

# Résistance d'un polycristal avec interfaces intergranulaires imparfaites

Luc Dormieux<sup>a,\*</sup>, Julien Sanahuja<sup>b</sup>, Yamen Maalej<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *LMSGC, UMR 113 CNRS/ENPC/LCPC, 77455 Marne-la-Vallée, France*

<sup>b</sup> *Lafarge centre de recherche, 95, rue du Montmurier, BP 15, 38291 Saint-Quentin Fallavier cedex, France*

Reçu le 25 juillet 2006 ; accepté après révision le 14 novembre 2006

Disponible sur Internet le 19 décembre 2006

Présenté par Évariste Sanchez-Palencia

---

## Résumé

On s'intéresse à un polycristal poreux constitué de grains en contact le long d'interfaces. On met tout d'abord en œuvre un schéma autocohérent faisant intervenir des pores sphériques ainsi qu'un motif constitué d'un noyau élastique entouré d'une interface également élastique. On établit ensuite une formule permettant de déterminer la moyenne quadratique de la discontinuité de déplacement tangentiel dans les interfaces entre grains. Dans la dernière partie, on applique la méthode sécante modifiée pour déterminer le critère de rupture d'un tel milieu dans l'hypothèse où le solide et les interfaces sont respectivement de type von Mises et Tresca. **Pour citer cet article :** *L. Dormieux et al., C. R. Mecanique 335 (2007).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

## Abstract

**Strength of a polycrystal with imperfect intergranular interfaces.** A porous polycrystal made up of grains in contact along interfaces is considered. First, a self-consistent scheme including spherical pores and a pattern comprising a spherical elastic core surrounded by an elastic interface is implemented. Then, a formula giving the quadratic average of the tangential displacement discontinuity in the interfaces is established. Finally, the modified secant method is applied to the determination of the effective strength criterion in the case of a von Mises solid and interfaces of the Tresca type. **To cite this article:** *L. Dormieux et al., C. R. Mecanique 335 (2007).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

*Mots-clés :* Mécanique des solides numérique ; Milieux granulaires ; Milieux poreux ; Interface ; Micromécanique ; Résistance ; Schéma auto-cohérent

*Keywords :* Computational solid mechanics; Granular media; Porous media; Interface; Micromechanics; Strength; Self-consistent scheme

---

\* Auteur correspondant.

Adresses e-mail : [dormieux@lmsgc.enpc.fr](mailto:dormieux@lmsgc.enpc.fr) (L. Dormieux), [julien.sanahuja@lafarge.com](mailto:julien.sanahuja@lafarge.com) (J. Sanahuja), [maalej@lmsgc.enpc.fr](mailto:maalej@lmsgc.enpc.fr) (Y. Maalej).

## Abridged English version

Let us introduce a r.e.v.  $\Omega$  of a porous polycrystal made up of solid grains (domain  $\Omega^s$ ) and pores (pore volume fraction  $\varphi$ ). The grains  $\mathcal{G}_i$  and  $\mathcal{G}_j$  are in contact along the interface  $\mathcal{I}_{ij}$ .

Considering a second order tensor  $\mathbf{a}$  and its deviatoric part  $\mathbf{a}_d$ , let  $a_m = \text{tr } \mathbf{a}/3$  and  $a_d = \sqrt{\mathbf{a}_d : \mathbf{a}_d/2}$ . First, the case of an elastic behavior of the solid and of the interfaces is investigated. The constitutive equation of the interfaces, given in (1), relates the stress vector  $\underline{T}$  acting on the interface to the displacement discontinuity  $[\underline{\xi}]$ . The stiffness tensor of the solid is denoted by  $\mathbb{C}^s$ . The macroscopic stress  $\Sigma$  is related to the average stress  $\bar{\sigma}^{\mathcal{G}_i}$  in the grains  $\mathcal{G}_i$  according to (2). In turn, the macroscopic strain  $\mathbf{E}$  is related by (4) to the average strains  $\bar{\epsilon}^{\mathcal{G}_i}$  and  $\bar{\epsilon}^{\mathcal{P}_k}$  in the grains  $\mathcal{G}_i$  and in the pores  $\mathcal{P}_k$  defined in (5).

A self-consistent estimate  $\mathbb{C}^{\text{ac}}$  of the homogenized stiffness tensor  $\mathbb{C}^{\text{hom}}$  of (6) is sought. In the proposed homogenization scheme, the average strain  $\bar{\epsilon}^{\mathcal{P}_k}$  is estimated by (8) according to the classical solution to the Eshelby problem. The generalized Eshelby problem (10) considering a spherical elastic core surrounded by an elastic interface embedded in an infinite medium is then introduced in view of estimating  $\bar{\epsilon}^{\mathcal{G}_i}$ . The displacement and stress fields  $(\underline{\xi}^{\text{esh}}, \sigma^{\text{esh}})$  solution to (10) yield estimates of  $\bar{\sigma}^{\mathcal{G}_i}$  and  $\bar{\epsilon}^{\mathcal{G}_i}$  in the form (11). Note that the auxiliary strain tensor  $\mathbf{E}_o$  that appears in (8) and (10) is related to the macroscopic strain tensor  $\mathbf{E}$  by (12). (10) can be solved explicitly for a purely spherical tensor  $\mathbf{E}_o$ . This yields the relationship (16) between the self-consistent estimates  $k^{\text{ac}}$  and  $\mu^{\text{ac}}$  of the effective bulk and shear moduli. Following [4], it can also be solved for a purely deviatoric tensor  $\mathbf{E}_o$ . Introducing  $\kappa = 2K_t a/\mu^s$ ,  $\mu^{\text{ac}}$  can be put in the form  $\mathcal{M}(\varphi, \kappa)\mu^s$  where  $\mathcal{M}$  is the positive solution to (17).

As shown in (18), the macroscopic volume density  $\Psi$  of elastic energy comprises the contribution of the solid grains and that of the interfaces ( $\mathcal{I} = \bigcup \mathcal{I}_{ij}$ ). Extending the classical result of Kreher [5], the quadratic average  $\langle \epsilon_d^2 \rangle_{\Omega^s}$  of the shear strain  $\epsilon_d = \sqrt{\boldsymbol{\epsilon}_d : \boldsymbol{\epsilon}_d/2}$  in the grains is derived from the derivative of  $\Psi$  with respect to the shear modulus  $\mu^s$  of the solid (see (22)) and is related to the macroscopic strain and stress by (23). Following the same line of reasoning, it is shown that the quadratic average of the tangential displacement discontinuity is derived from the derivative of  $\Psi$  with respect to the tangential elasticity modulus  $K_t$  of the interface (25). It is then related to the macroscopic stress by (26).

The strength of the polycrystal is investigated in the non porous case ( $\varphi = 0$ ). The strength of solid is described by the von Mises criterion  $\sigma_d \leq L_s$  and that of the interfaces by the Tresca criterion  $|\underline{T}_t| \leq L_j$ , in which  $\underline{T}_t$  denotes the tangential component of the stress vector applied to the interface. Let  $\beta$  denote the ratio  $L_j/L_s$ . For determining the homogenized strength, a fictitious non linear elastic behavior of the solid and the interfaces is defined by (27). The response of the r.e.v. is the solution to a non linear homogenization problem, which is determined using the modified secant method [7]. The failure of the composite can a priori combine failure mechanisms in the grains and the interfaces. They are respectively associated with the thresholds (29) and (30). If  $\beta \geq \sqrt{2/5}$ , the failure mechanism only involves the grains and the macroscopic criterion is identical to the local one:  $\Sigma_d \leq L_s$ . If  $\beta < \sqrt{2/5}$ , the strength of the composite is smaller than that of the solid. The macroscopic criterion is again of the von Mises type and can be put in the form  $\Sigma_d^2 \leq L_s^2 f(\beta)$ . A polynomial approximation of  $f(\beta)$  is given in (32).

## 1. Interfaces et grains élastiques

On s'intéresse dans un premier temps à un volume élémentaire  $\Omega$ , de volume  $|\Omega|$ , d'un composite constitué de grains solides élastiques (modules de compression et de cisaillement  $k^s$  et  $\mu^s$ ) et de pores, organisés selon une morphologie de type polycristalline.  $\Omega^s$  et  $\Omega^p$  désignent respectivement le sous-domaine solide et l'espace poreux. Les grains  $\mathcal{G}_i$  et  $\mathcal{G}_j$  sont en contact selon une interface  $\mathcal{I}_{ij}$  dont le comportement est régi par une relation entre vecteur-contrainte  $\underline{T}$  et discontinuité de déplacement  $[\underline{\xi}] = \underline{\xi}_j - \underline{\xi}_i$  à la traversée de celle-ci :

$$\underline{T} = \mathbf{K} \cdot [\underline{\xi}] \quad \text{avec } \mathbf{K} = K_n \underline{n} \otimes \underline{n} + K_t (\mathbf{1} - \underline{n} \otimes \underline{n}) \quad (1)$$

dans laquelle  $\mathbf{1}$  désigne le tenseur identité d'ordre 2 et  $\underline{n}$  la normale à l'interface orientée de  $\mathcal{G}_i$  vers  $\mathcal{G}_j$ .  $K_n$  (resp.  $K_t$ ) sont relatifs à une éventuelle discontinuité normale (resp. tangentielle). Dans la suite,  $\mathbf{a}$  désignant un tenseur d'ordre 2 et  $\mathbf{a}_d$  sa partie déviatorique, on pose  $a_m = \text{tr } \mathbf{a}/3$  et  $a_d = \sqrt{\mathbf{a}_d : \mathbf{a}_d/2}$ .

On recherche le comportement effectif du polycrystal dans l'hypothèse où la loi de comportement des joints de grains possède la forme (1). Il s'agit donc de relier la contrainte macroscopique  $\Sigma$  à la déformation macroscopique  $\mathbf{E}$  appliquée.

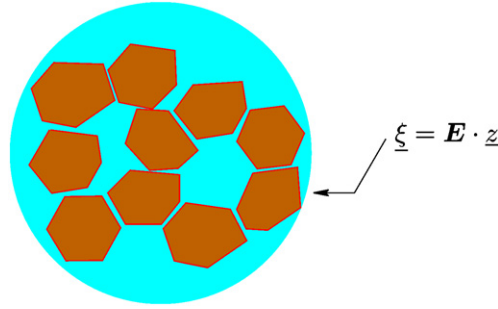


Fig. 1. v.e.r. d'un polycristal poreux.

Fig. 1. r.e.v. of a porous polycrystal.

Le tenseur des contraintes est relié au champ de contraintes dans  $\Omega$  par la règle de moyenne usuelle qui s'écrit ici :

$$\Sigma = (1 - \varphi)\bar{\sigma}^s = \sum_i f_i \bar{\sigma}^{\mathcal{G}_i} \quad \text{avec } \bar{\sigma}^s = \frac{1}{|\Omega^s|} \int_{\Omega^s} \sigma \, dV \quad \text{et } \bar{\sigma}^{\mathcal{G}_i} = \frac{1}{|\mathcal{G}_i|} \int_{\mathcal{G}_i} \sigma \, dV \quad (2)$$

où  $\varphi$  désigne la porosité et  $f_i$  la fraction volumique dans  $\Omega$  de  $\mathcal{G}_i$  ( $\sum_i f_i = 1 - \varphi$ ).

La déformation macroscopique  $\mathbf{E}$  comporte la contribution des grains, celle des interfaces entre grains et celle des pores. Notant  $\mathcal{P}_k$  le pore n°  $k$ , il vient :

$$\mathbf{E} = \frac{1}{|\Omega|} \left( \sum_{\{i,j\}} \int_{\mathcal{I}_{ij}} \llbracket \underline{\xi} \rrbracket \otimes \underline{n} \, dS + \sum_k \int_{\partial \mathcal{G}_k} \underline{\xi}_k \otimes \underline{n} \, dS + \sum_k \int_{\mathcal{P}_k} \boldsymbol{\varepsilon} \, dV \right) \quad (3)$$

où  $\boldsymbol{\varepsilon}$  désigne le champ de déformation dans l'espace poreux. Dans la première intégrale de (3), la sommation a lieu sur les interfaces, c'est-à-dire sur les paires  $\{i, j\}$  de grains. D'une façon équivalente, on peut sommer sur les grains, quitte à répartir la discontinuité  $\llbracket \underline{\xi} \rrbracket$  en deux moitiés. A cet effet, il est commode d'introduire le vecteur déplacement moyen de l'interface  $\mathcal{I}_{ij}$  défini par  $\bar{\underline{\xi}} = (\underline{\xi}_i + \underline{\xi}_j)/2$ . On remarque que  $\bar{\underline{\xi}} = \underline{\xi}_i + \llbracket \underline{\xi} \rrbracket/2 = \underline{\xi}_j - \llbracket \underline{\xi} \rrbracket/2$ . On pose par ailleurs  $\bar{\underline{\xi}} = \underline{\xi}_i$  sur la frontière de  $\mathcal{G}_i$  en contact avec la porosité. Il vient :

$$\mathbf{E} = \frac{1}{|\Omega|} \left( \sum_i \int_{\partial \mathcal{G}_i} \bar{\underline{\xi}} \otimes \underline{n} \, dS + \sum_k \int_{\mathcal{P}_k} \boldsymbol{\varepsilon} \, dV \right) = \sum_i f_i \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathcal{G}_i} + \sum_k \varphi_k \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathcal{P}_k} \quad (4)$$

où l'on a introduit la déformation moyenne respectivement dans le pore  $\mathcal{P}_k$  (de fraction volumique  $\varphi_k$ ) et dans le grain  $\mathcal{G}_i$  entouré des interfaces avec ses voisins :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathcal{P}_k} = \frac{1}{|\mathcal{P}_k|} \int_{\mathcal{P}_k} \boldsymbol{\varepsilon} \, dV ; \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathcal{G}_i} = \frac{1}{|\mathcal{G}_i|} \int_{\partial \mathcal{G}_i} \bar{\underline{\xi}} \otimes \underline{n} \, dS \quad (5)$$

$\mathbb{I}$  désignant le tenseur identité du quatrième ordre, on introduit selon l'usage les projecteurs  $\mathbb{J} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}/3$  et  $\mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$ . On se place dans l'hypothèse d'une géométrie isotrope de la microstructure. Le comportement macroscopique attendu est élastique linéaire et fait intervenir des coefficients d'élasticité volumique  $k^{\text{hom}}$  et déviatorique  $\mu^{\text{hom}}$  tels que

$$\Sigma = \mathbb{C}^{\text{hom}} : \mathbf{E} \quad \text{avec } \mathbb{C}^{\text{hom}} = 3k^{\text{hom}}\mathbb{J} + 2\mu^{\text{hom}}\mathbb{K} \quad (6)$$

La détermination du tenseur  $\mathbb{C}^{\text{hom}}$  passe par une estimation de la contrainte moyenne  $\bar{\sigma}^{\mathcal{G}_i}$  dans un grain, et des déformations moyennes  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathcal{G}_i}$  et  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathcal{P}_k}$ . On met en œuvre dans la suite un schéma autocohérent, la notation hom dans (6) étant alors remplacée par ac.

On estime tout d'abord la déformation dans les pores à partir de la solution classique du problème d'Eshelby. Plus précisément, on considère une cavité sphérique plongée dans un milieu infini dont les propriétés élastiques sont celles du milieu que l'on cherche à déterminer. On se donne à l'infini des conditions aux limites uniformes en déformation, de la forme :

$$\underline{z} \rightarrow \infty ; \quad \underline{\xi}(\underline{z}) = \mathbf{E}_o \cdot \underline{z} \quad (7)$$

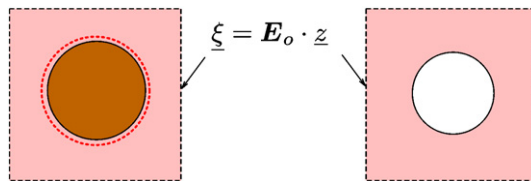


Fig. 2. Problème d'Eshelby pour l'ensemble grain + interface et pour le pore sphérique.

Fig. 2. The Eshelby problem for the grain + interface, and for the spherical pore.

$\mathbf{E}_o$  sera relié ultérieurement à  $\mathbf{E}$  à l'aide de la règle de moyenne sur la déformation (4). Dans la suite, on utilise la déformation uniforme  $\boldsymbol{\varepsilon}^C$  qui s'établit dans la cavité comme estimation de  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathcal{P}_k}$  :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathcal{P}_k} \approx \boldsymbol{\varepsilon}^C = (\mathbb{I} - \mathbb{S}^{\text{ac}})^{-1} : \mathbf{E}_o \quad (8)$$

où  $\mathbb{S}^{\text{ac}}$  est le tenseur d'Eshelby de l'inclusion sphérique. On représente l'ensemble grain solide + joints de grains par un motif morphologique [1] constitué d'un noyau élastique sphérique ( $r < a$ ) entouré d'une interface ( $r = a$ ), où  $a$  désigne le rayon caractéristique des grains. Dans la suite,  $\mathcal{B}_a$  désigne la sphère de rayon  $a$ . Le comportement de l'interface est caractérisé par une relation entre le vecteur-contrainte  $\underline{T}$  et la discontinuité de déplacement  $[\underline{\xi}]$  dont elle est le siège. Observant que l'interface en question prend en compte la moitié de la différence de déplacement intergranulaire  $[[\underline{\xi}]]$ , on a donc  $[\underline{\xi}] = [[\underline{\xi}]]/2$ , de sorte que l'on déduit de (1) la relation  $\underline{T}([\underline{\xi}])$  sous la forme :

$$\underline{T} = \mathbf{K}' \cdot [\underline{\xi}] \quad \text{avec } \mathbf{K}' = 2\mathbf{K} \quad (9)$$

On est ainsi ramené à un problème d'Eshelby généralisé ayant la structure suivante :

$$\begin{aligned} r < a : \quad & \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \text{avec } \mathbb{C}^s = 3k^s \mathbb{J} + 2\mu^s \mathbb{K} \\ r = a : \quad & \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} = \mathbf{K}' \cdot [\underline{\xi}] \\ r > a : \quad & \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^{\text{ac}} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \text{avec } \mathbb{C}^{\text{ac}} = 3k^{\text{ac}} \mathbb{J} + 2\mu^{\text{ac}} \mathbb{K} \\ r \rightarrow \infty : \quad & \underline{\xi} \rightarrow \mathbf{E}_o \cdot \underline{z} \end{aligned} \quad (10)$$

La résolution de ce problème est exposée de deux manières différentes dans [2] et [3]. On tire de la solution  $(\underline{\xi}^{\text{esh}}, \boldsymbol{\sigma}^{\text{esh}})$  de (10) une estimation de la contrainte moyenne et de la déformation moyenne dans l'ensemble grain + interface :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathcal{G}_i} \approx \frac{1}{|\mathcal{B}_a|} \int_{\partial \mathcal{B}_a} a \underline{n} \otimes \boldsymbol{\sigma}^{\text{esh}} \cdot \underline{n} \, dS ; \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathcal{G}_i} \approx \frac{1}{|\mathcal{B}_a|} \int_{\partial \mathcal{B}_a} \underline{\xi}^{\text{esh}}(a^+) \otimes \underline{n} \, dS \quad (11)$$

où la notation  $a^+$  renvoie à la face extérieure de l'interface. Notons qu'en combinant (8) et (11), la règle de moyenne (4) devient :

$$\mathbf{E} = \frac{1-\varphi}{|\mathcal{B}_a|} \int_{\partial \mathcal{B}_a} \underline{\xi}^{\text{esh}}(a^+) \otimes \underline{n} \, dS + \varphi (\mathbb{I} - \mathbb{S}^{\text{ac}})^{-1} : \mathbf{E}_o \quad (12)$$

Par ailleurs, en introduisant (11) dans (2), il vient aussi :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1-\varphi}{|\mathcal{B}_a|} \int_{\partial \mathcal{B}_a} a \underline{n} \otimes \boldsymbol{\sigma}^{\text{esh}} \cdot \underline{n} \, dS \quad (13)$$

Pour déterminer les deux constantes macroscopiques inconnues  $k^{\text{ac}}$  et  $\mu^{\text{ac}}$ , il suffit de considérer successivement deux tenseurs  $\mathbf{E}_o$  respectivement purement isotrope et déviatorique. Pour des raisons qui apparaîtront à la Section 3, on se limite à présent au cas limite où  $k_s$  et  $K'_n \rightarrow \infty$ . On commence par traiter le problème (10) pour le choix d'un tenseur  $\mathbf{E}_o$  isotrope, de la forme  $\mathbf{E}_o \mathbf{1}$ . Le champ de vitesses attendu dans le domaine  $r > a$  est purement radial, avec  $\xi_r = E_o(r - a^3/r^2)$ . On déduit d'abord de (12) l'expression de la déformation macroscopique sous la forme :

$$\mathbf{E} = \frac{\varphi \mathbf{E}_o}{1 - \alpha^{\text{ac}}} \mathbf{1} \quad \text{avec } \alpha^{\text{ac}} = \frac{3k^{\text{ac}}}{3k^{\text{ac}} + 4\mu^{\text{ac}}} \quad (14)$$

où  $\alpha^{\text{ac}}$  est la composante sur  $\mathbb{J}$  de  $\mathbb{S}^{\text{ac}}$ . Puis, (13) fournit la contrainte macroscopique sous la forme

$$\boldsymbol{\Sigma} = 3 \left( k^{\text{ac}} + \frac{4}{3} \mu^{\text{ac}} \right) E_o (1 - \varphi) \mathbf{1} \quad (15)$$

En éliminant  $E_o$  entre (14) et (15) et en comparant à (6), on obtient une relation entre les coefficients d'élasticité macroscopiques :

$$k^{\text{ac}} = \frac{4(1 - \varphi) \mu^{\text{ac}}}{3\varphi} \quad (16)$$

Étant donné un trièdre orthonormé direct  $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ , on considère ensuite un tenseur  $\mathbf{E}_o$  déviatorique de la forme  $\mathbf{E}_o = E_o(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3)$ . Le champ de solution de (10) est déterminé en s'inspirant de la solution classique de Love [4]. En procédant comme précédemment, on obtient une équation à vérifier par le module de cisaillement homogénéisé :

$$16(5 + \kappa)(3 - \varphi)\mathcal{M}^2 + [(9 + 77\varphi)\kappa + 114(3\varphi - 1)]\mathcal{M} + 57\kappa(2\varphi - 1) = 0 \quad (17)$$

où l'on a posé  $\mu^{\text{ac}} = \mathcal{M}\mu^s$  et  $\kappa = K'_t a / \mu^s = 2K_t a / \mu^s$ .

## 2. Second moment de la déformation et la discontinuité de déplacement dans le polycristal en élasticité linéaire

Toujours dans le contexte de l'élasticité linéaire, on s'intéresse successivement à la moyenne quadratique de la déformation déviatorique dans la phase solide et à celle du déplacement tangentiel dans les interfaces. A cet effet, on considère l'énergie élastique du v.e.r.  $\Omega$ , représentée par la densité  $\Psi$ . Elle comporte la contribution de la phase solide et celles des interfaces ( $\mathcal{I} = \bigcup \mathcal{I}_{ij}$ ) :

$$|\Omega| \Psi = \frac{1}{2} \int_{\Omega^s} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon} dV + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{I}} [\underline{\xi}] \cdot \mathbf{K} \cdot [\underline{\xi}] dS \quad (18)$$

Parallèlement, l'expression macroscopique de l'énergie élastique est :

$$\Psi = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{E} \quad (19)$$

Soit  $\boldsymbol{\varepsilon}_d$  la partie déviatorique de la déformation locale, à laquelle on associe le scalaire  $\varepsilon_d = \sqrt{\boldsymbol{\varepsilon}_d : \boldsymbol{\varepsilon}_d / 2}$ . On cherche en premier lieu à estimer la moyenne quadratique de  $\varepsilon_d$  sur la phase solide. A cet effet, on reprend l'idée de [5] qui consiste à dériver formellement l'expression (18) de l'énergie élastique par rapport au module de cisaillement  $\mu^s$ , à  $\mathbf{E}$  fixé. On obtient :

$$|\Omega| \frac{\partial \Psi}{\partial \mu^s} = \int_{\Omega^s} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mu^s} : \mathbf{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon} dV + \frac{1}{2} \int_{\Omega^s} \boldsymbol{\varepsilon} : 2\mathbb{K} : \boldsymbol{\varepsilon} dV + \int_{\mathcal{I}} \frac{\partial [\underline{\xi}]}{\partial \mu^s} \cdot \mathbf{K} \cdot [\underline{\xi}] dS \quad (20)$$

ce qui devient, en utilisant le comportement local du solide et des joints :

$$|\Omega| \frac{\partial \Psi}{\partial \mu^s} = \int_{\Omega^s} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mu^s} : \boldsymbol{\sigma} dV + 2 \int_{\Omega^s} \varepsilon_d^2 dV + \int_{\mathcal{I}} \frac{\partial [\underline{\xi}]}{\partial \mu^s} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}) dS \quad (21)$$

En appliquant le lemme de Hill (généralisé à des champs de déplacement présentant des discontinuités) au champ de contrainte  $\boldsymbol{\sigma}$  et au champ de « déformation »  $\partial \boldsymbol{\varepsilon} / \partial \mu^s$  associé à  $\partial \underline{\xi} / \partial \mu^s$ , on montre que la somme des premier et dernier termes est nulle. Il vient :

$$|\Omega| \frac{\partial \Psi}{\partial \mu^s} = 2|\Omega^s| \langle \varepsilon_d^2 \rangle_{\Omega^s} \quad \text{avec} \quad \langle \varepsilon_d^2 \rangle_{\Omega^s} = \frac{1}{|\Omega^s|} \int_{\Omega^s} \varepsilon_d^2 dV \quad (22)$$

On dérive maintenant l'expression macroscopique de l'énergie élastique volumique (19) par rapport à  $\mu^s$ , à  $\mathbf{E}$  fixé. En utilisant (6) et en reportant dans (22), il vient :

$$4(1 - \varphi) \langle \varepsilon_d^2 \rangle_{\Omega^s} = 9 \frac{\partial k^{\text{hom}}}{\partial \mu^s} E_m^2 + 4 \frac{\partial \mu^{\text{hom}}}{\partial \mu^s} E_d^2 = - \left( \frac{\partial 1/k^{\text{hom}}}{\partial \mu^s} \Sigma_m^2 + \frac{\partial 1/\mu^{\text{hom}}}{\partial \mu^s} \Sigma_d^2 \right) \quad (23)$$

On décompose à présent le saut de déplacement sur une interface de normale  $\underline{n}$  en une partie normale et une partie tangentielle :  $\llbracket \underline{\xi} \rrbracket = \llbracket \xi_n \rrbracket \underline{n} + \llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket$  avec  $\llbracket \xi_n \rrbracket = \llbracket \underline{\xi} \rrbracket \cdot \underline{n}$ . On cherche à estimer la moyenne quadratique de  $\llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket$  sur  $\mathcal{I}$ . On s'inspire du calcul de la déformation moyenne en dérivant l'expression (18) de l'énergie élastique par rapport à  $K_t$ , à  $\mathbf{E}$  fixé. En utilisant le comportement local, on obtient :

$$|\Omega| \frac{\partial \Psi}{\partial K_t} = \int_{\Omega^s} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial K_t} : \boldsymbol{\sigma} \, dV + \int_{\mathcal{I}} \frac{\partial \llbracket \underline{\xi} \rrbracket}{\partial K_t} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}) \, dS + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{I}} \llbracket \underline{\xi} \rrbracket \cdot (\mathbf{1} - \underline{n} \otimes \underline{n}) \cdot \llbracket \underline{\xi} \rrbracket \, dS \quad (24)$$

En appliquant le lemme de Hill (généralisé à des champs de déplacement présentant des discontinuités) au champ de contrainte  $\boldsymbol{\sigma}$  et au champ de « déformation »  $\partial \boldsymbol{\varepsilon} / \partial K_t$ , on montre que la somme des deux premiers termes est nulle. Il vient donc :

$$|\Omega| \frac{\partial \Psi}{\partial K_t} = \frac{1}{2} |\mathcal{I}| \langle \llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket^2 \rangle_{\mathcal{I}} \quad \text{avec} \quad \langle \llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket^2 \rangle_{\mathcal{I}} = \frac{1}{|\mathcal{I}|} \int_{\mathcal{I}} \llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket^2 \, dS \quad (25)$$

En dérivant à présent l'expression macroscopique (19) de l'énergie élastique par rapport à  $K_t$ , en utilisant le comportement macroscopique (6), on obtient l'analogue de (23) pour les discontinuités de déplacement :

$$\frac{|\mathcal{I}|}{|\Omega|} \langle \llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket^2 \rangle_{\mathcal{I}} = - \left( \frac{\partial 1/k^{\text{hom}}}{\partial K_t} \Sigma_m^2 + \frac{\partial 1/\mu^{\text{hom}}}{\partial K_t} \Sigma_d^2 \right) \quad (26)$$

### 3. Critère de rupture

On s'intéresse pour finir à la résistance d'un polycristal. La rupture des grains solides est caractérisée par un critère de von Mises de la forme  $\sigma_d \leq L_s$  et celle des joints par un critère portant sur la composante tangentielle  $\underline{T}_t$  du vecteur contrainte  $\underline{T}$  :  $|\underline{T}_t| \leq L_j$ . On pose  $\beta = L_j/L_s$ . Pour simplifier la discussion, on se place désormais dans le cas non poreux ( $\varphi = 0$ ). Dans la perspective de l'utilisation de (26), le paramètre géométrique  $|\mathcal{I}|/|\Omega|$  doit être estimé. Dans le cadre d'une modélisation sphérique de la forme des grains, supposés de même taille (rayon  $a$ ), ce rapport sera pris égal à  $3/(2a)$ .

On introduit un comportement élastique non linéaire fictif saturant asymptotiquement (aux grandes déformations) le critère de rupture du solide et des joints [6]. Il suffit que les modules de cisaillement sécants  $\mu^s(\varepsilon_d)$  et  $K_t(\llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket)$  satisfassent :

$$\mu^s(\varepsilon_d) \sim \frac{L_s}{2\varepsilon_d} ; \quad K_t(\llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket) \sim \frac{L_j}{|\llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket|} \quad (27)$$

lorsque  $\varepsilon_d$ ,  $|\llbracket \underline{\xi}_t \rrbracket| \rightarrow \infty$ . Aux grandes déformations, (27) indique que  $\mu^s$ ,  $K_t \rightarrow 0$ , de sorte que tout se passe comme si les grains et les joints étaient incompressibles ( $k^s$ ,  $K_n \rightarrow \infty$ ). Puisque  $\varphi = 0$ , cela entraîne que  $k^{\text{hom}} \rightarrow \infty$ . Le comportement effectif du v.e.r. est caractérisé par un module sécant  $\mu^{\text{hom}}(\mathbf{E})$  qui peut être estimé à l'aide de (17) par la méthode sécante modifiée [7] dont on rappelle qu'elle est équivalente à l'approche variationnelle de Ponte Castaneda [8]. A cet effet, on choisit les moyennes quadratiques de la déformation et de la discontinuité de déplacement introduites à la Section 2 (voir (22) et (25)) comme grandeurs de référence. On considère ensuite des trajets de chargement radiaux dans l'espace des déformations macroscopiques et l'on détermine les états de contrainte macroscopiques  $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{C}^{\text{hom}}(\mathbf{E}) : \mathbf{E}$  atteints asymptotiquement sur ces derniers : ils constituent la frontière  $\partial G^{\text{hom}}$  du domaine des contraintes admissibles :

$$\lim_{|\mathbf{E}| \rightarrow \infty} \boldsymbol{\Sigma} \in \partial G^{\text{hom}} \quad (28)$$

Mentionnons que l'estimation de  $G^{\text{hom}}$  obtenue par ce procédé (basé sur la méthode sécante modifiée) possède un statut de borne [9]. La rupture du v.e.r. implique a priori, séparément ou simultanément, une rupture intragranulaire ou un glissement aux joints entre grains. Le mécanisme intragranulaire est activé lorsque  $\sigma_d = 2\mu^s \varepsilon_d \rightarrow L_s$ . Compte tenu de (23), cette condition est associée à l'échelle macroscopique à un seuil défini sur  $\Sigma_d$  par :

$$\Sigma_d^2 = L_s^2 \frac{\mathcal{M}^2(\kappa)}{\partial \mu^{\text{hom}} / \partial \mu^s} \quad (29)$$

Par ailleurs, le mécanisme de joint est activé si  $|T_t| = K_t |\llbracket \xi_t \rrbracket| \rightarrow L_j$ . Compte tenu de (26), le critère de glissement de joint fait intervenir une autre valeur critique de  $\Sigma_d$  :

$$\Sigma_d^2 = \frac{6a}{\kappa^2} L_j^2 \frac{\mathcal{M}^2(\kappa)}{\partial \mu^{\text{hom}} / \partial K_t} \quad (30)$$

Dans le cadre du schéma autocohérent, on utilise l'estimation  $\mu^{\text{ac}} = \mu^s \mathcal{M}(\kappa)$  de  $\mu^{\text{hom}}$ , où  $\mathcal{M}(\kappa)$  est la solution de (17). Il vient alors :

$$\frac{\partial \mu^{\text{hom}}}{\partial \mu^s} = \mathcal{M}(\kappa) - \kappa \mathcal{M}'(\kappa) ; \quad \frac{\partial \mu^{\text{hom}}}{\partial K_t} = 2a \mathcal{M}'(\kappa) \quad (31)$$

Lorsque le mécanisme intragranulaire est activé seul, la condition  $\mu^s \rightarrow 0$  entraîne que  $\kappa \rightarrow \infty$ . À l'inverse, lorsque le mécanisme de joint est activé seul, on a  $K_t \rightarrow 0$  et  $\kappa \rightarrow 0$ . En effectuant les passages à la limite correspondants dans (29) et (30), il est facile de voir que la rupture est de nature exclusivement intragranulaire si  $\beta \geq \sqrt{2/5}$ . Le critère macroscopique est alors identique à celui du solide ( $\Sigma_d \leq L_s$ ). Si  $\beta < \sqrt{2/5}$ , on montre que la rupture fait intervenir simultanément les deux mécanismes. On a alors  $\mu^s \rightarrow 0$  et  $K_t \rightarrow 0$ . La valeur asymptotique de  $\kappa$  est la solution de (29) et (30). Le critère macroscopique se met sous la forme  $\Sigma_d^2 \leq L_s^2 f(\beta)$ . Un développement limité au troisième ordre en  $\beta$  au voisinage de  $\beta = 0$  permet d'approcher la fonction  $f(\beta)$  avec une erreur inférieure à 1% :

$$f(\beta) \approx \frac{19}{40} + \frac{21}{200} \sqrt{190} \beta - \frac{273}{400} \beta^2 - \frac{63}{2000} \sqrt{190} \beta^3 \quad (32)$$

## Références

- [1] A. Zaoui, Structural morphology and constitutive behavior of microheterogeneous materials, in: P. Suquet (Ed.), Continuum Micromechanics, in: CISM Courses and Lectures, vol. 377, Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [2] Z. Hashin, The spherical inclusion with imperfect interface, J. Appl. Mech. 58 (1991) 444–449.
- [3] Z. Zhong, S.A. Meguid, On the elastic field of a spherical inhomogeneity with an imperfectly bonded interface, J. Elasticity 46 (1997) 91–113.
- [4] E. Hervé, A. Zaoui,  $n$ -Layered inclusion-based micromechanical modelling, Internat. J. Engr. Sci. 31 (1) (1993) 1–10.
- [5] W. Kreher, Residual stresses and stored elastic energy of composites and polycrystals, J. Mech. Phys. Solids 38 (1990) 115–128.
- [6] L. Dormieux, D. Kondo, F.-J. Ulm, Microporomechanics, Wiley, New York, 2006.
- [7] P. Suquet, Effective behavior of non linear composites, in: P. Suquet (Ed.), Continuum Micromechanics, in: CISM Courses and Lectures, vol. 377, Springer-Verlag, Berlin/New York, 1997.
- [8] P. Ponte-Castaneda, The effective mechanical properties of non linear isotropic composites, J. Mech. Phys. Solids 39 (1991) 45–71.
- [9] M.V. Nebozhyn, P. Gilormini, P. Ponte-Castaneda, Variational self-consistent estimates for cubic viscoplastic polycrystals: the effect of grain anisotropy and shape, J. Mech. Phys. Solids 49 (2001) 313–340.