Journal of Computational Methods in Engineering, 2024, 42(2), 1-50; DOI: 10.47176/jcme.42.2.1013

JOURNAL OF COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING

Journal of Computational Methods in Engineering

Journal homepage: https://jcme.iut.ac.ir/

ISSN: 2228-7698 EISSN: 2423-5741

Original Article

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

Omid Alizadeh and Soheil Mohammadi *

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

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.

Received: Sep. 27, 2023; Revised: Oct. 22, 2023; Accepted: Oct. 22, 2023; Published Online: March 05, 2024.

* Corresponding Author: smoham@ut.ac.ir

How to Cite: Alizadeh Omid and Mohammadi Soheil, A review of concurrent multiscale methods for the analysis of fine scale discontinuity problems, Journal of Computational Methods in Engineering; 2024, 42(2), 1-50; DOI: 10.47176/jcme.42.2.1013.

Copyright © 2025 Isfahan University of Technology, Published by Isfahan University of Technology press. This work is licensed under a Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/). Non-commercial uses of the work are permitted, provided the original work is properly cited.

نشریه روش‌های عددی در مهندسی، سال ۴۲، شماره ۲، ص. ۵۰-۱، DOI: 10.47176/jcme.42.2.1013

نشریه علمی - پژوهشی روش‌های عددی در مهندسی

نشریه روش‌های عددی در مهندسی

صفحه خانگی نشریه: https://jcme.iut.ac.ir/

شاپا: ۷۶۹۸-۲۲۲۸ شاپا الکترونیکی: ۵۷۴۱-۲۴۲۳

مقاله پژوهشی

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، تهران، ایران

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 بدلیل بیشتر بودن تعداد درجات آزادی نیاز به صرف هزینه محاسباتی بسیار زیادی در مقایسه با سایر 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 روش‌های توسعه داده شده در طول چد دهه گذشته، مسئله گسترش ترک لبه بازطراحی و مدلسازی شده است و نتایج حاصل از شبیه‌سازی و دقت محاسباتی مهم‌ترین روش‌ها با یکدیگر مقایسه شده اند.

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

دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۷/۰۵، بازنگری: ۱۴۰۲/۰۷/۳۰، پذیرش: ۱۴۰۲/۰۷/۳۰، اولین انتشار: ۱۴۰۲/۱۲/۱۵

*: نویسنده مسئول، رایانامه: smoham@ut.ac.ir

حق انتشار این مستند، متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان است. ۱۴۰۳ ©.

این مقاله تحت گواهی زیر منتشر شده و هر نوع استفاده غیرتجاری از آن مشروط بر استناد حیح به مقاله و با رعایت شرایط مندرج در آدرس زیر مجاز است:

Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).

فهرست علائم

$\mathbf{D}^M$	تانسور خواص ماده	$\mathbf{u}$	بردار جابجایی کل
$\mathbf{d}$	بردار درجات آزادی در کل میدان	$\mathbf{u}^M$	جابجایی در مقیاس درشت (ماکرو)
$d\mathbf{X}_m$	تغییرات موقعیت اولیه در مقیاس ریز (میکرو)	$\mathbf{u}^m$	جابجایی در مقیاس ریز (میکرو)
dx_m	تغییرات موقعیت فعلی در مقیاس ریز (میکرو)	$\mathbf{W(F(u))}$	تابع انرژی چگالی کرنشی
$\mathbf{F}$	ماتریس گرادیان تغییرشکل مرتبه اول	$W_A(x)$	تابع وزن ناحیه اتمی
$\mathbf{F}^M$	ماتریس گرادیان تغییرشکل مرتبه اول مقیاس درشت (ماکرو)	$W_C(x)$	تابع وزن ناحیه پیوسته
$\mathbf{F}^m$	ماتریس گرادیان تغییرشکل مرتبه اول مقیاس ریز (میکرو)	$\mathbf{X}$	موقعیت اولیه
$\mathbf{f}$	بردار نیرو داخلی	$\mathbf{X}_m$	موقعیت اولیه در مقیاس ریز (میکرو)
$\mathbf{f}^{ext}$	بردار نیروهای خارجی	$\mathbf{X}_i^{atom}$	موقعیت اولیه اتم i
$\mathbf{f}_i^{MS}$	بردار نیروی روی اتم i در روش استاتیک مولکولی	x	موقعیت فعلی
$\mathbf{f}_i^{Multiscale}$	بردار نیروی روی اتم i در روش چندمقیاسی	$\mathbf{x}_m$	موقعیت فعلی در مقیاس ریز (میکرو)
$\mathbf{G}^M$	ماتریس گرادیان تغییرشکل مرتبه دوم مقیاس درشت (ماکرو)	$\mathbf{x}_i^{atom}$	موقعیت نهایی اتم i
$\mathbf{I}$	ماتریس همانی	Π	انرژی کل
$\mathbf{M}$	ماتریس جرم درشت مقیاس	Π_A	انرژی ناحیه اتمی
$\mathbf{M_A}$	ماتریس جرم اتمی	Π_C	انرژی ناحیه پیوسته
$\mathbf{N}$	ماتریس تابع شکل	Π_T	انرژی ناحیه انتقال
N^{atom}	تعداد کل اتم ها	Ψ_i	تابع پتانسیل اتم i
N_e^{atom}	تعداد اتم های مربوط به المان e	Ω_A	ناحیه اتمی
N_e^{conv}	تعداد المان‌های متداول اجزا محدود	Ω_C	ناحیه پیوسته
N_a^{conv}	تعداد اتم‌های زیر المان متداول اجزا محدود	Ω_e	حجم المان
N^{node}	تعداد کل گره‌ها	Ω_i	حجم اختصاص یافته به اتم i
N_e^{VNME}	تعداد المان‌های دارای گره‌های متغیر	Ω_T	ناحیه انتقال
$\mathbf{P}^M$	تنش اول پایولا مقیاس ماکرو	λ	ضریب لاگرانژ
$\mathbf{P}^m$	تنش اول پایولا مقیاس میکرو	$\mathcal{A}_a$	مجموعه اتم های موجود در ناحیه اتمی
$\mathbf{q}$	بردار درجات آزادی در ناحیه اتمی	$\mathcal{A}_c$	مجموعه اتم های موجود در ناحیه پیوسته
		$\mathcal{S}_c^e$	مجموعه المان های ناحیه پیوسته

۱-مقدمه

انواع مسائل تَرک و ناپیوستگی را می‌توان 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 می‌شوند. 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 می‌شوند، معمولا فقط برای مسائل در مقیاس‌های بسیار کوچک دارای اهمیت ویژه هستند.

در حیطه مکانیک کلاسیک نیوتنی، روش‌های مختلفی برای مدلسازی مسائل ناپیوستگی ارائه شده است. یکی از روش‌های عددی پرکاربرد در مدلسازی این نوع مسائل، روش المان محدود است که با ایده‌های مختلفی به مدلسازی ترک یا ناپیوستگی می‌پردازد. در روش‌های 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 می‌شود 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 است. این روش برای مدلسازی رشد ترک در انواعی از مسائل 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 می‌شود.

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 توجه به این نکته که کریستال‌های تشکیل دهنده مواد در طبیعت دارای نابجایی هستند (و به عنوان منشأ ایجاد پلاستیسیته و آسیب عمل می‌کنند)، محققین برای حل مسائل در مقیاس‌های خیلی کوچک مدل‌های مولکولی/ اتمی را بکار 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 می‌گردد. 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 می‌گیرد. در این روش، مکان اتم‌ها یا ذرات سیستم، لحظه به لحظه به وسیله حل عددی معادلات دیفرانسیلی حرکت (قانون دوم نیوتن) تعیین می‌شوند و به این ترتیب مسیر حرکت ذره‌ها قابل تعیین و تحلیل است. چنانچه مدل دینامیک مولکولی در دمای صفر درجه کلوین (معادل ۲۷۳- درجه سانتی گراد) شبیه‌سازی شود، هیچ گونه پارامتر دینامیکی در شبیه‌سازی موثر نخواهد بود. در این حالت، کمینه سازی انرژی مدل در حالت استاتیکی مطرح می‌شود. در این شیوه از حل، که به آن روش استاتیک مولکولی گفته می‌شود، نیروهای بین اتمی متناسب با تابع پتانسیل آنها محاسبه می‌شود و انرژی پیوندهای شکل گرفته کووالانسی و واندروالسی لحاظ می شوند و جملات مربوط به انرژی جنبشی و مومنتوم ذرات محاسبه نمی‌گردند.

در روش‌های احتمالاتی، بر خلاف روش دینامیک مولکولی، مکان ذره‌ها از همدیگر مستقل هستند و پیکربندی

شکل ۱- روش‌های عددی در مقیاس مکان و زمان (تصویر از مرجع [٤] بازطراحی شده است)

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 شبیه‌سازی دقیق میدان‌های تنش و تولید نابجایی وجود دارد اما این مدل‌ها نیز دارای اشکالات عمده‌ای می‌باشند. هزینه محاسباتی بسیار بالا و دشواری اعمال شرایط مرزی مختلف در این روش‌ها عملاً استفاده از آن را محدود می‌سازد. از طرف دیگر، مدل‌های محیط پیوسته نیز علیرغم هزینه محاسباتی مناسب و توانایی در مدلسازی انواع شرایط مرزی، در مدلسازی پدیده‌ها در ابعاد نانو ناتوان و کم دقت هستند. بر این اساس، روند تحقیقات به سمت ایجاد مدل‌هایی هدایت شد که با استفاده از آنها بتوانند از توانایی‌های دو روش گفته شده استفاده کنند و نواقص آنها را برطرف سازند. به این ترتیب روش‌های مدلسازی چندمقیاسی به وجود آمدند.

مساله چندمقیاسی به مساله‌ای گفته می‌شود 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 مقیاس‌های زمانی و مکانی متفاوت (از نظر گستردگی و اندازه) در یک شبیه‌سازی 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 روش‌های رایج در حوزه حل چندمقیاسی را تشکیل می‌دهد.

روش‌های حل چندمقیاسی می‌تواند به دو دسته کلی ترتیبی و همزمان تقسیم شود. شکل (۱) یکی از طبقه‌بندی‌های رایج روش‌های چندمقیاسی را ارائه می‌کند [٤].

شکل ۲- مدلسازی چندمقیاسی ترتیبی زنجیره DNA [۵]

روش ترتیبی به آن دسته گفته می‌شود که در آن محاسبات یک مقیاس (معمولاً مقیاس کوچکتر) به عنوان مرحله پیش پردازش[1] برای مقیاس دیگر (معمولاً مقیاس بزرگتر) مورد استفاده قرار می‌گیرد. در یکی از معمول‌ترین حالات استفاده از این روش محاسبات، بعد کوچکتر پارامترهای لازم برای محاسبات بعد بزرگتر را فراهم می‌کند. به عنوان مثال می‌توان از محاسبات از-اساس[2] برای به دست آوردن پارامترهای پتانسیل‌های بین اتمی در روش مکانیک مولکولی استفاده کرد. در مقیاس بزرگتر نیز می‌توان از روش مکانیک مولکولی پارامترهایی نظیر مدول الاستیسیته و یا تنش تسلیم را محاسبه کرد. با انجام محاسبات بیشتر حتی می‌توان علاوه بر پارامترها فرم کلی روابط حاکم بر مقیاس بالاتر را به دست آورد.

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)) 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 [٦]. 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 ٤)

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 [٤]. 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 دقیق‌تری در مدلسازی وارد نمایند.

۲- روش‌های چندمقیاسی همزمان

در مدل‌های چندمقیاسی همزمان بخشی از محیط توسط یک روش عددی نظیر اجزا محدود و بخش دیگر توسط روشی نظیر دینامیک مولکولی مدل می‌گردد. روش‌های همزمان را می‌توان به دو زیرگروه عمده روش‌های همگن‌سازی[3] و روش‌های دامنه مجزا[4] تقسیم نمود. در روش‌های همگن‌سازی، مقیاس‌های بزرگ و کوچک می‌توانند در همه نواحی بطور همزمان وجود داشته باشند و اطلاعات بین این دو مقیاس

شکل ۳- مدلسازی چندمقیاسی ترتیبی ستون بتنی مقاوم شده با الیاف CNT [٦]

شکل ٤- مدلسازی چندمقیاسی آثار دینامیکی بر روی دریچه قلب و زیرساختار سلولی آن [٨]

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 می‌کند.

در روش دامنه مجزا، مساله به دو یا چند ناحیه مستقل و مجاور تقسیم می‌شود که هرکدام از ناحیه‌ها با مقیاس‌های متفاوت مورد بررسی قرار می‌گیرند [۹]. در این شیوه سعی می‌شود نواحی با رفتارهای مختلف در کنار یکدیگر مدل شوند. به عبارت دیگر کل دامنه به نواحی مختلف تقسیم می‌شود و مقیاس بزرگتر و کوچکتر در مجاورت یکدیگر قرار دارند. در دهه‌های اخیر این شیوه از حل چندمقیاسی مورد استقبال گسترده‌ای قرار گرفته است و روش‌های متنوعی توسعه یافته‌اند. از محبوب‌ترین این شیوه‌ها می‌توان به روش شبه‌پیوسته[۵]، ارتباط دامنه‌ها[۶] و ارتباط مقیاس‌ها[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

روش‌های همگن‌سازی برای مدلسازی مسائلی که یک نقص، آشفتگی و یا هر پدیده‌ای بصورت متمرکز در نمونه وجود ندارد و در کل مدل پخش شده است، مناسب است. در این دسته از روش‌ها، پدیده‌های موجود در ناحیه‌های با مقیاس ریزتر بر روی محاسبات میدان‌های بزرگتر اثر می‌گذارند. طبیعی است تغییرات اعمال شده می‌بایست بر روی ناحیه ریزتر نیز اثر 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 درشت‌تر استفاده می‌شود. خواص ماده در نقاط مختلف در سرتاسر مدل‌های (در هر کدام از المان‌های نماینده) بصورت جداگانه محاسبه و به مقیاس درشت‌تر منتقل می‌گردد. بدیهی است تکرار این المان‌های نماینده به معنای یکسان بودن مقادیر مشخصات مواد در همه نقاط نیست. این شیوه حل باعث می‌شود که از ریزتر کردن مش در نواحی دارای ناخالصی، نقص و یا پیچیدگی هندسه اجتناب شود که باعث افزایش سرعت محاسبات می‌گردد. روش همگن‌سازی ریاضیاتی [۱۰ و ۱۱] روش همگن‌سازی مرتبه اول [۱۲]، روش همگن‌سازی مرتبه دوم [۱۳] و روش همگن‌سازی غنی شده [۱٤] برخی از مهم‌ترین روش‌های همگن‌سازی 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 می‌شود:

$$\mathbf{u}^{\xi}(\mathbf{x}^{M}) = \sum_{j=1}^{n} \xi^{j}\mathbf{u}^{j}(\mathbf{x}^{M};\mathbf{x}^{m}) \qquad (۱)$$
$$\mathbf{x}^{m} = \frac{\mathbf{x}^{M}}{\xi}$$

که در آن n تعداد جملات بسط است که بر اساس دقت مورد نیاز انتخاب می‌شود و ξ از محاسبات مقیاس ریزتر بدست می‌آید و حلقه ارتباط بین مقیاس ریز $\mathbf{x}^{m}$ و مقیاس درشت $\mathbf{x}^{M}$ را ترسیم می‌کند [۱۰ و ۱۱].

روند خلاصه همگن‌سازی ریاضیاتی برای مسائل الاستیسیته به شرح زیر است [۱۵]:

میدان ς از حل رابطه (۲) در المان نماینده در مقیاس ریز بدست می‌آید:

$$\int_{\Omega^{m}} \mathbf{D}(\mathbf{x}^{m})\frac{\partial\varsigma(\mathbf{x}^{m})}{\partial\mathbf{x}^{m}}.\delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}^{m})d\Omega = \int_{\Omega^{m}} \mathbf{D}(\mathbf{x}^{m})\delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}^{m})d\Omega \qquad (۲)$$

سپس تانسوررفتاری همگن شده D^{h} و بردار بار همگن شده f^{bh} در مقیاس ماکرو $\mathbf{x}^{M}$ متناظر المان نماینده محاسبه می‌شوند:

جدول ۱- روش‌های چندمقیاسی همزمان دامنه مجزا

نام روش	نام اختصاری	سال انتشار	دسته روش	انطباق درجات آزادی	ناحیه انتقال	روش حل معادلات حاکم	معادله حاکم بر رابطه محیط پیوسته و اتمی
همگن‌سازی مرتبه اول (First Order Computational Homogenization)	–	۱۹۶۳	همگن‌سازی	ندارد	ندارد	انرژی- نیرویی	غیرخطی
شبه‌پیوسته (Quasicontinuum)	QC	۱۹۹۶	دامنه مجزا	دارد	ندارد	انرژی – نیرویی	کوشی بورن
همگن‌سازی ریاضیاتی (Mathematical Hemoginization)	-	۱۹۹۸	همگن‌سازی	ندارد	ندارد	انرژی- نیرویی	غیرخطی
پیوند اتم و نابجایی (Coupled Atomistic and Discrete Dislocations)	CADD	۲۰۰۲	دامنه مجزا	دارد	ندارد	نیرویی	کوشی بورن – غیرخطی
همگن‌سازی مرتبه دوم (Second Order Computational Homogenization)	-	۲۰۰۲	همگن‌سازی	ندارد	ندارد	انرژی- نیرویی	غیرخطی
ارتباط مقیاس‌ها (Bridging Scales)	BSM	۲۰۰۳	دامنه مجزا	دارد	ندارد	انرژی	کوشی بورن
ارتباط دامنه‌ها (Bridging domain)	BDM	۲۰۰٤	دامنه مجزا	ندارد	دارد	انرژی	کوشی بورن
پیوند اتم و محیط پیوسته (Atomistic to Continuum)	AtC	۲۰۰۷	دامنه مجزا	دارد	دارد	نیرویی	الاستیک خطی
شبه‌پیوسته کلاستری (Cluster-based Quasicontinuum)	CQC	۲۰۰۹	دامنه مجزا	دارد	ندارد	انرژی – نیرویی	کوشی بورن
روش همگن‌سازی غنی شده (Micro-based enriched multiscale homogenization)	EMSHM	۲۰۱۷	همگن‌سازی	دارد	ندارد	انرژی – نیرویی	غیرخطی
چندمقیاسی با گره‌های متغیر (Variabel Node Multiscale Method)	VNMM	۲۰۱۹	دامنه مجزا	دارد	ندارد	انرژی	کوشی بورن- غیرخطی
روش DCMM	DCMM	۲۰۲۲	دامنه مجزا	ندارد	ندارد	انرژی	خطی – غیرخطی
روش MD-SMD-MPM	MD-SMD-MPM	۲۰۲۳	دامنه مجزا	ندارد	دارد	انرژی – نیرویی	خطی – غیرخطی

شکل ۵- مدلسازی چندمقیاسی همگن‌سازی ریاضیاتی [۱۹]

$$\mathbf{D}^{h}(\mathbf{x}^{M}) = \frac{1}{\Omega^{m}}\int_{\Omega^{m}}\left(\mathbf{D}(\mathbf{x}^{m}) - \mathbf{D}(\mathbf{x}^{m})\frac{\partial \varsigma(\mathbf{x}^{m})}{\partial \mathbf{x}^{m}}\right)d\Omega^{m} \quad (۳)$$

$$\mathbf{f}^{bh}(\mathbf{x}^{M}) = \frac{1}{\Omega^{m}}\int_{\Omega^{m}}\mathbf{f}^{b}d\Omega^{m} \quad (٤)$$

همگن‌سازی ریاضیاتی در کارهای فیش و همکاران در مدلسازی تغییر شکل‌های بزرگ [۱٦]، 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[۱۰]

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 می‌تواند از نظر هزینه‌های محاسباتی و زمان اختصاص یافته بهینه نباشد. ایده اصلی روش‌های همگن‌سازی محاسباتی از میانگین‌گیری خواص بر روی مقیاس ریزتر حاصل می‌شود. یکی از روش‌های اولیه همگن‌سازی محاسباتی بنام همگن‌سازی مرتبه اول معروف است. در این روش کرنش (یا گرادیان تغییر شکل) محیط درشت‌تر به عنوان شرایط مرزی روی محیط ریزتر اعمال می‌شود، سپس معادله رفتاری ماده (رابطه تنش-کرنش) از حل مقیاس ریزتر بدست می‌آید. در مقیاس ریزتر از المان نماینده استفاده می‌شود. هر نقطه‌ای از مقیاس درشت‌تر می‌تواند متناظر یک المان نماینده در نظر گرفته شود. شکل (٦) این ویژگی را نشان می‌دهد. اندازه طول المان نماینده (l_m) به مراتب کمتر از اندازه طول مقیاس درشت (l_M) است و ویژگی‌های رفتاری دقیق‌تری را از ماده استخراج می‌کند.

شکل ٦- نمایش المان نماینده در مساله همگن‌سازی

شکل ۷- حل مساله چند مقیاسی همگن‌سازی مرتبه اول

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

$$d\mathbf{x}^m = \mathbf{F}^m d\mathbf{X}^m \qquad (۵)$$

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 (٦) بازنویسی می‌شود:

$$d\mathbf{x}^m = \mathbf{F}^M d\mathbf{X}^m + d\boldsymbol{\omega} \qquad (٦)$$

در روش همگن‌سازی مرتبه اول، ابتدا مشخصات ماده توسط حل المان نماینده در مقیاس ریز بدست می‌آید. تنش معادل مقیاس درشت $\mathbf{P}^M$ از توزیع تنش مقیاس ریز $\mathbf{P}^m$ مطابق رابطه (۷) محاسبه می‌شود:

$$\mathbf{P}^M = \frac{1}{\Omega_e^m}\int_{\Omega_e} \mathbf{P}^m d\Omega_e \qquad (۷)$$

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

$$\delta\mathbf{P}^M = \mathbf{D}^M : \delta\mathbf{F}^M \qquad (۸)$$

سپس این مشخصات در حل مقیاس درشت‌تر مورد استفاده قرار می‌گیرد. امکان محاسبه ماتریس گرادیان تغییر شکل را فراهم می‌نماید. این گرادیان بر روی المان نمونه اعمال می‌شود و حل بر اساس شکل (۷) بصورت تکراری ادامه پیدا می‌کند تا

همگرایی کافی حاصل شود.

روش همگن‌سازی مرتبه اول برای مدلسازی مسائل مختلف از جمله کامپوزیت‌ها، ترک‌های پخش شده در مواد و خرابی استفاده می‌شود. استفاده از این روش برای مدلسازی کامپوزیت‌ها با کمک روش اجزا محدود در هر دو مقیاس در منابع متعددی [۲۸-۳۱] دیده می‌شود. 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 روش‌ها [۳٤] 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 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 [۳٦-۳۸] نیز توسعه داده شده است. این روش برای حل مسائل دارای گردایان‌های تغییرشکل بزرگی که دقت اندازه‌گیری آنها باید در محدوده اندازه مقیاس‌های ریز باشد، بکار می‌رود. در این روش موقعیت فعلی در مقیاس ریز بر اساس گرادیان تغییر شکل مرتبه اول مقیاس درشت $(\mathbf{F}^{M})$ و گرادیان تغییر شکل مرتبه دوم $(\mathbf{G}^{M})$ مطابق رابطه (۹) محاسبه می‌شود.

$$d\mathbf{x}^{m} = \mathbf{F}^{M} d\mathbf{X}^{m} + \frac{1}{2} d\mathbf{X}^{m} \mathbf{G}^{M} d\mathbf{X}^{m} + d\boldsymbol{\omega} \qquad (۹)$$

که در این رابطه گرادیان تغییر شکل مرتبه دوم $(\mathbf{G}^{M})$ مطابق رابطه (۱۰) محاسبه می‌شود.

$$\mathbf{G}^{M} = \nabla \mathbf{F}^{M} \qquad (۱۰)$$

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 می‌شود.

در این روش بعد از حل مقیاس ریز، تانسور تنش $(\mathbf{Q}^{M})$ در مقیاس درشت مطابق رابطه (۱۱) محاسبه می‌شود.

$$\mathbf{Q}^{M} = \frac{1}{2\Omega_{e}^{m}} \int_{\Omega_{e}^{m}} (\mathbf{P}^{m}\mathbf{X}^{m} + \mathbf{X}^{m}\mathbf{P}^{m}) d\Omega_{e}^{m} \qquad (۱۱)$$

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

$$\delta\mathbf{P}^{M} = \mathbf{D}^{h_1\mathbf{P}} : \delta\mathbf{F}^{M} + \mathbf{D}^{h_2\mathbf{P}} : \delta\mathbf{G}^{M} \qquad (۱۲)$$

$$\delta\mathbf{Q}^{M} = \mathbf{D}^{h_3\mathbf{P}} : \delta\mathbf{F}^{M} + \mathbf{D}^{h_4\mathbf{P}} : \delta\mathbf{G}^{M} \qquad (۱۳)$$

که مبتنی بر محاسبه $\mathbf{P}^{M}$ طبق رابطه (۷) است.

روش همگن‌سازی مرتبه دوم بر اساس گرادیان تغییر شکل می‌تواند ساختارهای پیچیده‌تر المان نماینده، رفتارهای غیرخطی نظیر نرم شدگی، شکست و نقص را شبیه‌سازی نماید. روش همگن‌سازی مرتبه دوم می‌بایست دارای پیوستگی C^1 باشد که نیازمند تمهیدات ویژه برای تامین پیوستگی بین دو مقیاس درشت و ریز [۳۹] است.

۲-۱-٤- روش همگن‌سازی غنی شده[۱۲]

در حل برخی مسائل ویژه، روش‌های متعارف همگن‌سازی مرتبه اول و دوم برای بیان ارتباط ساختارهای مقیاس درشت و مقیاس ریز دارای دقت کافی نمی‌باشد. به عبارت دیگر،

شکل ۸- حل مساله چند مقیاسی همگن‌سازی مرتبه دوم

شکل ۹- راست) همگن‌سازی محاسباتی مبتنی بر رفتار مقیاس میکرو، چپ) همگن‌سازی محاسباتی مبتنی بر رفتار مقیاس ماکرو [۱٤]

فرمول‌بندی درگیر دو مقیاس نمی‌تواند فقط تابع شرایط گرادیان‌های اعمالی از مقیاس ماکرو باشد و لازم است متغیرهای مستقل وابسته به مقیاس میکرو هم در نظر گرفته شوند. به عنوان مثال، مساله همگن‌سازی در مجاورت نوک ترک و یا بدنه ترک نمی‌تواند توسط 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 فرمول‌بندی همگن‌سازی منظور گردند [٤۰].

شکل (۹) دو الگوی مبتنی بر ماکرو و میکرو را در همگن‌سازی محاسباتی به اختصار ارائه و مقایسه می‌نماید. برای جزئیات بیشتر به مرجع [۱٤] 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 [۱٤] 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

شکل ۱۰- مراحل حل روش همگن‌سازی غنی‌شده [۱٤]

شکل ۱۱- حل مساله ترک لبه با روش همگن‌سازی غنی‌شده [۱٤]

شکل ۱۲- نتایج شبیه‌سازی مساله ترک لبه با روش همگن‌سازی غنی‌شده [۱٤]

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 Ω_A ۷۵٪ روش همگن‌سازی مرتبه اول در تعیین میزان تنش فون میزس[۱۳] نوک ترک اشاره کرد [۱٤].

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

شکل ۱٤- موقعیت اتم‌ها و درجات آزادی ناحیه پیوسته، الف) با انطباق کامل، ب) بدون انطباق

۲-۲- روش‌های چندمقیاسی دامنه مجزا

به طور کلی روش‌های 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 می‌شوند. دسته اول 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[۱٤] به یکدیگر متصل می‌کنند. شکل (۱۳) دو گونه متفاوت این روش‌ها را نشان می‌دهد. در این شکل 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 (۱٤) بطور نمادین انواع پیوند ناحیه اتمی و پیوسته را با در نظر گرفتن انطباق و یا عدم انطباق اتم‌ها و درجات آزادی نشان می‌دهد. چنانچه اتم‌های ناحیه Ω_A بر روی گره‌های ناحیه Ω_C قرار داده شوند و حرکت آنها به یکدیگر مقید گردد، سازگاری دو محیط اتمی و پیوسته بطور کامل برقرار می‌شود که به آن سازگاری قوی اطلاق می‌شود. 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 می‌دهد.

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 می‌شود که لیست همسایگی اتم‌های موجود در ناحیه اتمی (Ω_A) و اتم‌های ناحیه انتقال (Ω_T) را تکمیل کند. این اتم‌ها که در شکل (۱٤) با دایره‌هایی به رنگ خاکستری نشان داده شده است، اتم‌های مجاور[۱۵] نامیده می‌شوند.

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 نمی‌شود و می‌بایست 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 می‌شود.

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 [٤١] که وجود آنها سبب کاهش دقت نتایج می‌شود. در برقراری تعادل نیرویی، هیچ نیروی اضافی غیرفیزیکی ایجاد نمی‌شود، اما ممکن است در برخی موارد روش همگرا نگردد [٤]. 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 Π از رابطه (١٤) محاسبه می‌شود:

$$\Pi = \Pi_A + \Pi_C + \Pi_T \qquad (١٤)$$

در این رابطه Π_A انرژی ناحیه خالص اتمی و Π_C 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، Π نسبت به جابجایی بر اساس رابطه (١٥) کمینه می‌گردد.

$$\min_{\mathbf{u}} \Pi \rightarrow \mathbf{u}(\mathbf{x}) \qquad (١٥)$$

در شیوه برقراری تعادل نیرویی، نیروها توسط رابطه (١٦) محاسبه می‌شود. در این رابطه $\mathbf{u}$ بردار جابجایی درجات آزادی اتمی و پیوسته است که با حل معادله رابطه (١٦) محاسبه می‌گردد.

$$\mathbf{f} = \frac{\partial \Pi}{\partial \mathbf{u}} \qquad (١٦)$$

که در آن $\mathbf{u}$ 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 روش‌های چندمقیاسی همزمان دامنه مجزا در مدلسازی ترک، با کمک برخی از روش‌های مندرج در جدول (١)، یک ورق آلومینیومی به عرض و طول ٢٠٠ آنگستروم دارای ترک لبه به طول ١٠٠ آنگستروم را با کمک تابع پتانسیل EAM [٤٢] مدلسازی و مطالعه شده است. در ساختار کریستالوگرافی مواد تعداد ١١٦٦٩ اتم آلومینیوم با محور افقی بر روی امتداد (١,١,١) و محور قائم بر روی امتداد (١,١,٠-) مدل شده است. مشخصات هندسی و نوع بارگذاری ورق در شکل (١٦) 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 شکل‌گیری نابجایی، رفتار گسترش ترک و نیز میزان انرژی کل

شکل ۱۶- مشخصات هندسی ورق آلومینومی دارای ترک

شکل ۱۷- ایجاد صفحات لغزش با شکل‌گیری نابجایی

سیستم ارزیابی می‌گردد. 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 می‌گردد که می‌توان آنرا به یک مساله سه‌بعدی با یک بعد بی‌نهایت نیز تعمیم داد.

بعد از اعمال جابجایی در امتداد قائم، اولین نابجایی با زاویه ٤٥ درجه از نوک ترک ایجاد می‌شود و باعث یک افت در سطح نمودار انرژی شود. شکل (۱۷) میزان جابجایی در هر 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 شبیه‌سازی ادامه پیدا می‌کند و میزان بازشدگی ترک بر روی دو ضلع بالا و پایین مدل نیز افزایش می‌یابد. با توجه به این که معیار مجموع نیروی بین اتمی می‌تواند به عنوان یک معیار مناسب جهت سنجش اولیه و مقایسه روش‌های مختلف مورد استفاده قرار گیرد، نمودار

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

مجموع نیروی بین اتمی در واحد ضخامت یک لایه آلومینیوم (٤.٩٣٨ آنگستروم) بر حسب میزان جابجایی اعمال شده، برای مدل تمام اتمی در شکل (١٩) 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 (١٧) محاسبه می‌شود که در آن اندیس i نشان دهنده گام بارگذاری است و $\mathbf{f}_i^{\text{Multiscale}}$ و $\mathbf{f}_i^{\text{MS}}$ به ترتیب بیانگر میزان نیروی بین اتمی در گام بارگذاری iام برای مدلسازی چندمقیاسی ومرجع استاتیک مولکولی است.

$$\text{Error} = 100 \times \sqrt{\frac{\left\| \mathbf{f}_i^{\text{Multiscale}} - \mathbf{f}_i^{\text{MS}} \right\|^2}{\left\| \mathbf{f}_i^{\text{MS}^2} \right\|}} \qquad (١٧)$$

٢-٢-١- روش شبه‌پیوسته

روش شبه‌پیوسته توسط تادمور[١٦] و همکاران در سال ١٩٩٦ ارائه شد [٤٣]. این روش امروزه آنچنان جایگاهی پیدا کرده است که در مدلسازی‌های بسیار زیادی مورد استفاده قرار گرفته است. به طوری که بر اساس اطلاعات منتشر شده در وب سایت رسمی آن [٤٤]، بیش از ٣٠٠ مقاله با کمک این روش منتشر شده‌اند.

شکل ۲۰- نمونه‌های مدلسازی با کمک روش شبه‌پیوسته، الف)مدلسازی اثر سطح [۵۹]، ب) مدلسازی مرزدانه [۵۸]، ج) گسترش ترک خستگی[۵٤]، د)مدلسازی مواد با ساختار نامنظم [۵۲]، ه) مدلسازی نانو نفوذ در سطح صاف [۵۰]، و)مدلسازی نانو نفوذ در سطح زبر[۵۱]

روش شبه‌پیوسته در شبیه‌سازی‌های مختلفی نظیر گسترش ترک [٤۵-٤۸]، پدیده نانو نفوذ [٤۹-۵۱]، بررسی مواد با ساختار نامنظم [۵۲]، پدیده خستگی [۵۳ و ۵٤]، نانو تماس [۵۵]، مدلسازی مرزدانه [۵٦-۵۸] و اثر سطح [۵۹] استفاده شده است. شکل (۲۰) نمونه‌های مدلسازی پدیده‌های مختلفی با روش شبه‌پیوسته را نشان می‌دهد.

در سال‌های اخیر محققین بسیاری بر روی توسعه روش شبه‌پیوسته کار کرده‌اند. توسعه روش شبه‌پیوسته برای مدلسازی در دمای بالا [٦۰ و ٦۱]، استفاده از روش کوشی بورن مرتبه بالا [٦۲ و ٦۳]، بکارگیری روش بدون المان در روش شبه‌پیوسته [٦٤]، تعریف قواعد جدید برای انتخاب اتم نماینده [٦۵ و ٦٦]، ابداع الگوریتم حذف نیروهای زائد [٦۷ و ٦۸]، مدلسازی آلیاژهای حافظه‌دار شکلی [٦۹] و مدلسازی مواد با ساختار مرکب [۷۰ و ۷۱] از جمله این تحقیقات است.

استفاده از روش شبه‌پیوسته در حل مسائل ترک نیز مورد استقبال محققین قرار گرفته است. بررسی وضعیت شکل‌گیری

شکل ۲۱- بررسی وضعیت ساختارهای کریستالی درن نوک ترک با کمک روش شبه‌پیوسته [۷۵]

شکل ۲۲- وضعیت اتم ها در مدلسازی ترک بین لایه‌ای تحت بار چرخه‌ای، چپ) شرایط اولیه، راست)انتهای سیکل اول [٥٤]

ترک و گسترش آن با کمک روش شبه‌پیوسته در فلزات با ساختار اتمی BCC در مطالعات لو و لی [۷۲] و واتنه و استبای [۷۳] و شبیه‌سازی در ساختارهای FCC در مطالعات شائو و ونگ [٧٤] و بررسی جزئیات کریستالی (شکل ۲۱) در نوک ترک در مطالعات اخوان و همکاران [۷۵] دیده می‌شود.

استفاده از روش چندمقیاسی همزمان شبه‌پیوسته در مدلسازی رفتار ترک در مواد چندلایه‌ای[۲۱] در پژوهش‌های چنگ داوو و همکاران [٧٦] برای شبیه‌سازی رفتار ترک بین لایه‌ای فلزات و دریافت مشخصات مکانیکی مواد تحت کشش، پژوهش وئو و فنگ [۷۷] برای بررسی تاثیر طول اولیه ترک و جهت‌گیری اولیه کریستال‌های مواد در گسترش ترک و مشخصات مواد لایه‌ای، دیده می‌شود. علیزاده و همکاران [٥٤] 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 شبه‌پیوسته برای مدلسازی گسترش ترک در بارهای خستگی و چرخه‌ای در پژوهش‌های 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 شبه‌پیوسته نیز دیده می‌شود. در این مقاله، به تاثیر بهم آمیختگی و در هم تنیدگی نابجایی‌ها در نوک ترک در شکست ترد یا شکل‌پذیر ترک اشاره شده است. پرداختن به شکل‌گیری

شکل ۲۳- مدلسازی تمام اتمی

شکل ۲٤- نمایش روش شبه‌پیوسته

و حرکت نابجایی‌ها از نقاط قوت روش شبه‌پیوسته در مقایسه با سایر روش‌هاست.

در روش شبه‌پیوسته، شبکه‌ای از اتم‌ها مدل می‌شود و انرژی کل سیستم توسط انرژی اتم‌ها محاسبه می‌گردد. انرژی یک شبکه تمام اتمی نظیر شکل (۲۳) توسط رابطه (۱۸) تعریف می‌شود.

$$\Pi = \Pi_A = \sum_{i=1}^{N^{atom}} \Psi_i \qquad (۱۸)$$

که در آن Ψ_i انرژی اتم i است که از طریق پتانسیل بین اتمی بدست می‌آید و N^{atom} تعداد کل اتم‌های موجود در دامنه است. این اتم‌ها بصورت دایره‌های آبی رنگ در شکل (۲۳) نشان داده شده‌اند.

در روش شبه‌پیوسته برای آنکه از تعداد درجات آزادی کاسته 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[۱۷]مادی (نظیر ترک در وسط شکل ۲٤) در آن موجود است ابعاد المان‌های شبکه در حد اندازه پارامتر شبکه اتمی[۱۸]در نظر گرفته می‌شود و در 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 می‌شود.

همانگونه که در شکل (۲٤) دیده می‌شود، ابعاد المان‌های 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 Ω_A و Ω_C رابطه (۱۸) را می‌توان بصورت رابطه (۱۹) بازنویسی کرد.

شکل ۲۵- نمایش حجم ویگنر-سیز در مدل دوبعدی [۷۹]

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

$$\sum_{i=1}^{N^{atom}} \Psi_i = \underbrace{\sum_{i\in A_a} \Psi_i}_{\Pi_A} + \underbrace{\sum_{i\in A_c} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}))\Omega_1}_{\Pi_C} \qquad (۱۹)$$

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:

$$\sum_{i=1}^{N^{atom}} \Psi_i = \underbrace{\sum_{i\in A_a} \Psi_i}_{\Pi_A} + \underbrace{\sum_{e\in S_c^e} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}))\Omega_e}_{\Pi_C} \qquad (۲۰)$$

که در آن S_c^e مجموعه المان‌های ناحیه Ω_C است و Ω_e حجم المان است که با عبارت $N_e^{atom}\Omega_i$ برابر است. در 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 می‌گردد. اتم نماینده در داخل المان قرار می‌گیرد و انرژی آن بعد از محاسبه به کل

شکل ۲۷- نمای اولیه مدل شبه‌پیوسته مساله ترک لبه ورق آلومینیومی

شکل ۲۸- گسترش نابجایی در روش شبه‌پیوسته از نوک ترک در سه مقطع مختلف از شبیه‌سازی

المان تعمیم داده می‌شود. توضیحات کامل در ارتباط با اتم نماینده در بخش ۵-۲-۲ آورده شده است.

در راستای بررسی بیشتر روش شبه‌پیوسته، مساله ورق آلومینیومی دارای ترک گوشه مطرح شده در بخش ۲-۲ توسط این روش نیز مدلسازی می‌شود. در ابتدا تعداد ۱۹۷٤ گره دارای درجه آزادی برای ۱۱٦٦۹ اتم ایجاد می‌شود. شکل (۲۷) نمای اصلی المان‌بندی مساله ترک لبه با کمک روش شبه‌پیوسته را نشان می‌دهد.

همان گونه که از روش شبه‌پیوسته انتظار می‌رود، 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 می‌گردد و در نواحی نوک ترک و نزدیک نابجایی ساختار مش‌بندی مساله در حد ابعاد شبکه اتمی فلز آلومنیومی ریزتر شده است. شکل (۲۸) پیدایش اولین نابجایی را نشان می‌دهد. همزمان با شکل‌گیری 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

شکل ۲۹- تنش قائم در روش شبه‌پیوسته 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

گسترش نابجایی، بر تعداد المان‌های مدل افزوده می‌شود و ناحیه دارای مش بندی ریز گسترش می‌یابد.

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 شکل‌پذیر 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 شبیه‌سازی، با اینکه ترک رشد زیادی نمی‌کند ولی دو لبه ترک از همدیگر فاصله می‌گیرند و ترک بازتر می‌شود و شکل نوک ترک کماکان بصورت منحنی باقی می‌ماند. ساختار کریستالی اتم آلومینیوم با محور افقی بر روی امتداد (۱,۱,۱) و محور قائم بر روی امتداد (۱,۱,۰-) موجب شکل‌گیری ترک شکل‌پذیر می‌شود.

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 در زمان تشکیل اولین نابجایی و توزیع تنش در مجاورت

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

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 می‌شود.

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 مش‌بندی 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 چشم‌گیری پیدا می‌کند و به کمتر از ۱٪ می‌رسد.

شکل۳٤- نمایش روش پیوند اتم و نابجایی

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

۲-۲- روش پیوند اتم و نابجایی[۲۲]

این روش در سال ۲۰۰۲ توسط شیلکروت[۲۳] و میلر[۲٤] 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 (۳٤) 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 می‌شود 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 می‌شود و سایر نیروها و جابجایی‌های مساله نیز بر روی ناحیه اتمی اعمال می‌شوند. بنابراین پاسخ (میدان جابجایی) بدست آمده از روش پیوند اتم و نابجایی، همان مجموع جابجایی‌های دو بخش (I) و (II) در ناحیه پیوسته و بخش (III)) در ناحیه اتمی می‌باشد.

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 دادند که این روش، برای شبیه‌سازی رفتار مواد با دقت

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

شکل ۳٦- مدلسازی ورق آلومینیوم دارای ترک لبه با روش پیوند اتم و نابجایی

بالا و درصد خطای کم، مناسب است. در ادامه، چو و همکاران [۸٤] 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 ۸٦] 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 [٤١] مدلسازی شده است (شکل ۳٦).

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 ۲٤ام و به میزان ۷٪ است که از بیشینه خطای روش شبه‌پیوسته (۵٪) بیشتر است.

همچنین زمان شبیه‌سازی با کمک روش پیوند اتم و

شکل ۳۷- نمودار نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش پیوند اتم و نابجایی

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 ٤٠- ایجاد صفحات لغزش با شکل‌گیری نابجایی

شکل ٤١- نمایش روش ارتباط مقیاس‌ها

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

۲-۲-۳- روش ارتباط مقیاس‌ها[۲۵]

روش ارتباط مقیاس‌ها توسط واگنر[۲۶] و لیو[۲۷] [۸۷] و با ایده جداسازی میدان جابجایی کل به دو جابجایی ریز مقیاس $(\mathbf{u}^{m})$ و درشت مقیاس $(\mathbf{u}^{M})$ ابداع شد:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^{M} + \mathbf{u}^{m} \qquad (۲۱)$$

در روش ارتباط مقیاس‌ها، مطابق شکل (٤١) ناحیه اتمی و پیوسته بر روی یکدیگر منطبق هستند و ناحیه اتمی در راستای دقیق‌تر کردن پاسخ (میدان جابجایی) استفاده می‌شود.

در این روش، جابجایی درشت مقیاس $\mathbf{u}^{M}$ از حل شبکه اجزا محدود بدست می‌آید و جابجایی ریز مقیاس $\mathbf{u}^{m}$ از کسر تصویر[۲۸] جابجایی درشت مقیاس از جابجایی کل اتمی حاصل می‌شود [۸۸]:

$$\mathbf{u} = \mathbf{Nd} + \mathbf{Qq} = \underbrace{\mathbf{Nd}}_{\mathbf{u}^{M}} + \underbrace{(\mathbf{I} - \mathbf{NM}^{-1}\mathbf{N}^{T}\mathbf{M}_{A})\mathbf{q}}_{\mathbf{u}^{m}} \qquad (۲۲)$$

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 $\mathbf{d}$ در کل میدان و $\mathbf{q}$ در نواحی مدلسازی اتمی قرار دارند.

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

شکل ٤٢- مدلسازی دینامیکی رشد ترک به روش ارتباط مقیاس‌ها [٨٨]

شکل ٤٣- نمودار نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش ارتباط مقیاس‌ها

ناپیوستگی ضعیف (باند برشی) نمایش داده شده در شکل (٤٢) اشاره کرد.

مساله ورق آلومینیومی با روش ارتباط مقیاس‌ها مدلسازی شده است و نتایج حاصل از مدل در شکل (٤٣) نمایش داده شده است. شکل (٤٤) بیشترین میزان خطای انرژی در هر گام نسبت به حل تمام اتمی استاتیک مولکولی را ٤٪ 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.

٢-٢-٤- روش ارتباط دامنه‌ها

یکی از روش‌های مهم مدلسازی چندمقیاسی، روش ارتباط دامنه‌هاست که توسط ژیائو[٢٩] و بلیتچکو[٣٠] توسعه داده شده است [٨٩]. این روش جهت اتصال دو ناحیه اتمی و پیوسته به یکدیگر از ناحیه انتقال استفاده می‌کند (شکل ٤٥).

شکل ٤٤- نمودار خطای نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش ارتباط مقیاس‌ها

شکل٤٥- روش ارتباط دامنه‌ها

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:

$$\Pi_C = \int_{\Omega_C} w_C(\mathbf{x}) W(\mathbf{u}(\mathbf{x})) d\Omega \qquad (۲۳)$$

$$\Pi_A = \frac{1}{2}\sum_{i\in A_a}\sum_{\substack{j\in A_a \\ j\neq i}}\left[\frac{1}{2}(w_A(\mathbf{x}_i)+w_A(\mathbf{x}_j))\right]\Psi(\mathbf{x}_i.\mathbf{x}_j) \qquad (۲٤)$$

$$\Pi_T = \sum \lambda(\mathbf{x}_i^A).\left[\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^A)-\mathbf{u}_i^A\right] \qquad (۲٥)$$

در رابطه (۲٥) λ ضریب لاگرانژ است که جابجایی دو محیط پیوسته و اتمی را با سازگاری ضعیف با یکدیگر هماهنگ می‌کند [۹۰]. در روابط (۲۳) و (۲٤) توابع $w_C(x)$ و $w_A(x)$ به ترتیب تابع وزن محیط پیوسته و اتمی هستند که مطابق شکل (٤٦) تعریف می‌شوند.

همان گونه که در شکل (٤٦) مشهود است، تابع وزن پیوسته در ناحیه پیوسته مقدار یک را دارد و در ناحیه اتمی برابر صفر است [۱٥]. این تابع بصورت خطی در ناحیه انتقال از یک به صفر به تدریج کاسته می‌شود. تابع وزن ناحیه اتمی برعکس ناحیه پیوسته عمل می‌کند. در شکل (٤٦) 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

ب

الف

شکل ٤٦- 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 Π_1 و Π_2 تقسیم می‌کند.

$$\Pi = \underbrace{\Pi_C + \Pi_T}_{\Pi_1} + \underbrace{\Pi_A}_{\Pi_2} \tag{۲۶}$$

سپس جهت کمینه‌سازی انرژی کل، از هر یک از توابع Π_1 و Π_2 نسبت به درجات آزادی مدل مشتق گرفته می‌شود [۹۱].

$$\frac{\partial \Pi_1}{\partial \mathbf{u}_{c_i}} = 0 \tag{۲۷}$$

$$\frac{\partial \Pi_1}{\partial \boldsymbol{\lambda}_i} = 0 \tag{۲۸}$$

$$\frac{\partial \Pi_2}{\partial \mathbf{u}_{a_i}} = 0 \tag{۲۹}$$

در رابطه‌های (۲۷) الی (۲۹) پارامترهای $\mathbf{u}_{c_i}$ ، $\mathbf{u}_{a_i}$ و $\boldsymbol{\lambda}_i$ به 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 [۹۲-۹٤]. این روش در راستای توسعه مدل‌های مواد و نیز توسعه روش مورد توجه بوده است بگونه‌ای که مدلسازی مواد با شبکه اتمی کامپوزیت[۳۱]، مدلسازی ساختارهای کربنی از یک سو و بکارگیری روش اجزا محدود توسعه یافته[۳۲] در محیط پیوسته، از موارد بارز توسعه روش ارتباط دامنه‌ها بوده است [۹۵ و ۹٦].

مساله ترک لبه بخش ۲-۲ با کمک روش ارتباط دامنه‌ها مدلسازی شده است و نتایج آن در شکل‌های (٤۷) و (٤۸) ترسیم شده است. بیشترین میزان خطای این روش نسبت به روش استاتیک مولکولی ٦/۵ درصد است. در این روش وجود نیروهای اضافی بدلیل قیود اعمال شده به مساله باعث افزایش خطا می‌گردد. هر چند خطای این روش در مقایسه با روش شبه‌پیوسته اندکی بالاتر است اما میزان خطا در حد قابل قبول است.

۲-۲-٤-۱-روش پیوند اتم و محیط پیوسته[۳۳]

این روش نسخه نیرویی روش ارتباط دامنه‌ها است [۹۷-۱۰۰]. روند کلی مدلسازی این روش در شکل (٤۹) 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 Ω_A) و نیز بردار نیروهای باقی مانده بر روی گره‌های اجزا محدود از روابط زیر بدست می‌آیند:

$$\mathbf{f}_i = \sum_{\substack{j \in A_a \\ j \neq i}} \frac{\partial \Psi(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}} \tag{۳۰}$$

$$\mathbf{f}_I = \int_{\Omega_C} \mathbf{P} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{x}} d\Omega \tag{۳۱}$$

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 ٤٧- نمودار نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش ارتباط دامنه‌ها

شکل ٤٨- نمودار خطای نیروی مساله ورق آلومینیومی در روش ارتباط دامنه‌ها

شکل ٤٩- نمایش روش پیوند اتم و محیط پیوسته

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

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 شبه‌پیوسته پیشنهاد شده است. در حالت (b) مجموعه‌ای از اتم‌های مجاور گره‌های شبکه مثلثی به عنوان اتم نمونه‌گیری انتخاب می‌شود. به این شیوه حل روش شبه‌پیوسته کلاستری گفته می‌شود [۱۰۱] و به هریک از مجموعه دوایر قرمز به همراه دوایر آبی رنگ مجاور آن یک کلاستر گفته می‌شود. در این روش انرژی اتم نماینده (دایره قرمز) از میانگین انرژی اتم‌هایی که در یک کلاستر قرار دارند بدست می‌آید. در حالت‌های (ج) و (د) جهت ارتقای روش محاسبه انرژی تعدادی اتم نمونه‌گیری در میان المان مورد استفاده قرار می‌گیرند.

در روش شبه‌پیوسته کلاستری که در شکل (۵۱) نمایش داده شده است، دایره‌های سبز رنگ پیرامون گره‌ها، نمایش 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 شبه‌پیوسته تفاوتی نخواهد داشت و چنانچه شعاع دایره بزرگ انتخاب شود بگونه‌ای که تمامی اتم‌های موجود به عنوان اتم نمونه‌گیری انتخاب شوند، آنگاه مدل بطور کامل با روش‌های 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 می‌شوند.

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 می‌شود. 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

شکل ۵۱- روش شبه‌پیوسته کلاستری

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 می‌بایست 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

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 می‌گیرند ضروری است.

در شکل (٥٤- الف) یک مدل تمام اتمی دیده می‌شود که در مرکز آن یک نقص (نابجایی) وجود دارد. با استفاده از روش چندمقیاسی همزمان VNMM می‌توان ناحیه اطراف نابجایی را با کمک المان چندمقیاسی شبیه‌سازی نمود. سایر اتم‌های مدل نیز می‌توانند به دو حالت نشان داده شده در شکل (٥٤ - ب و ج) در مدل ایجاد گردند. در حالت اول که نظیر روش ارتباط دامنه‌ها است (شکل ٥٤-ب)، اتم‌های موجود در همسایگی اتم‌های المان چندمقیاسی مدل می‌شوند. در این حالت، اتم‌های خاکستری رنگ نمایش داده شده در شکل، جهت تکمیل میدان نیروی اتم‌های دارای درجه آزادی بکار برده می‌شود. در حالت دوم (شکل ٥٤-ج) که مشابه روش شبه‌پیوسته است کلیه اتم‌ها بطور کامل مدل می‌شوند. در این حالت انرژی المان‌های موجود می‌تواند مشابه روش شبه‌پیوسته از انرژی اتم‌های زیرین محاسبه شود.

موقعیت اتم‌هایی که دارای درجه آزادی هستند (اتم‌های قرمز رنگ شکل ٥٤) توسط روش چندمقیاسی که در ادامه تشریح خواهد شد بدست می آید و موقعیت اتم‌های خاکستری رنگ که دارای درجه آزادی نیستند می‌بایست توسط فرضیه کوشی بورن تعیین شود [١٠٤]. بر اساس این فرضیه جابجایی اتم‌هایی که در ناحیه دارای روند تغییر شکل یکنواخت هستند تابع گرادیان تغییر شکل محیط پیوسته خواهند بود. استفاده از فرضیه کوشی بورن در نواحی دارای رفتار غیرخطی منجر به تولید خطای بسیار بالایی می‌گردد که موضوعیت استفاده از آن در روش‌های چندمقیاسی را دچار تردید می‌کند و نیازمند اصلاحاتی است.

چنانچه موقعیت اولیه اتم‌ها $\mathbf{X}_i^{atom}$ و موقعیت نهایی آنها $\mathbf{x}_i^{atom}$ باشد، آنگاه رابطه (٣٢) بین موقعیت اولیه و نهایی برقرار است:

$$\mathbf{x}_i^{atom} = \mathbf{F}\mathbf{X}_i^{atom} \qquad (٣٢)$$

که در آن $\mathbf{F}$ گرادیان تغییر شکل است که از حل ناحیه پیوسته بدست می‌آید. حل ناحیه پیوسته می‌تواند با کمک اجزا محدود غیرخطی محاسبه شود. در روش چندمقیاسی با المان دارای گره‌های متغیر انرژی کل یک سیستم مطابق رابطه (٣٣) محاسبه می‌شود.

$$\Pi(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^{N_e^{conv}} W(\mathbf{F}_i(\mathbf{u}))\Omega_e + \sum_{j=1}^{N_e^{VNME}} W(\mathbf{F}_j(\mathbf{u}))\Omega_e - \sum_{k=1}^{N^{node}} \mathbf{f}_k^{ext}.\mathbf{u}_k \qquad (٣٣)$$

شکل ٥٤- 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 این رابطه W تابع چگالی انرژی کرنشی، $\mathbf{F}$ گرادیان تغییر شکل، Ω_e حجم المان، $\mathbf{f}^{ext}$ بردار نیروهای خارجی اعمال شده به گره، N^{node} تعداد کل گره‌ها، N_e^{conv} و N_e^{VNME} 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:

$$\sum_{i=1}^{N_e^{conv}} W(\mathbf{F}_i(\mathbf{u}))\Omega_i \approx \sum_{\alpha=1}^{N_a^{conv}} \Psi_\alpha \qquad (٣٤)$$

در رابطه (٢٩)، Ψ_α تابع پتانسیل بین اتمی و N_a^{conv} تعداد اتم‌های زیر المان متداول اجزا محدود است. رابطه (٣٤) قابل تعمیم به المان با گره‌های متغیر نیست زیرا گرادیان تغییر شکل در این المان به دلیل استفاده از توابع پایه شعاعی یکنواخت نیست [١٠٥]. بنابراین انرژی المان با گره‌های متغیر می‌تواند توسط رابطه (٣٥) محاسبه شود:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_a^{VNME}} \Psi_\alpha \approx \sum_{j=1}^{N_e^{VNME}} W(\mathbf{F}_j(\mathbf{u}))\Omega_j + \tilde{\Pi} \qquad (٣٥)$$

در این رابطه $\tilde{\Pi}$ عبارت اصلاحی انرژی المان با گره‌های متغیر است که توسط رابطه (٣٦) قابل محاسبه است [١٠٥]:

$$\tilde{\Pi}(\mathbf{u}^m) = \sum_{\alpha=1}^{N_a^{VNME}} \Psi_\alpha(\mathbf{X}_\alpha + \mathbf{u}^M + \mathbf{u}^m) \qquad (٣٦)$$

که در آن $\tilde{\Pi}(\mathbf{u}^m)$ انرژی کل سیستم، $\mathbf{X}_\alpha$ 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.

$$\Pi(\mathbf{u})= \sum_{j}^{N_{VNME}} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}^M))\Omega_j + \tilde{\Pi}(\mathbf{X}_\alpha + \mathbf{u}^M + \mathbf{u}^m) + \sum_{j}^{N_{conv}} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}^M))\Omega_j - \sum_{k}^{N_n} \mathbf{f}_k^{ext}.\mathbf{u}_k \tag{۳۷}$$

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

$$\frac{\partial \Pi(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}^M} = \frac{\partial(\sum_{j}^{N_{VNME}} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}^M))\Omega_j)}{\partial \mathbf{u}^M} + \frac{\partial(\tilde{\Pi}(\mathbf{X}_\alpha + \mathbf{u}^M + \mathbf{u}^m))}{\partial \mathbf{u}^M} + \frac{\partial(\sum_{j}^{N_{conv}} W(\mathbf{F}(\mathbf{u}^M))\Omega_j)}{\partial \mathbf{u}^M} + \frac{\partial(\sum_{k}^{N_n} \mathbf{f}_k^{ext}.\mathbf{u}_k)}{\partial \mathbf{u}^M} = 0 \tag{۳۸}$$

$$\frac{\partial \Pi(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}^m} = \frac{\partial(\tilde{\Pi}(\mathbf{X}_\alpha + \mathbf{u}^M + \mathbf{u}^m))}{\partial \mathbf{u}^m} = 0 \tag{۳۹}$$

از حل همزمان دو رابطه (۳۸) و (۳۹) مقدار جابجایی $\mathbf{u}^M$ و $\mathbf{u}^m$ برای کلیه گره‌ها و اتم‌ها بدست می‌آید. جمله مشترک $\tilde{\Pi}(\mathbf{X}_\alpha + \mathbf{u}^M + \mathbf{u}^m)$ در دو رابطه (۳۸) و (۳۹) باعث کوپل شدن دو معادله به یکدیگر می‌شود. 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 (٤٠) بدست می‌آید:

$$\mathbf{u}=\mathbf{u}^M + \mathbf{u}^m \tag{٤٠}$$

در این عبارت $\mathbf{u}^M$ حرکت درشت‌مقیاس و $\mathbf{u}^m$ 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 می‌شود. در این مقاله یک محیط شامل ۱۰۲۰۱ اتم، از جملات غنی‌سازی (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 می‌شود. مدل VNMM با دو شبکه بندی ساختار منظم و بدون ساختار ایجاد می‌شود. دو المان با گره‌های متغیر نظیر آنچه در شکل (۵۵) نشان داده شده است پیرامون ترک را احاطه کرده‌اند. این ترک از ابتدا در مدل ایجاد می‌شود و با کشیده شدن ورق گسترش می‌یابد. بقیه ورق توسط المان‌های متداول اجزا محدود مدل شده است.

المان‌های دارای گره متغیر نزدیک ترک، تنها توسط تابع 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 ترک اعتباری نخواهد داشت. مدل روش VNMM با سه مدل متفاوت از روش شبه‌پیوسته و یک مدل از روش استاتیک مولکولی مقایسه می‌شود.

مدل (C) نشان داده شده در شکل (٥٦) 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 می‌شود. 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 ٥٦ – مدل‌های شبه‌پیوسته حل ترک، الف) مدل C، ب) مدل D، (ج) مدل E

از آنجایی که امکان غنی‌سازی روش شبه‌پیوسته وجود ندارد لذا ترک در مدل شبه‌پیوسته بصورت ترکیبی و با توسط فاصله دادن دو اتم از یکدیگر ایجاد شده است. جدول (۲) مشخصات تمامی مدل‌ها را نشان می‌دهد.

علاوه بر اختلاف زیاد در تعداد درجات آزادی، خطای نسبی روش VNMM نسبت به مدل استاتیک مولکولی بسیار کم و محدود به حداکثر ۵٪ است.

جدول ۲- مشخصات مدل‌ها

روش	مدل	اندازه تقریبی المان نزدیک ترک (آنگستروم)	تعداد المان	تعداد درجه آزادی	تعداد گره‌ها	تعداد اتم‌ها	بیشینه خطای جابجایی
MS	-	–	–	۲۰٤۰۲	–	۱۰۲۰۱	–
VNMM	A	۵	۳۸۰	۹٤۲	٤٦۵	۱۰۲۰۱	۳/۲٦٪
VNMM	B	۲۰	۱۰۸	۲۳٤	۱۱۱	۱۰۲۰۱	۵/۱٤٪
QC	C	۵	۱۲٦۵	۱٦۳٦	۸۱۸	۱۰۲۰۱	٤/۷۹٪
QC	D	۲۰	۵۷٦	۹۰۰	٤۵۰	۱۰۲۰۱	٦/۸٪
QC	E	۲۰	٤۰٤	٦۰۰	۳۰۰	۱۰۲۰۱	٦/٦٦٪

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

۲-۲-۷- روش چندمقیاسی DCMM[۳۹]

در حالی که بیشتر روش‌های چندمقیاسی توسعه داده شده برای شبیه‌سازی مواد دارای ساختار کریستالی منظم هستند، موادی نظیر شیشه، پلیمر، آمورف‌ها و پروتئین‌ها ساختارهای نامنظمی دارند. روش DCMM [۱۰۸] برای شبیه‌سازی چندمقیاسی مواد دارای ساختار غیر کریستالی توسعه یافته است. در این روش، کل دامنه به المان‌های متعددی (ساختار مش‌بندی یکنواخت و غیریکنواخت) مطابق شکل (۵۷) تقسیم‌بندی می‌شود. هر یک از المان‌هایی که در مجاورت میدان دارای گرادیان تغییرشکل شدید قرار دارند نقش محیط با مقیاس ریز و سایر المان‌ها نقش محیط با مقیاس درشت را بازی می‌کنند.

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

میکرو)، از روش‌های بدون المان استفاده می‌شود و در نهایت گرادیان تغییر شکل مدل میکرو $(\mathbf{F}^m)$ قابل محاسبه است. موقعیت نهایی هر اتم بر اساس تجزیه ضربی گرادیان تغییرشکل $\mathbf{F}$ به اجزاء میکرو $\mathbf{F}^m$ و ماکرو $\mathbf{F}^M$ با اعمال رابطه (٤١) قابل محاسبه است:

$$\mathbf{F}=\mathbf{F}^M\mathbf{F}^m \tag{٤١}$$

تابع گرادیان تغییر شکل $\boldsymbol{F}$ 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 [١٥]:

$$\Pi = \Pi^M + \Pi^m \tag{٤٢}$$

$$\Pi^M = \int_{\Omega^M} w^S(\mathbf{F}(\mathbf{u}))d\Omega - \int_{\Omega^M} \rho_0 \mathbf{f}^b.\mathbf{u}d\Omega - \int_{\Gamma_t^M} \mathbf{f}^t.\mathbf{u}d\Gamma \tag{٤٣}$$

$$\Pi^m = \left[\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\substack{i.j\\ j\neq i}}^{n_t}\phi_2(r_{ij}) + \frac{1}{6}\sum_{\substack{i.j.k\neq i\\ i\neq j\neq k}}^{n_t}\phi_3(r_{ij}.r_{ik}.\theta_{jik})}_{U^p}\right] + \left[\underbrace{\sum_{i}^{n_t}\frac{1}{2}m_i(v_i)^2}_{U^k}\right] \tag{٤٤}$$

$$\mathbf{P}^m = \frac{1}{\Omega_0}\frac{\partial U^P}{\partial \mathbf{F}_\alpha} = \frac{1}{\Omega_0}\sum_{i=1}^{n_t}\left(\frac{\partial U^P}{\partial \mathbf{F}_\alpha}\right) \tag{٤٥}$$

$$\mathbf{P}^M = \frac{\partial w^s}{\partial F} \tag{٤٦}$$

$$\mathbf{D}^M = \frac{\partial^2 w^s}{\partial \mathbf{F}^2} \tag{٤٧}$$

شکل (٥٩) نمونه‌ای از مدلسازی انجام شده توسط این روش را که برگرفته از مرجع [١٥] 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.

٢-٢-٨- روش چندمقیاسی MD-SMD-MPM

در مقاله ارائه شده توسط ونگ و همکاران [١٠٩] 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 توسط روش دینامیک مولکولی مدل می‌شود. دو ناحیه اتمی و پیوسته مطابق شکل (٦٠) توسط روش دینامیک مولکولی هموار شده[٤٠] به یکدیگر متصل می‌شوند.

استفاده از روش دینامیک مولکولی هموار شده باعث می‌شود اتصال اصلی بین دو ناحیه برقرار شود. در روش SMD یک شبکه المان بندی شده به روش دینامیک مولکولی اضافه می‌شود. در این روش تمامی متغیرهای فیزیکی نظیر موقعیت و جابجایی بر روی شبکه اتمی محاسبه می‌شود و معادلات مومنتوم بر روی شبکه المان بندی مجزا حل می‌شود. در گام بعدی، مقادیر بدست آمده از شبکه المان بندی شده برای بروزرسانی جابجایی اتم ها استفاده می‌شود. شبکه المان بندی، یک شبکه ساده متشکل از المان‌های ٤ گرهی است. شکل (٦١) نمایشی از مراحل حل به روش SMD را نشان می‌دهد [١١٠] که به شرح زیر خلاصه می‌شود:

١- المان‌ها تشکیل می‌شوند و مقدار تابع شکل در موقعیت اتم i محاسبه می‌شود. این مقدار در هر گام زمانی بروز می‌شود.

٢- اختصاص مقادیر جرم، مومنتوم و نیروها از روی اتم‌ها به گره‌های المان مطابق با بخش (الف) شکل (٦١)

٣- حل شبکه المان‌ها در گام $n+\frac{1}{2}$ مطابق با بخش (ب) شکل (٦١)

٤- بروزرسانی موقعیت اتم‌ها بر اساس محاسبات بدست آمده و محاسبه گام $n+1$ مطابق با بخش (ج) شکل (٦١)

شکل ۵۸ – شبیه‌سازی میدان اتمی در روش DCMM [۱۵]

شکل ۵۹ – شبیه‌سازی با روش DCMM [۱۵]

شکل ٦٠– مدلسازی MD-SMD-MPM [۱۰۹]

شکل ٦١- مراحل روش SMD [١١٠]

شکل ٦٢- اتم‌های مجاور ناحیه انتقال در روش MD-SMD-MPM [١٠٩]

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 (٦١)

۷- بروزرسانی سرعت اتم‌ها بر اساس گام $n+1$ و $n+\frac{1}{2}$ مطابق با بخش (ه) شکل (٦١)

۸- بازسازی مجدد المان زیرین برای انجام محاسبات گام بعدی مطابق با بخش (و) شکل (٦١)

دو ناحیه پیوسته و اتمی در روش MD-SMD-MPM به کمک روش SMD یکدیگر متصل می‌شوند. وجود اتم در مجاورت اتم‌های ناحیه دینامیک مولکولی در روش SMD باعث کاهش خطای ایجاد نیروهای اضافی و افزایش دقت می‌شود. شکل (٦٢) نمایشی از همسایه‌های اتم‌های مجاور ناحیه انتقال را نشان می‌دهد. پیوستگی ناحیه پیوسته توسط روش بدون المان MPM تضمین می‌شود و از سوی دیگر ناحیه اتمی توسط دینامیک ملکولی مدل می‌شود. هر دو ناحیه در بخش مدل شده توسط روش SMD هم پوشانی دارند (شکل ٦٣).

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 ٦٣- 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 شبه‌پیوسته 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 واقعی‌تر را از بین می‌برند. 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 روش‌های چندمقیاسی همزمان در ابتدا برای مدلسازی از روش استاتیک مولکولی استفاده می‌کنند که باعث محدود شدن دمای شبیه‌سازی به دمای صفر درجه کلوین می‌شود. این روش‌ها ممکن است در مسیر توسعه به استفاده از روش دینامیک مولکولی روی بیاورند اما هزینه محاسباتی بالا یکی از چالش‌های جدی پیش روی این دسته از روش‌ها هستند.

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

فراهم کند، مورد انتظار است.

۸- محدودیت‌های نوع ارتباط بین ناحیه پیوسته که از روش اجزا محدود استفاده می‌شود با روش‌های غیرپیوسته اتمی همواره منشا خطاهای زیادی است که برای حل این مشکل روش‌های چندمقیاسی که از روش‌های بدون المان بهره می‌برند می‌توانند خطاهای ایجاد شده را کاهش دهند.

۹- در روش‌های چندمقیاسی توسعه داده شده مبتنی بر ایده غنی‌سازی، هر یک از میدان‌های متغیرهای موجود مدل می‌توانند راهکاری موثر برای کاهش هزینه‌های محاسباتی و کسب دقت مورد نظر گردند. استفاده از جملات غنی‌سازی در 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.

واژه‌نامه

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
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
37. Variable Node Element (VNE)
38. grain boundary
39. Disordered Concurrent Multiscale Method
40. Smoothed Molecular Dynamics

منابع

References

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.
6. 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.
7. 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.
9. 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.
10. 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.
11. 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.
12. Nemat-Nasser, S. and Hori, M., "Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials", New York: Elsevier, 1998.
13. 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.
14. 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.
17. 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.
20. 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.
24. 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.
26. 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.
31. 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.
61. 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.
68. 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.
100. 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

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.