

# Modélisation numérique de l'effet de taille dans les nanocomposites: approche par inclusion équivalente

K. Amekoe<sup>1</sup>, L.Cauvin<sup>1</sup>, D. Brancherie<sup>1</sup>, D. Kondo<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Université de Technologie de Compiègne Roberval (Mechanics, energy and electricity),

Centre de recherche Royallieu, CS 60319, 60203 Compiègne Cedex, France, komla.amekoe@utc.fr; ludovic.cauvin@utc.fr; delphine.brancherie@utc.fr

<sup>2</sup> Institut Jean Le Rond d'Alembert, CNRS UMR7190, Sorbonne Université, 4 place Jussieu, 75005 Paris, France,

Djimeddo.Kondo@sorbonne-universite.fr

---

**Résumé** — Différentes approches basées sur la mécanique des milieux continus permettent de rendre compte des effets de taille dans les matériaux nanocomposites. Dans cette contribution, nous comparons les prédictions de simulations numériques intégrant une inclusion équivalente à celles obtenues par une modélisation complète XFEM « matrice/inclusion/interface cohérente » ainsi qu'à une approche analytique. Les trois approches d'inclusion équivalente considérées sont celles proposées par Duan et *al.* [7], Gu et *al.* [9], et Dormieux et *al.* [5].

**Mots clés** — nanocomposite, inclusion équivalente, homogénéisation, élasticité surfacique, effet de taille, méthode XFEM.

---

## 1 Introduction

En raison de leurs bonnes propriétés multiphysiques (mécanique, thermique, électrique, etc.), généralement attribuées à la taille des nanorenforts, les nanocomposites trouvent leurs applications dans de nombreux domaines industriels (aéronautique, automobile, électronique, etc.). Expérimentalement, cet effet de taille a été observé sur leurs propriétés mécaniques [2]. Pour rendre compte de leur comportement, des approches tant analytiques [3, 4, 6, 13] que numériques [1, 12, 19], basées sur la représentation d'une interface cohérente entre matrice et inclusion, ont été développées. Dans ces approches, la continuité de déplacement à l'interface est assurée tandis qu'un saut de contrainte régi par l'équation de Young-Laplace généralisée [17] est autorisé. En vue d'utiliser des approches d'homogénéisation classiques conçues pour des matériaux composites [8, 11, 16] ne présentant pas d'effet de taille, plusieurs auteurs [5, 7, 9] ont recours à la notion d'inclusion équivalente. Les propriétés de cette inclusion équivalente rendent compte du comportement de l'ensemble «inclusion / interface cohérente», ainsi que de la forme (sphéroïde de révolution, cylindre ou sphère) et de la taille des inclusions.

Dans cette étude, nous proposons de comparer, par des développements numériques s'appuyant sur la méthode XFEM des approches à inclusion équivalente à des résultats analytiques et numériques issus de la littérature. Proposé par Brisard et *al.* [3, 4], le modèle analytique de référence, étend les bornes de Hashin-Shtrikman au cas des nanocomposites à interface cohérente. Les travaux numériques de référence [1, 19] utilisent la méthode XFEM pour prendre en compte une interface cohérente dans une stratégie de modélisation en champ complet.

Dans la première partie de ce résumé étendu, nous rappelons la formulation XFEM pour un matériau biphasé à interface cohérente. La seconde partie présente les hypothèses associées à la détermination des propriétés d'une inclusion équivalente. La troisième section porte sur les prédictions et la comparaison des différentes approches considérées en termes de module de compressibilité effectif. Les résultats en termes de comparaison des champs mécaniques locaux dans le VER ne sont pas inclus dans ce résumé et seront présentés lors de la communication orale.

## 2 Homogénéisation en champ complet d'un matériau biphasé à interface cohérente par la méthode XFEM/Level Set

### 2.1 Formulation forte et faible du problème mécanique

Considérons un corps continu décrit par un domaine borné  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $d = 2$  ou  $3$ ), délimité par sa frontière  $\partial\Omega$ . Ce domaine est constitué de deux phases distinctes : la matrice  $\Omega^{(2)}$  et l'inclusion  $\Omega^{(1)}$  séparées par une interface cohérente notée  $\Gamma$  (Figure 1). La normale unitaire à cette interface, orientée de  $\Omega^{(1)}$  vers  $\Omega^{(2)}$ , est notée  $\mathbf{n}$ .

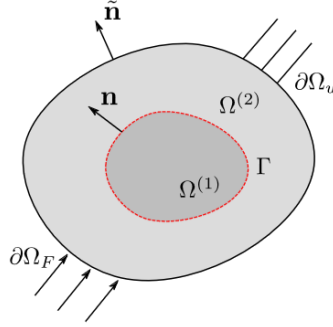


FIGURE 1: Matériau biphasé à interface cohérente

Dans chaque sous-domaine  $\Omega^{(i)}$  ( $i = 1, 2$ ), les équations d'équilibre s'écrivent :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(i)} + \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega^{(i)}, \quad i = 1, 2 \quad (1)$$

où  $\boldsymbol{\sigma}^{(i)}$  désigne le tenseur des contraintes de Cauchy et  $\mathbf{b}$  le vecteur des forces volumiques. Des conditions de Dirichlet et de Neumann sont appliquées à la frontière  $\partial\Omega$  :

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{sur } \partial\Omega_u, \quad \boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\mathbf{n}} = \bar{\mathbf{F}} \quad \text{sur } \partial\Omega_F, \quad (2)$$

avec  $\tilde{\mathbf{n}}$  la normale unitaire extérieure à  $\partial\Omega$ .

L'équilibre de l'interface est, quant à lui, régi par l'équation de Young-Laplace généralisée [17] :

$$\nabla_s \cdot \boldsymbol{\sigma}_s + \llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Gamma, \quad (3)$$

où  $\boldsymbol{\sigma}_s$  représente le tenseur des contraintes surfaciques sur  $\Gamma$ , et où  $\nabla_s(\cdot)$  désigne l'opérateur de divergence surfacique défini par :

$$\nabla_s(\cdot) = \nabla(\cdot) : \mathbf{P}, \quad \mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}. \quad (4)$$

Sur l'interface  $\Gamma$ , le déplacement est supposé continu  $\llbracket \mathbf{u} \rrbracket = 0$  et le champ de déformations satisfaisant la relation d'Hadamard :

$$\llbracket \boldsymbol{\varepsilon} \rrbracket = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{a}, \quad \text{sur } \Gamma \quad \mathbf{a} \in \mathbb{R}^d, \quad (5)$$

Les comportements supposés élastiques de l'inclusion 1, de la matrice 2 et de l'interface sont régis par :

$$\boldsymbol{\sigma}^{(i)} = \mathbb{C}^{(i)} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(i)} \quad \text{dans } \Omega^{(i)}, \quad i = 1, 2; \quad \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\varepsilon}_s \quad \text{sur } \Gamma, \quad (6)$$

$\mathbb{C}^{(i)}$  et  $\mathbb{C}_s$  représentent respectivement les tenseurs d'élasticité de la phase  $i$  et de l'interface  $\Gamma$ . En considérant des comportements isotropes et linéaires, les équations (6) s'écrivent :

$$\boldsymbol{\sigma}^{(i)} = 2\mu_i \boldsymbol{\varepsilon}^{(i)} + \lambda_i \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^{(i)}) \mathbf{I}, \quad \boldsymbol{\sigma}_s = 2\mu_s \boldsymbol{\varepsilon}_s + \lambda_s \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_s) \mathbf{I}, \quad (7)$$

où  $\lambda_i$ ,  $\mu_i$ ,  $\lambda_s$  et  $\mu_s$  sont les constantes de Lamé respectivement volumiques et surfaciques.

En combinant les équations d'équilibre, les conditions aux limites et les lois de comportement, on obtient la formulation faible suivante :

$$\forall \delta \mathbf{u} \quad \int_{\Omega \setminus \Gamma} \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{P} \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) \mathbf{P} : \mathbb{C}_s : \mathbf{P} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \mathbf{P} \, d\Gamma = \int_{\Omega \setminus \Gamma} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_F} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{F} \, d\Gamma. \quad (8)$$

## 2.2 Discrétisation du problème par la méthode XFEM/Level Set

La méthode XFEM/Level Set permet de modéliser des discontinuités à travers une interface sans la mailler explicitement. Pour cela, elle s'appuie sur une approximation enrichie des champs de déplacement, telle que proposée par Moës *et al.* [14, 15] :

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n N_i(\mathbf{x})\mathbf{u}_i + \sum_{j=1}^m N_j(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\mathbf{a}_j, \quad \psi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n |\phi_i|N_i(\mathbf{x}) - \left| \sum_{i=1}^n \phi_i N_i(\mathbf{x}) \right|. \quad (9)$$

où  $\mathbf{u}_i$  et  $\mathbf{a}_j$  notent les degrés de liberté, respectivement, standards et enrichis. Les  $\phi_i$  correspondent aux valeurs nodales de la distance signée à l'interface notée  $\phi(\mathbf{x})$ .

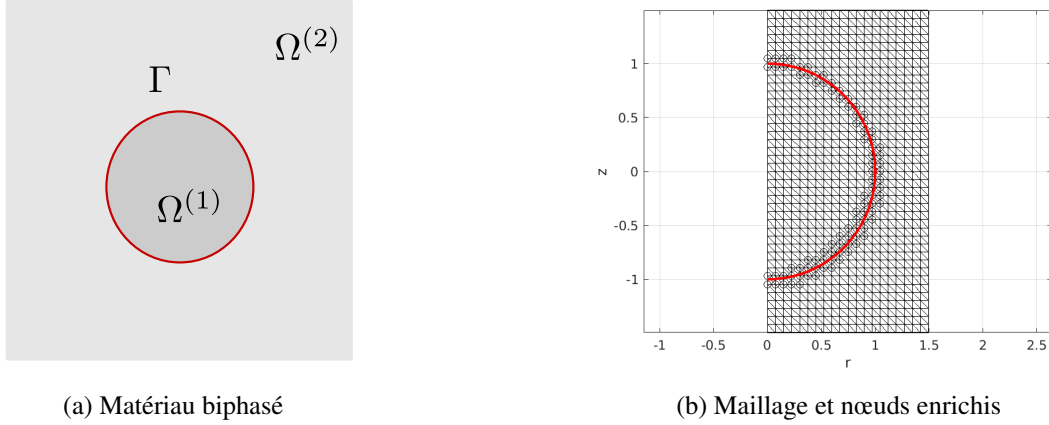


FIGURE 2: Exemples de figures illustrant la géométrie et le maillage XFEM du matériau.

Pour une inclusion sphérique (Figure 2a),  $\phi(\mathbf{x})$  s'écrit :

$$\phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_c\| - r_c, \quad \mathbf{x} \in \Omega^{(1)} \cup \Omega^{(2)}, \quad (10)$$

où  $\mathbf{x}_c$  et  $r_c$  désignent respectivement le centre et le rayon de l'inclusion. L'interface correspond à la ligne de niveau zéro de la fonction  $\phi(\mathbf{x})$ .

L'interface n'étant pas discrétisée explicitement, le tenseur de déformation surfacique  $\varepsilon_s$  est obtenu par projection de la déformation (volumique) de la matrice ou de l'inclusion sur l'interface  $\Gamma$  via le projecteur  $\mathbf{P}$ . La discrétisation du tenseur de déformation surfacique  $\varepsilon_s$  est ainsi évaluée à partir de la forme discrète  $\phi^h$  de la fonction  $\phi$  donnée par :

$$\phi^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n N_i(\mathbf{x})\phi_i, \quad \text{avec } \phi_i = \phi(\mathbf{x}_i) \text{ et } \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \frac{\nabla\phi^h(\mathbf{x})}{\|\nabla\phi^h(\mathbf{x})\|}. \quad (11)$$

Le système discret associé à la formulation faible (8) s'écrit :

$$(\mathbf{K} + \mathbf{K}_s)\mathbf{U} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{b} \gamma d\Omega + \int_{\partial\Omega_F} \mathbf{N}^T \mathbf{F} \gamma d\Gamma, \quad \mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbb{C} \mathbf{B} \gamma d\Omega, \quad \text{avec } \mathbf{K}_s = \int_{\Gamma} \mathbf{B}^T \mathbf{M}^T \mathbb{C}_s \mathbf{M} \mathbf{B} \gamma d\Gamma, \quad (12)$$

où  $\mathbf{U} = [\mathbf{u}, \mathbf{a}]^T$  désigne le vecteur des inconnues nodales,  $\mathbf{M}$  tel que  $\varepsilon_s = \mathbf{M}\varepsilon$ ,  $\gamma = 1$  pour un problème en déformation plane et  $\gamma = 2\pi r$  pour un problème axisymétrique.

La Figure 2b illustre le maillage du VER d'un matériau à inclusion sphérique pour un cas axisymétrique.

### 3 Mise en œuvre de l'inclusion équivalente

Nous présentons trois approches issues de la littérature pour la détermination du comportement d'une inclusion équivalente (inclusion sphérique + interface cohérente) (Figure 3) : Duan et al. [7], Gu et al. [9] et Dormieux et al. [5].

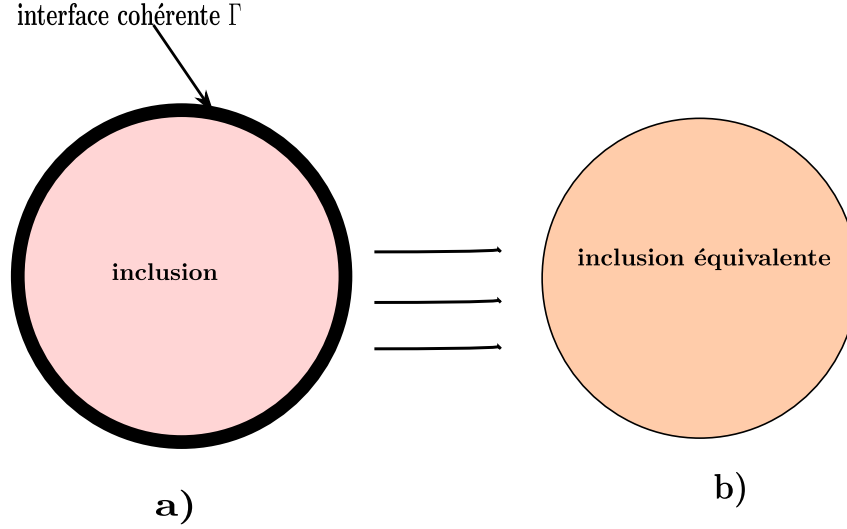


FIGURE 3: a) Inclusion avec interface cohérente, b) inclusion équivalente

Duan et al.[7] et Gu et al. [9] déterminent les propriétés élastiques de l'inclusion équivalente en s'appuyant sur un principe d'équivalence d'énergie pour une inclusion immergée dans un milieu infini (schéma dilué [8]). Dormieux et al. [5], quant à eux, proposent une formulation reposant sur l'équation de Lippmann-Schwinger pour déterminer les propriétés élastiques de l'inclusion équivalente.

Pour ces trois approches, dans le cas d'une inclusion sphérique, le module de compressibilité de l'inclusion équivalente est donné par :

$$\kappa_{eq} = \kappa_1 + \frac{4\kappa_s}{3R}, \quad \kappa_s = \lambda_s + \mu_s. \quad (13)$$

où  $\kappa_1$  note le module de compressibilité de l'inclusion et  $R$  son rayon.

L'évolution du module de compressibilité équivalent en fonction du rayon  $R$  est présentée dans la Figure 4a.

Toutefois, reposant sur des hypothèses différentes, les trois approches ne fournissent pas le même module de cisaillement équivalent :

— Duan et al. 2007 [7]

$$\mu_{eq}^{Duan} = \mu_2 \frac{P}{2N + 8(7 - 10\nu_1)(3\kappa_r + \mu_r)}, \quad (14)$$

où  $P$ ,  $N$ ,  $\kappa_r$ ,  $\mu_r$  sont des fonctions de  $\mu_1$ ,  $\mu_2$ ,  $\nu_1$ ,  $\mu_s$  et  $\lambda_s$  ( $\mu_i$ ,  $\nu_i$  notent, comme classiquement, le module de cisaillement et le coefficient de Poisson de la phase  $i = 1, 2$ ).

— Gu et al. 2013 [9]

$$\mu_{eq}^{Gu} = \mu_1 \frac{-\frac{4\mu_s f_4}{R} - \frac{2(k_s - \mu_s) f_5}{R} + \omega}{-\frac{4\mu_s g_4}{R} - \frac{2(k_s - \mu_s) g_5}{R} + \omega}, \quad (15)$$

où les fonctions  $f_4$ ,  $f_5$ ,  $g_4$ ,  $g_5$  et  $\omega$  dépendent de  $\kappa_1$ ,  $\mu_1$  et  $\mu_2$ .

— Dormieux et al. 2016 [5]

$$\mu_{eq}^{Dormieux} = \mu_1 + \frac{6\mu_s + \kappa_s}{5R}. \quad (16)$$

Considérons les propriétés de l'inclusion et de l'interface fournies dans le tableau 1, la Figure 4b illustre l'évolution du module de cisaillement équivalent pour les trois approches considérées en fonction du rayon de l'inclusion ( $R$ ) et à fraction volumique constante.

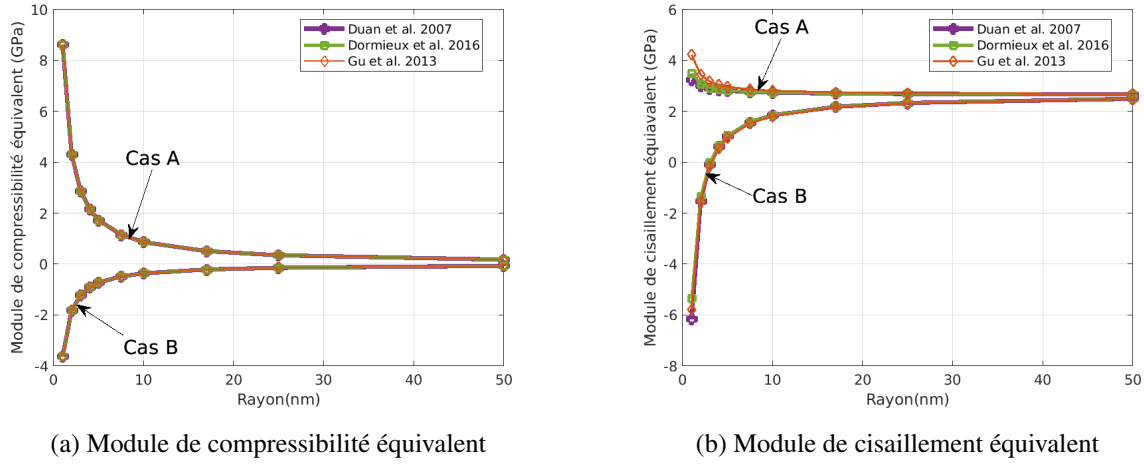


FIGURE 4: Modules équivalents : (a) module de compressibilité, (b) module de cisaillement, en fonction de  $R$ .

On observe sur la figure 4b que les trois approches, bien que fournissant des valeurs différentes du module de cisaillement, rendent toutes compte d'un même effet de taille.

#### 4 Comparaison des approches par inclusion équivalente

Dans la suite, nous considérons un problème axisymétrique, correspondant à une inclusion sphérique de rayon  $R$  plongée dans une matrice élastique. Nous considérons deux types de modèles (Figure 5) :

- un VER constitué d'une inclusion équivalente de module d'élasticité  $\mathbb{C}_{eq}$  et d'une matrice de module d'élasticité  $\mathbb{C}_2$  séparées par une interface parfaite ;
- un VER constitué d'une inclusion de module d'élasticité  $\mathbb{C}_1$  et d'une matrice de module d'élasticité  $\mathbb{C}_2$  séparées, dans ce cas, par une interface imparfaite de propriétés élastiques  $\lambda_s$  et  $\mu_s$ . Cette dernière, introduisant moins d'hypothèses, sera considérée comme référence.

L'objectif est d'évaluer l'effet de taille des inclusions. L'étude est réalisée pour des rayons  $R$  compris entre 1 et 50 nm, la fraction volumique  $f$  est maintenue constante à  $f = 0.2$ . Les résultats sont également comparés aux estimations analytiques fournies par Brisard *et al.* [3, 4].

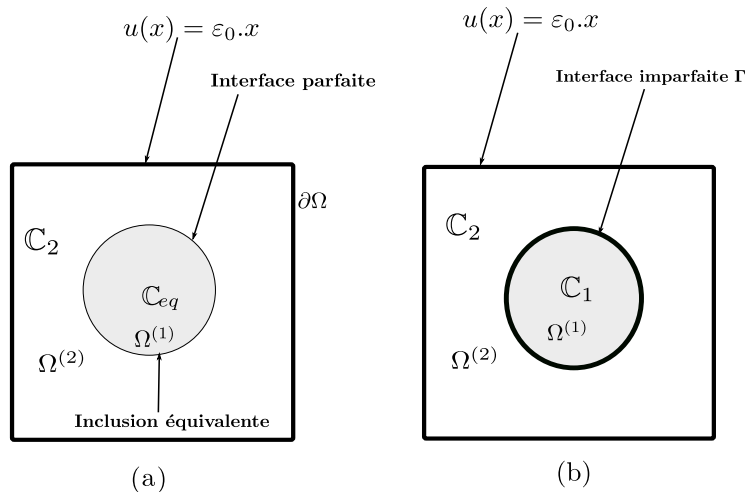


FIGURE 5: a) Matériau à inclusion équivalente, b) Matériau à interface cohérente.

Pour un matériau à inclusion sphérique et pour les propriétés données dans le tableau 1, les résultats en termes de modules de compressibilité et de cisaillement effectifs sont représentés dans les Figures (6, 7).

Pour faciliter la lecture, nous introduisons les notations suivantes :

- XFEM-NIC : Nanocomposite "matrice/Inclusion/interface Cohérente",
- XFEM-NIE : Nanocomposite "matrice/Inclusion Équivalente",
- XFEM-NIE-Dormieux, XFEM-NIE-Duan et XFEM-NIE-Gu : modèles XFEM-NIE associés respectivement aux formulations de [5, 7, 9].

Les conditions de simulation, les paramètres matériaux de la matrice et de l'inclusion ainsi que les propriétés surfaciques issues de Miller et Shenoy [18] sont résumés dans le tableau 1.

TABLE 1: Propriétés des matériaux, de l'interface et caractéristiques du modèle éléments finis.

Matériau	Paramètres NIC	Paramètres NIE
Matrice	$\mathbb{C}_2(E_2 = 70 \text{ GPa}, \nu_2 = 0.32)$	$\mathbb{C}_2(E_2 = 70 \text{ GPa}, \nu_2 = 0.32)$
Inclusion	$\mathbb{C}_1(E_1, \beta = E_1/E_2 = 0.1, \nu_1 = 0.32)$	$\mathbb{C}_{\text{eq}}(E_1, \beta = E_1/E_2 = 0.1, \nu_1 = 0.32, \lambda_s, \mu_s, R)$
Interface	$\lambda_s, \mu_s, R$	$\lambda_s = \mu_s = 0$
chargements : $\varepsilon_{rr} = \varepsilon_{zz} = 0.5$ (hydrostatique), $\varepsilon_{rr} = -\varepsilon_{zz} = 0.5$ (déviatorique), $f = 0.2$		

Propriétés surfaciques (Miller et Shenoy [18])

Cas	$\lambda_s$ (N/m)	$\mu_s$ (N/m)
A	6.842	-0.375
B	3.489	-6.218

Maillage et domaine

Maillage	$40 \times 40$ nœuds
Élément	Triangulaire à 3 nœuds

Les modules de compressibilité effectifs (Figure 6) obtenus par les approches XFEM-NIE coïncident entre eux et sont identiques à celui fourni par l'approche XFEM-NIC. En revanche, ces estimations du module de compressibilité effectif restent supérieures à celle issue de l'approche analytique proposée par Brisard et al. [3].

De même, les modules de cisaillement effectifs (Figure 7) obtenus par les différentes approches XFEM-NIE sont très proches les uns des autres et pratiquement confondus avec ceux obtenus par l'approche XFEM-NIC. On observe toutefois que ces estimations numériques demeurent légèrement supérieures aux modules de cisaillement effectifs prédits par les approches analytiques correspondantes [5, 7, 9].

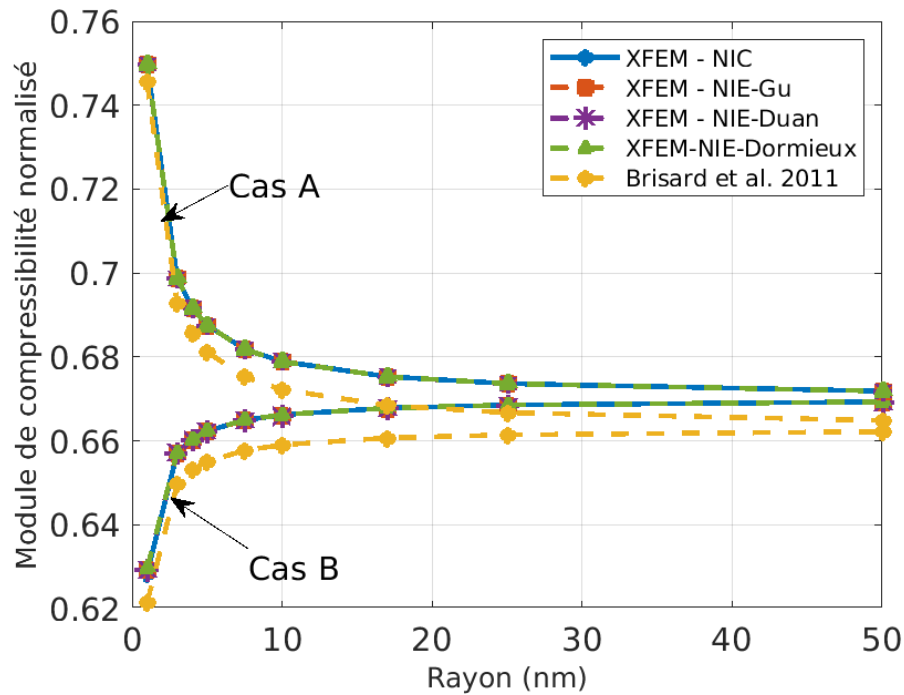


FIGURE 6: Module de compressibilité effectif normalisé par  $\kappa_2$  en fonction de  $R$ .

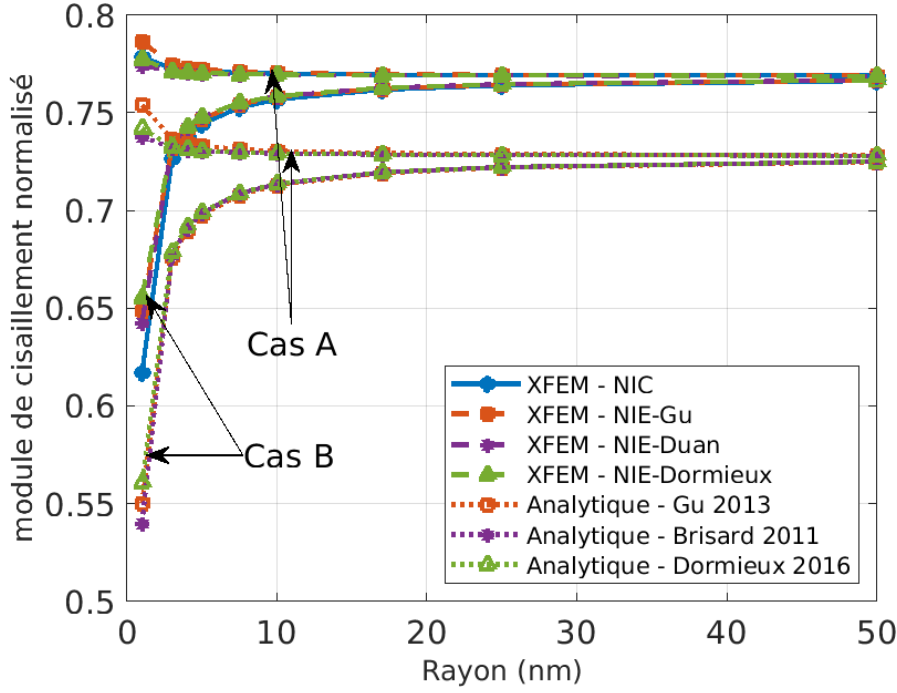


FIGURE 7: Module de cisaillement effectif normalisé par  $\mu_2$  en fonction de  $R$ .

*Remarque 1* : Le module de compressibilité effectif obtenu en introduisant les propriétés d'inclusion équivalente dans un schéma de Mori-Tanaka classique est le même que celui fourni par l'approche analytique de Brisard *et al.* [3, 4] considérant explicitement l'interface cohérente dans l'approche d'homogénéisation. Pour rappel, ce module effectif est donné par :

$$\kappa_{\text{eff}} = \kappa_2 + f(\kappa_{\text{eq}} - \kappa_2) \frac{3\kappa_2 + 4\mu_2}{3\kappa_2 + 4\mu_2 + 3(1-f)(\kappa_{\text{eq}} - \kappa_2)}. \quad (17)$$

*Remarque 2* : En utilisant les paramètres donnés dans le Tableau 1, nous avons comparé le module de cisaillement effectif obtenu par l'introduction des propriétés d'inclusion équivalente proposées par Duan *et al.* [7] dans un schéma de Mori-Tanaka à celui fourni par l'approche analytique de Brisard *et al.* [4].

## 5 Conclusion

Dans ce travail, nous avons comparé les modules équivalents donnés par trois approches à inclusion équivalente différentes. Nous avons également comparé les modules de compressibilité et de cisaillement effectifs obtenus à partir de ces approches (dénommés XFEM-NIE dans le papier) et les avons confrontés aux résultats fournis par une modélisation incluant au sein du VER l'interface cohérente (XFEM-NIC dans le papier). L'ensemble des modules effectifs obtenus sont en bon accord. On note, en particulier, que les trois approches à inclusion équivalente XFEM-NIE, bien que fondées sur des hypothèses différentes, conduisent à des résultats similaires pour le module de compressibilité effectif et à des estimations très proches pour le module de cisaillement. Par ailleurs, ces modules effectifs restent supérieurs à ceux prédits par les approches analytiques correspondantes. Les résultats issus des approches XFEM-NIE coïncident avec celui du modèle complet XFEM-NIC pour le module de compressibilité effectif, et s'en rapprochent pour le module cisaillement effectif. Les études relatives à l'analyse des champs locaux sont en cours et seront présentées lors de la communication orale.

## Références

- [1] D. P. Bach, D. Brancherie, L. Cauvin, *Size effect in nanocomposites : XFEM/level set approach and interface element approach*, Finite Elements in Analysis and Design 165 (2019) 41–51.

- [2] A. S. Blivi, F. Benhui, J. Bai, D. Kondo, F. Bédoui, *Experimental evidence of size effect in nano-reinforced polymers : Case of silica reinforced PMMA*, Polymer Testing, vol. 56, pp. 337–343, 2016.
- [3] S. Brisard, L. Dormieux, D. Kondo, *Hashin–Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects*, Computational Materials Science 50 (2010) 403–410.
- [4] S. Brisard, L. Dormieux, D. Kondo, *Hashin–Shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects*, Computational Materials Science 48 (2010) 8759–8768.
- [5] L. Dormieux, E. Lemarchand, S. Brisard, *Equivalent inclusion approach for micromechanics estimates of nanocomposite elastic properties*, Journal of Nanomechanics and Micromechanics, vol. 6, no. 2, 2016, 04016001. DOI : 10.1061/(ASCE)NM.2153-5477.0000104.
- [6] H. L. Duan, J. Wang, Z. P. Huang, B. L. Karim, *Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress*, J. Mech. Phys. Solids 53 (7) (2005) 1574–1596.
- [7] H. L. Duan, X. Yi, Z. P. Huang, J. Wang, *A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects. Part I : Theoretical framework*, Mechanics of Materials, vol. 39, no. 1, 2007, pp. 81–93. DOI :10.1016/j.mechmat.2006.02.009.
- [8] J. D. Eshelby, *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems*, Proc. R. Soc. Lond. A 241 (1957) 376–396.
- [9] S.-T. Gu, J.-T. Liu, Q.-C. He, *Size-dependent effective elastic moduli of particulate composites with interfacial displacement and traction discontinuities*.
- [10] M. Gurtin, A. Murdoch, *Continuum theory of elastic material surfaces*, Arch. Rational Mech. Anal. 57 (4) (1975) 291–323.
- [11] Z. Hashin, S. Shtrikman, *On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity*, J. Mech. Phys. Solids 10 (4) (1962) 335–342.
- [12] A. Javili, P. Steinmann, J. Mosler, *Micro-to-macro transition accounting for general imperfect interfaces*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **317**, 274–317, 2017.
- [13] H. Le Quang, Q. C. He, *Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces*, Mech. Mater. 40 (10) (2008) 865–884.
- [14] N. Moës, J. Dolbow, T. Belytschko, *A finite element method for crack growth without remeshing*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 46, no. 1, 1999, pp. 131–156.
- [15] N. Moës, M. Cloirec, P. Cartraud, J.-F. Remacle, *A computational approach to handle complex microstructure geometries*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 192 (2003) 3163–3177.
- [16] T. Mori, K. Tanaka, *Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions*, Acta Metallurgica (1973).
- [17] Yu. Z. Povstenko, *Theoretical investigation of phenomena caused by heterogeneous surface tension in solids*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 41, 1993, pp. 1499–1514.
- [18] V. B. Shenoy, *Atomistic calculations of elastic properties of metallic FCC crystal surfaces*, Physical Review B, vol. 71, 2005, 094104. DOI :10.1103/PhysRevB.71.094104.
- [19] J. Yvonnet, H. Le Quang, Q.-C. He, *An XFEM/level set approach to modelling surface/interface effects and to computing the size-dependent effective properties of nanocomposites*, Computational Mechanics, vol. 42, 2008, pp. 119–131. DOI :10.1007/s00466-008-0241-y.