

# Modélisation multiéchelle par champ de phase de la microfissuration d'un polycristal organique de forte anisotropie cristalline par FFT

F. Rabbette<sup>1,2</sup>, H. Trumel<sup>1</sup>, F. Willot<sup>2</sup>

<sup>1</sup> CEA, DAM, Le Ripault, F-37260 MONTS, France, herve.trumel@cea.fr

<sup>2</sup> CMM, Mines ParisTech, 35, rue Saint-Honoré, F-77300 FONTAINEBLEAU, France, francois.rabbette@ensmp.fr, francois.willot@ensmp.fr

**Résumé** — On présente 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, dont on compare les prédictions avec des simulations de sollicitations en mode I sur éprouvette homogène entaillée, issus 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.

**Mots clés** — homogénéisation, FFT, fissuration, champ de phase

## 1 Introduction

On s'intéresse à un matériau énergétique, polycristal de 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène (TATB), jointoyé par environ 5% (vol.) d'un polymère thermoplastique amorphe servant de liant. Fabriqué par pressage isostatique à haute pression, ce matériau est initialement isotrope et faiblement poreux (< 5 %). Son comportement thermomécanique, de type quasi-fragile [1], fait intervenir endommagement, déformations irréversibles, viscoélasticité, et dilatation thermique irréversible. Très bien caractérisé au plan macroscopique, ce comportement reste mal compris, même si les mécanismes physiques de déformation sont identifiés qualitativement : microfissuration inter et transgranulaire, viscoélasticité due à la fraction polymère, et déformation inélastique du TATB, dans un contexte de forte dépendance à la température et à la triaxialité des contraintes.

Afin de progresser dans la compréhension de ce comportement, on définit et on met en œuvre une méthodologie d'homogénéisation numérique par méthode de Fourier (FFT) [2, 3] utilisant une microstructure virtuelle [4] reproduisant les principales caractéristiques morphologiques du matériau étudié (distributions de taille de grains et d'élongation, et indice de convexité). Les travaux antérieurs [1, 5], limités au cas thermoélastique linéaire, ont mis en évidence le rôle déterminant de l'anisotropie cristalline du constituant principal, le TATB.

Ce cristal moléculaire, de structure triclinique, est constitué de feuillets graphitiques dans lesquels les molécules sont liées par liaisons hydrogène, les feuillets étant liés entre eux par liaisons faibles de van der Waals. Cette structure explique la très forte anisotropie thermoélastique de ce cristal, dont le tenseur d'élasticité est donné en GPa par [6] :

$$\mathbb{C}^{TATB} = \begin{pmatrix} 65.7 & 18.5 & 4.0 & -0.2 & -1.0 & 1.0 \\ & 62.0 & 5.0 & 0.6 & -0.5 & 1.0 \\ & & 18.3 & 0.2 & -0.4 & -0.4 \\ & & & 1.4 & 0.1 & 0.3 \\ \text{sym} & & & & 0.68 & 0.4 \\ & & & & & 21.6 \end{pmatrix} \quad (1)$$

On observe en particulier un contraste supérieur à 15 entre les modules de cisaillement plan et hors plan graphitique. Les coefficients de dilatation correspondants présentent un contraste analogue [7].

Sous sollicitation thermique, par exemple, ce contraste produit de fortes contraintes internes qui expliquent que le coefficient de dilatation effectif est inférieur d'environ 40% à celui du monocristal de TATB [4]. Si la sollicitation imposée est suffisante, ces contraintes internes peuvent conduire à une perte

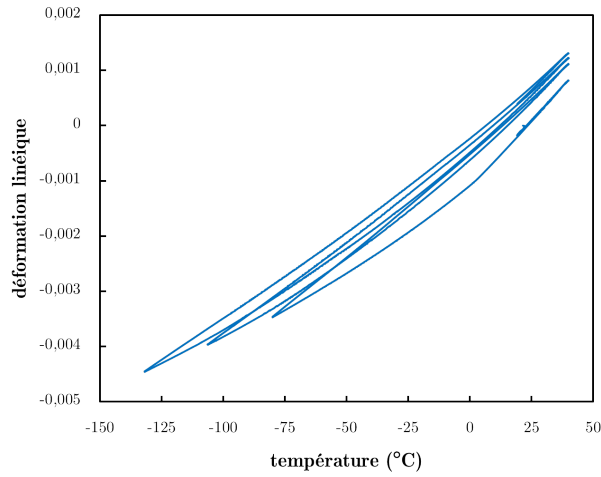


FIGURE 1 – Réponse du matériau en dilatation thermique à froid.

de linéarité de la réponse, comme l'illustre la figure 1, résultat d'un essai de dilatation thermique à basse température, vraisemblablement due à la microfissuration du matériau [5].

L'objectif du présent travail est d'introduire le mécanisme non linéaire de microfissuration, afin de prédire la réponse quasi-fragile du matériau à des sollicitations thermomécaniques quasi-statiques, notamment en compression simple et triaxiale (à 200 MPa de pression de confinement), illustrées par la figure 2a. La figure 2b donne un exemple de fissure non débouchante observée en microscopie optique post-mortem dans un échantillon rompu en compression simple.

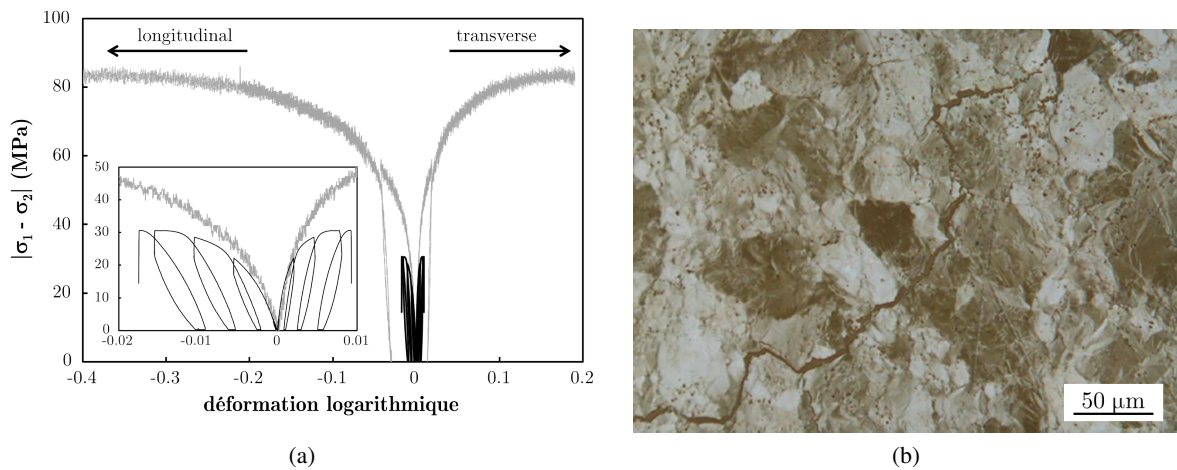


FIGURE 2 – (a) Réponse en compression simple (noir) et triaxiale à 200 MPa de pression de confinement (gris). (b) Microstructure du matériau après rupture en compression simple : cas d'une fissure non débouchante (microscopie optique en lumière polarisée).

A cet effet, on retient l'approche variationnelle de la rupture, supposée ici fragile, proposée par Francfort et Marigo [8], régularisée par Bourdin et al. [9], puis par Miehe et al. [10] dans un cadre isotrope. Ces modèles sont connus sous le nom de modèles « de champ de phase ». Le présent article décrit les premiers travaux réalisés pour l'implantation numérique du modèle de Miehe et al. [10] dans un code de Fourier en version bidimensionnelle (déformations planes). L'accent est mis sur l'effet unilatéral, nécessaire à la simulation d'essais cycliques et/ou alternés. On donne pour terminer un premier aperçu de l'effet de l'anisotropie locale sur le processus de fissuration.

## 2 Le modèle de champ de phase

Considérons un domaine  $\Omega$ , soumis à des conditions aux limites en déplacement, et contenant (ou non) des fissures notées collectivement  $\Gamma \subset \Omega$ . Le principe variationnel énoncé par Francfort et Ma-

rigor [8] s'écrit :

$$(\mathbf{u}(\mathbf{x}), \Gamma) = \operatorname{arginf}_{\mathbf{u} \in \mathcal{K}, \Gamma \subset \Omega} \{E(\mathbf{u}(\mathbf{x}), \Gamma)\} \quad (2)$$

où  $\mathbf{u}$  est le champ de déplacement,  $\mathcal{K}$  l'espace des champs de déplacement statiquement admissibles, et  $E(\mathbf{u}(\mathbf{x}), \Gamma)$  l'énergie totale du domaine  $\Omega$ , définie par :

$$E(\mathbf{u}(\mathbf{x}), \Gamma) = \int_{\Omega \setminus \Gamma} W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x}))) dV + g_c \int_{\Gamma} dS \quad (3)$$

Dans cette expression,  $W(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}$  est l'énergie élastique,  $\mathbb{C}(\mathbf{x})$  le tenseur d'élasticité local,  $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{grad}(\mathbf{u})_{\text{sym}}$  est le tenseur des déformations infinitésimales, et  $g_c$  est la ténacité du milieu considéré. La relation (2) exprime le fait que le champ de déplacement et l'ensemble des fissures, solutions du problème aux limites en déplacement, sont obtenus par minimisation de la somme de l'énergie élastique et de l'énergie de surface des fissures.

Le modèle proposé par Bourdin et al. [9] et étendu par Miehe et al. [10] régularise le problème (2) en introduisant une variable scalaire auxiliaire  $\phi(\mathbf{x})$ , prenant la valeur 0 dans le milieu sain, et la valeur 1 dans les fissures, de ce fait analogue à une variable d'endommagement, et également qualifié de « champ de phase ». Le principe (2) est reformulé de la façon suivante :

$$(\mathbf{u}(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x})) = \operatorname{arginf}_{\mathbf{u} \in \mathcal{K}, \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0|_{\partial \Omega}} \{E(\mathbf{u}(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}))\} \quad (4)$$

où  $\mathbf{n}$  est la normale au bord  $\partial \Omega$  du domaine  $\Omega$ , et où  $\nabla$  désigne l'opérateur gradient. L'expression de l'énergie (3) est modifiée comme suit :

$$E(\mathbf{u}(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x})) = \int_{\Omega} (1 - \phi(\mathbf{x}))^2 W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x}))) dV + g_c \int_{\Omega} \left( \frac{\phi(\mathbf{x})}{2\ell} + \frac{\ell}{2} \nabla \phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi(\mathbf{x}) \right) dV \quad (5)$$

Cette formulation permet de régulariser l'écriture de l'énergie totale en transformant l'intégrale de surface en intégrale de volume sur tout le domaine. En contrepartie, la surface de fissures est un champ diffus dont l'épaisseur est de l'ordre de  $\ell$ . En principe, ce nouveau paramètre doit être choisi grand devant la taille  $h$  de maille (ou de pixel) et petit devant la taille caractéristique du domaine  $\Omega$ . Afin de simplifier les expressions, on omet dans ce qui suit la dépendance à la position  $\mathbf{x}$ .

En prenant la dérivée variationnelle de l'expression de l'énergie (4) par rapport au champ de phase  $\phi$ , on obtient l'équation différentielle et la conditions aux limites suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{g_c}{2\ell} \phi - \frac{\ell}{2} \operatorname{div}(g_c \nabla \phi) &= (1 - \phi) W(\boldsymbol{\varepsilon}) \\ \nabla \phi \cdot \mathbf{n} &= 0|_{\partial \Omega} \end{aligned} \quad (6)$$

Dans la première de ces expressions, le terme de droite peut être vu comme force motrice de la fissuration. Cependant, si l'on conserve la forme usuelle de l'énergie élastique, rien ne s'oppose à l'apparition de fissures en compression. En conséquence, il est nécessaire de l'adapter pour interdire la fissuration en compression, d'une part, et interdire l'interpénétration des lèvres de la fissure à leur refermeture (effet unilatéral), d'autre part. On retient à cet effet la formulation proposée par Miehe et al. [10], en remplaçant le terme apparaissant dans la première intégrale de la relation (5) par :

$$\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \phi) = W(\boldsymbol{\varepsilon}^-) + (1 - \phi)^2 W(\boldsymbol{\varepsilon}^+) \quad (7)$$

Dans cette expression,  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\pm} = \mathbb{P}^{\pm} : \boldsymbol{\varepsilon}$ , où  $\mathbb{P}^{\pm}$  sont les projecteurs sur l'espace des tenseurs définis positifs et négatifs respectivement. Avec cette modification, le tenseur des contraintes s'écrit  $\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^- + (1 - \phi)^2 \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^+$ , et la relation (6) devient :

$$\frac{g_c}{2\ell} \phi - \frac{\ell}{2} \operatorname{div}(g_c \nabla \phi) = (1 - \phi) W(\boldsymbol{\varepsilon}^+) \quad (8)$$

De la sorte, la force motrice de la fissuration n'est non nulle que pour des sollicitations locales de traction.

Telle quelle, cependant, l'équation différentielle (6) ne respecte pas le principe d'irréversibilité du phénomène de fissuration, selon lequel la surface des fissures, ou le champ de phase, ne peuvent qu'augmenter au cours du temps. Pour assurer cette irréversibilité, Miehe et al. [10] proposent l'adaptation suivante :

$$\frac{g_c}{2\ell}\phi(t) - \frac{\ell}{2}\operatorname{div}(g_c \nabla \phi(t)) = (1 - \phi(t))\mathcal{H}(\varepsilon, t) \quad \text{avec} \quad \mathcal{H}(\varepsilon, t) = \max_{0 \leq s \leq t} \{W(\varepsilon^+, s)\} \quad (9)$$

Enfin, en prenant la dérivée variationnelle de l'expression de l'énergie (4) par rapport au déplacement  $\mathbf{u}$ , on obtient l'équation de l'équilibre :

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (10)$$

où  $\boldsymbol{\sigma}$  est le tenseur des contraintes de Cauchy.

### 3 Méthode de Fourier pour l'initiation et la propagation de fissure

#### 3.1 Discrétisation et schéma numérique

On souhaite résoudre de manière incrémentale le problème (9, 10) par une méthode de Fourier, avec conditions aux bords périodiques et chargement en déformation  $\langle \varepsilon \rangle = \bar{\varepsilon}(t)$ , où  $\langle \cdot \rangle$  désigne la moyenne volumique, et  $\bar{\varepsilon}(t)$  est la déformation imposée.

A champ de phase  $\phi$  fixé, l'équation de l'équilibre (10) est résolue à l'aide de la méthode employée habituellement en élasticité linéaire, avec comme tenseur d'élasticité local  $(1 - \phi(\mathbf{x}))^2 \mathbb{C}(\mathbf{x})$ . On utilise le « schéma direct » [2], avec discrétisation de l'opérateur de Green sur une grille tournée [11] et on considère comme critère de convergence :

$$\int_{\Omega} |\varepsilon^{k+1} - \varepsilon^k| dV \leq \eta_1 \quad (11)$$

où  $\varepsilon^k$  est le champ de déformation à la  $k$ -ième itération, et où  $\eta_1$  est le critère de convergence. A champ de déformation  $\varepsilon$  fixé, on résout l'équation (9) sur une grille régulière de pixels en discrétisant les opérateurs différentiels par différences finies :

$$\operatorname{div}(g_c \nabla \phi(\mathbf{x})) = g_c \Delta \phi(\mathbf{x}) \approx \frac{g_c}{h^2} \sum_i [\phi(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) + \phi(\mathbf{x} - h\mathbf{e}_i) - 2\phi(\mathbf{x})] \quad (12)$$

où  $h$  est la taille du pixel, et  $(\mathbf{e}_i)_{i=1,2}$  est un repère cartésien aligné sur la grille de pixels. L'équation (9) étant linéaire, on utilise une méthode de gradient conjugué qui permet de mettre le problème sous la forme  $\mathbb{A} \cdot \phi = \mathbf{b}$ , et  $\|\mathbf{b} - \mathbb{A} \cdot \phi\| \leq \eta_2$  comme critère de convergence.

La minimisation de l'énergie totale implique ainsi la résolution simultanée des problèmes couplés en déformation et en champ de phase. On considère dans la suite de ce travail deux schémas numériques, que l'on qualifie d'« implicite » et de « séquentiel ». Le schéma implicite consiste à résoudre alternativement et de manière itérative les problèmes en déformation et en champ de phase jusqu'à obtenir convergence simultanée des deux champs. On utilise comme critère de convergence :

$$\int_{\Omega} |\phi^{k+1} - \phi^k| dV \leq \eta_3 \quad (13)$$

Le schéma séquentiel consiste résoudre les deux problèmes séparés à chaque pas de chargement, ces derniers étant choisis suffisamment petits.

#### 3.2 Validation

Afin de valider l'implantation numérique décrite ci-dessus, on réalise une simulation de traction en mode I sur massif périodique homogène carré d'un millimètre de côté, entaillé sur la moitié de sa largeur (Fig. 3), simulation réalisée par Miehe et al. [10] à l'aide d'un logiciel aux éléments finis. Ce massif est représenté par une grille de  $140 \times 140$  pixels, et l'entaille par une rangée de 70 pixels de rigidité nulle. Le chargement, en mode I, est imposé par la déformation axiale  $\bar{\varepsilon}_{xx}(t)$ , avec  $\bar{\varepsilon}_{xy} = \bar{\varepsilon}_{xz} = \bar{\varepsilon}_{zz} = 0$ . La condition de bord latéral libre est réalisée par l'adjonction d'une rangée de 2 pixels de rigidité nulle le long de la

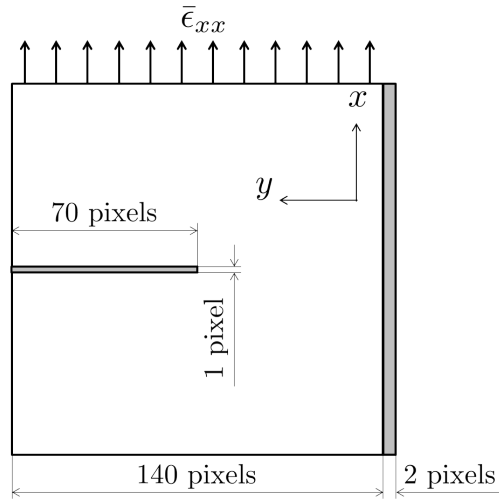


FIGURE 3 – Massif entaillé sollicité en mode I.

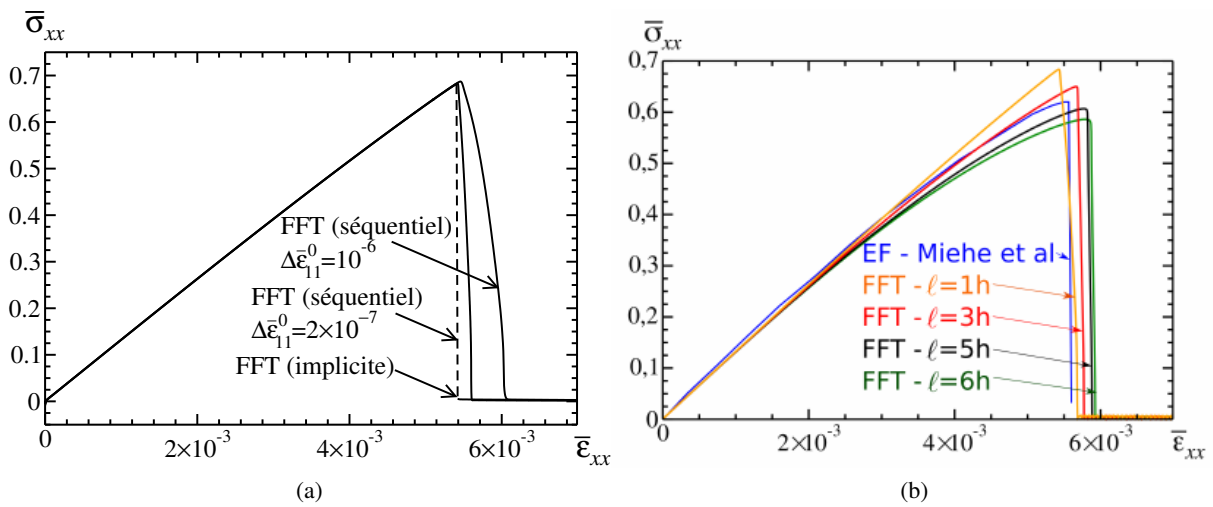


FIGURE 4 – Réponse  $\bar{\sigma}_{xx}$  du massif entaillé sollicité en mode I en fonction de la déformation macroscopique appliquée  $\bar{\epsilon}_{xx}$ . (a) Comparaison entre les prédictions des schémas implicite et séquentiel pour  $\ell = h$  (voir le texte). (b) Comparaison entre les prédictions par éléments finis [10] et la méthode implicite, pour différents choix de  $\ell$ .

face latérale du massif, et on rappelle que la structure et les conditions aux limites sont périodiques. Le matériau constitutif du massif est isotrope, caractérisé par des coefficients de Lamé  $\lambda = 121,15$  GPa et  $\mu = 80,77$  GPa, et par une ténacité  $g_c = 2,7$  J.m<sup>-2</sup>, identiques à celles utilisées par Miehe et al. [10].

La figure 4a donne la réponse du massif à la sollicitation imposée pour le schéma séquentiel avec des pas de chargement de  $\Delta \bar{\epsilon}_{xx} = 10^{-6}$  et de  $\Delta \bar{\epsilon}_{xx} = 2 \times 10^{-7}$ , et pour le schéma implicite avec un pas de chargement de  $\Delta \bar{\epsilon}_{xx} = 10^{-6}$ . Les critères de convergence retenus sont  $\eta_1 = 10^{-7}$ ,  $\eta_2 = 10^{-8}$ , et  $\eta_3 = 5 \times 10^{-7}$ . Le schéma implicite donne une réponse brutale, tandis que le schéma séquentiel donne une réponse plus progressive, qui se rapproche de celle du schéma implicite lorsque le pas de chargement décroît.

La figure 4b compare la solution obtenue par éléments finis (EF) par Miehe et al. [10] à la solution obtenue avec le schéma implicite pour diverses valeurs du paramètre  $\ell$ . On note une certaine dépendance de la contrainte maximale à la valeur de ce paramètre, ainsi qu'une perte de linéarité intervenant d'autant plus tôt que  $\ell$  est élevé, conformément aux observations de divers auteurs (voir par exemple [12]), certains interprétant  $\ell$  comme un paramètre matériau plutôt que comme un paramètre de régularisation.

### 3.3 Effet unilatéral

On reprend l'exemple précédent, avec schéma explicite et  $\frac{\ell}{h} = 2$ . Dans un premier temps, la déformation uniaxiale  $\varepsilon_{xx}$  croît jusqu'à initiation de la fissuration, puis la déformation imposée est progressivement ramenée à zéro. Dans un second temps, l'éprouvette est sollicitée en compression. La figure 5 présente la réponse du massif, et montre clairement que sa rigidité, après avoir été dégradée du fait de l'ouverture et la propagation de la fissure, est restaurée lors de la phase de compression.

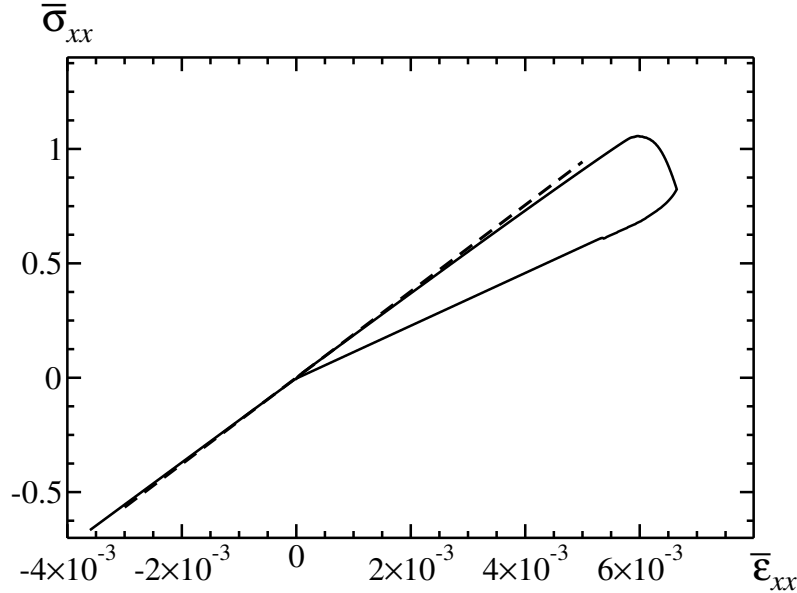


FIGURE 5 – Contrainte de traction  $\bar{\sigma}_{xx}$  vs. déformation uniaxiale imposée  $\bar{\varepsilon}_{xx}$  : cycle de traction-compression dans un milieu isotrope entaillé. Ligne pointillée : tangente à l'origine.

## 4 Vers une prise en compte de l'anisotropie

### 4.1 Massif à symétrie quasi-hexagonale

On reprend l'exemple précédent du massif périodique homogène fissuré, mais en lui conférant les propriétés élastiques linéaires anisotropes (1), tout en conservant une ténacité isotrope  $g_c = 0,2 \text{ J.m}^{-2}$ , valeur raisonnable pour ce cristal moléculaire. Pour ces simulations, on ne reprend pas la condition de bord latéral libre, mais on fixe  $\bar{\varepsilon}_{yy} = 0$ . Les simulations sont réalisées avec le schéma séquentiel, associé à un pas de chargement de  $\Delta\varepsilon_{xx} = 5 \times 10^{-5}$ , et des critères de convergence  $\eta_1 = 10^{-7}$  et  $\eta_2 = 10^{-9}$ .

La figure 6 représente la réponse du massif à la sollicitation de mode I pour 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 colorés de la figure 6.

Ces trois cas présentent d'importantes différences. Le seuil de rupture est le plus faible dans le cas où la fissure se propage le long du plan basal (cas ii). La différence entre les cas (i) et (iii) s'explique par la différence de leurs rigidités latérales. Les résultats obtenus sont cohérents avec les simulations par éléments finis réalisées dans des cas de cristaux 2D à symétrie orthotrope (voir notamment [13]).

### 4.2 Cas d'un polycristal non entaillé

On considère maintenant une microstructure périodique de Voronoi (Fig. 7a) avec une orientation aléatoire de 500 grains discrétisée sur une grille de  $500^2$  pixels. On ne prend pas en compte la présence de liant aux joints de grains et l'interface entre les grains est supposée parfaite. Le polycristal ne présente aucun défaut préexistant, l'initiation de la fissure ne résultant que de l'hétérogénéité des contraintes dans le matériau. On utilise comme ci-dessus un schéma de résolution explicite avec  $\frac{\ell}{h} = 2$ , et on choisit  $\mathbb{C} = \mathbb{C}^{TAB}$  à une rotation aléatoire près dans chaque grain. On fixe la ténacité à  $g_c = 0,12 \text{ J.m}^{-2}$ . On impose

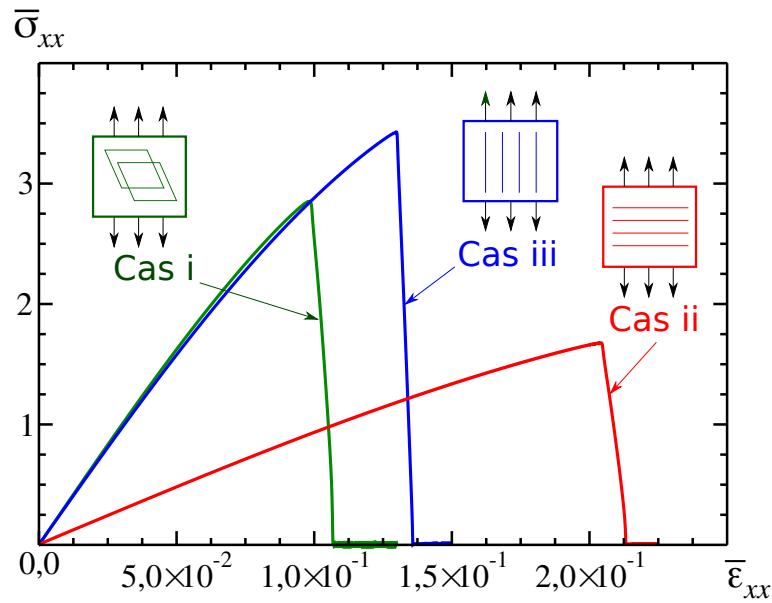


FIGURE 6 – Massif entaillé anisotrope sollicité en mode I, pour trois orientations différentes de l’entaille et de la sollicitation par rapport aux directions cristallographiques (voir les encarts).

par ailleurs une déformation uniaxiale avec un pas de chargement  $\Delta\epsilon_{xx} = 5 \times 10^{-5}$ , avec  $\eta_1 = 10^{-7}$  et  $\eta_2 = 10^{-8}$ . La nucléation de la fissure intervient lorsque  $\epsilon_{xx} \approx 9.1\%$  (Fig.7b), au niveau d’un joint triple. La fissure se propage de façon principalement transgranulaire (Fig.7c-f), avec apparition d’une fissure secondaire (Fig. 7d), dont la croissance s’arrête après un chargement de l’ordre de  $\epsilon_{xx} \approx 9.75\%$ . La fissure se propage dans le matériau jusqu’à rupture (Fig. 7f) avec  $\sigma_{xx} \approx 0$ .

## 5 Conclusion et perspectives

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 anisotropes est proposée. Celle-ci repose sur un algorithme FFT traitant séparément le problème en déformation et le problème en champ de phase, et résolu de manière « implicite » ou « séquentielle », les propriétés de convergence étant alors contrôlées par deux ou trois paramètres de convergence. La méthode a été validée par comparaison à des calculs éléments finis dans le cas de déformation plane, puis testée avec anisotropie élastique et effet unilatéral, et on présente pour terminer une première application à la simulation de l’endommagement dans un polycristal 2D, en traction.

La phase suivante de ces travaux consistera d’abord à compléter la prise en compte de l’anisotropie, en implantant un modèle à ténacité anisotrope (voir par exemple [14]), puis à implanter un modèle d’interphase intergranulaire permettant de prendre en compte la présence du liant et la rupture intergranulaire.

## 6 Références bibliographiques

### Références

- [1] J.-B. Gasnier, F. Willot, H. Trumel, D. Jeulin, M. Biessy, *Thermoelastic properties of microcracked polycrystals. Part II. The case of jointed polycrystalline TATB*, Int. J. Solids Struct., **155**, 257-274, **2018**.
- [2] H. Moulinec, P. Suquet, *A fast numerical method for computing the linear and nonlinear properties of composites*, C.R. Acad. Sci. Paris II, **318**, 1417-1423, **1994**.

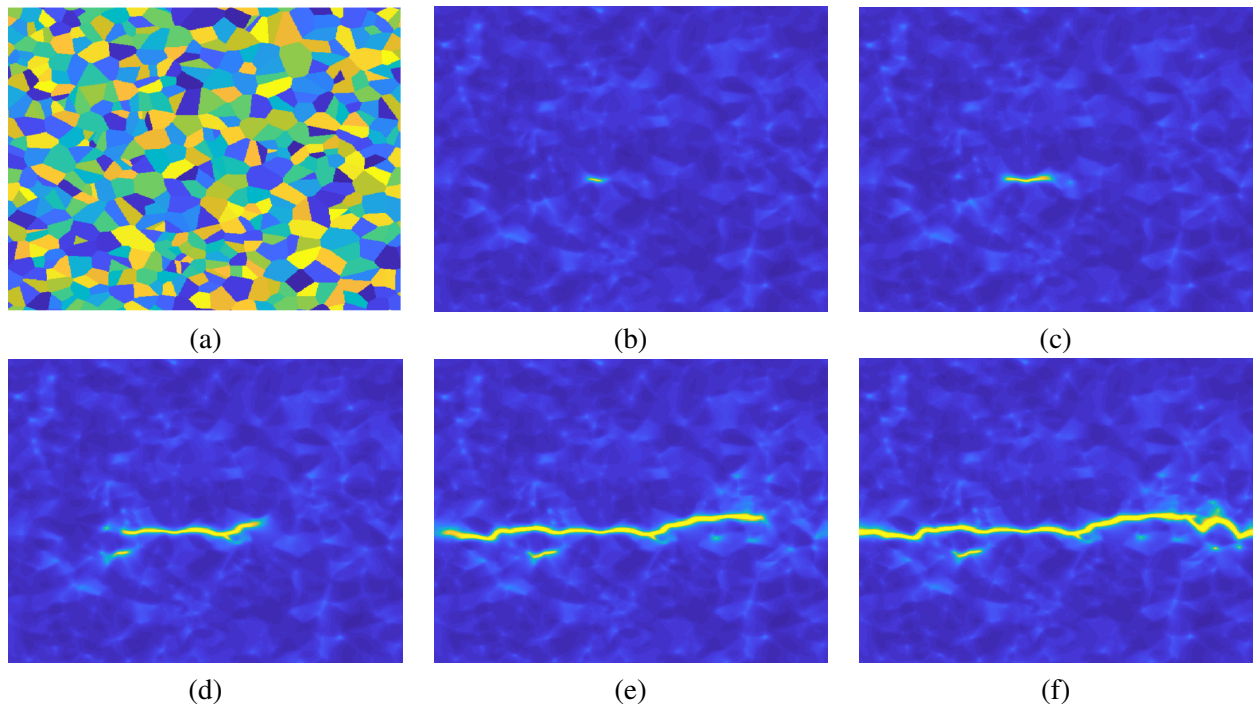


FIGURE 7 – Propagation de fissures dans un polycristal de Voronoi (a) sollicité en déformation uniaxiale : cartes du champ de phase  $\phi(\mathbf{x})$  pour un chargement macroscopique croissant  $\bar{\epsilon}_{xx} = 9.1, 9.25, 9.5, 9.75, 10\%$  (b-f, resp.). Bleu :  $\phi(\mathbf{x}) = 0$  ; jaune :  $\phi(\mathbf{x}) = 1$ .

- [3] F. Willot, B. Abdallah, 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**, 518-533, **2014**.
- [4] J.-B. Gasnier, F. Willot, H. Trumel, B. Figliuzzi, D. Jeulin, M. Biessy, *A Fourier-based numerical homogenization tool for an explosive material*, Mater. & Tech., **103**, 308, **2015**.
- [5] J.-B. Gasnier, F. Willot, H. Trumel, D. Jeulin, M. Besson, *Thermoelastic properties of microcracked polycrystals. Part I. Adequacy of Fourier methods for cracked elastic bodies*, Int. J. Solids Struct., **155**, 248-256, **2018**.
- [6] D. Bedrov, O. Borodin, G. D. Smith, T. D. Sewell, D. M. Dattelbaum, 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**.
- [7] J. Sun, B. Kang, C. Xue, Y. Liu, Y. Xia, X. Liu, 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**.
- [8] G. A. Francfort, J.-J. Marigo, *Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem*, J. Mech. Phys. Solids, **46**, 1319-1342, **1998**.
- [9] B. Bourdin, G. A. Francfort, J.-J. Marigo, *Numerical experiments in revisited brittle fracture*, J. Mech. Phys. Solids, **48**, 797-826, **2000**.
- [10] C. Miehe, M. Hofacker, F. Welschinger, *A phase field model for rate-independent crack propagation : Robust algorithmic implementation based on operator splits*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., **199**, 2765-2778, **2010**.
- [11] F. Willot, *Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields*, C. R. Méc., **343**, 232-245, **2015**.
- [12] R. P. May, J. Vignollet, R. de Borst, *A numerical assessment of phase-field models for brittle and cohesive fracture :  $\Gamma$ -convergence and stress oscillations*, Eur. J. Mech. A/Solids, **52**, 72-84, **2015**.
- [13] J. Bleyer, R. Alessi, *Phase-field modeling of anisotropic brittle fracture including several damage mechanisms*, Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg., **336**, 213-236, **2018**.
- [14] S. Teichtmeister, D. Kienle, F. Aldakheel, M.-A. Keip, *Phase field modeling of fracture in anisotropic brittle solids*, Int. J. Nonlinear Mech., **97**, 1-21, **2017**.