenir une loi d'évolution pour chaque champ de phase ϕ_i , sous la forme :

$$\frac{g_c}{\ell} (\phi_i - \nabla \cdot (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \phi_i)) = (1 - \phi_i) \mathcal{H}_i \quad (3.166)$$

où $\nabla \cdot$ désigne l'opérateur divergence, et où la fonction \mathcal{H}_i , qui assure l'irréversibilité du processus de fissuration, est définie par :

$$\mathcal{H}_i(\mathbf{x}, t) = \max_{0 \leq s \leq t} \left[\prod_{j \neq i} (1 - \phi_j)^2 \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C}^h : \boldsymbol{\varepsilon} \right] \quad (3.167)$$

avec :

$$\mathbf{C}^h = \mathbf{C}^0 - K_0 \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \operatorname{sgn}_-(\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.168)$$

Chapitre 4

Modélisation de la rupture fragile par champ de phase et méthode “FFT”

On présente dans ce chapitre une méthode numérique de simulation de la fissuration de milieux hétérogènes anisotropes par un modèle de champ de phase prenant en compte l’effet unilatéral, associé à une méthode numérique de Fourier. On propose deux algorithmes, séquentiel et implicite, dont on compare les prédictions avec des simulations de sollicitations en mode I sur éprouvette homogène entaillée, issues de la littérature. Après avoir vérifié le bon fonctionnement du modèle unilatéral, on réalise des simulations préliminaires sur des milieux hétérogènes, en ne prenant en compte dans un premier temps que l’anisotropie élastique locale.

4.1 Problème à résoudre

On souhaite résoudre par une méthode de type “FFT” le problème issu du modèle champ de phase (3.25). On choisit une fonction d’adoucissement quadratique (3.29) et une densité de surface de fissure γ donnée par (3.19) ou plus généralement par (3.95) dans le cas anisotrope. Le problème s’écrit à un instant t du chargement :

$$\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 0 \quad (4.1a)$$

$$g_c\phi(\mathbf{x};t) = \ell^2 g_c \operatorname{div} (\boldsymbol{\omega} \cdot \operatorname{grad} \phi(\mathbf{x};t)) + 2\ell [1 - \phi(\mathbf{x};t)] \mathcal{H}(\mathbf{x};t) \quad (4.1b)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{x};t) = \max_{0 \leq s < t} w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x};s)),$$

l’irréversibilité du processus de fissuration résultant de la forme du terme de source \mathcal{H} telle que proposée par Miehe (voir 3.35). On se place dans le cadre

des petites déformations :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right]_{\text{sym}}, \quad (4.2)$$

et, dans le cas d'un comportement linéaire thermoélastique (voir 3.103) :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = [1 - \phi(\mathbf{x})]^2 \frac{\partial w(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}); \mathbf{x})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{C} : [\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x})\Delta T]. \quad (4.3)$$

Dans le cas d'une loi de comportement unilatérale, on utilisera soit la décomposition en parties positives et négatives de Miehe et al. donnée par (3.77) pour les milieux isotropes, soit encore le tenseur d'élasticité dégradé de Nguyen et al. (3.160). Ce modèle reste valable dans le cas de milieux isotropes transverses, avec pour module de compressibilité $K_0 = (1/9)\mathbf{I} : \mathbf{C}^{TI} : \mathbf{I}$ (voir 2.1). En thermoélasticité, les lois de comportement unilatérales sont appliquées à la déformation $\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}^{Sun, TI} \Delta T$ (voir 2.3). L'inconvénient de ces lois de comportement est leur forte non-linéarité. Pour pallier ce problème, on utilisera également la méthode proposée par Ambati et al. [138] (voir Sec. 3.4.4) qui consiste à remplacer la loi unilatérale par une loi de comportement linéaire (3.69) tout en conservant le terme source \mathcal{H} , mais en imposant un champ de phase nul ($\phi := 0$) dans certaines zones du matériau, selon la règle (3.94).

On considère de plus des conditions aux bords périodiques [265] :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} - \#, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \rangle \cdot \mathbf{x} \#, \quad \phi(\mathbf{x}) \#, \quad (4.4)$$

où $\langle \cdot \rangle$ désigne la moyenne spatiale sur la cellule élémentaire Ω et $\#$ et $-\#$ respectivement des conditions de périodicité et d'anti-périodicité sur les bords $\partial\Omega$ de la même cellule, \mathbf{n} étant la normale le long de $\partial\Omega$ pointant vers l'extérieur. Les conditions (4.4) correspondent à un chargement macroscopique imposée en déformation $\langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Dans le cas d'un chargement mixte, on impose un chargement moyen en déformation $\langle \varepsilon_{kl} \rangle = \bar{\varepsilon}_{kl}$ sur certaines composantes $(k; l)$ et en contrainte $\langle \sigma_{ij} \rangle = \bar{\sigma}_{ij}$ sur les autres composantes $(i; j) \neq (k; l)$. Le plus souvent, on imposera $\bar{\sigma}_{ij} \equiv 0$ pour se rapprocher de conditions expérimentales de bords libres. Enfin, pour simuler des conditions de bord libre, on peut imposer une déformation macroscopique tout en ajoutant sur le bord du domaine une couche de phase poreuse, ici d'épaisseur de 2 pixels (voir Fig. 4.1). La cellule élémentaire Ω du milieu périodique est alors formée d'un domaine d'intérêt Ω' et d'une couche de porosité. La contrainte est alors nulle dans le milieu poreux et la condition de bord libre $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$ vérifiée le long des bords du pore, et ainsi par périodicité sur deux faces opposées au domaine Ω' . Du fait de l'équilibre des contraintes, on a également $\langle \sigma_{yy} \rangle = 0$, où y est normal à la couche poreuse (Fig. 4.1). Par ailleurs, on impose bien une déformation moyenne $\langle \varepsilon_{xx} \rangle_{\Omega'}$ sur Ω' égale à la déformation moyenne $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ imposée sur Ω , l'axe x étant parallèle à la couche de pores. Cette propriété résulte de l'admissibilité du champ de déformation

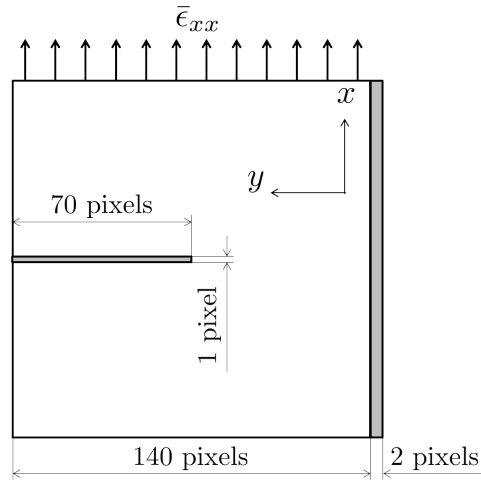


FIGURE 4.1 – Massif entaillé sollicité en mode I.

$\varepsilon_{xx} = \partial_x u_x$ et de la condition aux bords (4.4b). En revanche, la déformation moyenne $\langle \varepsilon_{yy} \rangle_{\Omega'}$ est libre, car celle-ci dépend de la déformation ε_{yy} dans la couche de vide qui est arbitraire.

Nous obtenons finalement, pour chaque chargement macroscopique appliqué, un système d'équations couplées portant sur le champ de déformation ε et le champ de phase. On peut soit s'appliquer à le résoudre complètement, en prenant en compte le couplage entre déformation et champ de phase, par une méthode dite implicite, soit résoudre séparément le problème mécanique (à champ de phase fixé) et le problème en ϕ (à déformation fixée), par une méthode dite séquentielle. Ces méthodes ne coïncident que dans le cas où le pas de chargement est infinitésimal. Bien qu'un schéma de résolution implicite soit plus précis, le schéma de type séquentiel offre plusieurs avantages, en particulier les deux problèmes sont elliptiques dans le cas linéaire.

4.2 Schéma numérique

4.2.1 Principe de la méthode FFT

Nous précisons dans cette section la méthode FFT employée dans le cas des schémas séquentiel et implicite. Pour les chargements en déformation que nous considérerons dans un premier temps, le trajet de déformation est monotone croissant ou décroissant et s'écrit $\bar{\varepsilon}(t) = t_i \bar{\varepsilon}_0$, $\bar{\varepsilon}_0$ étant la direction de chargement, avec $t_0 = 0$, $t_{i+1} - t_i = \pm \Delta t$, le signe de $t_{i+1} - t_i$ pouvant varier. On définit également par commodité $\Delta \varepsilon = \Delta t \bar{\varepsilon}^0 = t \Delta \bar{\varepsilon}^0$.

Par principe, les méthodes "FFT" utilisent l'opérateur de Green associé à un problème d'élasticité linéaire sur un milieu *homogène* avec précontrainte [266]. On définit un champ de polarisation associé à un tenseur de

rigidité homogène \mathbf{C}^0 par $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}$, et on cherche le champ de déformation compatible qui réalise l'équilibre des contraintes ($\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$). Celui-ci est donné explicitement par la convolution de l'opérateur de Green \mathbf{G}^0 associé à \mathbf{C}^0 avec le tenseur de polarisation :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \int d\mathbf{x}' \mathbf{G}^0(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) : \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}'), \quad (4.5)$$

l'opérateur de Green étant ici supposé de moyenne nulle. Une transformée de Fourier des deux membres permet de transformer l'équation de type Lippmann-Schwinger ci-dessus en une contraction entre tenseurs, locale dans le domaine de Fourier. On connaît par ailleurs des expressions simples de \mathbf{G}^0 dans le domaine de Fourier dans le cas d'un tenseur \mathbf{C}^0 isotrope. Cependant, du fait de la loi de comportement qui est locale dans le domaine réel, cette équation intégrale implicite en $\boldsymbol{\varepsilon}$ est aussi difficile à résoudre que l'équation aux dérivées partielles (forme forte) d'origine. Néanmoins on peut déduire de la relation (4.5) un schéma numérique de résolution par méthode itérative :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})^{k+1} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \int d\mathbf{x}' \mathbf{G}^0(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) : \left[\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}^k(\mathbf{x}')) - \mathbf{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}^k(\mathbf{x}') \right], \quad (4.6)$$

la convolution étant calculée dans le domaine de Fourier, à l'aide des transformées directe et inverse, et la contrainte étant obtenue à partir de la loi de comportement. On peut initialiser les champs par $\boldsymbol{\varepsilon}^{k=0} \equiv 0$. C'est le schéma direct [266], qui est robuste du fait des bonnes propriétés de l'opérateur de Green, le tenseur $\mathbf{G}^0 : \mathbf{C}^0$ est en effet le projecteur sur l'espace des champs de rotationnel nul, parallèlement à l'espace des champs de divergence nulle. De nombreux autres schémas numériques ont par la suite été développés. L'un des plus rapides consiste, dans le cas d'un comportement linéaire, à utiliser des méthodes de gradient conjugué [267, 268]. Dans le cas non-linéaire, la méthode ne s'applique pas directement et des schémas spécifiques doivent être utilisés [190, 269]. Dans le cas non-linéaire cependant, les performances des schémas dépendent fortement de la loi de comportement. Dans la suite de ce travail, on utilisera le schéma direct (4.6), ainsi qu'une variante utilisant la méthode de de Barzilai-Borwein [270]. Il est bien connu que la convergence du schéma direct dépend du choix des modules de référence du tenseur \mathbf{C}^0 . Dans le cas d'un milieu à deux phases linéaires isotropes, ces performances sont en générale optimales lorsque les modules sont un peu plus grands que la moyenne arithmétique des modules des deux phases, le schéma étant divergent en deçà, et convergent au-delà, mais de moins en moins rapidement au fur et à mesure que les modules augmentent. Dans le cas qui nous intéresse, nous choisissons pour \mathbf{C}^0 un module de compressibilité égal à $0.51K_0$ et un coefficient de Poisson de 0.2. L'endommagement créant des fissures, ces valeurs n'ont pas besoin d'être modifiées, nous restons dans le domaine de convergence du schéma direct. Il s'agit là de résultats empiriques. En effet, aucune règle générale n'est connue pour le choix des modules de référence s'agissant de comportements non-linéaires.

Afin d'appliquer un chargement mixte, on impose à l'itération k :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^k \rangle = \begin{cases} \bar{\varepsilon}_{ij} & \text{si } m_{ij} = 0, \\ (\mathbb{C}^0)_{ijkl}^{-1} : (S_{kl} - \langle \boldsymbol{\tau}_{kl}^k \rangle) & \text{si } m_{ij} = 1, \end{cases} \quad (4.7)$$

avec :

$$S_{ij} = \begin{cases} \bar{\sigma}_{ij} & \text{si } m_{ij} = 0, \\ \langle \sigma_{ij} \rangle & \text{si } m_{ij} = 1, \end{cases} \quad (4.8)$$

le tenseur \mathbf{m} indiquant les composantes qui sont imposées en contrainte ou en déformation. Dans ce cas, on introduit un critère de convergence supplémentaire :

$$\sum_{ij} |\langle \sigma_{ij} \rangle - \bar{\sigma}_{ij}| < \eta_s, \quad (4.9)$$

où la somme n'est effectuée que sur les composantes du chargement en contrainte, et où η_s est choisi.

À ces schémas numériques s'ajoute par ailleurs le choix de la méthode de discrétisation. En effet, des transformées de Fourier discrètes étant employées, les champs solutions sont par nature approximés par des polynômes trigonométriques. Pour éviter les phénomènes d'oscillations que ces méthodes produisent dans le cas de forts contrastes, on utilise un schéma aux différences finies qui équivaut à remplacer le vecteur d'onde de la transformée de Fourier continue (permettant de calculer les opérateurs différentiels) par une version "discrète" compatible avec le schéma aux différences finies [271]. On utilise plus précisément l'opérateur de Green "tourné" (voir par exemple [265]). On considère de plus comme critère de convergence :

$$\int_{\Omega} d\mathbf{x} |\boldsymbol{\varepsilon}^{k+1}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^k(\mathbf{x})| \leq \eta_\varepsilon, \quad (4.10)$$

$\boldsymbol{\varepsilon}^k$ étant le champ de déformation à l'itération k , avec η_ε petit.

4.2.2 Résolution du problème en champ de phase

Plusieurs schémas numériques ont été proposés pour résoudre le problème en champ de phase par méthode FFT [190, 265, 272]. Il est notamment possible d'utiliser un schéma numérique avec opérateur de Green pour résoudre l'équation aux dérivées partielles en champ de phase de type Helmholtz. Notons néanmoins que pour un champ de déformation fixé $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ (ou terme source $\mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon})$), l'équation aux dérivées partielles (4.1b) est linéaire en ϕ du fait de la forme quadratique de la fonction de dégradation. De ce fait, on peut appliquer un algorithme de type gradient conjugué, après avoir discrétisé l'opérateur laplacien par :

$$\operatorname{div}(g_c \operatorname{grad} \phi(\mathbf{x})) = g_c \Delta \phi(\mathbf{x}) \approx \frac{g_c}{h^2} \sum_i [\phi(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) + \phi(\mathbf{x} - h\mathbf{e}_i) - 2\phi(\mathbf{x})], \quad (4.11)$$

h étant la taille d'un voxel, $(e_i)_{i=1,\dots,d}$ étant un repère Cartésien aligné avec les directions de la grille de voxels et $d = 2$ ou 3 étant la dimension. Cette discrétisation rejoint la méthode employée en conductivité thermique dans [273]. Dans le cas d'une ténacité anisotrope, on calcule les opérateurs différentiels de la manière suivante :

$$\text{grad}\phi(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_i = \phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) - \phi(\mathbf{x}), \quad \text{div}\mathbf{V}(\mathbf{x}) = \sum_i V_i(\mathbf{x}) - V_i(\mathbf{x} - \mathbf{e}_i). \quad (4.12)$$

Le problème est alors mis sous la forme $\mathbf{A} \cdot \phi = \mathbf{b}$ (ϕ et \mathbf{b} étant vus comme des vecteurs et \mathbf{A} une matrice), la méthode nécessitant seulement de pouvoir calculer $\mathbf{A} \cdot \phi$ pour tout champ ϕ . Le critère d'erreur est calculé à partir du résidu $\|\mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \phi\| \leq \eta_\phi$, $\|\cdot\|$ étant la norme 2 et η_ϕ 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 4.2. Dans le premier, on résout de manière itérative les problèmes en déformation et en champ de phase jusqu'à obtenir la convergence simultanée des deux champs. On utilise comme critère de convergence la norme L_1 :

$$\int_{\Omega} d\mathbf{x} |\phi^{k+1}(\mathbf{x}) - \phi^k(\mathbf{x})| \leq \eta_I, \quad (4.13)$$

où ϕ^k est le champ de phase solution de l'algorithme par gradient conjugué à l'itération k , et η_I est un petit paramètre. Dans le schéma "séquentiel", on se contente de résoudre à chaque pas de chargement le champ de déformation ε puis le champ de phase ϕ et on utilise un pas de chargement Δt faible.

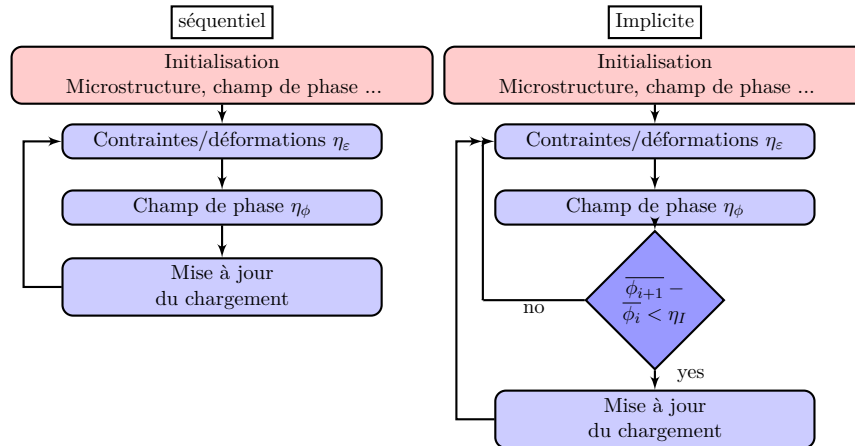


FIGURE 4.2 – Schémas séquentiel et implicite.

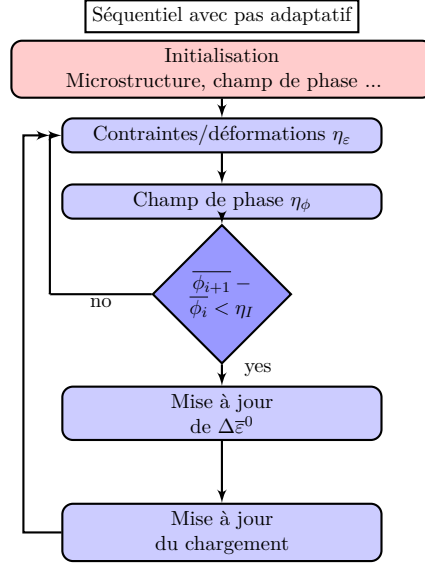


FIGURE 4.3 – Schéma séquentiel avec pas adaptatif.

Enfin, on met en place une méthode séquentielle à pas adaptatif, dans lequel le pas de chargement $\Delta\bar{\varepsilon}^0$ est modulé selon la règle :

$$\Delta\bar{\varepsilon}^{i+1} = \begin{cases} \min(\Delta\bar{\varepsilon}^0; \Delta\bar{\varepsilon}^i p^r / p^i) & \text{si } p^i > p^r, \\ \sqrt{\Delta\bar{\varepsilon}^i \times \min(\Delta\bar{\varepsilon}^0; \Delta\bar{\varepsilon}^i p^r / p^i)} & \text{si } p^i < p^r. \end{cases} \quad (4.14)$$

avec $p^i = (\int_{\Omega} \phi dV) - p^{i-1}$, $p^{i=0} = 0$, $\Delta\bar{\varepsilon}_{i=0}^0 = \Delta\bar{\varepsilon}^0$ et p^r est une valeur homogène à un nombre de voxels, correspondant aux variations maximales que l'on tolère pour le champ de phase. Au-delà, le pas de chargement diminue, en deçà il peut augmenter. Dans le cas d'une augmentation, la modification de la valeur du pas de chargement est « amortie » à l'aide d'une moyenne géométrique d'où la présence de la racine carré. Un schéma de l'algorithme est représenté en figure 4.3.

Au final, pour chaque simulation, on doit donc choisir, en plus de la microstructure, des propriétés matériaux, et de la sollicitation appliquée, les critères d'erreur $\eta_{\varepsilon, \phi, I}$ pour le schéma implicite et $\eta_{\varepsilon, \phi}$ pour le schéma séquentiel, le pas de chargement Δt , la longueur ℓ et enfin la taille du voxel h ou de manière équivalente le nombre de voxels L dans chaque direction. On doit également choisir une valeur de p^r dans le cas du schéma avec pas adaptatif et η_s dans le cas d'un chargement mixte.

4.3 Validation

4.3.1 Effet unilatéral

On teste tout d'abord l'effet de la loi de comportement unilatérale de Miehe et al. (3.77) en élasticité non-linéaire, sans champ de phase. Une illustration de l'effet unilatéral est proposée en figure 4.4 pour un milieu isotrope de modules élastiques $\lambda = 121,15$ GPa et $\mu = 80,77$ GPa, de taille 50×50 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, voir Fig. 4.1. L'effet Poisson induit un mode d'ouverture en compression (Fig. 4.4a). 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).

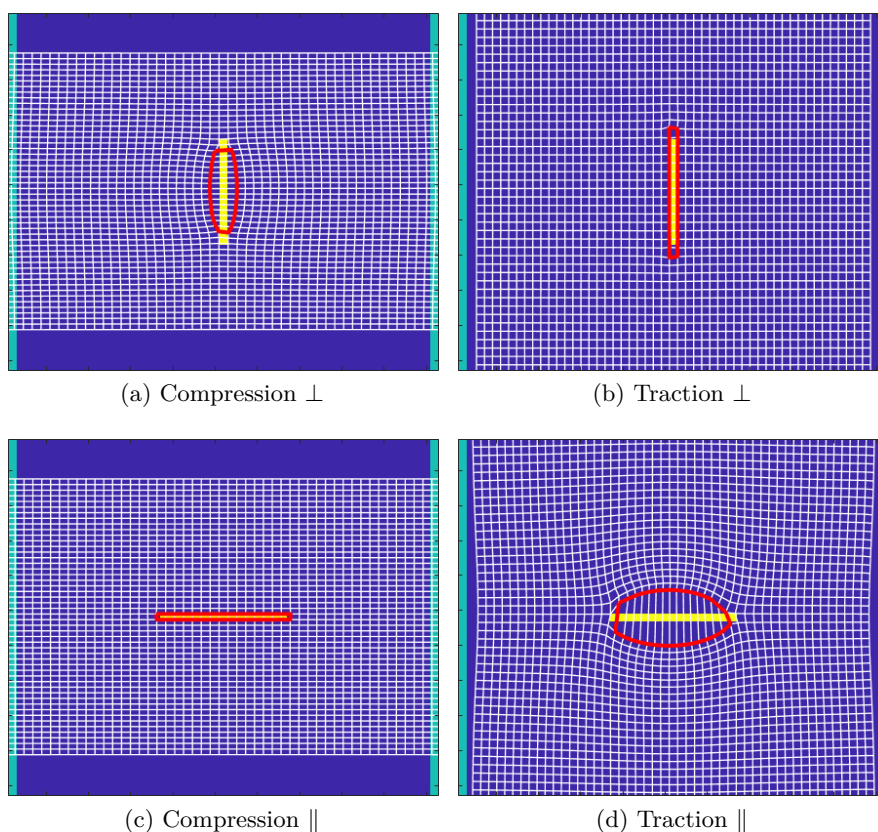


FIGURE 4.4 – Mode d'ouverture d'une fissure sollicitée en traction ($\bar{\sigma}_{xx} > 0$, b, d) et en compression ($\bar{\sigma}_{xx} < 0$, a, c) dans la direction e_x , verticale sur l'image. En blanc : déformation de la grille de voxels; en rouge : déformation des lèvres de la fissure. Les conditions de bord libre sont simulées à l'aide de pixels de vide (zones en bleu ciel à droite et à gauche).

4.3.2 Milieu homogène entaillé

Ces vérifications faites, on souhaite maintenant effectuer une comparaison avec les résultats éléments finis issus de [113] pour un milieu homogène isotrope. On considère un milieu périodique entaillé en déformation plane avec bord libre, dans un repère Cartésien $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$, 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 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur les faces de la cellule parallèle à \mathbf{e}_x et de normale $\mathbf{n} = \pm \mathbf{e}_y$. Pour appliquer ces conditions de bord libre, on insère dans la cellule élémentaire une phase poreuse d'épaisseur 2 voxels parallèle à \mathbf{e}_x . L'entaille, de longueur 0,5 mm et orientée parallèlement à l'axe \mathbf{e}_y , est modélisée par une rangée de $L/2 = 70$ pixels vides, dans lesquels $\mathbf{C}(\mathbf{x}) = 0$. L'entaille touche à l'une de ses extrémités le bord de la cellule périodique.

On applique la méthode FFT explicitée ci-dessus avec \mathbf{C} dans le reste du domaine isotrope. Les données matériaux sont $\lambda = 121,15$ GPa et $\mu = 80,77$ GPa pour les paramètres de Lamé et le module de cisaillement et $g_c = 2,7 \times 10^3$ J.m⁻² pour la ténacité du milieu sain. Ce problème est utilisé comme cas test par Miehe et al. [113] 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 $\ell = h$, $\eta_\varepsilon = 10^{-7}$, $\eta_\phi = 10^{-8}$, $\eta_I = 5 \cdot 10^{-7}$ et $\Delta \bar{\varepsilon}_{11}^0 = 10^{-6}$ ($\Delta \bar{\varepsilon}_{11}^0 = 2 \cdot 10^{-7}$ pour le second calcul séquentiel). À l'inverse des méthodes éléments finis, nous utilisons un maillage régulier défini par une grille de $L^2 = 1,96 \times 10^5$ pixels.

Le comportement macroscopique jusqu'à rupture est donné en figure 4.5. 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 $5,5 \times 10^{-3}$, tandis que le schéma séquentiel prédit une rupture moins brutale à partir de ce même seuil (Fig. 4.5). Dans le cas du schéma implicite, aucun calcul FFT ne prédit de point "intermédiaire" lors de la rupture (ligne en pointillé rouge, Fig. 4.5a). Les prédictions du schéma séquentiel se rapprochent de celles du schéma implicite lorsque le pas de chargement décroît. Par ailleurs le schéma séquentiel avec pas adaptatif permet de s'approcher des prédictions du schéma implicite en gardant un temps de calcul raisonnable. La figure 4.5 montre le comportement macroscopique prédit par le schéma implicite pour différentes valeurs de $\ell > 1$. Le seuil à rupture, de l'ordre de $5,75 \times 10^{-3}$ varie peu lorsque ℓ est choisi entre 2 et 5 et est légèrement supérieur au résultat éléments finis, environ $5,6 \times 10^{-3}$. Dans le cas des éléments finis, un maillage fin en pointe de fissure est utilisé et l'entaille n'a pas d'épaisseur, ce qui peut expliquer cette différence. Par ailleurs, les temps de calcul sont de 400 secondes pour le schéma FFT séquentiel et de 600 pour le schéma implicite.

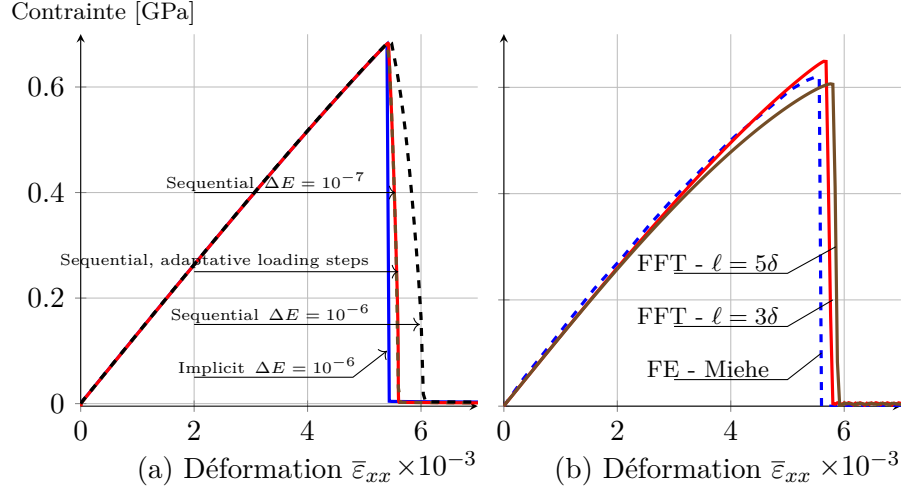


FIGURE 4.5 – (a) Milieu entaillé en traction : comparaison entre calculs FFT (schéma séquentiels et implicite) et résultats éléments finis. (b) Milieu entaillé en traction : comparaison entre calculs FFT sur une grille contenant $1,96 \times 10^4$ voxels, pour différentes valeurs de ℓ et résultats éléments finis [113].

On applique maintenant la méthode FFT avec schéma séquentiel à une éprouvette entaillée et sollicitée en mode I en déformation plane. La surface de l'éprouvette est de 1 mm^2 , discrétisée sur une grille de 200^2 pixels et entaillée sur une rangée de 100 pixels. On garde les mêmes modules élastiques et ténacité qu'au § (4.3) et on choisit $\eta_\varepsilon = \eta_\phi = \eta_I = 10^{-7}$, $\ell/h = 2$. 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. 4.6).

Les courbes contrainte-déformation obtenues dans le cas d'un chargement mixte et de conditions aux bords libres sont calculées sur le même milieu entaillé et comparés en figure 4.7. Le matériau sain est élastique avec pour modules de compressibilité et de cisaillement $K = 121 \text{ GPa}$, $G = 80 \text{ GPa}$ et ténacité $g_c = 2,7 \times 10^3 \text{ J.m}^{-2}$. La figure de droite montre par ailleurs l'évolution de la contrainte transverse.

Le cas d'un chargement en cisaillement $\langle \varepsilon_{xy} \rangle = t\bar{\varepsilon}_0$ pour les lois unilatérales de Miehe et al. et Nguyen et al est donné en figure 4.8.

Le problème d'un matériau possédant une double entaille décalée (Fig. 4.9) permet d'effectuer une validation supplémentaire de l'algorithme FFT. Celle-ci est calculée dans le cas d'un chargement en traction (Fig. 4.10a-c). Les résultats reproduisent de manière fidèle les calculs éléments finis (Fig. 4.10a-c).

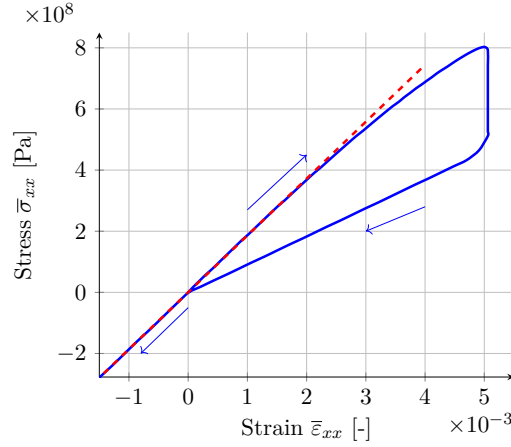


FIGURE 4.6 – Contrainte de traction $\bar{\sigma}_{xx}$ (GPa) vs. déformation uniaxiale imposée $\bar{\epsilon}_{xx}$: cycle de traction-compression dans un milieu isotrope entaillé. Ligne pointillée : tangente à l'origine.

4.4 Prise en compte de l'anisotropie élastique

4.4.1 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 \mathbf{C}^{TI} . On choisit une ténacité isotrope $g_c = 0,2 \text{ J.m}^{-2}$. 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 140×140 pixels et sa discrétisation est identique à celle utilisée en au paragraphe (4.3). En revanche, contrairement au cas étudié précédemment, on applique au matériau une déformation uniaxiale $\bar{\epsilon}_{xx} > 0$ et on impose $\bar{\epsilon}_{yy} = \bar{\epsilon}_{xy} = 0$. 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 $(\mathbf{e}_x; \mathbf{e}_y)$, (ii) le plan basal est orienté dans le plan $(\mathbf{e}_y; \mathbf{e}_z)$, et (iii) le plan basal est orienté dans le plan $(\mathbf{e}_x; \mathbf{e}_z)$. Ces trois cas sont schématisés dans les encarts de la Fig. (4.11).

On choisit un schéma séquentiel avec $\Delta \bar{\epsilon}_{11}^0 = 5 \cdot 10^{-5}$, $\eta_\varepsilon = 10^{-7}$, $\eta_\phi = 10^{-9}$. Les résultats sont indiqués en figure 4.11. 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 $\bar{\epsilon}_{22}^0$, 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 [130].

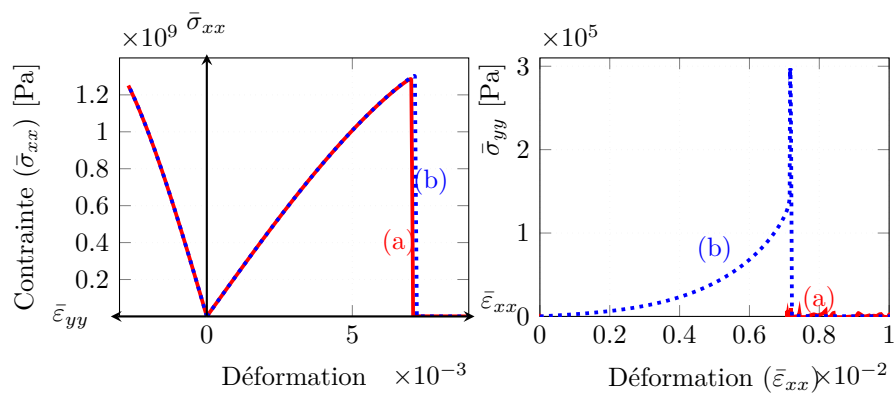


FIGURE 4.7 – Matériau entaillé soumis à un chargement en traction avec et sans condition de bords libres. Calculs FFT. (a) Condition de bord libre. (b) Chargement mixte. Contrainte axiale (gauche), contrainte radiale σ_{yy} (droite).

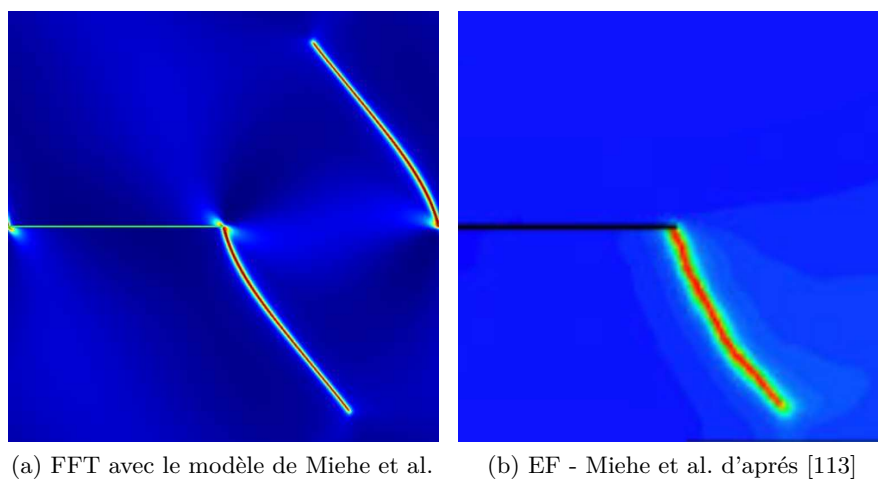


FIGURE 4.8 – Chargement en cisaillement d'un massif pré-entaillé contenant 500^2 voxels. Endommagement prédit par la méthode de champ de phase avec loi unilatérale de Miehe et al. [113] (a), comparé à l'endommagement prédit par éléments finis d'après Miehe et al. [113] (b).

4.4.2 Polycristal

On considère une microstructure de Voronoï (Fig. 4.12a) 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 des 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 au §4.4.1 un schéma de résolution séquentiel avec $\ell/h = 2$, et on choisit $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$ à une rotation aléatoire près dans chaque grain. On fixe la ténacité à $g_c = 0,12 \text{ J.m}^{-2}$. 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 $\Delta \bar{\varepsilon}_{11}^0 = 5 \times 10^{-5}$ et on choisit $\eta_\varepsilon = 10^{-7}$, $\eta_\phi = \eta_I = 10^{-8}$. L'amorçage de la fissure intervient lorsque $\bar{\varepsilon}_{xx}^0 \approx 9,1\%$ (Fig. 4.12b), au niveau d'un joint triple. La fissure se propage de façon transgranulaire (c-f), avec apparition d'une fissure secondaire (Fig. 4.12d), 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. 4.12f) avec $\bar{\sigma}_{xx} \approx 0$.

4.4.3 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 a été mis en place. 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 sont 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 chargements cycliques ou alternés.

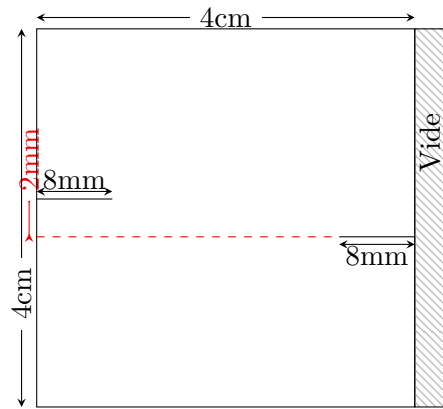


FIGURE 4.9 – Microstructure avec double entailles qui ne sont pas en vis à vis.

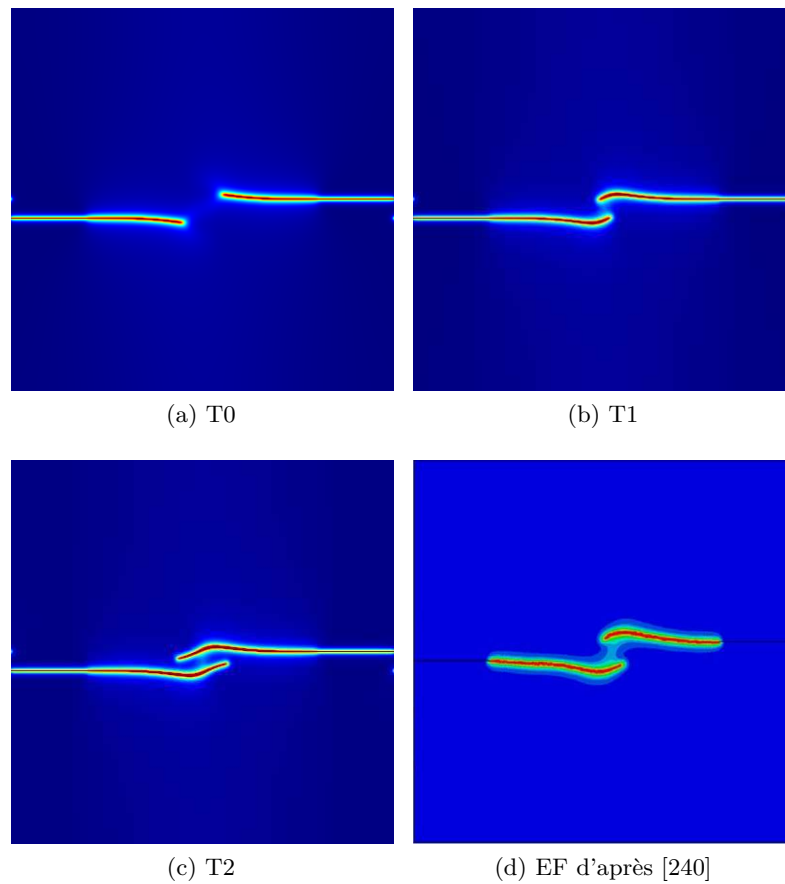


FIGURE 4.10 – Essai de traction sur un matériau contenant une double entaille. (a-c) Calculs FFT. (d)

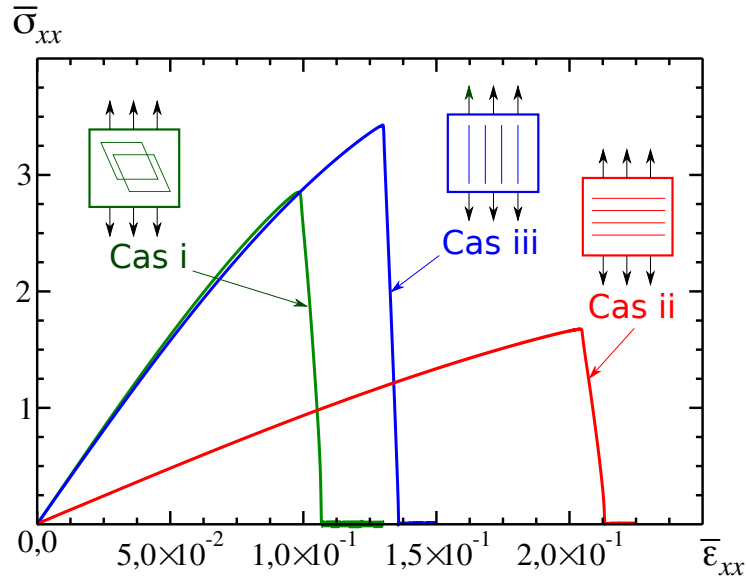


FIGURE 4.11 – Contrainte de traction σ_{xx} en fonction de la déformation longitudinale ϵ_{xx} dans un cristal homogène avec entaille, avec sollicitation en mode I en déformation plane, pour trois orientations différentes de l'entaille par rapport aux axes de symétrie de la maille cristalline.

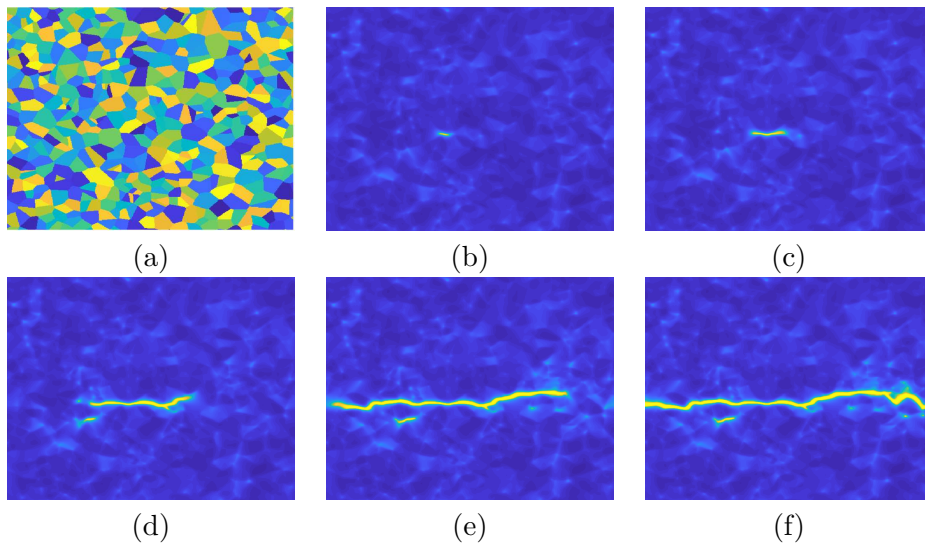


FIGURE 4.12 – Propagation de fissures dans un polycristal de Voronoï (a) sollicité en déformation uniaxiale : cartes du champ de phase $\phi(\mathbf{x})$ pour un chargement macroscopique croissant $\bar{\epsilon}_{11}^0 = 9,1 ; 9,25 ; 9,5 ; 9,75 ; 10\%$ (b-f, resp.). Bleu : $\phi(\mathbf{x}) = 0$, jaune : $\phi(\mathbf{x}) = 1$.

Chapitre 5

Étude paramétrique

Après avoir validé le modèle sur quelques cas simples, il est nécessaire d'une part d'en maîtriser les paramètres, de façon à trouver un compromis coût-précision, d'autre part d'évaluer l'influence des paramètres de la microstructure et du modèle de champ de phase. Cette étude paramétrique représentant nécessairement de nombreuses simulations, elle est réalisée sur des microstructures bidimensionnelles idéalisées et de taille relativement restreinte, les questions de représentativité étant traitées au chapitre 6.

L'objectif final étant d'utiliser les deux modèles de microfissuration simultanément en vue de prédictions quantitatives, il est nécessaire de les valider et de les maîtriser séparément, ce qui est fait dans le présent chapitre sous sollicitations thermiques pour le modèle transgranulaire, en traction simple pour le modèle intergranulaire. On vérifie le bon fonctionnement des deux mécanismes lorsqu'ils sont mis en œuvre simultanément, pour les sollicitations thermiques aussi bien que mécaniques.

5.1 Microfissuration transgranulaire sous chargement thermique

5.1.1 Étude d'un cas

Avant d'aborder l'étude paramétrique relative à la fissuration transgranulaire, et afin de familiariser le lecteur avec ce type de calculs, on présente le résultat de la simulation d'un cycle thermique composé d'un refroidissement de $\Delta T = -40^\circ\text{C}$ ¹, suivi d'une chauffe jusqu'à $\Delta T = 10^\circ\text{C}$. La microstructure est ici un polycristal de Voronoï de 500×500 pixels constitué de 200 grains. Les paramètres de l'algorithme et du modèle sont récapitulés au début du paragraphe suivant, et la formulation séquentielle à pas constant est retenue.

1. Nous rappelons ici que le modèle est indépendant de la température initiale, il est alors plus commode d'exprimer le chargement en variation de température ΔT .

La figure 5.1 représente la déformation volumique macroscopique calculée en fonction de l'écart de température imposé, sous la même représentation que les thermogrammes expérimentaux présentés au § 2.4.3. Qualitativement, on observe une évolution de même type que celle de la figure 2.11 (courbe bleue).

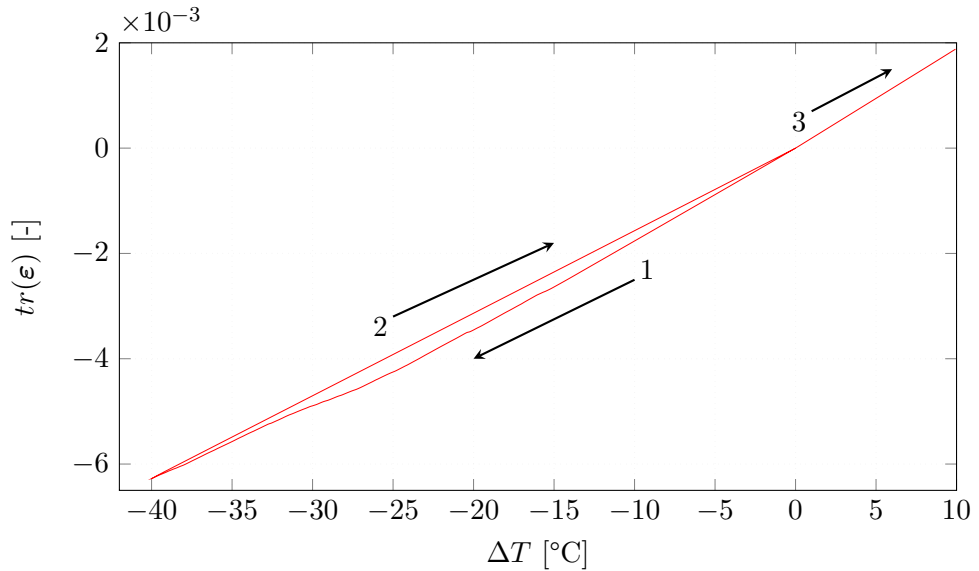


FIGURE 5.1 – Résultat de simulation d'un cycle thermique $\Delta T = 0 \rightarrow -40 \rightarrow 10^\circ\text{C}$ avec le modèle de microfissuration transgranulaire.

Cependant, la non linéarité, modérée, est difficile à apprécier. Pour améliorer la représentation des résultats numériques, on peut en retrancher la partie linéaire initiale, sous la forme :

$$E_{vol}^* = \text{tr}(\bar{\varepsilon}) - \tilde{\alpha}_0 \Delta T \quad (5.1)$$

où $\tilde{\alpha}_0$ est le coefficient de dilatation thermique effectif du matériau non fissuré. On obtient ainsi la représentation de la figure 5.2 (en haut), qui fait apparaître beaucoup plus clairement le seuil de fissuration (environ $\Delta T = -10^\circ\text{C}$), un retour linéaire jusqu'à l'ambiante montrant que le coefficient de dilatation thermique effectif n'évolue pas pendant la chauffe, puis une autre partie linéaire n'ayant pas les propriétés du matériau initial au-delà de $\Delta T = 0^\circ\text{C}$.

Une autre façon de représenter les résultats consiste à exploiter le caractère purement élastique endommageable du modèle, ce qui permet de mettre le coefficient de dilatation thermique volumique effectif $\tilde{\alpha}$ sous la forme :

$$\tilde{\alpha} = \frac{\text{tr}(\bar{\varepsilon})}{\Delta T} \quad (5.2)$$

et de représenter les résultats de simulation par l'évolution du coefficient de dilatation thermique volumique effectif, comme le montre la figure 5.2

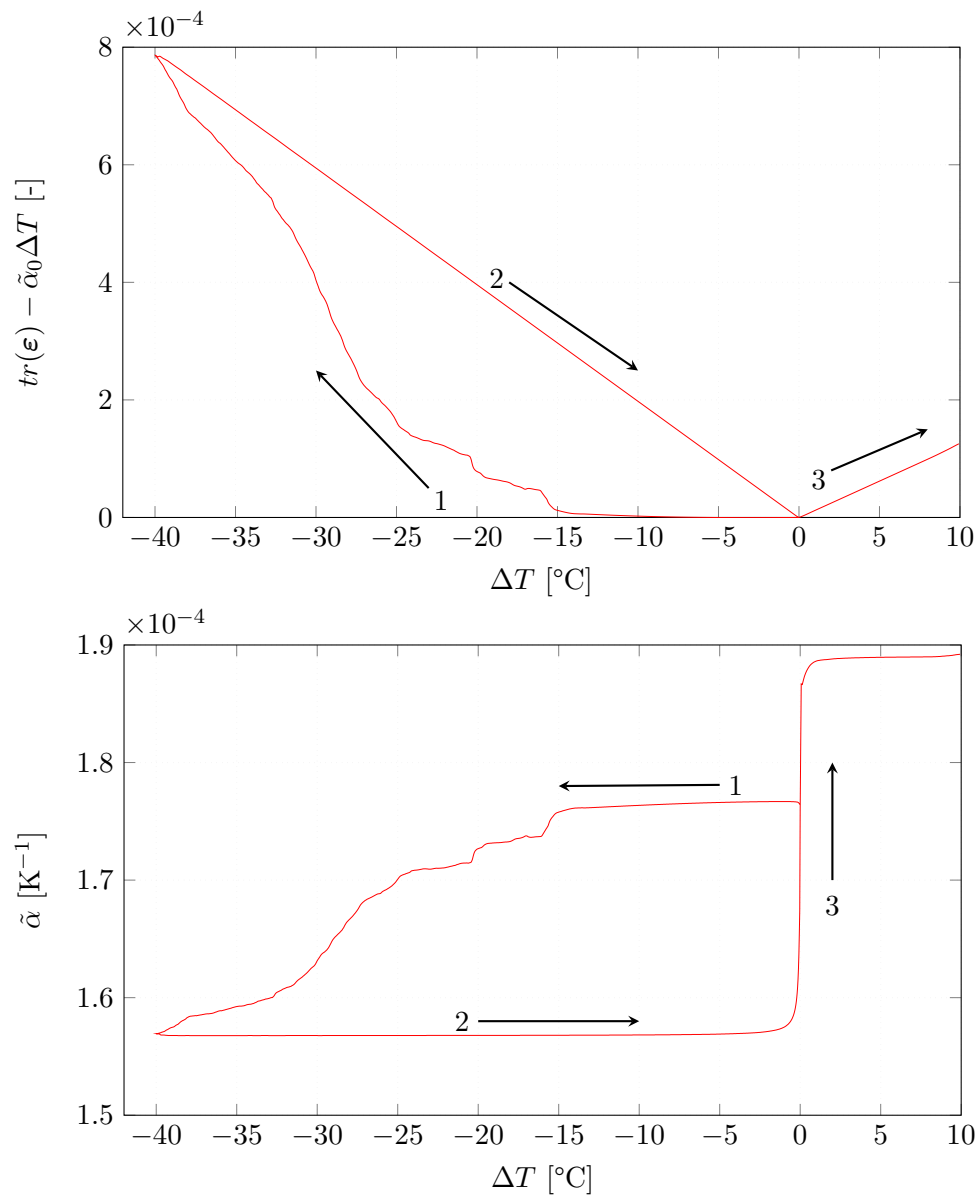


FIGURE 5.2 – Représentations alternatives des résultats de la figure 5.1. En haut : à l'aide de la relation (5.1). En bas : à l'aide de la relation (5.2).

(en bas). Cette seconde représentation, qui sera privilégiée dans ce qui suit, a l'avantage de représenter directement un paramètre physique, et s'avère sensible aux petites variations.

En particulier, la vue du bas de figure 5.2 permet de situer facilement le seuil de microfissuration, ici à $\Delta T = -15^\circ\text{C}$. On peut également observer que le coefficient de dilatation effectif ne varie pas lors de la chauffe, sauf en toute fin de processus. Au voisinage de la température ambiante, il varie

brutalement, traduisant l'effet de la refermeture des microfissures créées et ouvertes au refroidissement, et prend une valeur supérieure à sa valeur initiale aux températures plus élevées. C'est une illustration directe des défauts du modèle de contact unilatéral discutés au paragraphe 3.4.4.

Pour illustrer les évolutions locales du système, la figure 5.3 montre le champ de phase à la fin du refroidissement. On s'intéresse ici à deux pixels matérialisés par les deux réticules. Le réticule magenta est relatif à un pixel (que nous appellerons « pixel fissuré ») situé sur le chemin d'une fissure naissant à $\Delta T = -18^\circ\text{C}$ et dont le champ de phase dépasse la valeur de 0,95 à $\Delta T = -22^\circ\text{C}$. Le réticule saumon est relatif à un pixel (que nous appellerons « pixel sain ») se trouvant seulement à proximité d'une fissure prenant naissance à $\Delta T = -15^\circ\text{C}$.

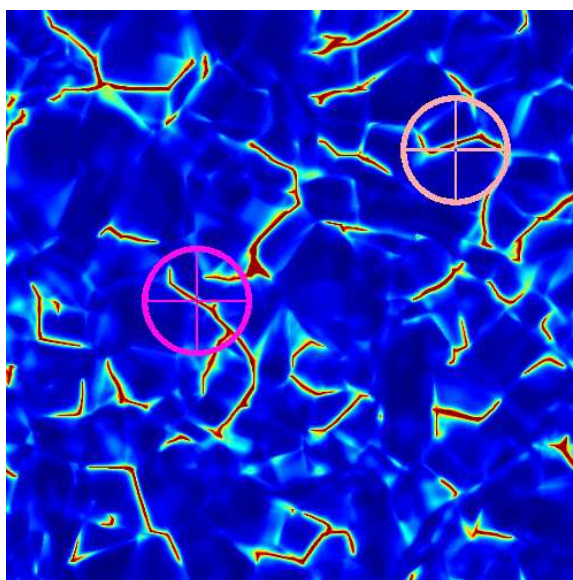


FIGURE 5.3 – Champ de phase à la fin de la simulation. Le réticule magenta matérialise le pixel fissuré, et le réticule saumon le pixel sain (voir le texte).

La vue du haut de la figure 5.4 montre les évolutions conjointes de la déformation volumique macroscopique, et des déformations volumiques locales de chacun de ces deux pixels. La déformation du pixel sain suit globalement la déformation macroscopique, et n'est que peu sensible à la présence des autres fissures, même proches. A contrario, le pixel fissuré évolue brutalement sous l'effet des variations du champ de phase, ce qui permet de situer précisément l'apparition de la fissure. La vue du bas de la figure 5.4 montre le détail des trois évolutions autour de $\Delta T = -20^\circ\text{C}$. On observe que le pixel sain est légèrement sensible à l'apparition d'une fissure à proximité immédiate, mais pas à celle d'une fissure plus éloignée.

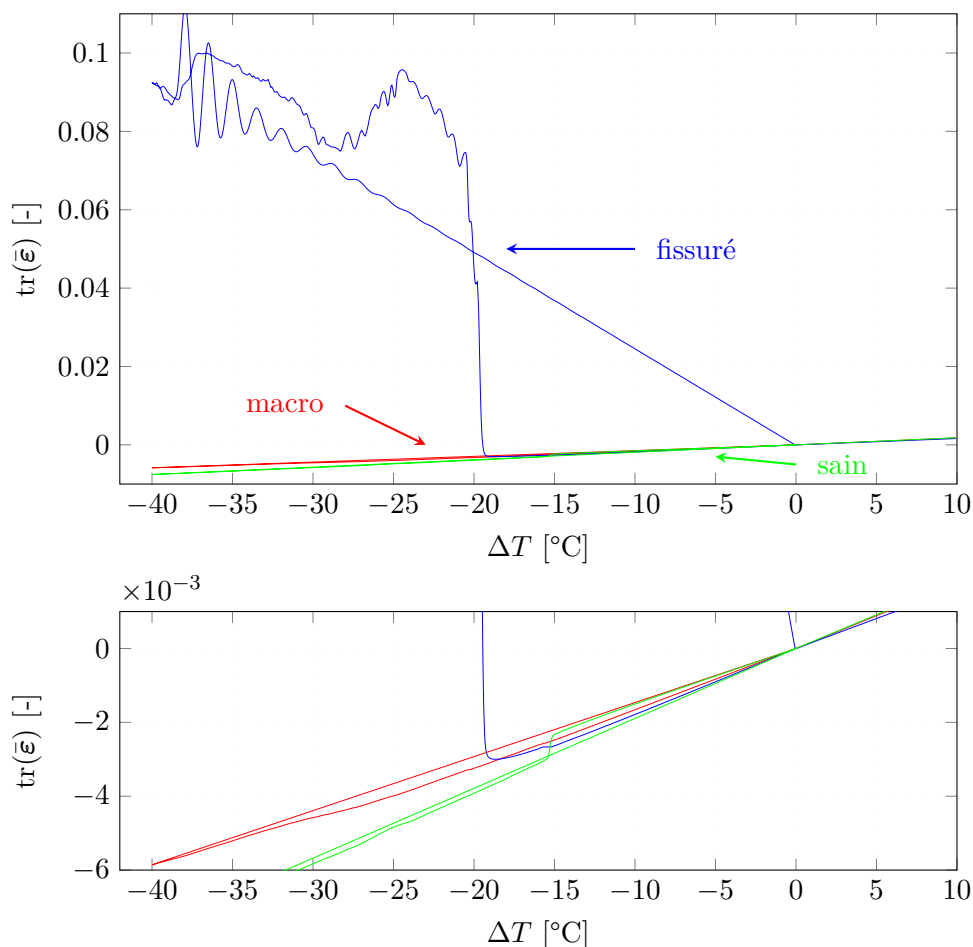


FIGURE 5.4 – En haut : Évolution des déformations volumiques macroscopiques (rouge), du pixel fissuré (bleu), et du pixel sain (vert). En bas : détail des trois évolutions autour de $\Delta T = -20^\circ\text{C}$.

Intéressons-nous maintenant à la répartition des champs locaux dans toute la microstructure. La figure 5.5 représente en coordonnées semi-logarithmiques l'histogramme² du champ de phase durant le refroidissement à $\Delta T = -13$, -27 et -40°C respectivement. A $\Delta T = -13^\circ\text{C}$, sa valeur maximale est de l'ordre de 0,3, ce qui montre d'une part que le processus de microfissuration n'a pas encore démarré, d'autre part que le modèle produit un champ diffus dès le début du chargement, ce qui souligne le défaut du modèle lié à l'utilisation de la fonction $\alpha(\phi) = \phi^2$ (voir le § 3.4.2). Ce caractère diffus explique pourquoi le pic n'est pas centré sur la valeur 0. Pour les deux autres températures, ce phénomène s'amplifie, et on observe un second pic centré sur la valeur 1, indiquant que le processus de microfissuration est

2. Tous les histogrammes présentés dans ce mémoire sont des densités de probabilité d'intégrale 1.

en cours.

La figure 5.6 représente l'histogramme de la déformation volumique durant le refroidissement à $\Delta T = -4, -13, -26$ et -40°C , et durant la chauffe à $\Delta T = -26, -13$ et $+10^\circ\text{C}$. On remarque que les histogrammes s'étalent lorsque la température baisse. Ceci s'explique par la chute locale de propriétés élastiques due au développement du champ de phase. De plus, la déformation volumique locale restant proportionnelle à la température, les histogrammes se resserrent à la chauffe, pour s'annuler totalement à 0°C . Par ailleurs, les queues de distributions sont plus étalées vers les déformations volumiques positives (voir la figure 5.7), ce qui s'explique par la présence de microfissures ouvertes.

Enfin, la figure 5.8 représente les histogrammes de la contrainte moyenne durant le refroidissement à $\Delta T = -13, -26$ et -40°C , et durant la chauffe à $\Delta T = -26, -13$ et $+10^\circ\text{C}$. On observe d'abord que tous sont centrés sur la contrainte nulle, qui correspond à la sollicitation appliquée. Ces histogrammes présentent un pic (également visible sur la figure 5.6), qui correspond à la contrainte résiduelle dans les fissures ouvertes, et représente un biais dû au modèle imparfait de contact unilatéral. On notera que les contraintes, résultant uniquement de l'anisotropie thermoélastique du cristal TATB, sont relativement fortes, puisqu'elles atteignent des valeurs de l'ordre de 15 MPa localement. On rappelle que la limite de rupture du composite en traction est de l'ordre de 7 MPa seulement.

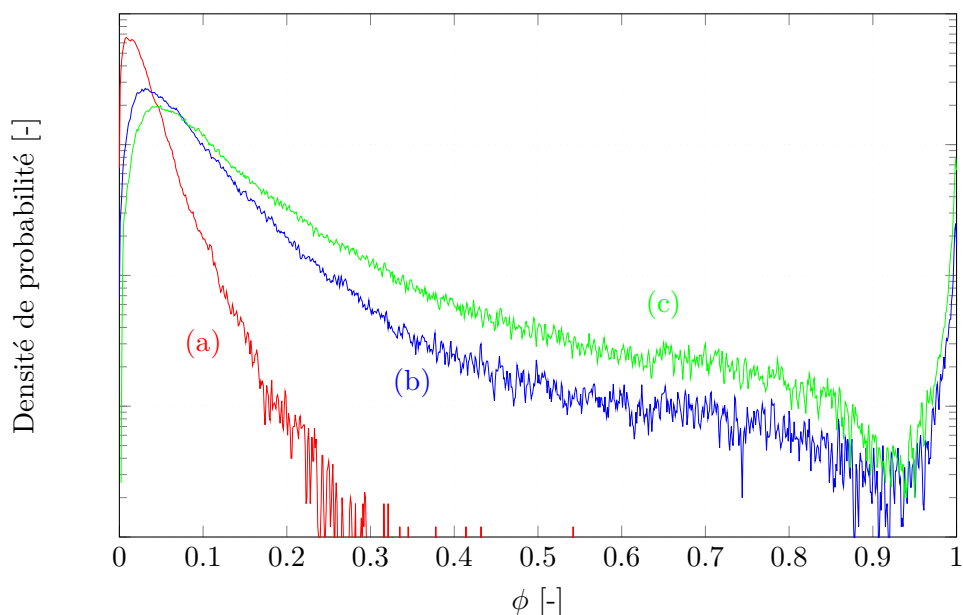


FIGURE 5.5 – Histogramme du champ de phase pour (a) -13°C , (b) -27°C et (c) -40°C , en représentation semi-logarithmique

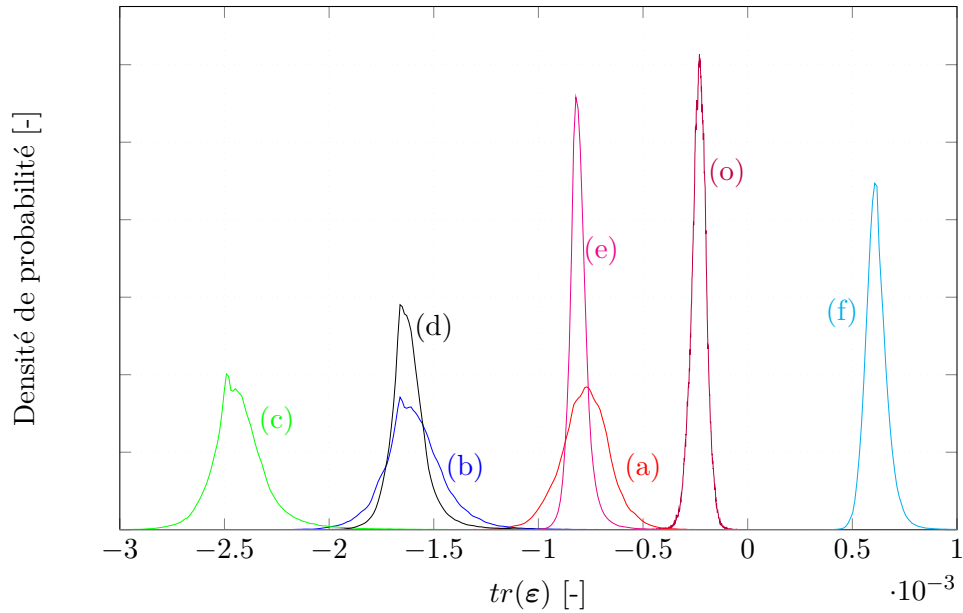


FIGURE 5.6 – Histogramme de la déformation volumique pour (a) -4°C , (a) -13°C , (b) -26°C , (c) -40°C , (d) -26°C , (e) -13°C , et (f) $+10^{\circ}\text{C}$.

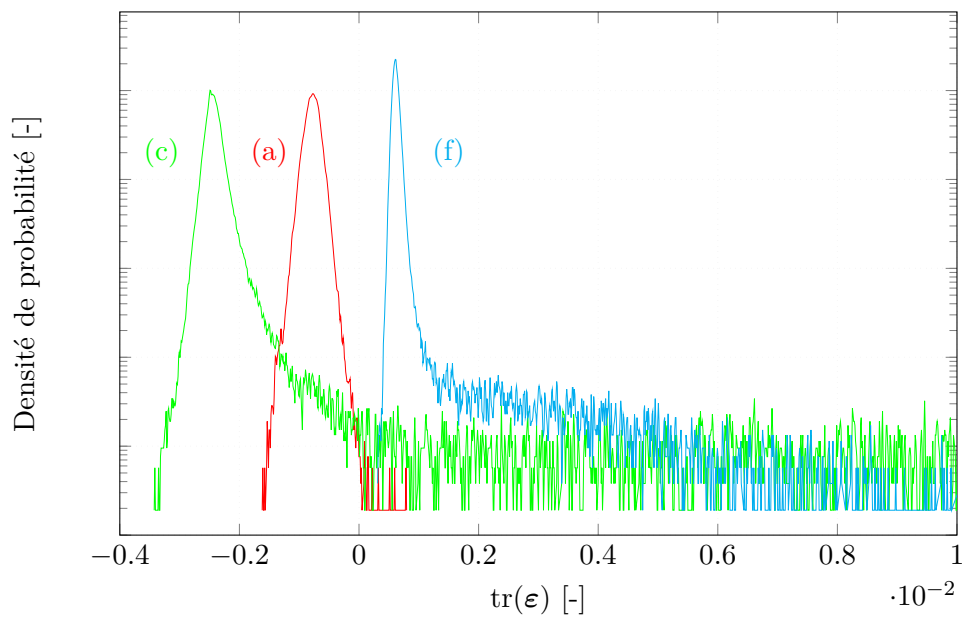


FIGURE 5.7 – Histogramme de la déformation volumique pour (a) -13°C , (c) -40°C , et (f) $+10^{\circ}\text{C}$, en représentation semi-logarithmique.

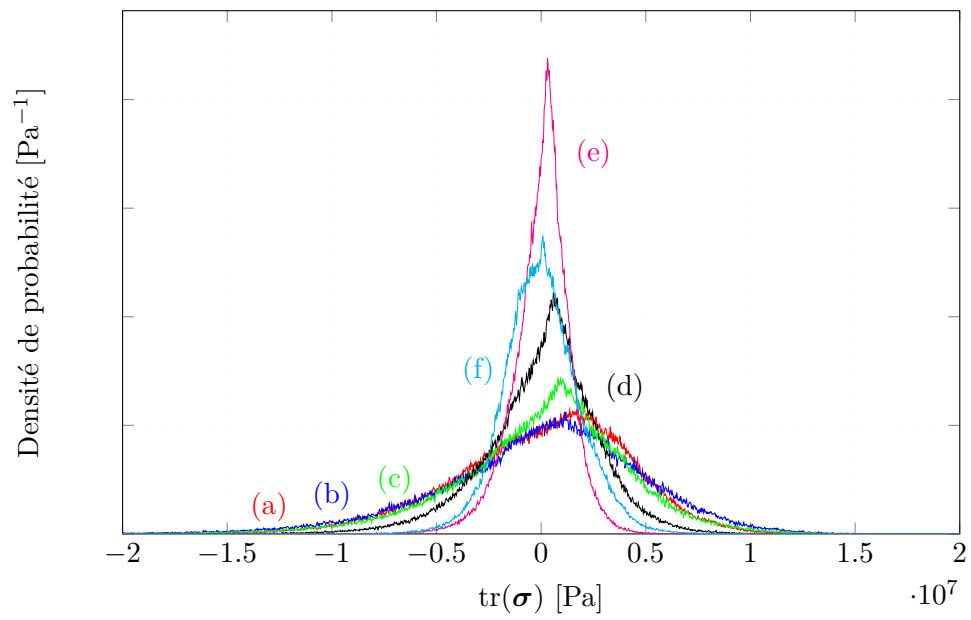


FIGURE 5.8 – Histogramme des contraintes (a) -13°C , (b) -26°C , (c) -40°C , (d) -26°C , (e) -13°C , et (f) $+10^{\circ}\text{C}$.

5.1.2 Étude paramétrique

Il s'agit ici d'étudier l'effet de divers paramètres de discrétisation de la microstructure, de l'algorithme, et du modèle de champ de phase, dans l'objectif de maîtriser les simulations et d'en déterminer le meilleur compromis précision-coût.

Pour l'ensemble des simulations de cette étude paramétrique, le schéma séquentiel à pas fixe est retenu. Pour limiter les temps de calcul et la taille des fichiers résultat, la microstructure est un polycristal bidimensionnel carré de 500 pixels de côté, comportant 200 grains, généré par un modèle aléatoire de Voronoï. Les modules thermoélastiques du cristal de TATB sont ceux indiqués par Bedrov et al. [31] et par Sun et al. [89], et les orientations cristallographiques sont choisies par tirage aléatoire. Enfin, la sollicitation est un cycle $\Delta T = 0 \rightarrow -40 \rightarrow 0^\circ\text{C}$.

Le jeu de paramètres suivant a été choisi par tâtonnement comme référence :

1. Discrétisation/résolution

- Taille du domaine : $L = 500$ pixels
- Nombre de grains : 200
- Taille du pixel : $1,6 \mu\text{m}$

2. Paramètres de l'algorithme

- Pas de chargement : $\Delta T = 0,03^\circ\text{C}$
- Critère de convergence en déformation : $\eta_\varepsilon = 10^{-10}$
- Critère de convergence en chargement mixte : $\eta_s = 500$ Pa
- Critère de convergence en champ de phase : $\eta_\phi = 10^{-10}$
- Module d'Young de référence : $\mathbf{E}^0 = 150$ GPa
- Paramètre de régularisation : $k = 10^{-4}$

3. Paramètres du modèle

- Longueur caractéristique : $\ell = 2$ pixels
- Ténacité $g_c = 0,1$ J.m⁻²
- Anisotropie de ténacité $\omega = 3$

Pour limiter le temps de calcul pour cette étape de validation du modèle, les simulations ont été restreintes à une taille de 500 pixels sur les deux dimensions. Pour obtenir une résolution de chaque grain suffisante (diamètre supérieur à 40 pixels), le nombre total de grains est par conséquent faible. Les simulations ont été menées avec une amplitude thermique de $\Delta T = 40^\circ\text{C}$.

Résolution

Pour estimer l'influence de la résolution, on garde le nombre de grains constant, mais on fait varier la taille L de la microstructure. On réalise trois simulations correspondant à des résolutions moyennes de l'ordre de 200, 450 et 1250 pixels par grain. La figure 5.9 montre que les deux résolutions les plus élevées donnent des résultats relativement proches, et suggère que la résolution la plus faible est insuffisante. La figure 5.10 montre clairement que les champs de phase peuvent différer sensiblement (voir en particulier dans le quart inférieur droit de la figure), et sont plus diffus avec une résolution grossière.

Les mêmes simulations sont reprises, cette fois en maintenant le rapport ℓ/L constant à la valeur de $1/200$. La figure 5.10 montre que les champs de phase sont beaucoup plus proches et moins diffus. On en déduit que la résolution ne semble pas constituer un paramètre déterminant. Dans ce qui suit, toutes les simulations sont réalisées pour $L = 500$ pixels.

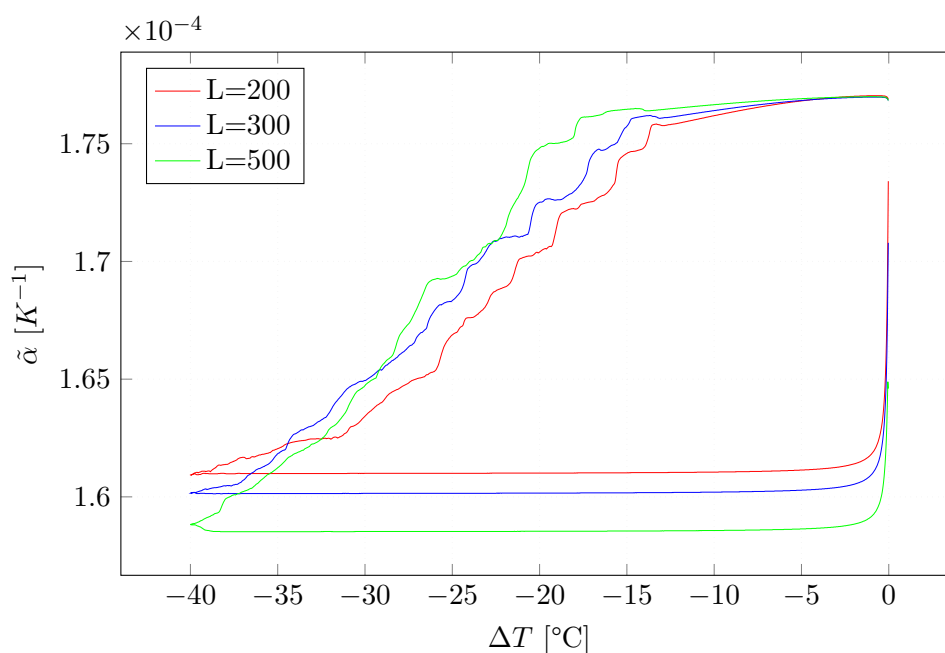


FIGURE 5.9 – Résultats de simulation pour des tailles de microstructure $L = 200, 300$ et 500 pixels.

Nombre de grains

La question de la représentativité fait l'objet du chapitre 6. Il est cependant utile, à ce stade, d'évaluer l'effet du nombre de grains sur les résultats de simulation. Pour ces simulations, la taille de la microstructure est fixée à $L = 500$ pixels, et le nombre de grains varie entre 50 et 1000.

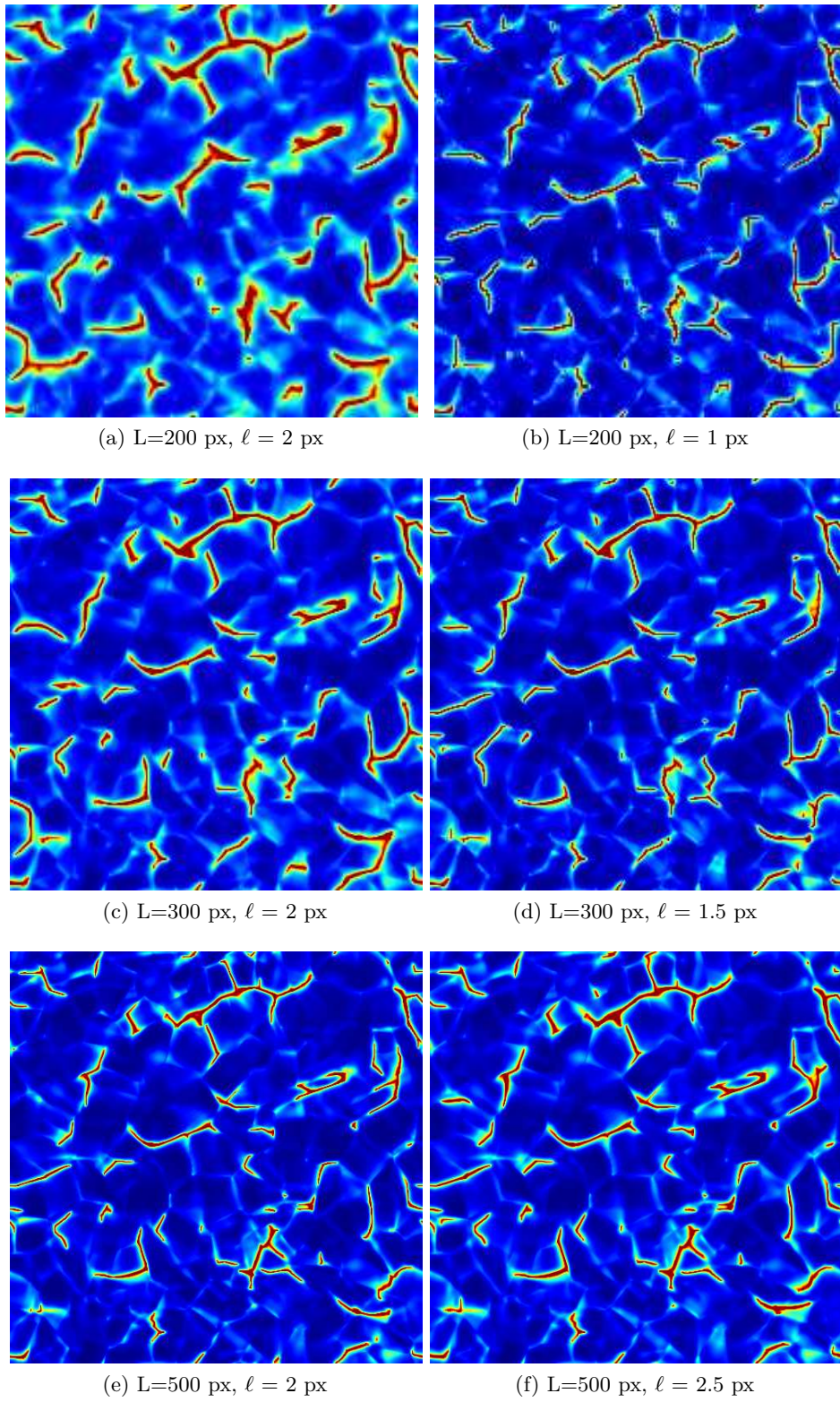


FIGURE 5.10 – Comparaison des champs de phases à $\Delta T = -40^\circ\text{C}$ avec ℓ constant (a,c,e) et avec $\ell/L = \frac{1}{200}$ constant (b,d,f).

La figure 5.11 illustre le résultat. Lorsque le nombre de grains est faible, la réponse macroscopique est constituée d'évolutions relativement brutales, séparées par des plateaux, ce qui correspond à l'apparition et la propagation d'un petit nombre de microfissures, évoluant essentiellement de façon individuelle. L'intérêt de prendre en compte un nombre de grains suffisant est d'autoriser l'apparition et la propagation de microfissures nombreuses, ce qui permet d'évaluer le comportement du modèle pour des populations de microfissures plutôt que pour des microfissures isolées.

Sans surprise, on observe que le coefficient de dilatation thermique volumique effectif est affecté par le nombre de grains. Lorsque ce dernier augmente, le coefficient de dilatation thermique à l'origine (matériau sain) tend vers une valeur proche de $1,76 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, obtenue à l'aide de la théorie de Hashin [274], dans le cadre de l'approximation à la symétrie hexagonale, valide à une bonne approximation près pour le cristal de TATB [48, 96].

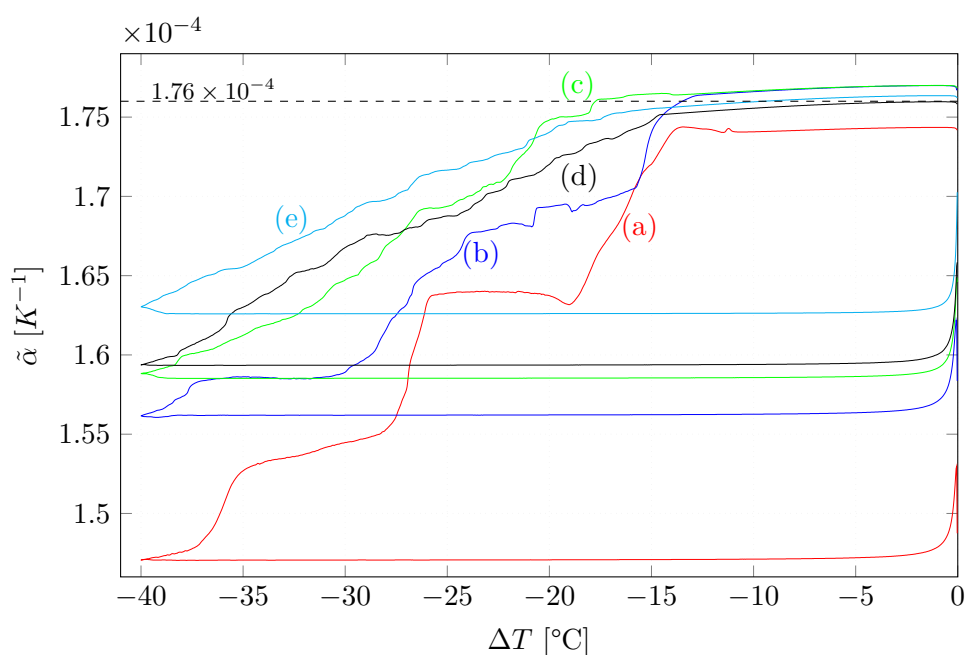


FIGURE 5.11 – Effet du nombre de grains, 20 (a-rouge), 50 (b-bleu), 200 (c-vert), 400 (d-noir), et 1000 (e-cyan)

Pas de chargement

Ayant retenu l'algorithme séquentiel afin de limiter le coût des simulations, il est nécessaire de déterminer le pas de chargement à utiliser. La figure 5.12 compare les résultats obtenus pour des pas de 1, 0,2, 0,1, 0,03 (valeurs de référence) et 0,01°C. On observe une convergence des résultats pour les valeurs de 0,03 et 0,01°C. Le choix de la première comme référence permet un bon compromis entre précision et temps calcul. A titre indicatif, une simulation effectuée avec le schéma implicite (voir le paragraphe 4.2) donne strictement le même résultat que le calcul séquentiel avec un pas de 0,01°C.

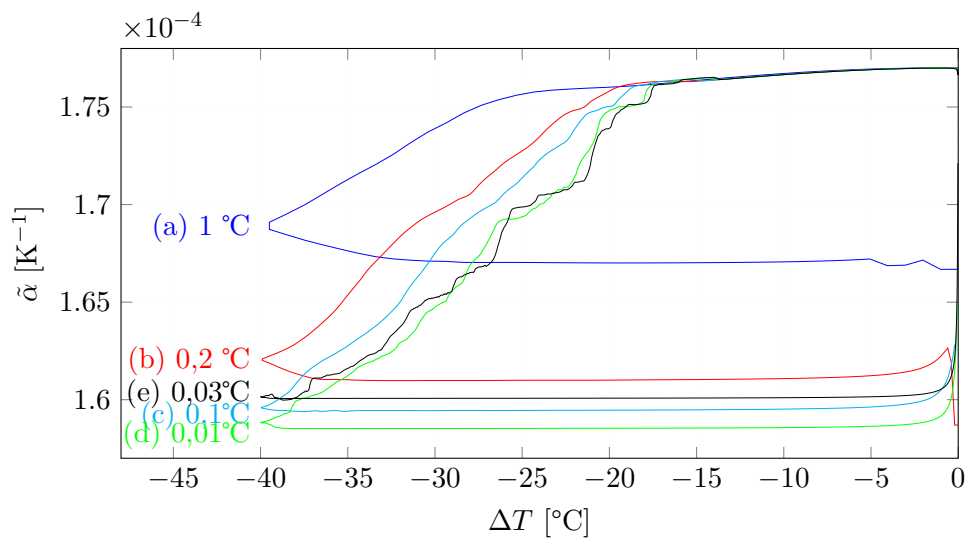


FIGURE 5.12 – Effet du pas de chargement pour (a) 1°C, (b) 0,2°C, (c) 0,1°C, (d) 0,03°C, et (e) 0,01°C.

Critère de convergence en déformation

Comme nous l'avons vu précédemment au chapitre 4, deux paramètres de l'algorithme sont couplés, le critère de convergence en déformation et le critère d'arrêt sur la contrainte macroscopique résiduelle. On désactive dans un premier temps le second, pour étudier l'effet du critère de convergence en déformation entre 10^{-6} et 10^{-12} . La figure 5.13 montre que la convergence est atteinte dès la valeur de 10^{-8} .

La figure 5.14a donne la dépendance du temps calcul au critère de convergence. Cette dépendance est globalement linéaire en représentation bi-logarithmique, le temps calcul étant multiplié par dix lorsque le critère de convergence est divisé par cent. Toutefois, cette constatation ne s'applique pas pour le critère de convergence le plus grossier. Ceci s'explique par le fait que, dans ce cas, la solution est atteinte avec une seule itération entre deux pas de chargement.

Il est ensuite intéressant d'évaluer les niveaux de contrainte macroscopique résiduelle. Avec un critère de déformation de 10^{-8} , la contrainte résiduelle est de 8 kPa contre 200 Pa pour 10^{-10} , et 50 Pa pour 10^{-12} (voir la figure 5.14b).

L'ensemble de ces résultats montre que la valeur de 10^{-8} constitue un bon compromis entre précision et temps calcul, mais que le niveau de contrainte macroscopique résiduelle reste dans ce cas élevé. Pour limiter ce dernier, il est nécessaire de porter le critère de convergence en déformation à 10^{-10} , au prix d'une forte élévation du temps calcul, et sans gain en précision.

Notons pour terminer qu'avec un critère de convergence plus fin (en particulier $\eta_\varepsilon = 10^{-12}$), l'effet de la refermeture des microfissures lors de la chauffe à l'approche de $\Delta T = 0^\circ\text{C}$ est nettement mieux représenté.

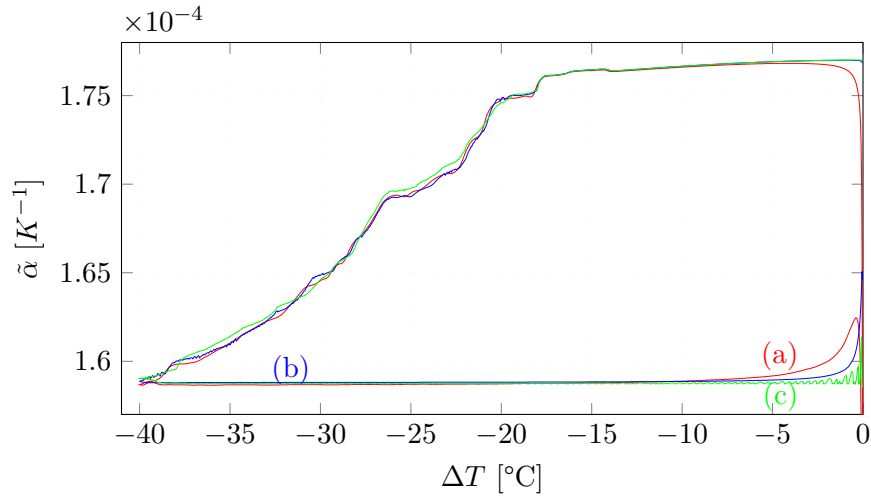


FIGURE 5.13 – Effet du critère de convergence en déformation $\eta_\varepsilon = 10^{-8}$ (a-rouge), $\eta_\varepsilon = 10^{-10}$ (b-bleu), $\eta_\varepsilon = 10^{-12}$ (c-vert), le critère de convergence en contrainte macroscopique résiduelle étant désactivé.

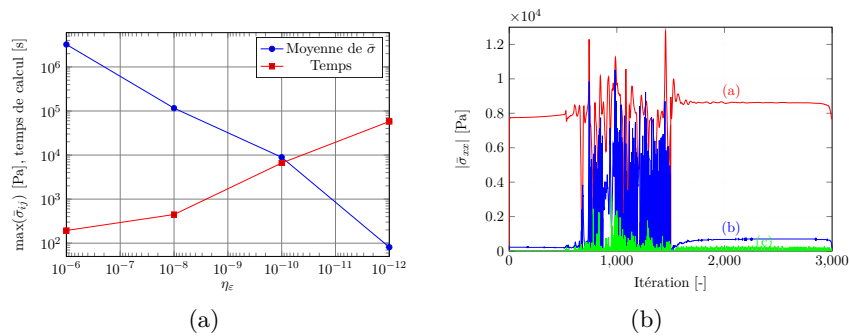


FIGURE 5.14 – (gauche) Contraintes macroscopiques résiduelles moyennes (bleu) et temps CPU (rouge) en fonction du critère de convergence η_ε . (droite) Contrainte macroscopique résiduelle durant le chargement pour trois valeurs du critère de convergence en déformation, $\eta_\varepsilon = 10^{-8}$ (a-rouge), $\eta_\varepsilon = 10^{-10}$ (b-bleu), $\eta_\varepsilon = 10^{-12}$ (c-vert).

Critère de convergence en contrainte

On a vu plus haut que le critère de convergence en déformation permet de limiter les contraintes résiduelles, mais pas de les contrôler strictement. Pour évaluer l'effet de ce contrôle, on fixe le critère de convergence en déformation à $\eta_\varepsilon = 10^{-10}$, et on fait varier le critère en contrainte entre 100 Pa et 5 kPa.

La figure 5.15 montre que la réponse macroscopique n'est que très peu affectée par ce critère complémentaire. La figure 5.16 présente l'évolution de la contrainte résiduelle au cours du chargement pour trois valeurs du critère de convergence en contrainte. On observe trois régimes distincts. Le premier, entre les itérations 0 et 800, correspond au début de la phase de refroidissement (entre 0°C et -20°C). Le second correspond à la propagation des microfissures, qui s'accompagne de fortes variations de la contrainte résiduelle. Enfin, la phase du retour à l'ambiante, entre les itérations 1500 et 3000 (respectivement -40°C et 0°C), pour laquelle le champ de phase n'évolue pas, est beaucoup plus régulière.

L'ajout du critère de convergence en contrainte n'apporte rien de significatif en termes de précision, mais permet de limiter notablement l'amplitude des oscillations de la contrainte résiduelle. Ce point pourra s'avérer important lorsque l'on s'intéressera à l'effet du confinement.

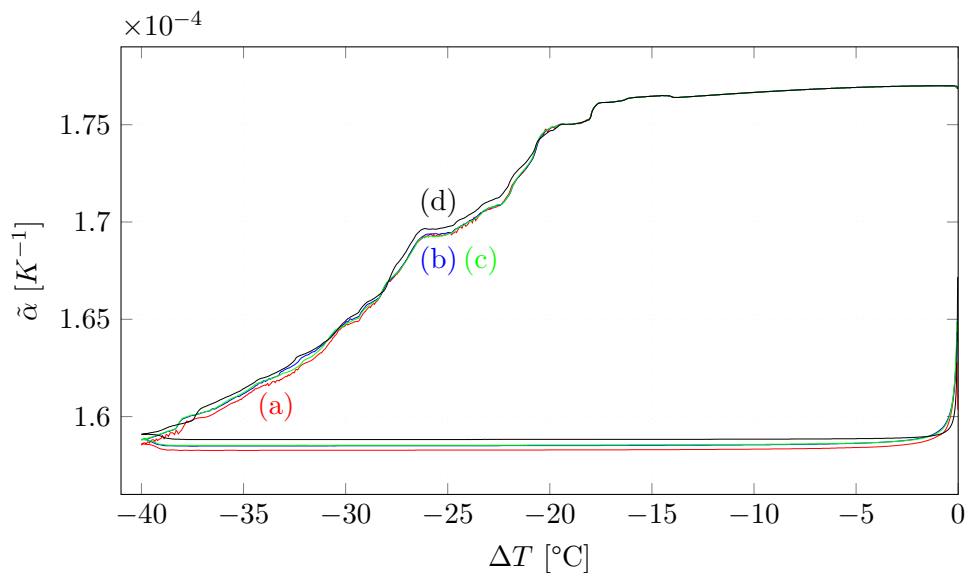


FIGURE 5.15 – Effet du critère de convergence en contrainte $\eta_s = 5$ kPa (a-rouge), $\eta_s = 1$ kPa (b-bleu), $\eta_s = 500$ Pa (c-vert), $\eta_s = 200$ Pa (d-noir), pour un critère de convergence en déformation $\eta_\varepsilon = 10^{-10}$.

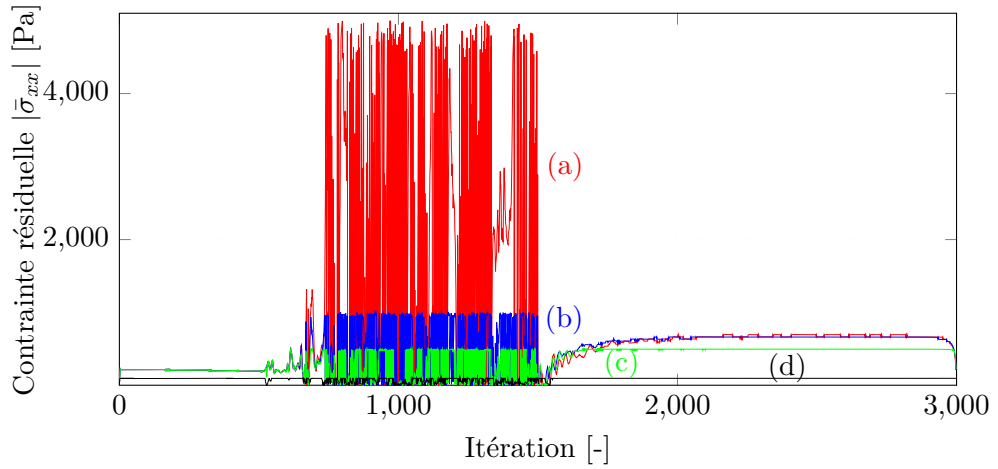


FIGURE 5.16 – Contrainte résiduelle pour $\eta_s = 5$ kPa (a-rouge), $\eta_s = 1$ kPa (b-bleu), $\eta_s = 500$ Pa (c-vert), et $\eta_s = 100$ Pa (d-noir).

Critère de convergence du champ de phase

On s'intéresse maintenant à l'effet du critère de convergence en champ de phase. La figure 5.17 illustre l'effet du critère de convergence en champ de phase sur la réponse macroscopique simulée, pour des valeurs de $\eta_\phi = 10^{-10}$, 10^6 , 10^7 et 10^8 . On observe qu'il faut atteindre la valeur de 10^8 pour obtenir une dégradation significative du résultat.

Pour rappel, l'algorithme d'intégration de la loi d'évolution du champ de phase s'appuie sur un gradient conjugué, et le critère d'erreur est la somme des erreurs de tous les voxels de la simulation, et n'a pas été adimensionné.

Cependant, même avec un critère aussi strict que 10^{-10} , la part du temps calcul dévolue à la loi d'évolution du champ de phase reste minime par rapport à la résolution de l'équation de l'équilibre. C'est pourquoi cette valeur a été conservée dans l'ensemble des travaux mentionnés dans ce mémoire.

Module élastique de référence

Le module d'Young E^0 du tenseur de rigidité de référence \mathbf{C}^0 (voir le chapitre 4) détermine les valeurs attribuées aux modules de compressibilité et de cisaillement du milieu élastique isotrope de référence sur lequel la méthode FFT repose. On sait que la solution numérique est indépendante de cette valeur, mais que l'algorithme est susceptible de diverger pour certaines valeurs de E^0 [275]. C'est pourquoi on réalise des simulations en faisant varier E^0 entre 30 et 1000 GPa. La figure 5.18 permet de constater que la valeur du module de référence n'a effectivement pas d'incidence sur le résultat. En revanche, le temps calcul est largement impacté (figure 5.19) et peut varier d'un facteur dix, et l'algorithme diverge au-dessous de la valeur 28 GPa.

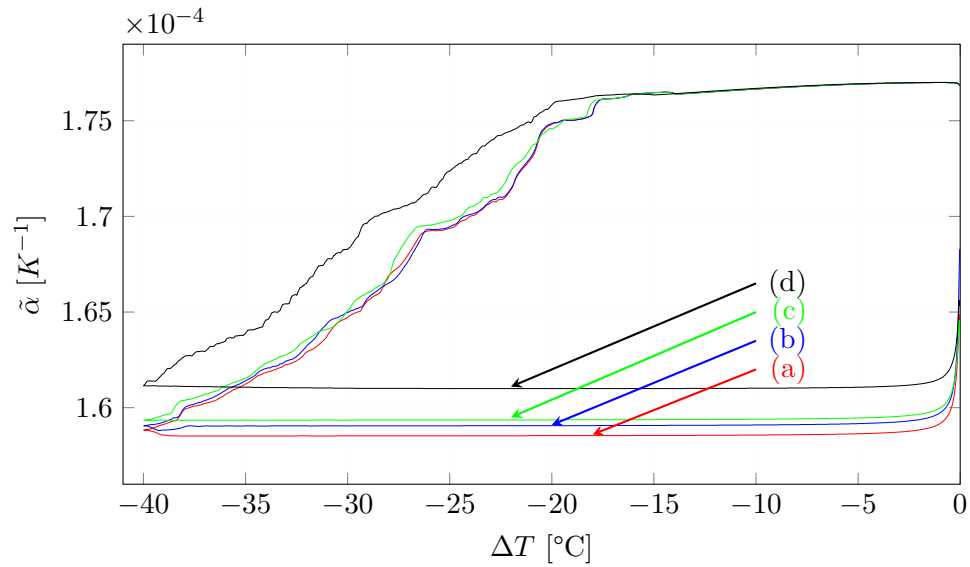


FIGURE 5.17 – Effet du critère de convergence en champ de phase pour $\eta_\phi = 10^{-10}$ (a-rouge), 10^{+6} (b-bleu), 10^{+7} (c-vert) et 10^{+8} (d-noir).

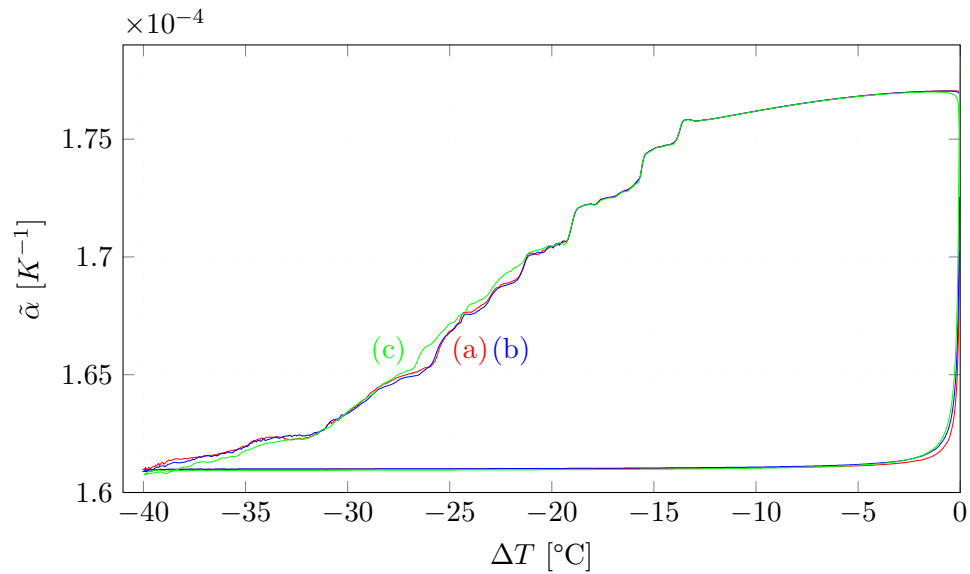
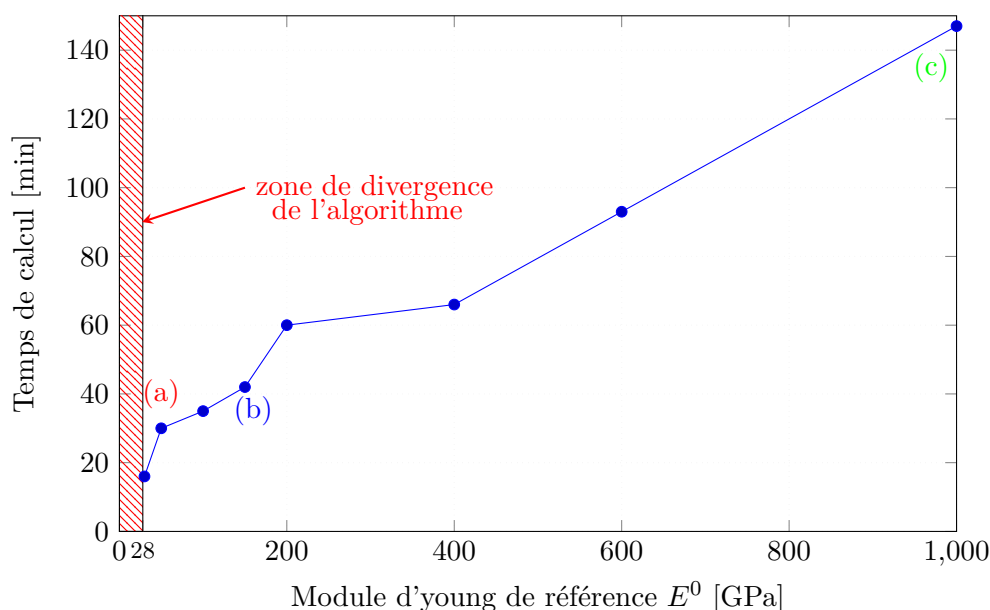


FIGURE 5.18 – Effet du module d'young de référence pour E^0 de 50 GPa (a-rouge), 150 GPa (b-bleu) et 1000 GPa (c-vert).

Paramètre de régularisation k

On a vu au chapitre 4 que l'introduction d'un petit paramètre de régularisation permet d'accélérer la convergence de l'algorithme, en empêchant les modules élastiques locaux de se dégrader totalement. On évalue ici l'effet de ce paramètre.

FIGURE 5.19 – Temps de calcul en fonction du module d'Young de référence E^0 .

La figure 5.20 montre que si le paramètre de régularisation prend une valeur inférieure ou égale à 10^{-4} , il n'a plus d'effet sur la réponse macroscopique. En revanche, on constate sur la figure 5.21 que son effet sur le temps calcul est très significatif. C'est la raison pour laquelle on retient dans ce qui suit la valeur de 10^{-3} , malgré son effet non négligeable sur la solution.

Longueur caractéristique ℓ

L'analyse bibliographique du chapitre 3 indique qu'il est nécessaire que la taille de maille (ou de pixel) h soit nettement plus faible que la longueur caractéristique ($h \ll \ell$). En pratique, de nombreux auteurs prennent $h \leq \ell \leq 2h$ pour des raisons de temps calcul et de taille mémoire. Nous verrons au paragraphe 5.2 que nous serons en pratique conduits à retenir la valeur $\ell = 2$ pixels.

L'analyse bibliographique a également montré que la contrainte à rupture sous sollicitations mécaniques dépend fortement de ℓ . Dans le cas homogène (voir [126, 129]), la contrainte à rupture en traction diminue lorsque ℓ augmente. La figure 5.22, qui compare les résultats obtenus pour les valeurs $\ell = 1, 2$ et 4 pixels, montre un effet analogue, puisque l'initiation de la microfissuration se produit à plus haute température, c'est-à-dire pour des niveaux de contrainte locale plus faible, lorsque ℓ augmente.

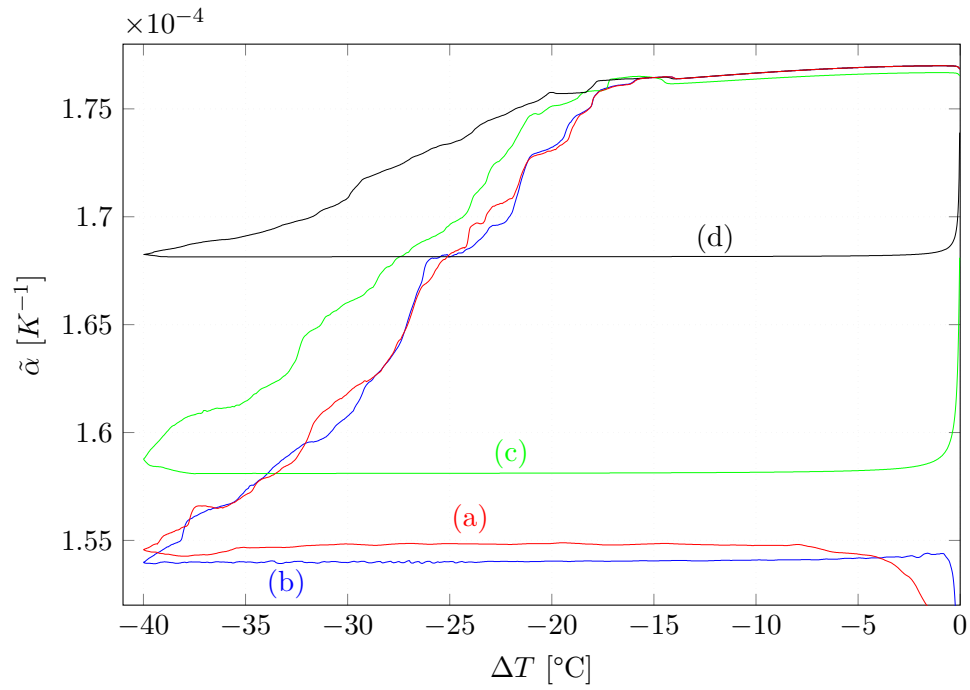


FIGURE 5.20 – Effet du paramètre de régularisation pour $k = 0$ (a-rouge), $k = 10^{-4}$ (b-bleu), $k = 10^{-3}$ (c-vert) et $k = 10^{-2}$ (d-noir).

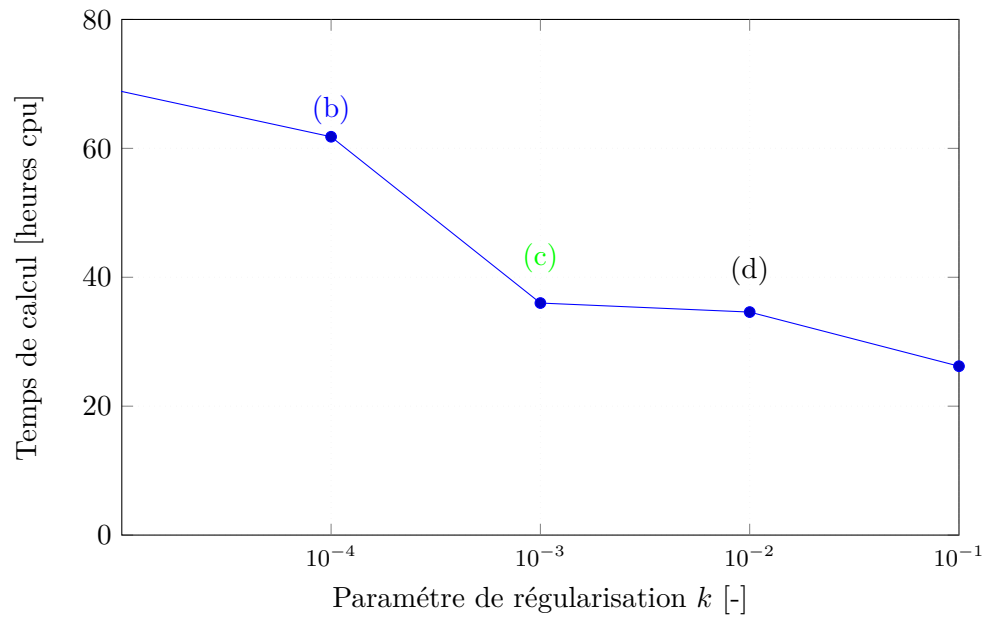


FIGURE 5.21 – Temps de calcul en fonction du paramètre de régularisation k

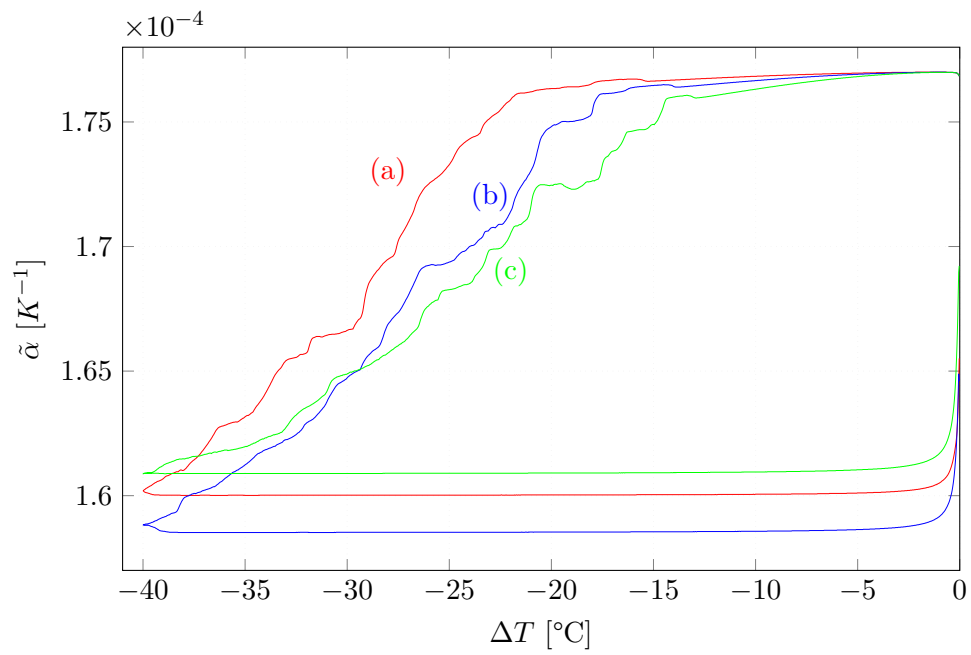


FIGURE 5.22 – Effet de la longueur caractéristique pour $\ell = 1$ (a-rouge), $\ell = 2$ (b-bleu) et $\ell = 4$ pixels (c-vert).

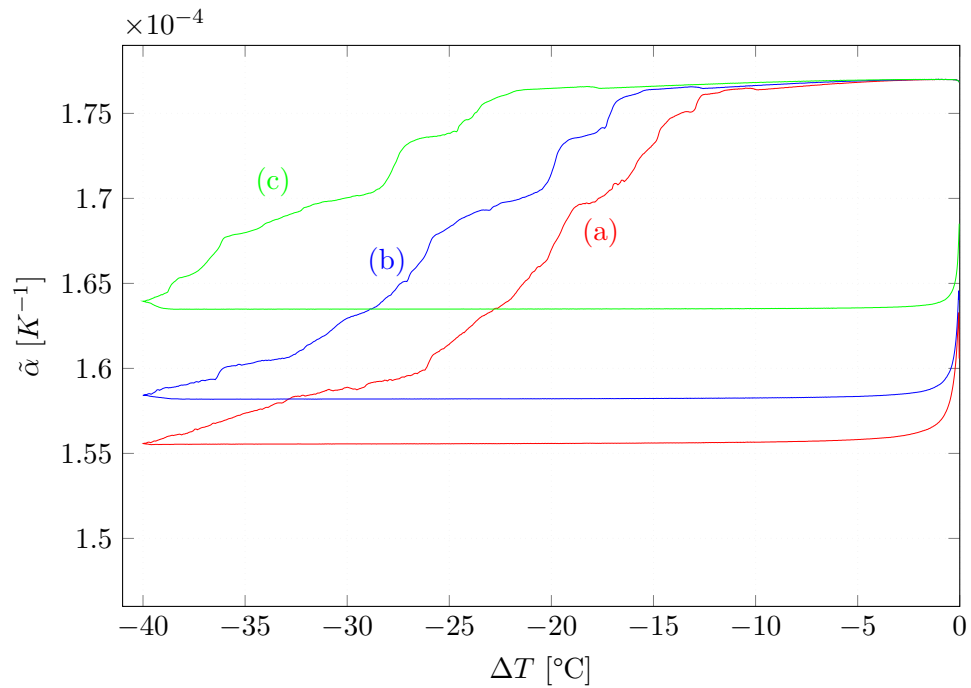


FIGURE 5.23 – Effet du paramètre g_c , ici $g_c = 0,05$ (a-rouge), $0,1$ (b-bleu) et $0,2$ $J.m^{-2}$ (c-vert).

Ténacité

La ténacité est décrite par deux paramètres, g_c qui décrit l'énergie de rupture des plans graphitiques, et le facteur d'anisotropie de ténacité ω . La figure 5.23 illustre l'effet du paramètre g_c , pour des valeurs de 0,05, 0,1 et 0,2 J.m⁻², le facteur d'anisotropie ω étant fixé à 3. On constate logiquement que l'initiation et l'évolution de la microfissuration sont retardées pour les grandes valeurs de g_c . Par ailleurs, on rappelle que l'équation d'évolution du champ de phase s'écrit :

$$\phi - \ell^2 \nabla \phi \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \phi = (1 - \phi) \frac{\ell \mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon})}{g_c} \quad (5.3)$$

Pour la sollicitation thermique considérée ici, et pour des trajets monotones, le terme source (membre de droite) de cette relation est proportionnel à $\frac{\Delta T^2}{g_c}$. De ce fait, la réponse macroscopique ne doit dépendre que de $\frac{\Delta T^2}{g_c}$. C'est ce que confirme la figure 5.24.

La figure 5.25 illustre l'effet du paramètre d'anisotropie de ténacité ω , pour des valeurs de 0,1, 1 (cas isotrope), 3 (valeur qui caractérise le cristal de TATB), et 6. On observe que le seuil d'initiation de la microfissuration est relativement peu affecté, mais que leurs évolutions sont très différentes.

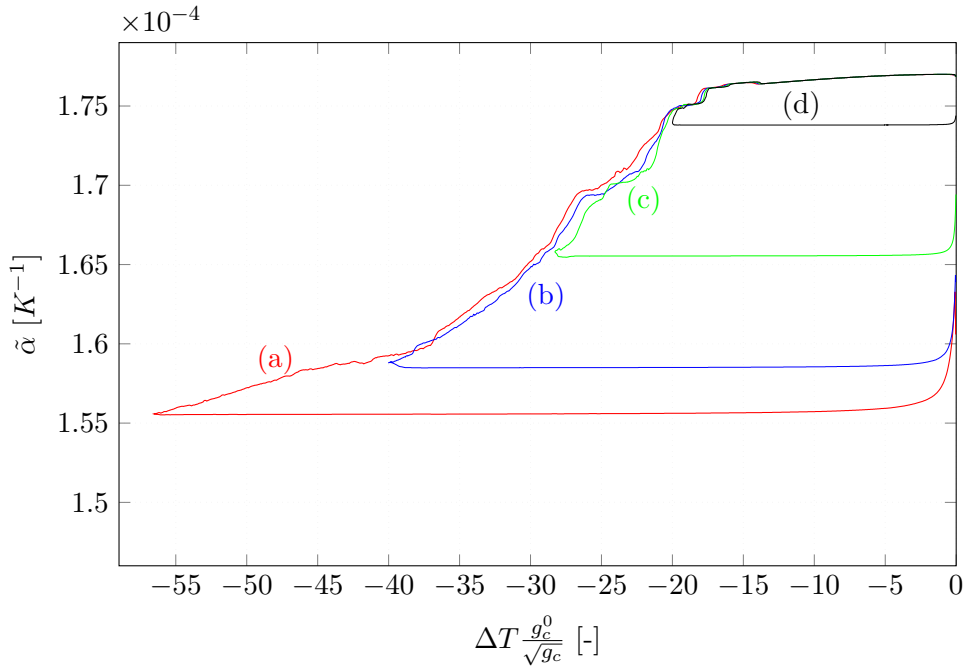


FIGURE 5.24 – Effet du paramètre g_c , ici $g_c = 0,05$ (a-rouge), 0,1 (b-bleu) et 0,2 J.m⁻² (c-vert). Coefficient de dilatation thermique effectif $\tilde{\alpha}$ en fonction de l'écart de température, renormalisé par la ténacité.

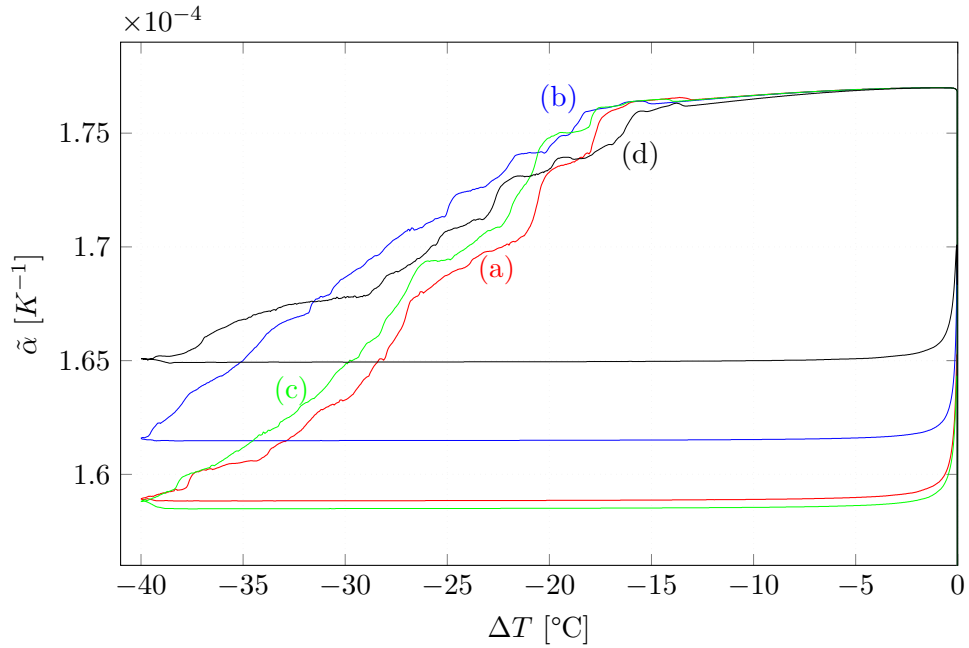


FIGURE 5.25 – Effet du paramètre d’anisotropie pour $\omega = 0.1$ (a-rouge), 1 (b-bleu), 3 (c-vert) et 6 (d-noir).

5.1.3 Bilan

On a pu constater dans ce qui précède que l’algorithme peut être considéré comme maîtrisé vis-à-vis des sollicitations thermiques. Des règles de conduite peuvent être déduites de la convergence aux paramètres algorithmiques, puis affinées de façon pragmatique en vue, en particulier, d’optimiser le rapport précision-temps calcul. Un critère de convergence en déformation de 10^{-8} apparaît ainsi comme un bon compromis, de même qu’un pas de chargement en température de 0,03 K. Les critères de convergence en contrainte et en champ de phase sont peu contraignants, de même que le paramètre de régularisation k et le module de référence \mathbf{C}^0 .

On a également pu constater que, comme attendu, la longueur caractéristique ℓ possède une influence forte sur le seuil d’initiation de la microfissuration. La valeur $\ell = 2$ pixels semble convenir, l’important restant de conserver une résolution correcte en choisissant une valeur faible vis-à-vis de la taille de grains moyenne.

Nous sommes ainsi en possession de tous les éléments nécessaires à la mise en œuvre du modèle de microfissuration transgranulaire.

5.2 Microfissuration intergranulaire en traction

5.2.1 Méthodologie

Il s'agit maintenant de réaliser un travail analogue pour définir les conditions de mise en œuvre du modèle de microfissuration intergranulaire. Ce processus étant à priori particulièrement important sous sollicitations mécaniques, on choisit de réaliser cette étude préalable en traction simple.

On a fait le choix (voir le chapitre 4) de représenter l'ensemble liant-interface par une interphase possédant les propriétés élastiques du liant (dans son domaine vitreux) et une ténacité propre pour représenter la résistance interfaciale. On a également vu que, compte tenu de l'épaisseur du liant dans le matériau réel, sa prise en compte directe est impossible. On a donc retenu le principe de modélisation défini lors des travaux antérieurs [96], basé sur la théorie des interfaces imparfaites (voir le § 7.1.2). De ce fait, l'épaisseur d'interphase w devient un paramètre de la microstructure. Ce paramètre étant petit par nature, il est important de chercher la valeur de la longueur caractéristique ℓ compatible avec une interphase de faible épaisseur.

Compte tenu de l'expérience acquise d'une part lors de la phase de pré-validation de l'algorithme (voir le paragraphe 4.3) et d'autre part de l'étude paramétrique ci-dessus, on se restreint à l'examen des paramètres jugés les plus importants, à savoir la résolution, le critère de convergence en déformation η_ε et le paramètre de stabilité k .

Les simulations réalisées pour cette brève étude paramétrique considèrent une microstructure plane carrée de 500 pixels de côté définie à partir du même polycristal que précédemment (modèle de Voronoï à 50 grains), l'interphase d'épaisseur uniforme $w = 4$ pixels étant ensuite générée par érosion. Les propriétés élastiques et les orientations cristallographiques des grains sont les mêmes que précédemment. Le liant est doté d'un module de compressibilité $K = 2$ GPa, d'un module de cisaillement $\mu = 0,9$ GPa, d'une ténacité $g_c = 0,2$ J.m⁻² choisie arbitrairement, et d'une longueur caractéristique $\ell = 2$ pixels. Comme précédemment, on retient l'algorithme séquentiel piloté en déformation macroscopique longitudinale, les contraintes latérale et de cisaillement imposées étant nulles, avec un critère de convergence en déformation $\eta_\varepsilon = 10^{-8}$, un pas de chargement fixe de 10^{-5} et un paramètre de régularisation $k = 10^{-5}$. Ces derniers paramètres sont issus de l'expérience acquise lors des premiers tests de validation au paragraphe 4.3.

5.2.2 Épaisseur d'interphase et résolution

Le choix de l'épaisseur d'interphase est dicté par une double considération. Les travaux antérieurs [96] ont montré qu'il est nécessaire de disposer d'au moins deux pixels (ou voxels) dans l'épaisseur, faute de quoi le nombre de degré de liberté, insuffisant, provoque une rigidification artificielle de

l'interphase. D'autre part, une interphase trop épaisse représente une fraction volumique très éloignée de celle du matériau réel.

Ces considérations ajoutent une certaine complexité au choix de la longueur interne. Au final, on obtient le tableau d'ensemble suivant :

$$\underbrace{\text{taille de pixel}}_1 < \ell < \underbrace{\text{interphase}}_{>2} < \underbrace{\text{taille de grain}}_{\text{Représentativité, résolution}} < \underbrace{\text{taille du calcul}}_{\text{Faisabilité}} \quad (5.4)$$

Un choix raisonnable est représenté par $\ell = 2$ pixels et $w = 4$ pixels. La figure 5.26 présente des simulations avec $w = 4$ pixels (vue du haut) et $w = 8$ pixels (vue du bas), pour différentes valeurs de la longueur caractéristique (la référence étant fixée à $\ell = 2$ pixels).

La bibliographie indique que, dans le cas homogène, la contrainte à rupture est inversement proportionnelle à $\sqrt{\ell}$ (voir par exemple [126, 129]). Ce n'est pas ce que l'on observe ici. Si l'on prend par exemple le cas $w = 8$ pixels (figure 5.26, vue du bas), on constate que la contrainte à rupture augmente au contraire pour $\ell \geq 4$. Il s'agit clairement d'un effet de résolution : le champ de phase est trop étalé au sein de l'interphase. Cet effet ne disparaît que pour les valeurs de ℓ plus faibles (1 ou 2 pixels). Le même constat peut être fait pour $w = 4$ pixels (figure 5.26, vue du haut). Dans ce cas, cependant, le choix de ℓ est plus contraint, et la valeur de $\ell = 2$ pixels semble déjà trop élevée.

La figure 5.27 compare les champs de phase obtenus après rupture dans quatre cas. Pour une interphase fine ($w = 4$ pixels, colonne de gauche), les champs sont quasiment identiques pour $\ell = 2$ et $\ell = 4$ pixels, ce que corrobore la similitude des réponses macroscopiques. Pour une interphase épaisse ($w = 8$ pixels, colonne de droite), mieux résolue, la fissure principale ne varie pas sensiblement entre $\ell = 2$ et $\ell = 4$ pixels, mais les fissures secondaires sont moins avancées pour $\ell = 4$ pixels, ce que corrobore la contrainte à rupture plus élevée dans ce cas.

Il est donc en résumé nécessaire d'avoir une résolution suffisante de l'interphase, faute de quoi la contrainte à rupture sera nécessairement surestimée. Dans ce qui suit, les valeurs $w = 4$ et $\ell = 2$ pixels seront néanmoins retenues, de façon à ne pas trop surestimer la fraction volumique d'interphase par rapport au matériau réel.

5.2.3 Critère de convergence en déformation η_ε

Dans cette étude, le pas de chargement a été augmenté de 5×10^{-6} à 5×10^{-5} pour s'assurer que le critère de convergence n'est pas atteint dès la première itération. La figure 5.28 montre que le critère de convergence influe faiblement sur la contrainte à rupture, déjà convergée pour $\eta_\varepsilon = 10^{-8}$, mais seulement 4% supérieure pour $\eta_\varepsilon = 10^{-6}$. On remarque cependant que le comportement post-critique peut présenter quelques différences, ce qui est

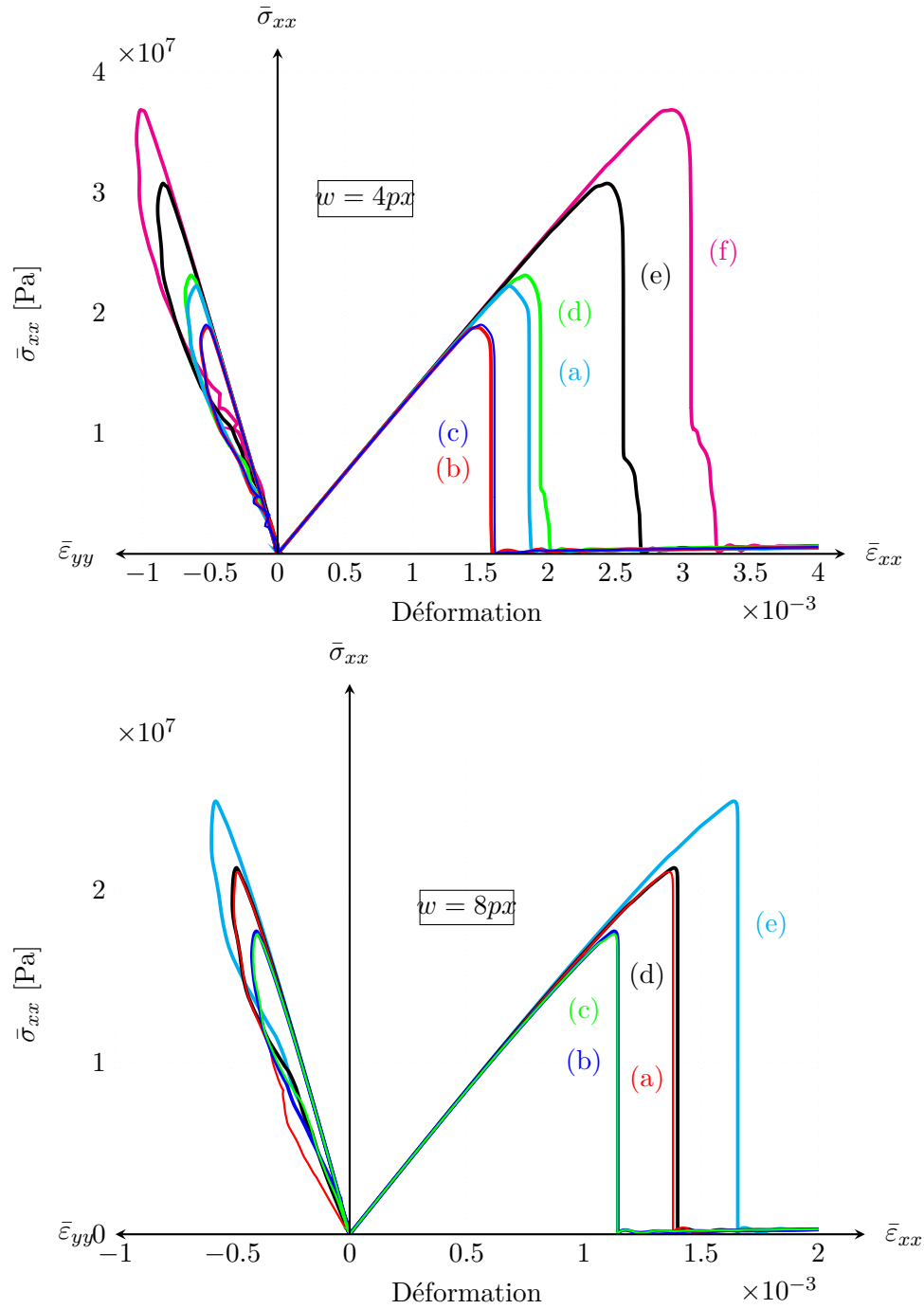


FIGURE 5.26 – Effet de la longueur interne selon l'épaisseur d'interphase. En haut : $w = 4$ pixels, (a) $l = 0.5$, (b) $l = 1$, (c) $l = 2$, (d) $l = 4$, (e) $l = 8$, et (f) $l = 12$ pixels. En bas : $w = 8$ pixels, (a) $l = 1$, (b) $l = 2$, (c) $l = 4$, (d) $l = 8$ et (e) $l = 12$ pixels.

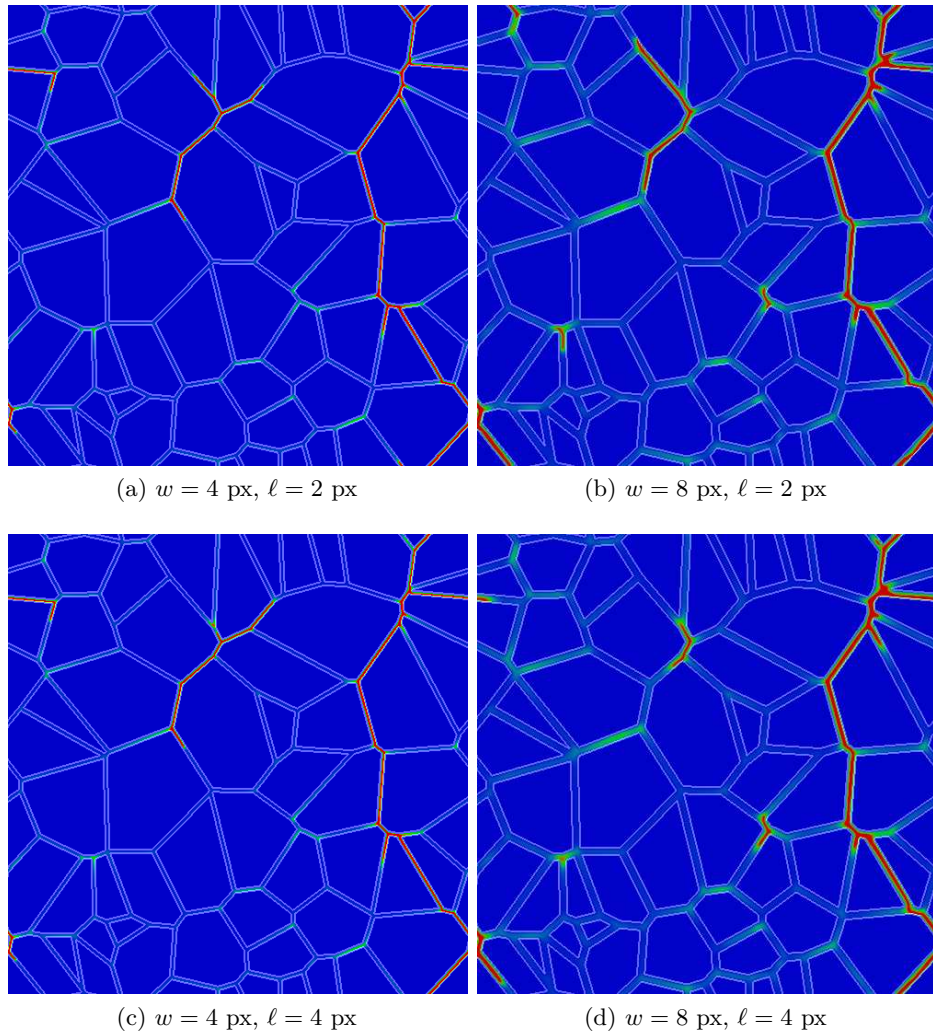


FIGURE 5.27 – Comparaison des champs de phases après rupture pour $w = 4$ et $w = 8$ pixels.

corroboré par les cartes du champ de phase à l'état rompu de la figure 5.29, qui montrent que les fissures secondaires peuvent différer sensiblement lorsque le critère de convergence n'est pas suffisamment strict.

5.2.4 Paramètre de régularisation k

Enfin, l'effet du paramètre de régularisation k fait l'objet des figures 5.30 et 5.31. On observe d'abord que ce paramètre n'a que peu d'influence sur la contrainte à rupture. La tableau 5.1 montre que ce paramètre permet d'alléger le temps calcul d'un facteur trois environ.

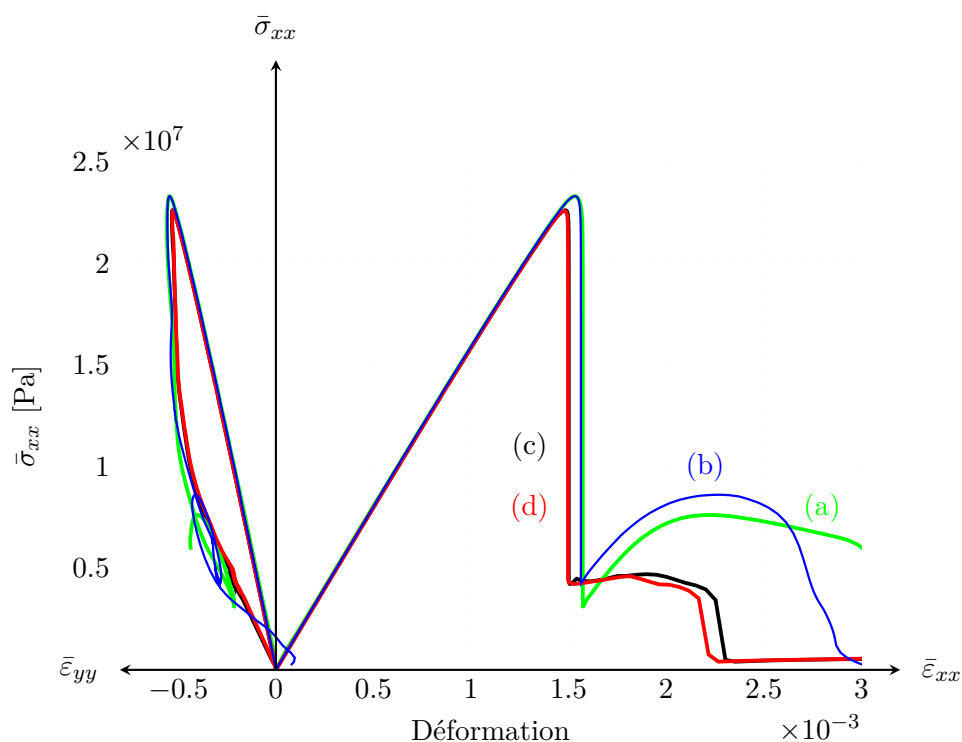


FIGURE 5.28 – Effet du critère de convergence en déformation avec un pas de chargement de 5×10^{-5} pour (a) $\eta_\varepsilon = 10^{-6}$, (b) $\eta_\varepsilon = 10^{-8}$, (c) $\eta_\varepsilon = 10^{-10}$ et (d) $\eta_\varepsilon = 10^{-12}$.

courbe	k	temps de calcul [heure cpu]
(a)	0	71
(b)	10^{-6}	28
(c)	10^{-5}	30
(d)	10^{-4}	31
(e)	10^{-3}	34

TABLE 5.1 – Effet du paramètre de régularisation k sur le temps calcul.

Le comportement post-critique est en revanche fortement affecté. La figure 5.31 montre en particulier un réseau de fissures secondaires complètement différent pour $k = 10^{-3}$. De ce fait, $k = 10^{-5}$ est la valeur la plus élevée admissible, et ce paramètre est plus sensible dans le cas de la traction que pour les sollicitations thermiques.

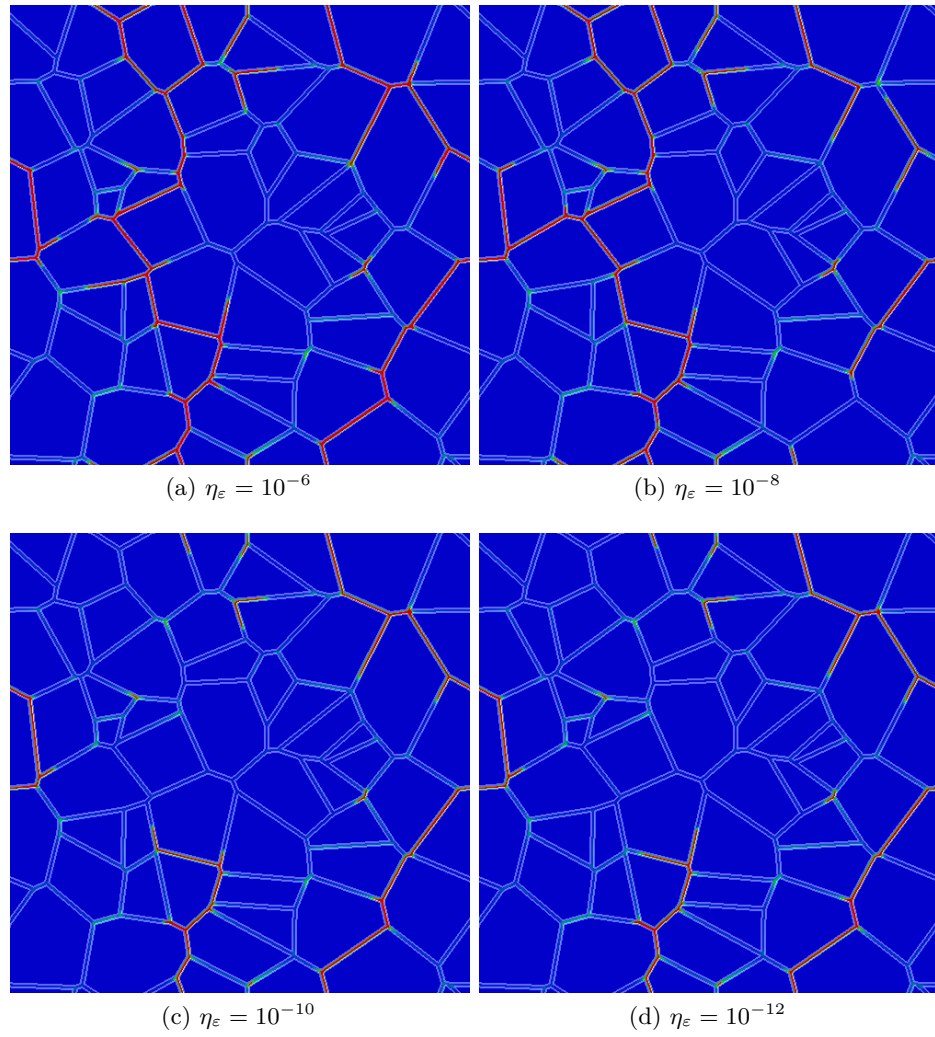


FIGURE 5.29 – Comparaison des champs de phases après rupture pour différent critère de convergence en déformation.

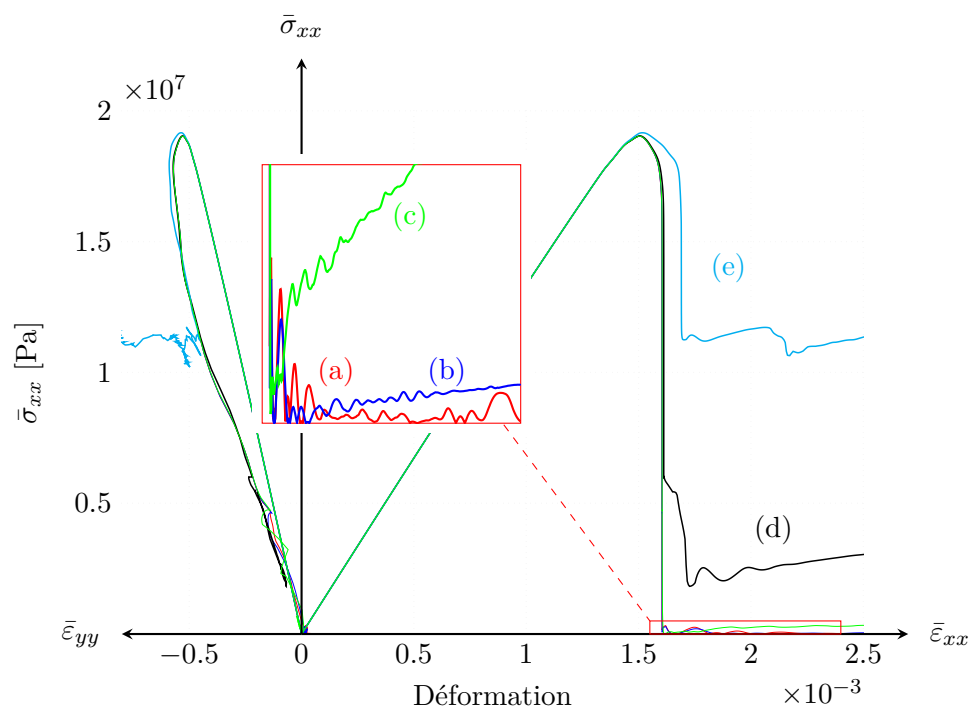
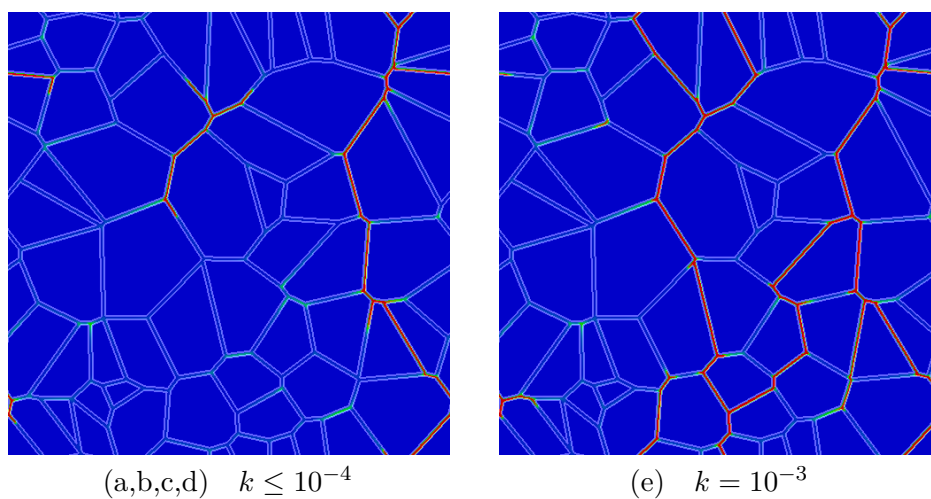


FIGURE 5.30 – Effet du paramètre de régularisation pour (a-rouge) $k = 0$, (b-bleu) 10^{-6} , (c-vert) 10^{-5} , (d-noir) 10^{-4} et (e-ciel) 10^{-3} .



(a,b,c,d) $k \leq 10^{-4}$

(e) $k = 10^{-3}$

FIGURE 5.31 – Champ de phase correspondant à la fin de l'essai en traction (après rupture).

5.2.5 Variabilité statistique

A titre indicatif, compte tenu du faible nombre de grains des microstructures considérées pour cette étude paramétrique, on donne sur la figure 5.32 les résultats obtenus pour quatre réalisations différentes de la microstructure, obtenues à partir du même modèle polycristallin de Voronoï, et contenant la même fraction volumique d'interphase.

Si la contrainte à rupture varie relativement peu, le modèle d'Young initial est en revanche fortement affecté, de même que le comportement post-critique et le trajet de fissure. La cause en est clairement le petit nombre de grains invoqué dans les simulations. La question de la représentativité sera approfondie au chapitre suivant.

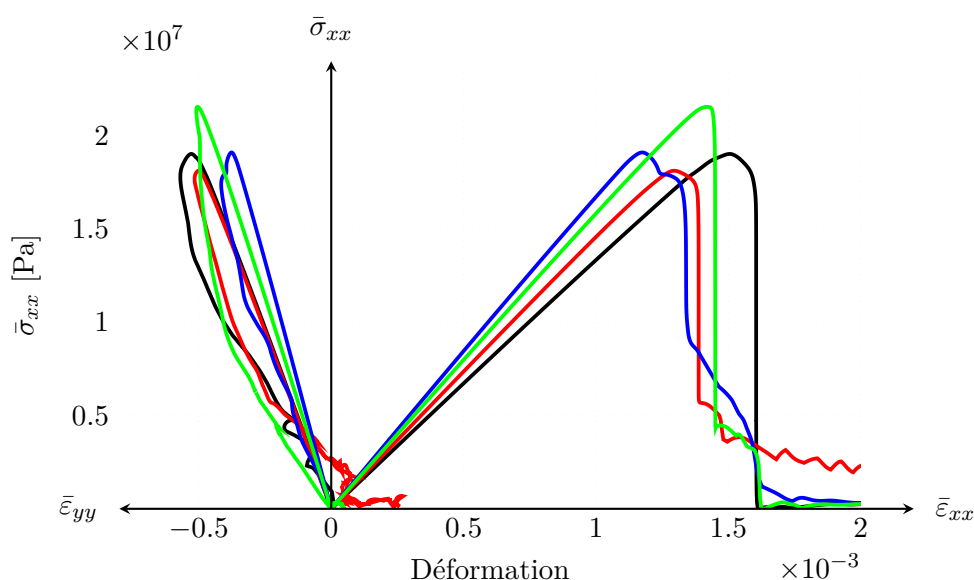


FIGURE 5.32 – Réponse en traction pour quatre réalisations distinctes de la microstructure générée à partir du même modèle de Voronoï, et avec la même fraction volumique d'interphase.

5.3 Mise en œuvre simultanée des deux mécanismes

Pour terminer ce chapitre, deux simulations sont réalisées dans le but de vérifier que les deux mécanismes de microfissuration peuvent être mis en œuvre simultanément pour chacun des deux types de sollicitation. Ces simulations utilisent les mêmes microstructures que précédemment, contenant 50 grains, de même que l'algorithme séquentiel à pas fixe (0,03 K pour les sollicitations thermiques, 10^{-5} pour la traction) et les mêmes propriétés des phases. On utilise les valeurs communes $\ell = 2$ pixels, $\eta_\varepsilon = 10^{-8}$, $k = 10^{-3}$, et les simulations sont arrêtées avant percolation des fissures pour en réduire

le coût. Enfin, la valeur $g_c = 0,5 \text{ J.m}^{-2}$ est choisie arbitrairement pour l'interphase d'épaisseur 4 pixels.

Les figures 5.33, 5.34 et 5.35, 5.36 comparent les résultats de ces deux simulations à ceux obtenus plus haut avec les paramètres standards, sous sollicitations thermique et de traction respectivement. On observe que, dans les deux cas, les deux mécanismes de microfissuration sont bien actifs simultanément, et que les simulations ont pu être menées à leur terme sans difficulté.

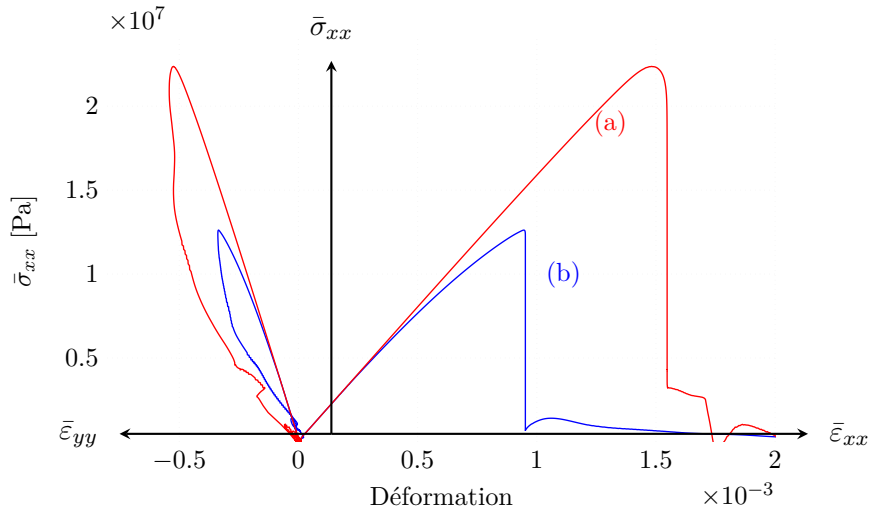
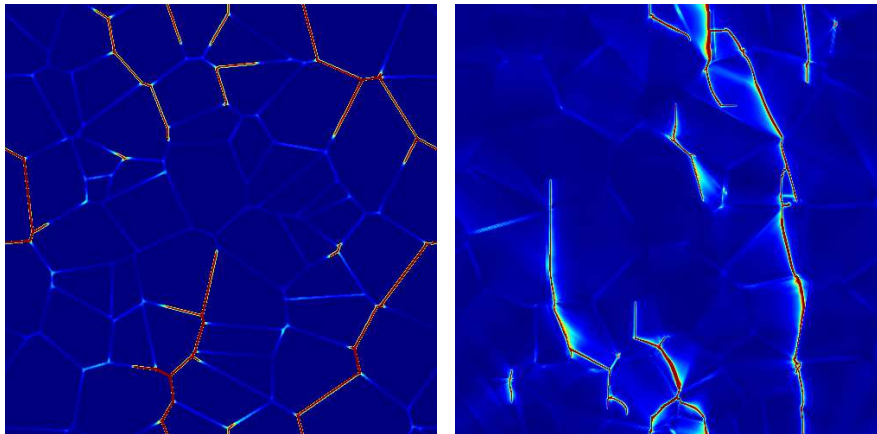


FIGURE 5.33 – Comparaison de la contrainte en fonction de la déformation (a-rouge) intergranulaire seule, (b-bleu) intergranulaire et transgranulaire.



(a) Intergranulaire

(b) Inter & trans-granulaire

FIGURE 5.34 – Comparaison des champs de phase finaux

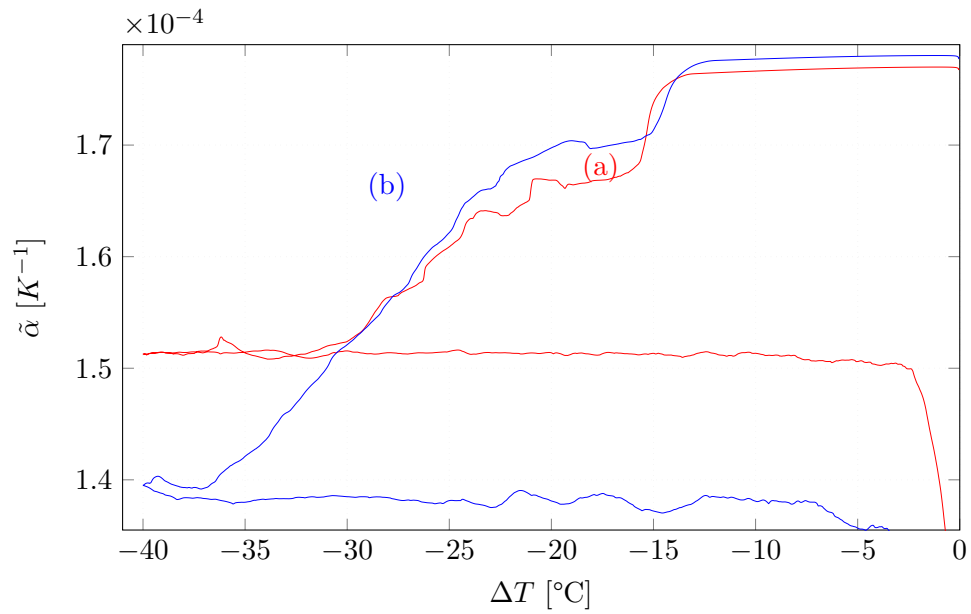


FIGURE 5.35 – Comparaison du coefficient de dilatation thermique. (a-rouge) sans liant, (b-bleu) avec liant.

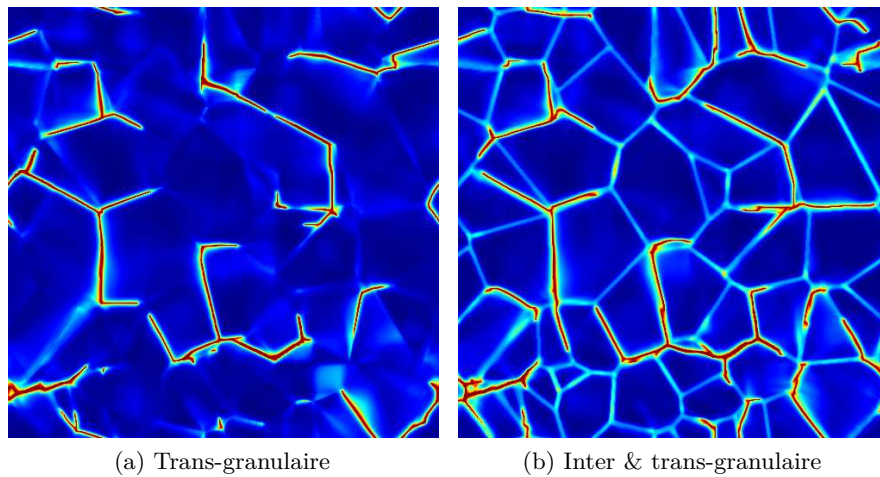


FIGURE 5.36 – Comparaison des champs de phase finaux.

Chapitre 6

Volumes élémentaires représentatifs

En plus des différents paramètres numériques liés à la méthode champ de phase qui sont étudiés en détail dans le chapitre précédent, il est nécessaire de prendre en compte l'effet de la taille des systèmes sur les prédictions numériques. Pour cela, nous exploitons deux calculs obtenus sous chargement thermique et en traction uni-axiale. On utilise la théorie de Matheron pour évaluer la représentativité des solutions, que l'on applique aux cartes d'énergie locale des champs. On estime ainsi la taille des volumes élémentaires représentatifs pour une erreur fixée et l'influence de la fissuration. On étudie par ailleurs les corrélations éventuelles entre orientation des grains et direction de propagation des fissures.

6.1 Introduction

Les travaux du chapitre précédent ont consisté à valider l'algorithme. Cependant, on a vu (cf. notamment la figure 5.32) que la petite taille des microstructures choisies implique une importante variabilité statistique. Le présent chapitre a pour vocation de réaliser des simulations sur des microstructures de plus grandes tailles, afin de déterminer les conditions nécessaires de représentativité. En d'autres termes, il s'agit ici d'estimer le volume élémentaire représentatif (VER), de façon à estimer la taille minimale des simulations à réaliser dans la suite de ce travail. Parallèlement à ces estimations, on procède à une rapide étude des champs de chacune des simulations.

Cette estimation est faite dans ce qui suit sur des microstructures bi-dimensionnelles, pour lesquelles il est plus pertinent de parler de surface élémentaire représentative. Par commodité de langage, cependant, on conservera l'appellation de « VER », et l'appellation de « volume » pour se référer à des surfaces, exprimées en mm^2 ou en pixels.

Ces travaux sont réalisés pour le même type de microstructures et de sollicitations qu'au chapitre précédent, et en séparant également les deux mécanismes de microfissuration. Du fait de la relative lenteur de l'algorithme, il n'est actuellement pas envisageable de procéder à des simulations de grande taille en géométrie tridimensionnelle. Cette étude sera donc réalisée sur des microstructures planes de 2000^2 pixels, comportant environ 1000 grains.

En toute rigueur, l'estimation de la taille d'un VER consiste à réaliser des séries de simulations de tailles croissantes, pour un nombre statistiquement suffisant de réalisations de la microstructure pour chaque taille de simulation. Le VER est atteint lorsque la variabilité statistique de la propriété considérée devient acceptable. On obtient alors une estimation de la taille du VER, associée à une erreur statistique représentée par l'écart-type choisi pour la propriété considérée [276].

En pratique, cependant, cette procédure implique de nombreuses simulations de grandes tailles, et s'avère le plus souvent impraticable. Une méthode alternative se base sur une unique simulation sur un domaine de grande taille, dont on contrôle a posteriori qu'il est représentatif [276]. On découpe ce domaine en sous-domaines disjoints de tailles décroissantes. La moyenne de la propriété d'intérêt, notée Z , est calculée sur chaque sous-domaine, puis la variance normalisée $\frac{D_Z^2(S)}{D^2}$ de cette moyenne est calculée sur les n sous-domaines de même taille S . Si l'on admet que l'erreur statistique relative ε_Z sur la valeur de Z est décrite par l'écart-type, on peut écrire :

$$\varepsilon_Z = \frac{2D_Z(S)}{\langle Z \rangle \sqrt{n}} \quad (6.1)$$

Il est alors possible de choisir ε_Z et d'en déduire la taille S du VER, ou de choisir la taille du VER, et de calculer le nombre n de réalisations nécessaires à la détermination de Z avec la même erreur statistique [276].

On sait, depuis les travaux de Matheron [277], qu'asymptotiquement, pour un champ stationnaire :

$$D_Z^2(S) \sim \frac{A_2}{S} D^2, \quad S \gg A_2, \quad (6.2)$$

où $A_2 = \int_{\mathbb{R}^2} d^2x \rho(x)$ désigne la portée intégrale et $\rho(x)$ est la fonction de corrélation [278].

$$\rho(h) = \frac{\langle Z(x+h)Z(x) \rangle - \langle Z(x+h) \rangle \langle Z(x) \rangle}{\langle Z^2(x) \rangle - \langle Z(x) \rangle^2} \quad ; \quad x \in \mathbb{R}^2 \quad (6.3)$$

Le comportement asymptotique (6.2) donne la loi attendue pour la variance de grandeurs statistiquement non corrélées où D^2 est la variance ponctuelle définie par :

$$D^2 = \langle Z^2 \rangle - \langle Z \rangle^2 \quad (6.4)$$

Paramètre	Valeur
Taille du domaine	$1.27 \times 1.27 \text{ mm}^2$
Discretisation du domaine	2000×2000 pixels
Pas de chargement	-0.05 K
Module de référence	150 GPa
Longueur caractéristique	$\ell = 2$ pixels
Nombre de grains	1000
Pas adaptatif	Non
Critères de convergence	$\eta_\varepsilon = 10^{-8}$
	$\eta_\phi = 10^{-8}$
	$\eta_s = 50 \text{ kPa}$

TABLE 6.1 – Paramètres de la sollicitation en sollicitation thermique. La résolution est de 4000 pixels par grain, soit un diamètre moyen d’environ 65 pixels par grain.

Dans le cas où il existe des corrélations à toutes les échelles (ρ de support non borné), la portée intégrale A_2 peut être infinie, auquel cas la relation (6.2) n’est plus vérifiée, et la variance décroît alors plus lentement. Notamment, celle-ci se traduit par une loi de puissance fractionnaire $D_Z^2(S) \sim 1/S^\alpha$ où $\alpha < 1$ en lieu et place de (6.2), par exemple dans les milieux fibreux [279].

Cette méthode présente deux biais. D’une part, si le nombre de sous-volumes associé à l’erreur choisie n’est pas suffisant, cette dernière est statistiquement mal définie. D’autre part, chaque sous-volume n’est pas exactement soumis aux mêmes conditions aux limites que la simulation qui sert à les définir. Elle permet néanmoins d’obtenir une estimation rapide du VER associé à une grandeur d’intérêt et une sollicitation données, et sera retenue dans ce qui suit.

6.2 Microfissuration transgranulaire sous sollicitations thermiques

On réalise la simulation d’un cycle thermique $\Delta T = 0 \rightarrow -150 \rightarrow 0^\circ\text{C}$ sur un polycristal de Voronoï. Les paramètres de cette simulation sont rappelés dans le tableau 6.1.

6.2.1 Résultats de simulation

La figure 6.1 donne l’évolution du coefficient de dilatation thermique volumique effectif. L’allure générale est analogue à celle des simulations du chapitre précédent. On note cependant quelques différences. D’abord, l’évolution du coefficient de dilatation thermique est nettement plus régulière, ce qui s’explique par le grand nombre de microfissures générées, comme le montrent les cartes de champ de phase obtenues à $\Delta T = -25, -50$ et -150°C (figure 6.2). Ensuite, on observe que le coefficient de dilatation

effectif n'évolue plus à partir de $\Delta T = -115^\circ\text{C}$ environ, qui correspond aux conditions pour lesquelles la percolation des microfissures est atteinte.

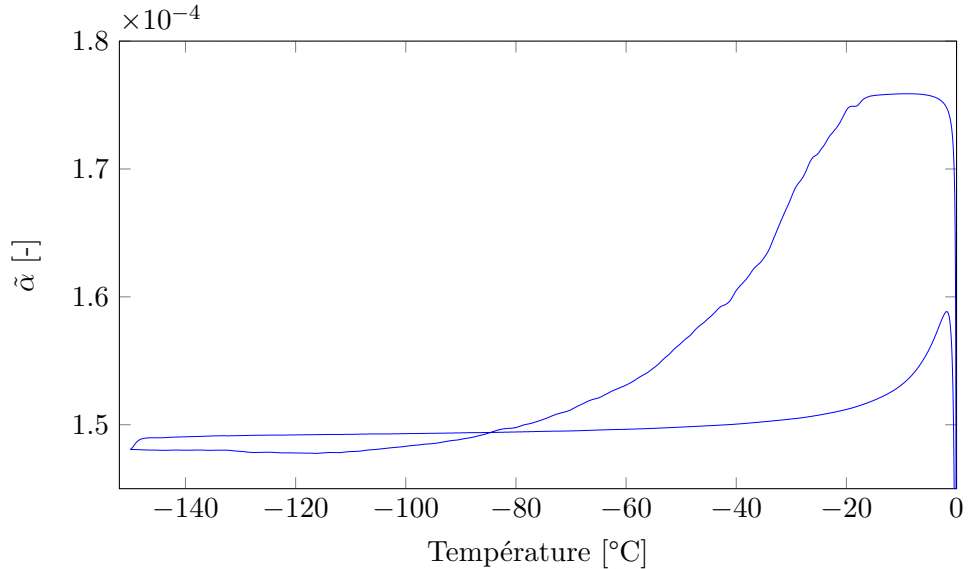


FIGURE 6.1 – Variation du coefficient de dilatation thermique volumique effectif.

6.2.2 Étude du champ de microfissures

La figure 6.2 montre tout d'abord qu'une part majoritaire des microfissures contourne les grains, ce bien que la rupture intergranulaire ne soit pas prise en compte dans la simulation. En réalité, une microfissure se situe nécessairement dans un grain, mais possède une forte probabilité de se trouver à proximité immédiate d'un joint.

Ensuite, les travaux antérieurs [48] avaient montré que, dans le cas transgranulaire, la décroissance du coefficient de dilatation thermique volumique effectif est due à la corrélation entre l'orientation des microfissures et celle des cristaux. Plus exactement, le coefficient de dilatation thermique effectif décroît lorsqu'une majorité de microfissures se trouvent dans le plan graphitique, et augmente dans le cas contraire.

Il est donc intéressant d'étudier la distribution d'orientations des fissures de la présente simulation, par rapport à l'orientation cristallographique de chaque grain. Un algorithme, inspiré des travaux de Jain et Farrokhnia [280] a été mis en place à cet effet, et donne les résultats de la figure 6.3 pour $\Delta T = -50^\circ\text{C}$. Pour une meilleure lisibilité, les résultats sont présentés sous forme d'histogrammes pour $\Delta T = -25$, -50 et -150°C sur la figure 6.4, en distinguant les populations de microfissures traversant les grains (transgranulaires) et les contournant (qualifiées abusivement d'intergranulaires).

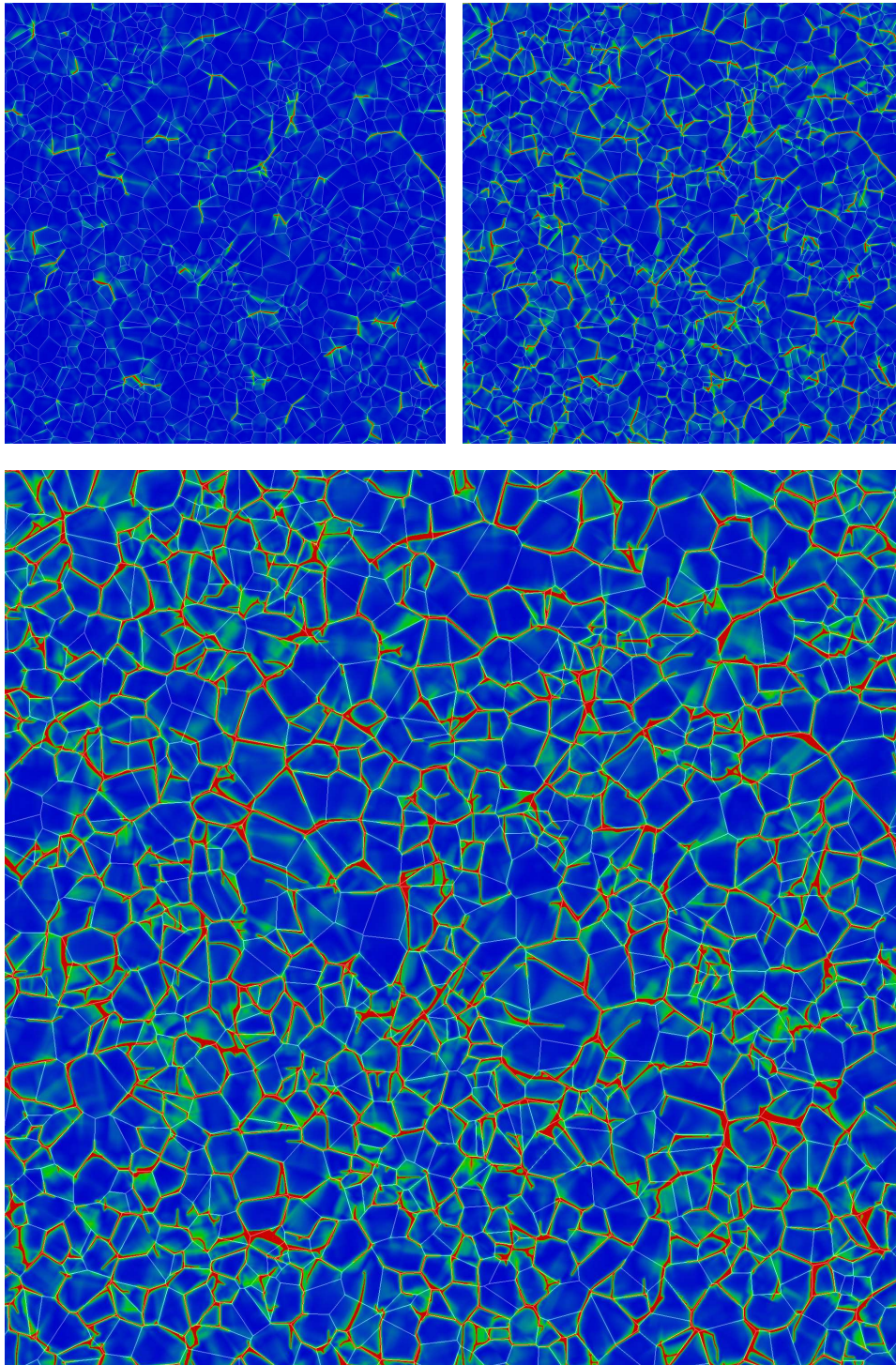


FIGURE 6.2 – Champ de phase à $\Delta T = -25^\circ\text{C}$ en haut à gauche), -50°C (en haut à droite) et -150°C (en bas).

Aux trois températures représentées, aucun histogramme ne montre de corrélation claire entre l'orientation des fissures et celle des grains. Ce résultat inattendu n'est pas expliqué à ce stade, mais pourrait être dû à la formulation incomplète du contact unilatéral. Remarquons cependant que seule l'influence des corrélations d'orientation des microfissures transgranulaires avait été étudiée dans les travaux antérieurs [48], alors que les microfissures intergranulaires sont majoritaires dans le cas présent.

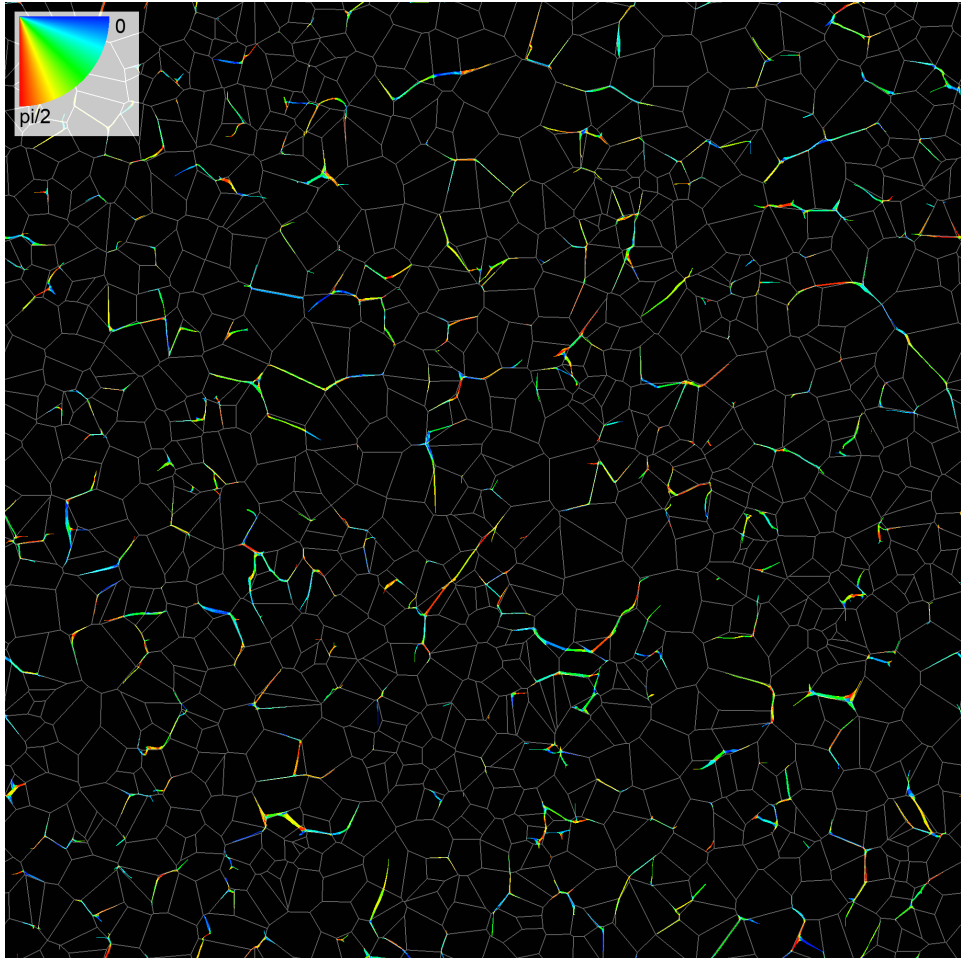


FIGURE 6.3 – Carte d'orientation des microfissures dans le repère cristallographique pour $\Delta T = -50^\circ\text{C}$.

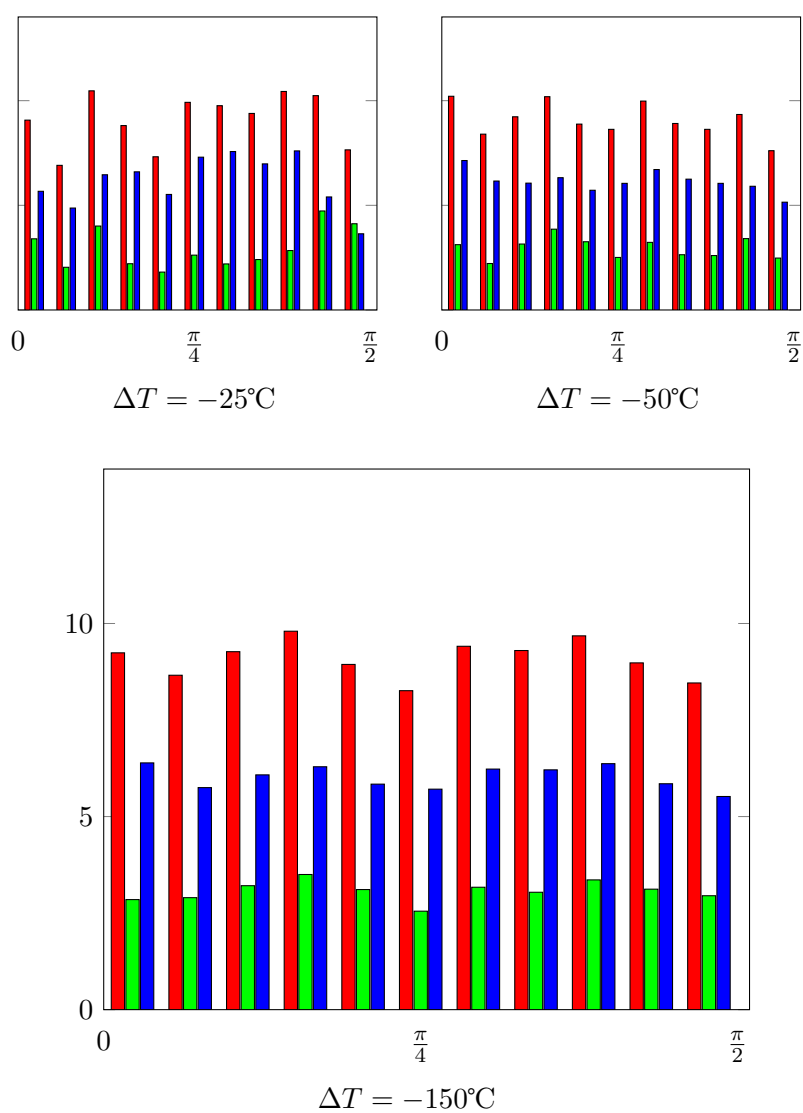


FIGURE 6.4 – Répartition de l'orientation locale des microfissures par rapport au cristal pour $\Delta T = -25^\circ\text{C}$ (en haut à gauche), -50°C (en haut à droite) et -150°C (en bas). Microfissures intergranulaires (bleu), transgranulaires (vert), totales (rouge).

6.2.3 Volume élémentaire représentatif

Pour estimer la taille du volume élémentaire représentatif, on utilise la relation (6.1) avec les résultats de la simulation présentée ci-dessus, en choisissant comme propriété d'intérêt Z l'énergie élastique, l'énergie de fissure, ou l'énergie totale (somme des deux). La figure 6.5 présente un diagramme de variance et d'erreur relative de l'énergie totale en fonction de la taille S des sous-domaines en représentation bi-logarithmique, pour $\Delta T = -1, -25, -50$ et -75°C .

Concernant la variance normalisée, elle vaut 1 lorsque $S = 1$ pixels, et reste proche de cette valeur jusqu'à $S = 100$ pixels environ. On note ensuite une inflexion, la variance diminuant pour atteindre un régime linéaire doté d'une pente de -1 aux grands volumes, caractéristique des microstructures isotropes [281, 282]. La fin de ce régime est extrêmement bruitée, ce qui s'explique par le petit nombre de sous-domaines utilisés pour le calcul de la variance dans cette zone. Cette première courbe permet de déterminer la portée intégrale A_2 à 63^2 pixels en début de simulation et à 20^2 pixels en fin de simulation.

Le diagramme de droite, sur l'erreur relative, permet de déterminer l'erreur statistique sur l'estimation de $\langle Z \rangle$ pour un domaine de taille donnée. Par exemple, pour un domaine de 500×500 pixels (63 grains), on trouve une erreur de l'ordre de 10% . De même, on peut estimer directement la taille du VER pour une erreur de 10^{-2} (soit 1%). Par exemple, le VER est de l'ordre de 10^8 pixels (environs $25\,000$ grains). La figure 6.6 donne l'erreur sur l'énergie totale, élastique et de fissure pour un domaine de 500×500 pixels, tandis que la figure 6.7 donne la taille du domaine permettant d'estimer ces trois propriétés avec une précision de 40% .

On peut procéder de la même façon pour d'autres propriétés comme par exemple le coefficient de dilatation thermique effectif.

Température	Portée intégrale $A_2^{\bar{\alpha}}$
-25°C	16×16
-50°C	15×15
-75°C	13×13

TABLE 6.2 – Portée intégrale sur le coefficient de dilatation thermique $\bar{\alpha}$ obtenue à partir de la trace de la déformation.

Par comparaison aux travaux antérieurs [96] ($A_3^\alpha = 34^3$ voxels), les portées intégrales, sur le coefficient de dilatation thermique, sont un peu plus faibles comme le montre le tableau 6.2. Cet écart peut s'expliquer par la différence de microstructure, Voronoï contre JMA et l'utilisation d'une microstructure 2D et non 3D. Comme on l'a dit plus haut, la procédure suivie ici implique que les sous-domaines utilisés pour estimer la variance

ne sont pas soumis aux mêmes conditions aux limites que la simulation sur le domaine entier, ici la nullité de toutes les composantes des contraintes macroscopiques imposées. A titre indicatif, la figure 6.8 donne l'évolution de l'écart-type sur la composante $\langle \sigma_{yy} \rangle$ en fonction de la taille des sous-domaines. On constate qu'au-dessous d'une taille de 200×200 pixels, l'écart-type de cette composante est supérieur à 1 MPa, valeur non négligeable en présence de microfissures. On constate par ailleurs que cet écart-type diminue lorsque la densité de microfissures augmente, ce qui est naturel, puisque la présence de microfissures a pour effet de relaxer les contraintes locales.

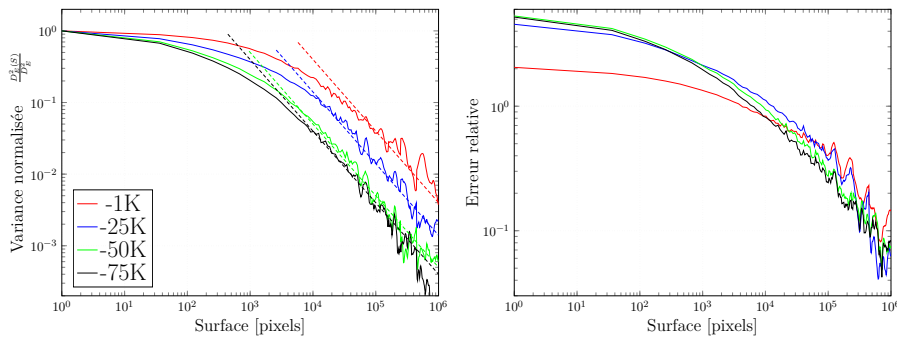


FIGURE 6.5 – Variance normalisée et erreur statistique sur l'énergie totale en fonction de la taille du domaine pour $\Delta T = -1^\circ\text{C}$ (en rouge), -25°C (en bleu), -50°C (en vert) et -75°C (en noir).

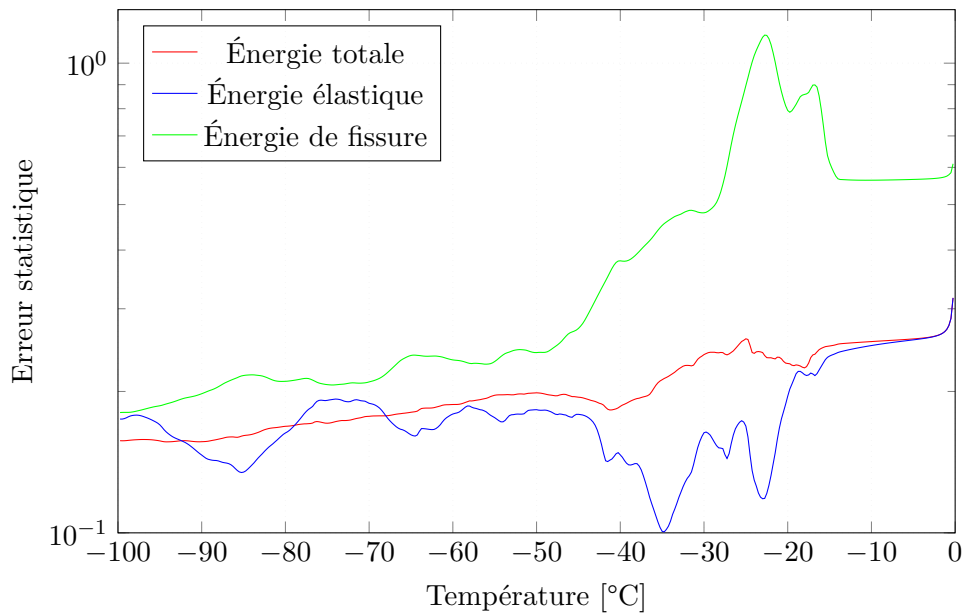


FIGURE 6.6 – Évolution de l'erreur statistique pour un volume de 500×500 pixels sur l'énergie totale, élastique et de fissuration.

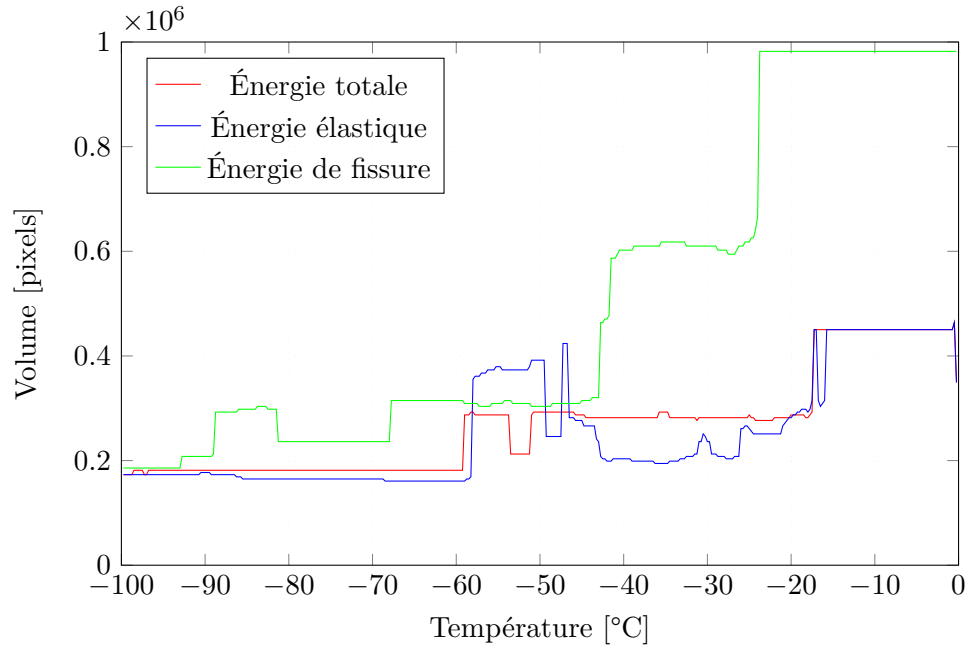


FIGURE 6.7 – Taille du domaine nécessaire pour atteindre 40% de précision sur l'énergie totale, élastique et de fissuration.

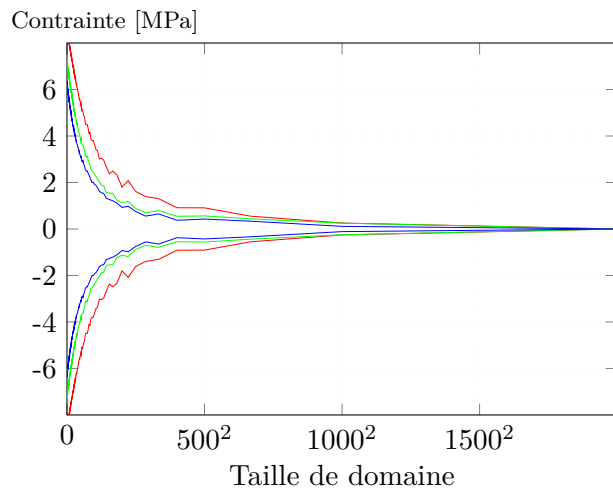


FIGURE 6.8 – Écart-type de la contrainte $\langle \sigma_{yy} \rangle$ pour $\Delta T = -25^\circ\text{C}$ (rouge), -50°C (vert) et -75°C (bleu) en fonction de la taille de domaine considéré.

6.2.4 Distributions

La figure 6.9 présente les histogrammes de l'énergie totale (en haut) et de l'énergie élastique (en bas), et celui relatif à l'énergie de fissure fait l'objet de la figure 6.10, pour $\Delta T = -25$ (en rouge), -50 (en vert) et -75°C (en bleu).

L'histogramme relatif à la partie élastique de l'énergie n'apporte que peu d'informations. L'énergie élastique augmente globalement au cours du chargement, et l'histogramme ne présente que le pic d'énergie nulle, correspondant approximativement aux microfissures ouvertes.

L'histogramme relatif à l'énergie de fissures indique d'abord que, pour les trois situations illustrées, l'énergie de fissures est nettement plus faible que l'énergie élastique. Cet histogramme présente trois pics. Le premier correspond à une énergie nulle, et concerne les pixels situés loin des microfissures. Le deuxième, matérialisé par le symbole \otimes , est centré sur une énergie d'environ $0,18 \text{ MJ.m}^{-3}$. Si l'on opère la décomposition de l'énergie de fissures en un terme en champ de phase $\frac{g_c}{2\ell}\phi^2$ et un terme en gradient $\frac{g_c\ell}{2}\nabla\phi \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla\phi$, on observe que ce pic se retrouve sur l'histogramme correspondant au terme en ϕ^2 , et correspond exactement à la valeur de ce terme pour $\phi = 1$.

Le troisième pic, situé aux environs de $0,12 \text{ MJ.m}^{-3}$ et matérialisé par le symbole \oplus sur la figure 6.10, correspond quant à lui aux pixels pour lesquels le gradient du champ de phase est maximal.

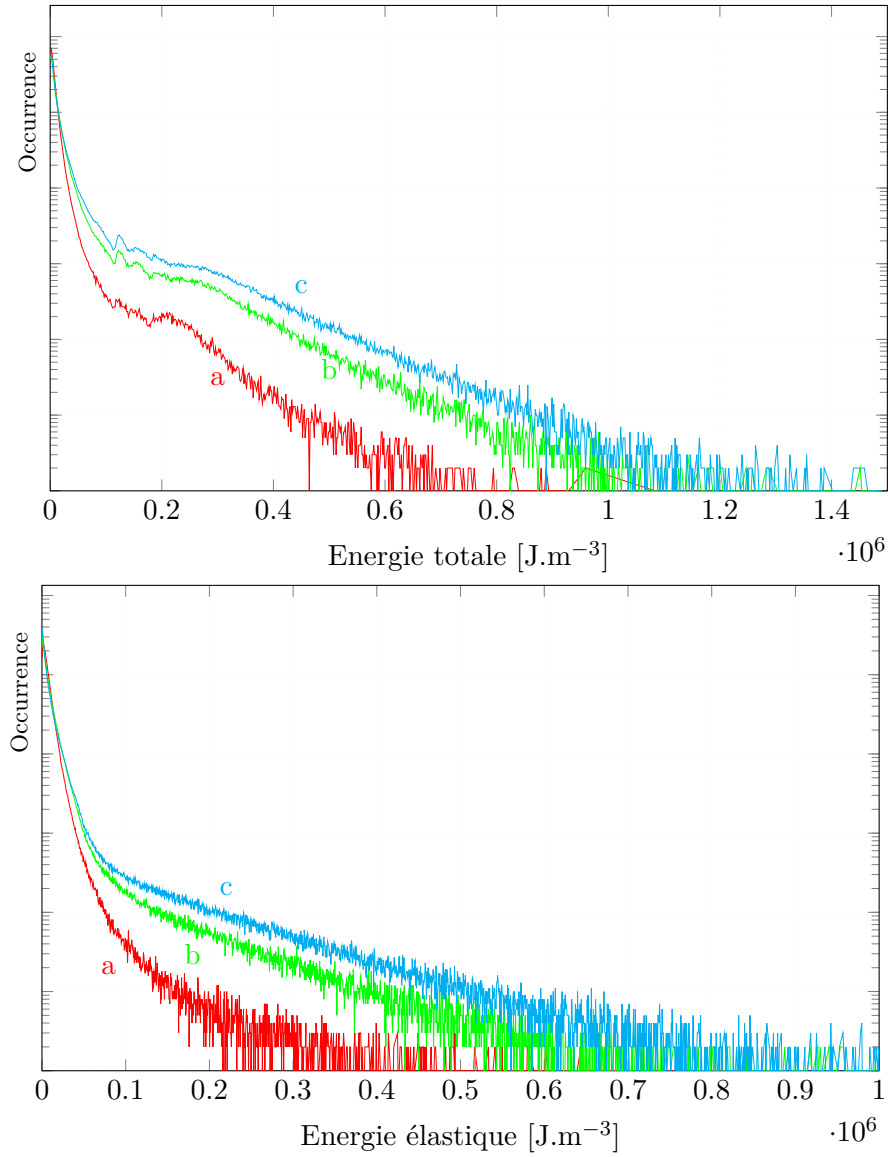


FIGURE 6.9 – Histogramme des densités d'énergie totale (en haut) et élastique (en bas) pour $\Delta T = -25^\circ\text{C}$ (a-rouge), -50°C (b-vert) et -75°C (c-bleu).

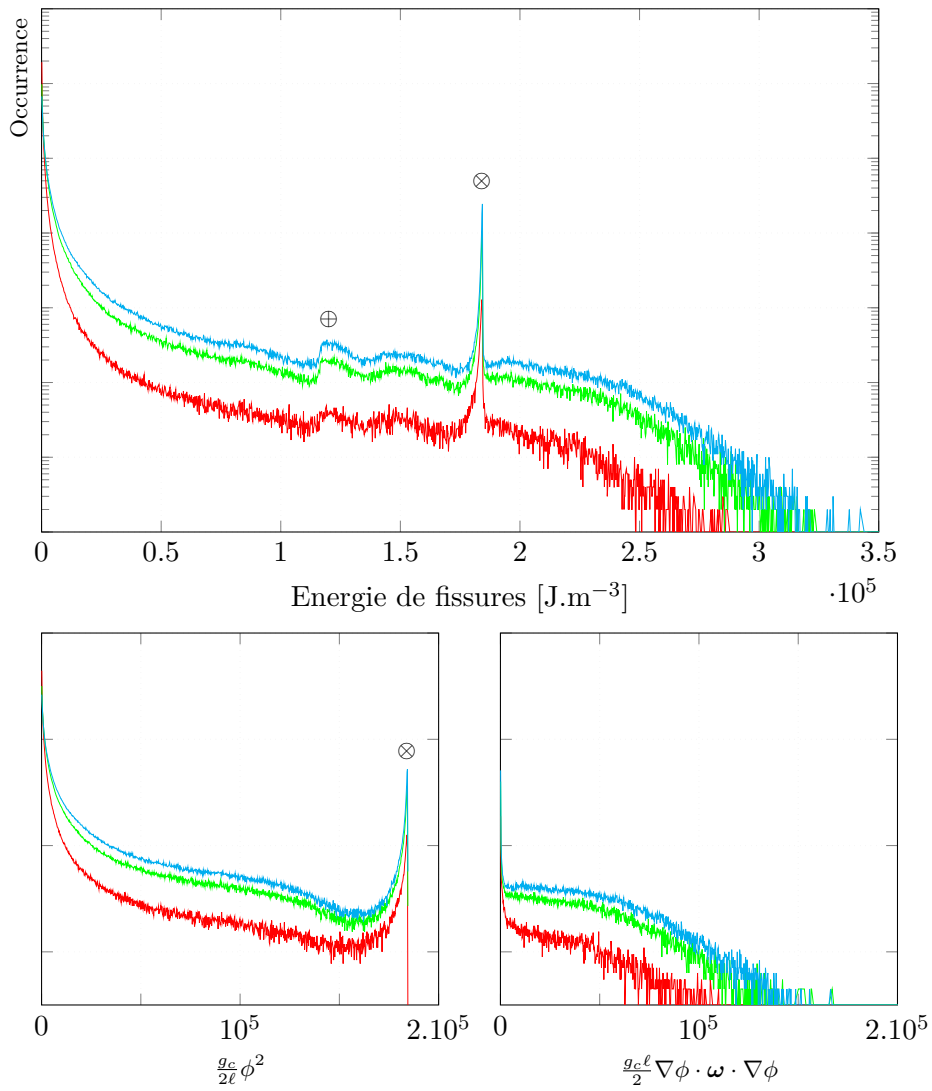


FIGURE 6.10 – Histogramme de la densité d'énergie de fissures (graphique principal) pour $\Delta T = -25^\circ\text{C}$ (a-rouge), -50°C (b-vert) et -75°C (c-bleu). Les deux graphiques inférieurs donnent chacun des composantes de l'énergie de fissures.

6.3 Microfissuration intergranulaire en traction uniaxiale

On réalise la simulation d'une traction uniaxiale monotone sur une microstructure polycristalline jointoyée, générée à partir d'un modèle de Voronoï. Les paramètres de cette simulation sont rappelés dans le tableau 6.3.

Paramètre	Valeur
Taille du domaine	$0,56 \times 0,56 \text{ mm}^2$ $2000 \times 2000 \text{ pixels}$
Pas de chargement initial	5×10^{-6}
Module de référence	150 GPa
Longueur caractéristique	$\ell = 2 \text{ pixels}$
Nombre de grains	500
Pas adaptatif	Oui
Critères de convergence	$\eta_\varepsilon = 1 \times 10^{-8}$ $\eta_\phi = 1 \times 10^{-6}$ $\eta_s = 1 \text{ kPa}$
Épaisseur de l'interphase	$w = 4 \text{ pixels}$

TABLE 6.3 – Paramètres des simulations de traction uniaxiale.

6.3.1 Résultats de simulation

La figure 6.11 présente l'évolution de la contrainte longitudinale macroscopique $\langle \sigma_{xx} \rangle$ et de la déformation transversale macroscopique $\langle \varepsilon_{yy} \rangle$ en fonction du chargement imposé E_{xx} . Trois phases peuvent être distinguées. La première correspond à la réponse linéaire du matériau, et s'achève avec l'apparition de la fissuration (marqueur A). La deuxième correspond à la fissuration du matériau jusqu'à la percolation (marqueur B). L'effet du pas adaptatif développé au paragraphe 4.2 se traduit par la chute très brutale de la contrainte macroscopique sans évolution de la déformation macroscopique longitudinale. Enfin, la dernière phase correspond à la réponse du matériau après la rupture, la contrainte longitudinale macroscopique étant proche de zéro, mais pas exactement nulle. Ceci provient essentiellement du paramètre de régularisation k , qui impose une rigidité résiduelle faible mais non nulle, et induit donc des contraintes résiduelles de faible amplitude.

Les numéros indiqués sur la figure 6.11 permettent de repérer l'état de fissuration de la microstructure au cours du chargement, présenté sur la figure 6.12, pour laquelle la direction du chargement est horizontale. Les couleurs indiquent le moment de fracturation comme suit :

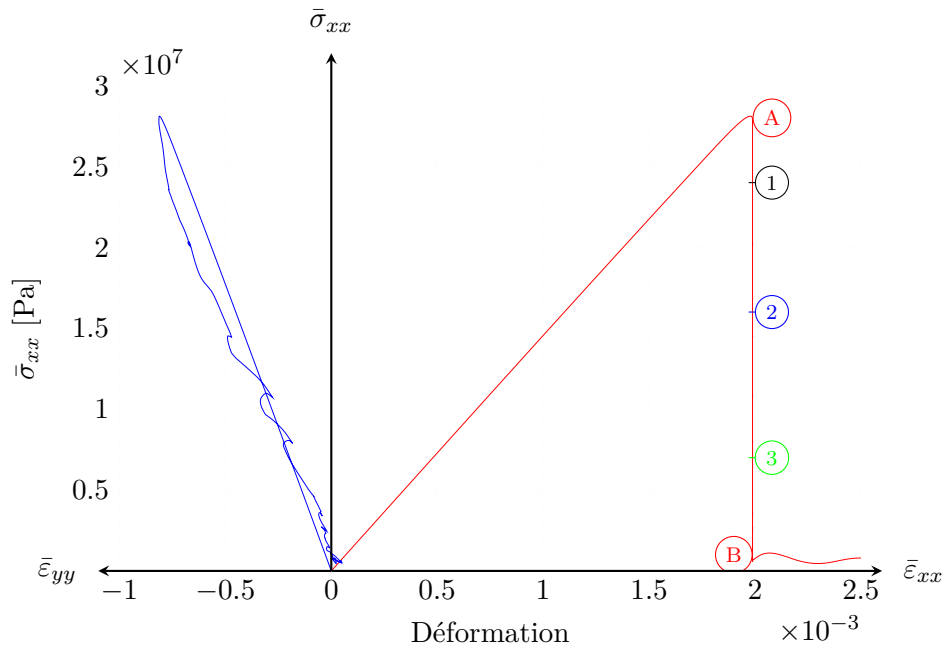


FIGURE 6.11 – Réponse prédite en traction uniaxiale.

$\langle \sigma_{xx} \rangle$ [MPa]	Marqueur	Couleur
28 \rightarrow 24	(A) \rightarrow (1)	noir
24 \rightarrow 16	(1) \rightarrow (2)	bleu
16 \rightarrow 7	(2) \rightarrow (3)	vert
7 \rightarrow 0	(3) \rightarrow (B)	rouge

L'initiation du processus de rupture (état 1) est multiple. Même si la propagation peut être observée sur plusieurs sites (états 2 et 3), une fissure principale se développe, et finit par percoler (état B). On note que la fissure principale est extrêmement tortueuse, globalement approximativement perpendiculaire à la direction de chargement, mais que la phase finale du processus invoque des directions de propagation très différentes de celle du chargement.

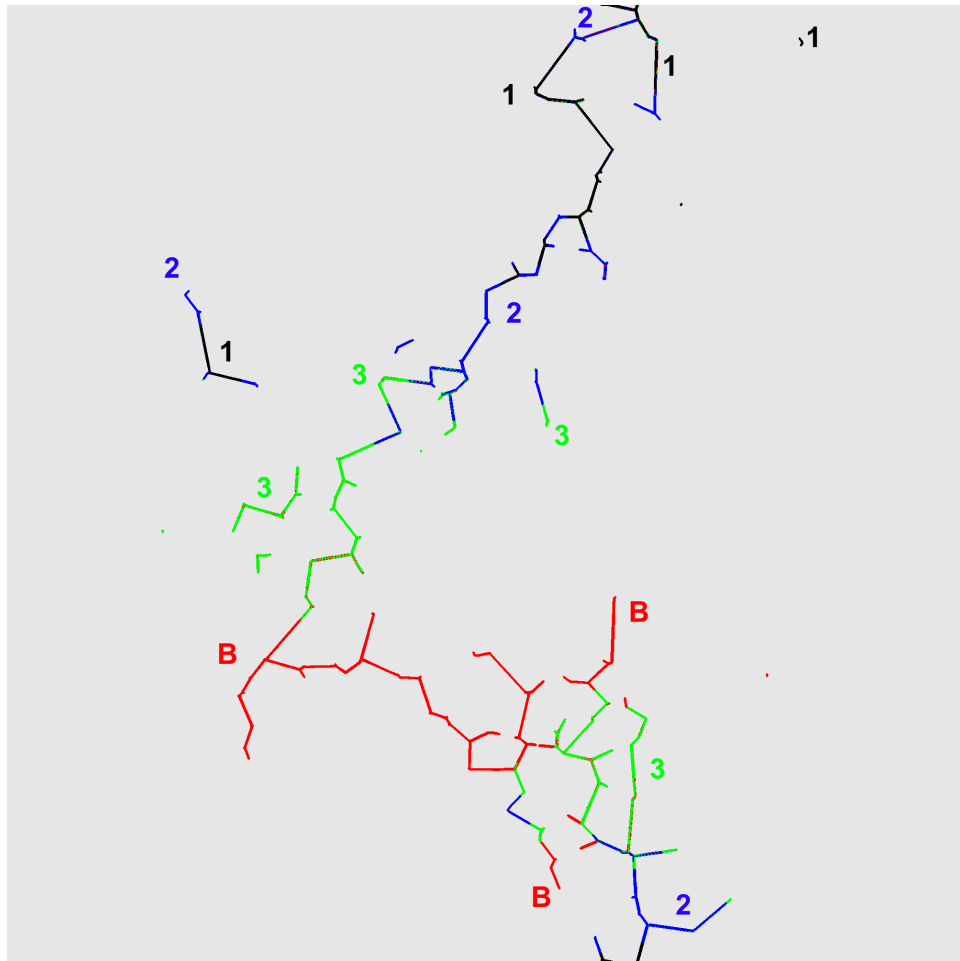


FIGURE 6.12 – Champ de phase pendant la rupture, $\langle \sigma_{xx} \rangle = 2,4 \times 10^7 Pa$ (1-noir), $\langle \sigma_{xx} \rangle = 1,6 \times 10^7 Pa$ (2-bleu), $\langle \sigma_{xx} \rangle = 6,8 \times 10^6 Pa$ (3-vert) et à l'état rompu (B-rouge).

6.3.2 Volume élémentaire représentatif

On reprend ici la méthodologie employée au paragraphe précédent. Les figures 6.13 et 6.14 présentent les diagrammes de variance normalisée et d'erreur relative sur l'énergie totale et sur ses composantes, l'énergie élastique et de fissure. Ces six graphiques sont toujours tracés en fonction de la taille S des sous-domaines en représentation bi-logarithmique, pour trois étapes du chargement, avant fissuration (en vert), pendant la propagation (état 2, en bleu), et après rupture (état B, en rouge).

En ce qui concerne l'énergie totale, contrairement au cas précédent, on observe que les pentes de la variance normalisée correspondant aux grands volumes varient au cours du chargement et que, pour la microstructure utilisée pour la simulation, la détermination d'un VER n'est possible que pour une erreur statistique supérieure à 80% environ. A l'inverse des chargements thermiques, la taille du VER tend à augmenter au cours du chargement. Par extrapolation, on en déduit que pour avoir une précision de 10% sur l'énergie totale, il faudrait une surface de 4472×4472 pixels (environ 2500 grains) avant l'endommagement et 1000000×1000000 pixels (environ 125 millions de grains) après la rupture.

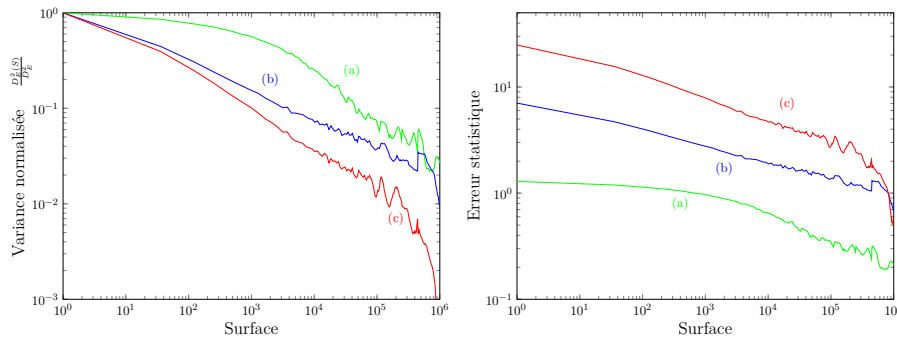


FIGURE 6.13 – graphique de gauche : variance normalisée, graphique de droite, erreur statistique sur l'énergie totale en fonction du volume de la cellule avant initiation (itération 200, a-vert), pendant la propagation (itération 600, marqueur 2, b-bleu) et après rupture (itération 1050, marqueur B, c-rouge).

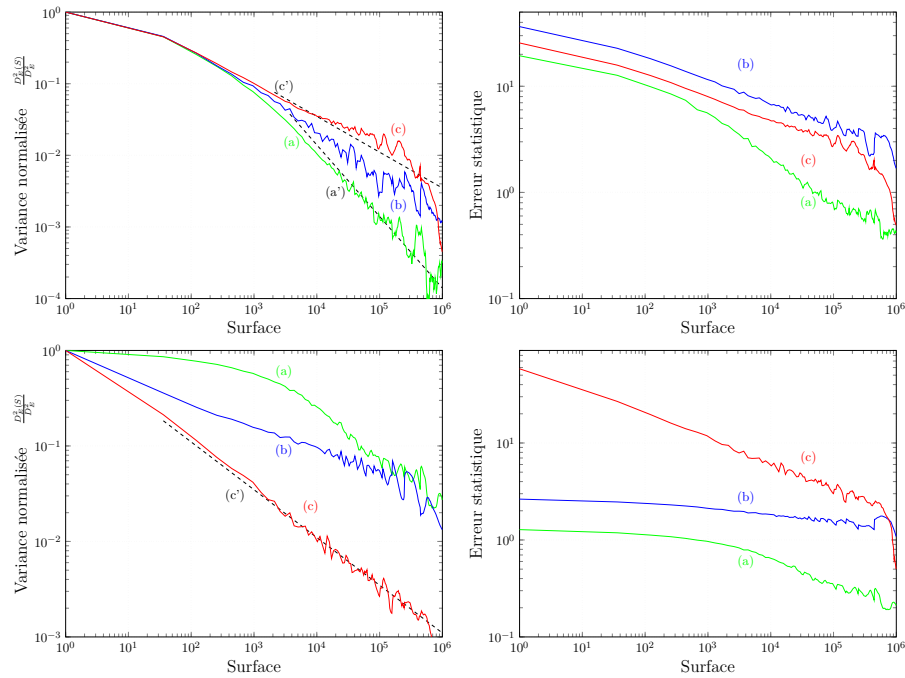


FIGURE 6.14 – Variance normalisée (gauche) et erreur statistique (droite) sur l'énergie de rupture (en haut) et sur l'énergie élastique (en bas) en fonction du volume de sous-domaine avant initiation (a-vert), pendant la propagation (marqueur A, b-bleu) et à l'état rompu (marqueur B, c-rouge). Les deux traits pointillés indiquent les pentes de -1 en (a') et de $-1/2$ en (c').

On observe une tendance plus complexe pour l'énergie de fissure. En effet, la taille du VER augmente puis diminue au cours du chargement, et peut être déterminée pour une erreur statistique de 100%. On observe en outre que la pente de la variance normalisée relative aux grands volumes tend à augmenter progressivement, et passe de -1 à l'état initial à $-1/2$ à l'état fracturé. On sait [281, 282] que la valeur de -1 est généralement obtenue pour des microstructures isotropes, ce qui correspond bien à la fois à l'état initial et à l'état endommagé après sollicitations thermiques. En deux dimensions, la valeur $-1/2$ est obtenue pour des microstructures contenant des objets fins allongés, dont la longueur est au moins aussi grande que le plus grand champ de vision, ce qui correspond bien à la fissure principale observée à l'état rompu en traction simple.

En ce qui concerne l'énergie élastique, le volume de la simulation en traction est insuffisant pour déterminer le VER à mieux que 100% environ (figure 6.14). Pour une erreur donnée, le VER augmente au cours du chargement. Pour le cas rompu, on observe en outre que la pente moyenne aux grands volumes de la variance est là encore de $-1/2$. La figure 6.15 montre comment évolue l'erreur relative au cours du chargement pour un volume de 500×500 sur l'énergie totale, de rupture, et élastique. Ce graphe

est représenté en fonction du numéro d'itération, pour permettre le suivi de l'évolution pendant la phase de rupture. L'évolution de la déformation appliquée est également indiquée (échelle de droite).

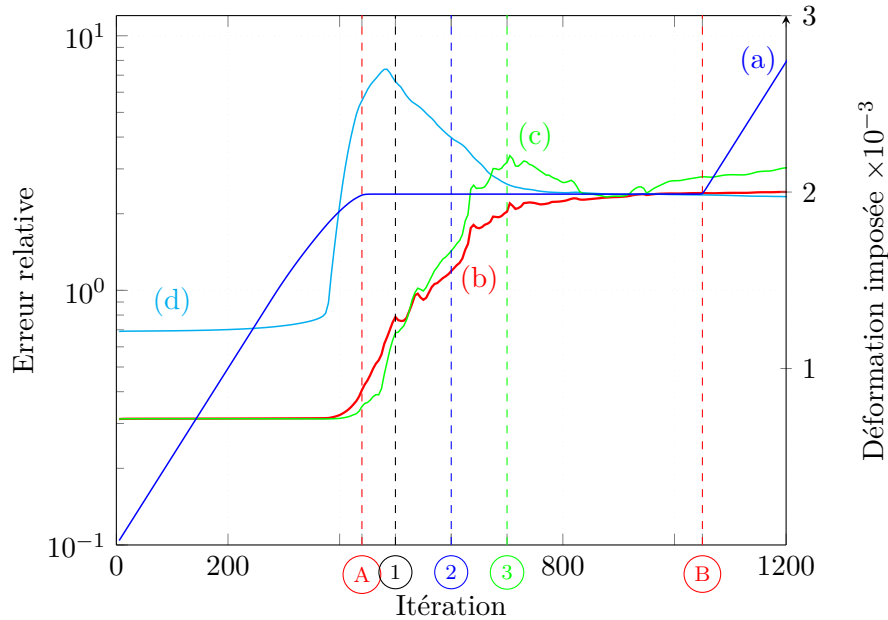


FIGURE 6.15 – Erreur associée à un volume de 500×500 pixels sur l'énergie totale (b-rouge), sur l'énergie de rupture (d-cyan) et sur l'énergie élastique (c-vert) en fonction du numéro d'itération. Échelle de droite : déformation longitudinale imposée (a-bleu).

6.3.3 Distributions

Les histogrammes de la figure 6.16 représentent la distribution de déformation volumique (en haut) et d'énergie élastique (en bas) à quatre étapes du chargement. Avant l'initiation de la microfissuration (courbe a), la distribution est de type Gaussienne tronquée, et découle uniquement de l'anisotropie cristalline du TATB. À partir du début du processus de rupture (courbes b et c), la distribution s'élargit, et une queue de distribution apparaît pour les valeurs positives de la déformation volumique, correspondant à l'ouverture des microfissures. Après percolation, la distribution présente un pic centré sur zéro, qui correspond au fait que la contrainte est nulle presque partout, et une queue de distribution correspondant, là encore, à l'ouverture des microfissures. L'histogramme du champ d'énergie élastique permet de faire les mêmes constats.

L'une des hypothèses de la modélisation menée dans cette thèse concerne l'hypothèse des petites déformations. La figure 6.16 montre que de très grandes déformations existent. Dans un contexte d'homogénéisation, ces déformations peuvent être acceptables à condition qu'elles n'interviennent

pas dans le calcul de la contrainte, en d'autre terme, qu'il s'agisse de fissures. Pour répondre à cette question, la figure 6.18 montre les valeurs du champ de phase en fonction de la déformation volumique. Cette histogramme est tracé pour l'itération n°600 (courbe verte de la figure 6.16). La courbe noire montre la distribution du champ de phase pour tous les pixels, tandis que les courbes verte et rouge, le champ de phase pour les pixels ayant une déformation supérieure à 1% et 10% respectivement. Ceci nous permet d'affirmer ici qu'aucun pixel avec une déformation supérieure à 1% ne possède un champ de phase inférieur à 0,8 (0,98 pour $tr\varepsilon > 10\%$) et que l'hypothèse des petites déformations est fondée.

La figure 6.17 présente l'histogramme du champ d'énergie de fissure aux mêmes instants du chargement. La présence du pic de faible énergie ($< 10^5 \text{ J.m}^{-3}$) est due au grand nombre de pixels peu ou pas endommagés. Pour les fortes énergies de rupture, on note la présence de trois pic repérés par les symboles \otimes , \ominus et \oplus . Pour comprendre l'origine de ces pics, on dissocie comme précédemment l'énergie de rupture en une partie due au champ de phase $\frac{g_c}{2\ell}\phi^2$ et une partie due à son gradient $\frac{g_c\ell}{2}\nabla\phi \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla\phi$.

Le pic labellisé \otimes se situe à la valeur d'énergie $\frac{g_c}{2\ell}$, et correspond donc au cœur des microfissures ($\phi = 1$). Ce pic n'apparaît pas sur la part de l'énergie de fissure liée au gradient du champ de phase. Les deux pic labellisés \ominus et \oplus y sont en revanche clairement visibles, mais n'apparaissent pas sur la part d'énergie de fissure liée au champ de phase. Ils correspondent aux lieux où le gradient du champ de phase est maximal, et donc aux « flancs » des microfissures.

On notera qu'en toute rigueur, le champ de phase et son gradient devraient être maximum au cœur des microfissures (voir le chapitre 3). On constate que tel n'est pas le cas ici. Ce hiatus provient du fait que l'évaluation du champ de phase est faite par une approximation de type différences finies, qui induit un décalage spatial d'un demi-pixel entre les maxima du champ de phase et de son gradient (voir la figure 6.19).

6.4 Conclusion

Dans le cas transgranulaire sous sollicitations thermiques, on a pu voir que le VER à 20% (correspondant à un volume de 500×500 , 63 grains) sur l'erreur relative est maximum dans l'état initial et décroît rapidement à mesure que les microfissures prennent naissance et se propagent. Le coefficient de dilatation thermique effectif peut être déterminé à environ 10% près par une simulation de 500×500 pixels dans l'état initial, et sa précision augmente au cours du chargement. Ainsi, les ordres de grandeur du VER sont comparables pour l'énergie et pour le coefficient de dilatation effectif.

Pour cette sollicitation, on a également vu sur les diagrammes donnant l'erreur statistique en fonction du volume de calcul que la pente moyenne aux

grands volumes est de -1 et ne varie pas durant le chargement, indiquant que la microstructure reste isotrope à l'état fissuré. Compte tenu de l'isotropie initiale du milieu et de l'isotropie du chargement, ce résultat n'a rien de surprenant.

Dans le cas intergranulaire en traction uniaxiale, on a pu voir qu'il n'est pas possible d'évaluer la taille du VER à mieux que 80% sur une simulation de 500×500 pixels dans l'état initial. La taille du VER est donc très supérieure dans le cas de la traction. Ces résultats corroborent les travaux antérieurs [47, 96], qui avaient montré, dans le cas élastique, qu'à domaine de calcul de taille donné, c'est le module de cisaillement qui est prédit avec le moins de précision. Là encore, la taille du VER décroît au cours du chargement. L'étude des composantes de l'énergie a permis de montrer que c'est la distribution d'énergie élastique qui fixe la taille du VER, et non l'énergie de fissure.

Pour cette sollicitation, on a également vu sur les diagrammes donnant l'erreur statistique en fonction du volume de calcul que la pente moyenne aux grands volumes varie au cours du chargement, et passe progressivement de -1 , caractéristique de l'isotropie de l'état initial, à $-\frac{1}{2}$, caractéristique de la présence d'une fissure de grande dimension, à l'état rompu.

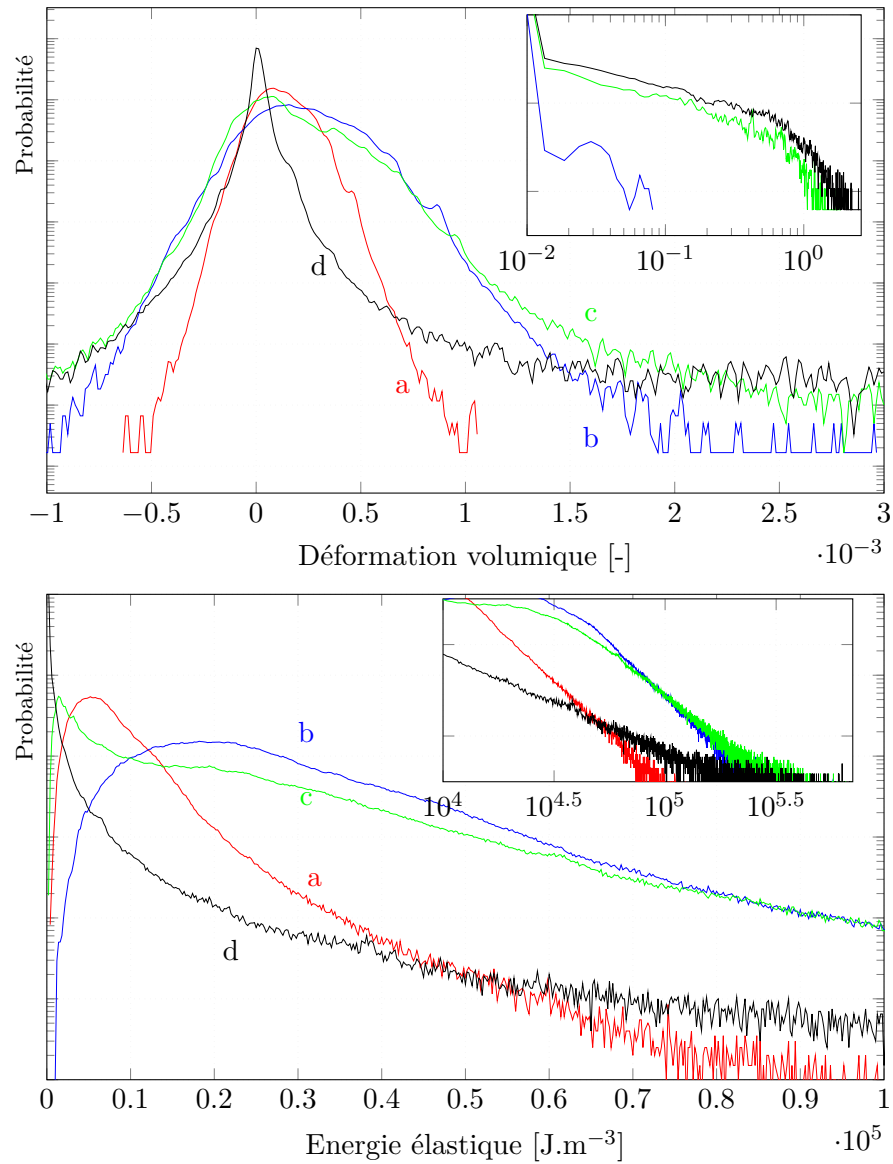


FIGURE 6.16 – Histogrammes de la déformation volumique (en haut) et de l'énergie élastique (en bas) avant le début du processus de microfissuration (itération 200, a-rouge), pendant la propagation (itération 400, b-bleu et itération 600, c-vert) et à l'état rompu (itération 1050, d-noir). Courbe principale, échelle semi-logarithmique, zoom, échelle bi-logarithmique.

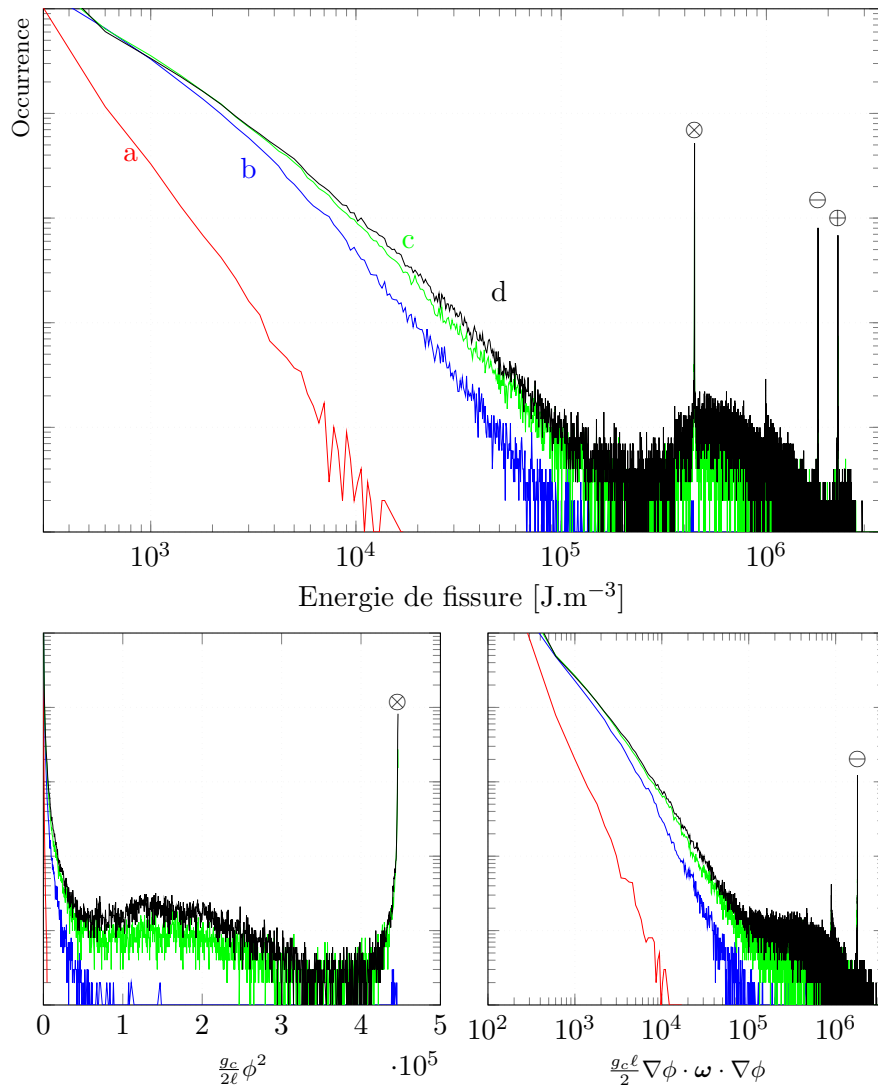


FIGURE 6.17 – Histogramme du champ d'énergie de fissure avant le début du processus de microfissuration (itération 200, a-rouge), 400 (b-bleu), 600 (c-vert) et 1050 (d-noir). Courbe principale, échelle semi-log, zoom échelle log-log.

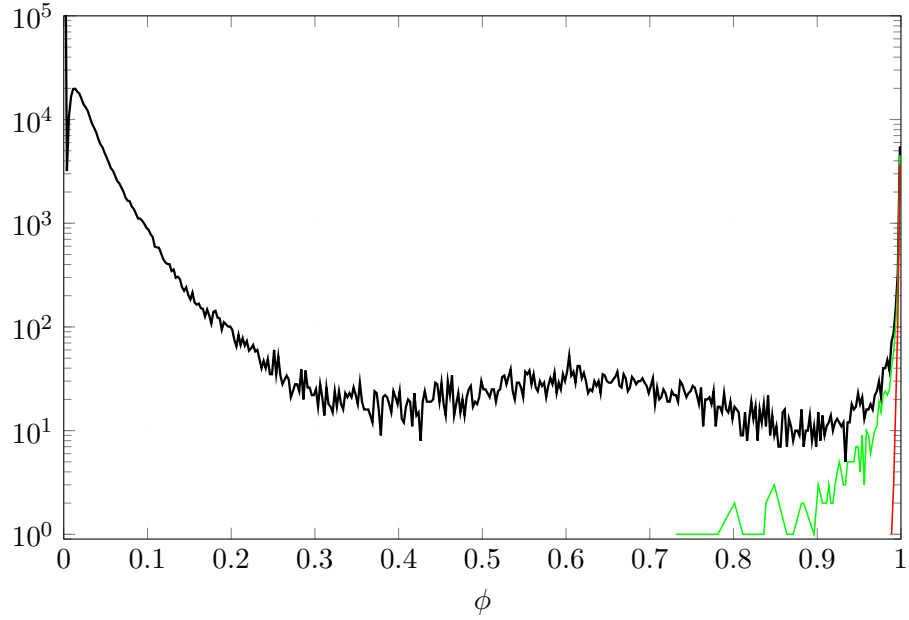


FIGURE 6.18 – Histogramme du champ de phase à l’itération 600 pour les voxels avec une déformation volumique supérieure à 1% (rouge), 10% (vert) et tous les voxels (noir).

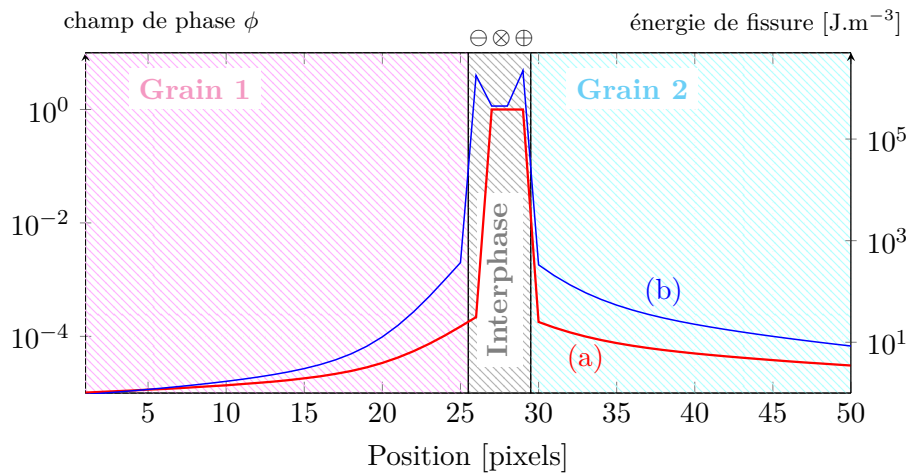


FIGURE 6.19 – Zoom sur une interphase bordée par deux grains (1 et 2). a-rouge : champ de phase (échelle de gauche). b-bleu : énergie de fissure (échelle de droite).

Chapitre 7

Application au matériau d'étude

Ce chapitre porte sur l'utilisation du modèle numérique champ de phase au matériau d'étude. On présente dans un premier temps la méthode de génération de modèles de microstructures et les différents paramètres des calculs en champs de phase. On prend en compte trois microstructures, les partitions aléatoires de Voronoï, de Johnson-Mehl « anisotrope » et une microstructure issue d'image MEB segmentée et périodisée, en deux dimensions. On présente quelques résultats en trois dimensions, sous sollicitation thermique et en traction. Les résultats obtenus montrent un comportement assez proche des données expérimentales avec un certain nombre de différences qui sont décrites et discutées.

7.1 Méthodologie

L'objectif de ce chapitre est d'appliquer le modèle choisi, implanté et testé plus haut, pour tenter de reproduire les propriétés de rupture du composite présenté au chapitre 2. Il s'agit donc de mettre en œuvre simultanément les deux processus de microfissuration, pour une microstructure aussi réaliste que possible, et pour les sollicitations thermiques et de traction simple au moins. Les conditions de cette mise en œuvre sont d'abord définies dans un cadre bidimensionnel, et la démarche est appliquée au cas tridimensionnel à la fin de ce chapitre.

7.1.1 Description de la microstructure

Il est nécessaire, pour commencer, de choisir la meilleure représentation possible de la microstructure du composite. Se pose d'abord la question de la description du liant. Comme on l'a dit plus haut, la topologie de ce dernier est mal connue. On fera dans ce qui suit l'hypothèse selon laquelle le liant est

présent sous la forme d'une fine couche continue entre les grains de TATB. Cependant, la fraction volumique de liant dans le composite est telle que l'épaisseur de la couche de liant postulée est largement inférieure au micron, et qu'il n'est donc pas possible de la représenter numériquement. C'est pourquoi on remplace le liant par une interphase plus épaisse, donc mieux résolue, dont les propriétés thermoélastiques sont modulées pour retrouver les propriétés thermoélastiques effectives du matériau (voir le § 7.1.2).

A l'issue de ce processus, on obtient une microstructure de type polycristal jointoyé. On sait cependant que le matériau contient également des défauts (porosité, microfissures et macles de déformation) dans son état initial, leurs caractéristiques géométriques et leurs distributions spatiales n'étant pas connues quantitativement. Pour pallier cette méconnaissance de la microstructure, on fait dans ce qui suit les hypothèses suivantes :

- la porosité est représentée par une distribution aléatoire de pores sphériques de taille unique, pour une porosité macroscopique totale inférieure à 3% ;
- conformément aux conclusions des travaux antérieurs [48, 96], la population de microfissures à l'état initial est supposée intergranulaire, et 20% des joints de grains sont fissurés ;
- les macles de déformation sont négligées. Les grains sont donc considérés comme des monocristaux de TATB, leurs orientations cristallographiques étant attribuées aléatoirement ;
- trois types de microstructures polycristallines sont considérées, à savoir les partitions de Voronoi et de Johnson-Mehl anisotrope [47, 48, 96] et, dans le cas bidimensionnel, une partition obtenue par segmentation d'une image MEB.

Pour sa simplicité et sa facilité d'utilisation, on considère d'abord une microstructure virtuelle construite à partir d'un modèle de Voronoï. Afin de se rapprocher du composite réel, on considère ensuite une microstructure construite à partir d'une image MEB segmentée. Aucune image tridimensionnelle n'étant aujourd'hui disponible, on considère pour terminer une microstructure virtuelle construite sur la base du modèle dit de Johnson-Mehl anisotrope (voir [47, 96]), ce qui permettra une comparaison avec certaines des simulations tridimensionnelles.

7.1.2 Propriétés thermoélastiques

Comme précédemment, le tenseur d'élasticité du monocristal de TATB est donné par Bedrov et al. [31], et son tenseur de dilatation thermique par Sun et al. [89]. En ce qui concerne les propriétés thermoélastiques de l'interphase, les travaux antérieurs [96] ont utilisé la théorie des interfaces imparfaites, que l'on commence par rappeler brièvement.

Hashin [283], pour le cas d'une inclusion sphérique plongée dans une matrice chargée à l'infini, puis Benveniste et Miloh [284], dans un cadre

plus général, ont montré que la présence d'une interphase élastique entre deux autres constituants élastiques, est équivalente à une interface imparfaite généralement qualifiée d'interface de type « ressort » entre ces derniers, sous deux conditions :

- l'épaisseur de l'interphase doit être petite vis-à-vis des dimensions des autres constituants ;
- la rigidité de l'interphase doit être faible vis-à-vis de celles des autres constituants.

Sous ces deux conditions, l'interface équivalente présente un vecteur contrainte non nul et continu, et un vecteur déplacement discontinu.

Considérons le cas bidimensionnel d'une interface notée Γ , de direction normale \mathbf{n} et tangentielle \mathbf{t} , équivalente à une interphase, supposée isotrope, de coefficients de Lamé λ_i et μ_i , et d'épaisseur e_i . Si \mathbf{u} et $\boldsymbol{\sigma}$ désignent respectivement le vecteur déplacement et le tenseur des contraintes, on note $u_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ et $u_t = \mathbf{u} \cdot \mathbf{t}$ les composantes normale et tangentielle du vecteur déplacement, $\sigma_{nn} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$ et $\sigma_{nt} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{t}$ les composantes normale et tangentielle du vecteur contrainte, et $[x]$ le saut de x au travers de l'interface. Avec ces notations, Benveniste et Miloh [284] obtiennent :

$$\begin{aligned} [\sigma_{nn}] &= 0 & [u_n] &= n \cdot \sigma_{nn}(\Gamma) \\ [\sigma_{nt}] &= 0 & [u_t] &= t \cdot \sigma_{nt}(\Gamma) \end{aligned} \quad (7.1)$$

où $\sigma_{nn}(\Gamma)$ et $\sigma_{nt}(\Gamma)$ représentent les composantes du vecteur contrainte évaluées sur l'interface, et où :

$$\begin{aligned} n &= \frac{e_i}{\lambda_i + 2\mu_i} \\ t &= \frac{e_i}{\mu_i} \end{aligned} \quad (7.2)$$

Dans le cas présent, on souhaite faire varier l'épaisseur e_i de l'interphase, de telle façon que les contraintes et le saut de déplacement ne soient pas modifiés. La relation (7.2) montre qu'il est nécessaire à cet effet d'ajuster les caractéristiques élastiques de l'interphase. Si l'on note e_ℓ , λ_ℓ et μ_ℓ l'épaisseur et les coefficients de Lamé du liant dans le composite, alors les coefficients de Lamé de l'interphase dont on a artificiellement augmenté l'épaisseur sont donnés par :

$$\begin{aligned} \lambda_i &= \lambda_\ell \cdot \frac{e_i}{e_\ell} \\ \mu_i &= \mu_\ell \cdot \frac{e_i}{e_\ell} \end{aligned} \quad (7.3)$$

Hashin [285] a montré que la relation (7.1) reste valable en thermoélasticité. Dans ces conditions, on peut écrire :

$$\begin{aligned} [u_n] &= \frac{e_i}{\lambda_i + 2\mu_i} [(\boldsymbol{\sigma}^m + \gamma_i \Delta T \mathbf{1}) \cdot \mathbf{n}] \cdot \mathbf{n} \\ [u_t] &= \frac{e_i}{\mu_i} [(\boldsymbol{\sigma}^m + \gamma_i \Delta T \mathbf{1}) \cdot \mathbf{n}] \cdot \mathbf{t} \end{aligned} \quad (7.4)$$

avec $\gamma_i = K_i \alpha_i$, où $K_i = \lambda_i + \frac{2}{3} \mu_i$ est le module de compressibilité de l'interphase, et α_i son coefficient de dilatation thermique volumique. Dans ces expressions, σ^m est la composante mécanique du tenseur des contraintes, et $\gamma_i \Delta T \mathbf{1}$ sa composante thermique. En simplifiant, on obtient :

$$\begin{aligned} [u_n] &= \frac{e_i}{\lambda_i + 2\mu_i} \left[\sigma_{nn}^m + \left(\lambda_i + \frac{2}{3} \mu_i \right) \alpha_i \Delta T \right] \\ [u_t] &= \frac{e_i}{\mu_i} \sigma_{nt}^m \end{aligned} \quad (7.5)$$

Si l'on souhaite de nouveau conserver les contraintes mécaniques et thermiques et les sauts de déplacements en modifiant l'épaisseur d'interface, on obtient les relations (7.3), ainsi qu'une relation additionnelle sur le coefficient de dilatation thermique volumique :

$$\alpha_i = \alpha_\ell \cdot \frac{e_\ell}{e_i} \quad (7.6)$$

où α_ℓ est le coefficient de dilatation thermique volumique du liant. Cette relation montre que le coefficient de dilatation doit varier dans le rapport inverse de celui des modules d'élasticité.

Ce modèle présente donc la caractéristique de diminuer artificiellement les niveaux de déformation au sein de l'interphase, mais de conserver le niveau des contraintes. Pour le mettre en œuvre, il est nécessaire de disposer de la valeur du paramètre e_ℓ . Malheureusement, on connaît la fraction volumique α_ℓ de liant dans le composite, mais pas l'épaisseur moyenne de liant e_ℓ . Dans la limite des petites épaisseurs relativement à la taille moyenne de grain ϕ_g ($e_\ell \ll \phi_g$), ces deux grandeurs sont liées par la relation :

$$\alpha_\ell = e_\ell \cdot S_s \quad (7.7)$$

où S_s est le périmètre spécifique des grains dans le cas bidimensionnel, leur surface spécifique dans le cas tridimensionnel. On ne connaît qu'une limite inférieure de cette dernière caractéristique pour le composite, mais pas sa valeur réelle. On est donc contraint de procéder par méthode inverse, en cherchant la valeur du paramètre $\beta = \frac{e_i}{e_\ell}$ permettant de retrouver le coefficient de dilatation thermique volumique du composite, ou son module d'Young, la théorie des interfaces imparfaites restant utilisée au travers des relations :

$$\begin{aligned} \lambda_i &= \beta \lambda_\ell \\ \mu_i &= \beta \mu_\ell \\ \alpha_i &= \frac{\alpha_\ell}{\beta} \end{aligned} \quad (7.8)$$

7.1.3 Propriétés de rupture

En ce qui concerne les propriétés de rupture des cristaux de TATB, les travaux de Bidault et Pineau [93] donnent accès au tenseur de ténacité,

supposé de symétrie hexagonale, et plus précisément aux paramètres g_c et ω . Il ne reste donc a priori qu'à déterminer la longueur caractéristique ℓ .

Les travaux de Tanné et al. [129] ont montré sans ambiguïté que, dans le cadre de la classe de modèles retenue dans ce travail, la contrainte à rupture en traction simple ne dépend pas seulement de g_c , mais du rapport $\frac{g_c}{\ell}$. Ces auteurs proposent donc de calculer ℓ à partir de la connaissance de la contrainte à rupture du milieu considéré, le paramètre g_c étant supposé connu par ailleurs.

Ils notent, cependant, que cette démarche n'est applicable stricto sensu que si la résolution est suffisante, c'est-à-dire si $\ell \gg h$. Or nous avons vu au chapitre 5 que cette condition ne peut être remplie, sauf à accepter des simulations de très longue durée. On est donc contraint d'adopter une démarche alternative pragmatique. Elle consiste à choisir d'abord un nombre de grains aussi représentatif que possible en se basant sur les résultats du chapitre 6, puis le nombre de pixels (ou de voxels) de la microstructure sur la base des résultats du chapitre 5, puis le paramètre $\ell = 1,5$ pixels.

De façon similaire, on retient l'épaisseur d'interphase $w = 4$ pixels sur la base des résultats du chapitre 5, et on décide de conserver la même valeur de $\ell = 1,5$ pixels pour l'interphase.

Il ne restera plus, alors, qu'à déterminer le paramètre g_c , pour le cristal de TATB et pour l'interphase, par méthode inverse en se basant sur la contrainte à rupture en traction simple et sur le seuil de linéarité des thermogrammes expérimentaux pour les sollicitations thermiques. Cette démarche sera appliquée à la microstructure de Voronoï jointoyée, puis aux deux microstructures plus réalistes.

7.2 Simulations bidimensionnelles

7.2.1 Microstructures

Trois microstructures polycristallines seront considérées ici, toutes comportant environ 400 grains, ce qui représente un compromis entre représentativité et temps calcul, et une résolution de $1,8 \mu\text{m}$ par pixel. A ces microstructures polycristallines, sont successivement ajoutées :

1. une interphase de $w = 4$ pixels d'épaisseur, générée par seuillage de la fonction distance.
2. une porosité de 2%, sous la forme de pores identiques de taille 2 pixels.
3. une population de microfissures intergranulaires représentant 20% des interfaces entre grains individuels.

Les interphases et pré-fissures sont calculées en propageant une fonction distance quasi-euclidienne à partir des pixels ou voxels de l'interface (dont l'un des premiers voisins est dans une phase distincte) puis seuillage à $w/2$. Les pré-fissures sont obtenues en appliquant un potentiel source \mathcal{H}^+ grand

dans une interphase d'épaisseur $w = 1$ et en calculant le champ de phase qui en résulte.

Une microstructure de Voronoï (figure 7.1) de 1000×1000 pixels pour 400 grains, simple et facile à générer, sera utilisée pour identifier les paramètres de ténacité des grains de TATB et de l'interphase.

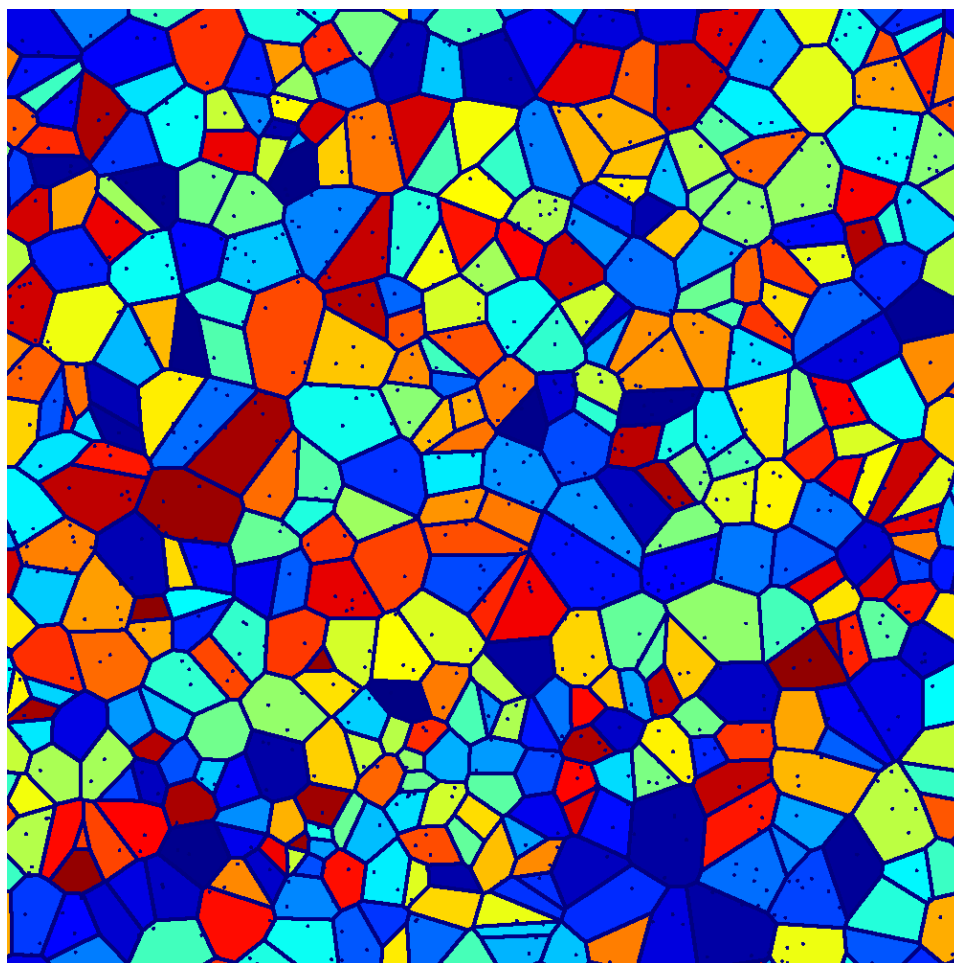


FIGURE 7.1 – Microstructure de Voronoï contenant 400 grains, 2% de porosité et 16%vol de liant sur une grille de 1000x1000 pixels.

Une microstructure (dite « microstructure MEB ») de 1125×1125 pixels, comportant 450 grains, est ensuite générée à partir d'une image MEB segmentée de grande taille, en vue d'une meilleure représentativité du composite réel (figure 7.4-a). Pour une utilisation en FFT, cette microstructure est ensuite périodisée.

À cet effet, on calcule dans un premier temps les moments d'inertie associés à chaque grain, ce qui se traduit géométriquement par un ensemble d'ellipses elles-mêmes facilement périodisables (Fig. 7.2).

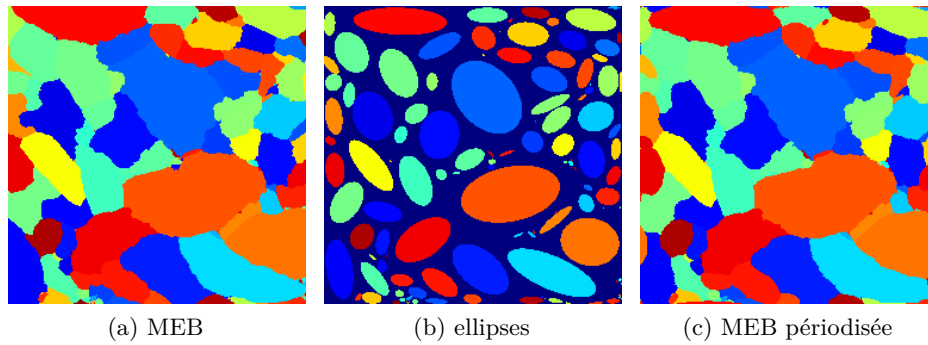


FIGURE 7.2 – Méthode de périodisation d'une microstructure MEB. À gauche, image MEB, au centre ellipses approchant les grains, à droite image périodisée.

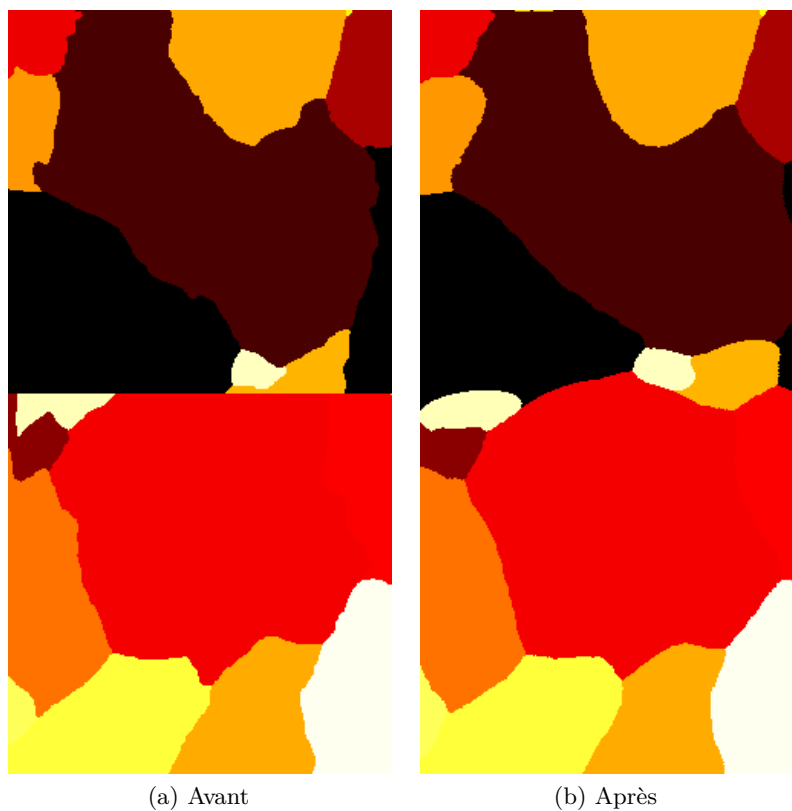


FIGURE 7.3 – Périodisation d'une microstructure MEB (agrandissement).

On calcule ensuite une fonction distance signée χ_1 à partir de chaque ellipse ($\chi_1 = 0$ sur les bords de l'ellipse), et une fonction distance χ_2 à partir de chaque grain de l'image MEB. La fonction χ_1 est périodique, mais ne rend pas compte de la forme des grains, tandis que la fonction χ_2 n'est pas périodique, mais rend parfaitement compte de la forme des grains.

On forme alors $\chi = (1 - s)\chi_1 + s\chi_2$ où $s = 0$ sur les bords du domaine, et $s \approx 1$ à l'intérieur. Dans le cas présent, on choisit pour s la puissance cinquième de la distance aux bords du domaine normalisée entre 0 et 1. Ceci définit une fonction s par grain. Le grain modifié est la région où cette fonction s est plus petite que toutes les autres fonctions s .

Cette transformation fournit une microstructure périodique qui diffère seulement sur les bords (Fig. 7.2a et 7.2c, et agrandissement Fig. 7.3).

Enfin, une microstructure (dite « microstructure JMA ») de 1000×1000 pixels, comportant 430 grains, générée à partir du modèle de Johnson-Mehl à croissance anisotrope [47, 96], permet une représentativité correcte du composite aussi bien en 2D qu'en 3D (figure 7.4b)

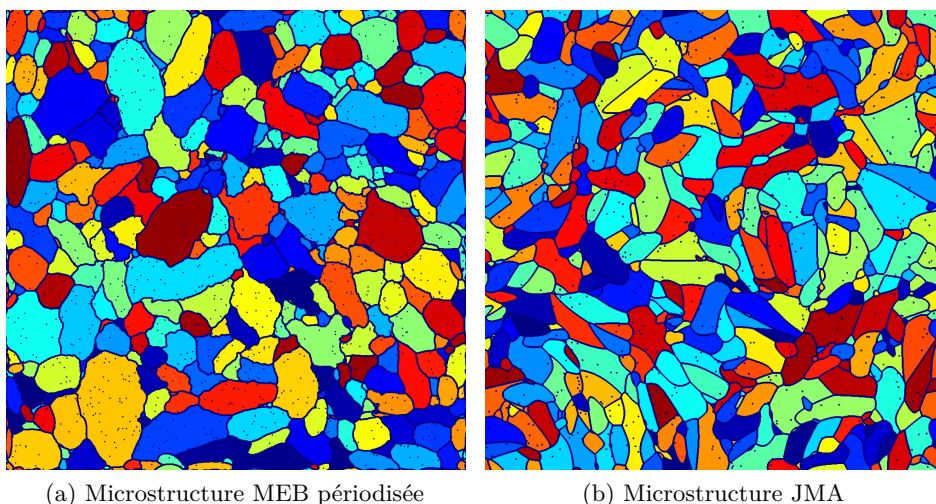


FIGURE 7.4 – Microstructures bidimensionnelles représentatives du composite.

7.2.2 Identification du paramètre β d'interphase

Compte tenu de leur surface spécifique respective, les fractions volumiques d'interphase sont de 14% pour la microstructure Voronoï, et de 13% pour les microstructures MEB et JMA. On réalise une première série de simulations en sollicitation thermique, en cherchant le paramètre β permettant de restituer le coefficient de dilatation thermique volumique effectif du composite mesuré sur l'essai de dilatation thermique de référence. On trouve des valeurs de $\beta = 1,5$

pour la microstructure Voronoï, et $\beta = 1,4$ pour les microstructures MEB et JMA, permettant d'obtenir respectivement $\tilde{\alpha}_v = 1,48$ et $\tilde{\alpha}_v = 1,49 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. Une deuxième série de simulations en traction donnent accès aux modules d'Young, de 6,8 (Voronoi) et 7,3 GPa (MEB et JMA) et aux coefficients de Poisson, de 0,3 (Voronoi) et 0,34 (MEB et JMA).

7.2.3 Identification des paramètres de ténacité des grains et de l'interphase

La valeur $\omega = 3$ du paramètre d'anisotropie de ténacité a été maintenue fixée pour l'ensemble des simulations de ce chapitre. Les valeurs retenues sont $1,1 \text{ J.m}^{-2}$ pour la ténacité des grains de TATB, et $1,7 \text{ J.m}^{-2}$ pour la ténacité de l'interphase, ce qui permet de reproduire la valeur expérimentale de contrainte à rupture de 7 MPa, associée à une déformation à rupture de 0,11% comme le montre la figure 7.7. La figure 7.5 indique la variation de la fraction de microfissures transgranulaires avec la ténacité de l'interphase. La zone verte matérialise le volume de l'interphase et correspond aussi à la proportion de microfissures transgranulaire maximale dans le cas d'une fissure rectiligne. Le point obtenu pour un contraste de ténacité de 5,5 est ici supérieur à cette valeur à cause de la tortuosité de la fissure. La figure 7.5 permet uniquement de déterminer le rapport de g_c entre l'interphase et les grains pour obtenir une proportion de microfissure transgranulaire donnée. Une fois ce rapport figé, la ténacité des deux constituants est multiplié par 2,5 pour obtenir une contrainte à rupture de 7MPa.

7.2.4 Influence de la microstructure

La figure 7.7 compare les résultats de simulation en traction pour les trois microstructures. La confrontation est correcte pour les trois microstructures, la contrainte à rupture variant de 0,5 MPa environ, et la déformation à rupture de 0,01%.

La situation est quelque peu différente pour la sollicitation thermique. La comparaison à l'expérience fait l'objet de la figure 7.9. Le seuil de microfissuration n'est pas correctement restitué pour la microstructure Voronoï. En revanche, la prédiction obtenue sur la microstructure JMA est extrêmement proche du résultat expérimental de référence, ce qui est très encourageant. A titre indicatif, la figure 7.10 compare les coefficient de dilatation thermique des trois microstructures ainsi que les champ de phase finaux.

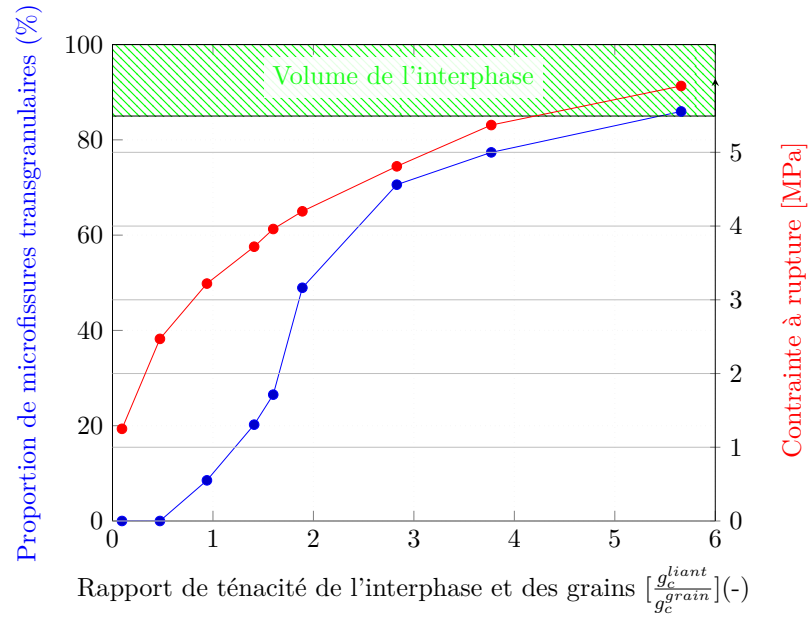


FIGURE 7.5 – Proportion de fissures transgranulaires en fonction de la ténacité de l'interphase (bleu), contrainte à rupture (rouge).

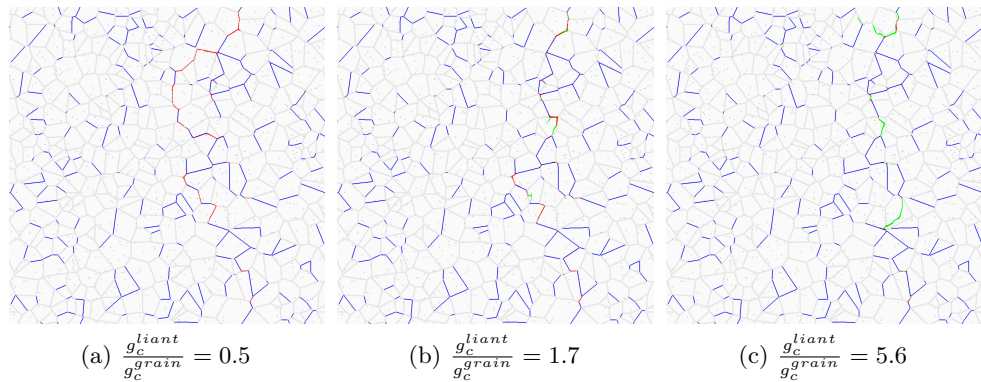


FIGURE 7.6 – Champs de phase obtenus selon la ténacité de l'interphase.

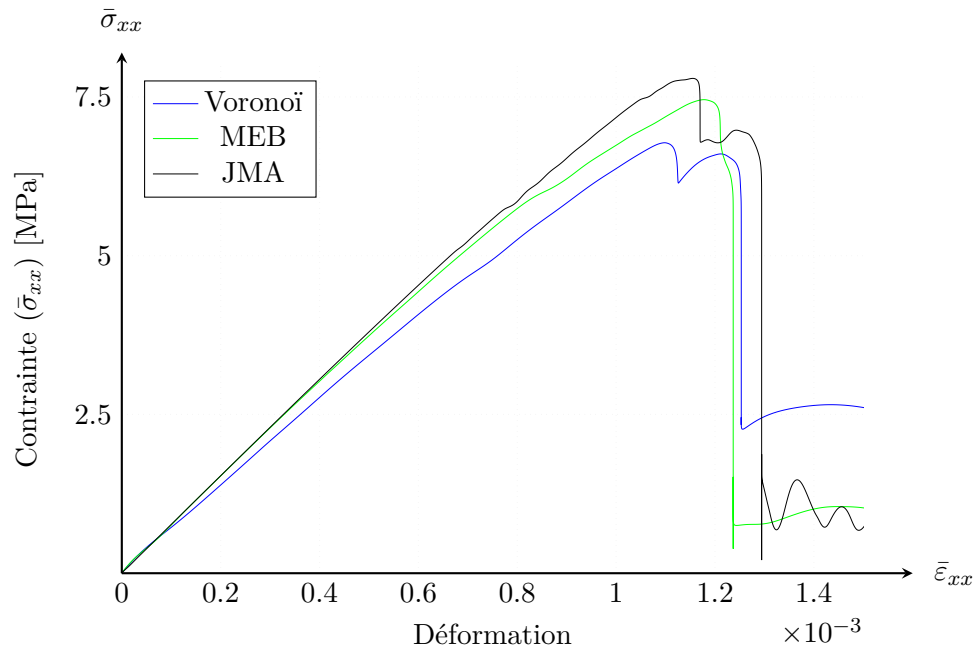


FIGURE 7.7 – Résultats de simulation en traction pour les trois microstructures.

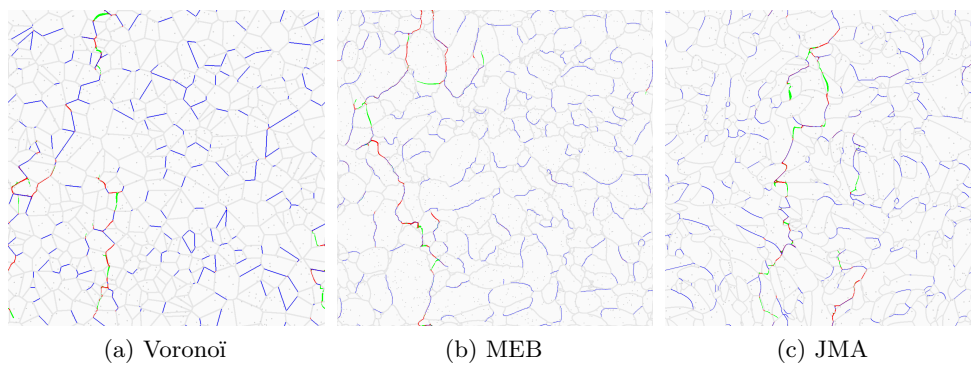


FIGURE 7.8 – Champs de phase obtenus à l'état final pour les trois microstructures.

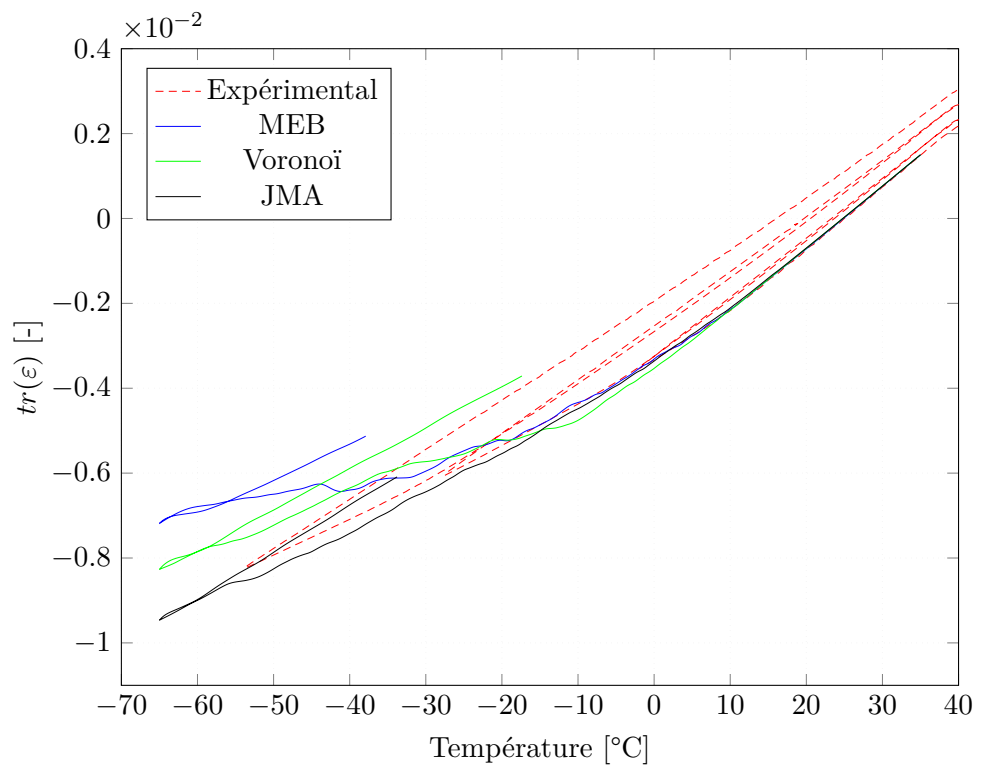
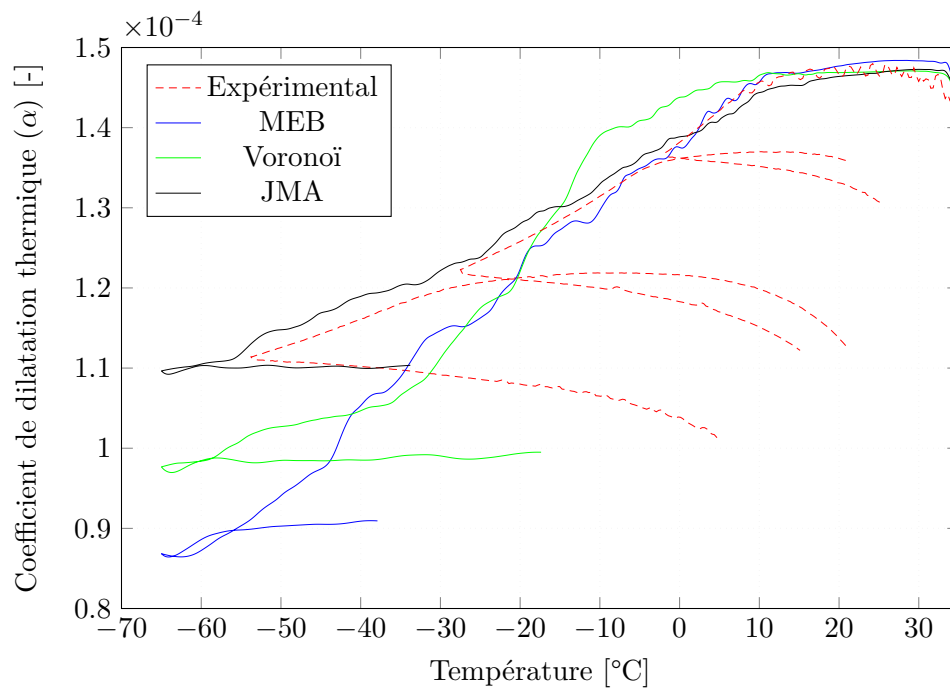


FIGURE 7.9 – Comparaison de la réponse des trois microstructures en fonction de la température avec la réponse du matériau réel.



(a) Coefficient de dilatation thermique volumique.

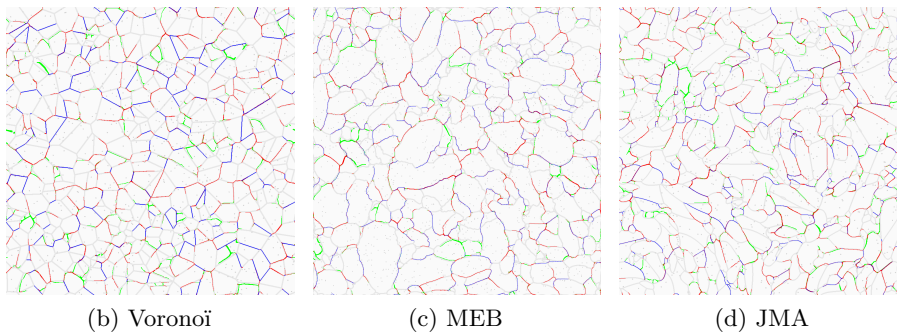


FIGURE 7.10 – Comparaison des résultats de simulation sous sollicitation thermique sur les microstructures Voronoi, MEB et JMA.

7.3 Simulations tridimensionnelles

Cette section a pour vocation d'établir une faisabilité plutôt que des résultats réalistes. La première partie concerne la comparaison des résultats pour la sollicitation thermique et en traction sur les microstructures Voronoï et JMA en 3D. La seconde donne des pistes d'amélioration.

À titre informatif, les résultats de la première (300^3 éléments) et seconde (500^3 éléments) partie ont nécessités respectivement 300 et 1500 heures de calcul.

7.3.1 Rôle de la microstructure

On s'attache ici à comparer deux microstructures, Voronoï et JMA en 3D. Ces deux microstructures sont composées de 200 grains séparés par une interphase d'épaisseur $2.4\ \mu\text{m}$. Comme précédemment, 20% des interfaces sont pré-fissurées, et 1% *vol* de pores a été ajouté. Ces microstructures, de $240\ \mu\text{m}$ de côté, sont discrétisées sur une grille de 300^3 voxels. Une représentation en est donnée sur la figure 7.11, avec la porosité en vert, et les pré-fissures en blanc. Comme le montre la figure 7.12, les deux simulations sous sollicitation

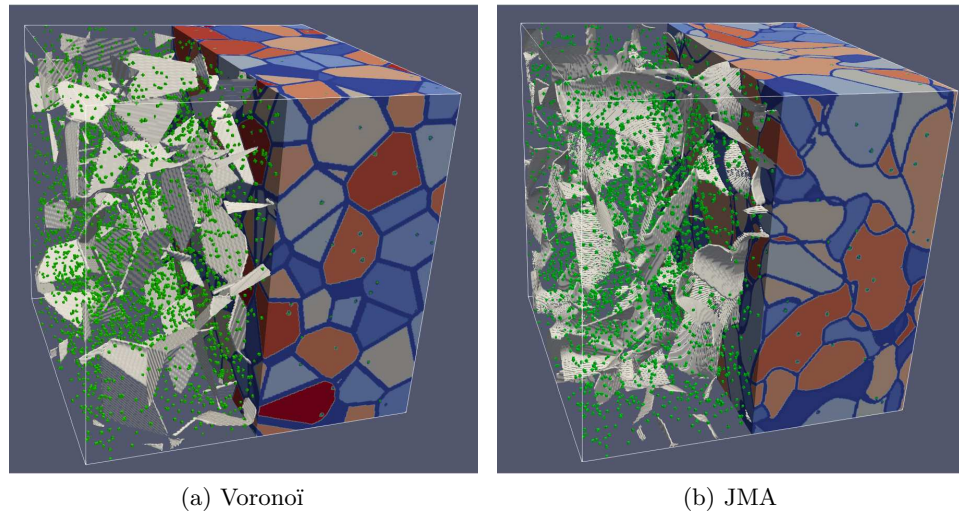


FIGURE 7.11 – Comparaison des microstructures 3D Voronoï et JMA.

Microstructures de 200 grains avec une interphase de 3 voxels d'épaisseur, sur une grille de 300^3 voxels. La porosité représente 1% du volume (représenté en vert) et les pré-fissures (en blanc) sectionnent 20% des interfaces.

thermique estiment le même coefficient de dilatation thermique en début d'essai pour les deux microstructures, à savoir $1.49 \times 10^{-4}\text{K}^{-1}$. Cependant, le seuil de microfissuration est légèrement plus précoce dans le cas JMA que Voronoï, situé à -22°C contre -25°C .

Dans le cas de la traction (figure 7.13), on observe un comportement plus

rigide pour la microstructure Voronoï ($E = 7.5$ GPa contre $E = 6.3$ GPa pour la microstructure JMA), ce qui entraîne une déformation à rupture plus élevée. En plus d'une éventuelle rigidité intrinsèque plus élevée du JMA, la différence de fraction volumique d'interphase (16% pour JMA contre 22% pour Voronoï) et la surface initiale des pré-fissures ($0,152 \text{ mm}^2$ pour JMA contre $0,186 \text{ mm}^2$ pour Voronoï) peuvent expliquer cette différence de pente à l'origine.

Cette série de quatre simulations, peu représentatives du fait du faible nombre de grains considéré, ne permet pas de conclure sur l'effet de la microstructure sur la réponse macroscopique du matériau. Elle a en revanche permis de montrer un bon comportement de l'algorithme, hormis la lenteur des calculs. Comme le montre la figure 7.14, en traction, les nouvelles fissures sont globalement orientées suivant un plan horizontal, ce qui est attendu pour un chargement uniaxial vertical.

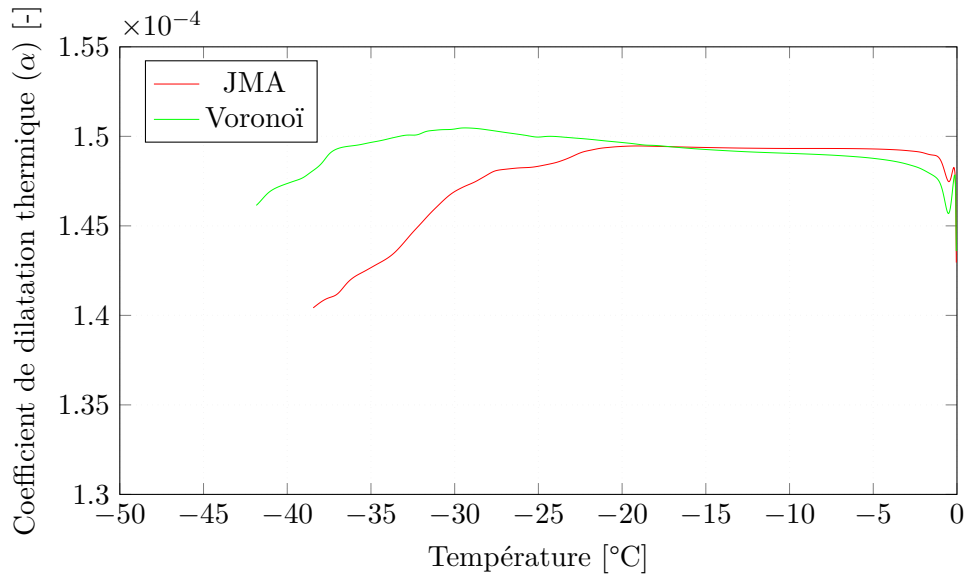


FIGURE 7.12 – Comparaison des thermogrammes obtenus pour les deux microstructures.

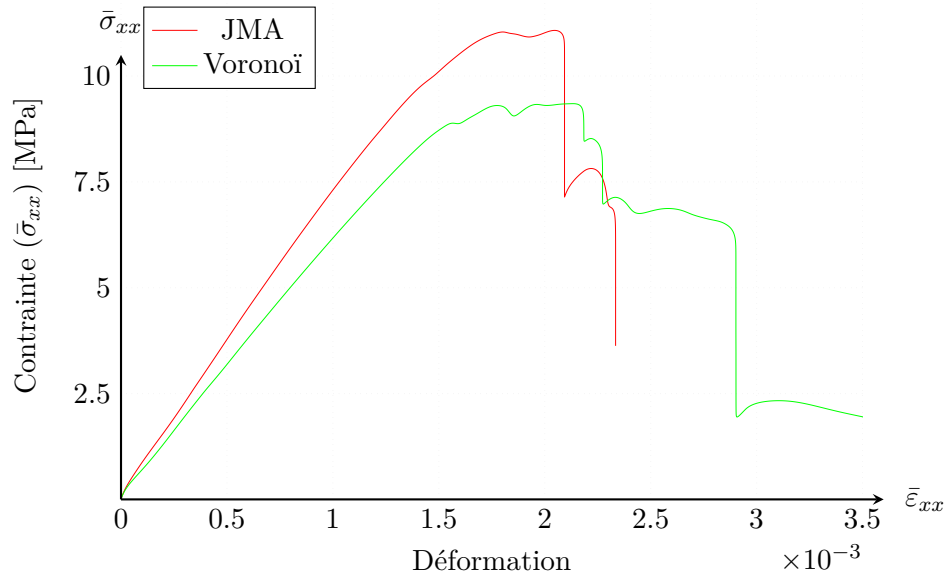


FIGURE 7.13 – Comparaison des courbes contrainte-déformation obtenues pour les deux microstructures.

7.3.2 Rôle des défauts

Afin de visualiser l'influence des défauts sur la réponse du matériau, quatre microstructures sont générées sur une grille de plus grande dimension, un polycristal de Voronoï sans interphase, servant de référence. Les trois autres microstructures sont obtenues en incorporant successivement deux types de défaut, les pré-fissures et les pores. La figure 7.15 représente la microstructure avec les deux types de défauts présents simultanément.

Les figures 7.16, 7.17 et 7.18 présentent les résultats de simulation et les champs de phase associés. On remarque que la porosité a pour effet de retarder l'initiation et la propagation des fissures, et qu'à l'inverse, la présence de pré-fissures en favorise l'initiation. Une explication possible réside dans l'intensité des concentrations de contraintes, plus élevées dans le cas des microfissures pré-existantes que dans le cas de pores sphériques.

Dans le cas des deux microstructure sans pré-fissures à -27°C , les principales fissures sont présentes dans les deux simulations, mais d'autres sont arrêtées par les pores au bénéfice de nouveaux chemins de fissuration. Toutefois, ces différences sont minoritaires par rapport aux fissures que ces deux microstructure partagent en commun mais apportent une grande différence dans le coefficient de dilatation thermique effectif.

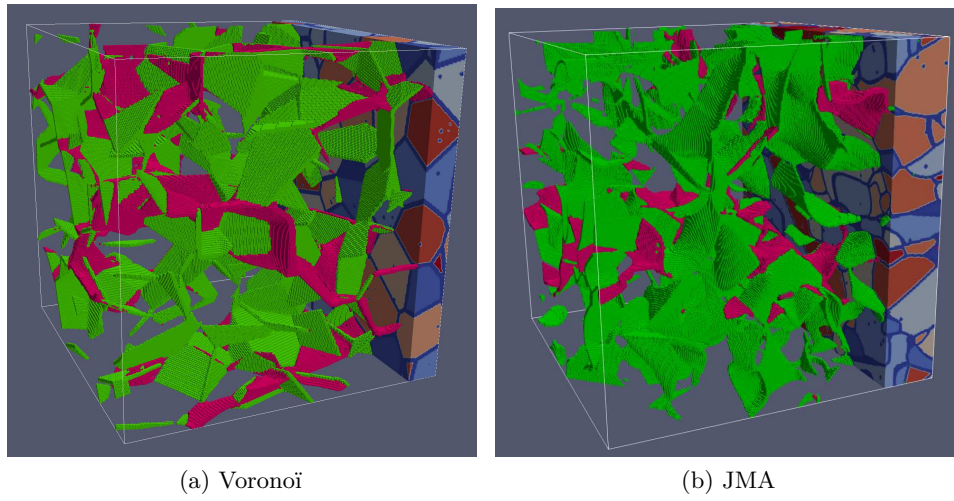


FIGURE 7.14 – Comparaison des champs de phase 3D Voronoï et JMA seuillé à $\phi = 0,9$. Les fissures initiales sont colorés en vert et les nouvelles fissures en rouge.

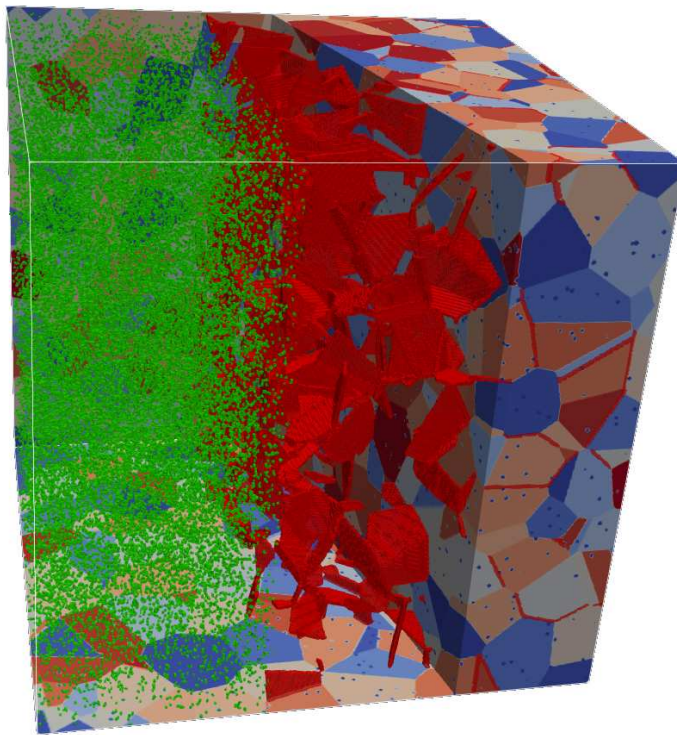


FIGURE 7.15 – Microstructure de Voronoï contenant 1000 grains, 2% de porosité et 16%vol de liant sur une grille de 500x500x500 voxels. De gauche à droite, porosité en vert, pré-fissures en rouge et microstructure Voronoï

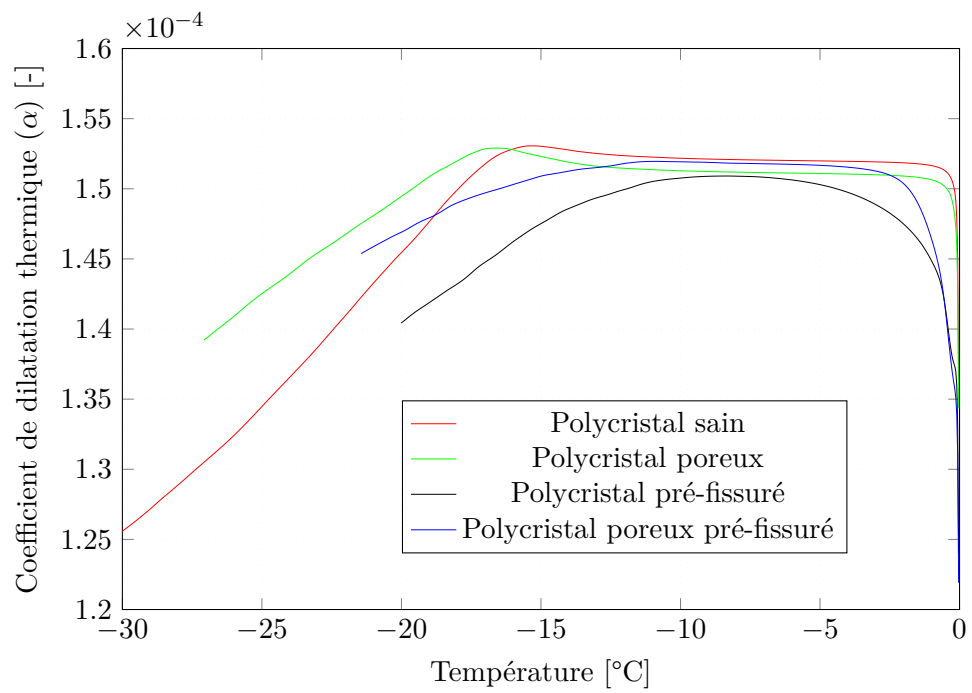


FIGURE 7.16 – Comparaison des résultats de simulation sous sollicitation thermique sur les différentes microstructures.

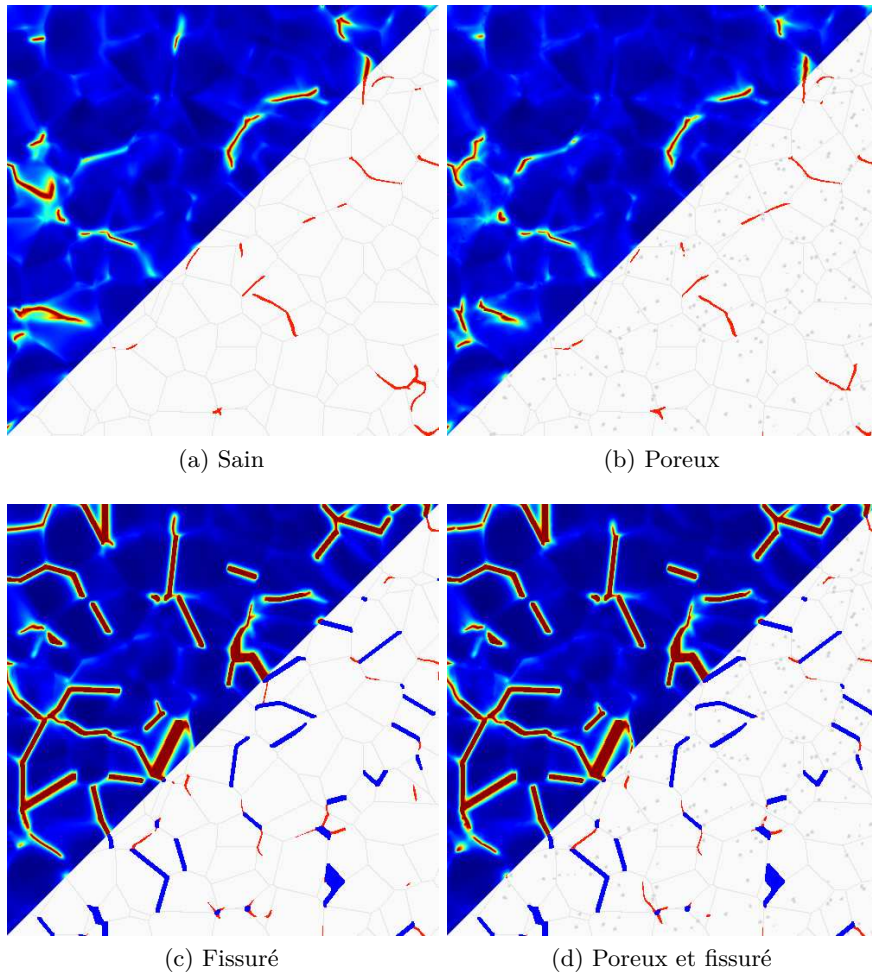


FIGURE 7.17 – Comparaison des champs de phase à $\Delta T = -20^\circ\text{C}$ (coupe 2D). La moitié nord-ouest est le champ de phase brut, la partie sud-est correspond à ce même champ de phase seuillé pour $\phi > 0,9$. Préfissures (bleu), fissures propagées (rouge).

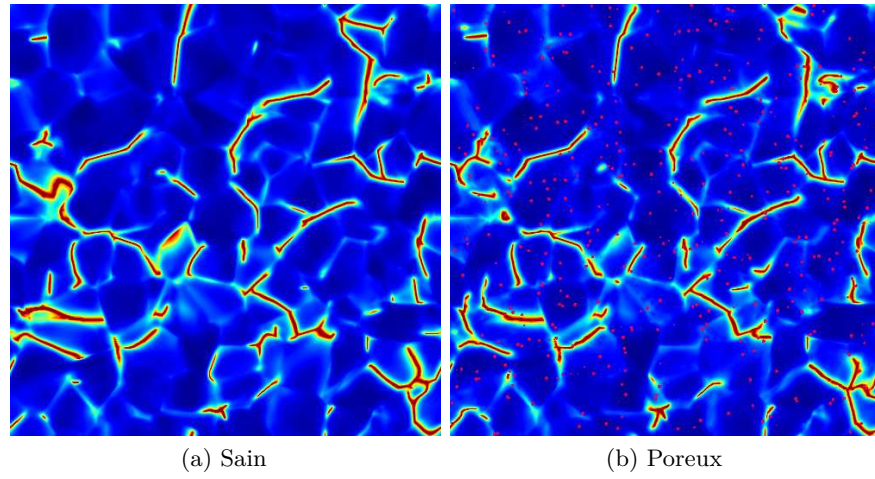


FIGURE 7.18 – Comparaison des champs de phase à $\Delta T = -27^\circ\text{C}$ (Coupe 2D) des microstructures saine et poreuse.

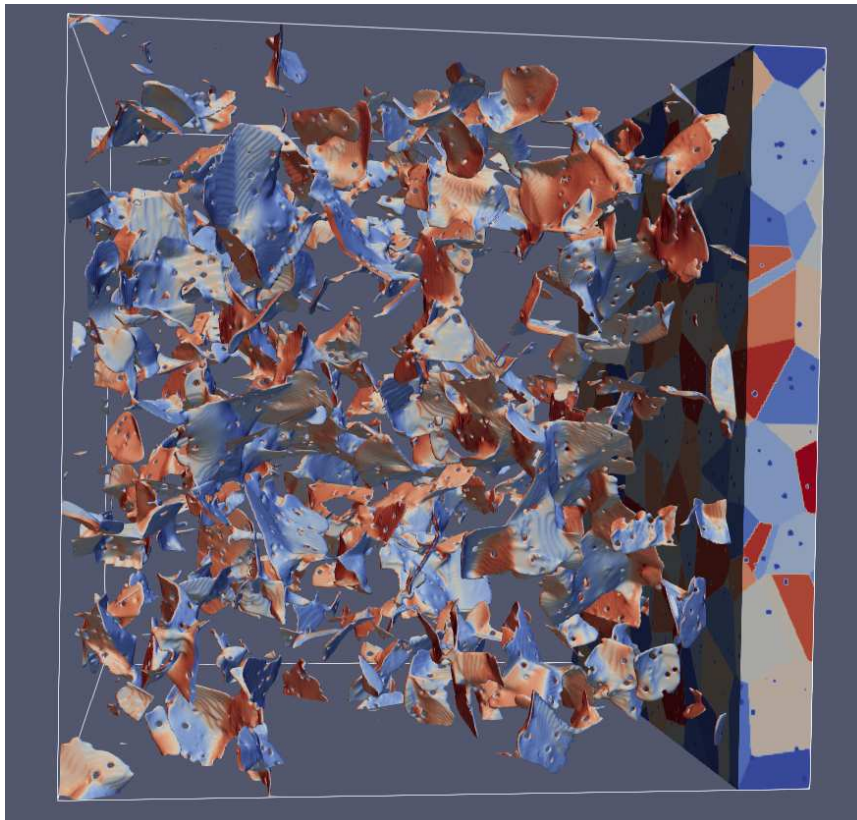


FIGURE 7.19 – Champ de phase de la microstructure avec porosité et sans pré-fissures à -20°C .

Chapitre 8

Conclusion et perspectives

Les travaux détaillés dans les chapitres précédents montrent le potentiel de l'approche de modélisation par champ de phase pour décrire les processus de microfissuration au sein du composite et, plus généralement, dans les matériaux hétérogènes. Cependant, il ne s'agit que d'une première approche. De nombreuses hypothèses ont été faites, de nombreux phénomènes négligés, et le type de sollicitations envisagées est restreint.

Dans ce chapitre, on cherche à explorer quelques champs d'application et d'extension possibles de l'approche, en réalisant quelques simulations exploratoires. On s'intéresse en particulier aux questions de la plasticité du liant et de la réponse du modèle en compression.

Étant donné le grand nombre de simplifications retenues pour le modèle de champ de phase considéré ici, on propose pour terminer quelques pistes d'investigation pour son amélioration, tant au plan conceptuel qu'à celui de l'application aux matériaux énergétiques comprimés.

8.1 Prise en compte de la plasticité de l'interphase en sollicitations thermiques

Le comportement du liant (ou de l'interphase) a jusqu'ici été supposé élastique linéaire. Toutefois, le niveau des contraintes locales au cours du chargement peut être relativement élevé, et induire une réponse inélastique du liant. Il s'agit ici d'étudier, sous une forme simplifiée, comment la plasticité de l'interphase est susceptible de modifier les champs de contraintes locales, ce qui pourrait avoir une influence sur le processus de microfissuration.

8.1.1 Modèle de plasticité et microstructure

On se limite ici au comportement (visco)-plastique du liant dans son domaine vitreux. Le modèle d'Arruda et Boyce [98], décrit au paragraphe 2.3.2, n'a été identifié que pour deux vitesses de déformation, ce qui est insuffisant

pour obtenir un modèle viscoplastique fiable. En conséquence, on négligera la viscosité plastique, pour ne retenir qu'une plasticité parfaite de von Mises indépendante du temps, en supposant que le champ de vitesse de déformation plastique reste centré autour d'une valeur moyenne de 10^{-5} s^{-1} , pour des vitesses de chauffe-refroidissement de $\pm 10^\circ\text{C.h}^{-1}$.

On modifie pour cela l'expression 2.7 de la contrainte seuil d'écoulement de la façon suivante :

$$\tau = \tilde{S} \left[1 + \frac{T}{A_0 \tilde{S}} \right]^{\frac{6}{5}} \quad (8.1)$$

où l'on rappelle que τ est la contrainte équivalente, et que $\tilde{S} = S_0 + \frac{1}{3}\beta\sigma_{kk}$ est une fonction qui décrit l'effet de la triaxialité des contraintes. La constante A_0 est définie par :

$$A_0 = \frac{A}{\ln(\dot{\gamma}^p/\dot{\gamma}_0^p)} \quad (8.2)$$

avec $A = 215,44 \text{ K.MPa}^{-1}$, $\dot{\gamma}_0^p = 1,50 \times 10^{31} \text{ s}^{-1}$, et $\dot{\gamma}^p = 1,0 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$.

S'agissant d'un travail exploratoire, on se contente d'une représentation du composite basée sur un modèle de Voronoï. Cependant, la non prise en compte du phénomène de rupture permet de conserver un algorithme FFT suffisamment rapide pour autoriser les simulations tridimensionnelles. On choisit d'autre part de représenter le liant sous la forme d'une interphase de même fraction volumique que celle du liant dans le composite réel, afin d'obtenir des champs de contraintes aussi réalistes que possible, mais au prix d'un nombre de grains relativement restreint. On choisit donc une microstructure de 400 grains, une fraction volumique d'interphase de 4,5%, modélisée sur une grille de 600^3 voxels.

On réalise une première simulation d'un cycle $20 \rightarrow 80 \rightarrow 20^\circ\text{C}$. La figure 8.1 donne les histogrammes de vitesses de déformation plastique équivalente (au sens de von Mises) à 75°C à la chauffe et au refroidissement. On constate que les vitesses de déformation plastique équivalente sont plutôt centrées autour de $2 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$, mais l'erreur reste faible, la contrainte d'écoulement ne diminuant que de 3% en passant de $1,0 \times 10^{-5}$ à $2,0 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$.

8.1.2 Cas des basses températures

On réalise ensuite une simulation du refroidissement de 20 à -100°C avec plasticité du liant (la rupture n'est pas prise en compte). La figure 8.2 donne le thermogramme obtenu, dans la même représentation que celle des résultats expérimentaux du chapitre 2. La manifestation macroscopique de la plasticité est extrêmement faible, puisque la déformation résiduelle n'est que de $-0,0003\%$. Pour plus de lisibilité, on donne sur l'axe secondaire l'écart à la linéarité, qui montre que la plasticité démarre vers -15°C au refroidissement, et vers -30°C à la chauffe.

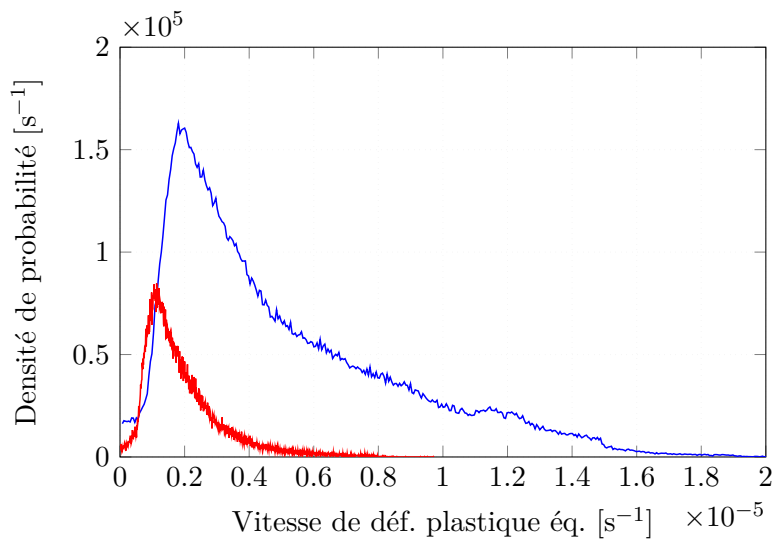


FIGURE 8.1 – Histogramme des vitesses de déformation plastique équivalente à 75°C à la chauffe (bleu) et au refroidissement (rouge).

Pour s’assurer que la plasticité de l’interphase est également négligeable à l’échelle locale, on compare les distributions de la contrainte équivalente de von Mises dans les grains avec et sans plasticité de l’interphase sur la figure 8.3. Le résultat est clair. Si une légère plastification se produit effectivement, son impact est négligeable sur la distribution des contraintes au sein du composite, notamment dans les grains. Il est donc légitime de considérer les phénomènes de rupture associés au refroidissement comme fragiles.

8.1.3 Cas des températures supérieures à l’ambiante

Afin d’estimer l’impact de la plasticité du liant à plus haute température, on réalise un cycle $20 \rightarrow 80 \rightarrow -60^\circ\text{C}$, illustré sur la figure 8.4. La pente initiale du thermogramme est de $4,96 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, proche de la valeur expérimentale. La linéarité est perdue vers 45°C , la pente augmentant jusqu’à 80°C . Le refroidissement est parabolique, associé à une pente variant de $4,93 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ à 80°C à $5,07 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ à -60°C , soit une augmentation de 3% seulement.

La dilataance au retour à 20°C est de 0,045%, du même ordre que la valeur expérimentale (0,025%). Cette dilataance n’a pas pour origine la décohesion. Il s’agit d’une dilataance élastique, résultant des contraintes internes induites par la plastification de l’interphase. Notons au passage que le modèle de plasticité du liant n’a été identifié que sur la gamme $[0 - 60^\circ\text{C}]$, et que des comparaisons quantitatives avec l’expérience seraient pour le moins hasardeuses.

Les histogrammes des déformations et des contraintes résiduelles sont donnés sur les figures 8.5. On observe que le champ de déformation volumique

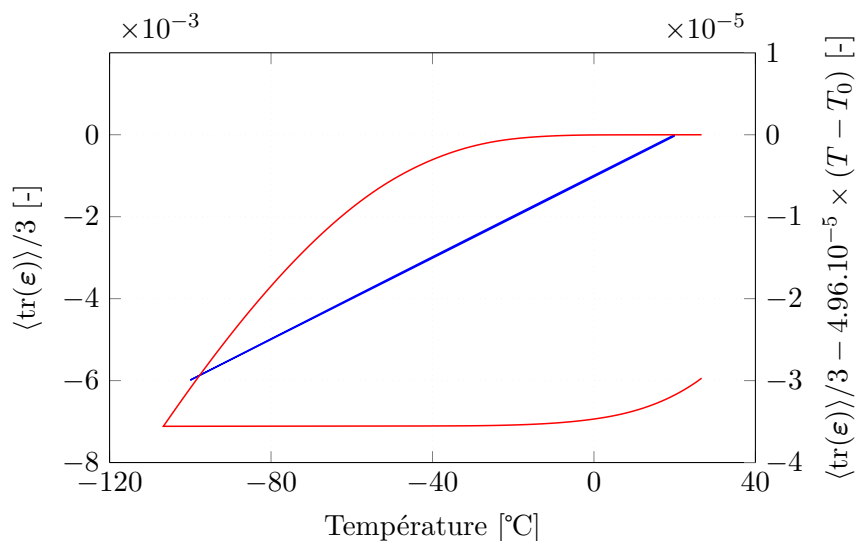


FIGURE 8.2 – Thermogramme obtenu en refroidissement avec prise en compte de la plasticité de l'interphase (bleu), et écart à la linéarité (rouge).

résiduelle dans les grains est presque entièrement en compression, ce qui n'est pas le cas dans le liant. Le champ de contraintes moyennes n'excède pas ± 50 MPa dans les grains, mais les contraintes équivalentes sont nettement plus étalées, pouvant dépasser 150 MPa.

On constate donc que l'influence de la plasticité de l'interphase est faible sur la réponse macroscopique, mais qu'elle induit des contraintes internes élevées. Il reste à savoir si des contraintes internes sont présentes à l'état initial dans notre composite. Dans l'affirmative, ces contraintes étant dues au procédé de pressage, le meilleur moyen de les évaluer serait de modéliser le procédé lui-même. Cependant, les travaux expérimentaux du paragraphe 2.4.3 suggèrent, alternativement, de supposer que le matériau, dans son état initial, est libre de contraintes à $48,7^\circ\text{C}$.

Quoiqu'il en soit, des contraintes internes élevées peuvent modifier significativement l'initiation de microfissures. Pour les travaux ultérieurs, il pourrait donc être intéressant de reprendre les simulations thermiques, en partant de cet état.

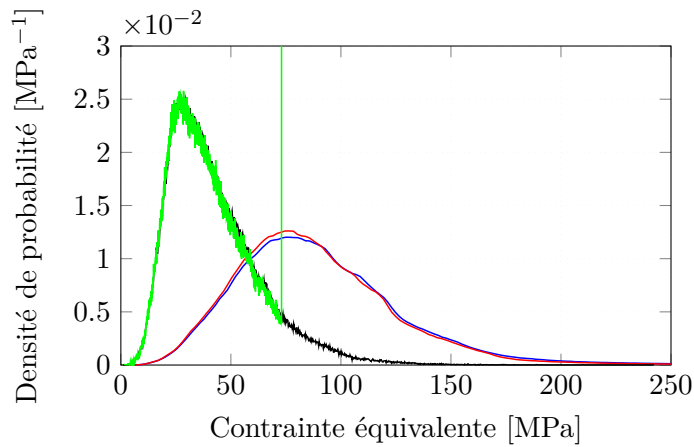


FIGURE 8.3 – Histogramme des contraintes équivalentes à -100°C dans les grains (bleu et rouge) et dans l'interphase (vert et noir).

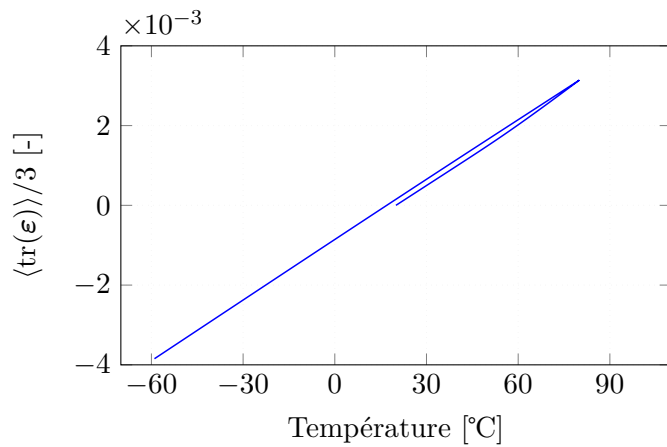


FIGURE 8.4 – Thermogramme du cycle $20 \rightarrow 80 \rightarrow -60^{\circ}\text{C}$.

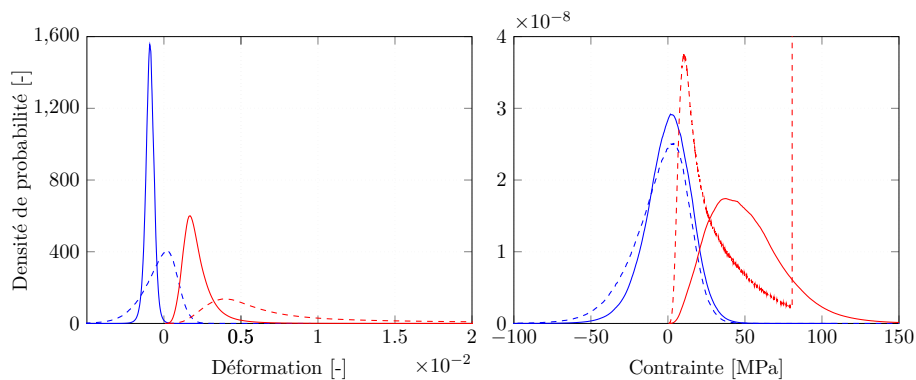


FIGURE 8.5 – Histogramme des déformations (gauche) et des contraintes (droite) moyennes (bleu) et équivalentes (rouge) à 20°C obtenues par chauffe à 80°C et refroidissement à partir de 20°C dans les grains (trait continu) et dans l'interphase (trait pointillé).

8.2 La compression

Les chapitres précédents se sont concentrés sur les sollicitations thermiques et la traction, mais pas sur la compression, du fait du caractère incomplet du modèle de contact unilatéral. La compression est toutefois un mode de sollicitation particulièrement important sous deux angles, celui de la dissymétrie traction-compression, et celui de la ductilité, certes limitée, observée en compression, plus encore en compression confinée et, plus généralement de la transition fragile-ductile observée dans tous les matériaux jointoyés.

La réponse du modèle de champ de phase est évaluée dans ce qui suit en compression simple, puis confinée. Quelques simulations complémentaires sont réalisées en prenant également en compte l'effet de la plasticité de l'interphase.

8.2.1 Compression simple

Une première simulation de compression simple a été réalisée sur la microstructure générée à partir de l'image MEB de la figure 7.4a, toutes choses égales par ailleurs, et la plasticité du liant n'étant pas prise en compte. La figure 8.6 compare les courbes macroscopiques obtenues en traction et en compression simples. Le module d'Young est plus élevé de 20% environ en compression qu'en traction. On attribue cette différence au modèle de contact unilatéral, qui induit des contraintes parasites de compression dans les fissures.

La contrainte à rupture en compression est environ deux fois plus élevée qu'en traction. Ce rapport est de l'ordre de quatre sur les résultats expérimentaux. Le modèle est donc a priori capable d'une certaine prise en compte de la dissymétrie traction-compression bien connue dans les milieux quasi-fragiles. Néanmoins, la rupture reste essentiellement fragile, et la valeur de déformation à rupture en compression, mesurée expérimentalement à -1.5% environ, est loin d'être prédite par le modèle. Ce point sera examiné plus loin.

La figure 8.7 compare les champs de phase obtenus en compression et en traction. La direction de la fissure principale semble grossièrement orientée à 45° de la direction de compression. Nettement plus tortueuse, elle semble faire intervenir davantage de rupture transgranulaire qu'en traction.

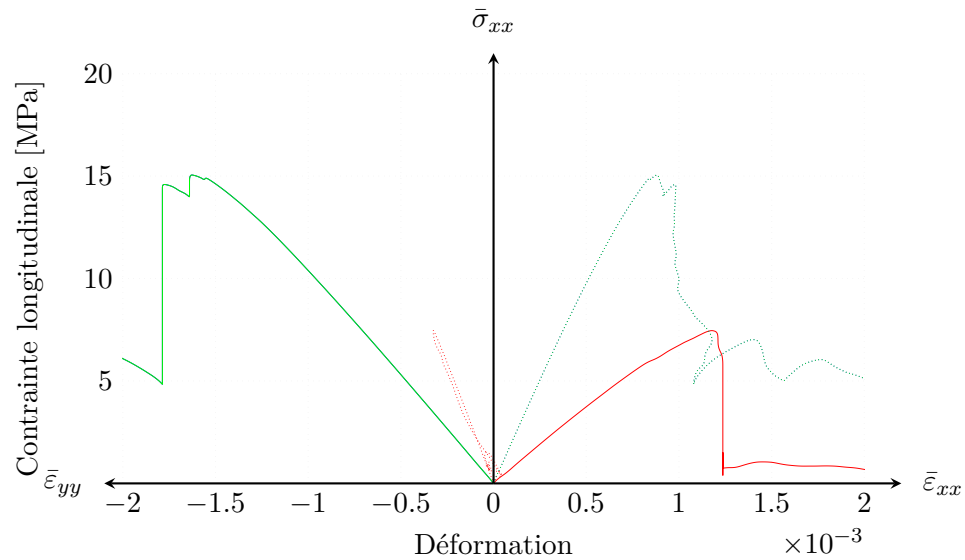


FIGURE 8.6 – Comparaison de la réponse prédite en compression (en bleu) et en traction (en rouge) simples, pour la microstructure générée à partir de l'image MEB (figure 7.4a). Pointillés : déformations transversales.

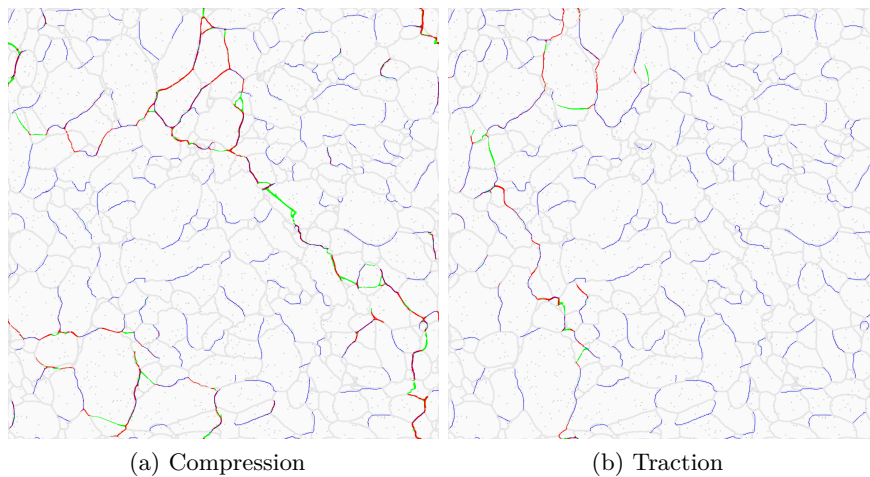


FIGURE 8.7 – Comparaison des champs de phase obtenus après rupture en compression et en traction. La direction de sollicitation est horizontale dans les deux cas. Gris : joints de grains. Bleu : microfissures initiales. Vert : microfissures transgranulaires. Rouge : microfissures intergranulaires.

8.2.2 Compression confinée

On réalise ensuite quelques simulations avec confinement, dont les résultats font l'objet de la figure 8.8. La courbe noire représente la réponse du milieu en compression hydrostatique (pilotée en contrainte). La courbe rouge est la réponse en compression simple de la figure 8.7. Les courbes bleue et verte sont les réponses en compression triaxiale à 5 et 10 MPa de confinement respectivement.

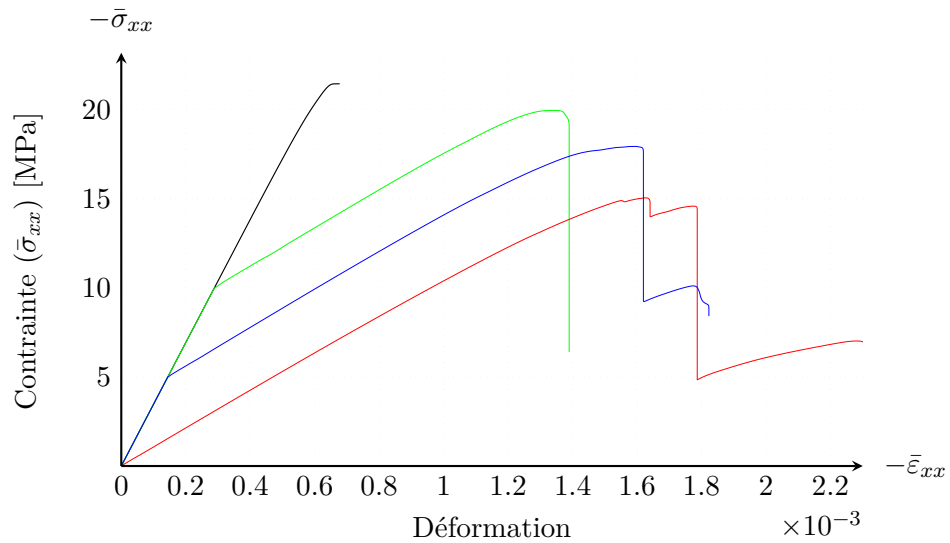


FIGURE 8.8 – Réponse en compression hydrostatique (noir), en compression simple (rouge), et en compression triaxiale, 5 MPa (bleu) et 10 MPa (vert) de confinement. Simulations réalisées sur la même microstructure que sur la figure 8.7.

Il apparaît clairement que le modèle ne prédit pas la réalité expérimentale. L'effet de la pression de confinement se traduit par une hausse de la contrainte à rupture inférieure à la pression de confinement, et même une décroissance de la déformation à rupture. Les champs de phase à rupture font l'objet de la figure 8.9, qui montre que le confinement a de plus pour effet d'inhiber la rupture transgranulaire.

Afin de comprendre les causes de ces prédictions défectueuses, on trace sur la figure 8.10 l'histogramme des déformations volumiques au pic de contraintes dans les grains et dans le liant pour le cas de la compression triaxiale à 10 MPa. Comme attendu, la déformation volumique est en compression dans la quasi-totalité de volume de calcul.

De ce fait, seules les composantes de cisaillement entrent dans l'expression de la force motrice de rupture, qui ne se produit plus en traction, mais en cisaillement. Il n'est dès lors pas étonnant d'observer des effets imprévus. Remédier à ce problème nécessite de prendre en compte la mixité des modes de rupture en introduisant une ténacité de mode II, comme le proposent par

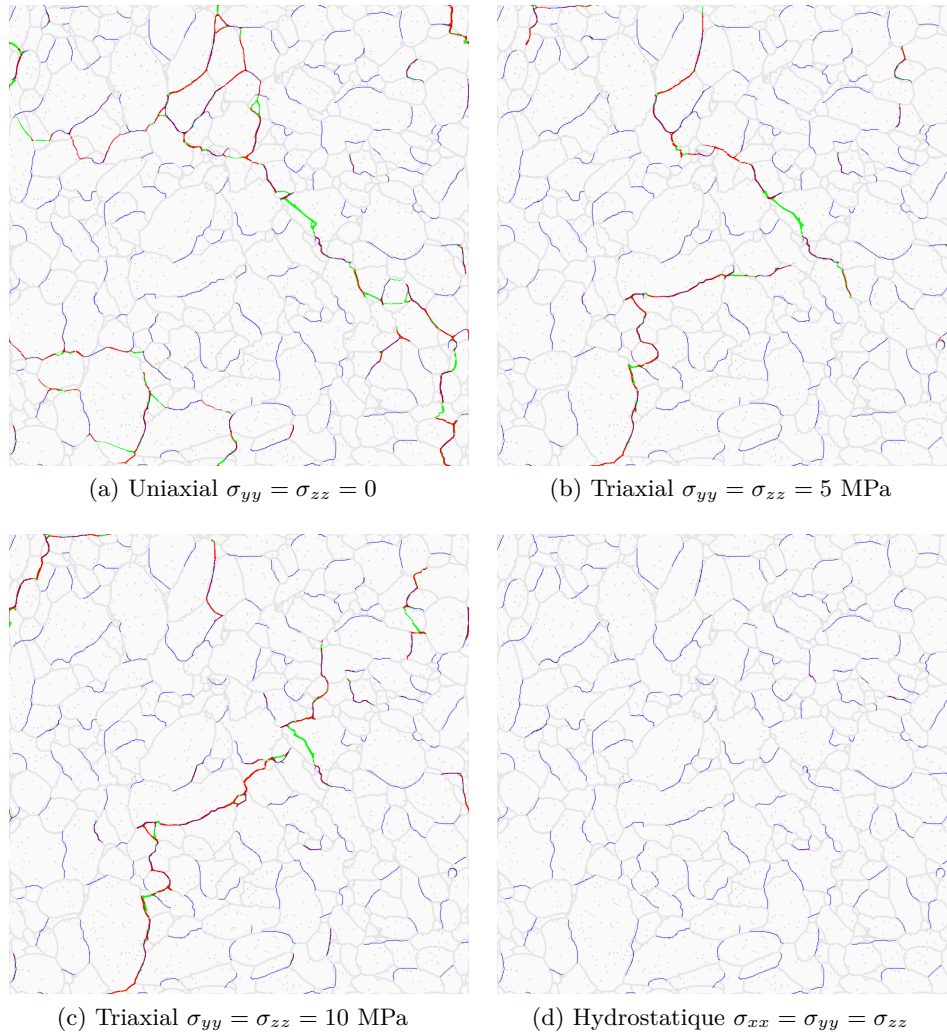


FIGURE 8.9 – Comparaison des champs de phase à rupture en compression uniaxiale, triaxiale (5 et 10 MPa) et hydrostatique. Bleu, fissures initiales, vert, transgranulaires, rouge, intergranulaires.

exemple Zhang et al. [149] dans le cas isotrope, ou Bryant et Sun [159] dans le cas anisotrope (voir le § 3.4.7).

Notons cependant que les histogrammes de la figure 8.10 sont purement élastiques, et que la prise en compte de la plasticité de l'interphase est susceptible de modifier sensiblement ces conclusions.

8.2.3 Prise en compte de la plasticité

Un premier calcul en champ de phase avec la loi de comportement parfaitement plastique (8.1) pour le liant à $T_0 = 20^\circ\text{C}$ montre que en effet, la déformation à rupture est plus importante dans la cas où la plasticité est prise

en compte. Néanmoins, celle-ci s'accompagne également d'une augmentation de la contrainte à rupture. Des calculs effectués en choisissant $T_0 = 60^\circ\text{C}$ et $T_0 = 80^\circ\text{C}$ de manière à amplifier l'effet de la plasticité, montre une plus faible augmentation de la contrainte à rupture par rapport au cas élastique (figure 8.12). Bien que le cas où $T_0 = 80^\circ\text{C}$ est certes discutable sur le plan du réalisme puisque à cette température, le liant dépasse sa limite de transition vitreuse. L'effet de la plasticité dans le liant se traduit en outre par de la fissuration transgranulaire, toujours orientée à environ $\pm 45^\circ$ (figure 8.11).

Sans modifier fondamentalement sa réponse en compression, l'introduction de la plasticité du liant se traduit par une augmentation de ductilité du composite (figure 8.1.1). L'influence de la plasticité sur les champs locaux retarde notablement la microfissuration, qui reste globalement orientée à environ $\pm 45^\circ$ (figure 8.1.2). L'effet de la température, en abaissant la limite d'écoulement du liant, amplifie le phénomène.

La prise en compte de la plasticité du liant nécessiterait de ré-identifier les paramètres du modèle de champ de phase. Augmenter la (les) ténacité(s) aurait pour conséquence de favoriser l'écoulement plastique du liant, et d'augmenter à la fois la contrainte et la déformation à rupture du composite. Il est également probable qu'un modèle de rupture interfaciale ductile aurait le même type d'effet.

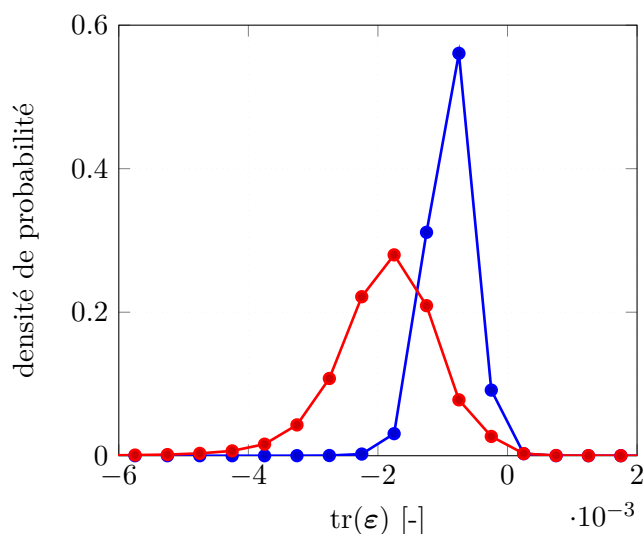


FIGURE 8.10 – Histogramme des déformations volumiques au pic de contrainte dans les grains (bleu) et dans l'interphase (rouge) pour le cas de la compression triaxiale de 10 MPa.

8.3 Pistes d'amélioration du modèle

Le présent cadre exploratoire a conduit à retenir un modèle existant, et à l'appliquer tel quel, à la fois aux grains de TATB et aux interfaces liant-charge.

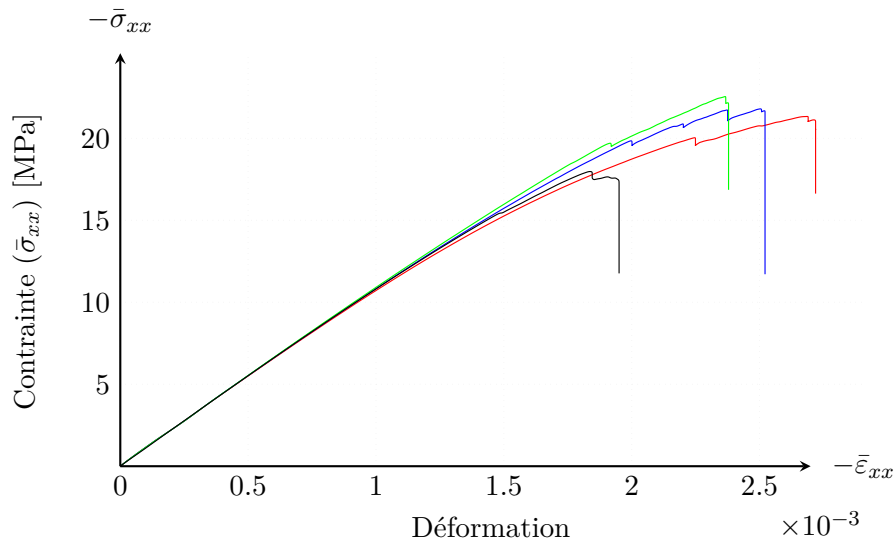


FIGURE 8.11 – Réponse en compression simple avec liant élastique (noir) ou élasto-plastique à $T=20^{\circ}\text{C}$ (vert), $T=60^{\circ}\text{C}$ (bleu) et $T=80^{\circ}\text{C}$ (rouge).

Toutefois, ce modèle et en particulier la version simplifiée utilisée dans cette thèse présentent un certain nombre de limitations, que l'on détaille dans ce qui suit.

8.3.1 Choix de la fonction $\gamma(\phi, \nabla\phi)$

D'abord, le choix de la fonction de densité volumique de surface de fissures $\gamma(\phi, \nabla\phi)$, quadratique en ϕ , conduit à l'absence de seuil d'endommagement, à une diffusion du champ de phase dès le début du chargement, et à une non linéarité prononcée de la réponse macroscopique avant la rupture.

On propose, pour éviter cet inconvénient, de suivre à l'avenir les précé-

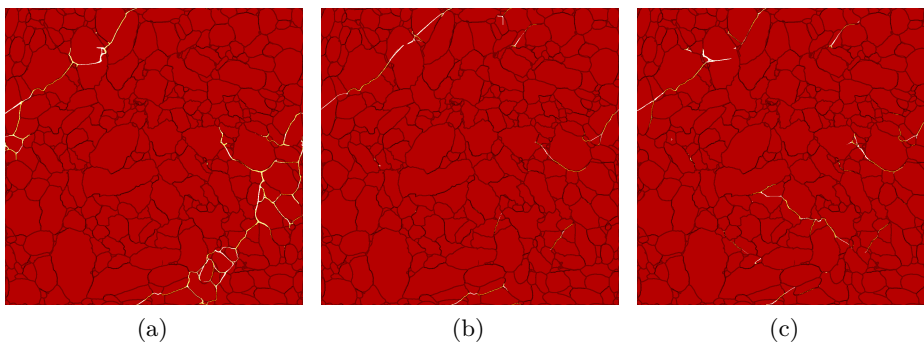


FIGURE 8.12 – Fissuration en compression simple. Déformation équivalente de Von Mises ε_{eq} (les valeurs supérieures à 50% uniquement sont seuillées) liant en gris et pré-fissures en noir. (a) Liant élastique. (b-c) Liant parfaitement plastique : $T_0 = 20^{\circ}\text{C}$ (b), 80°C (c).

nisations de Pham et al. [128], Tanné et al. [129], Bleyer et Alessi [130] et Jeulin [131], en choisissant :

$$\gamma(\phi, \nabla\phi) = \frac{3}{8\ell} (\phi + \ell \nabla\phi \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla\phi) \quad (8.3)$$

8.3.2 Anisotropie de ténacité

L'anisotropie de ténacité pose également question. En effet, l'étude de l'impact de l'anisotropie de ténacité sur l'orientation relative des microfissures par rapport à l'orientation cristallographique, réalisée au § 6.2.2, n'a rien donné de probant, et en particulier peu de différences avec le cas à ténacité isotrope.

La bibliographie (voir le § 3.4.5) propose diverses voies permettant de prendre en compte cet aspect dans la modélisation par champ de phase. Le modèle retenu ici [171] fait le choix de la plus grande simplicité possible, et on a retenu une version réduite du modèle, ne prenant en compte qu'un seul champ de phase, associé au tenseur d'anisotropie de ténacité $\boldsymbol{\omega}$, pour des raisons de régularité et de robustesse de l'algorithme. C'est probablement là que réside l'échec de la prise en compte de l'anisotropie de ténacité.

A l'avenir, on propose de prendre en compte au moins deux mécanismes, l'un décrivant la rupture dans le plan graphitique, l'autre la rupture hors plan graphitique, ce que permet le modèle retenu. Il est possible de forcer la rupture dans le plan de clivage, en définissant, pour la rupture dans le plan graphitique, un tenseur de ténacité sous la forme :

$$\boldsymbol{\omega}^1 = \begin{pmatrix} +\infty & 0 & 0 \\ 0 & +\infty & 0 \\ 0 & 0 & g_c^1 \end{pmatrix} \quad (8.4)$$

et, pour la rupture hors plan graphitique :

$$\boldsymbol{\omega}^2 = \begin{pmatrix} g_c^2 & 0 & 0 \\ 0 & g_c^2 & 0 \\ 0 & 0 & +\infty \end{pmatrix} \quad (8.5)$$

les paramètres g_c^1 et g_c^2 étant identifiés aux valeurs de l'énergie de surface données par Bidault et Pineau [93], et les valeurs infinies permettant d'interdire la rupture dans les directions correspondantes. L'effet du champ de phase sur le tenseur d'élasticité par la relation (3.107) pourrait être repris des travaux de Bleyer et Alessi [130], afin d'inclure l'anisotropie induite dans le terme de restitution d'énergie des équations d'évolution des champs de phase.

8.3.3 Contact unilatéral et frottement

Ensuite, on a vu au paragraphe 3.4.4 que le modèle de contact unilatéral ne prend pas en compte correctement les conditions d'interface liées à la présence de microfissures, ce qui se traduit par l'existence de contraintes parasites dans les fissures. Les propositions de Strobl et Seelig [154] et de Steinke et Kaliske [157] sont intéressantes, mais ne sont pas encore parvenues à une maturité suffisante pour les adopter. La difficulté est due à la définition de la normale à la fissure, qui pourrait nécessiter un algorithme ad hoc pouvant ralentir notablement les simulations.

Ce point devra faire l'objet d'un examen approfondi, qui devrait inclure le frottement sur les lèvres des microfissures, comme le proposent Fei et Choo [163, 164].

8.3.4 Mixité de modes et sensibilité à la pression

La rupture en compression est couramment observée dans les matériaux géologiques, souvent capables de rompre même lorsque les trois contraintes principales sont en compression. Il est évident que le modèle standard est incapable de décrire de telles situations, seules les déformations de traction entrant dans la force motrice de fissuration.

Il est donc nécessaire de modifier le modèle de contact unilatéral, ce que Zhang et al. [149], Choo et Sun [218], et Bryant et Sun [159] ont proposé (voir le paragraphe 3.4.7), en introduisant une ténacité de mode II. Zhou et al. [286] proposent une formulation différente incluant la dépendance de la rupture à la triaxialité des contraintes par l'intermédiaire d'une cohésion et d'un angle de frottement interne.

Les travaux ultérieurs devront nécessairement suivre ces pistes pour permettre la prévision de la rupture en compression et en compression confinée. Notons que l'une des difficultés réside dans l'identification des constantes, qu'il s'agisse d'un angle de frottement interne, d'une cohésion, ou d'une ténacité de cisaillement. Il paraît douteux, aujourd'hui, que ces paramètres puissent être déterminés expérimentalement pour notre composite, ce qui nécessitera donc le recours à l'analyse inverse.

8.3.5 Longueur interne ℓ et taille des simulations

Du fait de la relative lenteur de l'algorithme présenté au chapitre 4, la taille des simulations a été systématiquement limitée pour aboutir à des durées de calcul raisonnables. Ce choix a des conséquences multiples, qui concernent à la fois le modèle, la résolution des simulations et leur représentativité.

Les règles de dimensionnement des simulations, déduites à la fois de la littérature et de l'étude paramétrique du chapitre 5, ont conduit à choisir la longueur caractéristique $\ell = 1,5h$, ce qui oblige à abandonner la valeur physique de la ténacité locale g_c . Il en va de même pour l'épaisseur d'interphase.

Relaxer ce choix au profit d'une meilleure résolution du champ de phase au voisinage des microfissures, en choisissant par exemple $\ell \leq 5h$, nécessitera de travailler à l'accélération du schéma numérique ou à la parallélisation massive de la méthode FFT.

8.4 Extension du domaine d'applicabilité

8.4.1 Viscoélasticité

Tous les travaux réalisés dans cette thèse se sont limités aux températures inférieures ou égales à l'ambiante. Pour les températures supérieures à 70°C environ, la proximité à la transition vitreuse ($\sim 100^\circ\text{C}$) induit des effets de viscoélasticité dans le liant. On peut se référer aux travaux d'Arora et al. [28], qui utilisent un modèle hyper-viscoélastique indépendant de la température pour le liant (Kel-F 800) de leur composition explosive.

Cependant, la proximité et le franchissement de la transition vitreuse induisent de très importantes variations de modules élastiques, dont les répercussions sur le comportement effectif dépendent fortement de la morphologie du liant au sein du composite, selon qu'il enrobe l'ensemble des grains ou non. Le lecteur intéressé peut se référer aux travaux de Gallican [287]) qui montre, pour le cas de sollicitations harmoniques de faible amplitude, que le spectre de relaxation du composite n'est pas restitué correctement si l'on suppose que le liant enrobe tous les grains.

8.4.2 Rupture

Se pose d'autre part la question de la rupture de l'interphase. Le modèle considéré dans le présent travail est simplifié à l'extrême, en ayant supposé la rupture fragile de l'interface, et les simulations ci-dessus n'incorporant la plasticité du liant que comme modificateur de l'état local des contraintes. Ni le couplage entre rupture et plasticité du liant, ni la rupture du liant proprement dite n'ont été pris en compte.

Si l'on souhaite décrire la rupture proprement dite du liant, il sera nécessaire d'une part de décrire la décohésion, ce qui peut être fait à l'aide d'un modèle de champ de phase cohésif, comme le proposent Nguyen et al. [170], et d'autre part d'utiliser un modèle de champ de phase de rupture *ductile*, tels que ceux de Borden et al. [210] par exemple. Notons dans ce cas que l'hypothèse des petites transformations ne peut plus s'appliquer.

8.4.3 Aspects microstructuraux

Le présent travail s'est concentré sur la modélisation de la rupture, et n'a considéré que des (modèles de) microstructures existant(e)s. On a vu au chapitre 7 qu'une difficulté se présente si l'on cherche à relier l'épaisseur

moyenne de liant à sa fraction volumique, faute de connaissances suffisantes de la microstructure du composite. On sait par ailleurs que le meilleur modèle de microstructure virtuelle disponible pour le composite [47, 96] ne restitue qu'imparfaitement les populations des grains les plus fins, ce qui conduit à sous-estimer la surface spécifique des grains du polycristal.

Cette question a été abordée dans les travaux de Arora et al. [28] et de Li-Mayer et al. [44], qui proposent de définir une interphase composite comprenant le liant et les grains les plus fins. Cette démarche se base surtout sur le constat selon lequel l'endommagement démarre sur les grains les plus gros, et sur l'hypothèse d'existence d'une fraction de grains fins non endommagés. Adopter cette hypothèse suppose de bien définir la taille minimale des gros grains. Après quoi, il est possible de générer des microstructures à interphase composite par divers moyens, à l'aide de modèles de structure aléatoire (Voronoi, Laguerre, Johnson-Mehl, etc) ou d'images MEB ou de microtomographie et de retirer les grains les plus petits par érosion morphologique à l'aide de partitions aléatoires très générales (définies à partir de modèles de fonctions Booléennes notamment).

Mais cette démarche suppose également de construire une loi de comportement pour l'interphase composite. Li-Mayer [44] proposent une méthodologie pour le cas où le liant présente un comportement élasto-plastique. Cependant, cette méthodologie est empirique et simplifiée à l'extrême, et devrait être étudiée dans le détail.

8.5 Conclusion générale

Les travaux relatés dans le présent mémoire ont montré que le couplage entre la modélisation de la rupture par champ de phase et l'approche micromécanique d'homogénéisation numérique par FFT permet de faire des prédictions relatives à l'apparition et à la propagation de milliers de microfissures sans difficultés numériques majeures. L'approche a pu être appliquée, dans un cadre simplifié, aux sollicitations thermique et de traction.

Notre compréhension des mécanismes de déformation et de dilatation thermique du matériau d'intérêt a notablement progressé. Le rôle de l'anisotropie cristalline du TATB est fondamental. Ce phénomène est à l'origine de la microfissuration à froid aussi bien qu'à chaud et, bien sûr, intervient également sous sollicitations mécaniques. On a pu voir que la plasticité du liant n'est pas un phénomène négligeable, car il modifie sensiblement les états de contraintes au sein du matériau. D'autre part, comme toujours dans la démarche d'homogénéisation, on se heurte à la connaissance incomplète de la microstructure. La première voie à suivre dans ce domaine concerne l'amélioration de la description du liant au sein de la composition explosive. Nous avons opté pour une description continue, mais il semble, à la lumière des travaux les plus récents, que cette description soit trop idéalisée, et que

des contacts directs entre grains doivent être pris en compte. La second réside dans la prise en compte des petits grains et, peut-être, la définition d'un liant chargé.

On dispose désormais d'un outil dont le potentiel est démontré, et qu'il faut maintenant développer dans plusieurs directions, dont on a donné une esquisse au début de ce chapitre, mais dont les points les plus importants, du point de vue de l'application visée, sont l'amélioration du modèle de contact unilatéral, l'amélioration de la prise en compte de l'anisotropie de ténacité, et l'introduction de la ténacité de cisaillement, notamment en vue de décrire correctement la compression et les états de contraintes plus complexes. Le temps de calcul reste un obstacle si l'on souhaite réaliser des simulations représentatives du comportement réel. Le recours aux supercalculateurs et à des techniques de parallélisation CPU plus performante [288] est une possibilité, une fois l'algorithme parfaitement mis au point. Une autre voie réside dans l'amélioration de l'algorithme lui-même, notamment l'utilisation de méthodes par gradient conjugué [267, 289] pour le champ de déformation. On pourrait également envisager la mise au point d'un code GPU [290] sur clusters, à l'aide de bibliothèques FFT déjà implémentées pour les GPU, voire à plus long terme utiliser les données pour entraîner des algorithmes d'apprentissage automatique [291].

Le grand intérêt de cette méthode de modélisation réside dans le faible nombre, et surtout la signification physique claire, des constantes matériau requises pour chaque constituant. Ces constantes sont, pour les cristaux explosifs, les tenseurs d'élasticité et de dilatation thermique, le tenseur de ténacité, et la constante ℓ , que l'on peut identifier à partir d'un essai mécanique, soit directement sur monocristal, soit indirectement par méthode inverse sur le matériau d'intérêt. Il est notable de remarquer que la grande majorité de ces constantes peuvent être déterminées par la simulation atomistique, même s'il reste ensuite à valider les résultats sur l'expérience.

Pour le liant, le recours à la méthode classique de caractérisation mécanique et d'identification d'un modèle approprié fonctionne bien, et peut être étendu sans difficulté à d'autres types de comportement. L'une des difficultés de la démarche réside dans la description des interfaces liant-charge explosive, et la détermination de la ténacité interfaciale. Cette dernière peut être obtenue par simulations atomistiques (voir par exemple [43]), ou par l'une des méthodes expérimentales mentionnées au chapitre 1. De plus, la gestion de la compétition entre les deux modes de rupture n'a été qu'insuffisamment abordée dans ce mémoire, faute de temps. Il sera clairement nécessaire, à l'avenir, de l'approfondir, ce qui nécessitera probablement de modifier en profondeur le modèle actuel, par exemple par l'introduction du couplage entre un modèle cohésif et la plasticité du liant. Ajoutons que l'on ignore, à l'heure actuelle, si la rupture interfaciale est la décohésion ou la rupture du liant lui-même.

L'outil numérique est a priori applicable à n'importe quelle composition

explosive, si sa microstructure et les caractéristiques de ses composants sont connues. Par exemple, des simulations sur une composition comportant le même liant et contenant de l'octogène (octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine, ou HMX) sont envisageables, car son tenseur d'élasticité [292], son tenseur de dilatation thermique [293], et sa ténacité [294] sont disponibles dans la littérature. Remarquons que, dans ce cas, il est possible d'incorporer un modèle de plasticité cristalline, également disponible dans la littérature (voir par exemple [295]). De même, la prise en compte de compositions explosives à liant caoutchoutique est également envisageable, à condition d'étendre la méthode FFT aux transformations finies, ce qui ne pose pas de difficultés de principe (voir en particulier [269, 296]).

D'autre part, l'extension de la gamme de sollicitations vers les températures plus élevées nécessite une extension du modèle de comportement du liant. La viscoélasticité non linéaire doit être prise en compte si l'on souhaite s'approcher de la transition vitreuse du liant, tandis que la description de l'écoulement visqueux est indispensable pour les températures plus élevées. Ce dernier point permettrait d'envisager la modélisation du pressage, qui serait d'un grand intérêt, notamment pour prédire l'état de contraintes internes après pressage, que nous n'avons pas prises en compte dans le présent travail.

Sur un plan plus fondamental, le concept même de champ de phase, en tant que variable d'endommagement, mériterait d'être examiné de plus près. De ce point de vue, cette variable réalise essentiellement une interpolation entre le milieu sain et le milieu rompu, et beaucoup repose sur la qualité de l'interpolation entre les états sain et rompu. Se pose en particulier la question de savoir si une variable scalaire est suffisante dans un cadre cristallin, en particulier dans le cas anisotrope. Les outils de simulation atomistiques pourraient probablement fournir un éclairage approfondi sur cette question.

Chapitre 9

Annexes

9.1 Tenseur d'élasticité du cristal de TATB

Il s'agit dans cette annexe d'obtenir une comparaison entre les jeux de constantes élastiques disponibles dans la littérature [31, 32, 34, 92] et les données expérimentales de Plisson et al. [90]. Ces dernières ont été obtenues par diffraction X au synchrotron Soleil, sous pression de fluide appliquée par une cellule à enclumes de diamant. Les données fournies dans la référence [90] consistent en une série de valeurs de paramètres de la maille cristalline du TATB en fonction de la pression, données dans le tableau 9.1.

Etant donné la nature de la sollicitation, il est clair que tous les modes de déformation ne sont pas mis à contribution, le cisaillement notamment, et que la confrontation ne sera de ce fait que partielle. Deux méthodes sont proposées pour cette confrontation. Il faut d'autre part préciser que les pressions atteintes dans la référence [90] sont très élevées, et qu'une méthode d'extrapolation vers la pression atmosphérique doit être invoquée, ce qui limite encore la confrontation.

9.1.1 Estimation du module de compressibilité

La méthode consiste simplement à estimer le module de compressibilité à pression ambiante, à partir des données expérimentales et d'une fonction d'interpolation. Cette méthode, couramment utilisée en mécanique des hautes pressions, a été suggérée par Plisson et al. [90], qui proposent d'utiliser l'équation d'état de Vinet et al. [297], sous la forme :

$$p = 3K_0x^2(1-x) \exp\left(\frac{3}{2}(K'_0 - 1)(1-x)\right) \quad (9.1)$$

où $x \equiv \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\frac{1}{3}}$, V est le volume de la maille cristalline, et V_0 sa valeur à pression ambiante, K_0 est le module de compressibilité à pression ambiante, et K'_0 sa dérivée à pression ambiante. Afin de trouver la meilleure

pression	a	b	c	α	β	γ	V
GPa	Å	Å	Å	°	°	°	Å ³
0	9,04	9,03	6,81	108,5	91,7	120	443,8
2	8,88	8,89	6,41	110	92,2	120,1	397,2
4,4	8,78	8,81	6,17	110,8	92	120,2	371,4
7,6	8,76	8,72	5,994	111,5	91,8	119,9	355,7
9,9	8,71	8,68	5,902	111,8	91,6	119,9	346,3
13,3	8,67	8,63	5,796	112,3	91,3	119,9	335,5
17,3	8,62	8,57	5,684	112,7	91,1	119,9	323,9
21	8,59	8,51	5,598	113	90,9	119,9	315
25,8	8,55	8,46	5,509	113,3	90,6	119,9	305,9
28,3	8,53	8,43	5,458	113,5	90,5	119,9	301
30,8	8,52	8,4	5,422	113,7	90,4	119,9	297
36	8,48	8,36	5,342	114	90,3	120	289,1
41,2	8,4	8,3	5,301	114	90	119,8	283,1
46,1	8,35	8,27	5,249	114,1	89,9	119,8	277,6
49,5	8,3	8,24	5,21	114	90	119,5	274,4
55,1	8,25	8,2	5,17	114	89,9	119,5	269,2
58,5	8,24	8,17	5,13	114,2	89,8	119,6	265,3
61,8	8,23	8,15	5,1	114,3	89,8	119,5	262,4
66	8,23	8,12	5,07	114,6	89,6	119,6	259,1

TABLE 9.1 – Evolution des paramètres de la maille cristalline du TATB avec la pression (d'après Plisson et al. [90]).

Vinet	Bedr. P	Bedr. NP	Mathew	Lafourc.	Rykoun.
11,6	14,1	13,2	11,7	14,4	12,9

TABLE 9.2 – Module de compressibilité à pression ambiante obtenu à l'aide : **Vin.** : des données expérimentales de Plisson et al. [90] et de l'équation d'état de Vinet [297], et des composantes du tenseur d'élasticité données par **Bedr.** : Bedrov et al. [31] **P/NP** : champ de force polarisable/non polarisable, **Mathew** : Mathew et Sewell [34], **Lafourc.** : Lafourcade et al. [32], **Ryk.** : Rykoun. et al. [92]. Valeurs données en GPa.

interpolation possible des données au voisinage de la pression ambiante, on limite l'ajustement de la fonction d'état à la gamme [0-20 GPa]. On trouve $K_0 = 11,59$ GPa, et $K'_0 = 13,05$, et la figure 9.1 donne une idée de la qualité de l'ajustement.

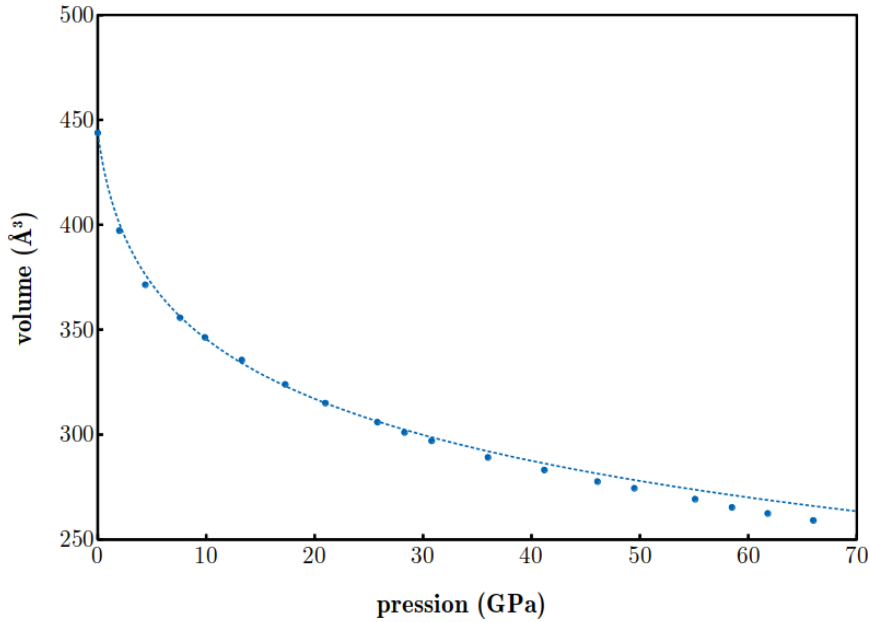


FIGURE 9.1 – Ajustement du volume de maille en fonction de la pression par l'équation d'état de Vinet (9.1).

A partir du tenseur d'élasticité du cristal de TATB, le module de compressibilité pour une sollicitation de compression hydrostatique est donné par :

$$K_0 = \frac{1}{\mathbb{S}_{11} + \mathbb{S}_{22} + \mathbb{S}_{33} + 2\mathbb{S}_{12} + 2\mathbb{S}_{13} + 2\mathbb{S}_{23}} \quad (9.2)$$

où $\mathbb{S} = \mathbb{C}^{-1}$ est le tenseur de souplesse du cristal, ici exprimé en notations de Voigt. Le tableau 9.2 compare les valeurs du module de compressibilité K_0 déduites de l'expérience et des données élastiques de la littérature.

Le résultat apparaît nettement en faveur des données de Mathew et Sewell [34].

9.1.2 Une autre méthode

Cette autre méthode cherche à tirer parti des autres données expérimentales pour établir des liens avec d'autres constantes élastiques.

Comme l'illustre la figure 9.2, la maille cristalline du TATB est définie par le repère cristallographique non orthonormé $\mathcal{B} = (\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$. On définit le repère cartésien orthonormé de référence $\mathcal{C} = (\mathbf{e}_1^c, \mathbf{e}_2^c, \mathbf{e}_3^c)$ tel que le vecteur \mathbf{e}_1^c est colinéaire au vecteur \mathbf{a} , le vecteur \mathbf{e}_2^c est dans le plan (\mathbf{a}, \mathbf{b}) , et le vecteur \mathbf{e}_3^c est tel que \mathcal{C} forme un repère orthonormé direct.

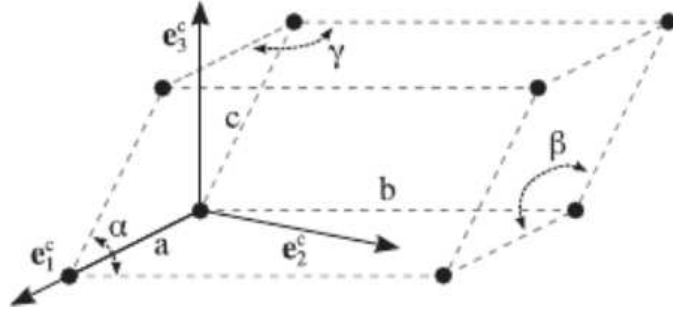


FIGURE 9.2 – Maille cristalline du cristal de TATB, repère cristallographique \mathcal{B} , repère cartésien de référence \mathcal{C} et définition des paramètres de maille (d'après Luscher et al. [64]).

On note $\mathcal{B}_0 = (\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \mathbf{c}_0)$ le repère cristallographique de la maille cristalline à l'état initial non déformé. Pour tout point \mathbf{X} de la maille initiale, on note $\{\mathbf{X}\}_{\mathcal{B}_0}$ ses coordonnées dans le repère cristallographique \mathcal{B}_0 et $\{\mathbf{X}\}_{\mathcal{C}}$ ses coordonnées dans le repère cartésien \mathcal{C} . On peut alors écrire :

$$\{\mathbf{X}\}_{\mathcal{C}} = \mathbf{H}_0 \cdot \{\mathbf{X}\}_{\mathcal{B}_0} \quad (9.3)$$

où \mathbf{H}_0 est la matrice de passage définie par :

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} a_0 & b_0 \cos \gamma_0 & c_0 \cos \beta_0 \\ 0 & b_0 \sin \gamma_0 & d_0 \\ 0 & 0 & e_0 \end{pmatrix} \quad (9.4)$$

avec :

$$\begin{cases} d_0 = \frac{c_0(\cos \alpha_0 - \cos \gamma_0 \cos \beta_0)}{\sin \gamma_0} \\ e_0 = \sqrt{c_0^2 \sin^2 \beta_0 - d_0^2} \end{cases} \quad (9.5)$$

On peut faire de même avec le même point matériel, noté \mathbf{x} à l'état déformé, repéré par ses coordonnées $\{\mathbf{x}\}_{\mathcal{B}}$ dans le repère cristallographique \mathcal{B} et $\{\mathbf{x}\}_{\mathcal{C}}$ dans le repère cartésien \mathcal{C} . De même que précédemment, on peut écrire :

$$\{\mathbf{x}\}_{\mathcal{C}} = \mathbf{H} \cdot \{\mathbf{x}\}_{\mathcal{B}} \quad (9.6)$$

où \mathbf{H} est la matrice de passage définie par :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} a & b \cos \gamma & c \cos \beta \\ 0 & b \sin \gamma & d \\ 0 & 0 & e \end{pmatrix} \quad (9.7)$$

avec :

$$\begin{cases} d = \frac{c(\cos \alpha - \cos \gamma \cos \beta)}{\sin \gamma} \\ e = \sqrt{c^2 \sin^2 \beta - d^2} \end{cases} \quad (9.8)$$

Le tenseur gradient de transformation $\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}$ est tel que :

$$\{\mathbf{x}\}_C = \mathbf{F} \cdot \{\mathbf{X}\}_C \quad (9.9)$$

ce qui permet d'écrire :

$$\{\mathbf{x}\}_B = \mathbf{H}^{-1} \cdot \mathbf{F} \cdot \mathbf{H}_0 \cdot \{\mathbf{X}\}_{B_0} \quad (9.10)$$

Etant donné qu'il s'agit du même point matériel, on peut écrire que :

$$\{\mathbf{x}\}_B = \{\mathbf{X}\}_{B_0} \quad (9.11)$$

et en déduire que :

$$\mathbf{F} = \mathbf{H} \cdot \mathbf{H}_0^{-1} \quad (9.12)$$

Si on se limite aux transformations infinitésimales, on obtient le tenseur de déformation :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}(\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}_0^{-1}) - \mathbf{I} \quad (9.13)$$

où sym désigne l'opération de symétrisation d'un tenseur de second ordre. Il est ainsi possible de déterminer le tenseur de déformation du cristal à partir des variations de ses paramètres de maille.

Pour une expérience en cellule à enclumes de diamant, la sollicitation est une pression de fluide $p = -\frac{1}{3}\sigma_{kk}\mathbf{I}$ appliquée à toutes les faces du cristal, où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes et \mathbf{I} est le tenseur identité du second ordre. On peut donc particulariser la relation 9.13 :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(p) = \text{sym}(\mathbf{H}(p) \cdot \mathbf{H}_0^{-1}) - \mathbf{I} \quad (9.14)$$

En se plaçant au voisinage de la pression ambiante, on peut développer en série de Taylor à l'ordre 1 au voisinage de 0 :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(p) = \left[\left(\mathbf{H}(0) + p \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p} \Big|_{p=0} \right) \cdot \mathbf{H}_0^{-1} \right] - \mathbf{I} \quad (9.15)$$

pour obtenir, en choisissant $\mathbf{H}(0) = \mathbf{H}_0$:

$$\varepsilon(p) = p \cdot \text{sym} \left(\left. \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p} \right|_{p=0} \cdot \mathbf{H}_0^{-1} \right) \quad (9.16)$$

Au voisinage de la pression ambiante, le comportement élastique est linéaire, et on peut écrire :

$$\varepsilon(p) = -\mathbf{S} : p\mathbf{I} \quad (9.17)$$

En reportant (9.17) dans la relation (9.16), on obtient finalement :

$$\mathbf{S} : \mathbf{I} = -\text{sym} \left(\left. \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p} \right|_{p=0} \cdot \mathbf{H}_0^{-1} \right) \quad (9.18)$$

Cette relation établit un lien partiel entre les constantes élastiques et les mesures de diffraction X sous pression.

9.1.3 Analyse des données de Plisson et al.

La première tâche pour appliquer cette méthode consiste à identifier le tenseur $\left. \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p} \right|_{p=0}$. Pour cela, on trace chaque paramètre de maille en fonction de la pression, on cherche une fonction représentant bien ses variations, et on la dérive à l'origine. La figure 9.3 donne les variations des paramètres a , b et c avec la pression.

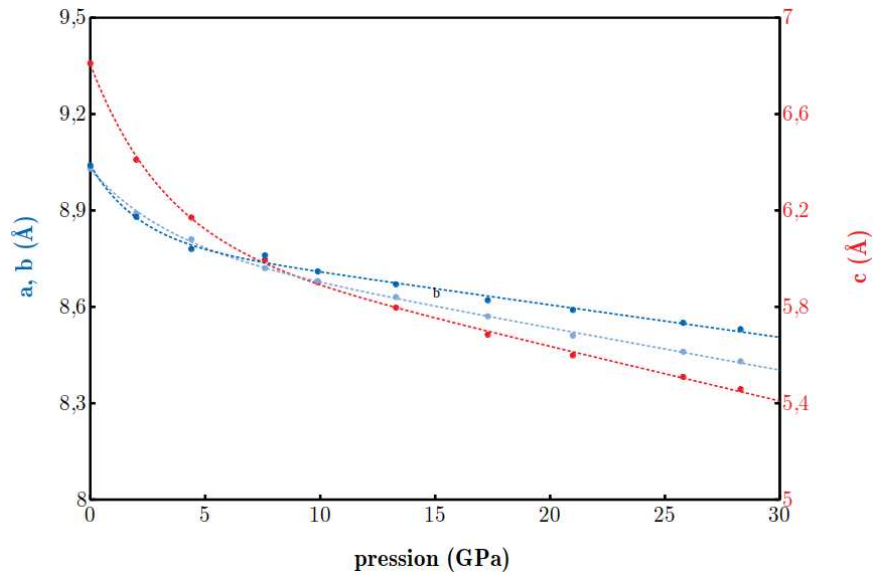


FIGURE 9.3 – Evolution des paramètres de maille a (bleu foncé), b (bleu clair) et c (rouge) avec la pression. Points : données de Plisson et al. [90]. Courbes pointillées : relation (9.19).

Elles sont bien restituées par la relation suivante :

$\xi(p)$	ξ_0	r	s	p_0
Å	Å	Å.GPa ⁻¹]	Å	GPa
a	9,04	-0,0101	0,2322	2,102
b	9,03	-0,0131	0,2318	3,423
c	6,80	-0,0226	0,7185	3,173

TABLE 9.3 – Constantes intervenant dans la relation (9.19) pour les paramètres de maille a , b et c .

$$\xi(p) = \xi_0 + r.p - s \left(1 - e^{-\frac{p}{p_0}}\right) \quad (9.19)$$

où $\xi(p)$ représente les paramètres de maille a , b , ou c , ξ_0 leurs valeurs à pression atmosphérique, et où les constantes r , s et p_0 sont données dans le tableau 9.3.

En dérivant l'expression (9.19), on obtient :

$$\frac{\partial \xi(p)}{\partial p} = r - \frac{s}{p_0} e^{-\frac{p}{p_0}} \quad (9.20)$$

dont l'ordonnée à l'origine :

$$\frac{\partial \xi(p)}{\partial p} = r - \frac{s}{p_0} \quad (9.21)$$

prend les valeurs de -0,1206, -0,0808 et -0,2490 pour les paramètres a , b et c respectivement.

La figure 9.4 donne les variations des angles de maille α , β et γ avec la pression. Les variations de l'angle α sont bien reproduites par la relation (9.19), avec les valeurs des constantes ξ_0 , r , s et p_0 de 108,5°, 0,0503 Å.GPa⁻¹, -3,128 Å et 5,221 GPa respectivement. Les angles β et γ sont supposés constants au voisinage de la pression atmosphérique, et prennent les valeurs de 119,95° et 91,92° respectivement.

On obtient ainsi pour $\left. \frac{\partial \xi(p)}{\partial p} \right|_{p=0}$ les valeurs suivantes :

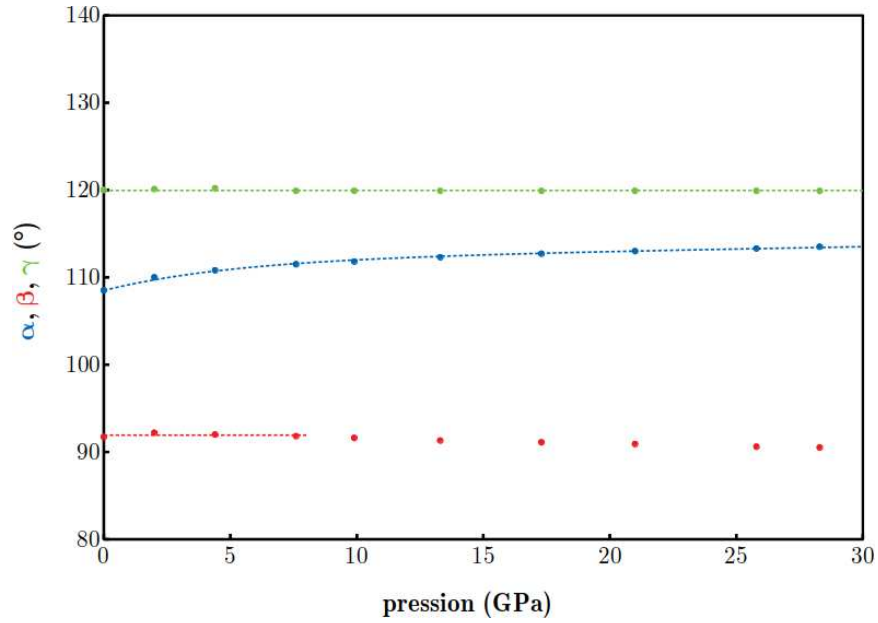


FIGURE 9.4 – Evolution des paramètres de maille α (bleu foncé), β (rouge) et γ (vert) avec la pression. Points : données de Plisson et al. [90]. Courbes pointillées rouge et verte : moyennes. Courbe pointillée bleu foncé : relation (9.19).

$$\left\{ \begin{array}{l} \left. \frac{\partial a(p)}{\partial p} \right|_{p=0} = -0,1203 \text{ \AA} \cdot \text{GPa}^{-1} \\ \left. \frac{\partial b(p)}{\partial p} \right|_{p=0} = -0,0808 \text{ \AA} \cdot \text{GPa}^{-1} \\ \left. \frac{\partial c(p)}{\partial p} \right|_{p=0} = -0,2490 \text{ \AA} \cdot \text{GPa}^{-1} \\ \left. \frac{\partial \alpha(p)}{\partial p} \right|_{p=0} = 0,6494 \text{ }^\circ \cdot \text{GPa}^{-1} \\ \left. \frac{\partial \beta(p)}{\partial p} \right|_{p=0} = 0 \\ \left. \frac{\partial \gamma(p)}{\partial p} \right|_{p=0} = 0 \end{array} \right. \quad (9.22)$$

La matrice de passage \mathbf{H}_0 est donnée par :

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} 9,04 & -4,515 & -0,202 \\ 0 & 7,820 & -2,612 \\ 0 & 0 & 6,286 \end{pmatrix} \text{ \AA} \quad (9.23)$$

La matrice $\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p}$ s'écrit :

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p} = \begin{pmatrix} \frac{\partial a}{\partial p} & \frac{\partial b}{\partial p} \cos \gamma - b \sin \gamma \frac{\partial \gamma}{\partial p} & \frac{\partial c}{\partial p} \cos \beta - c \sin \beta \frac{\partial \beta}{\partial p} \\ 0 & \frac{\partial b}{\partial p} \sin \gamma + b \cos \gamma \frac{\partial \gamma}{\partial p} & \frac{\partial d}{\partial p} \\ 0 & 0 & \frac{\partial e}{\partial p} \end{pmatrix} \quad (9.24)$$

de sorte que, tous calculs faits :

$$-\text{sym} \left[\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p} \Big|_{p=0} \cdot \mathbf{H}_0^{-1} \right] = \begin{pmatrix} 0,0133 & 0,00129 & -0,00916 \\ & 0,00895 & 0,00099 \\ \text{sym} & & 0,04215 \end{pmatrix} \text{Å.GPa}^{-1} \quad (9.25)$$

Le membre de gauche de la relation (9.18) s'écrit :

$$\mathbf{S} : \mathbf{I} = \begin{pmatrix} \mathbb{S}_{11} + \mathbb{S}_{12} + \mathbb{S}_{13} & \mathbb{S}_{16} + \mathbb{S}_{26} + \mathbb{S}_{36} & \mathbb{S}_{15} + \mathbb{S}_{25} + \mathbb{S}_{35} \\ & \mathbb{S}_{12} + \mathbb{S}_{22} + \mathbb{S}_{23} & \mathbb{S}_{14} + \mathbb{S}_{24} + \mathbb{S}_{34} \\ \text{sym} & & \mathbb{S}_{13} + \mathbb{S}_{23} + \mathbb{S}_{33} \end{pmatrix} \quad (9.26)$$

9.1.4 Résultats

La comparaison des composantes des deux membres de la relation (9.18) fait l'objet du tableau 9.4.

	exp.	Bed. P	Bed. NP	Mat.	Laf.	Ryk.
$\frac{1}{\mathbb{S}_{11} + \mathbb{S}_{12} + \mathbb{S}_{13}}$	75,0	97,8	78,8	72,6	61,3	86,7
$\frac{1}{\mathbb{S}_{12} + \mathbb{S}_{22} + \mathbb{S}_{23}}$	111,8	104,8	110,8	83,2	73,7	100,5
$\frac{1}{\mathbb{S}_{13} + \mathbb{S}_{23} + \mathbb{S}_{33}}$	23,7	19,6	18,5	16,8	25,4	17,8
$\frac{1}{\mathbb{S}_{14} + \mathbb{S}_{24} + \mathbb{S}_{34}}$	1014,3	-146,7	-175,3	-234,7	65,8	82,7
$\frac{1}{\mathbb{S}_{15} + \mathbb{S}_{25} + \mathbb{S}_{35}}$	-109,2	36,6	36,9	52,7	71,1	74,3
$\frac{1}{\mathbb{S}_{16} + \mathbb{S}_{26} + \mathbb{S}_{36}}$	788,6	-2533,4	-1043,6	-2246,3	-787,3	-824,3

TABLE 9.4 – Comparaison des composantes des membres de la relation (9.18). **exp.** : données extraites de Plisson et al. [90]. **Bed.** : données de Bedrov et al. [31] **P/NP** : champ de force polarisable/non polarisable. **Mat.** : Mathew et Sewell [34]. **Laf.** : Lafourcade et al. [32]. **Ryk.** : Rykounov [92]. Valeurs données en GPa.

Plusieurs observations peuvent être faites :

- les termes de cisaillement \mathbb{S}_{44} , \mathbb{S}_{55} et \mathbb{S}_{66} et les termes croisés n'interviennent pas dans (9.18). Ceci vient du fait que le cristal n'est pas sollicité en cisaillement. De ce fait, les propriétés du cristal en cisaillement ne peuvent pas être testées ;
- les termes des trois dernières lignes du tableau 9.4 ne sont pas restitués correctement. Les composantes du tenseur d'élasticité intervenant dans ces termes sont proches de zéro, et leur incertitude est forte.

La validation portant sur les composantes du tenseur de souplesse, il est nécessaire d'inverser le tenseur d'élasticité, ce qui fait intervenir l'inverse de grandeurs proches de zéro ;

- pour tous les auteurs, les ordres de grandeur des trois premières lignes du tableau 9.4 sont corrects. Le premier terme est bien restitué par Mathew et Sewell [34], et le troisième par Lafourcade et al. [32]. Ce sont cependant Bedrov et al. [31] qui obtiennent les valeurs les plus proches pour les trois premières lignes, avec leur champ de force non polarisable. C'est pourquoi ces données ont été retenues dans les travaux de ce mémoire.

9.2 Tenseur de dilatation thermique du cristal de TATB

Il s'agit dans cette Annexe de calculer le tenseur de dilatation thermique anisotrope à partir des données cristallographiques obtenues par diffraction X et de leurs évolutions avec la température. On considère ici les données de Sun et al. [89], rappelées dans le tableau 9.5.

temp.	a	b	c	α	β	γ
°C	Å	Å	Å	°	°	°
30	9,016	9,033	6,827	108,68	91,77	119,97
60	9,022	9,037	6,86	108,64	91,73	119,97
90	9,02	9,034	6,888	108,61	91,69	119,98
120	9,025	9,041	6,925	108,58	91,66	119,97
150	9,029	9,042	6,959	108,55	91,61	119,98
180	9,029	9,047	6,993	108,55	91,56	119,98
210	9,035	9,051	7,033	108,52	91,53	119,99
240	9,036	9,049	7,068	108,53	91,5	119,97
240	9,036	9,052	7,067	108,54	91,49	120,01
210	9,037	9,051	7,031	108,52	91,54	119,99
180	9,034	9,049	6,995	108,56	91,56	119,98
150	9,028	9,044	6,962	108,57	91,59	119,98
120	9,023	9,039	6,922	108,6	91,63	119,97
90	9,019	9,035	6,89	108,6	91,67	119,99
60	9,021	9,038	6,861	108,65	91,71	119,98
30	9,015	9,032	6,827	108,68	91,76	119,97

TABLE 9.5 – Evolution des paramètres de la maille cristalline du TATB avec la température (d'après Sun et al. [89]).

On part de la relation (9.13) de l'Annexe 9.1, que l'on spécialise au cas d'une sollicitation thermique à contrainte nulle :

9.2. TENSEUR DE DILATATION THERMIQUE DU CRISTAL DE TATB221

$$\varepsilon(T) = \text{sym} \left(\mathbf{H}(T) \cdot \mathbf{H}_0^{-1} \right) - \mathbf{I} \quad (9.27)$$

On obtient les composantes du tenseur de déformation thermique $\varepsilon(T)$ du tableau 9.6.

temp.	ε_{11}	ε_{12}	ε_{13}	ε_{22}	ε_{23}	ε_{33}
30	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
60	0,665	0,064	0,338	0,443	-0,288	5,393
90	0,444	0,009	0,625	0,010	-0,729	9,948
120	0,998	0,032	0,846	0,886	-1,173	15,813
150	1,442	0,041	1,261	0,896	-1,639	21,306
180	1,442	-0,119	1,603	1,449	-2,279	26,557
210	2,107	-0,142	1,811	1,791	-2,960	32,831
240	2,218	0,129	2,146	1,771	-3,916	38,080
240	2,218	-0,317	2,059	1,700	-4,048	37,816
210	2,329	-0,078	1,748	1,791	-2,955	32,485
180	1,996	-0,022	1,649	1,670	-2,399	26,763
150	1,331	-0,055	1,406	1,117	-1,783	21,675
120	0,776	0,032	1,137	0,664	-1,172	15,355
90	0,333	-0,142	0,746	0,020	-0,597	10,413
60	0,555	-0,087	0,460	0,453	-0,335	5,536
30	-0,111	0,000	0,093	-0,111	0,031	0,052

TABLE 9.6 – Evolution des composantes du tenseur de déformation thermique en fonction de la température obtenue à l'aide de la relation (9.27) et des données du tableau 9.5. Température donnée en °C, déformations données en ‰

Les figures 9.5, 9.6 et 9.7 illustrent les variations des composantes du tenseur de déformation thermique. On observe que les composantes ε_{11} et ε_{22} du tenseur de déformation thermique sont relativement dispersées, mais évoluent linéairement avec la température. Il en va de même avec les composantes ε_{12} et ε_{23} . Les composantes ε_{33} et ε_{23} ont une évolution quadratique, ce qui montre que le tenseur de dilatation thermique n'est pas constant, mais linéaire en fonction de la température.

Les régressions linéaires et paraboliques des composantes du tenseur de déformation thermique s'écrivent :

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3,53 \times 10^{-4} + 1,3 \times 10^{-5} \cdot T \\ -3,83 \times 10^{-4} + 9,57 \times 10^{-6} \cdot T \\ -5,00 \times 10^{-3} + 1,6688 \times 10^{-4} \cdot T + 5,38 \times 10^{-8} \cdot T^2 \\ 1,86 \times 10^{-4} - 5,00 \times 10^{-6} \cdot T - 5,04 \times 10^{-8} \cdot T^2 \\ -1,90 \times 10^{-4} + 9,71 \times 10^{-6} \cdot T \\ 2,34 \times 10^{-5} - 4,76 \times 10^{-7} \cdot T \end{pmatrix} \quad (9.28)$$

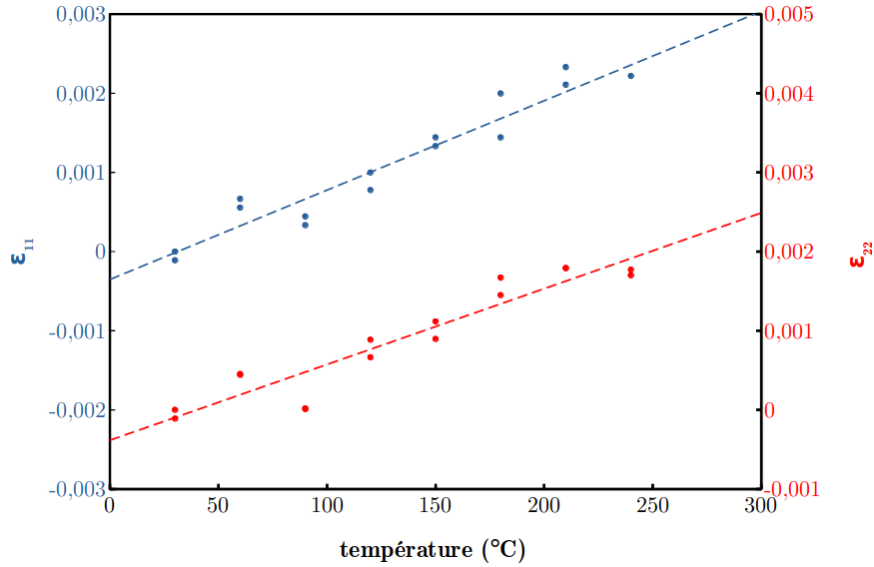


FIGURE 9.5 – Evolution des composantes ε_{11} (bleu) et ε_{22} (rouge) de la déformation thermique avec la température. Points : données du tableau 9.6. Lignes pointillées : régressions linéaires.

Dans le cadre de l'élasticité linéaire, la relation thermoélastique peut s'écrire :

$$\sigma_{ij} = \mathbb{C}_{ijkl}(T) (\varepsilon_{kl} - \alpha_{kl}(T)(T - T_0)) \quad (9.29)$$

Pour une expérience de dilatation thermique pour laquelle $\sigma_{ij} = 0$, on obtient :

$$\varepsilon_{ij} = \alpha_{ij}(T)(T - T_0) \quad (9.30)$$

ce qui permet d'écrire :

$$\alpha_{ij}(T) = \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial T} \quad (9.31)$$

On obtient le tenseur de dilatation thermique sous la forme finale :

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 11,29 & -0,48 & 9,71 \\ & 9,57 & -2,83 - 1,07 \times 10^{-2}(T - T_0) \\ \text{sym.} & & 169,01 + 1,065 \times 10^{-3}(T - T_0) \end{pmatrix} \times 10^{-6} \text{ K}^{-1} \quad (9.32)$$

où la température est exprimée en °C, et où $T_0 = 20^\circ\text{C}$.

9.2. TENSEUR DE DILATATION THERMIQUE DU CRISTAL DE TATB223

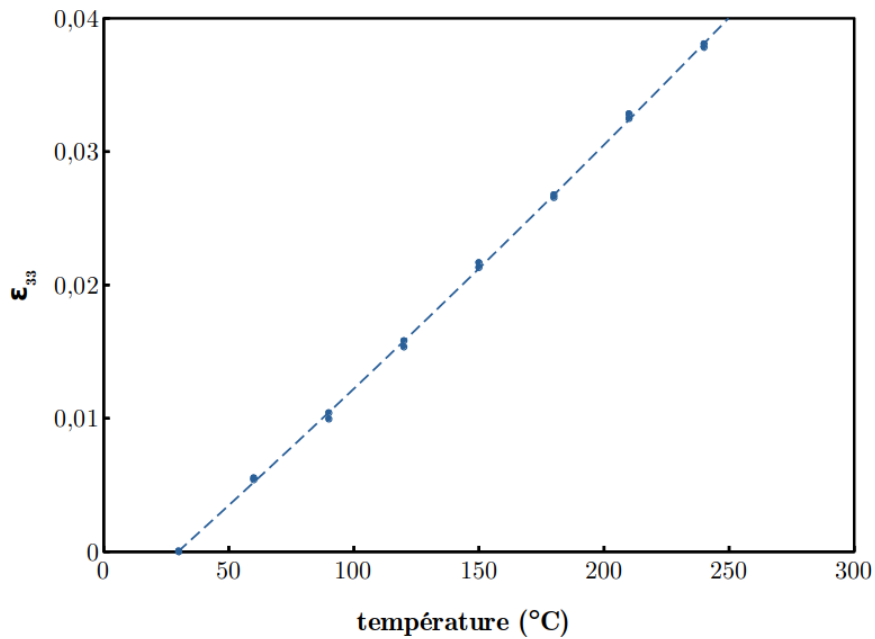


FIGURE 9.6 – Evolution de la composante ε_{33} de la déformation thermique avec la température. Points : données du tableau 9.6. Ligne pointillée : régression parabolique.

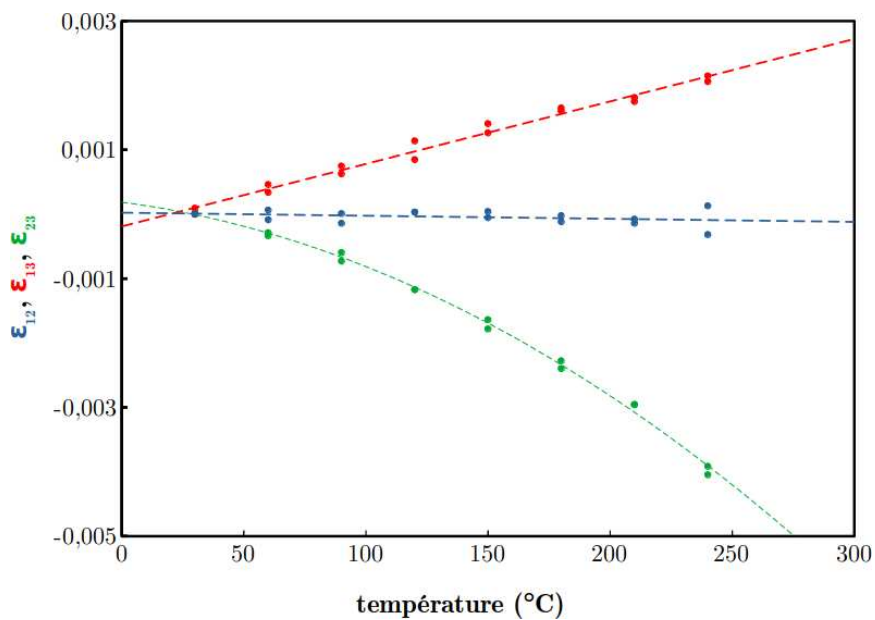


FIGURE 9.7 – Evolution des composantes ε_{12} , ε_{13} et ε_{23} de la déformation thermique avec la température. Points : données du tableau 9.6. Lignes pointillées : régressions linéaire ou parabolique.

Bibliographie

- [1] S. Gallier and F. Hiernard. Microstructure of composite propellants using simulated packings and x-ray tomography. *J. Prop. Power*, 24 : 147–150, 2008.
- [2] H. Trumel, P. Lambert, G. Vivier, and Y. Sadou. *Toward physically-based explosive modelling : meso-scale investigations*, chapter 9, pages 179–204. Wiley, 2010.
- [3] P. Rangaswamy and M. W. Lewis. High-and-low-strain rate, compression of several energetic material composites as a function of strain rate and temperature. In *11th National Congress on Computational Mechanics, Minneapolis, MN., USA*, 2011.
- [4] G. T. Gray III, D. J. Idar, W. R. Blumenthal, C. M. Cady, and P. D. Peterson. High-and-low-strain rate, compression of several energetic material composites as a function of strain rate and temperature. In *11th International Detonation Symposium, Snowmass Village, CO., USA*, 1998.
- [5] W. R. Blumenthal, G. T. Gray III, D. J. Idar, M. D. Holmes, P. D. Scott, C. M. Cady, and D. D. Cannon. Influence of temperature and strain rate on the mechanical behavior of PBX-9502 and Kel-F 800. In *Shock Compression of Condensed Matter APS Topical Group, Snowbird, UT., USA*, 1999.
- [6] K. Ellis, C. Leppard, and H. H. Radesk. Mechanical properties and damage evaluation of a UK PBX. *J. Mat. Sci.*, 40 :6241–6248, 2005.
- [7] V. D. Le, M. Gratton, M. Caliez, A. Frachon, and D. Picart. Experimental mechanical characterization of plastic-bonded explosives. *J. Mat. Sci.*, 45 :5802–5813, 2010.
- [8] D. A. Wiegand, B. Redingius, K. Ellis, and C. Leppard. Pressure and friction dependent mechanical strength – cracks and plastic flow. *Int. J. Solids Structures*, 48 :1617–1629, 2011.

- [9] D. M. Hoffman. Dynamic mechanical signatures of a polyester-urethane and plastic-bonded explosives based on this polymer. *J. Appl. Pol. Sci.*, 83 :1009–1024, 2002.
- [10] D. R. Drodge, D. M. Williamson, S. J. P. Palmer, W. G. Proud, and R. K. Govier. The mechanical response of a PBX and binder : combining results across the strain-rate and frequency domains. *J. Phys D. : Appl. Phys.*, 43 :335403, 2010.
- [11] D. Picart and J.-L. Brigolle. Characterization of the viscoelastic behaviour of a plastic-bonded explosive. *Mat. Sci. Engng. A*, 527 : 7826–7831, 2010.
- [12] D. G. Thompson, R. Deluca, and G. W. Brown. Time–temperature analysis, tension and compression in PBXs. *J. Energetic Mat.*, 30 : 299–323, 2012.
- [13] M. L. Williams, R. F. Landel, and J. D. Ferry. The temperature dependence of relaxation mechanisms in amorphous polymers and other glass-forming liquids. *J. Amer. Chem. Soc.*, 77 :3701–3707, 1955.
- [14] H. F. Rizzo, J. R. Humphrey, and J. R. Kolb. Growth of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene. II. Control of growth by use of high Tg polymeric binders. *Prop. Expl. Pyrotech.*, 6 :27–36/57–62, 1981.
- [15] D. G. Thompson, C. Woznick, and R. DeLuca. Thermal cycling and ratchet growth of TATB and PBX 9502. *Prop. Expl. Pyrotech.*, 44 : 1–9, 2019.
- [16] P. J. Rae, S. J. P. Palmer, H. T. Goldrein, J. E. Field, and A. L. Lewis. Quasi-static studies of the deformation and failure of PBX 9501. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 458 :2227–2242, 2002.
- [17] D. M. Williamson, S. J. P. Palmer, W. G. Proud, and R. Govier. Brazilian disc testing of a UK PBX above and below the glass transition temperature. In *Shock Compression of Condensed Matter APS Topical Group, Wailoloa, HI., USA*, 2007.
- [18] Z.-N. Yuan, H. Chen, J.-M. Li, B. Dai, and W.-B. Zhang. In-situ x-ray tomography observation of structure evolution in 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene based polymer bonded explosive (TATB-PBX) under thermo-mechanical loading. *MDPI Materials*, 11 :732, 2018.
- [19] M. R. Baer. Modeling heterogeneous energetic materials at the mesoscale. *Thermochimica Acta*, 384 :351–367, 2002.
- [20] A. Barua and M. Zhou. Computational analysis of temperature rises in microstructures of HMX-Estane PBXs. *Comput. Mech.*, 52 :151–159, 2013.

- [21] S. Chakravarthy, K. A. Gonthier, and R. Panchadhara. Analysis of mesoscale heating by piston supported waves in granular metalized explosive. *Modelling Simul. Mater. Sci. Engng.*, 21 :055016, 2013.
- [22] X. Wang, Y. Wu, F. Huang, T. Jiao, and R. J. Clifton. Mesoscale thermal-mechanical analysis of impacted granular and polymer-bonded explosives. *Mech. Mat.*, 99 :68–78, 2016.
- [23] S. Kim, Y. Wei, Y. Horie, and M. Zhou. Prediction of shock initiation thresholds and ignition probability of polymer-bonded explosives using mesoscale simulations. *J. Mech. Phys. Solids*, 114 :97–116, 2018.
- [24] R. S. Tate, D. S. Fryer, S. Pasqualini, M. F. Montague, J. J. de Pablo, and P. F. Nealey. Extraordinary elevation of the glass transition temperature of thin polymer films grafted to silicon oxide substrates. *J. Chem. Phys.*, 115 :9982–9990, 2001.
- [25] J. Richeton, S. Ahzi, K. S. Vecchio, F. C. Jiang, and A. Makradi. Modeling and validation of the large deformation inelastic response of amorphous polymers over a wide range of temperatures and strain rates. *Int. J. Solids Structures*, 44 :7938–7954, 2007.
- [26] V. Srivastava, S. A. Chester, N. M. Ames, and L. Anand. A thermo-mechanically-coupled large-deformation theory for amorphous polymers in a temperature range which spans their glass transition. *Int. J. Plasticity*, 26 :1138–1182, 2010.
- [27] W. E. Cady and L. E. Caley. Properties of Kel F-800 polymer. Technical Report UCRL-52301, Lawrence Livermore Laboratory, Livermore, CA., USA, 1977.
- [28] H. Arora, E. Tarleton, J. Li-Mayer, M. N. Charalambides, and D. Lewis. Modelling the damage and deformation process in a plastic bonded explosive microstructure under tension using the finite element method. *Comput. Mat. Sci.*, 110 :91–101, 2015.
- [29] A R. Zamiri and S. De. Modeling the anisotropic deformation response of beta-HMX molecular crystals. *Prop. Expl. Pyrotech.*, 36 :247–251, 2011.
- [30] D. B. Hardin, J. J. Rimoli, and M. Zhou. Analysis of thermomechanical response of polycrystalline HMX under impact loading through mesoscale simulations. *AIP Advances*, 4 :097136, 2014.
- [31] 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. *J. Chem. Phys.*, 131 :224703, 2009.

- [32] P. Lafourcade, C. Denoual, and J.-B. Maillet. Irreversible deformation mechanisms for 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene single crystal through molecular dynamics simulations. *J. Phys. Chem. C*, 122 : 14954–14964, 2018.
- [33] P. Lafourcade, C. Denoual, and J.-B. Maillet. Mesoscopic constitutive law with nonlinear elasticity and phase transformation for the twinning-buckling of TATB under dynamic loading. *Phys. Rev. Mat.*, 3 :053610, 2019.
- [34] N. Mathew and T. D. Sewell. Nanoindentation of the triclinic molecular crystal 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene : a molecular dynamics study. *J. Phys. Chem. C*, 120 :8266–8277, 2016.
- [35] T. B. Brill and R. J. Karpowicz. Solid phase transition kinetics. The role of intermolecular forces in the condensed-phase decomposition of octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine. *J. Phys. Chem.*, 86 : 4260–4265, 1982.
- [36] T. Chakraborty, S. S. Khatri, and A. L. Verma. Temperature-dependent Raman study of ammonium perchlorate single crystals : The orientational dynamics of the NH_4^+ ions and phase transitions. *J. Chem. Phys.*, 84 :7018–7027, 1986.
- [37] S. J. P. Palmer, D. M. Williamson, and W. G. Proud. Adhesion studies between HMX and EDC 37 binder system. In *Shock Compression of Condensed Matter APS Topical Group, Baltimore, MD., USA*, 2005.
- [38] D. J. Walters, D. J. Luscher, J. D. Yeager, and B. M. Patterson. Cohesive finite element modeling of the delamination of HTPB binder and HMX crystals under tensile loading. *Int. J. Mech. Sci.*, 140 : 151–162, 2017.
- [39] H. Tan, C. Liu, Y. Huang, and P.H. Geubelle. The cohesive law for the particle/matrix interfaces in high explosives. *J. Mech. Phys. Solids*, 53 :1892–1917, 2005.
- [40] T. Mori and K. Tanaka. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall.*, 21 :571–574, 1973.
- [41] R. Hu, C. Prakash, V. Tomar, M. Harr, I. E. Gunduz, and C. Oskay. Experimentally-validated mesoscale modeling of the coupled mechanical-thermal response of AP-HTPB energetic material under dynamic loading. *Int. J. Fract.*, 203 :277–298, 2017.

- [42] R. H. Gee, A. Maiti, S. Bastea, and L. E. Fried. Molecular dynamics investigation of adhesion between TATB surfaces and amorphous fluoropolymers. *Macromol.*, 40 :3422–3428, 2007.
- [43] J. Xiao, H. Huang, J. Li, H. Zhang, W. Zhu, and H. Xiao. Computation of interface interactions and mechanical properties of HMX-based PBX with Estane 5703 from atomic simulation. *J. Mater. Sci.*, 43 :5685–5691, 2008.
- [44] J. Y. S. Li-Mayer, D. Lewis, S. Connors, A. Glauser, D. M. Williamson, H. Arora, and M. N. Charalambides. Hierarchical multi-scale models for mechanical response prediction of highly filled elastic–plastic and viscoplastic particulate composites. *Comput. Mater. Sci.*, 181 :109734, 2020.
- [45] F. Hofmann, B. Abbey, L. Connor, N. Baimpas, X. Song, S. Keegan, and A. M. Korsunsky. Imaging of grain-level orientation and strain in thicker metallic polycrystals by high energy transmission micro-beam Laue (HETL) diffraction techniques. *Int. J. Mat. Res.*, 103 :192–199, 2012.
- [46] A. Ambos, F. Willot, D. Jeulin, and H. Trumel. Numerical modeling of the thermal expansion of an energetic material. *Int. J. Solids Struct.*, 60-61 :125–139, 2015.
- [47] J.-B. Gasnier, F. Willot, H. Trumel, B. Figliuzzi, D. Jeulin, and M. Biessy. A Fourier-based numerical homogenization tool for an explosive material. *Mat. Tech.*, 103 :308, 2015.
- [48] J.-B. Gasnier, F. Willot, H. Trumel, D. Jeulin, and M. Biessy. Thermoelastic properties of microcracked polycrystals. Part II : The case of jointed polycrystalline TATB. *Int. J. Solids Struct.*, 155 :257–274, 2018.
- [49] C. Liu. On the minimum size of representative volume element : an experimental investigation. *Exp. Mech.*, 45 :238–243, 2005.
- [50] B. E. Clements and E. M. Mas. Dynamic mechanical behavior of filled polymers. I. Theoretical developments. *J. Appl. Phys.*, 90 :5522–5534, 2001.
- [51] E. M. Mas and B. E. B. E. Clements. Dynamic mechanical behavior of filled polymers. II. Applications. *J. Appl. Phys.*, 90 :5535–5541, 2001.
- [52] G. Li and G. J. Weng. Anisotropic stress-strain relations and complex moduli of a viscoelastic composite with aligned spheroidal inclusions. *Composite Engrg.*, 4 :1073–1097, 1994.

- [53] J. D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. R. Soc. Lond.*, A241 :376–396, 1957.
- [54] Z. Hashin. Viscoelastic behavior of heterogeneous media. *J. Appl. Mech.*, 32 :630–636, 1965.
- [55] H. Tan, Y. Huang, C. Liu, and P. H. Geubelle. The Mori–Tanaka method for composite materials with nonlinear interface debonding. *Int. J. Plasticity*, 21 :1890–1918, 2005.
- [56] H. Tan. Viscoelastic behaviors of plastic-bonded energetic materials accounting for nonlinear interface debonding. In *17th DYMAT Technical Meeting, 2007, Cavendish Laboratory, Cambridge, UK*, 2007.
- [57] H. Tan, Y. Huang, and C. Liu. The viscoelastic composite with interface debonding. *Composites Sci. Technol.*, 68 :3145–3149, 2008.
- [58] J. Christoffersen. Bonded granulates. *J. Mech. Phys. Solids*, 31 :55–83, 1983.
- [59] C. Nadot-Martin, H. Trumel, and A. Dragon. Morphology-based homogenization method for viscoelastic particulate composites, Part I : Viscoelasticity sole. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 22 :89–106, 2003.
- [60] C. Nadot, A. Dragon, H. Trumel, and A. Fanget. Damage modelling framework for viscoelastic particulate composites via a scale transition approach. *J. Theor. Appl. Mech.*, 44 :553–583, 2006.
- [61] M. Touboul, C. Nadot-Martin, A. Dragon, and A. Fanget. A multi-scale “morphological approach” for highly-filled particulate composites : Evaluation in hyperelasticity and first application to viscohyperelasticity. *Arch. Mech.*, 59 :403–433, 2007.
- [62] S. Darrois, C. Nadot-Martin, D. Halm, A. Dragon, G. Contesse, and A. Fanget. Micromechanical modelling of damage evolution in highly filled particulate composites - Induced effects at different scales. *Int. J. Damage Mech.*, 22 :1035–1044, 2013.
- [63] M. Trombini, C. Nadot-Martin, D. Halm, M. Gueguen, G. Contesse, and A. Fanget. Multiscale damage modeling with the “Morphological Approach” to highlight particle size and interaction effects in highly-filled particulate composites. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 53 :163–174, 2015.
- [64] D. J. Luscher, M. A. Buechler, and N. A. Miller. Self-consistent modeling of the influence of texture on thermal expansion in polycrystalline TATB. *Modelling Simul. Mater. Sci. Engng.*, 22 :075008, 2014.

- [65] K. C. Bennett and D. J. Luscher. Effective thermoelasticity of polymer-bonded particle composites with imperfect interfaces and thermally expansive interphases. *J. Elasticity*, 136 :55–85, 2019.
- [66] K. C. Bennett, M. Zecevic, D. J. Luscher, and R. A. Lebensohn. A thermo-elastoplastic self-consistent homogenization method for inter-granular plasticity with application to thermal ratcheting of TATB. *Adv. Model. Simul. Engrg. Sci.*, 7 : <https://doi.org/10.1186/s40323-019-0139-6>, 2020.
- [67] R. Hill. A self-consistent mechanics of composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 13 :213–222, 1965.
- [68] F. Willot, H. Trumel, and D. Jeulin. The thermoelastic response of cracked polycrystals with hexagonal symmetry. *Phil. Mag.*, 99 :606–630, 2018.
- [69] B. E. Clements and E. M. Mas. A theory for plastic-bonded materials with a bimodal size distribution of filler particles. *Modelling Simul. Mater. Sci. Engrng.*, 12 :407–421, 2004.
- [70] K. Matous, H. M. Inglis, X. Gu, D. Rypl, T. L. Jackson, and P. H. Geubelle. Multiscale modeling of solid propellants : From particle packing to failure. *Composites Sci. Technol.*, 67 :1694–1708, 2007.
- [71] G. M. Knott, T. L. Jackson, and J. Buckmaster. Random packing of heterogeneous propellants. *AIAA J.*, 39 :678–686, 2001.
- [72] S. Kochevets, J. Buckmaster, T. L. Jackson, and A. Hegab. Random packs and their use in modeling heterogeneous solid propellant combustion. *J. Prop. Power*, 17 :883–891, 2001.
- [73] P. Areias and K. Matous. Finite element formulation for modeling nonlinear viscoelastic elastomers. *Phys. Rev. Lett.*, 85 :118–121, 2000.
- [74] J. S. Bergstrom and M. C. Boyce. Constitutive modelling of the time-dependent and cyclic loading of elastomers and application to soft biological tissues. *Mech. Mat.*, 33 :523–530, 2001.
- [75] S.-J. Zhi, B. Sun, and J.-W. Zhang. Multiscale modeling of heterogeneous propellants from particle packing to grain failure using a surface-based cohesive approach. *Acta Mechanica Sinica*, 28 :746–759, 2012.
- [76] P.-A. Toulemonde, J. Diani, P. Gilormini, G. Lacroix, and N. Desgardin. Roles of the interphase stiffness and percolation on the behavior of solid propellants. *Prop. Expl. Pyrotech.*, 41 :978–986, 2016.

- [77] B. Banerjee and D. O. Adams. On predicting the effective elastic properties of polymer bonded explosives using the recursive cell method. *Int. J. Solids Structures*, 41 :481–509, 2004.
- [78] Y.-Q. Wu and F.-L. Huang. A micromechanical model for predicting combined damage of particles and interface debonding in PBX explosives. *Mech. Mat.*, 41 :27–47, 2009.
- [79] G. Kang, P. Chen, X. Guo, G. Ma, and Y. Ning. Simulations of meso-scale deformation and damage of polymer bonded explosives by the numerical manifold method. *Engrg. Anal. Bound. El.*, 96 :123–137, 2018.
- [80] A. Barua and M. Zhou. A Lagrangian framework for analyzing micro-structural level response of polymer-bonded explosives. *Model. Simul. Mater. Sci. Engng.*, 19 :055001, 2011.
- [81] G. D. Seidel, D. H. Allen, K. L. E. Helms, and S. E. Groves. A model for predicting the evolution of damage in viscoelastic particle-reinforced composites. *Mech. Mat.*, 37 :163–178, 2005.
- [82] J. R. Kolb and H. F. Rizzo. Growth of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene. I. Anisotropic thermal expansion. *Prop. Expl. Pyrotech.*, 4 :10–16, 1979.
- [83] M. Sauzay, J. Liu, F. Rachdi, L. Signor, T. Ghidossi, and P. Villechaise. Physically-based simulations of the cyclic behavior of FCC polycrystals. *Adv. Mater. Res.*, 891-892 :833–839, 2014.
- [84] 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. *Int. J. Solids Struct.*, 155 :248–256, 2018.
- [85] A. A. Griffith. The phenomena of rupture and flow in solids. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, 121 :183–198, 1921.
- [86] T. M. Willey, T. van Buuren, J. R. I. Lee, G. E. Overturf, J. H. Kinney, J. Handly, B. L. Weeks, and J. Havsky. Changes in pore size distribution upon thermal cycling of TATB-based explosives measured by ultra-small angle X-ray scattering. *Prop. Expl. Pyrotech.*, 31 :1617–1629, 2006.
- [87] H. H. Cady and A. C. Larson. The crystal structure of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene. *Acta Crystall.*, 18 :485–496, 1965.
- [88] L. L. Stevens, N. Velisavljevic, D. E. Hooks, and D. M. Dattelbaum. Hydrostatic compression curve for triamino-trinitrobenzene determined

- to 13.0 GPa with powder x-ray diffraction. *Prop. Expl. Pyrotech.*, 33 : 286–295, 2008.
- [89] J. Sun, B. Kang, C. Xue, Y. Liu, Y. Xia, X. Liu, and W. Zhang. Crystal state of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene (TATB) undergoing thermal cycling process. *J. Energetic Mat.*, 28 :189–201, 2010.
- [90] T. Plisson, N. Pineau, G. Weck, E. Bruneton, N. Guignot, and P. Loubeyre. Equation of state of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene up to 66 GPa. *J. Appl. Phys.*, 122 :235901, 2017.
- [91] L. Valenzano, W. J. Slough, and W. Perger. Accurate prediction of second-order elastic constants from first principles : PETN and TATB. *AIP Conf. Proc.*, 1426 :1191–1194, 2012.
- [92] A. A. Rykounov. Investigation of the pressure dependent thermodynamic and elastic properties of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene using dispersion corrected density functional theory. *J. Appl. Phys.*, 117 : 215901, 2015.
- [93] X. Bidault and N. Pineau. Impact of surface energy on the shock properties of granular explosives. *J. Chem. Phys.*, 148 :034704, 2018.
- [94] B. W. Olinger and H. H. Cady. The hydrostatic compression of explosives and detonation products to 10 GPa (100 kbars) and their calculated shock compression : Results for PETN, TATB, CO–2 and H–20. In *6th Symp. on Detonation, San Diego (CA), USA.*, 1976.
- [95] J. D. Yeager, D. J. Luscher, S. C. Vogel, B. Clausen, and D. W. Brown. Neutron diffraction measurements and micromechanical modelling of temperature-dependent variations in TATB lattice parameters. *Prop. Expl. Pyrotech.*, 41 :514–525, 2016.
- [96] J.-B. Gasnier. *Etude du comportement thermo-mécanique et de l'endommagement d'un matériau énergétique granulaire par méthodes de Fourier*. PhD thesis, Université de recherche Paris Sciences et Lettres, 2017.
- [97] G. A. Francfort and J.-J. Marigo. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *J. Mech. Phys. Solids*, 46 :1319–1342, 1998.
- [98] E. M. Arruda and M. C. Boyce. Evolution of plastic anisotropy in amorphous polymers during finite straining. *Int. J. Plasticity*, 9 : 697–720, 1993.
- [99] D. Krajcinovic. Continuous damage mechanics revisited : basic concepts and definitions. *J. Appl. Mech.*, 52 :829–834, 1985.

- [100] F. Cormery and H. Welemene. A critical review of some damage models with unilateral effect. *Mech. Res. Comm.*, 29 :391–395, 2002.
- [101] R. Bargellini, D. Halm, and A. Dragon. Modelling of quasi-brittle behaviour : a discrete approach coupling anisotropic damage growth and frictional sliding. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 27 :564–581, 2008.
- [102] H. Welemene, C. Goidescu, D. Kondo, O. Pantalé, and M. Karama. Brittle damage in initially anisotropic materials : a model accounting for the induced anisotropy and unilateral effects. *Appl. Mech. Mater.*, 784 :173–178, 2015.
- [103] Y. Huang and K. X. Hu. Elastic moduli of a microcracked composite with spherical inclusions of cubic anisotropy. *Composite Sci. Technol.*, 50 :149–156, 1994.
- [104] B. Bourdin, G. A. Francfort, and J.-J. Marigo. Numerical experiments in revisited brittle fracture. *J. Mech. Phys. Solids*, 48 :797–826, 2000.
- [105] T. L. Anderson. *Fracture Mechanics - Fundamentals and Applications*. Taylor & Francis, 2005.
- [106] D. Mumford and J. Shah. Optimal approximations by piecewise smooth functions and associated variational problems. *Comm. Pure Applied Math.*, 42 :577–685, 1989.
- [107] L. Ambrosio and V. M. Tortorelli. Approximation of functionals depending on jumps by elliptic functionals via γ -convergence. *Comm. Pure Appl. Math.*, 43 :999–1036, 1990.
- [108] B. Bourdin. Numerical implementation of the variational formulation for quasi-static brittle fracture. *Interf. Free Bound.*, 9 :411–430, 2007.
- [109] B. Bourdin, G. A. Francfort, and J.-J. Marigo. The variational approach to fracture. *J. Elasticity*, 91 :5–148, 2008.
- [110] C. Kuhn and R. Muller. A phase field model for fracture. *Proc. Appl. Math. Mech.*, 8 :10223–10224, 2008.
- [111] C. Kuhn and R. Muller. A continuum phase field model for fracture. *Engng. Fract. Mech.*, 77 :3625–3634, 2010.
- [112] C. Kuhn. *Numerical and analytical investigation of a phase field model for fracture*. PhD thesis, Technischen Universität Kaiserslautern, 2013.
- [113] C. Miehe, F. Welschinger, and M. Hofacker. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture : Variational principles and multi-field FE implementations. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 83 : 1273–1311, 2010.

- [114] C. Miehe, M. Hofacker, and F. Welschinger. A phase field model for rate-independent crack propagation : Robust algorithmic implementation based on operator splits. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 199 : 2765–2778, 2010.
- [115] R. P. Wool and K. M. O’Connor. A theory of crack healing in polymers. *J. Appl. Phys.*, 52 :5953–5963, 1981.
- [116] S.-K. Lee, W. Ishida, S.-Y. Lee, K.-W. Nam, and K. Ando. Crack-healing behavior and resultant strength properties of silicon carbide ceramic. *J. Eur. Ceramic Soc.*, 25 :569–576, 2005.
- [117] T. Gerasimov and L. de Lorenzis. A line search assisted monolithic approach for phase-field computing of brittle fracture. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 312 :276–303, 2016.
- [118] T. Gerasimov and L. de Lorenzis. On penalization in variational phase-field models of brittle fracture. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 354 :990–1026, 2019.
- [119] P. Shanthraj, B. Svendsen, L. Sharma, F. Roters, and D. Raabe. Elastoviscoplastic phase field modelling of anisotropic cleavage fracture. *J. Mech. Phys. Solids*, 99 :19–34, 2017.
- [120] J. Lemaître and R. Desmorat. *Engineering Damage Mechanics - Ductile, creep, fatigue and brittle failures*. Springer, 2005.
- [121] A. Karma, D. A. Kessler, and H. Levine. Phase-field model of mode III dynamic fracture. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :045501, 2001.
- [122] H. Henry and H. Levine. Dynamic instabilities of fracture under biaxial strain using a phase field model. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :105504, 2004.
- [123] V. Hakim and A. Karma. Laws of crack motion and phase-field models of fracture. *J. Mech. Phys. Solids*, 57 :342–368, 2009.
- [124] M. J. Borden, C. V. Verhoosel, M. A. Scott, T. J. R. Hughes, and C. M. C. M. Landis. A phase-field description of dynamic brittle fracture. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 217-220 :77–95, 2012.
- [125] C. Hesch, A. J. Gil, R. Ortigosa, M. Dittmann, C. Bilgen, P. Betsch, M. Franke, A. Janz, and K. Weinberg. A framework for polyconvex large strain phase-field methods to fracture. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 317 :649–683, 2017.
- [126] C. Kuhn, A. Schlüter, and R. Müller. On degradation functions in phase field fracture models. *Comput. Mat. Sci.*, 108 :374–384, 2015.

- [127] J. M. Sargado, E. Keilegavlen, I. Berre, and J. M. Nordbotten. High-accuracy phase-field models for brittle fracture based on a new family of degradation functions. *J. Mech. Phys. Solids*, 111 :458–489, 2018.
- [128] K. Pham, H. Amor, J.-J. Marigo, and C. Maurini. Gradient damage models and their use to approximate brittle fracture. *Int. J. Damage Mech.*, 20 :618–652, 2011.
- [129] E. Tanné, T. Li, B. Bourdin, J.-J. Marigo, and C. Maurini. Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture. *J. Mech. Phys. Solids*, 110 :80–99, 2018.
- [130] J. Bleyer and R. Alessi. Phase-field modeling of anisotropic brittle fracture including several damage mechanisms. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 336 :213–236, 2018.
- [131] D. Jeulin. Towards crack paths simulations in media with a random fracture energy. *Int. J. Solids Struct.*, 184 :279–286, 2020.
- [132] R. Alessi, J.-J. Marigo, and S. Vidoli. Gradient damage models coupled with plasticity : Variational formulation and main properties. *Mech. Mat.*, 62 :351–367, 2015.
- [133] J.-Y. Wu. A unified phase-field theory for the mechanics of damage and quasi-brittle failure. *J. Mech. Phys. Solids*, 103 :72–99, 2017.
- [134] J.-Y. Wu. Robust numerical implementation of non-standard phase-field damage models for failure in solids. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 340 :767–797, 2018.
- [135] M. J. Borden, T. J. R. Hughes, C. M. Landis, and C. V. Verhoosel. A higher-order phase-field model for brittle fracture : Formulation and analysis within the isogeometric analysis framework. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 273 :100–118, 2014.
- [136] J. Y. Wu and V. P. Nguyen. A length scale insensitive phase-field damage model for brittle fracture. *J. Mech. Phys. Solids*, 119 :20–42, 2018.
- [137] J.-Y. Wu, V. P. Nguyen, H. Zhou, and Y. Huang. A variationally consistent phase-field anisotropic damage model for fracture. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 358 :112629, 2020.
- [138] M. Ambati, T. Gerasimov, and L. De Lorenzis. A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation. *Comput. Mech.*, 55 :383–405, 2015.

- [139] H. Amor, J.-J. Marigo, and C. Maurini. Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact : Numerical experiments. *J. Mech. Phys. Solids*, 57 :1209–1229, 2009.
- [140] F. Freddi and G. Royer-Carfagni. Regularized variational theories of fracture : A unified approach. *J. Mech. Phys. Solids*, 58 :1154–1174, 2010.
- [141] F. Freddi and G. Royer-Carfagni. Variational fracture mechanics to model compressive splitting of masonry-like materials. *Ann. Solid Struct. Mech.*, 2 :57–67, 2011.
- [142] J. D. Clayton and J. Knap. A geometrically nonlinear phase field theory of brittle fracture. *Int. J. Fract.*, 189 :139–148, 2014.
- [143] T.-T. Nguyen, J. Yvonnet, Q.-Z. 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. *Engng. Fract. Mech.*, 139 :18–39, 2015.
- [144] T. 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. *Int. J. Fract.*, 197 :213–226, 2016.
- [145] T. T. Nguyen, J. Yvonnet, M. Bornert, and C. Chateau. Initiation and propagation of complex 3D networks of cracks in heterogeneous quasi-brittle materials : Direct comparison between in situ testing-microCT experiments and phase field simulations. *J. Mech. Phys. Solids*, 95 : 320–350, 2016.
- [146] S. May, J. Vignollet, and R. de Borst. A numerical assessment of phase-field models for brittle and cohesive fracture : Γ -convergence and stress oscillations. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 52 :72–84, 2015.
- [147] P. Chakraborty, Y. Zhang, and M. R. Tonks. Multi-scale modeling of microstructure dependent intergranular brittle fracture using a quantitative phase-field based method. *Comput. Mater. Sci.*, 113 : 38–52, 2016.
- [148] P. Chakraborty, P. Sabharwall, and M. C. Carroll. A phase-field approach to model multi-axial and microstructure dependent fracture in nuclear grade graphite. *J. Nuclear Mat.*, 475 :200–208, 2016.
- [149] X. Zhang, S. W. Sloan, C. Vignes, and D. Sheng. A modification of the phase-field model for mixed mode crack propagation in rock-like materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 322 :123–136, 2017.

- [150] X. Zhang, C. Vignes, and S. W. Sloan. Numerical evaluation of the phase-field model for brittle fracture with emphasis on the length scale. *Comput. Mech.*, 59 :737, 2017.
- [151] J. Y. Wu and M. Cervera. A novel positive/negative projection in energy norm for the damage modeling of quasi-brittle solids. *Int. J. Solids Struct.*, 139-140 :250–269, 2018.
- [152] M. Ortiz. A constitutive theory for the inelastic behavior of concrete. *Mech. Mat.*, 4 :67–93, 1985.
- [153] F. Zhang, W. Huang, X. Li, and S. Zhang. A study on phase field models for brittle fracture. 2018.
- [154] M. Strobl and T. Seelig. A novel treatment of crack boundary conditions in phase field models of fracture. *PAMM*, 15 :155–156, 2015.
- [155] M. Strobl and T. Seelig. On constitutive assumptions in phase field approaches to brittle fracture. *Struct. Integrity Proc.*, 2 :3705–3712, 2016.
- [156] G. Zhang, T. F. Guo, X. Guo, S. Tang, M. Fleming, and W. K. Liu. Fracture in tension–compression-asymmetry solids via phase field modeling. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 357 :112573, 2019.
- [157] C. Steinke and M. Kaliske. A phase-field crack model based on directional stress decomposition. *Comput. Mech.*, 63 :1019–1046, 2019.
- [158] M. Strobl and T. Seelig. Restrictions in phase field modeling of brittle fracture. *PAMM*, 18 :e2018001572, 2018.
- [159] E. C. Bryant and W.-C. Sun. A mixed-mode phase field fracture model in anisotropic rocks with consistent kinematics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 342 :561–584, 2018.
- [160] S. Tang, G. Zhang, T. F. Guo, X. Guo, and W. K. Liu. Phase field modeling of fracture in nonlinearly elastic solids via energy decomposition. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 347 :477–494, 2019.
- [161] M. Fan, Y. Jin, and T. Wick. A phase-field description for mixed-mode fracture propagation. *Leibniz Universität Hannover Institutional Repository*, doi.org/10.15488/5369, 2019.
- [162] T. You, Q.-Z. Zhu, P.-F. Li, and J.-F. Shao. Incorporation of tension-compression asymmetry into plastic damage phase-field modeling of quasi brittle geomaterials. *Int. J. Plasticity*, 124 :71–95, 2020.
- [163] F. Fei and J. Choo. A phase-field method for modeling cracks with frictional contact. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 121 :740–762, 2020.

- [164] F. Fei and J. Choo. A phase-field model of geologic shear fracture. *Pre-print arXiv:2003.04779v2.*, 2020.
- [165] M. Dittmann, M. Krüger, F. Schmidt, S. Schuss, and C. Hesch. Variational modeling of thermomechanical fracture and anisotropic frictional mortar contact problems with adhesion. *Comput. Mech.*, 63 :571–591, 2019.
- [166] B. Li, C. Peco, D. Millan, I. Arias, and M. Arroyo. Phase-field modeling and simulation of fracture in brittle materials with strongly anisotropic surface energy. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 102 :711–727, 2015.
- [167] B. Li. *The variational approach to brittle fracture in materials with anisotropic surface energy and in thin sheets*. PhD thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, 2018.
- [168] S. Teichtmeister and C. Miehe. Phase-field modeling of fracture in anisotropic media. *PAMM*, 15 :159–160, 2015.
- [169] S. Teichtmeister, D. Kienle, F. Aldakheel, and M.-A. Keip. Phase field modeling of fracture in anisotropic brittle solids. *Int. J. Nonlinear Mech.*, 97 :1–21, 2017.
- [170] T.-T. Nguyen, J. Réthoré, J. Yvonnet, and M.-C. Baietto. Multi-phase-field modeling of anisotropic crack propagation for polycrystalline materials. *Comput. Mech.*, 60 :289–314, 2017.
- [171] T. T. Nguyen, J. Réthoré, and M.-C. Baietto. Phase field modelling of anisotropic crack propagation. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 65 :279–288, 2017.
- [172] O. Gultekin, H. Dal, and G. A. Holzapfel. Numerical aspects of anisotropic failure in soft biological tissues favor energy-based criteria : A rate-dependent anisotropic crack phase-field model. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 331 :23–52, 2018.
- [173] B. Li and C. Maurini. Crack kinking in a variational phase-field model of brittle fracture with strongly anisotropic surface energy. *J. Mech. Phys. Solids*, 125 :502–522, 2019.
- [174] J. J. Eggleston, G. B. McFadden, and P. W. Voorhees. A phase-field model for highly anisotropic interfacial energy. *Physica D*, 150 :91–103, 2001.
- [175] J. E. Taylor and J. W. Cahn. Diffuse interfaces with sharp comers and facets : Phase field models with strongly anisotropic surfaces. *Physica B*, 112 :381–411, 1998.

- [176] J. W. Cahn and J. E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. *J. Chem. Phys.*, 28 :258–267, 1959.
- [177] A. Takei, B. Roman, J. Bico, E. Hamm, and F. Melo. Forbidden directions for the fracture of thin anisotropic sheets : An analogy with the Wulff plot. *Phys. Rev. Lett.*, 110 :144301, 2013.
- [178] A. Yuse and M. Sano. Transition between crack patterns in quenched glass plates. *Nature*, 362 :329–331, 1993.
- [179] A. Chambolle, G. A. Francfort, and J.-J. Marigo. Revisiting energy release rates in brittle fracture. *J. Nonlinear Sci.*, 20 :395–424, 2010.
- [180] B. Bourdin, J.-J. Marigo, C. Maurini, and P. Sicsic. Morphogenesis and propagation of complex cracks induced by thermal shocks. *Phys. Rev. Lett.*, 112 :014301, 2014.
- [181] C. Miehe, L. M. Schänzel, and H. Ulmer. Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. Part I. Balance of crack surface and failure criteria for brittle crack propagation in thermo-elastic solids. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 294 :449–485, 2015.
- [182] P. Sicsic, J.-J. Marigo, and C. Maurini. Initiation of a periodic array of cracks in the thermal shock problem : A gradient damage modeling. *J. Mech. Phys. Solids*, 63 :256–284, 2014.
- [183] Y. Shao, Y. Zhang, X. Xu, Z. Zhou, W. Li, and B. Liu. Effect of crack pattern on the residual strength of ceramics after quenching. *J. Amer. Ceram. Soc.*, 94 :2804–2807, 2011.
- [184] T.-T. Nguyen, D. Waldmann, and T.-Q. Bui. Computational chemo-thermo-mechanical coupling phase-field model for complex fracture induced by early-age shrinkage and hydration heat in cement-based materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 348 :1–28, 2019.
- [185] C. Miehe, F. Welschinger, and M. Hofacker. A phase field model of electromechanical fracture. *J. Mech. Phys. Solids*, 58 :1716–1740, 2010.
- [186] A. Abdollahi and I. Arias. Phase-field modeling of the coupled microstructure and fracture evolution in ferroelectric single crystals. *Acta Mater.*, 59 :733–746, 2011.
- [187] B. D. Coleman and M. E. Gurtin. Thermodynamics with internal state variables. *J. Chem. Phys.*, 47 :597–613, 1967.
- [188] M. E. Gurtin. Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance. *Physica D*, 92 :178–192, 1996.

- [189] V. Hakim and A. Karma. Crack path prediction in anisotropic brittle materials. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :235501, 2005.
- [190] Y. Chen, D. Vasiukov, L. Gélébart, and C. H. Park. A FFT solver for variational phase-field modeling of brittle fracture. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 349 :167–190, 2019.
- [191] A. Braides. *Gamma-convergence for beginners*. Oxford University Press, 2002.
- [192] A. Chambolle. An approximation result for special functions with bounded deformation. *J. Math. Pure Appl.*, 83 :929–954, 2004.
- [193] M. Negri. γ -convergence for high order phase field fracture : continuum and isogeometric formulations. *arXiv preprint arXiv:1907.09814*, 2019.
- [194] A. Chambolle, S. Conti, and G. A. Francfort. Approximation of a brittle fracture energy with a constraint of non-interpenetration. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 228 :867–889, 2018.
- [195] J. Vignollet, S. May, R. de Borst, and C. V. Verhoosel. Phase-field models for brittle and cohesive fracture. *Meccanica*, 49 :2587–2601, 2014.
- [196] G. Del Piero, G. Lancioni, and R. March. A variational model for fracture mechanics : Numerical experiments. *J. Mech. Phys. Solids*, 55 :2512–2537, 2007.
- [197] E. O. Omatuku-Ngongo. *Phase field modeling of dynamic to brittle fracture at finite strains*. PhD thesis, University of Cape Town, 2019.
- [198] C. Hesch and K. Weinberg. Thermodynamically consistent algorithms for a finite-deformation phase-field approach to fracture. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 99 :906–924, 2014.
- [199] C. Miehe and L.-M. Schanzel. Phase field modeling of fracture in rubbery polymers. Part I : Finite elasticity coupled with brittle failure. *J. Mech. Phys. Solids*, 65 :93–113, 2014.
- [200] B. Li and N. Bouklas. A variational phase-field model for brittle fracture in polydisperse elastomer networks. *Int. J. Solids Struct.*, 182-183 :193–204, 2020.
- [201] F. P. Duda, A. Ciarbonetti, P. J. Sanchez, and A. E. Huespe. A phase-field/gradient damage model for brittle fracture in elastic-plastic solids. *Int. J. Plasticity*, 65 :269–296, 2015.

- [202] P. Shanthraj, L. Sharma, B. Svendsen, F. Roters, and D. Raabe. A phase field model for damage in elasto-viscoplastic materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 312 :167–185, 2016.
- [203] M. Diehl, M. Wick, P. Shanthraj, F. Roters, A. Brueckner-Foit, and D. Raabe. Coupled crystal plasticity–phase field fracture simulation study on damage evolution around a void : pore shape versus crystallographic orientation. *JOM*, 69 :872–878, 2017.
- [204] M. Ambati, R. Kruse, and L. de Lorenzis. A phase-field model for ductile fracture at finite strains and its experimental verification. *Comput. Mech.*, 157 :149–167, 2016.
- [205] H. Badnava, E. Etemadi, and M. A. Msekh. A phase field model for rate-dependent ductile fracture. *Metals*, 7 :180, 2017.
- [206] R. Alessi, J.-J. Marigo, C. Maurini, and S. Vidoli. Coupling damage and plasticity for a phase-field regularisation of brittle, cohesive and ductile fracture : one-dimensional examples. *Int. J. Mech. Sci.*, 149 : 559–576, 2018.
- [207] R. Alessi, M. Ambati, T. Gerasimov, S. Vidoli, and L. de Lorenzis. volume 46 of *Computational Methods in Applied Sciences*, chapter Comparison of phase-field models of fracture coupled with plasticity, pages 1–21. Springer, 208.
- [208] M. Arriaga and H. Waisman. Multidimensional stability analysis of the phase-field method for fracture with a general degradation function and energy split. *Comput. Mech.*, 61 :181–205, 2018.
- [209] M. Arriaga and H. Waisman. Stability analysis of the phase-field method for fracture with a general degradation function and plasticity induced crack generation. *Mech. Mat.*, 116 :33–48, 2018.
- [210] M. J. Borden, T. J. R. Hughes, C. M. Landis, A. Anvari, and I. J. Lee. A phase-field formulation for fracture in ductile materials : Finite deformation balance law derivation, plastic degradation, and stress triaxiality effects. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 312 :130–166, 2016.
- [211] C. Kuhn, T. Noll, and R. Muller. On phase field modeling of ductile fracture. *GAMM*, 39 :35–54, 2016.
- [212] C. Miehe, M. Hofacker, L.-M. Schänzel, and F. Aldakheel. Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. Part II. Coupled brittle-to-ductile failure criteria and crack propagation in thermo-elastic–plastic solids. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 294 : 486–522, 2015.

- [213] C. Miehe, F. Aldakheel, and A. Raina. Phase field modeling of ductile fracture at finite strains : a variational gradient-extended plasticity-damage theory. *Int. J. Plasticity*, 84 :1–32, 2016.
- [214] C. Miehe, S. Teichtmeister, and F. Aldakheel. Phase-field modelling of ductile fracture : a variational gradient-extended plasticity-damage theory and its micromorphic regularization. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 374 :20150170, 2016.
- [215] F. Aldakheel, P. Wriggers, and C. Miehe. A modified Gurson-type plasticity model at finite strains : Formulation, numerical analysis and phase-field coupling. *Comput. Mech.*, 62 :815–833, 2018.
- [216] M. Dittmann, F. Aldakheel, J. Schulte, F. Schmidt, M. Kruger, P. Wriggers, and C. Hesch. Phase-field modeling of porous-ductile fracture in non-linear thermo-elasto-plastic solids. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 361 :112730, 2020.
- [217] L. de Lorenzis, A. McBride, and B. D. Reddy. Phase-field modelling of fracture in single crystal plasticity. *GAMM*, 39 :7–34, 2016.
- [218] J. Choo and W.-C. Sun. Coupled phase-field and plasticity modeling of geological materials : From brittle fracture to ductile flow. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 330 :1–32, 2018.
- [219] L. Xue. *Ductile fracture modeling - Theory, experimental investigation and numerical verification*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2007.
- [220] C. V. Verhoosel and R. de Borst. A phase-field model for cohesive fracture. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 96 :43–62, 2013.
- [221] M. Paggi and J. Reinoso. Revisiting the problem of a crack impinging on an interface : A modeling framework for the interaction between the phase field approach for brittle fracture and the interface cohesive zone model. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 321 :145–172, 2016.
- [222] V. Carollo, J. Reinoso, and M. Paggi. A 3D finite strain model for intralayer and interlayer crack simulation coupling the phase field approach and cohesive zone model. *Composite Struct.*, 182 :636–651, 2017.
- [223] T. T. Nguyen, J. Yvonnet, Q.-Z. Zhu, M. Bornert, and C. Chateau. A phase-field method for computational modeling of interfacial damage interacting with crack propagation in realistic microstructures obtained by microtomography. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 312 : 567–595, 2015.

- [224] I. S. Aranson, V. A. Kalatsky, and V. M. Vinokur. Continuum field description of crack propagation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 197 :4702–4717, 2008.
- [225] L. O. Eastgate, J. P. Sethna, M. Rauscher, T. Cretegnny, S.-C. Chen, and C. R. Myers. Fracture in mode I using a conserved phase-field model. *Phys. Rev. E*, 65 :036117, 2002.
- [226] A. Karma and A. E. Lobkovsky. Unsteady crack motion and branching in a phase-field model of brittle fracture. *Appl. Phys. Lett.*, 92 :245510, 2004.
- [227] B. Bourdin, C. J. Larsen, and C. S. Richardson. A time-discrete model for dynamic fracture based on crack regularization. *Int. J. Fract.*, 168 : 133–143, 2008.
- [228] M. Hofacker and C. Miehe. Continuum phase field modeling of dynamic fracture : variational principles and staggered FE implementation. *Int. J. Fract.*, 178 :113–129, 2012.
- [229] A. Schluter, C. Kuhn, and R. Müller. Phase field approximation of dynamic brittle fracture. *PAMM*, 14 :143–144, 2014.
- [230] A. Schluter, C. Kuhn, R. Muller, and D. Gross. An investigation of intersonic fracture using a phase field model. *Arch. Appl. Mech.*, 86 : 321–333, 2016.
- [231] H. Gao, Y. Huang, and F. F. Abraham. Continuum and atomistic studies of intersonic crack propagation. *J. Mech. Phys. Solids*, 49 : 2113–2132, 2001.
- [232] A. J. Rosakis, O. Samudrala, and D. Coker. Inter-sonic shear crack growth along weak planes. *Mater. Res. Innov.*, 3 :236–243, 2000.
- [233] V. Agrawal and K. Dayal. Dependence of equilibrium Griffith surface energy on crack speed in phase-field models for fracture coupled to elastodynamics. *Int. J. Fract.*, 207 :243–249, 2017.
- [234] D. H. Doan, T. Q. Bui, T. V. Do, and N. D. Duc. A rate-dependent hybrid phase field model for dynamic crack propagation. *J. Appl. Phys.*, 112 :115102, 2017.
- [235] F. Zhou, J.-F. Molinari, and T. Shioya. A rate-dependent cohesive model for simulating dynamic crack propagation in brittle materials. *Engrg. Frac. Mech.*, 72 :1383–1410, 2005.
- [236] J. Bleyer and J.-F. Molinari. Microbranching instability in phase-field modelling of dynamic brittle fracture. *Appl. Phys. Lett.*, 110 :151903, 2017.

- [237] D. Kamensky, G. Moutsanidis, and Y. Bazilevs. Hyperbolic phase field modeling of brittle fracture : Part I - Theory and simulations. *J. Mech. Phys. Solids*, 121 :81–98, 2018.
- [238] T. N. Bittencourt, P. A. Wawrzynek, A. R. Ingraffea, and J. L. Sousa. Quasi-automatic simulation of crack propagation for 2D LEFM problems. *Engng. Fract. Mech.*, 55 :321–334, 1996.
- [239] M. A. Msekh, J. M. Sargado, M. Jamshidian, P. M. Areias, and T. Rabczuk. Abaqus implementation of phase-field model for brittle fracture. *Comput. Mat. Sci.*, 96 :472–484, 2015.
- [240] G. Molnar and A. Gravouil. 2D and 3D Abaqus implementation of a robust staggered phase-field solution for modeling brittle fracture. *Finite Elem. Anal. Design*, 130 :27–38, 2017.
- [241] T. K. Mandal, V. P. Nguyen, and J.-Y. Wu. Length scale and mesh bias sensitivity of phase-field models for brittle and cohesive fracture. *Engng. Fract. Mech.*, 217 :106532, 2019.
- [242] A. R. Ingraffea and F. E. Heuze. Finite element models for rock fracture mechanics. *Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech.*, 4 :25–43, 1980.
- [243] D. Santillan, R. Juanes, and L. Cueto-Felgueroso. Phase field model of fluid-driven fracture in elastic media : Immersed-fracture formulation and validation with analytical solutions. *J. Geophys. Res.*, 122 : 2565–2589, 2017.
- [244] A. L. Thomas and D. D. Pollard. The geometry of echelon fractures in rock : implications from laboratory and numerical experiments. *J. Struct. Geol.*, 15 :323–334, 1993.
- [245] J. Galvez, M. Elices, G. Guinea, and J. Planas. Mixed mode fracture of concrete under proportional and nonproportional loading. *Int. J. Fract.*, 94 :267–284, 1998.
- [246] D.-C. Feng and J.-Y. Wu. Phase-field regularized cohesive zone model (CZM) and size effect of concrete. *Engng. Fract. Mech.*, 197 :66–79, 2018.
- [247] M. Strandberg. Fracture at V-notches with contained plasticity. *Engng. Fract. Mech.*, 69 :403–415, 2002.
- [248] A. Seweryn. Brittle fracture criterion for structures with sharp notches. *Eng. Fract. Mech.*, 47 :673–681, 1994.
- [249] J. F. Kalthoff and S. Winkler. Failure mode transition at high rates of shear loading. In *Proc. Int. Conf. on Impact Loading and Dynamic Behavior of Materials*, volume 1, page 185–195, 1987.

- [250] J. Guo. *An experimental and numerical investigation on damage evolution and ductile fracture mechanism of aluminum alloy*. PhD thesis, Université de Tokushima, 2013.
- [251] S. P. Patil, Y. Heider, C. A. Hernandez Padilla, E. R. Cruz-Chu, and B. Markert. A comparative molecular dynamics-phase-field modeling approach to brittle fracture. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 312 :117–129, 2016.
- [252] G. Lancioni and G. Royer-Carfagni. The variational approach to fracture mechanics. A practical application to the French Panthéon in Paris. *J. Elasticity*, 95 :1–30, 2009.
- [253] A. Mesgarnejad, B. Bourdin, and M. M. Khonsari. Validation simulations for the variational approach to fracture. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 290 :420–437, 2015.
- [254] B. Winkler, G. Hofstetter, and G. Niederwanger. Experimental verification of a constitutive model for concrete cracking. *Proc. Inst. Mech. Eng., Part L : Journal of Materials : Design and Applications*, 215 : 75–86, 2001.
- [255] K. G. Webster. Investigation of close proximity underwater explosion effects on a ship-like structure using the multi-material arbitrary Lagrangian Eulerian finite element method. Master’s thesis, Virginia Polytechnic Institute and State University, 2007.
- [256] F. Tian, X. Tang, T. Xu, and L. Li. An adaptive edge-based smoothed finite element method (ES-FEM) for phase- field modeling of fractures at large deformations. arXiv preprint arXiv:1909.10858., 2019.
- [257] W. Lee, Y.-H. Yoo, and H. Shin. Reconsideration of crack deflection at planar interfaces in layered systems. *Compos. Sci. Technol.*, 64 : 2415–2423, 2004.
- [258] T.-T. Nguyen, D. Waldmann, and T.-Q. Bui. Role of interfacial transition zone in phase field modeling of fracture in layered heterogeneous structures. *J. Comput. Phys.*, 386 :585–610, 2019.
- [259] O. Seveček, R. Bermejo, and M. Kotoul. Prediction of the crack bifurcation in layered ceramics with high residual stresses. *Engrg. Fract. Mech.*, 108 :120–138, 2013.
- [260] V. Carollo, T. Guillén-Hernández, J. Reinoso, and M. Paggi. Recent advancements on the phase field approach to brittle fracture for heterogeneous materials and structures. *Adv. Model. Simul. Engrg. Sci.*, 5 :8, 2018.

- [261] R. Alessi and F. Freddi. Phase-field modelling of failure in hybrid laminates. *Composite Struct.*, 181 :9–25, 2017.
- [262] J. J. Espadas-Escalante, N. P. van Dijk, and P. Isaksson. A phase-field model for strength and fracture analyses of fiber-reinforced composites. *Composites Sci. Technol.*, 174 :58–67, 2019.
- [263] E. K. Gamstedt and B. A. Sjögren. Micromechanisms in tension-compression fatigue of composite laminates containing transverse plies. *Compos. Sci. Technol.*, 59 :167–178, 1999.
- [264] M. A. Msekh, N. H. Cuong, G. Zi, P. Areias, X. Zhuang, and T. Rabczuk. Fracture properties prediction of clay/epoxy nanocomposites with interphase zones using a phase field model. *Engng. Fract. Mech.*, 188 :287–299, 2018.
- [265] R. Ma and W.-C. Sun. FFT-based solver for higher-order and multi-phase-field fracture models applied to strongly anisotropic brittle materials. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 362 :112781, 2020.
- [266] H. Moulinec and P. Suquet. A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites. *C. R. Acad. Sci. Paris, IIb*, 318 :1417–1423, 1994.
- [267] J. Zeman, J. Vondrejč, J. Novak, and I. Marek. Accelerating a FFT-based solver for numerical homogenization of a periodic media by conjugate gradients. *J. Comput. Phys.*, 229 :8065–8071, 2010.
- [268] S. Brisard and L. Dormieux. FFT-based methods for the mechanics of composites : A general variational framework. *Comput. Mater. Sci.*, 49(3) :663–671, 2010.
- [269] M. Kabel, T. Bohlke, and M. Schneider. Efficient fixed point and Newton–Krylov solvers for FFT-based homogenization of elasticity at large deformations. *Comput Mech*, 54 :1497–1514, 2014.
- [270] M. Schneider. On the Barzilai-Borwein basic scheme in FFT-based computational homogenization. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 118(8) :482–494, 2019.
- [271] F. Willot. Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *C. R. Méc.*, 343 :232–245, 2015.
- [272] F. Ernesti, M. Schneider, and T. Böhlke. Fast implicit solvers for phase-field fracture problems on heterogeneous microstructures. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 363 :112793, 2020.

- [273] 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. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 98(7) :518–533, 2014.
- [274] Z. Hashin. Thermal expansion of polycrystalline aggregates : I. Exact analysis. *J. Mech. Phys. Solids*, 32 :149–157, 1984.
- [275] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 157 :69–94, 1998.
- [276] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *Int. J. Solids Struct.*, 40 :3647–3679, 2003.
- [277] G. Matheron. *Random sets and integral geometry*. Wiley, New-York, 1975.
- [278] H. WANG et al. Modelling mesoporous alumina microstructure with 3d random models of platelets. *Journal of Microscopy*, 260 Issue 3 : 287–301, 2015.
- [279] F. Willot. Mean covariogram of cylinders and applications to Boolean random sets. *Journal of Contemporary Mathematical Analysis*, 52(6) : 305–315, 2017.
- [280] A. K. Jain and F. Farrokhnia. Unsupervised texture segmentation using gabor filters. *Pattern Recognition*, 24 :1167–1186, 1991.
- [281] C. Lantuéjoul. Ergodicity and integral range. *Journal of Microscopy*, 161(3) :387–403, 1991.
- [282] D. Jeulin. Power laws variance scaling of Boolean random varieties. *Methodol. Comput. Appl. Probab.*, 18 :1065–1079, 2016.
- [283] Z. Hashin. The spherical inclusion with imperfect interface. *J. Appl. Mech.*, 58 :444–449, 1991.
- [284] Y. Benveniste and T. Miloh. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity. *Mech. Mat.*, 33 :309–323, 2001.
- [285] Z. Hashin. Thermoelastic properties of particulate composites with imperfect interface. *J. Mech. Phys. Solids*, 39 :746–762, 1991.
- [286] F. Zhou, J.-F. Molinari, and T. Shioya. Phase field modeling of brittle compressive-shear fractures in rock-like materials : A new driving force

- and a hybrid formulation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 355 : 729–752, 2019.
- [287] V. Gallican. *Homogenization estimates for polymer-based viscoelastic composite materials*. PhD thesis, Sorbonne Université, 2019.
- [288] Roland Schulz. 3d fft with 2d decomposition. *CS project report <http://cmb.ornl.gov/Members/z8g/csproject-report.pdf>*, 2008.
- [289] Lionel Gélébart and Romain Mondon-Cancel. Non-linear extension of fft-based methods accelerated by conjugate gradients to evaluate the mechanical behavior of composite materials. *Computational Materials Science*, 77 :430–439, 2013.
- [290] Adnan Eghtesad, Kai Germaschewski, Ricardo A Lebensohn, and Marko Knezevic. A multi-gpu implementation of a full-field crystal plasticity solver for efficient modeling of high-resolution microstructures. *Computer Physics Communications*, page 107231, 2020.
- [291] Zongyi Li, Nikola Kovachki, Kamyar Azizzadenesheli, Burigede Liu, Kaushik Bhattacharya, Andrew Stuart, and Anima Anandkumar. Fourier neural operator for parametric partial differential equations. *arXiv preprint [arXiv:2010.08895](https://arxiv.org/abs/2010.08895)*, 2020.
- [292] L. L. Stevens and C. J. Eckhardt. The elastic constants and related properties of β -HMX determined by Brillouin scattering. *J. Chem. Phys.*, 122 :174701, 2005.
- [293] C. Xue, J. Sun, B. Kang, Y. Liu, X. Liu, G. Song, and Q. Xue. The β - δ -phase transition and thermal expansion of octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine. *Prop. Expl. Pryrotech.*, 35 :333–338, 2010.
- [294] N. Grilli and M. Koslowski. The effect of crystal anisotropy and plastic response on the dynamic fracture of energetic materials. *J. Appl. Phys.*, 126 :155101, 2019.
- [295] X. Wang, Y. Wu, and F. Huang. A fully coupled thermomechanical dislocation model for explosive crystal (β -HMX) subjected to isentropic compression loading. *Eur. J. Mech./A Solids*, 82 :104001, 2020.
- [296] N. Lahellec, J.-C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. Analysis of inhomogeneous materials at large strains using Fast Fourier Transforms. In C. Miehe, editor, *IUTAM Symposium on Computational Mechanics of Solid Materials at Large Strains. Solid Mechanics and Its Applications*, volume 108, pages 247–258, Dordrecht, 2003. Springer.
- [297] L. Valenzano, W. J. Slough, and W. Perger. A universal equation of state for solids. *J. Phys. C : Solid State Phys.*, 19 :L467–L473, 1986.

RÉSUMÉ

Ce travail s'inscrit dans la thématique classique en mécanique non-linéaire de la modélisation du comportement à rupture de milieux hétérogènes. On étudie par des moyens numériques la localisation et la propagation de l'endommagement dans un comprimé au TATB (triamino-trinitrobenzène) soumis à diverses sollicitations mécaniques et thermiques. La microstructure polycristalline, qui contient en outre liant et porosités, est partiellement caractérisée à travers des images obtenues par microscopie électronique, ainsi que des essais mécaniques et thermiques, et présente, à l'état initial, des contraintes résiduelles, voir des fissures pré-existantes. On développe dans un premier temps une méthode numérique de calculs par transformées de Fourier rapide pour la prédiction de l'endommagement reposant sur l'utilisation d'un "champ de phase", qui décrit l'endommagement local au sein de la microstructure. Les algorithmes proposés, validés à partir de données issues de la littérature, prennent en compte le caractère irréversible de l'endommagement ainsi que la forte anisotropie des cristaux de TATB, en élasticité mais également du point de vue de la fissuration. Dans un second temps, on applique les schémas numériques développés au polycristal étudié. On s'intéresse en particulier à la fissuration transgranulaire sous cycle thermique à froid, puis on intègre la porosité et la fissuration dans le liant sous chargement thermique et en traction. Ces divers phénomènes sont pris en compte de manière incrémentale et identifiés par méthode inverse sur les données expérimentales disponibles. Les résultats de ce travail montrent d'une part le rôle prépondérant joué par l'endommagement inter et transgranulaire sur le comportement thermique à froid et lors des essais mécaniques. La démarche entreprise permet, en outre, de préciser l'influence relative des divers mécanismes pris en compte : porosité, élasticité dans le liant et dans les grains, mais également anisotropie mécanique des grains ou endommagement du matériau à l'état initial.

MOTS CLÉS

Champ de phase, Polycristal au TATB, Fissures, Homogénéisation, Thermoélasticité, Méthodes FFT

Prediction of microcracking by a FFT-based phase field method for pressed energetic materials.

ABSTRACT

This work presents a study in non-linear mechanics, in the classical framework of brittle fracture in heterogeneous media. We study numerically the localization and propagation of damage in a triamino-trinitrobenzene-based (TATB) material under various mechanical and thermal loadings. The polycrystalline microstructure, which in addition contains a binder and porosities, is partially characterized by electron microscopy images as well as experimental testings under mechanical and thermal solicitations, and presents in its initial state, residual stresses and, possibly, pre-existing cracks. We first develop a numerical method based on fast Fourier transforms for predicting the material's brittle response. A "phase field" is used to describe local damage within the microstructure. The proposed algorithms, validated by comparisons with data obtained in the literature, takes into account the irreversible nature of damage as well as the strong crystal anisotropy in TATB grains, in elasticity and tenacity. Secondly, we apply the developed numerical schemes to the study of TATB polycrystals. We focus first on transgranular cracking under a cooling-heating thermal cycle, after which the role of the porosity and of the binder as well as purely-mechanical loadings are investigated. These various phenomena are taken into account incrementally and identified by an inverse method using available experimental data. The results obtained in the present work show the preponderant role played by inter and transgranular cracks on the thermal behavior under thermal and mechanical loadings. Moreover our approach also quantifies the relative influence of various mechanisms : porosity, binder and grains elasticity, but also the grains mechanical anisotropy and pre-existing cracks in the material in its initial state.

KEYWORDS

Phase field, TATB Polycristal, Cracks, Homogenization, Thermoelasticity, FFT Methods