



HAL
open science

Modélisation stochastique continue et identification inverse d'interphases aléatoires à partir de simulations atomistiques

Think-Tien Le, Johann Guilleminot, Christian Soize

► **To cite this version:**

Think-Tien Le, Johann Guilleminot, Christian Soize. Modélisation stochastique continue et identification inverse d'interphases aléatoires à partir de simulations atomistiques. 22ème Congrès Français de Mécanique 2015 (CFM 2015), Aug 2015, Lyon, France. pp.1-2. hal-01192569

HAL Id: hal-01192569

<https://hal.science/hal-01192569>

Submitted on 3 Sep 2015

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.

Modélisation stochastique continue et identification inverse d'interphases aléatoires à partir de simulations atomistiques

T.-T. LE * , J. GUILLEMINOT, C. SOIZE

Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME
UMR 8208 CNRS, 5 bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée, France
Email: Thinh-Tien.Le@univ-paris-est.fr

Résumé

Dans ce travail, nous nous intéressons à la modélisation stochastique continue d'une interphase aléatoire dans une matrice polymère renforcée par une ou plusieurs inclusions nanoscopiques, ainsi qu'à l'identification statistique inverse du modèle sur la base de simulations atomistiques [1]. La présence de cette zone de matrice perturbée autour des hétérogénéités a été mise en évidence par des résultats expérimentaux [2, 3] et numériques [4, 5, 6]. Des simulations par dynamique moléculaire sont tout d'abord conduites sur un nanocomposite modèle. Ces simulations permettent d'une part d'extraire certaines caractéristiques conformationnelles des chaînes polymères, et d'autre part d'estimer (au travers d'essais virtuels, voir la figure 1) des réalisations des propriétés élastiques apparentes de plusieurs configurations initiales. On montre ainsi

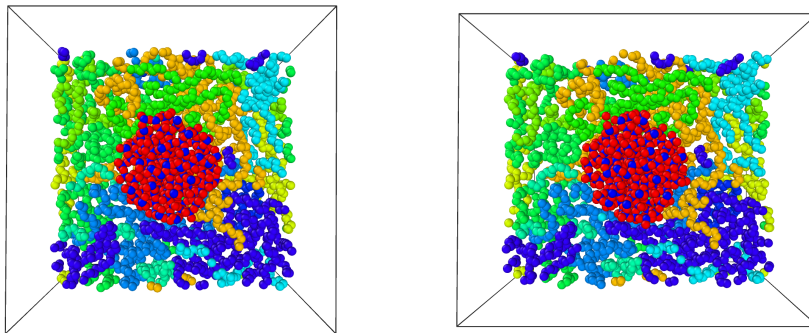


Figure 1: Essai virtuel en dynamique moléculaire pour la détermination des propriétés apparentes du nanocomposite: état initial (gauche) et état déformé à 10% (droite) lors d'un essai de traction.

que le champ des rigidités dans l'interphase peut être modélisé par un champ aléatoire

localement isotrope transverse en coordonnées sphériques. Le modèle informationnel de champ aléatoire développé dans [7] est alors mis en œuvre afin de représenter l'élasticité dans l'interphase. Les paramètres du modèle probabiliste (essentiellement, un paramètre contrôlant le niveau des fluctuations statistiques et les longueurs de corrélation radiale et angulaires) sont alors identifiés par le principe du maximum de vraisemblance formulé sur les propriétés apparentes. L'incidence des propriétés aléatoires sur les propriétés effectives du nanocomposite est enfin caractérisée à l'aide d'un solveur d'homogénéisation stochastique ad hoc.

Mots clefs: champs aléatoires, dynamique moléculaire, interphase, modèle probabiliste, nano-composite, principe du maximum d'entropie.

Références

- [1] T. T. Le, J. Guilleminot, C. Soize, Stochastic continuum modeling of random interphases from atomistic simulations. Application to a polymer nanocomposite, *submitted* (2015)
- [2] J. Berriot, F. Lequeux, L. Monnerie, H. Montes, D. Long, P. Sotta, Filler-elastomer interaction in model filled rubbers, a ¹H NMR study, *Journal of Non-Crystalline Solids* 307-310 (2002) 719-724
- [3] S. E. Harton, S. K. Kumar, H. Yang, T. Koga, K. Hicks, H. Lee, J. Mijovic, M. Liu, R. S. Vallery, D. W. Gidley, Immobilized polymer layers on spherical nanoparticles, *Macromolecules* 43(7) (2010) 3415-3421
- [4] D. Brown, V. Marcadon, P. Mélé and N.D. Albrera, Effect of filler particle size on the properties of model nanocomposites, *Macromolecules* 41(4) (2008) 1499-1511
- [5] A. Ghanbari, T. V. M. Nodoro, F. Leroy, M. Rahimi, M. C. Böhm, F. Müller-Plathe, Interphase structure in silica-polystyrene nanocomposites: a coarse-grained Molecular Dynamics study, *Macromolecules* 45(1) (2012) 572-584
- [6] G. G. Vogiatzis, E. Voyiatzis, D. N. Theodorou, Monte Carlo simulations of a coarse grained model for an athermal all-polystyrene nanocomposite system, *European Polymer Journal* 47(4) (2011) 699-712
- [7] J. Guilleminot, C. Soize, Stochastic model and generator for random fields with symmetry properties: application to the mesoscopic modeling of elastic random media, *SIAM Multiscale Modeling & Simulation* 11(3) (2013) 840-870