

مقاله مروری

مروری بر روشهای چندمقیاسی همزمان در تحلیل مسائل ناپیوستگی در مقیاس ریز

امید علیزاده و سهیل محمدی*

آزمایشگاه محاسبات سریع، دانشکده مهندسی عمران، دانشکدگان فنی، دانشگاه تهران

(دریافت مقاله: ۵ //۰۷ /۱۴۰۲ – دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۲/۰۷/۳۰)

چکیده- مدلسازی مسائل ترک و ناپیوستگی اهمیت بسزایی در صنایع مختلف دارد و از دیرباز مورد توجه بوده است. مدلسازی رفتار ترک در مقیاسهای مختلف بویژه مقیاسهای اتمی میتواند باعث شناخته شدن بهتر رفتار ریز ساختار ماده و پیش بینی رفتار آن در مقیاسهای بزرگتر گردد. از سوی دیگر مدلسازی مبتنی بر مقیاسهای اتمی میتواند باعث شناخته شدن بهتر رفتار ریز ساختار ماده و پیش بینی رفتار آن در مقیاسهای بزرگتر گردد. از روشها دارد. مجموعه روشهای چندمقیاسی همزمان برای حل این مشکلات بوجود آمدهاند و به عنوان تکنیکهای قابل پذیرش برای مدلسازی ناپیوستگی در دهههای اخیر مورد استقبال محققین قرار گرفته است. مطالعات نشان میدهد روشهای چندمقیاسی همزمان توانستهاند کلیه رفتارهای ریز مقیاس در مقابل تحریکهای مکانیکی را شبیهسازی نمایند و ضمن دستیابی به تطابق مناسبی با مدلهای آزمایشگاهی، ارتباط پیوسته با مقیاسهای بزرگتر را برقرار کنند. در مطالعه حاضر، روشهای چندمقیاسی همزمان همگن سازی و دامنه مجزا که در طول چند دهه گذشته در مدلسازی مسائل ناپیوستگی مورد استفاده قرار گرفتهاند بررسی شده اند. جهت ایجاد زمینه مناسب برای مقایسه دوشهای تواسته با میال ناپیوستگی مورد استفاده قرار گرفتهاند بررسی شده اند. جهت ایجاد زمینه مناسب برای مقایسه می توسعه داده شده در طول چند دهه گذشته در مدلسازی مسائل ناپیوستگی مورد استفاده قرار گرفتهاند بررسی شده اند. جهت ایجاد زمینه مناسب برای مقایسه روشهای توسعه داده شده در طول چد دهه گذشته، مسائل ناپیوستگی مورد استفاده قرار گرفته اند بررسی شده اند. جهت ایجاد زمینه مناسب برای مقایسه روشهای توسعه داده شده در طول چد دهه گذشته، مسائل مای برکتر ترک لبه بازطراحی و مدلسازی شده است و نتایج حاصل از شبیه سازی و دقت محاسباتی مهمترین روشها با یکدیگر مقایسه شده اند.

واژههای کلیدی: روشهای چندمقیاسی همزمان، همگن سازی، روشهای دامنه مجزا، ناپیوستگی.

A review of concurrent multiscale methods for the analysis of fine scale discontinuity problems

O. Alizadeh and S. Mohammadi*

High Performance Computing Lab, School of Civil Engineering, Faculty of Engineering, University of Tehran.

Abstract: Modeling of crack and discontinuity related problems has had a great influence on numerous industries for a long time. Simulation of discontinuity behavior in different scales, especially in atomistic scales, can lead to better insight of the crack/discontinuity initiation and propagation phenomena and prediction of its behavior in larger scales. On the other hand, modeling based on fully refined scales requires huge computational effort compared to other methods due to the higher number of degrees of freedom. Concurrent multiscale methods have been developed to overcome the high computational cost issues of refined models, while preserving sufficient accuracy. Studies have shown that concurrent multiscale methods are capable of simulating all atomic behaviors in order to establish a compatible solution with larger scales, and to accurately resemble the laboratory results. In the present review, concurrent multiscale methods, which could be categorized into homogenization and partitioned-domain methods, are briefly investigated and compared. These methods have been widely used for modelling of

cracks, discontinuities and impurities in different types of problems in the past two decades. To create a suitable basis for comparing the main concurrent methods, the problem of edge crack propagation is redesigned and modeled, and the simulation results and their computational accuracy are compared.

Keywords: Concurrent multiscale methods, homogenization, discrete domain methods, discontinuity.

۱–مقدمه

انواع مسائل تَرک و ناپیوستگی را می توان از دو دیدگاه مکانیک کلاسیک نیوتنی و مکانیک اتمی/مولکولی بررسی نمود. متناسب با ماهیت هر یک از این دیدگاهها، این نوع مسائل در بازه مقیاسهای نانو تا ماکرو قابل تشریح هستند. در حیطهی مکانیک کلاسیک، معادلات حرکت نیوتنی با اعمال روشهای مختلف حل می شوند. این دیدگاه قابلیت مدلسازی بسیاری از پدیدههای فیزیکی با دقت مناسب را دارد. این درحالی است که اثرات و پدیدههایی که در مکانیک اتمی پیشبینی می شوند، معمولا فقط برای مسائل در مقیاسهای بسیار کوچک دارای اهمیت ویژه هستند.

در حیطه مکانیک کلاسیک نیوتنی، روش های مختلفی برای مدلسازی مسائل ناپیوستگی ارائه شده است. یکی از روش های عددی پرکاربرد در مدلسازی این نوع مسائل، روش المان محدود است که با ایدههای مختلفی به مدلسازی ترک یا ناپیوستگی میپردازد. در روش های غیر مستقیم، نظیر روش ترک پخش شده که اولین بار توسط رشید و همکاران [۱] استفاده شد، ترکهای موجود در ماده به صورت میدانی پیوسته در سراسر المان پخش میگردد. در روش حذف المان که بیشتر به همراه مدلهای خرابی و پلاستیسیته به کار رفته است با رسیدن خرابی در نقاط انتگرالگیری المان به حد نهایی، المان به طور کامل از شبکهبندی حذف می شود و رشد ترک بصورت غیر مستقیم مدلسازی میگردد [۲].

در اواخر دهه نود میلادی دستهای از روشها ایجاد شدند که مبتنی بر مفهوم تقسیمبندی واحد بودند. این مفهوم اجازه میدهد تا هندسه ناپیوستگی مستقل از شبکهبندی تعریف شود. روشهای بدون المان مانند روش بدون المان گالرکین و روشهای مبتنی بر المان محدود مانند المان محدود تعمیم یافته و المان محدود کلی بر این اساس پایه گذاری شدهاند. روشهای بدون المان بسیار زیادی در سالهای اخیر ایجاد شدهاند که یکی از معروفترین آنها روش بدون المان گالرکین

استفاده شده است و در آن از تابع تقریب حداقل مربعات متحرک روی مجموعهای از گرههای داخلی و همراه با توصیفی از مرز داخلی ساخته می شود.

در مدلسازی ترک در مقیاس ماکرو، تعیین دقیق میدان تنش نوک ترک از مهمترین مباحث است. به این منظور، در مسائل خاص، علاوه بر در نظر گرفتن رفتار غیرخطی میباید به شکسته شدن پیوندهای اتمی و نیز تولید نابجایی در حوالی نوک ترک توجه شود. از این رو میدان تنش نوک ترک محاسبه شده به کمک روشهای مبتنی بر مقیاس ماکرو، نمیتواند توزیع دقیق تنش در مجاورت نوک ترک را بیان کند [۳]. بدلیل عدم توانایی مدلهای مقیاس ماکرو در تعیین دقیق میدان تنش و بوانایی مدلهای مقیاس ماکرو در تعیین دقیق میدان تنش و میدان تنش ا بردهاند تا اطلاعات به دست آمده در آن بر پایه رفتار تک تک اتمها و برهمکنش آنها با یکدیگر باشد.

در مدلهای مولکولی/ اتمی، تمام اتمها مدل میشوند و رابطهی میان آنها توسط پتانسیلهای بین اتمی بیان می گردد. این مدلها که برای بررسی ساختارهای بسیار ریز در ابعاد نانومتری بسیار توانا هستند به دو دسته تعیینی و احتمالاتی تقسیم میشوند. روشهای تعیینی که در آنها معادلات حرکت بطور مستقیم حل میشوند دارای انواع متفاوتی هستند که از میان آنها روش دینامیک مولکولی بیشتر مورد استفاده قرار می گیرد. در این روش، مکان اتمها یا ذرات سیستم، لحظه به لحظه به وسیله حل عددی معادلات دیفرانسیلی حرکت (قانون دوم نیوتن) و تحلیل است. چنانچه مدل دینامیک مولکولی در دمای صفر درجه کلوین (معادل ۳۷۳ – درجه سانتی گراد) شبیهسازی شود، و یی حالت، کمینه سازی انرژی مدل در حالت استاتیکی مطرح میشود. در این شیوه از حل، که به آن روش استاتیک مولکولی

گفته می شود، نیروهای بین اتمی متناسب با تابع پتانسیل آنها محاسبه می شود و انرژی پیوندهای شکل گرفته کووالانسی و واندروالسی لحاظ می شوند و جملات مربوط به انرژی جنبشی و مومنتوم ذرات محاسبه نمی گردند.

در روشهای احتمالاتی، بر خلاف روش دینامیک مولکولی، مکان ذرهها از همدیگر مستقل هستند و پیکربندی دستگاه با حرکت دادن تصادفی یک یا چند ذره تغییر میکند و وابسته به زمان نیست. اگر انرژی پتانسیل کل دستگاه بعد از تغییر پیکربندی کمتر از پیکربندی قبلی شود، تغییر مکان ذره یا ذرات مجاز است و در غیر این صورت، تغییر مکان با یک ضریب احتمالی اصلاح میگردد تا مجاز شود و شبیهسازی به همین ترتیب ادامه پیدا میکند. یکی از مهمترین روشها در این دسته، روش مونت-کارلو است.

از آنجا که در مقیاس نانو، چینش اتمها و پیوندهای بین آنها نقش بسیار مهمی در رفتار مواد بازی میکنند، روش دینامیک مولکولی بیشتر مورد استفاده قرار گرفته است. پرهیز از تشکیل ماتریس سختی توسط روش دینامیک مولکولی و همچنین توانایی این روش در شبیهسازی پدیدههای شبه استاتیکی محبوبیت آن را دو چندان کرده است. تحقیقات گستردهای بر روی گسترش ترک با کمک روش دینامیک مولکولی صورت گرفته است که در آنها میدان تنش در مجاورت نوک ترک به صورت کاملا دقیق مطالعه شده است.

در مدلهای مبتنی بر مکانیک مولکولی، هر چند امکان شبیه سازی دقیق میدان های تنش و تولید نابجایی وجود دارد اما این مدل ها نیز دارای اشکالات عمده ای می باشند. هزینه محاسباتی بسیار بالا و دشواری اعمال شرایط مرزی مختلف در این روش ها عملاً استفاده از آن را محدود می سازد. از طرف دیگر، مدل های محیط پیوسته نیز علیرغم هزینه محاسباتی مناسب و توانایی در مدلسازی انواع شرایط مرزی، در مدلسازی پدیده ها در ابعاد نانو ناتوان و کم دقت هستند. بر این اساس، روند تحقیقات به سمت ایجاد مدل هایی هدایت شد که با

کنند و نواقص آنها را برطرف سازند. به این ترتیب روشهای مدلسازی چندمقیاسی به وجود آمدند.

مساله چندمقیاسی به مسالهای گفته می شود که در مقیاس زمان یا مکان و یا هر دو نیاز به استفاده از دو گستره متمایز از مکان و یا زمان است. به عبارت دیگر حل چندمقیاسی درصدد پوشش دادن دو و یا چند محیط با مقیاس های زمانی و مکانی متفاوت (از نظر گستردگی و اندازه) در یک شبیه سازی است. به عنوان مثال چنانچه دو مقیاس مکانی آنگستروم و میکرومتر در مدلسازی یک نمونه مورد توجه قرار گیرد، نیاز به حل چندمقیاسی ضروری است. در حل چندمقیاسی شیوه ایجاد ارتباط بین هر دو ناحیه متفاوت مکانی و یا گامهای متفاوت زمانی از اهمیت بالایی برخوردار است و عمده تفاوت بین روش های رایج در حوزه حل چندمقیاسی را تشکیل می دهد.

روشهای حل چندمقیاسی می تواند به دو دسته کلی ترتیبی و همزمان تقسیم شود. شکل (۱) یکی از طبقهبندیهای رایج روشهای چندمقیاسی را ارائه میکند [۴].

روش ترتیبی به آن دسته گفته می شود که در آن محاسبات یک مقیاس (معمولاً مقیاس کوچکتر) به عنوان مرحله پیش پردازش^۱ برای مقیاس دیگر (معمولاً مقیاس بزرگتر) مورد استفاده قرار می گیرد. در یکی از معمول ترین حالات استفاده از این روش محاسبات، بعد کوچکتر پارامترهای لازم برای محاسبات بعد بزرگتر را فراهم می کند. به عنوان مثال می توان از محاسبات از –اساس^۲ برای به دست آوردن پارامترهای پتانسیل های بین اتمی در روش مکانیک مولکولی استفاده کرد. پر مقیاس بزرگتر نیز می توان از روش مکانیک مولکولی پارامترهایی نظیر مدول الاستیسیته و یا تنش تسلیم را محاسبه کرد. با انجام محاسبات بیشتر حتی می توان علاوه بر پارامترها

محققین بسیاری با استفاده از روش چندمقیاسی ترتیبی دقت محاسبات مقیاس بزرگتر را بهبود بخشیدهاند. سان و همکاران [۵] به بررسی ساختار یک رشته DNA پرداختند و اطلاعات کامل زنجیره DNA از بعدهای کوچکتر را محاسبه کردند (شکل (۲))



شکل ۱– روش های عددی در مقیاس مکان و زمان (تصویر از مرجع [۴] بازطراحی شده است)



شکل ۲- مدلسازی چندمقیاسی ترتیبی زنجیره DNA [۵]

در نمونهای دیگر، افتخاری و همکاران با کمک مدلسازی چند مقیاسی ترتیبی در چهار مقیاس نانو، میکرو، مزو و ماکرو تاثیرات افزودن نانو لوله کربنی به یک عضو بتن مسلح را ارزیابی کردهاند [۶]. در شکل (۳) نمونه مراحل انتقال اطلاعات از مقیاس کوچک به بزرگ در این تحقیق نشان داده شده است.

از این روش در تحلیل مسائل از مقیاس بزرگ به مقیاس کوچک هم استفاده شده است، برای نمونه، شاهی و محمدی [۷ و ۸] ضمن مدلسازی آثار دینامیکی جریان خون بر دریچه قلب، به بررسی آسیب در لایههای بافت نرم نقاط بحرانی دریچه پرداختهاند و در نهایت، بحرانیترین سلولها را از نقطه نظر کرنشهای وارده تعیین و تحلیل نمودهاند (شکل ۴)

با وجود اینکه مدلهای چندمقیاسی ترتیبی امکان

مدلسازی نمونههای بزرگتری از نانومواد را با شرایط مرزی گوناگون ایجاد میکنند، استفاده از آنها در مدلسازی پدیدههایی مانند شکست و وجود ناخالصی در ابعاد اتمی در شبکه بلوری دارای نقاط ضعف و کاهش دقت است [۴]. از این رو محققین به دنبال ارائه مدلهایی هستند که علاوه بر استفاده از مزایای روشهای ترتیبی برای اعمال شرایط مرزی، بتواند پدیدههای محلی مانند شکست و یا وجود ناخالصی را با استفاده از مدلسازی دینامیک مولکولی به شکل موثرتر و دقیق تری در مدلسازی وارد نمایند.

۲– روشهای چندمقیاسی همزمان

در مدلهای چندمقیاسی همزمان بخشی از محیط توسط یک



شکل ۴– مدلسازی چندمقیاسی آثار دینامیکی بر روی دریچه قلب و زیرساختار سلولی آن [۸]

امید علیزاده و سهیل محمدی

روش عددی نظیر اجزا محدود و بخش دیگر توسط روشی نظیر دینامیک مولکولی مدل میگردد. روشهای همزمان را میتوان به دو زیرگروه عمده روشهای همگنسازی⁷ و روشهای دامنه مجزا^۴ تقسیم نمود. در روشهای همگنسازی، مقیاسهای بزرگ و کوچک میتوانند در همه نواحی بطور همزمان وجود داشته باشند و اطلاعات بین این دو مقیاس بزرگ و کوچک بر یکدیگر اثر میگذارند. مقیاس کوچکتر اطلاعات مورد نیاز مقیاس بزرگتر را تامین میکند و مقیاس بزرگتر شرایط مرزی اعمال شده به مقیاس کوچکتر را فراهم

در روش دامنه مجزا، مساله به دو یا چند ناحیه مستقل و مجاور تقسیم می شود که هرکدام از ناحیه ها با مقیاس های متفاوت مورد بررسی قرار می گیرند [۹]. در این شیوه سعی می شود نواحی با رفتارهای مختلف در کنار یکدیگر مدل شوند. به عبارت دیگر کل دامنه به نواحی مختلف تقسیم می شود و مقیاس بزرگتر و کوچکتر در مجاورت یکدیگر قرار دارند. در دهه های اخیر این شیوه از حل چندمقیاسی مورد استقبال گستردهای قرار گرفته است و روش های متنوعی توسعه یافته اند. از محبوب ترین این شیوه ها می توان به روش شبه پیوسته⁶، ار تباط دامنه ها⁹ و ارتباط مقیاس ها^۷ اشاره کرد.

در مطالعه مروری حاضر روشهای چندمقیاسی همزمان همگنسازی و دامنه مجزایی که در طول دهههای اخیر مورد استقبال محققین بودهاند مورد بحث و بررسی اجمالی قرار گرفتهاند و نقاط قوت و ضعف هر کدام از آنها به تفکیک تشریح شدهاند (جدول ۱).

۲–۱– روشهای چندمقیاسی همگنسازی

روش های همگن سازی برای مدلسازی مسائلی که یک نقص، آشفتگی و یا هر پدیده ای بصورت متمرکز در نمونه وجود ندارد و در کل مدل پخش شده است، مناسب است. در این دسته از روش ها، پدیده های موجود در ناحیه های با مقیاس ریزتر بر روی محاسبات میدان های بزرگتر اثر می گذارند. طبیعی است تغییرات اعمال شده می بایست بر روی ناحیه ریزتر نیز اثر

روش های عددی در مهندسی، سال ۴۲، شماره ۲، زمستان ۱۴۰۲

داده شود که این موضوع باعث ایجاد ارتباط دوگانه میشود. این دسته از روشها همواره در حال بروزرسانی هر یک از دو ناحیه ریز و درشت هستند.

در شیوه همگنسازی، با استفاده از المانهای نماینده^۸ مشخصات مورد نیاز از ناحیه ریزتر استخراج و به عنوان اطلاعات اولیه در محاسبات ناحیه درشت تر استفاده می شود. خواص ماده در نقاط مختلف در سرتاسر مدلهای (در هر کدام از المانهای نماینده) بصورت جداگانه محاسبه و به مقیاس درشت تر منتقل می گردد. بدیهی است تکرار این المانهای نماینده به معنای یکسان بودن مقادیر مشخصات مواد در همه نماینده به معنای یکسان بودن مقادیر مشخصات مواد در همه نقاط نیست. این شیوه حل باعث می شود که از ریز تر کردن مش شود که باعث افزایش سرعت محاسبات می گردد. روش شود که باعث افزایش سرعت محاسبات می گردد. روش شود که باعث افزایش سرعت محاسبات می گردد. روش نقای شده [۱۲]، روش همگن سازی مرتبه اول غنی شده [۱۴] برخی از مهم ترین روش های همگن سازی هستند.

۲-۱-۱- روش همگنسازی ریاضیاتی روش همگنسازی ریاضیاتی برای مسائل چندمقیاسی مکانیک جامدات بر اساس رابطه (۱) برای تقریب میدان در نقطه ماکرو تعریف می شود:

$$\mathbf{u}^{\xi}(\mathbf{x}^{M}) = \sum_{j=1}^{n} \xi^{j} \mathbf{u}^{j}(\mathbf{x}^{M}; \mathbf{x}^{m})$$

$$\mathbf{x}^{m} = \frac{\mathbf{x}^{M}}{\xi}$$
(1)

که در آن n تعداد جملات بسط است که بر اساس دقت مورد نیاز انتخاب می شود و کم از محاسبات مقیاس ریزتر بدست می آید و حلقه ارتباط بین مقیاس ریز **x**^m و مقیاس درشت **X**^M را ترسیم می کند [۱۰ و ۱۱]. روند خلاصه همگنسازی ریاضیاتی برای مسائل الاستیسیته به شرح زیر است [۱۵]: میدان کاز حل رابطه (۲) در المان نماینده در مقیاس ریز

		-		,	000	- • •				
معادله حاكم بر	روش حل معادله ح		انطباق		ti	.1•				
رابطه محيط	معادلات	ں حیہ ابت ا	درجات	دسته روش	سال اند ا	ن م	نام روش			
پيوسته و اتمي	حاكم	انتعال	آزادی		انتشار	اختصارى				
	'						همگنسازی مرتبه اول			
غير خطى	انرژی-	ندارد	ندار د	ھمگن سازى	1983	_	First Order Computational)			
	نيرويي	2	5	03 0			(Homogenization			
	اند ژی –						شبه بيه سته			
كوشي بورن	الررى	ندارد	دارد	دامنه مجزا	1998	QC	(Quasicontinuum)			
	فيرويي ۱۰ شه									
غيرخطي	اىررى-	ندارد	ندارد	ھمگنسازى	١٩٩٨	-	همکن ساری ریاضیانی			
	ىيرويى						(Mathematical Hemoginization)			
كوشي بورن -	نې و يې	ندار د	دار د	دامنه مجزا	7007	CADD	پیوند اتم و نابجایی			
غيرخطي		2	2	5.			(Coupled Atomistic and Discrete Dislocations)			
	۰ ^۱ ۱						همگنسازی مرتبه دوم			
غيرخطي	اىررى-	ندارد	ندارد	ھمگنسازى	7 • • 7	-	Second Order Computational)			
	ىيرويى						(Homogenization			
	انرژى						ارتباط مقياس ها			
کوشی بورن		ندارد	دارد	دامنه مجزا	7004	BSM	(Bridging Scales)			
							ار تباط دامنهها			
كوشي بورن	انرژى	دارد	ندارد	دامنه مجزا	7004	BDM	(Bridging domain)			
							بيوند اتم و محبط بيوسته			
الاستيك خطى	نيرويي	دارد	دارد	دامنه مجزا	7007	AtC	(Atomistic to Continuum)			
	÷ •1						شبهپيوسته كلاستري			
كوشي بورن	ابرژی –	ندارد	دارد	دامنه مجزا	7009	CQC	Cluster-based)			
	نيرويي						(Quasicontinuum			
							روش همگنسازی غنی شده			
غير خطى	انرژی –	ندار د	دار د	ھمگن سازى	7 º 1V	EMSHM	Micro-based enriched)			
0	نيرويي	-	-				(multiscale homogenization			
-0.000							حندمقیاسی یا گروهای متغد			
غرمتنى بورن	انرژى	ندارد	دارد	دامنه مجزا	7019	VNMM	(Variabel Node Multiscale			
عير خطي							Method)			
خطی –	انرژى	ندارد	ندارد	دامنه مجزا	7077	DCMM	روش DCMM			
غيرخطي										
خطی –	انرژی –	دارد	ندارد	دامنه مجزا	۲۰۲۳	MD- SMD-	روش MD-SMD-MPM			
غيرخطي	نيرويي	2	-	<u>,</u>		MPM				

جدول ۱– روشهای چندمقیاسی همزمان دامنه مجزا

محاسباتی از میانگین گیری خواص بر روی مقیاس ریزتر حاصل می شود. یکی از روش های اولیه همگن سازی محاسباتی بنام همگن سازی مرتبه اول معروف است. در این روش کرنش (یا گرادیان تغییر شکل) محیط در شت تر به عنوان شرایط مرزی روی محیط ریزتر اعمال می شود، سپس معادله رفتاری ماده (رابطه تنش – کرنش) از حل مقیاس ریزتر بدست می آید. در مقیاس ریزتر از المان نماینده استفاده می شود. هر نقطه ای از مقیاس در شت تر می تواند متناظر یک المان نماینده در نظر گرفته شود. شکل (۶) این ویژگی را نشان می دهد. اندازه طول المان نماینده (اn) به مراتب کمتر از اندازه طول مقیاس در شت (M) است و ویژگی های رفتاری دقیق تری را از ماده استخراج می کند.

چنانچه موقعیت فعلی یک نقطه مادی با \mathbf{X} و موقعیت اولیه آن با \mathbf{X} نشان داده شود و از دو اندیس \mathbf{M} و \mathbf{m} به ترتیب برای دو مقیاس درشت و ریز استفاده شود، ارتباط بین موقعیت فعلی و قبلی در مقیاس ریز توسط رابطه (۵) بیان می شود:

(۵) $d\mathbf{x}^{m} = \mathbf{F}^{m} d\mathbf{X}^{m}$ (۵) در روش همگنسازی مرتبه اول جابجایی نقاط در مقیاس ریز با کمک تانسور گرادیان تغییر شکل بدست آمده از مقیاس بالا (\mathbf{F}^{M}) بدست میآید و برای احتساب اثرات داخلی المان نماینده (ناشی از ناخالصیهای موجود) رابطه (۵) با افزودن جمله $d\boldsymbol{\omega}$ متناظر با اثرات میکرو نوسانات بصورت رابطه (۶)

 $d\mathbf{x}^{m} = \mathbf{F}^{M}d\mathbf{X}^{m} + d\boldsymbol{\omega}$ (۶) در روش همگنسازی مرتبه اول، ابتدا مشخصات ماده توسط حل المان نماینده در مقیاس ریز بدست می آید. تنش معادل مقیاس درشت \mathbf{P}^{M} از توزیع تنش مقیاس ریز \mathbf{P}^{m} مطابق رابطه (۷) محاسبه می شود:

بازنویسی میشود:

$$\mathbf{P}^{\mathrm{M}} = \frac{1}{\Omega_{\mathrm{e}}^{\mathrm{m}}} \int_{\Omega_{\mathrm{e}}} \mathbf{P}^{\mathrm{m}} \mathrm{d}\Omega_{\mathrm{e}} \tag{V}$$

بدست مى آيد:

$$\int_{\Omega^{m}} \mathbf{D}(\mathbf{x}^{m}) \frac{\partial \boldsymbol{\varsigma}(\mathbf{x}^{m})}{\partial \mathbf{x}^{m}} \cdot \delta \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}^{m}) d\Omega =$$

$$\int_{\Omega^{m}} \mathbf{D}(\mathbf{x}^{m}) \delta \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}^{m}) d\Omega$$
(7)

سپس تانسوررفتاری همگن شده \mathbf{D}^{h} و بردار بار همگن شده سپس ماکرو \mathbf{X}^{M} متناظر المان نماینده محاسبه می شوند: $\mathbf{D}^{h}(\mathbf{x}^{M}) =$

$$\frac{1}{\Omega^{m}} \int_{\Omega^{m}} \left(\mathbf{D}(\mathbf{x}^{m}) - \mathbf{D}(\mathbf{x}^{m}) \frac{\partial \boldsymbol{\varsigma}(\mathbf{x}^{m})}{\partial \mathbf{x}^{m}} \right) d\Omega^{m}$$
(7)

$$\mathbf{f}^{\mathrm{bh}}(\mathbf{x}^{\mathrm{M}}) = \frac{1}{\Omega^{\mathrm{m}}} \int_{\Omega^{\mathrm{m}}} \mathbf{f}^{\mathrm{b}} \mathrm{d}\Omega^{\mathrm{m}}$$
(*)

همگنسازی ریاضیاتی در کارهای فیش و همکاران در مدلسازی تغییر شکلهای بزرگ [۱۶]، در کارهای مارکنسکف و همکاران در مدلسازی خرابی [۱۷] و در مدلسازی کامپوزیتهای ترموالکتریک [۱۸] مورد استفاده قرار گرفته است. همچنین از روش همگنسازی ریاضیاتی برای مدلسازی رفتار مواد آلیاژی حافظهدار^۹ در تحقیق فاطمی و همکاران [۱۹] و مقایسه آن با محاسبات مستقیم مش ریز استفاده شده است (شکل ۵).

بسط روابط دقیق همگنسازی ریاضیاتی برای مسائل پیچیده مهندسی، بسیار سخت است که نیازمند توسعه روابط لازم برای اعمال شرایط مرزی ریزمقیاس مختلف است. از این رو، توسعه آن بصورت محدود انجام شده است و تحقیقات بیشتر به سمت همگنسازی محاسباتی متمایل شده است.

۲–۱–۲– روش همگنسازی محاسباتی مرتبه اول^۱ تئوریهای مبنایی همگنسازی محاسباتی توسط مقالات متعددی [۲۰–۲۷] پایهریزی شده است. در دهههای اخیر توجه به مساله چندمقیاسی همگنسازی محاسباتی بیشتر از قبل شده است زیرا مدلسازی کامل یک نمونه با در نظر گرفتن مستقیم همه ریز اجزاء آن می تواند از نظر هزینههای محاسباتی و زمان اختصاص یافته بهینه نباشد. ایده اصلی روشهای همگنسازی



شکل ۵- مدلسازی چندمقیاسی همگنسازی ریاضیاتی [۱۹]



شکل ۶- نمایش المان نماینده در مساله همگنسازی

و تانسور خواص ماده \mathbf{D}^{M} در مقیاس درشت، مطابق رابطه (۸) محاسبه می شود:

$$\delta \mathbf{P}^{\mathrm{M}} = \mathbf{D}^{\mathrm{M}} : \delta \mathbf{F}^{\mathrm{M}}$$

سپس این مشخصات در حل مقیاس درشت تر مورد استفاده قرار می گیرد. امکان محاسبه ماتریس گرادیان تغییر شکل را فراهم می نماید. این گرادیان بر روی المان نمونه اعمال می شود و حل بر اساس شکل (۷) بصورت تکراری ادامه پیدا می کند تا همگرایی کافی حاصل شود.

روش همگنسازی مرتبه اول برای مدلسازی مسائل

مختلف از جمله کامپوزیتها، ترکهای پخش شده در مواد و خرابی استفاده می شود. استفاده از این روش برای مدلسازی کامپوزیتها با کمک روش اجزا محدود در هر دو مقیاس در منابع متعددی [۲۸–۳۱] دیده می شود. توسعه روش همگنسازی مرتبه اول برای دستیابی به دقت بیشتر [۳۲] و یا امکان مدلسازی مواد با ساختار پیچیده [۳۳] و ترکیب آن با سایر روش ها [۳۴] نیز در مطالعات زیادی دیده شده است.

اگرچه روش همگنسازی مرتبه اول، قابلیت پیاده سازی در مسائل متعددی دارد اما این روش دارای محدودیتهایی نیز



شکل ۷- حل مساله چند مقیاسی همگن سازی مرتبه اول

میباشد [۳۵]. اگر مساله دارای گرادیانهای تغییر شکل خیلی بزرگ در مقیاس درشت باشد، قابلیت پیادهسازی آن بر روی مقیاس ریزتر با دقت مناسب فراهم نیست و استفاده از این روش نتیجه مناسبی نخواهد داشت. همچنین، این روش در حل مسائلی که دارای ناخالصی، نقص و یا آشفتگی در یک ناحیه متمرکز را دارند از کارایی مناسبی برخوردار نیست.

باید توجه نمود که روش همگنسازی بر این اصل استوار است که ابعاد مقیاس درشت اختلاف چشمگیری با ابعاد مقیاس ریز دارند اما این اختلاف به معنای ایجاد مقیاس ریز در اندازههای واقعی نمونه نیست، بلکه اندازههای واقعی نمونه میتواند بسیار ریزتر از مقیاس ریز انتخاب شده باشد (به عنوان مثال اندازه مقیاس ریز ممکن است بصورت پیوسته در نظر گرفته شود در حالی که مقیاس ریز واقعی ممکن است بصورت اتمی جدا از هم و غیرپیوسته باشد). بنابراین مقیاس ریزی که میبایست مشخصات رفتاری ماده را تعیین کند، ممکن است در صورت وجود نواقص کریستالی یا اتمی دارای خطای زیادی باشد.

۲-۱-۳- روش همگنسازی مرتبه دوم^{۱۱} روش ارتقا یافته همگنسازی مرتبه اول با نام همگنسازی مرتبه دوم [۳۶–۳۸] نیز توسعه داده شده است. این روش برای حل مسائل دارای گردایانهای تغییر شکل بزرگی که دقت اندازه گیری آنها باید در محدوده اندازه مقیاسهای ریز باشد، بکار می رود. در این روش موقعیت فعلی در مقیاس ریز بر

روش های عددی در مهندسی، سال ۴۲، شماره ۲، زمستان ۱۴۰۲

اساس گرادیان تغییر شکل مرتبه اول مقیاس درشت (**F**^M) و گرادیان تغییر شکل مرتبه دوم (**G**^M) مطابق رابطه (۹) محاسبه میشود.

$$d\mathbf{x}^{m} = \mathbf{F}^{M} d\mathbf{X}^{m} + \frac{1}{2} d\mathbf{X}^{m} \mathbf{G}^{M} d\mathbf{X}^{m} + d\boldsymbol{\omega}$$
 (۹)
که در این رابطه گرادیان تغییر شکل مرتبه دوم (**G**^M) مطابق
رابطه (۱۰) محاسبه می شود.

$$\mathbf{G}^{\mathrm{M}} = \nabla \mathbf{F}^{\mathrm{M}} \tag{(1 \circ)}$$

در روش همگنسازی مرتبه دوم در هنگام اعمال شرایط مرزی از مقیاس درشت بر روی مقیاس ریز، از تانسور گرادیان تغییر شکل \mathbf{F}^{M} و نیز گرادیان \mathbf{G}^{M} آن مطابق شکل (۸) استفاده می شود.

$$\mathbf{Q}^{\mathrm{M}} = \frac{1}{2\Omega_{\mathrm{e}}^{\mathrm{m}}} \int_{\Omega_{\mathrm{e}}^{\mathrm{m}}} (\mathbf{P}^{\mathrm{m}} \mathbf{X}^{\mathrm{m}} + \mathbf{X}^{\mathrm{m}} \mathbf{P}^{\mathrm{m}}) d\Omega_{\mathrm{e}}^{\mathrm{m}}$$
(11)

و اجزای تانسورهای مادی مرتبه چهار از دو رابطه (۱۲) و (۱۳) محاسبه می شوند:

 $\delta \mathbf{P}^{M} = \mathbf{D}^{h_{1}\mathbf{P}} : \delta \mathbf{F}^{M} + \mathbf{D}^{h_{2}\mathbf{P}} : \delta \mathbf{G}^{M}$ (17)

$$\delta \mathbf{Q}^{\mathrm{M}} = \mathbf{D}^{\mathrm{h}_{3}\mathbf{P}} : \delta \mathbf{F}^{\mathrm{M}} + \mathbf{D}^{\mathrm{h}_{4}\mathbf{P}} : \delta \mathbf{G}^{\mathrm{M}}$$
(17)

که مبتنی بر محاسبه **P^M طبق رابطه (۷) است.** روش همگنسازی مرتبه دوم بر اساس گرادیان تغییر شکل میتواند ساختارهای پیچیدهتر المان نماینده، رفتارهای غیرخطی



شکل ۸- حل مساله چند مقیاسی همگن سازی مرتبه دوم

جزئیات بیشتر به مرجع [۱۴] مراجعه شود.

شیوه همگنسازی غنی شده که توسط بایسته و همکاران توسعه پیدا کرده است، با استفاده از ایده غنیسازی، میدان کرنش موجود در المان نماینده در مقیاس کوچک را به مقیاس بزرگتر منتقل میکند. مراحل حل این روش در مرجع [۱۴] نشان داده شده است. در این روش علاوه بر اینکه انرژی کرنشی مقیاس درشت به کرنش مقیاس بزرگ وابسته است بلکه به عوامل مقیاس ریز که بر انرژی کرنشی اثرگذار است نیز وابسته است (شکل ۱۰).

این روش برای حل مساله ترک لبه نیز استفاده شده است. شکلهای (۱۱) و (۱۲) به ترتیب نمایی از مدلسازی مساله ترک و نحوه چیدمان المانهای نماینده در کل مدل و نتایج حاصل از شبیهسازی را نشان میدهند. از نتایج استفاده از این روش در مدلسازی ترک لبه میتوان به خطای ۸٪ در مقایسه با خطای /۷۵۷ روش همگنسازی مرتبه اول در تعیین میزان تنش فون میزس^{۱۳} نوک ترک اشاره کرد [۱۴].

۲-۲- روشهای چندمقیاسی دامنه مجزا

به طور کلی روش های چندمقیاسی همزمان دامنه مجزا که دو ناحیه پیوسته و اتمی را به یکدیگر متصل میکنند از جهت نوع اتصال دو ناحیه به دو دسته کلی تقسیم می شوند. دسته اول نظیر نرم شدگی، شکست و نقص را شبیهسازی نماید. روش همگنسازی مرتبه دوم میبایست دارای پیوستگی ^{C1} باشد که نیازمند تمهیدات ویژه برای تامین پیوستگی بین دو مقیاس درشت و ریز [۳۹] است.

۲–۱–۴– روش همگن سازی غنی شده ۲

در حل برخی مسائل ویژه، روش های متعارف همگن سازی مرتبه اول و دوم برای بیان ارتباط ساختارهای مقیاس درشت و مقیاس ریز دارای دقت کافی نمی باشد. به عبارت دیگر، فرمول بندی درگیر دو مقیاس نمی تواند فقط تابع شرایط گرادیان های اعمالی از مقیاس ماکرو باشد و لازم است متغیرهای مستقل وابسته به مقیاس میکرو هم در نظر گرفته شوند. به عنوان مثال، مساله همگن سازی در مجاورت نوک ترک و یا بدنه ترک نمی تواند تو سط اعمال یک میدان گرادیان جابجایی یکنواخت بدست آمده از مقیاس درشت بر روی مقیاس ریز محاسبه شود. در این حالت می بایست میدان بدست آمده از مقیاس درشت، مقیاس ریز و نوسانات ناشی از کینماتیک مقیاس درشت در فرمول بندی همگن سازی منظور گردند [۴۰].

شکل (۹) دو الگوی مبتنی بر ماکرو و میکرو را در همگنسازی محاسباتی به اختصار ارائه و مقایسه مینماید. برای



شکل ۹– راست) همگنسازی محاسباتی مبتنی بر رفتار مقیاس میکرو، چپ) همگنسازی محاسباتی مبتنی بر رفتار مقیاس ماکرو [۱۴]



شکل ۱۰ – مراحل حل روش همگنسازی غنی شده [۱۴]



شکل ۱۱- حل مساله ترک لبه با روش همگن سازی غنی شده [۱۴]

روشهایی هستند که بدون ناحیه انتقال، دو محیط پیوسته و اتمی را به یکدیگر متصل میکنند. دسته دیگر این دو محیط را به

کمک ناحیه انتقال^{۱۴} به یکدیگر متصل میکنند. شکل (۱۳) دو گونه متفاوت این روشها را نشان میدهد. در این شکل $\Omega_{
m A}$



شکل ۱۳– شمای کلی دو روش چندمقیاسی همزمان دامنه مجزا الف) دارای ناحیه انتقال ب) بدون ناحیه انتقال

ناحیه اتمی، Ω_C ناحیه پیوسته و Ω_T ناحیه انتقال است. هیچ یک از این دو دسته در حالت کلی برتری خاصی نسبت به دیگری ندارد، اما نوع ارتباط و فرضیات حاکم در روشهای مختلف، تفاوتهایی را در بین روشها ایجاد میکنند که برخی از این روشها را کارآمدتر از سایرین میکند.

انطباق و یا عدم انطباق موقعیت اتمهای ناحیه Ω_A با درجات آزادی ناحیه پیوسته Ω_c در هر یک از دو دسته دارای ناحیه انتقال و یا بدون ناحیه انتقال، تاثیر بسزایی در دقت و کارآمدی روش چندمقیاسی دارد. شکل (۱۴) بطور نمادین انواع پیوند ناحیه اتمی و پیوسته را با در نظر گرفتن انطباق و یا عدم انطباق اتمها و درجات آزادی نشان می دهد. چنانچه اتمهای ناحیه Ω_A بر روی گرههای ناحیه Ω_c قرار داده شوند و پیوسته بطور کامل برقرار می شود که به آن سازگاری قوی اطلاق می شود. در صورت عدم انطباق، سازگاری موجود از

جنس سازگاری ضعیف است. اگرچه روشهای با سازگاری قوی، دقت بسیار بالایی در پیوند دو ناحیه دارند اما اتصال تمامی درجات آزادی ناحیه پیوسته به اتمهای آن، مستلزم الگوریتم پیچیده ریز کردن مش است که در صورت تغییرات مشبندی جهت برقراری سازگاری قوی، هزینه محاسباتی را به شدت افزایش می دهد.

متناسب با مادهای که در ناحیه اتمی وجود دارد ممکن است نیاز به تکمیل لیست همسایگی اتمهای ناحیه Ω_A برای محاسبه پتانسیلهای بین اتمی باشد. دراین صورت، برای کاهش میزان خطا از یک سری اتم در ناحیه پیوسته (Ω_C) و در مجاورت ناحیه انتقال استفاده می شود که لیست همسایگی اتمهای موجود در ناحیه اتمی (Ω_A) و اتمهای ناحیه انتقال (Ω_T) را تکمیل کند. این اتمها که در شکل (۱۴) با دایرههایی به رنگ خاکستری نشان داده شده است، اتمهای مجاور^{۱۵} نامیده می شوند.



شکل ۱۴– موقعیت اتمها و درجات آزادی ناحیه پیوسته، الف) با انطباق کامل، ب) بدون انطباق



شکل ۱۵– موقعیت اتمهای لایه مجاور در دو حالت الف)بدون ناحیه انتقال، ب) با ناحیه انتقال

همان گونه که در شکل (۱۵) نشان داده شده است، اتم A در هر دو حالت بدون ناحیه انتقال و با ناحیه انتقال، دارای لیست همسایههای کامل است که تمامی آنها دارای درجه آزادی هستند اما لیست همسایههای اتم B، با اتمهای آزاد کامل نمی شود و می بایست تعدادی اتم مجاور جهت تکمیل شدن لیست همسایهها به مدل اضافه شود. اتمهای مجاور در هیچیک از روشهای چندمقیاسی دارای درجه آزادی مستقل نیستند. میزان جابجایی این اتمها در هر گام بر اساس فرضیههای حاکم و متناسب با نزدیکترین درجه آزادی به آنها تعیین می شود.

از دیگر تفاوتهای اساسی بین روشهای چندمقیاسی همزمان، توجه به نوع حل معادلات حاکم است. در روش اول، معادلات انرژی کمینه میشود، در حالی که در روش دوم تعادل نیرویی برقرار میشود. هر چند که احتمال همگرایی در کمینه – سازی انرژی بیشتر از حالت برقراری تعادل نیرویی است، اما در کمینهسازی انرژی در برخی از روشها نیروهای زائد غیرفیزیکی ایجاد میشوند [۴۱] که وجود آنها سبب کاهش اضافی غیرفیزیکی ایجاد نمیشود، اما ممکن است در برخی موارد روش همگرا نگردد [۴]. عدم همگرایی در صورتی ممکن است رخ دهد که تعادل نیرویی در نقاط اکسترمم تابع پتانسیل و

نقاط عطف رخ دهد. در شیوه کمینهسازی تابع انرژی، انرژی کل محیط П از رابطه (۱۴) محاسبه می شود: $\Pi = \Pi_A + \Pi_C + \Pi_T$ (14) در این رابطه $\Pi_{\rm A}$ انرژی ناحیه خالص اتمی و $\Pi_{\rm A}$ انرژی ناحیه خالص پیوسته است. Π_{T} در روشهای دارای ناحیه انتقال، همان انرژی ناحیه انتقال است. مقدار این انرژی در روشهای بدون ناحیه انتقال صفر است. در این روش، П نسبت به جابجایی بر اساس رابطه (۱۵) کمینه می گردد. (10) $\min_{\mathbf{u}} \Pi \rightarrow \mathbf{u}(\mathbf{x})$ در شیوه برقراری تعادل نیرویی، نیروها توسط رابطه (۱۶) محاسبه می شود. در این رابطه u بردار جابجایی درجات آزادی اتمی و پیوسته است که با حل معادله رابطه (۱۶) محاسبه می گر دد. $\mathbf{f} = \frac{\partial \Pi}{\partial \mathbf{u}}$ (19) که در آن **u** بردار جابجایی درجات آزادی اتمها و درجات آزادی گرهها در بخش پیوسته (FE) است. در راستای بررسی دقیقتر روشهای ذکر شده، علاوه بر مرور ادبیات فنی در خصوص استفاده از روش های چندمقیاسی



شکل ۱۶– مشخصات هندسی ورق آلومینومی دارای ترک



شکل ۱۷ – ایجاد صفحات لغزش با شکل گیری نابجایی

همزمان دامنه مجزا در مدلسازی ترک، با کمک برخی از روشهای مندرج در جدول (۱)، یک ورق آلومینیومی به عرض و طول ۲۰۰ آنگستروم دارای ترک لبه به طول ۱۰۰ آنگستروم را با کمک تابع پتانسیل EAM [۲۴] مدلسازی و مطالعه شده است. در ساختار کریستالوگرافی مواد تعداد ۱۱۶۶۹ اتم آلومینیوم با محور افقی بر روی امتداد (۱,۱,۱) و محور قائم بر روی امتداد (۱,۱,۰) مدل شده است. مشخصات هندسی و نوع بارگذاری ورق در شکل (۱۶) نشان داده شده است.

این ورق در امتداد قائم در معرض یک جابجایی با نرخ ثابت قرار میگیرد تا اولین نابجایی در آن شکل بگیرد. بعد از

شکل گیری نابجایی، رفتار گسترش ترک و نیز میزان انرژی کل سیستم ارزیابی می گردد. برای راستی آزمایی نتایج بدست آمده و ایجاد یک معیار قابل قبول جهت محاسبه خطاها، مثال مذکور ابتدا با روش استاتیک مولکولی تک مقیاسی مدل شده است. در این شیوه انرژی پتانسیل کل مساله که بصورت تمام اتمی مسطح مدلسازی شده است کمینه می گردد که می توان آنرا به یک مساله سهبعدی با یک بعد بی نهایت نیز تعمیم داد.

بعد از اعمال جابجایی در امتداد قائم، اولین نابجایی با زاوبه ۴۵ درجه از نوک ترک ایجاد می شود و باعث یک افت در سطح نمودار انرژی شود. شکل (۱۷) میزان جابجایی در هر



شکل ۱۸– چگالی انرژی کرنشی، چپ) قبل از تشکیل نابجایی، وسط) همزمان با تشکیل نابجایی ، راست) بعد از تشکیل نابجایی



شکل ۱۹– نمودار مجموع نیروی بین اتمی تمام اتمها در واحد ضخامت برای روش استاتیک مولکولی

سه راستا را نشان میدهد.

با ترسیم چگالی انرژی کرنشی نمونه میتوان به تغییرات رفتار اتمها و ایجاد اغتشاش و بینظمی در ساختار کریستالی مواد فلزی پی برد. مطابق شکل (۱۸)، با تغییر سطح تنش در مجاورت نوک ترک و نیز در مسیر نابجایی چگالی انرژی کرنشی نیز افزایش مییابد.

با اعمال جابجایی بیشتر شبیه سازی ادامه پیدا می کند و میزان بازشدگی ترک بر روی دو ضلع بالا و پایین مدل نیز افزایش می یابد. با توجه به این که معیار مجموع نیروی بین اتمی می تواند به عنوان یک معیار مناسب جهت سنجش اولیه و مقایسه روش های مختلف مورد استفاده قرار گیرد، نمودار

مجموع نیروی بین اتمی در واحد ضخامت یک لایه آلومینیوم (۴.۹۳۸ آنگستروم) بر حسب میزان جابجایی اعمال شده، برای مدل تمام اتمی در شکل (۱۹) ترسیم میگردد و در ادامه برای سایر روشها نیز این نمودار استخراج ونتایج آنها با یکدیگر مقایسه میشود.

میزان خطای محاسبه نیروی بین اتمی در هر گام در هر یک از روشهای چندمقیاسی بر اساس رابطه (۱۷) محاسبه می شود که در آن اندیس i نشان دهنده گام بارگذاری است و $f_i^{Multiscale}$ و f_i^{MS} به ترتیب بیانگر میزان نیروی بین اتمی در گام بارگذاری *i*ام برای مدلسازی چندمقیاسی ومرجع استاتیک مولکولی است.

$$\text{Error} = 100 \times \sqrt{\frac{\left\| \mathbf{f}_{i}^{\text{Multiscale}} - \mathbf{f}_{i}^{\text{MS}} \right\|^{2}}{\left\| \mathbf{f}_{i}^{\text{MS}^{2}} \right\|}}$$
(1V)

۲–۲–۱– روش شبه پیوسته

روش شبه پیوسته توسط تادمور^{۹۰} و همکاران در سال ۱۹۹۶ ارائه شد [۴۳]. این روش امروزه آنچنان جایگاهی پیدا کرده است که در مدلسازی های بسیار زیادی مورد استفاده قرار گرفته است. به طوری که بر اساس اطلاعات منتشر شده در وب سایت رسمی آن [۴۴]، بیش از ۳۰۰ مقاله با کمک این روش منتشر شدهاند.

روش شبه پیوسته در شبیه سازی های مختلفی نظیر گسترش ترک [۴۵–۴۸]، پدیده نانو نفوذ [۴۹–۵۱]، بررسی مواد با ساختار نامنظم [۵۲]، پدیده خستگی [۵۳ و ۵۴]، نانو تماس [۵۵]، مدلسازی مرزدانه [۵۶–۵۸] و اثر سطح [۵۹] استفاده شده است. شکل (۲۰) نمونه های مدلسازی پدیده های مختلفی با روش شبه پیوسته را نشان می دهد.

در سالهای اخیر محققین بسیاری بر روی توسعه روش شبهپیوسته کار کردهاند. توسعه روش شبهپیوسته برای مدلسازی در دمای بالا [۶۰ و ۶۱]، استفاده از روش کوشی بورن مرتبه بالا [۶۲ و ۶۳]، بکارگیری روش بدون المان در روش شبهپیوسته [۶۴]، تعریف قواعد جدید برای انتخاب اتم نماینده [۵۵ و ۶۶]، ابداع الگوریتم حذف نیروهای زائد [۶۷ و ۶۸]، مدلسازی آلیاژهای حافظهدار شکلی [۶۹] و مدلسازی مواد با ساختار مرکب [۷۰ و ۷۱] از جمله این تحقیقات است.

استفاده از روش شبه پیوسته در حل مسائل ترک نیز مورد استقبال محققین قرار گرفته است. بررسی وضعیت شکلگیری ترک و گسترش آن با کمک روش شبه پیوسته در فلزات با ساختار اتمی BCC در مطالعات لو و لی [۷۲] و واتنه و استبای [۷۳] و شبیه سازی در ساختارهای FCC در مطالعات شائو و ونگ [۷۴] و بررسی جزئیات کریستالی (شکل ۲۱) در نوک ترک در مطالعات اخوان و همکاران [۷۵] دیده می شود.

استفاده از روش چندمقیاسی همزمان شبه پیوسته در

مدلسازی رفتار ترک در مواد چندلایهای^{۲۱} در پژوهشهای چنگ داوو و همکاران [۷۶] برای شبیه سازی رفتار ترک بین لایه ای فلزات و دریافت مشخصات مکانیکی مواد تحت کشش، پژوهش وئو و فنگ [۷۷] برای بررسی تاثیر طول اولیه ترک و جهت گیری اولیه کریستال های مواد در گسترش ترک و مشخصات مواد لایه ای، دیده می شود. علیزاده و همکاران [۵۴]

در یک پژوهش، گسترش ترک بین لایهای تحت بار چرخهای را به کمک روش شبهپیوسته مدلسازی نمودند. در این پژوهش، رژیم گسترش ترک با رابطه پاریس مقایسه شد و رفتار تولید و انتشار نابجایی از جنس نیمه نابجاییهای شاکلی مورد بررسی قرار گرفته است. شکل (۲۲) نمایی از این شبیهسازی را نشان میدهد.

استفاده از روش شبه پیوسته برای مدلسازی گسترش ترک در بارهای خستگی و چرخهای در پژوهش های رن ژنگ کیو و همکاران [۵۳] در مدلسازی رفتار گسترش ترک در دو ماده نیکل و آهن تحت بار چرخهای در مود اول و دوم با کمک روش شبه پیوسته نیز دیده می شود. در این مقاله، به تاثیر بهم آمیختگی و در هم تنیدگی نابجایی ها در نوک ترک در شکست ترد یا شکل پذیر ترک اشاره شده است. پرداختن به شکل گیری و حرکت نابجایی ها از نقاط قوت روش شبه پیوسته در مقایسه با سایر روش هاست.

در روش شبه پیوسته، شبکهای از اتمها مدل می شود و انرژی کل سیستم توسط انرژی اتمها محاسبه می گردد. انرژی یک شبکه تمام اتمی نظیر شکل (۲۳) توسط رابطه (۱۸) تعریف می شود.

$$\Pi = \Pi_{A} = \sum_{i=1}^{N^{acoun}} \Psi_{i} \tag{1A}$$

که در آن Ψ_i انرژی اتم i است که از طریق پتانسیل بین اتمی بدست می آید و N^{atom} تعداد کل اتم های موجود در دامنه است. این اتم ها بصورت دایره های آبی رنگ در شکل (۲۳) نشان داده شده اند.







شکل ۲۰- نمونه های مدلسازی با کمک روش شبه پیوسته، الف)مدلسازی اثر سطح [۵۹]، ب) مدلسازی مرزدانه [۵۸]، ج) گسترش ترک خستگی[۵۴]، د)مدلسازی مواد با ساختار نامنظم [۵۲]، ه) مدلسازی نانو نفوذ در سطح صاف [۵۰]، و)مدلسازی نانو نفوذ در سطح زبر[۵۱]



شکل ۲۱– بررسی وضعیت ساختارهای کریستالی درن نوک ترک با کمک روش شبه پیوسته [۷۵]



شکل ۲۲- وضعیت اتم ها در مدلسازی ترک بین لایهای تحت بار چرخهای، چپ) شرایط اولیه، راست)انتهای سیکل اول [۵۴]



شکل ۲۴ – نمایش روش شبه پیوسته

نواحی دورتر ابعاد المانها افزایش داده میشود. اتمهای داخل المانها درجه آزادی مستقل ندارند. به این ترتیب درجات آزادی مساله محدود به درجات آزادی گرههای شبکه می شود. همانگونه که در شکل (۲۴) دیده می شود، ابعاد المانهای

در روش شبهپیوسته برای آنکه از تعداد درجات آزادی کاسته 💿 حد اندازه پارامتر شبکه اتمی^{۱۸}در نظر گرفته میشود و در شود، یک شبکه از المانها بهگونهای که گرههای آن بر روی اتمها منطبق باشند ایجاد میگردد بطوری که کل دامنه توسط المانهای مثلثی شبکهبندی شود. در نواحی که دقت اتمی مورد نیاز است و پدیدههای غیرخطی و نواقص^{۷۷}مادی (نظیر ترک در وسط شکل ۲۴) در آن موجود است ابعاد المانهای شبکه در



الف شکل ۲۶– نمایش حجم ویگنر-سیز در مدل سه بعدی [۷۸]، الف) ساختار BCC، ب) ساختار ۲۷[۷۹]

مثلثی در مجاورت تَرک (وسط شکل) به اندازه پارامتر شبکه هستند و به تدریج با دور شدن از ناحیه دارای نقص ابعاد مثلثها افزایش پیدا میکند. با تقسیمبندی کل دامنه به دو ناحیه مثلثها افزایش میدا میکند. ابا تقسیمبندی کل دامنه به دو احیه مثلثها افزایش پیدا میکند. با تقسیمبندی کل دامنه به دو ابعه بازنویسی کرد.

$$\sum_{i=1}^{N^{atom}} \Psi_i = \sum_{i \in A_a} \Psi_i + \sum_{i \in A_c} W(\mathbf{F}(\mathbf{u})) \Omega_i$$
(14)

در رابطه (۱۹) جمله اول بیانگر انرژی ناحیه دارای نقص با شبکهبندی در ابعاد اتمی (Π_A) و جمله دوم بیانگر انرژی ناحیه دارای شبکهبندی بزرگتر (Π_C) است. A_a و A_c به ترتیب نماینده مجموعه اتمهای موجود درناحیه اتمی و پیوسته هستند. در محاسبه Π_C عبارت W(F(u)) انرژی چگالی کرنشی است که به بردار تغییر شکل المانی که اتم در آن قرار دارد وابسته است. Ω_i حجم ویگنر-سیز^{۱۹} اختصاص یافته به هر

اتم [۷۸] است که در یک مدل دو بعدی، مطابق شکل (۲۵)، محدوده محصور بین عمود منصف خطوط واصل بین آن اتم و اتمهای مجاور است. حجم ویگنر-سیز در فضای سهبعدی همان محدوده

محصور بین صفحات عمود بر وسط خطوط واصل بین آن اتم و اتمهای مجاور است. شکل (۲۶) حجم ویگنر-سیز برای دو ساختار اتمی فلزی متفاوت را نشان میدهد [۷۹].

با شمارش تعداد اتمهای موجود در هر المان و در نظر گرفتن حجم اختصاص یافته به هر کدام از اتمها، انرژی کل المان قابل محاسبه است. به عبارت دیگر جمله دوم رابطه (۱۹) به جمع بر روی المانها تغییر خواهد کرد:

$$\sum_{i=1}^{N} \Psi_{i} = \underbrace{\sum_{i \in A_{a}} \Psi_{i}}_{\Pi_{A}} + \underbrace{\sum_{e \in S_{c}^{e}} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}))\Omega_{e}}_{\Pi_{C}}$$
(Y •)

که در آن $\mathbf{S}^{ ext{e}}_{ ext{c}}$ مجموعه المانهای ناحیه $\mathbf{\Omega}_{ ext{c}}$ است و

Natom



شکل ۲۷– نمای اولیه مدل شبه پیوسته مساله ترک لبه ورق آلومینیومی

برابر است. در $N_e^{atom}\Omega_i$ با عبارت Ω_e برابر است. در Ω_e این رابطه N_e^{atom} تعداد اتمهای المان e است.

جهت محاسبه انرژی کرنشی المانهای ناحیه Ω_C در روش شبهپیوسته، اتم نماینده^{۲۰} تعریف می گردد. اتم نماینده در داخل المان قرار می گیرد و انرژی آن بعد از محاسبه به کل المان تعمیم داده می شود. توضیحات کامل در ارتباط با اتم نماینده در بخش ۵-۲-۲ آورده شده است.

در راستای بررسی بیشتر روش شبه پیوسته، مساله ورق آلومینیومی دارای ترک گوشه مطرح شده در بخش ۲-۲ توسط این روش نیز مدلسازی می شود. در ابتدا تعداد ۱۹۷۴ گره دارای درجه آزادی برای ۱۱۶۶۹ اتم ایجاد می شود. شکل (۲۷) نمای اصلی المان بندی مساله ترک لبه با کمک روش شبه پیوسته را نشان می دهد.

همان گونه که از روش شبهپیوسته انتظار می رود، با اعمال جابجایی بر روی دو انتهای ورق در امتداد قائم، تنش در نوک ترک رو به افزایش خواهد بود تا جایی که اولین نابجایی تولید شود. با ایجاد اولین نابجایی، الگوریتم خودکار ریزنمودن مش اجرا می گردد و در نواحی نوک ترک و نزدیک نابجایی ساختار مش بندی مساله در حد ابعاد شبکه اتمی فلز آلومنیومی ریزتر شده است. شکل (۲۸) پیدایش اولین نابجایی را نشان می دهد. همزمان با شکل گیری و حرکت نابجایی، روش شبهپیوسته

محدوده نزدیک به نوک ترک و نابجایی را ریزتر میکند تا اثرات رفتار غیرخطی نابجایی را ثبت نماید. از این رو با گسترش نابجایی، بر تعداد المانهای مدل افزوده می شود و ناحیه دارای مش بندی ریز گسترش می یابد.

شکل (۲۹) کانتورهای تنش قائم را در هر سه مرحله تحلیل نشان میدهد. همانگونه که پیداست با ایجاد و حرک نابجایی، میدان تنش دارای آشفتگی میشود. این آشفتگی متناسب با نوع و ساختار کریستالی ماده میتواند میزان بیشینه تنش و موقعیت آن را تغییر دهد و در مواد فلزی بسته به رفتار شکل پذیر و یا ترد ماده که به ساختار کریستالی نیز مرتبط است، این افزایش تنش باعث ایجاد خرابی و یا ترک در مدل میشود. شکل (۲۹) رفتار شکل پذیر نوک ترک را نشان میدهد. همانگونه که در این شکل دیده میشود با ادامه شبیه سازی، با اینکه ترک رشد زیادی نمی کند ولی دو لبه ترک از همدیگر فاصله می گیرند و باقی میماند. ساختار کریستالی اتم آلومینیوم با محور افقی بر روی امتداد (۱,۱,۱) و محور قائم بر روی امتداد (۰,۱,۱–

تشکیل نابجایی زمانی قابل تشخیص است که ساختار کریستالی در مواد دارای یک صفحه مازاد بر صفحات طبیعی باشد. در شکلهای (۳۰) و (۳۱)، به ترتیب ایجاد صفحات لغزش



شکل ۲۸– گسترش نابجایی در روش شبه پیوسته از نوک ترک در سه مقطع مختلف از شبیهسازی



SYY -0.025 -0.005 0.015 0.035

شکل ۲۹– تنش قائم در روش شبه پیوسته در سه مقطع مختلف از شبیهسازی



شکل ۳۰- تشخیص اولین نابجایی تشکیل شده



شکل ۳۱– توزیع تنش پیرامون نابجایی اول در زمان پیدایش نابجایی دوم



شکل ۳۲- نمودار مجموع نیروی بین اتمی تمام اتمها در واحد ضخامت برای روش QC



شکل ۳۳- نمودار مجموع نیروی بین اتمی تمام اتمها در واحد ضخامت برای روش QC

در زمان تشکیل اولین نابجایی و توزیع تنش در مجاورت نابجایی اول در زمانی که نابجایی دوم شکل گرفته است به تصویر کشیده شده است. نابجاییهای نمایش داده شده دارای دو جهت مختلف تنش هستند که باعث حرکت آنها در سطح ماده می شود.

شکلگیری نابجایی با کاهش سطح انرژی داخلی همراه است چرا که لغزش حاصل از شکلگیری نابجایی باعث آزاد شدن انرژی میگردد. بنابراین با رسم نمودار انرژی داخلی بر حسب جابجایی اعمالی میتوان آستانه وقوع نابجاییها را نیز تشخیص داد. همانگونه که در شکل (۳۲) نمایش داده شده

است، نوسان ایجاد شده در نمودار بدلیل ایجاد نابجایی در ساختار ماده است.

میزان خطای مجموع نیروی بین اتمی در هر گام نسبت به روش مرجع استاتیک مولکولی مطابق رابطه (۱۲) محاسبه شده است و در شکل (۳۳) نشان داده شده است. حداکثر خطا به میزان حدوداً ۵٪ زمانی اتفاق میافتد که نابجایی شکل میگیرد. بعد از شکل گیری نابجایی شبکه مشربندی تغییرات اساسی میکند که منشا ایجاد این خطاست. اما بعد از گذشت چند گام حل در شبیهسازی میزان خطا در مقایسه با روش استاتیک مولکولی کاهش چشم گیری پیدا میکند و به کمتر از ۱٪ میرسد.



شکل۳۴- نمایش روش پیوند اتم و نابجایی

با توجه به این شاخصها خطای روش شبهپیوسته در مقایسه با روش استاتیک مولکولی مناسب ارزیابی می شود.

۲-۲- روش پیوند اتم و نابجایی^{۲۲}

این روش در سال ۲۰۰۲ توسط شیلکروت^{۳۳} و میلر^{۲۴} ارائه شد [۸۰ و ۸۱]. ایده اصلی روش بر این استوار است که امکان ایجاد نابجایی و عبور آن از مرز مشترک ناحیه اتمی و پیوسته فراهم شود. در این روش اتمهای مجاور ناحیه اتمی (قسمت متراکم شبکه اجزا محدود) که در شکل (۳۴) نشان داده شدهاند، وظیفه تکمیل لیست همسایگی را دارند. از آنجا که ناحیه اتمی برای گرفتن نتایج دقیق همواره در مجاورت نقصهای موجود در ماده و مدل اعم از ناپیوستگی، ترک، نابجایی و وجود لایه-های مختلف قرار دارد، لذا تولید نابجایی از ناحیه اتمی شروع میشود و این نابجاییها به سمت ناحیه پیوسته حرکت میکنند. در این روش از یک باند جهت تشخیص وجود نابجایی در ناحیه اتمی استفاده میشود.

این روش با برهم نهی میدان الاستیک ناشی از نابجایی در محیط بینهایت و حل اجزا محدود ناحیه پیوسته، اثرات نابجایی را لحاظ میکند. در روش پیوند اتم و نابجایی، ابتدا میدان جابجایی ناشی از وجود نابجایی در یک محیط بینهایت توسط تئوری الاستیسیته تعیین میشود و سپس اثرات نابجایی بر روی مرزهای ماده بطور کامل مشخص میگردد. این اثرات

به کمک نیرو و جابجایی در شکل (۳۵) در بخش (I) نشان داده شده است. در مرحله بعد، ناحیه پیوسته با در نظر گرفتن مرز کاملا صلب در ناحیه اتصال به اتمها، بگونهای مدل می شود که نتایج برهم نهی بخشهای (I) و (II) شکل (۳۵) هیچ گونه نیرو و یا جابجایی اضافی را به مدل تحمیل نکند. بخش (III) از شکل (۳۵) نمایانگر مدلسازی ناحیه اتمی است. اثرات ثابت نمودن مرز مشترک بصورت یک نیرو بر روی این ناحیه اعمال می شود و سایر نیروها و جابجایی های مساله نیز بر روی ناحیه اتمی اتمال می شوند. بنابراین پاسخ (میدان جابجایی) بدست آمده از روش پیوند اتم و نابجایی، همان مجموع جابجایی های دو بخش (I) و (II) در ناحیه پیوسته و بخش (III)) در ناحیه اتمی می باشد.

هرچند که توسعه روش پیوند اتم و نابجایی برای حل مسائل سه بعدی دارای پیچیدگیهای متعددی بوده است اما در سال ۲۰۱۸، آنسیائوکس و همکاران [۸۲] تئوری و الگوریتم توسعه روش به سه بعدی را ارائه نمودند و از آن برای شبیهسازی مواد با ساختار بلوری پیچیده و تعامل بین نابجاییها و اتمها استفاده نمودند. در ادامه این تحقیقات، هوداپ و همکاران [۸۳] روش سه بعدی پیوند اتم و نابجایی را پیادهسازی نموده و به اعتبارسنجی روش پرداختند و با مقایسه نتایج شبیهسازیهای سه بعدی با دادههای آزمایشگاهی نشان



شکل ۳۵– روند حل روش پیوند اتم و نابجایی، الف) کل دامنه پیوسته، ب) دامنه پیوسته با اثرات ناحیه اتمی، ج) ناحیه اتمی

VN	N	\sim	N	$ \bigtriangleup $	Δ	1	V	V	T	5	D	Δ	1		Δ	Z				Δ	4	V	V	\vee	D	Δ	2	N	5	N	Z
N	N	N	N		N	V	1	1	N		Ν		Ν		\mathcal{N}	V			N	V	Z	V	5	7	2	Ν	Ν	Ν		N	ß
N	SN	22	\square	N		N	1	20	D	\square	Z	Z			2	Z	\leq			Z	Z	Ϋ́	5	P	D	Z	Z	\square	Z	Z	Ľ
N	W	V	N	1	\square	V	V	5	2	2	Δ	\mathbb{N}	\mathbb{N}	N	1	V	1	\square	N	V	V	V	5	5	2	\square	Δ	\square	1	N	Đ
N	N	Y	2	5		20	32	1	0	0	2	2	2		2	N	\leq		\square	И	2	1	5	1	D	0	0	\square	0	\square	£
N	W	V	\square	2	\square	Y	Y	5	0	2	\square	7		N	\mathbf{Y}	N	1		N	И	N	2	2	P	1	0	Δ	2	2	\square	D
AN A	X	X	P	0	9	X	¥	X	4	9	9	2	2	N	7	Ц	2	A	N	Ц	Ц	Ł	2	P	4	4	4	4	0	2	ç
N	\overline{M}	11	\square	2	\square	Y	7	XV	17	5	17	\square	\geq	N	\geq	Ц	\geq	\square	N	И	Ы	AL	1	1	17	0	D	2	2	\square	Ľ
A A	KK.	£	P	0	P	X	¥	X	0	Ð	4	4	2	N	N	Ч	2	P	N	Ч	Ч	£	X	£	4	4	4	4	2	2	Ŗ
	11	10	17	2	\square	7	Х	10	1	0	5	2	2	N	\geq	Ц	2		N	И	И	10	1	1	17	0	\square	\square	2	\square	Ľ
2	KK	æ		0		H	¥	X	8	0	4	0	2	R	Н	Ч	2		Н	Ч	X	¥	2	£	0	9	9	$\left(\right)$	2	0	R
XX	44	X	N	0	2	X	¥	X	4	0	4	5	2	N	7	Ц	2	2	И	X	Y	Æ.	10	\$	4	2	2	2	2	Δ	ų
22	KK	X	0	0	R	X	×	ж	ю	0	R	0	9	0	Э	9	2	2	9	Н	4	ж	*	€	0	6	6	R	0	0	Ř
2	KK	X		0	2	2	X	R	2	2	R	0	2	2	2	2	2	0	N	2	4	X	X	*	2		P)		2	2	H
2	88	X	R	0	0	C/	X	X	R	0	Ð	\ominus	Ð	\ominus	Э	3	\rightarrow	0	9	4	4	ж	K	₩	8	6	0	R	0	0	k
2	83	æ	R	0	9	R	X	ж	K	主法	ÉĚ	ЬŠ	关	識	à	鰦	鰦		9	A	A	X	K	÷	ł	6	6	R	0	Ð	k
24	11	R	R	0	Q	7	ħ	X	K										9	a	3	ж	K	K	R	R	6	R	0	R	ŝ
2	44	æ	Ю	0	R	R	¥	ж	K€										4	A	9	ж	K	ĸ	*	6	6	R	0	0	k
1	\mathcal{M}	\mathcal{X}	0	\bigtriangledown	2	72	Ż	ж	10	182	88	錢	8						ौ	Ť,	Ť.	Ť	X	T	1	R	D		0		h
								_					1					K I	M	V	VI.	1	11		N	N	Ν	$ \lambda $	1	$ \lambda $	ł
30	334	X	R	P	Q	R	¥	R	R									2	4	ð	ी	k	K	¥	K	R	Ю	R	2	Ю	K
100	11	X	R	0	2	7	ð	R	K				8		8			₹	đ	đ	3	Ť	K	K	R	R	R	R	2	R	k
30	11	K	ю	0	R	¢,	÷	ж	K									2	đ	ते	đ	Ъ	X	ж	K	ю	6	ю	0	R	k
1	17	R	Ю	2	7	47	٦,	Т,	K	198	铗	X	笐	X	刑	荒	R	7	2	4	Q.	٦b	X	π	R	R	2	R	7	R	ŝ
3	94	Ř	R	2	9	4	ð	Зr.	K	R	R	9	9	0	4	9	2	9	4	9	4	t	X	X	K	R	6	R	2	Ŕ	h
N	11	77		7		2	T	1	Σ	N	Ν	$\overline{\ }$	7		V	2	2	N	V	7	7	1	N	N	N	Ν	Ν	N	7	N	ā
J J	27	1	N	R	N	1		1	N	K	R	Z	Ø	N	đ	Q	2	N	N	đ	4	d'	1	T	N	K	R	N	2	N	b
	N	N		1	N	Z	T	1	Л	N	Ν	Ν		N	V	J	\leq	N	V	J	V	T	1	V	N	Ν	7		1	N	ñ
	V	4		7		4	d,	5	N	N	N	N	7	N	2	2				2	4	1	5	7	7		Z		1		ē
N	N	N	N	1	N	V	5	5	N	N	N	N		N	1	V	1	N	V	V	V	5	5	N	N	N	N	N		N	ľ
	N	N	N	5		Z	S.	1	D				Z	N	$\overline{2}$	Z	5			Z	7	1	5	P	D	Z			1		Ľ
N	N	N	N	1	N	V	5	5	N	N	N	N	N	N	1	N	1	N	N	M	V	1	5	5	N	N	N	N		N	ľ
N	N	N				N	T	Ż	D		D		N		2	Д	\leq			2	2	T.		P	D	D	D		\leq	\square	Ľ
N	N	V	N		N	V	1	5	\mathbb{D}	2	Ν	N		N		V	1			V	V	P	5	1	N	N	Ν			\square	£
	N	V		2	2		12	4	1	N	1	N	N	N	2	N	5	\square	N	Z	Z	1	5	P	2	5	ß	D	5	N	l
N	VV	V	N		N	V	5	V	2	2	N	1	N	N	1		1		N	V	V	1	5	5	2	2	N	2	1	N	ĺ
N	N	V	N	0		N	1	1	D		D	D			N	N	1	N	N	2	V	1	5	1	1	D	N	D	2	D	Ľ
N	VV	V	N	1	N	V	1	S	N	2	N	1	N	N	1	N	1	N	N	V	N	1	5	5	5	D	N	N	1	N	Ē
		_			_																										

شکل ۳۶– مدلسازی ورق آلومینیوم دارای ترک لبه با روش پیوند اتم و نابجایی

بالا و درصد خطای کم، مناسب است. در ادامه، چو و همکاران [۸۴] به بررسی دینامیک نابجاییهای هیبریدی در روش پیوند اتم و نابجایی سه بعدی در مواد با ساختار بلوری پیچیده پرداختند.

روش پیوند اتم و نابجایی در مسائل نانو نفوذ در ابتدای پیدایش روش توسط میلر و همکاران [۸۵ و ۸۶] بکار گرفته شد. همچنین، این روش برای مدلسازی نابجایی و پلاستیسته از ابتدای پیدایش مورد استفاده قرار گرفته است اما در خصوص مسائل مربوط به ترک و مدلسازی آن این روش دارای

محدودیتهای فراوانی است.

برای بررسی روش پیوند اتم و نابجایی، مساله ورق آلومینیومی دارای ترک لبه با کمک کد ارائه شده در مرجع [۴۱] مدلسازی شده است (شکل ۳۶).

نمودار نیرو بر حسب گامهای بارگذاری در شکل (۳۷) نشان داده شده است. همان طور که میزان خطا در شکل (۳۸) نشان میدهد حداکثر خطا مربوط به گام ۲۴ام و به میزان ۷٪ است که از بیشینه خطای روش شبه پیوسته (۵٪) بیشتر است. همچنین زمان شبیه سازی با کمک روش پیوند اتم و



شکل ۳۸– نمودار خطای نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش پیوند اتم و نابجایی



شکل ۳۹- چگالی انرژی کرنشی، چپ) قبل از تشکیل نابجایی، وسط) همزمان با تشکیل نابجایی، ج) بعد از تشکیل نابجایی

نابجایی از روش شبهپیوسته بیشتر است. در شکلهای (۳۹) و (۴۰) به ترتیب نمودارهای چگالی انرژی کرنشی و جابجایی نشان

داده شدهاند. در این دو شکل با تشکیل اولین نابجایی میدان اتمی دچار تغییرات وسیعی میشود. اما در ادامه نابجایی دوم





شکل ۴۱– نمایش روش ارتباط مقیاس ها

برخلاف پیشبینی مدل شبهپیوسته و تمام اتمی شکل میگیرد که میزان خطای روش را افزایش میدهد.

۲–۲–۳– روش ارتباط مقیاس ها^{۲۵}

روش ارتباط مقیاسها توسط واگنر^{۲۶} و لیو^{۲۷} [۸۷] و با ایده جداسازی میدان جابجایی کل به دو جابجایی ریز مقیاس (**u**^m) و درشت مقیاس (**u**^M) ابداع شد: (۲۱) **u** = **u**^M + **u**^m در روش ارتباط مقیاسها، مطابق شکل (۴۱) ناحیه اتمی و پیوسته بر روی یکدیگر منطبق هستند و ناحیه اتمی در راستای دقیق. کردن پاسخ (میدان جابجایی) استفاده می شود.

در این روش، جابجایی درشت مقیاس **u^M از حل شبکه** اجزا محدود بدست میآید و جابجایی ریز مقیاس **u**^m از کسر

تصویر^{۲۸} جابجایی درشت مقیاس از جابجایی کل اتمی حاصل می شود [۸۸]:

u =

$$\mathbf{Nd} + \mathbf{Qq} = \mathbf{Nd} + \underbrace{(\mathbf{I} - \mathbf{NM}^{-1}\mathbf{N}^{\mathrm{T}}\mathbf{M}_{\mathrm{A}})\mathbf{q}}_{\mathbf{u}^{\mathrm{m}}}$$
(77)

در این رابطه، \mathbf{N} ماتریس توابع شکل، \mathbf{M}_{A} ماتریس جرم اتمی و \mathbf{M} ماتریس جرم درشت مقیاس است. بردار درجات آزادی \mathbf{M} در کل میدان و \mathbf{q} در نواحی مدلسازی اتمی قرار دارند.

مطالعات نسبتا محدودی در خصوص بکارگیری و توسعه روش ارتباط مقیاس ها صورت گرفته است که از آن جمله می توان به مقاله لیو و همکاران [۸۸] در خصوص تشریح روش و حل مثال غیر خطی چند مقیاسی خم شدن نانو لوله کربنی، مدلسازی دینامیکی رشد ترک اتمی و مدلسازی اتمی



شکل ۴۲– مدلسازی دینامیکی رشد ترک به روش ارتباط مقیاسها [۸۸]



شکل ۴۳– نمودار نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش ارتباط مقیاس ها

ناپیوستگی ضعیف (باند برشی) نمایش داده شده در شکل (۴۲) اشاره کرد.

مساله ورق آلومینیومی با روش ارتباط مقیاس ها مدلسازی شده است و نتایج حاصل از مدل در شکل (۴۳) نمایش داده شده است. شکل (۴۴) بیشترین میزان خطای انرژی در هر گام نسبت به حل تمام اتمی استاتیک مولکولی را ٪۴ نشان میدهد. این میزان از خطا قابل قبول است. این روش در این مساله پاسخهای دقیقتری نسبت به روش پیوند اتم و نابجایی ارائه داده است زیرا

در این روش، اثرات فرضیات ناقص اعمال شده به محیط نظیر آنچه در روش پیوند اتم و نابجایی موجود هست، وجود ندارد.

۲–۲–۴– روش ارتباط دامنهها

یکی از روشهای مهم مدلسازی چندمقیاسی، روش ارتباط دامنههاست که توسط ژیائو^{۲۹} و بلیتچکو^{۳۰} توسعه داده شده است [۸۹]. این روش جهت اتصال دو ناحیه اتمی و پیوسته به یکدیگر از ناحیه انتقال استفاده می کند (شکل ۴۵).



شکل ۴۴– نمودار خطای نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش ارتباط مقیاسها



شکل۴۵– روش ارتباط دامنهها

پیوسته و اتمی را با سازگاری ضعیف با یکدیگر هماهنگ میکند [۹۰]. در روابط (۲۳) و (۲۴) توابع (W_C(X) و W_A(X) به ترتیب تابع وزن محیط پیوسته و اتمی هستند که مطابق شکل (۴۶) تعریف میشوند.

همان گونه که در شکل (۴۶) مشهود است، تابع وزن پیوسته در ناحیه پیوسته مقدار یک را دارد و در ناحیه اتمی برابر صفر است [۱۵]. این تابع بصورت خطی در ناحیه انتقال از یک به صفر به تدریج کاسته می شود. تابع وزن ناحیه اتمی برعکس ناحیه پیوسته عمل می کند. در شکل (۴۶) شمای کلی برای یک چهارم دامنه بصورت سه بعدی نیز ترسیم شده است. در این شکل، پوسته آبی رنگ تابع وزن ناحیه اتمی و پوسته زرد رنگ در این روش، از شیوه کمینهسازی تابع انرژی کل سیستم استفاده میشود. انرژی ناحیه پیوسته (Π_C)، انرژی ناحیه اتمی(Π_A) و انرژی در ناحیه انتقال (Ω_T) از روابط زیر محاسبه میشوند:

$$\Pi_{\rm C} = \int_{\Omega_{\rm C}} w_{\rm C}(\mathbf{x}) W(\mathbf{u}(\mathbf{x})) d\Omega \tag{(97)}$$
$$\Pi_{\rm A} =$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i \in A_a} \sum_{j \in A_a \atop i \neq i} \left[\frac{1}{2} (w_A(\boldsymbol{x}_i) + w_A(\boldsymbol{x}_j)) \right] \Psi(\boldsymbol{x}_i.\boldsymbol{x}_j)$$
 (Yf)

$$\Pi_{\mathrm{T}} = \sum \lambda(\mathbf{x}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{A}}) \cdot \left[\mathbf{u}(\mathbf{x}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{A}}) - \mathbf{u}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{A}} \right]$$
(Ya)

در رابطه (۲۵) کم ضریب لاگرانژ است که جابجایی دو محیط



شکل ۴۶– بکارگیری توابع وزن جهت ترکیب انرژیهای ناحیه پیوسته و اتمی در محدوده ناحیه انتقال، الف) نمایش یک بعدی، ب)نمایش سه بعدی [۱۵]

> تابع وزن ناحیه پیوسته است. این روش برای یافتن جابجایی، انرژی محیط را به دو قسمت 1₁ و 1₂ تقسیم میکند.

$$\Pi = \underbrace{\Pi_{C} + \Pi_{T}}_{\Pi_{1}} + \Pi_{A}$$

$$\Pi_{2}$$
(Y9)

سپس جهت کمینهسازی انرژی کل، از هر یک از توابع Π_1 و Π_2 نسبت به درجات آزادی مدل مشتق گرفته می شود [۹۱]. $\partial \Pi_1$

$$\frac{\partial \mathbf{u}_{c_i}}{\partial \mathbf{u}_{c_i}} = 0 \tag{(YV)}$$

$$\frac{\partial \Pi_1}{\partial \lambda_i} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \Pi_2}{\partial \mathbf{u}_{\mathbf{a}_i}} = 0 \tag{(Y4)}$$

در رابطههای (۲۷) الی (۲۹) پارامترهای $_{c_i}$ **u**_a **i u**_c **i u**_a د محیط پیوسته و اتمی ترتیب درجات آزادی میدان جابجایی در محیط پیوسته و اتمی و درجات آزادی قیدهای برقراری ناحیه اتصال هستند. روش ارتباط دامنهها توسط محققین بسیاری مورد استفاده قرار گرفته است [۲۹–۹۴]. این روش در راستای توسعه مدلهای مواد و نیز توسعه روش مورد توجه بوده است بگونهای که مدلسازی مواد با شبکه اتمی کامپوزیت^{۲۱}، مدلسازی ساختارهای کربنی از یک سو و بکارگیری روش اجزا محدود توسعه یافته^{۳۳} در محیط پیوسته، از موارد بارز توسعه روش ارتباط دامنهها بوده است [۹۶ و ۹۶].

روش های عددی در مهندسی، سال ۴۲، شماره ۲، زمستان ۱۴۰۲

مساله ترک لبه بخش ۲-۲ با کمک روش ارتباط دامنهها مدلسازی شده است و نتایج آن در شکلهای (۴۷) و (۴۸) ترسیم شده است. بیشترین میزان خطای این روش نسبت به روش استاتیک مولکولی ۶/۵ درصد است. در این روش وجود نیروهای اضافی بدلیل قیود اعمال شده به مساله باعث افزایش خطا می گردد. هر چند خطای این روش در مقایسه با روش شبه پیوسته اندکی بالاتر است اما میزان خطا در حد قابل قبول است.

۲-۲-۴-۱-روش پیوند اتم و محیط پیوسته^{۳۳}

این روش نسخه نیرویی روش ارتباط دامنهها است [۹۷–۱۰۰]. روند کلی مدلسازی این روش در شکل (۴۹) نشان داده شده است. در این روش نیز انرژی ناحیه پیوسته و اتمی بصورت خطی در طول ناحیه انتقال تغییر میکند.

نیروهای وارد بر اتمهایی که دارای درجه آزادی هستند (اتمهای ناحیه $\Omega_{
m A}$) و نیز بردار نیروهای باقی مانده بر روی گرههای اجزا محدود از روابط زیر بدست میآیند:

$$\mathbf{f}_{i} = \sum_{\substack{j \in A_{a} \\ j \neq i}} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}_{ij})}{\partial \mathbf{r}}$$
(\vec{r} \cdot)

$$\mathbf{f}_{\mathrm{I}} = \int_{\Omega_{\mathrm{C}}} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{X}} \mathrm{d}\Omega \tag{(71)}$$

که در آن \mathbf{f}_i و \mathbf{f}_i به ترتیب نیروی بین اتمی و بردار نیروی باقی مانده بر روی گره است، \mathbf{P} تنش اول پایولا و \mathbf{N} تابع شکل المان است.



شکل ۴۷– نمودار نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش ارتباط دامنهها



شکل ۴۸– نمودار خطای نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش ارتباط دامنهها





شکل ۵۰- نمایش حالات مختلف اتم نماینده، الف) اتم نماینده در گوشهها، ب) اتم نماینده بصورت کلاستری از اتمها، ج) اتم نماینده در گوشه و در مرکز، د) اتم نماینده در گوشهها و سه اتم نماینده در مرکز

کلاستری است که در تعیین انرژی المان استفاده میشود.

چنانچه شعاع دایره کلاستر به تنها یک اتم (همان گره المان) محدود شود، نتایج بدست آمده با روش شبه پیوسته تفاوتی نخواهد داشت و چنانچه شعاع دایره بزرگ انتخاب شود بگونهای که تمامی اتمهای موجود به عنوان اتم نمونه گیری انتخاب شوند، آنگاه مدل بطور کامل با روش های تمام اتمی برابری خواهد کرد. بعد از اتمام مراحل حل و یافتن موقعیت نهایی درجات آزادی، اتمهایی که مقید به اتم نماینده هستند توسط فرضیه کوشی بورن^{۳۵} به موقعیت نهایی خود منتقل می شوند.

۲–۲–۶– روش چندمقیاسی با گرههای متغیر^{۳۶}

روش چندمقیاسی با گرههای متغیر روشی جدید است که با استفاده از المان با گرههای متغیر^{۳۷} طراحی و پیادهسازی می شود. این المان با تلفیق روش بدون المان و روش کلاسیک اجزا محدود و با کمک توابع پایه شعاعی، یک میدان هموار را بر روی کل دامنه ایجاد میکند و توابع شکل و ماتریس سختی ۲–۲–۵– روش شبهپیوسته کلاستری

مطالعات فراوانی بر روی روش انتخاب اتم نماینده در روش شبهپیوسته انجام شده است که در شکل (۵۰) برخی از آنها نمایش داده شده است.

شکل (۵۰- الف) شیوه متداول استفاده از اتم نماینده را نشان میدهد که در نسخه اولیه روش شبه پیوسته پیشنهاد شده است. در حالت (d) مجموعهای از اتمهای مجاور گرههای شبکه مثلثی به عنوان اتم نمونه گیری انتخاب می شود. به این شیوه حل روش شبه پیوسته کلاستری گفته می شود [۱۰۱] و به هریک از مجموعه دوایر قرمز به همراه دوایر آبی رنگ مجاور آن یک کلاستر گفته می شود. در این روش انرژی اتم نماینده (دایره قرمز) از میانگین انرژی اتمهایی که در یک کلاستر قرار دارند بدست می آید. در حالتهای (ج) و (د) جهت ارتقای روش محاسبه انرژی تعدادی اتم نمونه گیری در میان المان مورد استفاده قرار می گیرند.

در روش شبه پیوسته کلاستری که در شکل (۵۱) نمایش داده شده است، دایرههای سبز رنگ پیرامون گرهها، نمایش



شکل ۵۲– الف) نمایش دامنه با روش بدون المان، ب)روش المان با گرههای متغیر

المان را تشکیل میدهد. از ویژگیهای بارز این المان امکان قرارگیری گرههای داخلی در هر موقعیتی و به تعداد دلخواه در هر المان است. جهت آشنایی با نحوه استخراج توابع شکل و ماتریس سختی المان با گرههای متغیر به مرجع [۱۰۲] رجوع شود. شکل (۵۲) بصورت نمادین این المان را نشان می دهد.

این المان با در نظر گرفتن قواعد زیر میتواند در حل مسائل چندمقیاسی همزمان بکار برده شود.

– المان باید در طول اضلاع خود مشابه المانهای مرسوم اجزا محدود عمل کند و پیوستگی و سازگاری میدان در دو المان مجاور را تضمین کند.

– گرههای میانی نباید در مرز المان قرار گیرند. – آرایش گرههای میانی میبایست مشابه ساختار اتمی آن ماده

باشد. هرگونه نقص نظیر ناخالصی، ترک، حفره و مرزدانه می بایست بصورت کاملا واقعی با کمک گرههای میانی مدلسازی شود.

در صورتی که آرایش گرههای میانی مطابق هیچگونه ساختار اتمی تنظیم نشود، در این حالت المان مزبور مشابه المانهای متداول اجزا محدود میتواند مورد استفاده قرار گیرد (شکل ۵۳ –الف). در صورتی که آرایش گرههای میانی (که بطور همزمان میتوانند نقش اتم را نیز داشته باشند) مطابق با آرایش اتمی واقعی آن ماده، به عنوان مثال فلزات FCC (شکل ۵۳ –ب) و یا گرافن [۱۰۳] (شکل ۵۳–ج)، چیده شود، آنگاه این المان میتواند به عنوان المان چندمقیاسی در روش چندمقیاسی با گرههای متغیر مورد استفاده قرار گیرد.



شکل ۵۳- المان با گرههای متغیر، الف) بدون ساختار چندمقیاسی، ب) ساختار FCC، ج) ساختار گرافن

میک مش دلخواه قرمز رنگ شکل ۵۴) توسط روش چندمقیاسی که در ادامه وده نقص اتمی، تشریح خواهد شد بدست می آید و موقعیت اتمهای خاکستری مول اجزا محدود رنگ که دارای درجه آزادی نیستند می بایست توسط فرضیه به عنوان گرمهای کوشی بورن تعیین شود [۱۰۴]. بر اساس این فرضیه جابجایی این روش اتمها این روش اتمها اتمهایی که در ناحیه دارای روند تغییر شکل یکنواخت هستند ی اتمهای داخل تابع گرادیان تغییر شکل محیط پیوسته خواهند بود. استفاده از حدوده شعاع قطع فرضیه کوشی بورن در نواحی دارای رفتار غیرخطی منجر به تولید خطای بسیار بالایی می گردد که موضوعیت استفاده از آن مدیده می شود که در روش های چندمقیاسی را دچار تردید می کند و نیازمند ا استفاده از روش

چنانچه موقعیت اولیه اتمها $\mathbf{X}^{ ext{atom}}_i$ و موقعیت نهایی آنها چنانچه موقعیت اولیه رابطه (۳۲) بین موقعیت اولیه و نهایی برقرار است:

 $\mathbf{x}_{i}^{\text{atom}} = \mathbf{F} \mathbf{X}_{i}^{\text{atom}} \tag{(m)}$

که در آن **F** گرادیان تغییر شکل است که از حل ناحیه پیوسته بدست می آید. حل ناحیه پیوسته می تواند با کمک اجزا محدود غیر خطی محاسبه شود. در روش چندمقیاسی با المان دارای گرههای متغیر انرژی کل یک سیستم مطابق رابطه (۳۳) محاسبه می شود.

$$\Pi(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^{N_{e}^{\text{outv}}} W(\mathbf{F}_{i}(\mathbf{u}))\Omega_{e} + \sum_{j=1}^{N_{e}^{\text{vNME}}} W(\mathbf{F}_{j}(\mathbf{u}))\Omega_{e} - \sum_{k=1}^{N^{\text{node}}} \mathbf{f}_{k}^{\text{ext}} \cdot \mathbf{u}_{k}$$
(YYY)

در روش چندمقیاسی با المان با گرههای متغیر، یک مش دلخواه بر روی محیط اتمی مدل میشود. در محدوده نقص اتمی، المانهای چند مقیاسی جایگزین المانهای معمول اجزا محدود میشوند که همه اتمهای داخل آن المانها به عنوان گرههای میانی دارای درجه آزادی خواهند بود. در این روش اتمها میتوانند در هر مکانی مدل شوند اما مدلسازی اتمهای داخل المان چندمقیاسی و همسایههای آنها که در محدوده شعاع قطع قرار می گیرند ضروری است.

در شکل (۵۴– الف) یک مدل تمام اتمی دیده می شود که در مرکز آن یک نقص (نابجایی) وجود دارد. با استفاده از روش چندمقیاسی همزمان VNMM می توان ناحیه اطراف نابجایی را با کمک المان چندمقیاسی شبیه سازی نمود. سایر اتم های مدل نیز می توانند به دو حالت نشان داده شده در شکل (۵۴ – ب و ج) در مدل ایجاد گردند. در حالت اول که نظیر روش ارتباط دامنه ها است (شکل ۵۴–ب)، اتم های موجود در همسایگی اتم های المان چندمقیاسی مدل می شوند. در این حالت، اتم های نیروی اتم های دارای درجه آزادی بکار برده می شود. در حالت نیروی اتم های دارای درجه آزادی بکار برده می شود. در حالت بطور کامل مدل می شوند. در این حالت اتم ها موجود در حالت خاکستری میدان می شوند. در این حالت، اتم های موجود در حالت خاکستری رزگ نمایش داده شده در شکل جهت تکمیل میدان می تواند مشابه روش شبه پیوسته است کلیه اتم ها موجود.

موقعیت اتمهایی که دارای درجه آزادی هستند (اتمهای



شکل ۵۴– الف) مدل تمام اتمی دارای نقص (نابجایی)، ب) مدل چندمقیاسی با گرههای متغیر بدون مدلسازی تمامی اتمها، ج) مدل چندمقیاسی با گرههای متغیر با مدلسازی تمامی اتمها

در رابطه (۲۹)، Ψ_{α} تابع پتانسیل بین اتمی و N_{a}^{conv} تعداد اتمهای زیر المان متداول اجزا محدود است. رابطه (۳۴) قابل تعمیم به المان با گرههای متغیر نیست زیرا گرادیان تغییر شکل در این المان به دلیل استفاده از توابع پایه شعاعی یکنواخت نیست [۱۰۵]. بنابراین انرژی المان با گرههای متغیر می تواند توسط رابطه (۳۵) محاسبه شود:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{a}^{\text{VNME}}} \Psi_{\alpha} \approx \sum_{j=1}^{N_{e}^{\text{VNME}}} W(\mathbf{F}_{j}(\mathbf{u}))\Omega_{j} + \tilde{\Pi}$$
(Ya)

در این رابطه Ĩ عبارت اصلاحی انرژی المان با گرههای متغیر است که توسط رابطه (۳۶) قابل محاسبه است [۱۰۵]:

$$\widetilde{\Pi}(\mathbf{u}^{\mathrm{m}}) = \sum_{\alpha=1}^{N_{\mathrm{a}}^{\mathrm{MME}}} \Psi_{\alpha}(\mathbf{X}_{\alpha} + \mathbf{u}^{\mathrm{M}} + \mathbf{u}^{\mathrm{m}})$$
(٣۶)

در این رابطه W تابع چگالی انرژی کرنشی، \mathbf{F} گرادیان تغییر شکل، $\Omega_{\rm e}$ حجم المان، $\mathbf{f}^{\rm ext}$ بردار نیروهای خارجی اعمال شده به گره، $\Omega_{\rm e}^{\rm vNME}$ و $\mathbf{N}_{\rm e}^{\rm ext}$ ا شده به گره، $\mathbf{N}_{\rm e}^{\rm node}$ و $\mathbf{N}_{\rm e}^{\rm vonde}$ و تعداد المانهای متداول اجزا محدود و المانهای دارای گرههای متغیر است. در این روش، المانهای متداول اجزا محدود را میتوان در نواحی دارای گرادیان تغییر شکل یکنواخت که در آن فرضیه کوشی بورن صادق است بکار برد. بنابراین تابع چگالی انرژی کرنشی المانهای متداول با انرژی پتانسیل اتمهای زیر این المانها برابر خواهد بود:

$$\sum_{i=1}^{N_{e}^{conv}} W(\mathbf{F}_{i}(\mathbf{u})) \Omega_{i} \approx \sum_{\alpha=1}^{N_{a}^{conv}} \Psi_{\alpha}$$
 (Me)

که در آن (\mathbf{u}^{m}) انرژی کل سیستم، \mathbf{X}_{α} موقعیت اولیه اتمها، \mathbf{u}^{m} مقدار جابجایی از حل معادلات محیطهای پیوسته و \mathbf{u}^{m} میزان جابجایی جهت اصلاح پاسخهای محیطهای پیوسته است. هدف روش چندمقیاسی با المان دارای گرههای متغیر دستیابی به دقت اتمی در حل است. لذا، انرژی یک سیستم بر اساس پتانسیلهای بین اتمی به صورت رابطه (۳۷) قابل محاسبه است.

$$\Pi(\mathbf{u}) = \sum_{j}^{N_{VNME}} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}^{M}))\Omega_{j} + \tilde{\Pi}(\mathbf{X}_{\alpha} + \mathbf{u}^{M} + \mathbf{u}^{m}) + \sum_{j}^{N_{conv}} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}^{M}))\Omega_{j} - \sum_{k}^{N_{n}} \mathbf{f}_{k}^{ext} \cdot \mathbf{u}_{k}$$
(YV)

برای محاسبه میزان کل جابجایی لازم است رابطه (۳۷) نسبت به دو جزء جابجایی کمینه شود.

$$\frac{\partial \Pi(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}^{M}} = \frac{\partial (\sum_{j}^{N_{\text{VNME}}} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}^{M}))\Omega_{j})}{\partial \mathbf{u}^{M}} + \frac{\partial (\tilde{\Pi}(\mathbf{X}_{\alpha} + \mathbf{u}^{M} + \mathbf{u}^{m}))}{\partial \mathbf{u}^{M}} + \frac{\partial (\sum_{j}^{N_{\text{conv}}} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}^{M}))\Omega_{j})}{\partial \mathbf{u}^{M}} + \frac{\partial (\sum_{k}^{N_{n}} \mathbf{f}_{k}^{\text{ext}} \cdot \mathbf{u}_{k})}{\partial \mathbf{u}^{M}} = 0$$
(7.4)

$$\frac{\partial \Pi(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}^{\mathrm{m}}} = \frac{\partial (\tilde{\Pi}(\mathbf{X}_{\alpha} + \mathbf{u}^{\mathrm{M}} + \mathbf{u}^{\mathrm{m}}))}{\partial \mathbf{u}^{\mathrm{m}}} = 0 \qquad (\texttt{M9})$$

از حل همزمان دو رابطه (۳۸) و (۳۹) مقدار جابجایی ${}^{\rm M}$ و ${}^{\rm m}$ برای کلیه گرهها و اتمها بدست میآید. جمله مشترک ${}^{\rm m}$ برای کلیه گرهها و اتمها بدست میآید. جمله مشترک $\Pi({\bf X}_{\alpha} + {\bf u}^{\rm M} + {\bf u}^{\rm m})$ در دو رابطه (۳۸) و (۳۹) باعث کوپل شدن دو معادله به یکدیگر می شود. از آنجایی که انرژی کل سیستم تابع حالت است [۱۰۶] و به مسیر کمینهسازی بستگی

ندارد، لذا میتوان با یک حل دومرحلهای طبق روابط (۳۸) و (۳۹) در یک روند تکراری انرژی کل سیستم را کمینه کرد. در نهایت، جابجایی نهایی هر اتم که دارای درجه آزادی مستقل است از رابطه (۴۰) بدست میآید: (۴۰) **u=u**^M + u^m در این عبارت **u**^M حرکت درشتمقیاس و ^m حرکت ریزمقیاس میباشد.

با کمک این روش مساله ترک لبه حل شده است و نتایج آن با روش شبهپیوسته در مقاله علیزاده و همکاران [۱۰۷] مقایسه می شود. در این مقاله یک محیط شامل ۱۰۲۰۱ اتم، از جملات غنی سازی (تابع پله) برای ایجاد ناپیوستگی در یک ورق مربعی به ابعاد ۱۰۰ آنگستروم با یک ترک لبه به طول ۷ آنگستروم مدل شده است. این ورق در ضلع تحتانی از هر دو امتداد بسته شده است و از ضلع فوقانی کشیده می شود. مدل NMM با دو شبکه بندی ساختار منظم و بدون ساختار ایجاد می شود. دو المان با گرههای متغیر نظیر آنچه در شکل (۵۵) نشان داده شده است پیرامون ترک را احاطه کردهاند. این ترک می یابد. بقیه ورق توسط المانهای متداول اجزا محدود مدل شده است.

المانهای دارای گره متغیر نزدیک تـرک، تنهـا توسط تـابع پلهای غنی شدهاند تا اتمهای دو سمت ترک هیچ گونه اندرکنشی نداشته باشند. از آن جا که نوک ترک در ناحیه اتمی قرار دارد، لذا استفاده از توابع غنیسازی نوک تـرک اعتبـاری نخواهـد داشـت. مدل روش WMM با سه مـدل متفـاوت از روش شبه پیوسـته و یک مدل از روش استاتیک مولکولی مقایسه می شود.

مدل (C) نشان داده شده در شکل (۵۶) دارای ساختار متراکم شبکه بندی در ناحیه ترک است و در نواحی دورتر اندازه شبکههای ایجاد شده ثابت است. مدل (D) نیز ناحیه مشابهی با مدل (C) دارد اما در این مدل با دورتر شدن از ترک ابعاد شبکه بزرگتر می شود. در مدل (E) ابعاد ناحیه ریز شده نزدیک به ترک کمتر از دو مدل قبلی است.



شکل ۵۵ –مدل روش VNMM برای مساله ترک لبه، الف) مدل A، ب) مدل B



شکل ۵۶ – مدل های شبه پیوسته حل ترک، الف) مدل C، ب) مدل D، (ج) مدل E

از آنجایی که امکان غنیسازی روش شبهپیوسته وجود ندارد لذا ترک در مدل شبه پیوسته بصورت ترکیبی و با توسط فاصله دادن 🦳 روش VNMM نسبت به مدل استاتیک مولکولی بسیار کم و دو اتم از یکدیگر ایجاد شده است. جدول (۲) مشخصات محدود به حداکثر ۵٪ است. تمامی مدلها را نشان میدهد.

علاوه بر اختلاف زیاد در تعداد درجـات آزادی، خطـای نسـبی

				جلاول			
بیشینه خطای جابجایی	تعداد اتمها	تعداد گرەھا	تعداد درجه آزادی	تعداد المان	اندازه تقریبی المان نزدیک ترک (آنگستروم)	مدل	روش
-	10701	-	70407	_	-	-	MS
٣/٢۶%	10701	490	947	۳۸۰	۵	А	VNMM
۵/۱۴%	10701	111	774	١٠٨	۲۰	В	VNMM
۴/۷۹%	1 • 7 • 1	A1A	1838	1790	۵	С	QC
۶/۸'.	1 • 7 • 1	400	٩。。	۵۷۶	۲۰	D	QC
\$/\$\$ ['] .	1 • 7 • 1	٣٠٠	900	404	۲۰	Е	QC

جدول ۲- مشخصات مدلها



Multiscale model on irregular macro mesh

شکل ۵۷ – تقسیم بندی میدان در روش DCMM [۱۵]

۲-۲-۷ روش چندمقیاسی ^{۳۹}DCMM

در حالی که بیشتر روش های چندمقیاسی توسعه داده شده برای شبیه سازی مواد دارای ساختار کریستالی منظم هستند، موادی نظیر شیشه، پلیمر، آمورف ها و پروتئین ها ساختارهای نامنظمی دارند. روش MDCI [۸۰۱] برای شبیه سازی چندمقیاسی مواد دارای ساختار غیر کریستالی توسعه یافته است. در این روش، کل دامنه به المان های متعددی (ساختار مش بندی یکنواخت و غیریکنواخت) مطابق شکل (۵۷) تقسیم بندی می شود. هر یک از المان هایی که در مجاورت میدان دارای گرادیان تغییر شکل شدید قرار دارند نقش محیط با مقیاس ریز و سایر المان ها نقش محیط با مقیاس درشت را بازی می کنند.

حل اجزا محدود در روش DCMM می تواند بصورت مشابه برای انواع مسائل غیرخطی گسترش یابد. در این روش، ابتدا مقیاس میکرو بصورت کامل شبیهسازی می شود و نمونه تمام اتمی به حالت تعادل در دمای مورد نظر مساله می رسد. سپس تحریک اولیه بر مقیاس ماکرو اعمال می شود و مقیاس ماکرو حل می شود و جابجایی گرهها و گرادیان تغییر شکل مقیاس ماکرو (\mathbf{F}^{M}) محاسبه می گردد. سپس این گرادیان بر روی مدل مقیاس میکرو اعمال می شود که می تواند مدلی به اندازه یک المان و یا ترکیبی از چند المان باشد. از آنجا که قانون کوشی بورن بر روی این دامنه اتم ها صادق نیست، برای ایجاد یک میدان پیوسته جابجایی بر روی شبکه اتمی مجزا (مقیاس

میکرو)، از روش های بدون المان استفاده می شود و در نهایت گرادیان تغییر شکل مدل میکرو (\mathbf{F}^{m}) قابل محاسبه است. موقعیت نهایی هر اتم بر اساس تجزیه ضربی گرادیان تغییر شکل \mathbf{F} به اجزاء میکرو \mathbf{F}^{m} و ماکرو \mathbf{F}^{M} با اعمال رابطه (۴۱) قابل محاسبه است: (۴۱)

$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{M} \mathbf{F}^{m}$

تابع گرادیان تغییر شکل F با روش حداقل مربعات وزنی ماندهها بر روی اتمهای موجود در مقیاس میکرو برازش میشود. با تحلیل مدل میکرو، میدانهای جدید محاسبه و مقادیر معادل ماکرو تعیین میشوند و این روند تکراری تا حصول همگرایی نهایی ادامه خواهد یافت.

فرمول بندی کلی حاکم بر مسئله چندمقیاسی مطابق روابط زیر است [۱۵] :

$$\Pi = \Pi^{M} + \Pi^{m} \tag{(77)}$$

$$\Pi^{M} = \int_{\Omega^{M}} w^{s}(\mathbf{F}(\mathbf{u})) d\Omega - \int_{\Omega^{M}} \rho_{0} \mathbf{f}^{b} . \mathbf{u} d\Omega - \int_{\Gamma^{M}} \mathbf{f}^{t} . \mathbf{u} d\Gamma$$
(ft)

 $\Pi^m =$

$$\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\j\neq i}}^{n_{i}}\phi_{2}(\mathbf{r}_{ij}) + \frac{1}{6}\sum_{\substack{i,j,k\neq i\\i\neq j\neq k}}^{n_{t}}\phi_{3}(\mathbf{r}_{ij}.\mathbf{r}_{ik}.\theta_{jik})}_{U^{p}}\right] + (\mathbf{Y}\mathbf{Y})$$

$$\begin{bmatrix} \sum_{i}^{n_{t}} \frac{1}{2} m_{i} (v_{i})^{2} \\ \end{bmatrix}$$
$$\mathbf{P}^{m} = \frac{1}{\Omega_{0}} \frac{\partial U^{P}}{\partial \mathbf{F}_{\alpha}} = \frac{1}{\Omega_{0}} \sum_{i=1}^{n_{t}} \left(\frac{\partial U^{P}}{\partial \mathbf{F}_{\alpha}} \right)$$
(9a)

$$\mathbf{P}^{\mathrm{M}} = \frac{\partial \mathbf{W}^{\mathrm{s}}}{\partial \mathbf{F}} \tag{(45)}$$

$$\mathbf{D}^{\mathrm{M}} = \frac{\partial^2 \mathbf{w}^{\mathrm{s}}}{\partial \mathbf{F}^2} \tag{(4)}$$

شکل (۵۹) نمونهای از مدلسازی انجام شده توسط این روش را که برگرفته از مرجع [۱۵] است نشان می دهد.

محدود نبودن این روش به ساختارهای کریستالی و نیز دمای صفر درجه کلوین از مزیتهای این روش است. این در حالی است که بیشتر روشهای چندمقیاسی همزمان راه حلی برای توسعه به دمای غیر صفر کلوین ارائه ندادهاند.

MD-SMD-MPM روش چندمقیاسی MD-SMD-MPM

در مقاله ارائه شده توسط ونگ و همکاران [۱۰۹] روشی چندمقیاسی برای شبیهسازی مقیاس بزرگ در تمامی دماها بین ناحیه اتمی و پیوسته ابداع شده است. در این روش، ناحیه پیوسته توسط روش بدون المان MPM و ناحیه اتمی و پیوسته روش دینامیک مولکولی مدل میشود. دو ناحیه اتمی و پیوسته مطابق شکل (۶۰) توسط روش دینامیک مولکولی هموار شده^{۴۰} به یکدیگر متصل میشوند.

استفاده از روش دینامیک مولکولی هموار شده باعث می شود اتصال اصلی بین دو ناحیه برقرار شود. در روش SMD یک شبکه المان بندی شده به روش دینامیک مولکولی اضافه می شود. در این روش تمامی متغیرهای فیزیکی نظیر موقعیت و جابجایی بر روی شبکه اتمی محاسبه می شود و معادلات مومنتوم بر روی شبکه المان بندی مجزا حل می شود. در گام بعدی، مقادیر بدست آمده از شبکه المان بندی شده برای بروزرسانی جابجایی اتم ها استفاده می شود. شبکه المان بندی، نمایشی از مراحل حل به روش SMD را نشان می دهد [۱۱۰] که به شرح زیر خلاصه می شود. ۱- المانها تشکیل می شوند و مقدار تابع شکل در موقعیت اتم i محاسبه می شود. این مقدار در هر گام زمانی بروز می شود.

۲- اختصاص مقادیر جرم، مومنتوم و نیروها از روی اتمها به
 گرههای المان مطابق با بخش (الف) شکل (۶۱)

۴- بروزرسانی موقعیت اتمها بر اساس محاسبات بدست آمده و محاسبه گام n+1 مطابق با بخش (ج) شکل (۶۱)







شکل ۵۹ – شبیهسازی با روش DCMM [۱۵]



شکل ۶۰- مدلسازی MD-SMD-MPM [۱۰۹]



شکل ۶۲– اتمهای مجاور ناحیه انتقال در روش MD-SMD-MPM [۱۰۹]

۵– محاسبه نیروهای اتمی و بروزرسانی آنها متناسب با موقعیت جدید بدست آمده

۶- محاسبه نیروی گرههای المانها بر اساس نیروهای محاسبه شده اتمی گام قبل مطابق با بخش (د) شکل (۶۱)
۷- بروزرسانی سرعت اتمها بر اساس گام 1+n و 1/2 به مطابق با بخش (ه) شکل (۶۱)
۸- بازسازی مجدد المان زیرین برای انجام محاسبات گام بعدی مطابق با بخش (و) شکل (۶۱)
دو ناحیه پیوسته و اتمی در روش MD-SMD-MPM به کمک روش SMD به در مجاورت روش SMD

اتمهای ناحیه دینامیک مولکولی در روش SMD باعث کاهش خطای ایجاد نیروهای اضافی و افزایش دقت می شود. شکل (۶۲) نمایشی از همسایههای اتمهای مجاور ناحیه انتقال را نشان می دهد. پیوستگی ناحیه پیوسته توسط روش بدون المان MPM تضمین می شود و از سوی دیگر ناحیه اتمی توسط دینامیک ملکولی مدل می شود. هر دو ناحیه در بخش مدل شده توسط روش SMD هم پوشانی دارند (شکل ۶۳).

از مزیتهای این روش امکان مدلسازی مقیاسهای بزرگ اتمی با درجات آزادی متعدد است و میتوان از آن برای مدلسازی مسائل چندمقیاسی در دمای متفاوت با در نظر گرفتن گرادیان دما در زمان استفاده کرد.



شکل ۶۳- ناحیه انتقال در روش MD-SMD-MPM [۱۰۹]

۳- جمعبندی

در این مقاله در میان انبوه روشهای چندمقیاسی همزمان که در حوزه مدلسازی مواد استفاده میشوند، به مهمترین آنها پرداخته شده است. این روشها از چند دیدگاه قابل بررسی هستند: ۱- روشهای همگنسازی با وجود پیچیدگی در محاسبات، امکان مدلسازی نواقص غیرهمگن شده را ندارند و تنها به شبیهسازی رفتار میانگین مواد میپردازند.

۲- روشهای نظیر روش شبه پیوسته که از دقت بالایی در پیوند دو ناحیه پیوسته و اتمی برخوردار هستند، در راستای برقراری سازگاری قوی مجبور به ریزتر کردن ابعاد المانها هستند. در این صورت، علیرغم ایجاد دقت بالا به همراه کاهش هزینههای محاسباتی در خصوص پیوند دو یا چند ناحیه به یکدیگر، هزینههای بالای تولید شبکه مناسب (در حد ابعاد شبکه اتمی) را به مدل تحمیل میکنند.

۳- روشهایی که نیاز به ریز کردن مش در ابعاد اتمی دارند، در واقع امکان گسترش مدلهای عددی به ابعاد واقعی تر را از بین می برند. به عبارت دیگر این روشها در مدلسازی به ابعاد واقعی مجبور به استفاده از المانهای بسیار کوچک و بسیار بزرگ در یک مدل هستند.

۴– روشهایی نظیر ارتباط دامنهها که نیازی به ریزتر کردن مش

ندارند، دقت پایینی در ارتباط بین دو ناحیه دارند. این گونه روشها بدلیل استفاده از سازگاری ضعیف بین دو ناحیه مجبور به اعمال قید مضاعف در ناحیه انتقال هستند.

۵- روشهایی که از اتمهای زیرین به عنوان منبع تعیین انرژی ناحیه پیوسته استفاده میکنند، میبایست به کمک فرضیههایی نظیر کوشی بورن حرکت اتمها را پیشبینی کنند. بنابراین امکان مدلسازی تمامی مواد را نخواهند داشت زیرا تمامی ساختارهای اتمی لزوما از قاعده کوشی بورن تبعیت نمیکنند. حال آنکه استفاده از مدلهای مبتنی بر مشخصات ماکرو (معادلات رفتاری استخراج شده بر اساس آزمایشات ماکرو) میتوانند در نواحی دورتر از نقص دقت قابل قبولی را ارائه نماید.

۶- بیشتر روش های چندمقیاسی همزمان در ابتدا برای مدلسازی از روش استاتیک مولکولی استفاده میکنند که باعث محدود شدن دمای شبیهسازی به دمای صفر درجه کلوین می شود. این روش ها ممکن است در مسیر توسعه به استفاده از روش دینامیک مولکولی روی بیاورند اما هزینه محاسباتی بالا یکی از چالش های جدی پیش روی این دسته از روش ها هستند.

۷- با توجه به مطالعات صورت گرفته، توسعه روش های چندمقیاسی که اثرات انتقال دما در مکان و زمان، ارتباط پیوسته بین نواحی و مقیاس های مختلف را بدون ایجاد محدودیت

مسائل تک مقیاسی در محیطهای پیوسته تاکنون نتایج خوبی از دقت و سرعت محاسبات را نشان داده است، اما توسعه آنها به روشهای چندمقیاسی با توجه به ماهیت گسسته بودن میدانهای مبتنی بر اتم به دقت بسیاری برای کوپل دو ناحیه با اعمال توابع غنی سازی دارد.

علیرغم تلاشهای صورت گرفته در خصوص توسعه روشهای چندمقیاسی، به نظر میرسد دامنه هر یک از این روشها محدود است و در عمل امکان شبیهسازی کارای فرآیندهای نزدیک به واقعیت از نظر اندازه و شرایط محیطی نیاز به توسعه روشهای نوین دارد. فراهم کند، مورد انتظار است.

۸- محدودیت های نوع ارتباط بین ناحیه پیوسته که از روش
 اجزا محدود استفاده می شود با روش های غیرپیوسته اتمی
 همواره منشا خطاهای زیادی است که برای حل این مشکل
 روش های چندمقیاسی که از روش های بدون المان بهره می برند
 می توانند خطاهای ایجاد شده را کاهش دهند.
 ۹- در روش های چندمقیاسی توسعه داده شده مبتنی بر ایده
 غنی سازی، هر یک از میدان های متغیرهای موجود مدل
 می توانند راه کاری موثر برای کاهش هزینه های محاسباتی و
 کسب دقت مورد نظر گردند. استفاده از جملات غنی سازی در

واژەنامە

مراجع

- 1. preprocess
- 2. ab-initio
- 3. hemoginization methods
- 4. partitioned domain methods
- 5. quassicontinuum
- 6. bridging domain (BD)
- 7. bridging scales (BS)
- 8. Representative Volumetric Element (RVE)
- 9. shape memory alloy
- 10. First Order Computational Homogenization
- 11. Second Order Computational Hemogenization
- 12. Enriched Multiscale Homogenization Method (EMSHM)
- 13. von mises stress
 14. transient region
 15. padding atom
 16. tadmor
 17. defetcs
 18. lattice parameter
 19. Wigner-Seitz Volume
 20. representative atom
 21. multi-layer
 22. Coupled Atomistic and Discrete Dislocations (CADD)
 23. shilkrot
 24. Miller
 25. bridging scale method
- 26. Wagner
- 20. Wugik 27. Liu

- 28. projection
 29. Xiao
 30. belytschko
 31. composite lattice
 32. extended finite element method
 33. atomistic to continuum
 34. cluster-based quasicontinuum
 35. cauchy-born hypothesis
 36. variable node multiscale method
 e 37. Variable Node Element (VNE)
 38. grain boundary
 39. Disordered Concurrent Multiscale
 - Method
 - 40. Smoothed Molecular Dynamics

- 1. Rashid, Y.R., "Analysis of Prestressed Concrete Reactor Vessels", *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 7, No. 4, pp. 334-344, 1968.
- 2. Beissel, S., Johnson, G. and Popelar, C., "An Element-Failure Algorithm for Dynamic Crack Propagation in General Directions", *Engry Fracture Mechanics*, Vol. 61, No. 3, pp. 407-425, 1998.
- 3. Cindy, L., Rountree, R.K., and Kalia, E.L., "Atomistic Aspects of Crack Propagation :Multimillion Atom Molecular Dynamics Simulations", *Annual Review of Materials Research*, Vol. 32, pp. 377-400, 2002.
- 4. Tadmor, E.B. and Miller, R.E., "Modeling Materials; Continuum, Atomistic and Multiscale Techniques", New York: Cambridge University Press, 2011.
- 5. Sun, T., Mirzoev, A., Minhas, V., Korolev, N.,

Lyubartsev, A. P. and Nordenskiöld, L., "A Multiscale Analysis of DNA Phase Separation: from Atomistic to Mesoscale Level", *Nucleic Acids Research*, Vol. 47, No. 11, pp. 5550-5562, 2019.

- Eftekhari, M., Mohammadi, S. and, M., "A Hierarchical Nano to Macro Multiscale Analysis of Monotonic Behavior of Concrete Columns Made of CNT-Reinforced Cement Composite", *Construction and Building Materials*, Vol. 175, pp. 134-143, 2018.
- Shahi, S. and Mohammadi, S., "A Comparative Study of Transversely Isotropic Material Models for Prediction of Mechanical Behavior of the Aortic Valve Leaflet", *International Journal of Research in engineering and Technology*, Vol. 2, No. 4, pp. 192-196, 2013.
- 8. Shahi, S. and Mohammadi, S., "A Multiscale Finite

Element Simulation of Human Aortic Heart Valve", *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 367, pp. 275-279, 2013.

- Talebi, H., Silani, M., Bordas, S. P. A., Kerfriden, P. and Rabczuk, T., "A Computational Library for Multiscale Modeling of Material Failure", *Computational Mechanics*, Vol. 53, p. 1047–1071, 2014.
- Hassani, B. and Hinton, E., "A Review of Homogenization and Topology Optimization I— Homogenization Theory for Media with Periodic Structure", *Computers & Structures*, Vol. 69, No. 6, pp. 707-717, 1998.
- Hassani, B. and Hinton, E., "A Review of Homogenization and Topology Opimization II— Analytical and Numerical Solution of Homogenization Equations", *Computers & Structures*, Vol. 69, No. 6, pp. 719-738, 1998.
- Nemat-Nasser, S. and Hori, M., "Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials", New York: Elsevier, 1998.
- Larsson, R. and Diebels, S., "A Second-Order Homogenization Procedure for Multi-Scale Analysis Based on Micropolar Kinematics", *Numerical Methods in Engineering*, Vol. 69, No. 12, pp. 2485-2512, 2006.
- Bayesteh, H. and Mohammadi, S., "Micro-Based Enriched Multiscale Homogenization Method for Analysis of Heterogeneous Materials", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 125, pp. 22-42, 2017.
- 15. Mohammadi, S., "Multiscale Biomechanics: Theory and Applications", Wiely, 2023.
- 16. Fish, J. and Fan, R., "Mathematical Homogenization of Nonperiodic Heterogeneous Media Subjected to Large Deformation Transient Loading", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 76, pp. 1044-1064, 2008.
- Markenscoff, X. and Dascalu, C., "Asymptotic Homogenization Analysis for Damage Amplification Due to Singular Interaction of Micro-Cracks", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 60, No. 8, pp. 1478-1485, 2012.
- 18. Yang, Y., Ma, F., Lei, C., Liu, Y. and Li, J., "Nonlinear Asymptotic Homogenization and the Effective Behavior of Layered Thermoelectric Composites", *Journal of the Mechanics and Physics* of Solids, Vol. 61, No. 8, pp. 1768-1783, 2013.
- 19. Fatemi Dehaghani, P., Hatefi Ardakani, S., Bayesteh, H. and Mohammadi, S., "3D Hierarchical Multiscale Analysis of Heterogeneous SMA Based Materials", *International Journal of Solids and Structures*, Vols. 118-119, pp. 24-40, 2017.
- Hashin, Z. and Shtrikman, S., "On Some Variational Principles in Anisotropic and Nonhomogeneous Elasticity", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 10, No. 4, pp. 335-342, 1962.

- 21. Hashin, Z. and Shtrikman, S., "A Variational Approach to the Theory of the Elastic Behaviour of Multiphase Materials", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 11, No. 2, pp. 127-140, 1963.
- 22. Hill, R., "Elastic Properties of Reinforced Solids: Some Theoretical Principles", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 11, No. 5, pp. 357-372, 1963.
- 23. Hill, R., "A Self-Consistent Mechanics of Composite Materials", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 13, No. 4, pp. 213-222, 1965.
- Hill, R., "Continuum Micro-Mechanics of Elastoplastic Polycrystals", *Journal of the Mechanics* and Physics of Solids, Vol. 13, No. 2, pp. 89-101, 1965.
- 25. Budiansky, B., "On the Elastic Moduli of Some Heterogeneous Materials", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 13, No. 4, pp. 223-227, 1965.
- Hashin, Z., "The Elastic Moduli of Heterogeneous Materials", J. Appl. Mech., Vol. 29, No. 1, pp. 143-150, 1962.
- 27. Eshelby, J. D., "The Determination of the Elastic Field of An Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems", *Proceedings of the Royal Society A*, Vol. 241, No. 1226, 1957.
- 28. Feyel, F., "A Multilevel Finite Element Method (FE2) to Describe the Response of Highly Non-Linear Structures Using Generalized Continua", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 192, No. 28, pp. 3233-3244, 2003.
- 29. Shu, W., and Stanciulescu, I., "Computational Modeling and Multiscale Homogenization of Short Fiber Composites Considering Complex Microstructure and Imperfect Interfaces", *Composite Structures*, Vol. 306, 116592, 2023.
- 30. Özdemir, I., Brekelmans, W. and Geers, M., "FE2 Computational Homogenization for the Thermo-Mechanical Analysis of Heterogeneous Solids", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 198, No. 3-4, pp. 602-613, 2008.
- Feyel, F., "Multiscale FE2 Elastoviscoplastic Analysis of Composite Structures", *Computational Materials Science*, Vol. 16, No. 1-4, pp. 344-354, 1999.
- 32. Otero, F., Oller, S. and Martinez, X., "Multiscale Computational Homogenization: Review and Proposal of a New Enhanced-First-Order Method", *Archives of Computational Methods in Engineering*, Vol. 25, pp. 479–505, 2018.
- 33. Petracca, M., Pelà, L., Rossi, R., Oller, S., Camata, G. and Spacone, E., "Multiscale Computational First Order Homogenization of Thick Shells for the Analysis of Out-of-Plane Loaded Masonry Walls", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 315, No. 1, pp. 273-301, 2017.
- 34. Wang, C., Li, C., Ling, Y., and Wah, M. A.,

"Investigation on Fretting Fatigue Crack Initiation in Heterogenous Materials Using a Hybrid of Multiscale Homogenization and Direct Numerical Simulation", *Tribology International*, Vol. 169, 107470, 2022.

- 35. Geers, M., Kouznetsova, V. and Brekelmans, W., "Multi-Scale Computational Homogenization: Trends and Challenges", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 234, pp. 2175–2182, 2010.
- 36. Kouznetsova, V., Geers, M. G. D., and Brekelman, W. A. M., "Multi-Scale Constitutive Modelling of Heterogeneous Materials with A Gradient-Enhanced Computational Homogenization Scheme", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 54, No. 8, pp. 1235-1260, 2002.
- 37. Kouznetsova, V., Geers, M., and Brekelman, W. A. M., "Multi-Scale Second-Order Computational Homogenization of Multi-Phase Materials: A Nested Finite Element Solution Strategy", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 193, No. 48, pp. 5525-5550, 2004.
- 38. Kaczmarczyk, Ł., Pearce, C. J. and Bićanić, N., "Scale Transition and Enforcement of RVE Boundary Conditions in Second-Order Computational Homogenization", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 74, No. 3, pp. 506-522, 2008.
- 39. Lesičar, T., Sorić, J. and Tonković, Z., "Large Strain, Two-Scale Computational Approach Using C1 Continuity Finite Element Employing A Second Gradient Theory", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 298, pp. 303-324, 2016.
- 40. Sánchez, P., Blanco, P. and Huespe, A., "Failure-Oriented Multi-scale Variational Formulation: Micro-Structures with Nucleation and Evolution of Softening Bands", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 257, pp. 221-247, 2013.
- 41. Miller, R. E., and Tadmor, E. B., "A Unified Framework and Performance Benchmark of Fourteen Multiscale Atomistic/Continuum Coupling Methods", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 17, No. 5,pp. 1-51, 2009.
- 42. Daw, M. S., and Baskes, M. I., "Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals", *Physical Review B*, Vol. 29, No. 12, pp. 6443-6453, 1984.
- 43. Tadmor, E. B., Ortiz, M., and Phillips, R., "Quasicontinuum Analysis of Defects in Solids", *Philosophical Magazine A*, pp. 1529-1563, 1996.
- 44. "QC Method", [Online]. Available: www.qcmethod.org.2023.
- 45. Qiu, R. Z., Lin, Y. C., Fang, T. H., and Tsai, L. R., "The Crack Growth and Expansion Characteristics of

Fe and Ni Using Quasi-Continuum Method", *Materials Research Express*, Vol. 4, No. 3, pp. 1-10, 2017.

- 46. Xu, T., Fan, J., Stewart, R., Zeng, X., and Yao, A., "Quasicontinuum Simulation of Brittle Cracking in Single-Crystal Material", *Crystal Research and Technology*, Vol. 52, No. 3, pp. 1-15, 2017.
- 47. RingdalenVatne, I., Stby, E., Thaulow, C., and Farkas, D., "Quasicontinuum Simulation of Crack Propagation in Bcc-Fe", *Materials Science and Engineering A*, Vol. 528, No. 15, pp. 5122–5134, 2011.
- 48. Zhou, T., Yang, X., and C. Chen, "Quasicontinuum Simulation of Single Crystal Nano-Plate with A Mixed-Mode Crack", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 46, No. 9, pp. 1975-1980, 2009.
- 49. Huang, S., and Zhou, C., "Modeling and Simulation of Nanoindentation", *JOM*, Vol. 69, No. 11, pp. 2256-2263, 2017.
- 50. Alizadeh, O., Toloee Eshlaghi, G., and Mohammadi, S., "Nanoindentation Simulation of Coated Aluminum Thin Film Using Quasicontinuum Method", *Computational Materials Science*, Vol. 111, No. 1, pp. 12-22, 2016.
- 51. Moslemzadeh, H., Alizadeh, O., and Mohammadi, S., "Quasicontinuum Multiscale Modeling of the Effect of Rough Surface on Nanoindentation Behavior", *Meccanica*, Vol. 54, pp. 411-427, 2019.
- 52. Mikes, K., and Jirasek, M., "Quasicontinuum Method Extended to Irregular Lattices", *Computers & Structures*, Vol. 192, pp. 50-70, 2017.
- 53. Qiu, R. Z., Lin, Y. C., and Fang, T. H., "Fatigue Crack Growth Characteristics of Fe and Ni under Cyclic Loading Using A Quasi-Continuum Method", *Beilstein Journal of Nanotechnology*, Vol. 9, pp. 1000-1014, 2018.
- 54. Alizadeh, O., Moslemzadeh, H., and Mohammadi, S., "Concurrent Multiscale Modeling of Interlaminar Nano Crack Propagation under Cyclic Loading", In 11th International Congress on Civil Engineering, Tehran, 2018.
- 55. Chen, P. and Shen, Y., "Nanocontact Between BCC Tungsten and FCC Nickel Using the Quasicontinuum Method", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 45, No. 24, pp. 6001-6017, 2008.
- 56. Peron-Luhrs, V., Sansoz, F., and Noels, L., "Quasicontinuum Study of the Shear Behavior of Defective Tilt Grain Boundaries in Cu", *Acta Materialia*, Vol. 64, pp. 419-428, 2014.
- 57. Yu, W. S., and Wang, Z. Q., "Interactions Between Edge Lattice Dislocations and Sigma 11 Symmetrical Tilt Grain Boundaries in Copper: A Quasi-Continuum Method Study", *Acta Materialia*, Vol. 60, pp. 5010–5021, 2012.
- 58. Yu, W., Wang, Z., and Shen, S., "Edge Dislocations Interacting with a Σ11 Symmetrical Grain Boundary in Copper Upon Mixed Loading: A Quasi Continuum

Method Study", *Computational Materials Science*, Vol. 137, pp. 162-170, 2017.

- 59. Amelang, J. S., and Kochmann, D. M., "Surface Effects in Nanoscale Structures Investigated by a Fully-Nonlocal Energy-Based Quasicontinuum Method", *Mechanics of Materials*, Vol. 90, pp. 166-184, 2015.
- 60. Dupuy, L. M., Tadmor, E. B., Miller, R. E., and Phillips, R., "Finite-Temperature Quasicontinuum: Molecular Dynamics Without All the Atoms", *Physical Review Letters*, Vol. 95,No. 6, pp. 1-4, 2005.
- Tadmor, E., Legoll, F., Kim, W., Dupuy, L., and Miller, R., "Finite-Temperature Quasi-Continuum", *Applied Mechanics Reviews*, Vol. 65, No. 1, pp. 1-27, 2013.
- 62. Wang, X. and Guo, X., "Numerical Simulation for Finite Deformation of Single-Walled Carbon Nanotubes at Finite Temperature Using Temperature-Related Higher Order Cauchy-Born Rule Based Quasi-Continuum Model", *Computational Materials Science*, Vol. 55, No. 1, pp. 273–283, 2012.
- 63. Beex, L., Rokoš, O., Zeman J., and Bordas, S., "Higher-Order Quasicontinuum Methods for Elastic and Dissipative Lattice Models: Uniaxial Deformation and Pure Bending", *GAMM-Mitteilungen*, Vol. 38, No. 2, pp. 344-368, 2015.
- 64. Kochmann, D. M., and Venturini, G. N., "A Meshless Quasicontinuum Method Based on Local Maximum-Entropy Interpolation", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol 22, No. 3, pp. 1-5, 2014.
- 65. Amelang, J. S., Venturini, G. N., and Kochmann, D. M., "Summation Rules for A Fully-Nonlocal Energy-Based Quasicontinuum Method", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 82, pp. 378– 413, 2015.
- 66. Beex, L., Peerlings, R., and Geers, M., "Central Summation in the Quasicontinuum Method", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 70, pp. 242-261, 2014.
- 67. Ortner, C., and Zhang, L., "Atomistic/Continuum Blending with Ghost Force Correction", *SIAM Journal of Scientific Computing*, pp. A346–A375, 2016.
- Dobson, M., and Luskin, M., "An Analysis of the Effect of Ghost Force Oscillation on Quasicontinuum Error", *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, Vol. 43, pp. 591–604, 2009.
- 69. Sorkin, V., Elliott, R. S., and Tadmor, E. B., "A Local Quasicontinuum Method for 3D Multilattice Crystalline Materials: Application to Shape-Memory Alloys", *Modelling and Simulations in Materials Science and Engineering*, Vol. 22, No. 5, pp. 1-21, 2014.
- 70. Dobson, M., Elliott, R., Luskin, M., and Tadmor, E.,

"A Multilattice Quasicontinuum for Phase Transforming Materials: Cascading Cauchy Born kinematics", *Journal of Computer-Aided Materials Design*, Vol. 14, pp. 219-237, 2007.

- 71. Smith, G. S., Tadmor, E. B., and Kaxiras, E., "Multiscale Simulation of Loading and Electrical Resistance in Silicon Nano Indentation", *Physics Review Letters*, Vol. 84, No. 3, pp. 1260–1263
- 72. Lu, H. B., Li, J. W., Ni, Y. S., Mei, J. F., and Wang, H. S., "Multiscale Analysis of Defect Initiation on the Atomistic Crack Tip in Body-Centered-Cubic Metal Ta", *Acta Physica Sinica*, Vol. 60,No. 10, pp.1-7, 2011.
- 73. Vatne, I. R., Ostby, E., Thaulow, C., and Farkas, D., "Quasicontinuum Simulation of Crack Propagation in bcc-Fe", *Materials Science and Engineering A*, Vol. 528, pp. 5122–5134, 2011.
- 74. Shao, Y. F. and Wang, S. Q., "Quasicontinuum Simulation of Crack Propagation in Nanocrystalline Ni", *Acta Physica Sinica*, Vol. 59, pp. 7258–7265, 2010.
- 75. Akhavan, S., Khodadad, M., Alizadeh, O., and Mohammadi, S., "Atomistic Modelling of Plastic Zone of Crack Tip in FCC Metals", In 11th International Congress of Civil Engineering, Tehran, 2018.
- 76. Wu, C. D., Fang, T. H., Su, W. C., and Fan, Y. C., "Effects of Constituting Material and Interfacial Crack on Mechanical Response of Nanoscale Metallic Bilayers - A Quasi-Continuum Study", *Molecular Simulation*, Vol. 46, pp. 1155–1163, 2020.
- 77. Wu, C. D., Fang, T. H., Su, W. C., and Fan, Y. C., "Fracture and Crack Propagation of Metallic Bilayers Using Quasi-Continuum Silumations", *Digest Journal of Nanomaterials & Biostructures (DJNB)*, Vol. 15, No. 2, pp. 319-327, 2020.
- 78. Imaizumi, K., Ono, T., Kota, T., Okamoto, S., and Sa, S., "Transformation of Cubic Symmetry for Spherical Microdomains from Face-Centred to Body-Centred Cubic upon Uniaxial Elongation in an Elastomeric Triblock Copolymer", *Applied Crystallography*, Vol. 36, pp. 976-981, 2003.
- 79. Islam, S., [Online], Available: https://slideplayer.com/slide/14570656/.
- 80. Shilkrot, L. E., Miller, R. E. and Curtin, W. A., "Coupled Atomistic and Discrete Dislocation Plasticity", *Physical Review Letters*, Vol. 89, No. 2, pp. 025501, 2002.
- 81. Shilkrot, L. E., Miller, R. E., and Curtin, W. A., "Multiscale Plasticity Modeling: Coupled Atomistic and Discrete Dislocation Mechanics", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 52, No. 4, pp. 755-787, 2004.
- 82. Anciaux, G., Junge, T., Hodapp, M., Cho, J., Molinari, J. F., and Curtin, W., "The Coupled Atomistic/Discrete-Dislocation Method in 3d part I:

Concept and Algorithms", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 118, pp. 152-171, 2018.

- 83. Hodapp, M., Anciaux, G., Molinari, J. F., and Curtin, W., "Coupled Atomistic/Discrete Dislocation Method in 3D Part II: Validation of the Method", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 119, pp. 1-19, 2018.
- 84. Cho, J., Molinari, J. F., Curtin, W. A., and Anciaux, G., "The Coupled Atomistic/Discrete-Dislocation Method in 3d. Part III: Dynamics of Hybrid Dislocations", *Journal of the Mechanics and Physics* of Solids, Vol. 118, pp. 1-14, 2018.
- 85. "A Study of Nano-Indentation Using Coupled Atomistic and Discrete Dislocation (CADD) Modeling", *Computational Fluid and Solid Mechanics 2003*, pp. 455-459, 2003.
- 86. Miller, R. E., Shilkrot, L., and Curtin, W. A., "A Coupled Atomistics and Discrete Dislocation Plasticity Simulation of Nanoindentation into Single Crystal Thin Films", *Acta Materialia*, Vol. 52, No. 2, pp. 271-284, 2004.
- 87. Wagner, G. J., and Liu, W. K., "Coupling of Atomistic and Continuum Simulations Using A Bridging Scale Decomposition", *Journal of Computational Physics*, Vol. 190, No. 1, pp. 249-274, 2003.
- 88. Liu, W. K., Park, H. S., Qian, D., Karpov, E. G., Kadowaki, H., and Wagner, G. J., "Bridging Scale Methods for Nanomechanics and Materials", *Computer Methods in Appiled Mechanics and Engineering*, Vol. 195, No. 13-16, pp. 1407-1421, 2006.
- 89. Xiao, S., and Belytschko, T., "A Bridging Domain Method for Coupling Continua with Molecular Dynamics", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 193, No. 17-20, pp. 1645-1669, 2004.
- 90. J. Fish, Multiscale Methods: Bridging the Scales in Science and Engineering, Oxford Scholarship Online, 2009.
- 91. Zhang, S., Khare, R., Lu, Q., and Belytschk, T., "A Bridging Domain and Strain Computation Method for Coupled Atomistic–Continuum Modelling of Solids", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 70, No. 8, pp. 913-933, 2006.
- 92. Tabarraei, A., Wang, X., Sadeghirad, A. and Song, J. H., "An Enhanced Bridging Domain Method for Linking Atomistic and Continuum Domains", *Finite Elements in Analysis and Design*, Vol. 92, pp. 36-49, 2014.
- 93. Xu, M., Gracie, R., and Belytschko, T., "A Continuum-to-Atomistic Bridging Domain Method for Composite Lattices", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 81, No. 13, pp. 1635 - 1658, 2009.
- 94. Guidault, P. and Belytschko, T., "Bridging Domain

Methods for Coupled Atomistic–Continuum Models with L2 or H1 Couplings", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 77, No. 11, pp. 1566-1592, 2009.

- 95. Talebi, H., Silani, M., and Rabczuk, T., "Concurrent Multiscale Modeling of Three Dimensional Crack and Dislocation Propagation", *Advances in Engineering Software*, Vol. 80, pp. 82-92, 2015.
- 96. Adelman, S. A., and Doll, J. D., "Generalized Langevin Equation Approach for Atom/Solid-Surface Scattering – Collinear Atom/Harmonic", *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 61, No. 10, pp. 4242–4245, 1974.
- 97. Badia, S., Bochev, P., Lehoucq, R., Parks, M. L., Fish, J., Nuggehally, M., and Gunzburger, M., "A Force-Based Blending Model for Atomistic-to-Continuum Coupling", *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, Vol. 5, No. 5, pp. 387-406, 2007.
- 98. Badia, S., Parks, M., Bochev, P., Gunzburger, M., and Lehoucq, R., "On Atomistic-to-Continuum Coupling by Blending", *Multiscale Modeling & Simulation*, Vol. 7, No. 1, pp. 381-406, 2008.
- 99. Fish, J., Nuggehally, M. A., Shephard, M. S., Picu, C. R., Badia, S., Parks, M. L., and Gunzburger, M., "Concurrent AtC Coupling Based on a Blend of the Continuum Stress and the Atomistic Force", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 196, No. 45-48, pp. 4548-4560, 2007.
- Parks, M. L., Bochev, P. B., and Lehoucq, R. B., "Connecting Atomistic-to-Continuum Coupling and Domain Decomposition", *Multiscale Modeling & Simulation*, Vol. 7, No. 1, pp. 362-380, 2008.
- 101. Eidel, B., and Stukowski, A., "A Variational Formulation of the Quasicontinuum Method Based on Energy Sampling in Clusters", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 57, No. 1, pp. 87-108, 2009.
- 102. Alizadeh, O., "Enriched Multiscale Method", Ph.D. Thesis, University of Tehran, Tehran, 2019.
- 103. Zhu, H., "Graphene; Fabrication, Characterizations, Properties and Applications",1st ed.,272, Elsevier Inc, Amsterdam, 2018.
- 104. Ericksen, J., "The Cauchy and Born Hypotheses for Crystals", in *Phase Transformations and Material Instabilities in Solids*, New York, Academic Press, 1984, pp. 61-77.
- 105. Marenić, E. and Ibrahimbegovic, A., "Multiscale Atomistic-to-Continuum Reduced Models for Micromechanical Systems", in *Computational Methods for Solids and Fluids*, Springer, 2016, pp. 215-244.
- 106. Atkins, P. and Paula, J. D., "Atkins' Physical Chemistry", Oxford university press, 2010.
- 107. Alizadeh, O. and Mohammadi, S., "The Variable Node Multiscale Approach: Coupling the Atomistic
- روش های عددی در مهندسی، سال ۴۲، شماره ۲، زمستان ۱۴۰۲

and Continuum Scales", *Computational Materials Science*, Vol. 160, pp. 256-274, 2019.

- 108. Moslemzadeh, H. and Mohammadi, S., "An Atomistic Entropy Based Finite Element Multiscale Method for Modeling Amorphous Materials", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 256, 2022.
- 109. Wang, S., Zhao, L., and Liu, Y., "A Concurrent Multiscale Method Based on Smoothed Molecular

Dynamics for Large-Scale Parallel Computation at Finite Temperature", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 406, 115898, 2023.

110. Wang, S., Zhao, L., and Liu, Y., "An Improved Smoothed Molecular Dynamics Method with High-Order Shape Function", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 122, No. 13, pp. 3300-3322, 2021.