论文

基于原子模型的非局域连续模型

向美珍*, 崔俊芝*, 田霞

中国科学院数学与系统科学研究院, 计算数学与科学工程计算研究所, 科学与工程计算国家重点实验室, 北京 100190

* 联系人, E-mail: mzxiang@lsec.cc.ac.cn; cjz@lsec.cc.ac.cn

收稿日期: 2010-09-02; 接受日期: 2010-12-16

国家自然科学基金 (批准号: 90916027)、国家重大基础研究计划 (批准号: 2010CB832702) 和科学和工程计算国家重点实验室资助项目

摘要 在传统的连续模型中, 本构关系, 例如胡克定律、热传导的傅立叶定律是宏观现象的表征. 在原子尺度下, 传统连续模型具有很大的局限性, 其中一个原因就是传统连续模型忽略了原子间相互作用的非局域性. 本文在不采用任何经验的本构假设和局部均匀变形假设 (如 Cauchy-Born 假设) 的情况下, 严格基于原子模型, 构造了一个连续模型, 将原子间相互作用力的非局域性和非线性自然地嵌入到模型中. 此模型可以有效表现原子尺度的非均匀变形.

关键词 原子模型, 推广连续模型, 多尺度, 非局域性

PACS: 05.50.+q, 46.05.+b, 45.20.-d, 45.05.+x, 81.07.Nb

1 引言

连续模型和原子模型是材料微—纳米行为的两个不同描述方式. 在连续模型中, 将材料看成连续体, 研究的物理量包括应力, 应变, 温度等, 这些量被作为连续场来研究. 连续模型处理的系统通常是宏观系统. 但是, 随着纳米技术的飞速发展, 迫使人们研究原子数要少很多数量级的系统, 在这些系统中, 连续性假设不再适用. 原子模型认为材料是由原子构成的, 承认材料的离散特性. 原则上, 原子模型可准确地描述任何系统的力学行为, 但是, 其计算复杂度非常高, 由于计算能力的限制, 原子模拟在目前只适用于长度纳米量级的情形.

原子模型和传统连续模型各自的局限性, 推动了新的多尺度力学模型的发展. 人们希望构造新的模型, 使其同时具有连续模型和原子模型的优点, 即让计算代价远远低于原子模型, 并且可用于刻画在

各个不同尺度下的力学行为. 这些新模型的构建大体上可以分为两类. 第一类模型是同时串行地或并行地使用原子模型和传统连续模型, 可以被称之为“混合模型”. 在过去的十多年中, 许多混合模型发展起来, 例如, 准连续方法 (QC)^[1~3], 粗粒度分子动力学 (CGMD)^[4,5], 桥域尺度方法 (Bridge Scale)^[6,7], 异质多尺度方法 (HMM)^[8~11] 等等. 第二类方法是对传统连续模型进行推广, 使其具有原子模型的一些特性. 在 20 世纪 70 年代, Eringen 等提出了非局域连续模型 (简称为 Eringen 模型), 使连续模型包含原子间相互作用的非局域特性^[12~15]. 在非局域连续模型中, 传统力学里面默认的本构关系被推广, 材料中一点的应力不仅仅依赖于该点的应变, 跟材料体中其他点的应变也有关系. 因此, 应力可以表示成材料应变场的一个泛函. Eringen 模型的弹性应力-应变关系可以表示成

$$\sigma(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} A(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (1)$$

引用格式: 向美珍, 崔俊芝, 田霞. 基于原子模型的非局域连续模型. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2011, 41: 292–301

Xiang M Z, Cui J Z, Tian X. A nonlocal continuum model based on atomistic model (in Chinese). Sci China Phys Mech Astron, 2010, 41: 292–301, doi: 10.1360/132010-874

其中, $\sigma(\mathbf{x})$, $\varepsilon(\mathbf{x})$ 分别是应力场和应变 $\mathbf{D} = \nu \varepsilon D_{ijk}$ 是经典弹性模量张量. 标量函数 $A(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 被称为衰减函数 (或者非局域权函数), 反映原子间相互作用力的非局域性. A 被假设为 $\mathbf{x}'$ 与 $\mathbf{x}$ 的距离的函数, 即 $A = a(r)$, 其中 $r = |\mathbf{x}' - \mathbf{x}|$. 在实际中, 当 $r > r_c$ 时, a 可设置为 0. 这里, r_c 类似于分子动力学中的截断半径. Eringen 模型已经成功应用于纳米力学和断裂力学 [16,17].

另一个推广连续模型的方法是直接从原子模型推导连续的运动方程和本构方程. 一个常见的做法是, 先从原子模型获得一个应变能密度函数, 然后由该应变能函数推导应力-应变关系. 最具代表性的例子是采用 Cauchy-Born 准则来获得连续模型的局部本构方程 [1,18~20]. Zhang 等人 [21,22] 基于推广的 Cauchy-Born 准则的连续模型对碳纳米管的力学性质进行了研究. 另外, Blanc 等人 [23] 利用求极限的办法从原子模型推导出一些连续力学模型, 高阶应变梯度模型, 又称弱非局域连续模型, 可以由对应变能密度的 Taylor 展开而得出, 可参考文献 [24~26].

传统的连续模型中, 应力应变关系是局域的, 即一点的应力只由该点的应变确定. 而原子间的相互作用具有非局域性, 这正是传统连续模型不能适用于原子尺度的一个重要原因. 而基于 Cauchy-Born 准则的连续模型的均匀变形假设也忽略了原子间相互作用的非局域性, 其适用范围必定也因此受到限制. 本文直接基于原子模型的晶格结构和原子间相互作用势函数, 构造了一个非局域连续模型. 连续模型运动方程的形式与传统连续模型中的动量守恒方程一致. 连续模型的质量密度与原子模型的质量分布保持一致. 连续模型应变能密度与原子间相互作用能保持一致. 与上一段所述各模型不同的是, 原子间相互作用的非局域性直接嵌入到本模型中. 因此, 应变能密度是变形场的一个泛函; 基于第一类 Piola-Kirchhoff 应力功共轭于应变梯度, 应力-应变关系由应变能密度的变分计算得到.

2 原子模型概述

考虑一个由 M 个原子组成的系统. 本文用小写希腊字母 $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ 表示原子的编号. 在原子模型中, 原子运动方程可以写成牛顿形式:

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{x}}_\alpha = -\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial \mathbf{x}_\alpha}, \quad (2)$$

其中 $\mathcal{U} = \mathcal{U}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_M)$ 是系统的总势能函数. 在经典的原子模型中, 势能函数的一般结构是

$$\mathcal{U}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M) = \sum_\alpha \mathcal{V}_1(\mathbf{x}_\alpha) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \mathcal{V}_2(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta) + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k} \mathcal{V}_3(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) + \dots, \quad (3)$$

第一项代表外力场, 例如重力场和电磁力场, 函数 $\mathcal{V}_1$ 称为外势. 其余各项代表原子间相互作用的内能. 相应的, 函数 $\mathcal{V}_2$ 通常被称为对势, 而 $\mathcal{V}_m, m \geq 2$ 被称为 m -体势. 实际中, 为了减少计算量, 通常将求和式 (3) 截断, 并且在保证一定的精度的情况下, 将所有的多体势拟合到对势或者三体势当中 [27].

在经典的原子模型中, 原子间相互作用能由原子间的相对位置完全确定. 例如, 原子 α 与 β 间的对势由 $\mathbf{r}_{\alpha\beta} = \mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha$ 确定, 原子 α, β, γ 间的三体势由 $\mathbf{r}_{\alpha\beta}$ 和 $\mathbf{r}_{\alpha\gamma}$ 确定 (注意到 $\mathbf{r}_{\beta\gamma} = \mathbf{r}_{\alpha\gamma} - \mathbf{r}_{\alpha\beta}$). 因此, 函数 $\mathcal{V}_2(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta)$ 可以表示成 $\mathcal{V}_2(\mathbf{r}_{\alpha\beta})$, 三体势函数 $\mathcal{V}_3(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta, \mathbf{x}_\gamma)$ 可以表示成 $\mathcal{V}_3(\mathbf{r}_{\alpha\beta}, \mathbf{r}_{\alpha\gamma})$, $\dots$. 总之, 函数 $\mathcal{V}_m, m \geq 2$ 可以看成有 $m-1$ 个向量作为自变量的函数, 即

$$\mathcal{V}_m = \mathcal{V}_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{m-1}), \quad \mathbf{r}_k \in \mathbb{R}^d, k = 1, 2, \dots, m-1, \quad (4)$$

于是, 总势能函数 (3) 可写成

$$\mathcal{U}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M) = \sum_\alpha \mathcal{V}_1(\mathbf{x}_\alpha) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \mathcal{V}_2(\mathbf{r}_{\alpha\beta}) + \frac{1}{6} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathcal{V}_3(\mathbf{r}_{\alpha\beta}, \mathbf{r}_{\alpha\gamma}) + \dots, \quad (5)$$

为方便叙述, 记:

$$\mathbf{f}_{mk}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{m-1}) = -\frac{\partial \mathcal{V}_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{m-1})}{\partial \mathbf{r}_k}, \quad k = 1, \dots, m-1. \quad (6)$$

系统的总势能可以分解成各个原子的势能的相加的形式, 即

$$\mathcal{U}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M) = \sum_\alpha E_\alpha, \quad (7)$$

其中

$$E_\alpha = \mathcal{V}_1(\mathbf{x}_\alpha) + \frac{1}{2} \sum_\beta \mathcal{V}_2(\mathbf{r}_{\alpha\beta}) + \frac{1}{6} \sum_{\beta, \gamma} \mathcal{V}_3(\mathbf{r}_{\alpha\beta}, \mathbf{r}_{\alpha\gamma}) + \dots, \quad (8)$$

E_α 可被称为原子 α 的位点能量 (site energy)^[3].

材料的晶体结构由其晶格单胞的结构来描述, 单胞的选择不唯一. 将选定的单胞内所有原子的集合记为 $\mathcal{C}_A$. 则此单胞所占有的能量可以自然地定义为

$$E_{\text{cell}} = \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_\alpha E_\alpha, \quad (9)$$

其中 η_α 是单胞占有原子 α 的比例. 同样的, 单胞所占有的质量定义为

$$m_c = \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_\alpha m_\alpha, \quad (10)$$

单胞的质心定义为

$$\bar{\mathbf{X}}_c = \frac{1}{m_c} \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_\alpha m_\alpha \mathbf{X}_\alpha, \quad (11)$$

其中 m_α 是原子 α 的质量, $\mathbf{X}_\alpha$ 是原子 α 的位置.

本文所考虑的势函数都是经典势函数, 并且可写成 (3) 和 (5) 式的形式. 但是, 应该指出的是, 一些由量子力学方法 (如密度泛函理论和紧束缚方法) 直接得到的复杂的势函数并不能写成 (3) 或 (5) 式的形式^[16]. 这些复杂的势函数不在本文的考虑范围之内.

3 基于原子模型的非局域连续模型

本节将介绍基于原子模型的非局域连续模型的推导过程. 假设连续体参考构型是 $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^d$, $d=1$ 或 2 或 3 是空间维数. 连续体的变形过程由时间相关的变形映射 $\phi: \Omega_0 \times [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}^d$ 描述, 其中 $[0, +\infty)$ 是时间区间. 记当前构型为 $\Omega = \phi(\Omega_0, t)$, 参考构型中的点 $\mathbf{X} \in \Omega_0$ 的当前位置为 $\mathbf{x}(t) = \phi(\mathbf{X}, t)$. 为了简便, 省略时间变量 t , 记为 $\mathbf{x} = \phi(\mathbf{X})$. 本文中, 参考位形中的点用大写黑体字母表示, 当前构型中的点用小写黑体字母表示, 参考构型和当前构型采用同一个直角坐标系. 变形梯度定义为

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{X}}, \quad (12)$$

连续体的运动方程为

$$\rho_0(\mathbf{X}) \ddot{\mathbf{x}} = \text{div } \mathbf{P} + \rho_0(\mathbf{X}) \mathbf{b}(\mathbf{X}), \quad (13)$$

这里, $\rho_0(\mathbf{X})$ 和 $\mathbf{b}(\mathbf{X})$ 分别是质量密度和体积力密度, $\mathbf{P}$ 是第一类 Piola-Kirchhoff 应力. 散度计算是相对于参考位形求的. $\rho_0(\mathbf{X})$ 由晶格结构和原子质量确定:

$$\rho_0(\mathbf{X}) = \frac{m_c}{V_0}, \quad (14)$$

其中 m_c 是由 (10) 式定义的单胞质量, V_0 是参考构型下单胞体积.

本节余下部分主要介绍直接基于原子模型的连续非局域本构关系的构造.

对于任意给定的 $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \Omega_0$, 变形到 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega$, 有如下的几何关系:

$$\begin{aligned} \mathbf{y} - \mathbf{x} &= \phi(\mathbf{Y}) - \phi(\mathbf{X}) \\ &= \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + s(\mathbf{Y} - \mathbf{X})) \, ds \cdot (\mathbf{Y} - \mathbf{X}), \end{aligned} \quad (15)$$

根据 (15) 式, 变形后任何两个原子之间的相对位置, 可以由连续体的变形梯度场表示出来.

记点 $\mathbf{X} \in \Omega_0$ 处的应变能密度为 $\mathcal{E}_0(\mathbf{X})$. 为计算 $\mathcal{E}_0(\mathbf{X})$, 我们考虑一个材料体的代表晶格, 变形前, 此代表晶格的位形记为 $\mathcal{L}_0 = \{\mathbf{X}_\alpha \mid \alpha = 0, 1, \dots\}$, 变形后代表晶格构型记为 $\mathcal{L} = \{\mathbf{x}_\alpha \mid \alpha = 0, 1, \dots\}$. 此代表晶格完全独立于所研究的连续体, 但是它反应材料的内在晶格结构. 为方便叙述, 将此代表晶格置于与连续体相同的直角坐标系中. 选择代表晶格中的一个单胞 $\mathcal{L}_{\text{cell}}$ 作为参考单胞. 不失一般性, 在变形前, 将其质心 $\bar{\mathbf{X}}_c$ 置于坐标系的原点, 即 $\bar{\mathbf{X}}_c = \mathbf{0}$.

设代表晶格由 $\mathcal{L}_0$ 到 $\mathcal{L}$ 的变形由变形映射 ϕ_r 描述. 尽管 $\mathcal{L}_0$ 是一个离散点集, ϕ_r 可以看成是定义在整个欧几里得空间 $\mathbb{R}^d$ 上的. 因此我们可以定义代表晶格的变形梯度:

$$\mathbf{F}_r(\mathbf{X}) = \frac{\partial \phi_r}{\partial \mathbf{X}}, \quad (16)$$

对于给定的 $\mathbf{X} \in \Omega_0$, 定义 $\mathbf{X}$ 的变形环境函数为一个张量值函数:

$$\mathbf{H}_X(\mathbf{Y}) = \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{Y}), \quad \forall \mathbf{X} + \mathbf{Y} \in \Omega_0, \quad (17)$$

对于代表晶格 $\mathcal{L}_0$ 的一个点 $\mathbf{X}$, 其变形环境函数定义为

$$\mathbf{H}_{r,X}(\mathbf{Y}) = \mathbf{F}_r(\mathbf{X} + \mathbf{Y}), \quad \forall \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^d. \quad (18)$$

图1 应变能密度计算过程示意图

当计算 $\mathcal{E}_0(\mathbf{X})$ 时, 使代表晶格的参考单胞 $\mathcal{L}_{cell}$ 的质心 $\bar{\mathbf{X}}_c$ 的变形环境函数 H_c^X 与点 $\mathbf{X}$ 的变形环境函数 H_X 保持一致. 然后在变形后的代表晶格 $\mathcal{L}$ 中, 计算参考单胞的能量, 记为 E_c^X , 此能量除以参考单胞未变形时的体积 V_0 , 即得 $\mathcal{E}_0(\mathbf{X})$

Figure 1 Diagram for computing strain energy density: When computing $\mathcal{E}_0(\mathbf{X})$, let the deformation environment function of the centroid of the reference cell $\mathcal{L}_{cell}$ stay the same as the deformation environment function of $\mathbf{X}$, i.e. $H_c^X = H_X$. Then, the energy of the reference cell, denoted as E_c^X , is computed in the deformed representative lattice $\mathcal{L}$. The strain energy density $\mathcal{E}_0(\mathbf{X})$ is defined as E_c^X divided by V_0 .

为了计算 $\mathcal{E}_0(\mathbf{X})$, 假设代表晶格的参考单胞的质心 $\bar{\mathbf{X}}_c$ 与 $\mathbf{X}$ 具有相同的变形环境函数. 在此假设下, 代表晶格 $\mathcal{L}_0$ 的 $\bar{\mathbf{X}}_c$ 附近的变形状态由连续体内的点 $\mathbf{X}$ 的变形环境函数确定. 因此, 可以把代表晶格的变形映射记为 ϕ_r^X , 变形梯度记为 $\mathbf{F}_r^X$, $\bar{\mathbf{X}}_c$ 的变形环境函数记为 H_c^X . 用原子模型计算应变能密度 $\mathcal{E}_0(\mathbf{X})$ 的计算过程可以用图 1 来表示. 即首先假设:

$$H_c^X(\mathbf{Y}) = H_X(\mathbf{Y}), \forall \mathbf{X} + \mathbf{Y} \in \Omega_0, \quad (19)$$

注意到 $\mathbf{X}_c = \mathbf{0}$, 于是有

$$\mathbf{F}_r^X(\mathbf{Y}) = \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{Y}) \quad \forall \mathbf{Y} \in \{\mathbf{Y} \mid \mathbf{X} + \mathbf{Y} \in \Omega_0\}, \quad (20)$$

或者

$$\phi_r^X(\mathbf{Y}) - \phi_r^X(\mathbf{0}) = \phi(\mathbf{X} + \mathbf{Y}) - \phi(\mathbf{X}) \quad \forall \mathbf{Y} \in \{\mathbf{Y} \mid \mathbf{X} + \mathbf{Y} \in \Omega_0\}, \quad (21)$$

然后, 基于假设 (19) 式, 先计算 $\mathcal{L}_{cell}$ 的原子与其邻居原子之间的相互作用能, 即位点能 E_α^X . 然后利用 (9)

式计算参考单胞 $\mathcal{L}_{cell}$ 的能量 E_c^X , 即

$$E_c^X = \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} \eta_\alpha E_\alpha^X, \quad (22)$$

于是点 $\mathbf{X}$ 处的应变能密度定义为

$$\mathcal{E}_0(\mathbf{X}) = \frac{1}{V_0} E_c^X. \quad (23)$$

能量 E_c^X 由 $\mathcal{L}_{cell}$ 附近的原子间的相对距离确定. 假设 $V_2, V_3, \dots$ 的截断半径的最大的一个是 r_c . 原子 α 的邻居原子集合记为 $\mathcal{N}_\alpha^X$. $\mathcal{N}_\alpha^X$ 必须足够大, 以保证使变形后截断半径内的原子, 处于此集合中, 即

$$\mathcal{N}_A^X \supseteq (\phi_r^X)^{-1}[\mathcal{B}(\phi(\mathbf{0}); r_c)], \quad (24)$$

实际计算中, 可以取一个比较大的集合 $\mathcal{N}_A$, 使其满足:

$$\mathcal{N}_A \supseteq \bigcup_{\mathbf{X} \in \Omega_0} \mathcal{N}_A^X, \quad (25)$$

这样, 当在 Ω_0 取不同的 $\mathbf{X}$ 时, 不需要重新构造邻居原子集合.

在假设 (19) 式条件下, 原子 α 的位点能为

$$\begin{aligned} E_\alpha^X &= \frac{1}{2} \sum_{\beta \in \mathcal{N}_A} \gamma_2(\phi_r^X(X_\beta) - \phi_r^X(\alpha)) \\ &+ \frac{1}{6} \sum_{\beta, \gamma \in \mathcal{N}_A} \gamma_3(\phi_r^X(X_\beta) - \phi_r^X(X_\alpha), \phi_r^X(X_\gamma) - \phi_r^X(X_\alpha)) + \dots \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\beta \in \mathcal{N}_A} \gamma_2 \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + X_\alpha + s(X_\beta - X_\alpha)) ds \cdot (X_\beta - X_\alpha) \right) \\ &+ \frac{1}{6} \sum_{\beta, \gamma \in \mathcal{N}_A} \gamma_3 \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + X_\alpha + s(X_\beta - X_\alpha)) ds \cdot (X_\beta - X_\alpha), \right. \\ &\quad \left. \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + X_\alpha + s(X_\gamma - X_\alpha)) ds \cdot (X_\gamma - X_\alpha) \right) + \dots, \end{aligned} \quad (26)$$

为推导上面的方程 (26), 几何关系 (15) 和假设 (20) 式均被用到.

于是系统的总应变能为

$$\begin{aligned}
 W &= \int_{\Omega_0} \mathcal{E}_0(\mathbf{X}) dV = \int_{\Omega_0} \frac{1}{V_0} E_c^{\mathbf{X}} dV = \frac{1}{V_0} \int_{\Omega_0} \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_{\alpha} E_{\alpha}^{\mathbf{X}} \\
 &= \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_{\alpha} \int_{\Omega_0} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\beta \in \mathcal{N}_A} \gamma_2 \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + s(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{6} \sum_{\beta, \gamma \in \mathcal{N}_A} \gamma_3 \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + s(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}), \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} + s(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right) + \dots \right\} dV, \quad (27)
 \end{aligned}$$

总应变能 W 的变分是

$$\begin{aligned}
 \delta W &= -\frac{1}{V_0} \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_{\alpha} \int_{\Omega_0} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\beta \in \mathcal{N}_A} f_{21} \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + s(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right) \right. \\
 &\quad \left. \cdot \delta \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} + s'(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{6} \sum_{\beta, \gamma \in \mathcal{N}_A} \left[f_{31} \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + s(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}), \right. \right. \\
 &\quad \left. \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} + s(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right) \\
 &\quad \cdot \delta \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} + s'(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) \\
 &\quad \left. + f_{32} \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} + s(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}), \right. \right. \\
 &\quad \left. \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} + s(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) \cdot \right. \\
 &\quad \left. \delta \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{X}_{\alpha} + s'(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) \cdot (\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right] + \dots \left\} dV ds'. \quad (28)
 \end{aligned}$$

由固体力学^[28], 可知:

$$\delta W = \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \delta \mathbf{F}^T dV, \quad (29)$$

其中 $\delta \mathbf{F}^T$ 是 $\delta \mathbf{F}$ 的转置. 以上方程对任意 $\delta \mathbf{F}$ 成立. 特别地, 对于固定点 $\mathbf{X}_0 \in \Omega_0$, 和给定的 (i, j) , 按如下方

式取 $\delta \mathbf{F}$:

$$\delta \mathbf{F}_{hk}(\mathbf{X}) = \begin{cases} 0, & \text{when } (h, k) \neq (j, i), \\ \delta(\mathbf{X} - \mathbf{X}_0), & \text{when } (h, k) = (j, i). \end{cases} \quad (30)$$

由 (30) 式结合 (28) 和 (29) 式, 可得到

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_{ij}(\mathbf{X}_0) &= -\frac{1}{V_0} \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_{\alpha} \int_0^1 \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\beta \in \mathcal{N}_A} f_{21}^j \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X}_0 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + (s - s')(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right) \cdot (\mathbf{X}_{\beta}^i - \mathbf{X}_{\alpha}^i) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{6} \sum_{\beta, \gamma \in \mathcal{N}_A} \left[f_{31}^j \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X}_0 + (s - s')(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}), \right. \right. \\
 &\quad \left. \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X}_0 + s(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha}) - s'(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \right. \\
 &\quad \left. \cdot (\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) \cdot (\mathbf{X}_{\beta}^i - \mathbf{X}_{\alpha}^i) + f_{32}^j \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X}_0 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + s(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) - s'(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}), \right. \right. \\
 &\quad \left. \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X}_0 + (s - s')(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) \right. \\
 &\quad \left. \cdot (\mathbf{X}_{\gamma}^i - \mathbf{X}_{\alpha}^i) \right] + \dots \left\} ds', \quad (31)
 \end{aligned}$$

由 $\mathbf{X}_0$ 的任意性, 用 $\mathbf{X}$ 代替 $\mathbf{X}_0$, 得到应力—应变关系 (张量表示) 为

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}(\mathbf{X}) &= -\frac{1}{V_0} \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_{\alpha} \int_0^1 \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\beta \in \mathcal{N}_A} (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right. \\
 &\quad \otimes f_{21} \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + (s - s')(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right) \\
 &\quad \left. + \frac{1}{6} \sum_{\beta, \gamma \in \mathcal{N}_A} \left[(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) \otimes f_{31} \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + (s - s') \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}), \right. \right. \\
 &\quad \left. \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + s(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha}) - s'(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right) \\
 &\quad \left. + (\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha}) \otimes f_{32} \left(\int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + s(\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - s'(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\beta} - \mathbf{X}_{\alpha}), \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + (s - s')(\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha})) ds \cdot (\mathbf{X}_{\gamma} - \mathbf{X}_{\alpha}) \right) \right] + \dots \left\} ds', \quad (32)
 \end{aligned}$$

其中 $\otimes$ 代表张量积.

至此,我们推导出了一个严格基于原子模型的应力-应变关系. 原子间相互作用的非局域性和非线性被自然地嵌入到本模型中. 应变能密度和应力都是应变梯度场的泛函. 一点的应力不只由该点的应变梯度决定, 还取决于该点周围的变形情况. 所研究的材料体内本身的原子的位置没有显式地出现在本模型中. 取而代之的是考虑一个独立的代表晶格来反应材料的内部晶格结构. 参考单胞内的原子与附近的原子的相互作用能用来计算连续体的应变能密度和应力场. 对于连续模型进行离散后, 当自由度远少于材料中原子自由度时, 将极大地节约计算成本.

4 与 Cauchy-Born 准则和高阶应变梯度模型的关系

由 Cauchy-Born 准则, 为了计算 $\mathcal{E}_0(\mathbf{X})$, 假设微观代表晶格均匀变形, 变形梯度为 $\mathbf{F}(\mathbf{X})$. 如果在本文模型中用如下方式近似 $\mathbf{X}$ 的变形环境函数:

$$\mathbf{H}_\mathbf{X}(\mathbf{Y}) = \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{Y}) \approx \mathbf{F}(\mathbf{X}) \quad \forall \mathbf{Y} \in \mathcal{B}(\mathbf{X}; R_c), \quad (33)$$

则本文提出的变形环境函数假设与 Cauchy-Born 准则的假设是一样的. 因此 Cauchy-Born 准则可以看成是本文模型的基本假设 (19) 式结合变形环境函数的 0 阶近似表达式. 将 (33) 式代入 (32) 式得到局部应力应变关系:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{X}) = & -\frac{1}{V_0} \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_\alpha \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\beta \in \mathcal{N}_A} (\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha) \right. \\ & \otimes \mathbf{f}_{21}(\mathbf{F}(\mathbf{X})) \cdot (\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha)) \\ & + \frac{1}{6} \sum_{\beta, \gamma \in \mathcal{N}_A} [(\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha) \otimes \mathbf{f}_{31}(\mathbf{F}(\mathbf{X})) \cdot (\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha), \\ & \mathbf{F}(\mathbf{X}) \cdot (\mathbf{X}_\gamma - \mathbf{X}_\alpha)) + (\mathbf{X}_\gamma - \mathbf{X}_\alpha) \otimes \mathbf{f}_{32}(\mathbf{F}(\mathbf{X})) \\ & \left. \cdot (\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha), \mathbf{F}(\mathbf{X}) \cdot (\mathbf{X}_\gamma - \mathbf{X}_\alpha)] + \dots \right\}, \quad (34) \end{aligned}$$

根据局部假设 (34), 还可以计算四阶拉格朗日弹性张量 $\mathbb{C}$, 其分量为

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_{ijkl} = & \frac{\partial P_{ij}}{\partial F_{hk}} \\ = & -\frac{1}{V_0} \sum_{\alpha \in \mathcal{C}_A} \eta_\alpha \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\beta \in \mathcal{N}_A} (\mathbf{X}_\beta^i - \mathbf{X}_\alpha^i) \cdot \partial_{r_1^h} \mathbf{f}_{21}^j(\mathbf{F} \right. \\ & \left. \cdot (\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha)) \cdot (\mathbf{X}_\beta^k - \mathbf{X}_\alpha^k) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \frac{1}{6} \sum_{\beta, \gamma \in \mathcal{N}_A} [(\mathbf{X}_\beta^i - \mathbf{X}_\alpha^i) \cdot \partial_{r_1^h} \mathbf{f}_{31}(\mathbf{F} \cdot (\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha), \\ & \mathbf{F} \cdot (\mathbf{X}_\gamma - \mathbf{X}_\alpha)) \cdot (\mathbf{X}_\beta^k - \mathbf{X}_\alpha^k) + (\mathbf{X}_\beta^i - \mathbf{X}_\alpha^i) \\ & \cdot \partial_{r_2^h} \mathbf{f}_{31}(\mathbf{F} \cdot (\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha), \mathbf{F} \cdot (\mathbf{X}_\gamma - \mathbf{X}_\alpha)) \cdot (\mathbf{X}_\gamma^k - \mathbf{X}_\alpha^k) \\ & + (\mathbf{X}_\gamma^i - \mathbf{X}_\alpha^i) \cdot \partial_{r_1^h} \mathbf{f}_{32}(\mathbf{F} \cdot (\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha), \\ & \mathbf{F} \cdot (\mathbf{X}_\gamma - \mathbf{X}_\alpha)) \cdot (\mathbf{X}_\beta^k - \mathbf{X}_\alpha^k) + (\mathbf{X}_\gamma^i - \mathbf{X}_\alpha^i) \cdot \partial_{r_2^h} \mathbf{f}_{32}(\mathbf{F} \\ & \cdot (\mathbf{X}_\beta - \mathbf{X}_\alpha), \mathbf{F} \cdot (\mathbf{X}_\gamma - \mathbf{X}_\alpha)) \cdot (\mathbf{X}_\gamma^k - \mathbf{X}_\alpha^k)] + \dots \Big\}, \quad (35) \end{aligned}$$

其中

$$\partial_{r_l} f_{mk}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{m-1}) = \frac{\partial f_{mk}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{m-1})}{\partial \mathbf{r}_l}.$$

从 (33) 式可知, 由非局域连续模型退化到局域连续模型时引入了一个长度尺度参数 R_c , 此参数刻画原子间相互作用力的截断半径, 相距大于 R_c 的两个原子间的相互作用力可以忽略. 当问题的特征波长 L 一定时, (33) 式的近似方式的精确程度取决于 R_c 的大小. 当 $R_c \ll L$ 时, (33) 式有很好的精度时, 因此 Cauchy-Born 准则是可以使用的. 但是当 R_c 与 L 是同一个数量级的时候, 这时 (33) 式的近似方式带来的误差就不能再被忽略, 非局域性的重要性凸显出来. 总之, 对于宏观问题, 问题的特征波长远大于原子间相互作用的截断半径时, 传统局域连续模型是比较准确的. 但当特征波长小到原子尺度, 则考虑原子间相互作用的非局域特性, 传统局域连续模型不再适用. 在特征波长一定的情况下, 非局域特性对长程势系统的影响大于对短程势系统的影响. 在下一节的数值算例中会进一步说明这个问题.

另外, 如果用变形环境函数的高阶 Taylor 来近似变形环境函数, 则可以得到高阶应变梯度连续模型. 例如采用二阶 Taylor 展开式,

$$\mathbf{H}_\mathbf{X}(\mathbf{Y}) = \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{Y}) \approx \mathbf{F}(\mathbf{X}) + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{X}} \cdot \mathbf{Y} + \frac{1}{2!} \mathbf{Y} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{X}^2} \cdot \mathbf{Y}, \quad (36)$$

将 (36) 式代入 (32) 式, 则得到新的应力应变关系 ($\mathbf{P}-\mathbf{F}$ 关系), 应力 $\mathbf{P}$ 将决定于应变梯度 $\mathbf{F}$ 和应变梯度的一阶导数和二阶导数 $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{X}}$, $\frac{\partial^2 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{X}^2}$. 即有如下二阶应

变梯度本构关系:

$$\begin{aligned}
 P(X) = & -\frac{1}{V_0} \int_0^1 \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha \in \mathcal{N}_A} X_\alpha \otimes f_{21} \left(F(X) \right. \right. \\
 & + \left(\frac{1}{2} - s' \right) \frac{\partial F}{\partial X} \cdot X_\alpha + \left(\frac{1}{3} - s' + s'^2 \right) \frac{1}{2!} X_\alpha \\
 & \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot X_\alpha \Big) \cdot X_\alpha + \frac{1}{6} \sum_{\alpha, \beta \in \mathcal{N}_A} \left[X_\alpha \otimes f_{31} \left(F(X) \right. \right. \\
 & + \left(\frac{1}{2} - s' \right) \frac{\partial F}{\partial X} \cdot X_\alpha + \left(\frac{1}{3} - s' + s'^2 \right) \frac{1}{2!} X_\alpha \\
 & \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot X_\alpha \Big) \cdot X_\alpha, \\
 & \left(F(X) + \left(\frac{1}{2} - s' \right) \frac{\partial F}{\partial X} \cdot X_\beta + \left(\frac{1}{3} - s' + s'^2 \right) \frac{1}{2!} X_\beta \right. \\
 & \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot X_\beta \Big) \cdot X_\beta + X_\beta \otimes f_{32} \left(F(X) + \left(\frac{1}{2} - s' \right) \frac{\partial F}{\partial X} \right. \\
 & \cdot X_\alpha + \left(\frac{1}{3} - s' + s'^2 \right) \frac{1}{2!} X_\alpha \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot X_\alpha \Big) \cdot X_\alpha, \\
 & \left. \left(F(X) + \left(\frac{1}{2} - s' \right) \frac{\partial F}{\partial X} \cdot X_\beta + \left(\frac{1}{3} - s' + s'^2 \right) \frac{1}{2!} X_\beta \right. \right. \\
 & \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot X_\beta \Big) \cdot X_\beta \Big] + \dots \Big\} ds'. \quad (37)
 \end{aligned}$$

5 数值例子

为了对本文提出的模型进行数值验证, 我们考虑一个由相同原子组成的一维原子链结构, 相邻原子间的距离为 r_0 . 假设每个原子与最近邻和第二近邻原子有相互作用的简谐对势. 将同时采用非局域连续模型和原子模型模拟一维弹性波传播. 势能函数为

$$\begin{aligned}
 \mathcal{V}_2(r) &= \frac{1}{2} k(|r| - a)^2, \\
 \mathcal{V}_m(r) &= 0, \quad m \geq 3,
 \end{aligned} \quad (38)$$

其中 k 和 a 是势函数的两个参数. 根据 (6) 式, 有

$$f_{21}(r) = -k(|r| - a) \frac{r}{|r|} = -k(|r| - a) \operatorname{sgn}(r), \quad (39)$$

其中

$$\operatorname{sgn}(r) = \begin{cases} 1, & \text{when } r > 0, \\ -1, & \text{when } r < 0, \end{cases} \quad (40)$$

在初始构型中, 原子 α 的能量为

$$E_\alpha = \frac{1}{2} (r_0 - a)^2 + \frac{1}{2} (2r_0 - a)^2, \quad (41)$$

假设 r_0 使能量 E_α 达到最小, 于是有 $r_0 = 0.6a$.

对于原子链使用周期性边界条件. 在本例中, 代表晶格中 $\mathcal{N}_A$ 只需要包含四个原子, 他们在参考位形中的位置为 $\hat{X}_{-2} = -2r_0, \hat{X}_{-1} = -r_0, \hat{X}_1 = r_0, \hat{X}_2 = 2r_0$. 用来区分代表晶格中的原子和待研究材料体中的原子.

连续模型的运动方程为

$$\rho_0 \ddot{x} = \frac{\partial P_{11}}{\partial X}. \quad (42)$$

非局域连续模型的应力应变关系由 (32) 式给出, 即有

$$\begin{aligned}
 P_{11}(X) &= \frac{1}{r_0} \int_0^1 \frac{1}{2} \sum_{\alpha \in \mathcal{N}_A} k \left(\int_0^1 F(X + (s - s') \hat{X}_\alpha) ds \hat{X}_\alpha \right. \\
 &\quad \cdot \operatorname{sgn}(\hat{X}_\alpha - a) \Big) \cdot \operatorname{sgn}(\hat{X}_\alpha) \hat{X}_\alpha ds' \\
 &= \frac{k}{2} \sum_{\alpha=-2,-1,1,2} |\alpha| \left(\int_0^1 \int_0^1 F(X + (s - s') \hat{X}_\alpha) ds ds' \right. \\
 &\quad \cdot |\hat{X}_\alpha| - a \Big), \quad (43)
 \end{aligned}$$

在本例中, 传统的局域连续模型的应力应变关系为

$$P_{11} = 5F r_0 - 3a. \quad (44)$$

原子链的相关连续结构是一条线. 将连续线离散, 使得离散节点与原子重合, 以方便在不记离散误差的情况下和原子模拟进行比较. 给定初始位移如图 2(a), 5000 步时间步过后, 原子模拟下和连续模型模拟下的位置如图 2(b). 在图 2(b) 中分别为原子模拟结果, 非局域连续模型模拟结果和采用传统的局域连续模型模拟的结果. 本例中, 特征波长 L 约为 $500r_0$, 其中 r_0 为平衡时原子间距. 而原子间相互作用的截断距离为 $R_c = 2r_0$, 因此可以认为 $L \gg R_c$ 成立. 由图可见, 本文建立的非局域连续模型, 传统的连续模型, 原子模型的模拟结果完全吻合.

为了进一步揭示非局域特性的影响. 我们采用 Lennard-Jones 9-3 势函数模拟. 初始位移如图 3(a) 所示, 在本例中, 特征波长取为约 $L = 20r_0$, 因此 $L \gg R_c$ 不成立. 特征波长和原子间相互作用的截断半径可以比拟. 6000 时间步后, 位移图如图 3(b) 所示. 由图可见, 非局域连续模型的模拟结果与原子模型的模拟结果仍然吻合良好, 但是传统的局域连续模型与原子模型的结果有比较明显的偏差.

图 2

(a) 一维原子链的初始位移分布图; (b) 5000 时间步后原子链位移分布图

Figure 2 (a) Initial displacement of the 1-d atom chain; (b) the displacement distribution after 5000 time steps.

图 3

(a) 原子链的初始位移分布图; (b) 6000 时间步后原子链位移分布图

Figure 3 (a) Initial displacement of the 1-d atom chain; (b) the displacement distribution after 6000 time steps.

以上两个算例表明, 当特征波长远大于原子尺度时, 非局域特性的影响较小, 传统的连续模型已经足够精确. 但是当特征波长与原子尺度差不多时, 与原子模型相比, 传统连续模型有较大的偏差, 而采用本文建立的非局域连续模型比较精确. 一般地, 原子间的相互作用的非局域特性对于距离越远的两个原子的影响越大. 如果原子间具有长程相互作用, 截

断半径 R_c 较大, 而特征波长保持不变, 则传统的局域连续模型与原子模型的误差将随截断半径 R_c 的增大而更加明显的显示出来.

6 总结

本文基于原子模型建立了一个非局域连续模型. 连续模型的质量、动量和能量分布与对应的原子

模型保持一致. 在没有对本构关系的先验假设情况下, 原子间相互作用的非局域性和非线性被自然地嵌入到本模型的本构方程中. 为了建立代表晶格与连续体变形梯度场的联系, 本文提出了变形环境函数的概念. 为了计算连续体中的点 $\mathbf{X}$ 的应变能密度, 让代表晶格的参考单胞的质心的变形环境函数与 $\mathbf{X}$ 的变形环境函数相同. 然后计算参考单胞的原子间相互作用能, 除以单胞体积得到的能量密度作为 $\mathbf{X}$ 的应变能密度.

本文得出的本构关系推广了 Cauchy-Born 准则. 在 Cauchy-Born 准则中, 代表晶格被假设为均匀变形, 变形梯度与点 $\mathbf{X}$ 保持一致. 如果局部材料体是均匀变形, 本模型退化为 Cauchy-Born 模型. 因此, 本模型比 Cauchy-Born 准则具有更广的适用范围. 另外, 通过 Taylor 展开近似变形环境函数, 可以从本模型直接构造高阶应变梯度连续模型. 理论分析和数值算例均表明, 非局域性对模拟结果的影响取决于特征波长与原子间相互作用的截断半径的相对大小. 当

特征波长远大于截断半径时, 非局域特性对模拟结果的影响不大, 传统的连续模型已足够精确. 当特征波长小到与截断半径为同一数量级时, 非局域特性的影响比较明显. 在这种情况下, 本文建立的非局域连续模型与原子模型吻合良好, 而基于 Cauchy-Born 准则的传统的连续模型与原子模型有较大误差.

本文所提出的连续模型虽然严格基于原子模型, 但是所研究的材料体内本身的原子的位置和所受作用力没有显式地出现在本模型中. 取而代之的是考虑一个独立的代表晶格来反应材料的内部晶格结构, 并基于来计算连续体的应变能密度和应力场. 因此, 连续模型进行离散后, 当离散节点远少于材料中原子个数时, 其计算复杂度与原子模型相比将降低很多.

本文所提出的是一个适用于微 - 纳米尺度的原子 - 连续多尺度模型, 其理论分析和数值模拟还需要做大量的工作. 另外, 本文仅涉及纯力学模型, 基于原子模型的热力耦合模型有待发展.

参考文献

- 1 Tadmor E, Ortiz M, Phillips R. Quasicontinuum analysis of defects in solids. *Philos Mag A*, 1996, 73(6): 1529–1563
- 2 Miller R, Tadmor E. The quasicontinuum method: Overview, applications and current directions. *J Comput Aided Mater Des*, 2002, 9(3): 203–239
- 3 Tadmor E, Miller R. The theory and implementation of the quasicontinuum method. *Handbook Mater Model*, 2005, 2: 663–682
- 4 Rudd R, Broughton J. Coarse-grained molecular dynamics and the atomic limit of finite elements. *Phys Rev B*, 1998, 58(10): 5893–5896
- 5 Rudd R, Broughton J. Coarse-grained molecular dynamics: Nonlinear finite elements and finite temperature. *Phys Rev B*, 2005, 72(14): 144104
- 6 Wagner G, Liu W. Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition. *J Comput Phys*, 2003, 190(1): 249–274
- 7 Liu W, Park H, Qian D, et al. Bridging scale methods for nanomechanics and materials. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2006, 195(13-16): 1407–1421
- 8 Li X, Weinan E. Multiscale modeling of the dynamics of solids at finite temperature. *J Mech Phys Solids*, 2005, 53(7): 1650–1685
- 9 Curtin W, Miller R. Atomistic/continuum coupling in computational materials science. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2003, 11: R33–R68
- 10 Park H, Liu W. An introduction and tutorial on multiple-scale analysis in solids. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2004, 193(17-20): 1733–1772
- 11 Miller R, Tadmor E, Rajgarhia R, et al. A unified framework and performance benchmark of fourteen multiscale atomistic/continuum coupling methods. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2009, 17: 053001
- 12 Eringen A C. Continuum mechanics at atomistic scale. *Cryst Lattice Defects*, 1972, 7(5): 109–130
- 13 Eringen A. Linear theory of nonlocal elasticity and dispersion of plane waves. *Int J Eng Sci*, 1972, 10(5): 425–435
- 14 Eringen A. Theory of nonlocal thermoelasticity. *Int J Eng Sci*, 1974, 12: 1063–1077
- 15 Povstenko Y. The nonlocal theory of elasticity and its applications to the description of defects in solid bodies. *J Math Sci*, 1999, 97(1): 3840–3845
- 16 Lakhtakia A, Thompson B, Messier R. *The Handbook of Nanotechnology. Nanometer Structures: Theory, Modeling, and Simulation*. Bellingham: SPIE Press, 2004
- 17 Wang Q, Liew K. Application of nonlocal continuum mechanics to static analysis of micro- and nano- structures. *Phys Lett A*, 2007, 363(3): 236–242
- 18 Ming P, Weinan E. CauchyBorn rule and the stability of crystalline solids: Static problems. *Arch Rational Mech Anal*, 2007, 183(2): 241–297
- 19 Friesecke G, Theil F. Validity and failure of the Cauchy-Born hypothesis in a two-dimensional mass-spring lattice. *J Nonlinear Sci*, 2008, 12(5): 445–478
- 20 Ericksen J. On the Cauchy-Born rule. *Math Mech Solids*, 2008, 13(3): 199–220

- 21 Zhang P, Huang Y, Geubelle P, et al. The elastic modulus of single-wall carbon nanotubes: A continuum analysis incorporating interatomic potentials. *Int J Solids Struct*, 2002, 39: 3893–3906
- 22 Zhang P, Jiang H, Huang Y, et al. An atomistic-based continuum theory for carbon nanotubes: analysis of fracture nucleation. *J Mech Phys Solids*, 2004, 52: 977–998
- 23 Blanc X, Le Bris C, Lions P. From molecular models to continuum mechanics. *Arch Rational Mech Anal*, 2002, 164(4): 341–381
- 24 Arndt M, Griebel M. Derivation of higher order gradient continuum models from atomistic models for crystalline solids. *Multiscale Model Simul*, 2006, 4(2): 531–562
- 25 Triantafyllidis N, Bardenhagen S. On higher order gradient continuum theories in 1-D nonlinear elasticity. Derivation from and comparison to the corresponding discrete models. *J Elast*, 1993, 33(3): 259–293
- 26 Bardenhagen S, Triantafyllidis N. Derivation of higher order gradient continuum theories in 2, 3-D non-linear elasticity from periodic lattice models. *J Mech Phys Solids*, 1994, 42(1): 111–139
- 27 Liu W, Karpov E, Park H. *Nano Mechanics and Materials*. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd., 2006
- 28 Malvern L. *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall, 1969

A nonlocal continuum model based on atomistic model

XIANG MeiZhen*, CUI JunZhi* & TIAN Xia

The State Key Laboratory of Scientific and Engineering Computing, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Academy of Mathematics and System Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

In traditional continuum theories, constitutive relations such as generalized Hooke's law and the Fourier law for heat conduction, are representations of macroscopic phenomenons. These theories have severe limitations as the length scale of the structure becomes close to the atomistic dimensions. The failure of the traditional continuum theories at atomistic scale can be attribute to the ignoring of the length scale induced by intrinsic non-locality of atomistic interactions. The primary objective of this work is to construct a coupled atomistic-continuum model strictly based on the atomistic model bypassing any empirical constitutive law and any local homogeneous assumption such as Cauchy-Born rule. The intrinsic non-locality of the atomistic interactions are explicitly built into the model. Inhomogeneous deformation at atomistic scale can be efficiently represented by this model.

atomistic model, aeneralized continuum model, nonlocal continuum model, multiscale model

PACS: 05.50.+q, 46.05.+b, 45.20.-d, 45.05.+x, 81.07.Nb

doi: 10.1360/132010-874