

## Od modeliranja na atomističkoj razini do kontinuumске konstitutivne jednadžbe

Trapić, I.<sup>1</sup>, Pezer, R.<sup>2</sup>, Sorić, J.<sup>3</sup>

### Sažetak

Model zasnovan na promatranju atomističke jedinične ćelije u kojoj se prati klasična dinamika svakog atoma zasebno usmjeren je određivanju konstitutivnih relacija koje predstavljaju materijalnu informaciju korištenu u mehanici kontinuuma. Atomistička jedinična ćelija predstavlja reprezentativni uzorak diskretne strukture materijala čije stanje naprežanja prenosimo u integracijske točke konačnih elemenata. Cauchy-Bornovo pravilo primijenjeno je za prijenos deformacije iz makrorazine, utvrđene analizom konačnih elemenata, u nanorazinu atomističke jedinične ćelije. Nakon relaksacije i termalizacije atomističkog sistema proveden je izračun primarnog i sekundarnog naprežanja, a iz poznatog stanja naprežanja i deformacija moguće je određivanje matrice krutosti koja predstavlja konstitutivnu relaciju za lokalnu krutost sustava. Takvim pristupom omogućuje se evolucija kontinuumskog modela ažuriranjem krutosti u dovoljno malim koracima iterativnim algoritmom čime se umjesto fenomenoloških koriste konstitutivne jednadžbe zasnovane na diskretnoj atomističkoj dinamici.

**Ključne riječi:** atomistička jedinična ćelija, konstitutivne jednadžbe, molekularna dinamika

---

<sup>1</sup> **Ivan Trapić, mag. ing. stroj,** Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Katedra za mehaniku i čvrstoću, Ivana Lučića 5, 10 000 Zagreb, Hrvatska, [ivan.trapic@fsb.hr](mailto:ivan.trapic@fsb.hr)

<sup>2</sup> **Izv. prof. dr. sc. Robert Pezer, , dipl. ing. fiz.,** Sveučilište u Zagrebu, Metalurški fakultet, Zavod za fizičku metalurgiju Aleja narodnih heroja 3, 44 103 Sisak, Hrvatska, [rpezer@simet.hr](mailto:rpezer@simet.hr)

<sup>3</sup> **Prof. dr. sc. Jurica Sorić, dipl. ing. stroj.,** Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Katedra za mehaniku i čvrstoću, Ivana Lučića 5, 10 000 Zagreb, Hrvatska, [jurica.soric@fsb.hr](mailto:jurica.soric@fsb.hr)

## 1 Uvod

Za fizički vjerno modeliranje materijala primjenom mehanike kontinuuma (MK) potrebno je koristiti kvantitativno korektne konstitutivne jednadžbe koje povezuju tenzore naprezanja i deformacija. Konstitutivne relacije moraju se odrediti za svaku klasu materijala zasebno, pri čemu veliki broj stupnjeva slobode atomističkog sistema svodimo na ograničeni broj parametara, dostupan korisniku, za fino ugađanje modela. Budući da svojstva materijala počivaju na međudjelovanju između atoma kristalne rešetke otvara se mogućnost određivanja konstitutivnih jednadžbi analizom dinamike atoma primjenom molekularne dinamike (MD). Ovim pristupom je ponašanje materijala moguće analizirati na razini atoma modeliranjem nanostrukture primjenom MD-a kao alternative često skupim i vremenski zahtjevnim eksperimentima. MD omogućuje provođenje računalnih simulacija koje mogu dati uvid u razumijevanje procesa razvoja pukotine i nastajanja oštećenja, *ab initio*, modeliranjem pucanja kemijskih veza između atoma. U određenim slučajevima MD može dati dodatni uvid u pojedine aspekte procesa deformiranja koji su izvan dohvata eksperimenata, što dodatno povećava privlačnost pristupa računalnog eksperimenta procesa.

Metode višerazinskog modeliranja značajno su se razvile u proteklim godinama čime je otvoreno novo područje računalne znanosti o materijalima. Grupa višerazinskog modeliranja u kojima se lokalno ulaže nanorazina atomističkih modela u makro razinu modela MK-a naziva se hijerarhijsko višerazinsko modeliranje. Često se mikrostrukturna homogenizacija provodi korištenjem reprezentativnih volumnih elemenata [1] i [2]. Osnovna metoda za takvo atomističko kontinuumsko vezivanje je Cauchy-Bornovo pravilo (CBP) [3] koje kaže da svi atomi jednog kristala prate propisanu deformaciju rubova kristalne rešetke. Korištenjem atomističke jedinične ćelije (AJĆ) koja predstavlja reprezentativni atomistički uzorak materijala omogućuje se razmjena informacija između kontinuumskog i atomističkog modela materijala [4], [5]. Stoga se MK, ugrađena u metodu konačnih elementa (MKE), može nadopuniti MD-om kako bi točnije opisala procese koji se odvijaju unutar opterećenog materijala kao što su popuštanje, stvaranje i propagiranje pukotine. Međutim prividna jednostavnost MD a skriva brojne poteškoće u analizi velike količine podataka potrebnih za vjeran opis fenomena preko više prostornih skala.

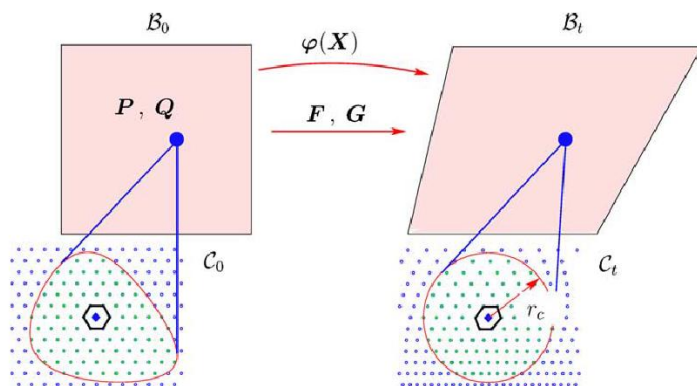
## 2 Atomistička jedinična ćelija

Atomistička jedinična ćelija predviđena je za ugradnju u integracijsku točku konačnog elementa (KE) pri čemu stanje deformiranja proizlazi iz deformiranog KE-a koje se na atomističku jediničnu ćeliju nameće CBP-om. U klasičnom obliku CBP je pogodno za homogena polja deformacija, ali upotrebom formulacije višeg reda mogu se razmatrati i gradijentne teorije [3] prema jednadžbi:

$$\mathbf{r}_\alpha = \mathbf{F} \cdot \mathbf{R}_\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{G} : (\mathbf{R}_\alpha \otimes \mathbf{R}_\alpha) \quad (1)$$

u kojoj su  $\mathbf{r}$  i  $\mathbf{R}$  trenutna i početna konfiguracija, a  $\mathbf{F}$  gradijent deformiranja i  $\mathbf{G}$  gradijent gradijenta deformiranja. U svrhu preglednosti i jednostavnosti u ovom radu indeksi označeni

grčkim slovima  $\alpha$  i  $\beta$  označavaju vektore i tenzore dodijeljene pojedinim atomima, a ne indeksnu notaciju. Smještanjem AJĆ-a u integracijsku točku KE-a omogućeno je proučavanje strukture materijala pri opterećenju [4] i [6]. AJĆ predstavlja reprezentativni atomistički uzorak mikrostrukture koji omogućuje izračun makroskopskog napreznja, vlačne čvrstoće i lomne žilavosti. Takvim pristupom MK, nadopunjena analizom AJĆ-a, može uzeti u obzir složenu mirostrukturu i mehanička svojstva skrivena unutar nelinearnog atomskog međudjelovanja, nesavršenosti mirostrukture i razvoja oštećenja. Stoga se određivanje empirijskog konstitutivnog zakona nužnog za MKE svodi na odabir prikladnog međuatomskog potencijala, koji je prilagođen tako da može opisati široki spektar svojstava diskretnog atomističkog sistema. Druga primjena, AJĆ-a, je određivanje kriterija loma kao što su kohezivni zakon vezivanja ili pokretljivost dislokacija [7] i [5]. Do sada je takav pristup primijenjen za analizu 2D [8] i 3D [5] struktura materijala, a s određenim prilagodabama pogodan je i za amorfne materijale [4] i [5].



**Slika 1,** Shematski prikaz preslikavanja gradijenata deformiranja prvog  $F$  i drugog reda  $G$  primjenom CBP-a višeg reda [3]

### 3 Atomističko napreznje

Glavna premisa MD-a je neposredno razmatranje stupnjeva slobode svakog atoma u nadi da će to pružiti mogućnost prijenosa vjerno kvantitativno određenih fizikalnih veličina u empirijske konstitutivne zakone metoda baziranih na MK-u uključujući posljedice diskretne prirode atomističke strukture. Napreznja koja su potrebna za formiranje konstitutivnog zakona su prvo Piola-Kirchhoffovo napreznje  $\mathbf{P}$  i sekundarno napreznje  $\mathbf{Q}$ . Napreznja možemo izračunati za svaki od atoma zasebno iz poznatog vektora sile  $\mathbf{f}$  i početne konfiguracije  $\mathbf{R}$  koje proizlaze iz izračuna odabranim međuatomskim potencijalom [3]

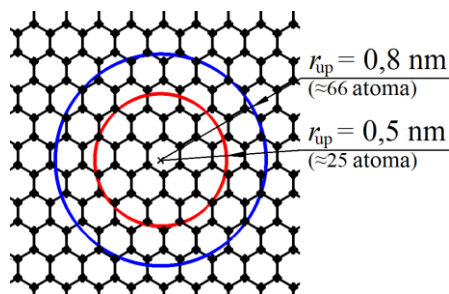
$$\mathbf{P}_\alpha = \frac{1}{2V_\alpha} \sum_{\alpha \neq \beta} (\mathbf{f}_{\alpha\beta} \otimes \mathbf{R}_{\alpha\beta}), \quad (2)$$

$$\mathbf{Q}_\alpha = \frac{1}{4V_\alpha} \sum_{\alpha \neq \beta} (\mathbf{f}_{\alpha\beta} \otimes \mathbf{R}_{\alpha\beta} \otimes \mathbf{R}_{\alpha\beta}) \quad (3)$$

pri čemu se sumiranje provodi preko atoma s kojima atom  $\alpha$  međudjeluje gdje  $\mathbf{f}_{\alpha\beta}$  označava vektor sile između atoma  $\alpha$  i  $\beta$ , a  $\mathbf{R}_{\alpha\beta} = \mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta$ . Međuatomski potencijal određuje polumjer odbacivanja izvan kojeg utjecaj međudjelovanja zanemarujemo. Kako bi naprezanje bilo korektno određeno potrebno je sumu podijeliti s atomu pripadnim volumenom  $V_\alpha$ .

Određivanje naprezanja AJĆ-a također je složeno pitanje budući da mnogobrojna atomistička naprezanja valja ugraditi u naprezanje AJĆ-e. U tu svrhu pogodno je koristiti prostorno i vremensko usrednjavanje budući da razmatranje naprezanja svakog pojedinog atoma sadrži termalno pobuđenje sustava koje daje fluktuacije, ponekada znatne, iznosa naprezanja. Naprezanje određujemo prema postupku za računanje usrednjenog naprezanja podrobno opisana u [8]. U ovom radu ju primjenjujemo na AJĆ u četiri jednostavna koraka:

- 1) odabrati skup reprezentativnih točaka u simulacijskom prostoru AJĆ-a,
- 2) odabrati jednu od točaka i odrediti sve atome koje se nalaze unutar radijusa usrednjavanja  $r_{up}$  (Slika 2),
- 3) zbrojiti sva naprezanja po atomima unutar radijusa usrednjavanja (jednadžbe (2) i (3)),
- 4) ponoviti postupak korake 2) i 3) za sve reprezentativne točke AJĆ-a.



Slika 2, Utjecaj radijusa na broj atoma usrednjavanja (primjer 2D strukture grafena) [8]

## 4 Interakcija između modela

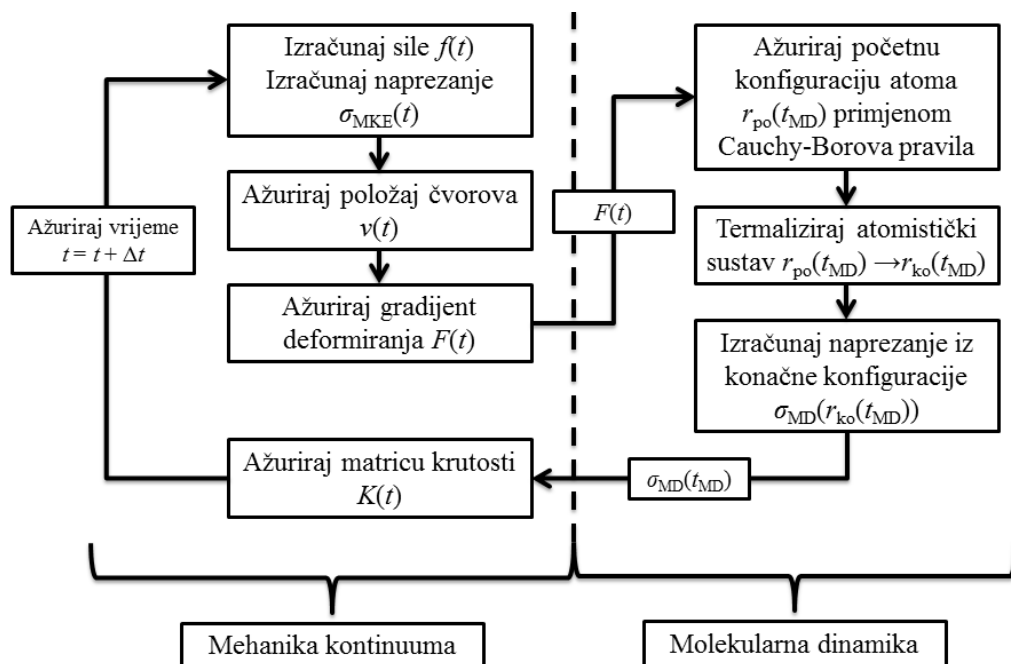
S prepoznatim i određenim naprezanjem JAC-a može se pristupiti vezivanju atomističkog i kontinuumskog modela čiji je dijagram toka prikazan je na Slici 3. Prvo se pristupa formiranju globalnog MKE modela i odabiru željenog materijala pri čemu su ograničenja vezana za odabir prikladnog međuatomskog potencijala. Međuatomski potencijali, jednom formirani, su veoma robusni za širok spektar opterećenja unutar definiranih varijabla stanja. Na temelju poznavanja osnovnih svojstava materijala može se odrediti lokalna matrica krutosti MKE modela i započeti analiza u koracima. U narednim inkrementima povećava se iznos opterećenja na MKE model. U svakom koraku provodi se dodatna analiza za svaku integracijsku točku KE-a u koju je ugrađena AJĆ. Gradijent deformiranja se prenosi s KE-a na AJĆ, primjenom CBP-a, pri čemu je rubnim atomima AJĆ-a onemogućeno pomicanje i ponašaju se kao rubni uvjet. AJĆ je potom termalizirana primjenom Verletova algoritma uz nametanje izotermnom-izohornog (NVT) ansambla.

Nakon termalizacije AJĆ-a vrši se izračun primarnog i sekundarnog napreznja kako bi se nadopunio opis konstitutivnog zakona bez potrebe za eksperimentima [4] i [9]. Izračun napreznja atomističke nanostrukture omogućava određivanje trenutne matrice krutosti KE-a kojem AJĆ pripada. Takvim pristupom omogućuje se prirodna evolucija kontinuumskog modela postupnim ažuriranjem krutosti iterativnim algoritmom čime se ukida potreba za formulacijom konstitutivnih jednadžbi u obliku kombinacije elementarnih funkcija. Linearizirane konstitutivne jednadžbe konačnog elementa višeg reda s  $C^1$  kontinuitetom, pogodnog za ugradnju AJĆ-a, koji se nalazi na makrorazini se mogu zapisati u sljedećem obliku [10]:

$$\Delta \mathbf{P}_M = \mathbf{C}_{PF} \Delta \mathbf{F}_M + \mathbf{C}_{PG} \Delta \mathbf{G}_M, \quad (4)$$

$$\Delta \mathbf{Q}_M = \mathbf{C}_{QF} \Delta \mathbf{F}_M + \mathbf{C}_{QG} \Delta \mathbf{G}_M \quad (5)$$

gdje matrice krutosti  $\mathbf{C}$  u indeksu imaju oznaku koje gradijente i koja napreznja povezuju. Na prikazani način može se prirodno ugraditi ponašanje materijala bez prethodnog eksplicitnog poznavanja konstitutivnih jednadžbi i elastičnih parametara.



Slika 3, Dijagram toka predloženog hijerarhijskog višerazinskog modela

## 5 Zaključak

U ovom radu smo prikazali potencijalne mogućnosti primjene CBP-a u okviru višerazinskog modeliranja-a za potrebe povezivanja KE-a i AJĆ-a. Predloženi višerazinski postupak primjenjiv je za analizu inicijacije i evolucije mirostrukturnih oštećenja i posljedičnog popuštanja materijala. Ažuriranjem matrice krutosti u svakom inkrementu omogućeno je prirodno ugrađivanje svojstva materijala, koja počivaju na atomskoj mikrostrukтури, bez eksplicitnog poznavanja konstitutivnih zakona i materijalnih parametara. Takav pristup pruža veliku fleksibilnost MKE modela jer nije potrebno unaprijed poznavati materijalni model, a budući da je reprezentativna mirostruktura sadržana u AJĆ-u otvara se i dodatna mogućnost analize zamora materijala te praćenja oštećenja na atomističkoj razini.

### Literatura

- [1] Tadmor E.B., Miller R.E., *Modeling materials: continuum, atomistic and multiscale techniques* (Cambridge University Press, 2011)
- [2] Liu W.K., Karpov E.G., Zhang S., Park H.S., *Computer Method in Applied Mechanics and Engineering*, 193, 1529 (2004)
- [3] Sunyk R., Steinmann P., *On higher gradients in continuum-atomistic modelling*, Int. J. Solids Struct., 2002, 40 (24) (2003) 6877–6896.
- [4] Li S., Urata S. *An atomistic-to-continuum molecular dynamics: Theory, algorithm, and applications*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Volume 306, 2016, Pages 452-478,
- [5] Urata S., Shaofan L., *A multiscale shear-transformation-zone (STZ) model and simulation of plasticity in amorphous solids*, Acta Materialia, Volume: 155 Pages: 153-165, 2018
- [6] Yang J. Z., Weinan E. *Generalized Cauchy-Born rules for elastic deformation of sheets, plates, and rods: Derivation of continuum models from atomistic models*, Physical Review B, Volume: 74 Issue: 18, 2006.
- [7] Larsson R., Samadikhah K. *Atomistic continuum modeling of graphene membranes*, Computational Materials Science, Volume: 50 Issue: 5 Pages: 1744-1753, 2011,
- [8] Trapić I., Pezer R., Sorić J. *Atomistic modelling of 2D stress distribution around discontinuities*, Transactions of FAMENA. 42 (2018) , 3; 47-60
- [9] Lyu D., Li S., *Multiscale crystal defect dynamics: A coarse-grained lattice defect model based on crystal microstructure*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Volume: 107 Pages: 379-410, 2017,
- [10] Lesičar T., Sorić J., Tonković Z., *Large strain, two-scale computational approach using C1 continuity finite element employing a second gradient theory*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 298 (2016) 303–324