

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI PADOVA  
Dipartimento di Costruzioni e Trasporti

SCUOLA DI DOTTORATO IN SCIENZE  
DELL'INGEGNERIA CIVILE E AMBIENTALE  
XX CICLO

UN METODO DI ACCOPPIAMENTO TRA  
MODELLI CONTINUI ED ATOMISTICI CON  
DISCUSSIONE E APPLICAZIONI SPECIFICHE.

**Direttore della Scuola:**Ch.mo Prof.Ing. Andrea Rinaldo

**Supervisore:**Ch.mo Prof.Ing. Bernhard Schrefler

**Correlatore:**Ch.mo Prof.Luciano Colombo

**Dottoranda:**Gambato Cristina

31 gennaio 2008

*A Luigi*

# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Il progresso nel campo dei nuovi materiali e i modelli multi-scala</b>	<b>5</b>
2.1	Materiali ad elevate prestazioni . . . . .	6
2.2	Materiali compositi . . . . .	7
2.2.1	Proprietà dei compositi . . . . .	9
2.2.2	Caratteristiche delle fibre . . . . .	11
2.2.3	Classificazione dei materiali compositi . . . . .	15
2.3	Multiscale material modelling . . . . .	22
2.4	Obiettivi . . . . .	24
<b>3</b>	<b>Classificazione e analisi dei principali Modelli Multiscala</b>	<b>27</b>
3.1	Aspetti generali . . . . .	28
3.2	Information-passing o Hierarchical Multiscale Methods . . . .	29
3.2.1	Generalized Mathematical Homogenization (GMH) . .	30
3.2.2	Multiscale enrichment based on the partition of unity (MEPU) . . . . .	32
3.2.3	Equation free method (EFM) . . . . .	33
3.2.4	KMC-based information-passing method . . . . .	33
3.3	Concurrent Multiscale Methods . . . . .	34
3.3.1	MAAD Method . . . . .	35
3.3.2	Quasi-continuum method (QC) . . . . .	36
3.3.3	FEAt model . . . . .	39

---

3.3.4	Coarse-grained Molecular dynamics . . . . .	41
3.3.5	Edge-to-edge Decomposition Method . . . . .	41
3.3.6	Bridging domain coupling method . . . . .	44
<b>4</b>	<b>La dinamica molecolare: teoria e applicazioni</b>	<b>47</b>
4.1	Concetti base di dinamica molecolare . . . . .	48
4.1.1	Equazioni lagrangiane del moto . . . . .	48
4.1.2	Equazioni Hamiltoniane del moto . . . . .	52
4.2	Integratori numerici . . . . .	55
4.2.1	Algoritmo di Verlet . . . . .	55
4.2.2	Algoritmo Predictor-Corrector . . . . .	57
4.3	Potenziali interatomici . . . . .	57
4.3.1	Potenziale a due corpi . . . . .	58
4.3.2	Potenziale a più corpi . . . . .	59
4.4	Applicazioni . . . . .	61
4.4.1	Liste di Verlet e Linked Cell . . . . .	62
4.4.2	Termostato di Anderson . . . . .	66
4.4.3	Funzione di distribuzione a coppie . . . . .	69
<b>5</b>	<b>La meccanica del continuo</b>	<b>73</b>
5.1	Generalità . . . . .	73
5.2	Concetti base di meccanica del continuo . . . . .	75
5.2.1	Le equazioni fondamentali . . . . .	77
5.3	Alcuni concetti del metodo degli elementi finiti . . . . .	82
5.4	Le funzioni di forma . . . . .	84
5.5	Metodi per l'integrazione numerica nel tempo . . . . .	89
5.5.1	Metodo delle differenze centrali . . . . .	89
<b>6</b>	<b>Metodo di accoppiamento tra dinamica molecolare e dominio continuo</b>	<b>91</b>
6.1	Inquadramento del problema . . . . .	92
6.1.1	Modello Atomistico . . . . .	92

---

6.1.2	Modello Continuo . . . . .	93
6.2	Bridging domain coupling method . . . . .	95
6.2.1	Coupling method . . . . .	95
6.2.2	Equazioni discrete . . . . .	97
6.3	Algoritmo esplicito . . . . .	98
6.4	Applicazioni . . . . .	101
6.4.1	Comportamento della zona di interfaccia al variare della forma del campo degli spostamenti . . . . .	102
6.4.2	Comportamento della zona di interfaccia al variare della funzione di forma . . . . .	114
<b>Appendice A</b>		
	<b>Teorema di Gauss</b>	<b>123</b>
<b>Appendice B</b>		
	<b>Equazione di conservazione del momento angolare</b>	<b>125</b>
<b>Appendice C</b>		
	<b>Equazione di conservazione dell'energia</b>	<b>127</b>
<b>Appendice D</b>		
	<b>Metodo dei Moltiplicatori di Lagrange</b>	<b>131</b>



# Capitolo 1

## Introduzione

Capire come le caratteristiche di un materiale a scala microscopica possano influenzare il comportamento di un corpo o una struttura considerata nel suo insieme risulta di fondamentale importanza in ambito scientifico. Tale comprensione è di maggiore interesse nell'ambito dei materiali compositi i quali, al giorno d'oggi, trovano diverse utilizzazioni in numerosi campi tecnologici: dalla nanoelettronica alle tecnologie metallurgiche e ai superconduttori e alla diagnostica medica. Tali materiali trovano inoltre applicazioni nel campo delle nanotecnologie e questo presuppone un loro utilizzo a diversi tipi di scala: macroscopica, microscopica e atomistica. Dopo una prima analisi delle caratteristiche generali e di alcuni materiali compositi in particolare, nasce l'esigenza di dover studiare il loro comportamento tenendo conto delle informazioni che provengono dalle scale inferiori. Ciò richiede di considerare anche il passaggio tra le varie scale spingendosi fino a quella atomistica. Servono quindi le modalità di interfaccia tra un modello basato sulla teoria del continuo ad uno basato sulla teoria della dinamica molecolare (MD). Entrambe le scale presentano poi delle limitazioni: problemi di singolarità matematica per quanto riguarda il continuo e problemi di costi computazionali troppo elevati per quanto riguarda la MD. I metodi che permettono tale accoppiamento prendono il nome di *Multiscale material modelling*.

Si presenta quindi una panoramica sull'evoluzione che questi metodi han-

no avuto nel corso degli anni e dei vari ambiti di applicazione in cui sono stati impiegati. La letteratura a riguardo, sebbene molto ampia, non risulta però altrettanto chiara in quanto spesso non vi è un'univoca identificazione di tali metodi. Nonostante ciò, si è definita una classificazione dei vari modelli multiscala dividendoli secondo due approcci. Il primo *Information-Passing Multiscale Approach* o *Hierarchical Approach* implica una risoluzione sequenziale dei due domini, partendo da quello alla scala minore. Il secondo approccio, definito *Concurrent* nella maggior parte della documentazione, o *Embedded, Integrated, Hand-Shaking*, risolve simultaneamente il dominio continuo e quello atomistico mediante l'introduzione di un appropriato modello tra le differenti scale. A partire da questa classificazione vengono trattati, seppur brevemente, i principali metodi che afferiscono alle due categorie. Considerando quindi lunghezze di scale differenti risulta opportuno soffermarci sulle caratteristiche che ne sono alla base.

Si definiscono pertanto le basi teoriche della dinamica molecolare (MD) definendo le equazioni del moto secondo una formulazione Lagrangiana e tramite le equazioni di Hamilton. Vengono quindi presentati dapprima alcuni concetti fondamentali come l'introduzione delle condizioni periodiche al contorno, il principio della minima immagine, etc, per poi identificare l'algoritmo di Verlet e il Predictor-Corrector come integratori numerici per la risoluzione delle equazioni del moto. Si introducono in seguito due tipi di potenziali interatomici: Lennard-Jones (LJ) e Tight-Binding (TB). Mediante lo sviluppo di quest'ultimo si sono eseguite applicazioni volte a migliorare l'efficienza computazionale del sistema tramite l'introduzione delle liste di Verlet e delle Linked Cell. Ulteriori applicazioni, relative a tale ambito riguardano lo sviluppo della funzione di correlazione a coppie e al termostato di Andersen.

Analogamente si definiscono, seppur brevemente, le equazioni base che regolano la meccanica del continuo: equazione di conservazione della massa, dell'energia, del momento lineare e angolare, equazione di equilibrio, equazioni costitutive, equazioni al contorno e condizioni iniziali. Tale trattazione viene effettuata seguendo la formulazione lagrangiana totale (total Lagran-



gian formulation). Si prosegue quindi con un rapido accenno al metodo degli elementi finiti per poter introdurre il concetto di funzioni di forma. Esse infatti entrano in gioco nella definizione delle equazioni del continuo e, quindi, anche nella zona di interfaccia nel metodo multiscala considerato. In particolare si definiscono in coordinate locali funzioni di forma lineari, quadratiche e cubiche.

Avendo quindi a disposizione le basi teoriche di entrambe le discipline è possibile descrivere nel dettaglio il metodo multiscala che è stato studiato: *Bridging Domain Coupling Method*. Tale metodo prevede l'accoppiamento tra il dominio continuo e quello atomistico tramite una regione di sovrapposizione in cui gli spostamenti atomici devono conformarsi agli spostamenti del modello continuo in corrispondenza della stessa posizione atomica. Le equazioni del moto, definite in termini dell'Hamiltoniano, vengono risolte per entrambi i domini mediante il Metodo dei Moltiplicatori di Lagrange.

Si è quindi analizzata la dipendenza della modalità di propagazione del campo di spostamento attraverso l'interfaccia, dapprima in funzione della sua forma e successivamente in funzione della dipendenza spaziale. In entrambe le situazioni è stato considerato un dominio atomistico comprendente alcune migliaia di atomi e centinaia di nodi. Grazie al fatto di poter considerare una regione abbastanza estesa di dinamica molecolare è stato possibile, per quanto riguarda il primo punto, studiare la propagazione di un'onda sinusoidale semplice all'aumentare del numero dei periodi e al variare della lunghezza dell'onda stessa. In secondo luogo sono state analizzate le modalità con cui queste onde si propagano tra i due domini al variare delle funzioni di forma. Entrambe le applicazioni considerano differenti spessori della zona di sovrapposizione.

Concludendo, l'obiettivo di questo lavoro è quello di fornire le basi per uno strumento metodologico con il quale trasferire, in modo adeguato, attraverso la zona di sovrapposizione, un campo di spostamenti dal dominio atomistico a quello continuo. Volendo quindi fornire uno strumento di tipo metodologico è stato necessario affrontare nel dettaglio le basi teoriche dei domini

considerati. Questo per permettere a utenti di diverse discipline di poter apprendere, utilizzare e magari migliorare tale strumento.

## Capitolo 2

# Il progresso nel campo dei nuovi materiali e i modelli multiscala

Il capitolo introduce i materiali ad elevate prestazioni mediante l'analisi dei fattori che ne hanno permesso, negli ultimi anni, un notevole sviluppo. A questa classe appartengono i materiali compositi di cui vengono delineate le caratteristiche generali per focalizzarsi poi su alcuni di essi. Le caratteristiche di questi materiali a livello macroscopico, intendendo con questo termine la scala nella quale usualmente vengono eseguiti i calcoli strutturali, dipendono fortemente dalle caratteristiche dei componenti a livelli inferiori di scala (micro, nano). Nasce quindi l'esigenza di dover tener conto di informazioni che provengono dalle scale inferiori. Questo richiede anche di includere il passaggio da una scala nanometrica a una microscopica, ossia da un modello basato sulla teoria del continuo ad uno atomistico mediante simulazioni di dinamica molecolare (MD) in quanto è oggi impensabile eseguire i calcoli strutturali alla scala più piccola. I metodi che permettono tale accoppiamento prendono il nome di *Multiscale material modelling*. Il capitolo si conclude con gli obiettivi di tale lavoro, in particolare sulla necessità di definire il comportamento del modello mediante la propagazione di un'onda nella regione

di collegamento tra i due domini.

## 2.1 Materiali ad elevate prestazioni

Il continuo progresso delle conoscenze nel campo della tecnologia ed ingegneria dei materiali ha reso possibile lo sviluppo di prodotti che hanno un impatto positivo sulla competitività economica, sulla sicurezza, sulla qualità della vita e dell'ambiente. Sebbene il pubblico in generale tenda a recepire simili progressi solo nel contesto di nuovi dispositivi di consumo, l'industria dei materiali compie continui miglioramenti che interessano un ampio campo di settori produttivi.

Questo processo è reso possibile dal fatto che, negli ultimi decenni, gli strumenti disponibili hanno permesso uno studio più accurato della sintesi di materiali a livello nanoscopico. Da un lato, nuovi metodi analitici hanno permesso di indagare le strutture dei materiali fino a scale dell'ordine dei nanometri, dall'altro nuovi dispositivi informatici hanno ampliato le potenzialità per modellare sistemi più complessi.

Tali conoscenze di base trovano applicazione per lo studio di questi materiali i quali presentano una combinazione di notevoli proprietà: una perfetta distribuzione strutturale, bassa densità, alta rigidità e durezza ed eccellenti proprietà elettroniche. Le incredibili caratteristiche che tali materiali ci offrono e la possibilità di adattare i materiali a specifiche applicazioni hanno pertanto stimolato largamente le attività di ricerca sia in ambito scientifico che ingegneristico. Come risultato possono trovare uso in molteplici applicazioni nell'ambito dei materiali fibrorinforzati, della nanoelettronica, della diagnostica medica e in altri ambiti specifici. Le tecnologie di questi materiali avanzati permettono:

- di assemblare materiali metallici, ceramici, polimerici o ibridi in prodotti a forma quasi finita conservando o conferendo proprietà controllate a livello nanometrico o micrometrico. Entrano in questa categoria tutte le tecnologie per la realizzazione di prodotti per i quali non è sostanzial-

mente possibile la modifica della forma dopo la fabbricazione, e quindi le tecnologie per materiali ceramici ad alte prestazioni e le tecnologie per prodotti ceramici industriali e del cemento. L'ambiente di utilizzo determina le singole applicazioni (trasporti, costruzioni, ambiente, salute, sistemi di produzione, energetica, agroalimentare).

- di fabbricare prodotti (essenzialmente metallici) da sottoporre a successive trasformazioni, aventi proprietà controllabili dalle dimensioni micrometriche o submicrometriche in grado di conservare o modificare a specifica le proprietà durante i successivi cicli di trasformazione. Entrano in gioco in questa categoria le tecnologie metallurgiche e le tecnologie dei superconduttori. Anche in questo caso l'ambiente di utilizzo determina le singole specializzazioni.
- di utilizzare i prodotti delle due tecnologie precedenti come semiprodotto per la realizzazione di beni o processi di scala dimensionale maggiore.
- di riutilizzare i materiali provenienti come scarti dei cicli di lavorazione o dai beni al termine della vita utile di esercizio.

## 2.2 Materiali compositi

Con il termine materiali compositi si può indicare una serie molto vasta di materiali costituiti da una miscela eterofase, naturale o artificiale. Tuttavia la letteratura scientifica ha ristretto la definizione di compositi ad una categoria di materiali, non naturali, che rispondono a tre requisiti:

- consistono di due o più materiali fisicamente distinti e meccanicamente separabili;
- vengono dispersi l'uno nell'altro in modo controllato;
- consentono di raggiungere una combinazione di proprietà che non si può ottenere con i singoli materiali.

La loro scoperta si deve al grosso impegno sia economico che umano profuso dall'industria aerospaziale nella ricerca tecnologica. In questo campo, infatti, innumerevoli sono stati e sono gli sforzi per ottenere il miglior compromesso tra resistenza, peso e costo delle strutture degli aeromobili, in quanto il raggiungimento di tale scopo permette di realizzare prestazioni altrimenti inavvicinabili, sia in termini assoluti sia in termini di risparmio energetico, a parità di condizioni d'impiego. Il problema della determinazione analitica delle proprietà di materiali compositi ha interessato alcuni dei nomi più illustri degli scienziati della fine dell'ottocento come J.C. Maxwell e Lord Rayleigh che, rispettivamente nel 1783 e nel 1892, calcolarono la conducibilità effettiva di compositi consistenti in una matrice con una certa distribuzione di particelle sferiche. L'analisi delle proprietà meccaniche dei materiali compositi ebbe probabilmente origine con una pubblicazione di Albert Einstein nel 1906 in cui egli calcolò la viscosità effettiva di un fluido contenente una piccola quantità di particelle rigide di forma sferica. Fino al 1960 circa, gli studiosi si dedicarono essenzialmente a problemi riguardanti compositi con comportamento macroscopicamente isotropico. In questo periodo tuttavia una vera tecnologia dei materiali compositi non esisteva ancora. Essa cominciò ad emergere negli anni successivi con l'avvento dei moderni compositi fibrosi consistenti in fibre allineate molto rigide e resistenti ed in seguito si è diffusa grazie all'avvento della meccanica computazionale. In generale i materiali compositi sono costituiti da una fase continua *matrice* in cui è dispersa una fase discontinua costituita da *particelle* o *fibre*.

I compositi particellari sono ottenuti aggiungendo delle particelle ad una matrice polimerica, metallica o ceramica, con lo scopo di aumentare particolari caratteristiche elettriche, termiche, magnetiche, di resistenza all'abrasione, all'usura o all'impatto; tuttavia non portano ad un aumento della resistenza a trazione. I composti più diffusi sono quelli ottenuti con fibre le quali hanno la funzione di conferire al materiale composito elevata rigidità, resistenza a trazione e ad aumentare il modulo elastico; la matrice invece ha il compito di fungere da legante conferendo continuità al materiale, consentendo la

trasmissione e la ripartizione delle sollecitazioni e, infine, proteggendo le fibre dall'aggressività dell'ambiente esterno. Le fibre possono essere continue, e quindi estendersi per tutta la lunghezza del composto, oppure discontinue ed orientate preferibilmente lungo una determinata direzione in modo da conferire al materiale un comportamento anisotropo.

### 2.2.1 Proprietà dei compositi

Per valutare le proprietà dei compositi è necessario conoscere le proprietà dei materiali che li costituiscono e la geometria del sistema (concentrazione, dimensioni, forma, distribuzione e orientamento delle fibre). Alcune proprietà sono legate alle corrispondenti regole delle miscele.

E' ad esempio il caso della densità del composto  $\rho_c$  che è uguale alla media pesata rispetto alla frazione volumetrica delle densità dei suoi costituenti:

$$\rho_c = f_m \cdot \rho_m + f_f \cdot \rho_f$$

dove  $f_f$  e  $f_m=1-f_f$  sono rispettivamente la frazione volumetrica delle fibre e della matrice. Nel caso di fibre continue e unidirezionali anche la conducibilità elettrica e termica nella direzione delle fibre possono essere valutate in modo analogo secondo:

$$K_c = f_m \cdot K_m + f_f \cdot K_f$$

$$\sigma_c = f_m \cdot \sigma_m + f_f \cdot \sigma_f$$

dove  $K$  e  $\sigma$  sono rispettivamente la conducibilità termica ed elettrica. Spesso queste ultime due grandezze sono differenti per diversi ordini di grandezza tra la matrice e la fibra per cui il flusso termico o la corrente elettrica passano di fatto solo nella fase più conduttiva. Nel caso di fibre discontinue e non unidirezionali questa semplice regola non è più applicabile. In materiali compositi con fibre polimeriche la conducibilità elettrica è più bassa e dipende dalla lunghezza delle fibre, dalla frazione di volume delle fibre e dalla vicinanza di queste ultime tra di loro.

Per quanto riguarda il modulo elastico del composto  $E_c$  la media pesata

$$E_{c,\parallel} = f_m \cdot E_m + f_f \cdot E_f$$

vale solo nella direzione in cui le fibre (continue) sono allineate e nel caso in cui sia la matrice che le fibre operino nel campo elastico. In effetti, come riportato in Figura (2.1), aumentando la sollecitazione, queste condizioni non risultano rispettate dalla matrice che si deforma plasticamente e, quindi, non contribuisce più a conferire rigidità al composto per cui il modulo elastico può essere espresso come:

$$E_{c,\parallel} = f_f \cdot E_f$$

Quando la sollecitazione agisce perpendicolarmente alle fibre, ciascun com-

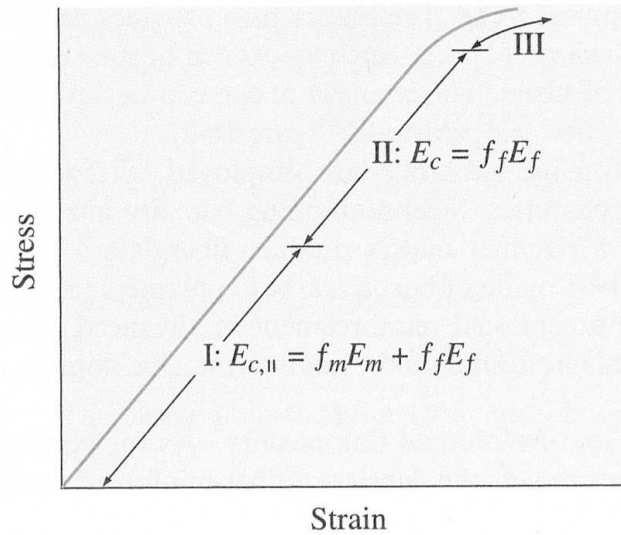


Figura 2.1: Diagramma tensione-deformazione per un composito fibrorinforzato. Alle basse tensioni (regione I) il modulo elastico è calcolato mediante la regola delle miscele. Per tensioni maggiori (regione II) la matrice si deforma e la relazione non può essere applicata [4].

ponente agisce indipendentemente dall'altro e si può ricavare, in campo elastico, la relazione:

$$1/E_{c,\perp} = f_m/E_m + f_f/E_f$$



Altra caratteristica di notevole importanza è la resistenza a trazione del composto fibro-rinforzato  $TS_c$  la quale dipende dal legame tra le fibre e la matrice. Questa è espressa, per un composto contenente fibre continue e tra loro parallele da

$$TS_c = f_f \cdot TS_f + f_m \cdot \sigma_m$$

dove  $TS_f$  è la resistenza a trazione della fibra e  $\sigma_m$  è la tensione che agisce sulla matrice quando il composto è deformato in un punto in corrispondenza della frattura della fibra; cioè la  $\sigma_m$  non è la reale resistenza a trazione della matrice.

### 2.2.2 Caratteristiche delle fibre

Per quanto riguarda la resistenza meccanica del composto non vale più la semplice regola delle miscele, ma si devono considerare anche caratteristiche delle fibre diverse dalla loro resistenza meccanica (le dimensioni, la forma, l'orientazione, il contenuto e la loro adesione alla matrice). Le fibre possono essere corte, lunghe o continue e le loro dimensioni sono spesso caratterizzate dal rapporto  $l/d$  dove  $l$  è la lunghezza della fibra e  $d$  il suo diametro; maggiore è questo rapporto e più elevata sarà la resistenza del composito [4]. Tipiche fibre hanno diametri che variano tra  $10 \mu m$  a  $150 \mu m$ .

È noto che la resistenza a trazione di una fibra aumenta al diminuire del suo diametro Figura (2.2) . Utilizzando delle fibre, anche con materiali fragili si possono ottenere resistenze a trazione molto maggiori di quelle dell'acciaio Tabella (2.1).

Il motivo principale è da ricercare nella riduzione del numero e delle dimensioni dei difetti superficiali. I valori più elevati di resistenza a trazione si possono raggiungere con i *whiskers*, sottilissimi monocristalli con un rapporto lunghezza/diametro molto elevato in quanto, avendo un diametro piccolissimo, hanno una struttura praticamente perfetta e sono esenti da difetti. La resistenza del composito dipende, però, anche dalla possibilità della matrice

Materiali	Densità (Kg/m <sup>3</sup> )	Modulo elastico (GPa)	Resistenza a a trazione (GPa)
Fibre di carbonio	1750	250	2,7
Fibre di Kevlar 49	1450	130	2,7
Fibre di vetro E	2600	73	3,4
Laminette di mica	2000	170	3,0
Acciaio di carbonio	7800	210	0,4-2

Tabella 2.1: Caratteristiche di alcuni materiali di rinforzo e confronto con gli acciai [4].

di trasferire le sollecitazioni alla fibra attraverso la loro interfaccia. Il carico trasmesso, che è nullo all'estremità della fibra, aumenta quando ci si sposta verso il suo interno. Quindi all'aumentare della lunghezza delle fibre migliorano le proprietà meccaniche del composito. D'altra parte fibre molto lunghe possono rendere difficile la lavorazione del composito, per cui si deve raggiungere un compromesso. Si può dimostrare che esiste una lunghezza critica  $l_c$ , Equazione (2.1), la quale dipende oltre che dalla geometria della fibra, anche dalla resistenza allo scorrimento dell'accoppiamento fibra-matrice.  $TS_f$  è la resistenza della fibra e  $\tau_i$  è la resistenza del legame tra la fibra e la matrice o la tensione alla quale la matrice inizia a deformarsi:

$$l_c = \frac{TS_f d}{2\tau_i} \quad (2.1)$$

Se la lunghezza della fibra è molto maggiore della lunghezza critica (in genere  $l > 15l_c$ ) gli effetti alle estremità della fibra stessa possono essere trascurati e la fibra viene considerata come se fosse continua. La resistenza del composto [4] può essere stimata da:

$$\sigma_c = f_f TS_f \left(1 - \frac{l_c}{2l}\right) + f_m \sigma_m$$

dove  $\sigma_m$  è la tensione sulla matrice quando si rompe la fibra.

Nella maggior parte dei compositi le fibre sono resistenti, dure ma leggere

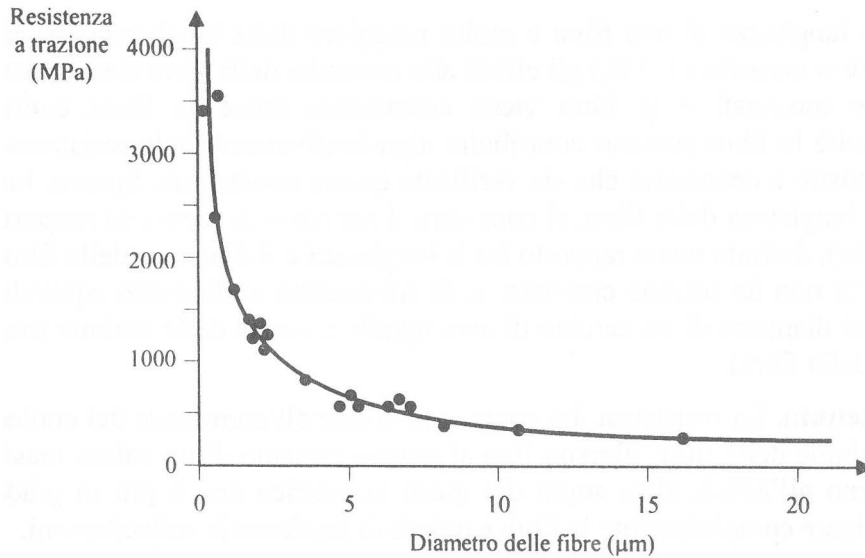


Figura 2.2: Resistenza a trazione di fibre di vetro in funzione del diametro [1].

e, se il materiale deve essere usato ad alte temperature, hanno anche un elevato punto di fusione. Per definire quindi le caratteristiche meccaniche di tali composti si fa riferimento a due parametri. Il primo è il modulo specifico (*specific modulus*) definito dal rapporto tra il modulo di Young  $E$  e la densità  $\rho$  del materiale; il secondo è la resistenza specifica (*specific strength*) definita come rapporto tra la resistenza a trazione  $TS$  e la densità  $\rho$  del materiale.

$$\text{specific modulus} = \frac{E}{\rho}$$

$$\text{specific strength} = \frac{TS}{\rho}$$

Nella Figura (2.4) e nella Tabella riportata in Figura (2.3) a pagina seguente sono riportate le proprietà di alcuni tipi di fibre. È da notare che un più alto modulo specifico si ritrova in materiali che hanno un basso numero atomico e presenza di legami covalenti come il boro e il carbonio. Questi due materiali hanno inoltre elevato punto di fusione ed elevata resistenza.

Nonostante i numerosi vantaggi che presentano tali materiali bisogna considerare anche alcune loro limitazioni. Prima di tutto l'elevato costo di fabbricazione che sarà forse abbassato in futuro grazie a nuove tecniche

Material	Density (g/cm <sup>3</sup> )	Tensile Strength (ksi)	Modulus of Elasticity (×10 <sup>6</sup> psi)	Melting Temperature (°C)	Specific Modulus (×10 <sup>7</sup> in.)	Specific Strength (×10 <sup>6</sup> in.)
<b>Polymers:</b>						
Kevlar™	1.44	650	18.0	500	34.7	12.5
Nylon	1.14	120	0.4	249	1.0	2.9
Polyethylene	0.97	480	25.0	147	7.1	13.7
<b>Metals:</b>						
Be	1.83	185	44.0	1277	77.5	2.8
Boron	2.36	500	55.0	2030	64.7	4.7
W	19.40	580	59.0	3410	8.5	0.8
<b>Glass:</b>						
E-glass	2.55	500	10.5	<1725	11.4	5.6
S-glass	2.50	650	12.6	<1725	14.0	7.2
<b>Carbon:</b>						
HS (high strength)	1.75	820	40.0	3700	63.5	13.0
HM (high modulus)	1.90	270	77.0	3700	112.0	3.9
<b>Ceramics:</b>						
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.95	300	55.0	2015	38.8	2.1
B <sub>4</sub> C	2.36	330	70.0	2450	82.4	3.9
SiC	3.00	570	70.0	2700	47.3	5.3
ZrO <sub>2</sub>	4.84	300	50.0	2677	28.6	1.7
<b>Whiskers:</b>						
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.96	3000	62.0	1982	43.4	21.0
Cr	7.20	1290	35.0	1890	13.4	4.9
Graphite	1.66	3000	102.0	3700	170.0	50.2
SiC	3.18	3000	70.0	2700	60.8	26.2
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	3.18	2000	55.0		47.8	17.5

$$* 1 \frac{\text{gm}}{\text{cm}^3} = 0.0361 \frac{\text{lb}}{\text{in.}^3}$$

Figura 2.3: Si ricorda che kdi=6.894 MPa, psi=6.894E+3 Pa, in=25.4 mm [4].

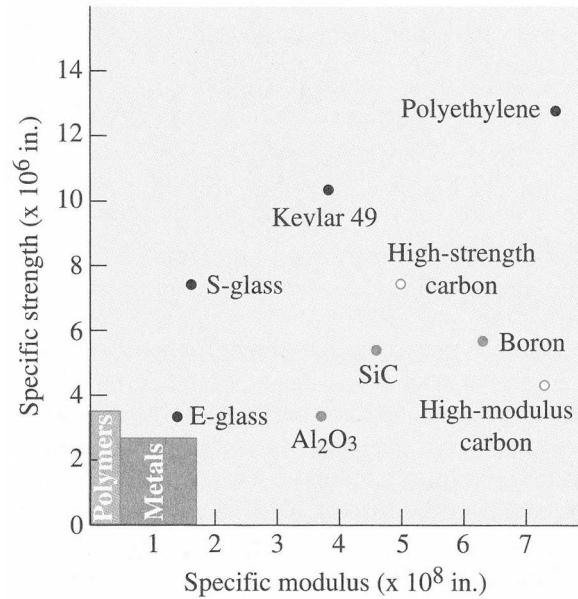


Figura 2.4: Confronto della resistenza e modulo specifico di fibre metalliche o polimeriche [4].

di lavorazione e di fabbricazione. In secondo luogo da un punto di vista meccanico è più difficile definire la struttura di un composito da quella di un semplice metallo dato che, a differenza di questi ultimi, presentano un comportamento isotropico. Le proprietà non sono pertanto uguali nelle varie direzioni e ciò comporta un elevato numero di parametri nella definizione del materiale che si ripercuote in una maggior complessità computazionale e sperimentale. Inoltre la riparazione dei compositi non è un processo semplice in confronto a quello dei metalli dato che, talvolta, alcune cricche possono non essere identificate.

### 2.2.3 Classificazione dei materiali compositi

I materiali compositi possono essere classificati in base alla geometria e forma del rinforzo: fibre, particelle sferiche, elementi molto sottili denominati flakes o dal tipo di matrice: metallica, ceramica, polimerica o a base di carbonio.

**Compositi a matrice metallica (MMCs).** Questi materiali, rinforzati da fibre metalliche o ceramiche forniscono una buona resistenza alle alte temperature. Presentano inoltre migliori proprietà elastiche, una più alta conduttività termica ed elettrica, insensibilità all'umidità e una migliore resistenza all'usura e alla fatica. Solitamente la matrice metallica è in alluminio e talvolta in magnesio o titanio rinforzata con fibre di carbonio e carburo di silicio. I metalli vengono rinforzati soprattutto per aumentare o ridurre alcune loro proprietà in modo da adattarsi ai bisogni della progettazione. In presenza di determinate fibre alcuni metalli mostrano una diminuzione della duttilità e della resistenza alla frattura; nel caso dell'alluminio la presenza di whiskers di carburo di silicio porta ad una riduzione della densità del 10% mentre la presenza di fibre di silicio riduce di circa il 50% la resistenza alla frattura. Si riportano alcune caratteristiche in Tabella (2.2).

In Figura (2.5) invece si confrontano il modulo e la resistenza specifica di

Proprietà	Unità di misura	SiC/ alluminio	Graffite/ alluminio	Acciaio	Alluminio
Modulo di Young	GPa	117.2	124.1	206.8	68.95
Resistenza ultima a trazione	MPa	1206	448.2	648.1	234.40
Coefficiente di espansione termica	$\mu\text{m}/\text{m}/^\circ\text{C}$	12.4	18	11.7	23

Tabella 2.2: Proprietà meccaniche di alcuni compositi a matrice metallica [2].

alcuni compositi con quella di metalli e polimeri. Da notare che questi valori sono inferiori di quelli della Figura (2.4) in quanto ora stiamo considerando l'intero composito e non solamente le fibre.

L'utilizzo di questi materiali trova spazio in molteplici applicazioni. Sono impiegati nella realizzazione di tubi in boro/alluminio per sostenere l'intelaiatura della fusoliera nelle navicelle spaziali in quanto grazie alla loro bassa conduttività termica riducono i requisiti di isolamento termico. I motori a

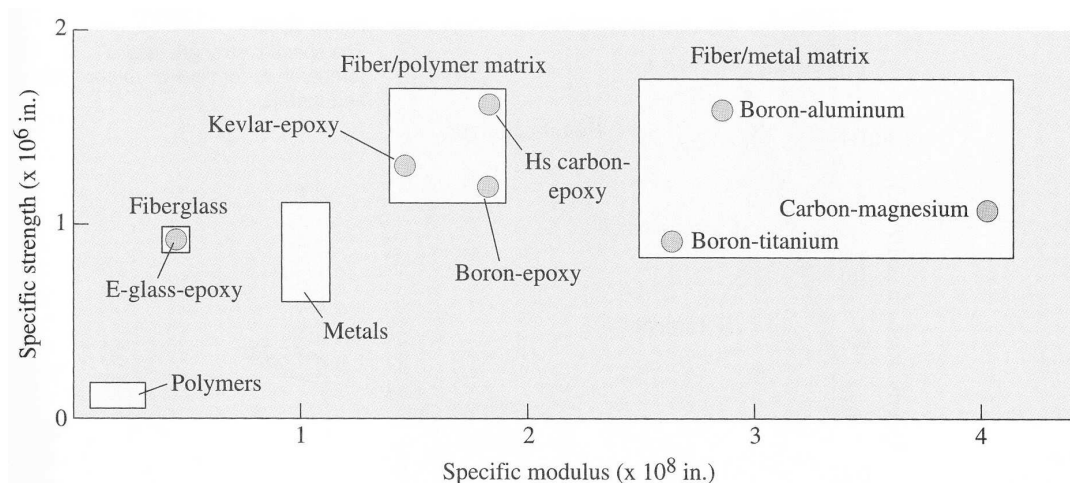


Figura 2.5: Confronto della resistenza specifica e modulo specifico di materiali compositi con metalli e polimeri [4].

reazione permettono di operare più efficientemente se rinforzati con fibre metalliche (tungsteno) o ceramiche ( $\text{SiC}$  o  $\text{B}_4\text{N}$ ) in quanto sono resistenti anche ad alte temperature. In maniera analoga il titanio rinforzato con fibre di  $\text{SiC}$  viene utilizzato nelle pale e nei dischi delle turbine. In ambito meccanico sono impiegati nei motori delle automobili perchè sono più leggeri rispetto ai metalli o perchè permettono di rinforzare i pistoni in alcuni motori diesel.

**Compositi a matrice ceramica (CCMs).** Questi materiali hanno una matrice ceramica ottenuta con l'alluminio o con silicati di alluminio rinforzati da fibre di carbonio o carburo di silicio. I vantaggi sono l'elevata resistenza e durezza, gli elevati limiti di temperatura di servizio <sup>1</sup>, la bassa densità e la resistenza alla frattura. È importante sottolineare che tale caratteristica dipende dall'assenza di deformazioni plastiche alle basse e medie temperature. I materiali ceramici, diversamente dai metalli, non sono infatti in grado di dissipare energia in vicinanza delle zone plastiche di fronte alla punta della fessura. Numerosi sono i metodi che permettono di aumentare la resistenza

<sup>1</sup>Temperature limiti di servizio sono 400 °C per i polimeri, 1000 °C per i metalli e le loro leghe, 1500 °C per i ceramici.

alla frattura: dall'inserimento di nanoparticelle metalliche delle dimensioni di 5-20 nm incorporate in una matrice ceramica policristallina in modo da formare un collegamento duttile, all'inserimento di fibre o particelle fibrorinforzate costituite da fibre di carbonio o carburo di silicio Tabella (2.3). L'unione quindi di una fibra con una matrice ceramica rende i CCMs applicabili in ambiti dove sono richieste elevate proprietà meccaniche e temperature di servizio. Come per i MMC si riportano in Tabella (2.4) alcune proprietà meccaniche.

Materiali	Resistenza alla frattura ( $\text{MPa}\sqrt{m}$ )
Resine epossidiche	3
Leghe di alluminio	35
Carburo di Silicio	3
SiC/ $\text{Al}_2\text{O}_3$	27
SiC/SiC	30

Tabella 2.3: Valori della resistenza alla frattura di alcuni compositi a matrice ceramica [2].

Proprietà	Unità di misura	SiC/LAS	SiC/CAS	Acciaio	Alluminio
Modulo di Young	GPa	89.63	121	206.8	68.95
Resistenza ultima a trazione	MPa	496.4	400	648.1	234.4
Coefficiente di espansione termica	$\mu\text{m}/\text{m}/^\circ\text{C}$	3.6	4.5	11.7	23

Tabella 2.4: Proprietà meccaniche di alcuni compositi a matrice ceramica [2].

### Compositi a matrice polimerica (PMCs)

Questi compositi sono i più utilizzati. Sono formati da una matrice polimerica (resine epossidiche o poliestere), rinforzata con fibre sottili di grafite, vetro, carbonio, etc. Le principali caratteristiche di questi materiali sono



Proprietà	Unità di misura	Grafite/ resina epossidica	Vetro/ resina epossidica	Acciaio	Alluminio
Modulo di Young	GPa	181.0	38.6	206.8	68.95
Resistenza ultima a trazione	MPa	1500	1062	648.1	275.8
Coefficiente di espansione termica	$\mu\text{m}/\text{m}/\text{ }^\circ\text{C}$	0.02	8.6	11.7	23

Tabella 2.5: Principali proprietà di alcuni composti a matrice polimerica e materiali monolitici [2].

riportate in Tabella (2.5). Le fibre di vetro portano ad una maggiore resistenza, elevata resistenza chimica e hanno un basso costo; ciò a discapito di un basso modulo elastico e resistenza alla fatica, ridotta aderenza ai polimeri e sensibilità all'abrasione. Le fibre di grafite presentano invece un elevato modulo specifico e resistenza specifica e buona resistenza alla fatica; presentano invece alta conduttività elettrica, una bassa resistenza all'impatto ed un costo elevato. Alcune di queste caratteristiche sono riassunte in Tabella (2.6). Tali materiali trovano applicazione in vari ambiti: da quello delle co-

Proprietà	Unità di misura	Grafite	Vetro	Acciaio	Alluminio
Modulo di Young	GPa	181.0	38.6	206.8	68.95
Resistenza ultima a trazione	MPa	1500	1062	648.1	275.8
Coefficiente assiale di espansione termica	$\mu\text{m}/\text{m}/\text{ }^\circ\text{C}$	0.02	8.6	11.7	23

Tabella 2.6: Principali proprietà di alcuni composti a matrice polimerica e materiali monolitici [2].

struzioni, a quello sportivo o aerospaziale. Nel primo si realizzano barre di armatura o tiranti da precompressione destinati a sostituire gli elementi di acciaio oppure laminati per la fasciatura dei pilastri (cioè l'applicazione sul

perimetro esterno dell'elemento di fascie o di tessuto che viene poi incollato alla base della matrice polimerica). Essi sono stati per ora usati ancora poco per le nuove costruzioni, ma maggiormente in sede di ripristino come mezzo di rinforzo e/o adeguamento sismico di strutture in cemento armato o in muratura. In ambito aerospaziale vengono utilizzati grazie alle elevate caratteristiche di resistenza e modulo specifico in presenza di grandi variazioni di temperatura; in ambito sportivo sono invece destinati alla realizzazione di racchette da tennis, mazze da golf e biciclette di peso molto ridotto.

### Compositi intermetallici

Gli intermetallici o composti intermetallici costituiscono una nuova importante classe di materiali utili in numerosi settori grazie alle loro elevate qualità come buone caratteristiche meccaniche, proprietà termoelettriche, magnetiche e superconduttive. Sono per lo più composti di elementi metallici (due o più) la cui struttura cristallina è diversa da quella dei materiali di partenza. Si formano quando la forza di legame tra atomi diversi è maggiore di quella tra atomi della stessa specie dando origine ad un nuovo materiale con una sua struttura cristallina, composizione e proprietà. Alcuni intermetallici e le loro corrispondenti caratteristiche sono elencati in Tabella (2.7) mentre in Figura (2.6) sono evidenziate alcune proprietà.

Un esempio di materiale intermetallico è il  $\text{MoSi}_2$  il quale, alle alte tem-

Proprietà	Compositi
Proprietà meccaniche	$\text{Ti}_3\text{Al}$ , $\text{TiAl}$ , $\text{Ni}_3\text{Al}$ , $\text{NiAl}$ , $\text{Fe}_3\text{Al}$ , $\text{FeAl}$ , $\text{MoSi}_2$ , $\text{Mo}_5\text{Si}_3$ , $\text{Nb}_3\text{Al}$
'Hydrogen storage'	$\text{LaNi}_5$ , $\text{TiFe}$ , $\text{Mg}_2\text{Ni}$ , $\text{TiMn}_{1.5}$
'Shape memory'	$\text{TiNi}$
Termoelettricità	$\text{Bi-Te}$ , $\text{SiGe}$ , $\text{CoNb}_3$ , $\text{FeSi}_2$ , $\text{Mg}_2\text{Si}$ , $\text{MnSi}_2$
Ferromagnetismo	$\text{SmCo}_5$ , $\text{Sm}_2(\text{Co,Cu,Fe})_{17}$ , $\text{Nd-Fe-B}$
Superconduttività	$\text{Nb}_3\text{Al}$ , $\text{Nb}_3\text{Sn}$

Tabella 2.7: Principali proprietà di alcuni composti intermetallici [3].

perature ( $\sim 1000\text{-}1600$  °C), mostra una notevole resistenza all'ossidazione

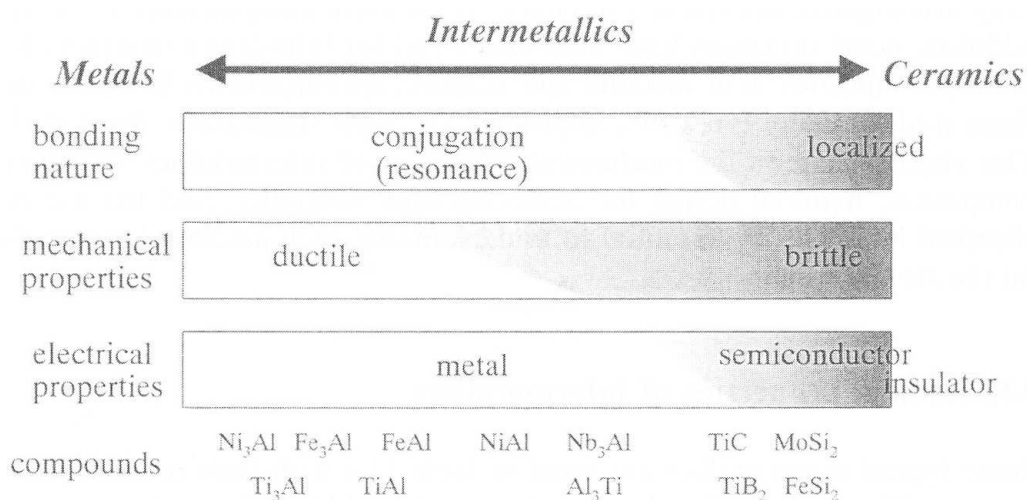


Figura 2.6: Proprietà degli intermetallici [3].

mentre a temperature più basse ( $\leq 500$  °C) è fragile e si ossida in maniera catastrofica; il fenomeno è conosciuto come 'pestring'. Altri intermetallici come il  $\text{Ti}_3\text{Al}$  e il  $\text{Ni}_3\text{Al}$  mantengono la loro resistenza e sviluppano caratteristiche di duttilità utilizzabili alle alte temperature. Gli intermetallici a base di silicio giocano un ruolo fondamentale nella microelettronica, mentre altri come il  $\text{Nb}_3\text{Sn}$  sono utili come superconduttori. Questo materiale viene prodotto sotto forma di fili mediante lo schema riportato in Figura (2.7). Esso prevede l'assemblamento di una billetta nella quale sono inseriti i precursori del  $\text{Nb}_3\text{Sn}$ ; si processa tale billetta fino al raggiungimento delle dimensioni desiderate. In seguito il filo viene torto e sottoposto a trattamento termico per formare il  $\text{Nb}_3\text{Sn}$ . Esso viene utilizzato per la realizzazione delle bobine superconduttive del reattore nucleare ITER.

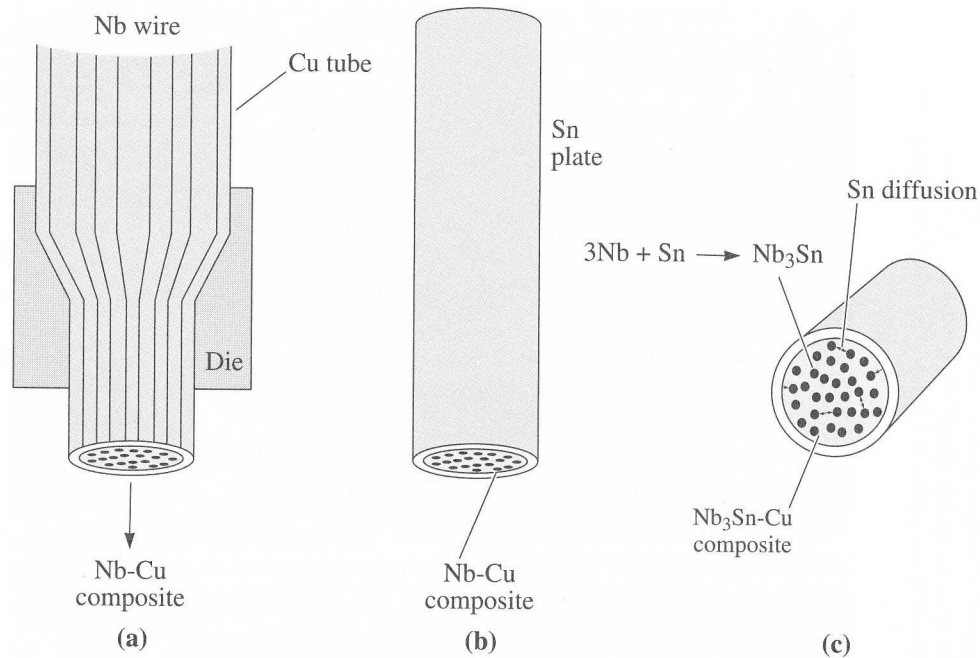


Figura 2.7: Fasi della realizzazione di fili superconduttori di Nb<sub>3</sub>Sn.

## 2.3 Multiscale material modelling

Abbiamo fino ad ora considerato le caratteristiche e le varie applicazioni che derivano da alcuni materiali compositi. Molto spesso si è fatto riferimento a questi materiali i quali vengono utilizzati a scala nanoscopica o micrometrica. Ciò pone un'importante questione sulla trattazione e lo studio di questi materiali. Mentre dal punto di vista atomico un cristallo viene considerato come un periodico insieme di atomi uniti tra loro mediante legami, la meccanica del continuo lo vede come un insieme omogeneo e continuo. Da una parte è l'atomo ad essere l'unità strutturale più piccola, dall'altra la struttura base del cristallo è idealizzata come una massa puntuale; le deformazioni all'interno dell'unità base sono quindi ignorate. Nella nano/micro fisica queste deformazioni interne devono essere considerate; pertanto la classica teoria del continuo non può essere più utilizzata. È utile ricordare la ben nota teo-

ria della frattura fragile di Griffith <sup>2</sup> con la quale è stato dimostrato come il campo deformativo e tensionale diventino matematicamente singolari se ci poniamo in vicinanza di una punta della frattura come è evidenziato in Figura (2.8) La natura della frattura fragile come anche fenomeni di creep e di

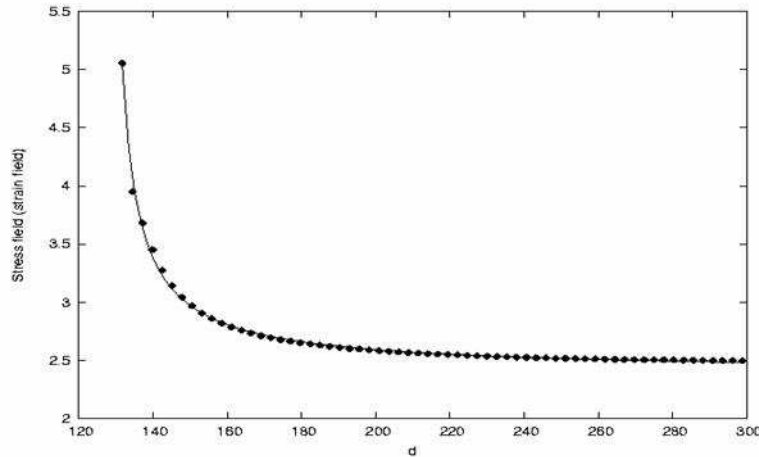


Figura 2.8: Andamento del campo tensionale e deformativo al diminuire della distanza  $d$  la quale rappresenta la distanza tra la punta di una frattura e un'eventuale inclusione nel materiale.

fatica, inomogeneità delle deformazioni plastiche, dipendono fortemente dai fenomeni che si sviluppano alle scale più piccole. Dobbiamo quindi riferirci ad una descrizione atomistica, mediante simulazioni di dinamica molecolare (MD), per tener conto delle effettive proprietà, di difetti o impurità del materiale. Ciò permetterà di analizzare il materiale nella sua conformazione strutturale e determinare univocamente e senza approssimazioni le sue proprietà a livello locale.

---

<sup>2</sup>La teoria della frattura fragile descrive il comportamento della propagazione delle fratture in un corpo considerando l'energia implicata. L'equazione stabilisce che, quando una microfrattura riesce a propagarsi abbastanza da fratturare un solido, il guadagno in energia superficiale è uguale alla perdita dell'energia potenziale. Poiché l'energia di tensione rilasciata è direttamente proporzionale al quadrato della lunghezza della microfrattura, soltanto quando questa è relativamente corta l'energia richiesta per espandersi supera l'energia disponibile. Oltre la lunghezza critica di Griffith, la frattura diventa pericolosa

Con gli strumenti computazionali a disposizione si riescono oggi a simulare domini contenenti alcuni milioni ( $10^9$ ) di atomi e tempi dell'ordine dei picosendi. Modelli più complessi avrebbero bisogno, per essere studiati nella loro interezza, di bilioni di atomi; cifre non ancora raggiungibili per le correnti simulazioni di MD. Da una parte quindi i concetti che regolano la meccanica del continuo ci impediscono di spingersi a scale troppo piccole a causa di problemi matematici, dall'altra la MD non ci permette di studiare un intero dominio a causa di costi computazionali troppo elevati.

Risulta quindi necessario poter discretizzare l'intero corpo considerando le classiche regole del continuo ed analizzare singole regioni ritenute più significative tramite uno studio a scala atomica. Per ovviare a tali problemi sono nati negli ultimi vent'anni dei metodi denominati *Multiscale material modeling* che permettono di accoppiare queste due discipline. Con tale termine ci si riferisce quindi alla teoria e simulazione delle proprietà e del comportamento di materiali a diverse lunghezze e tempi di scala, da quella microscopica a nanoscopica a quella macroscopica Figura (2.9).

La possibilità di evidenziare una parte del dominio ci permetterà di capire come si possano riflettere a scale maggiori le proprietà del materiale soprattutto se, a livello atomistico, siano presenti eventuali difetti. Questa conoscenza sarà a sua volta essenziale per capire, controllare e realizzare nuovi strumenti in vari campi industriali che permetteranno lo sviluppo dei nuovi nano/micro sistemi. Il rapido sviluppo di nanotecnologie, nanomeccanica e nanomateriali è l'esempio di quanto detto.

Per la trattazione di alcuni metodi multiscala si rimanda al Capitolo 3.

## 2.4 Obiettivi

Si è visto come i materiali eterogenei riescono a garantire prestazioni migliori in termini di resistenza, durabilità, caratteristiche elettroniche, etc. Di conseguenza risulta di fondamentale importanza in ambito scientifico capire come le caratteristiche di un materiale a scala microscopica o atomistica pos-

sano influenzare il comportamento di un corpo o una struttura considerata nel suo insieme.

Il principale obiettivo di questo lavoro è quindi poter disporre di uno strumento metodologico che permetta di collegare i due ambiti: continuo-molecolare. Una delle applicazioni interessanti di questo strumento è la possibilità di studiare il comportamento o la stabilità di strutture attraverso tecniche non invasive di propagazione di onde ad ultrasuoni.

Si studia tale comportamento facendo riferimento a Modelli Multiscala mediante i quali è possibile individuare le caratteristiche dei materiali dalla scala atomistica a quella macroscopica. Il collegamento tra il dominio molecolare e quello continuo è svolto con un metodo multiscala che appartiene alla categoria *Concurrent*. L'obiettivo è quindi analizzare la dipendenza della modalità di propagazione del campo di spostamento attraverso l'interfaccia dapprima in funzione della sua forma e successivamente in funzione della dipendenza spaziale. In entrambe le situazioni è stato considerato un dominio atomistico comprendente alcune migliaia di atomi e centinaia di nodi. In particolare il lavoro si prefigge di studiare tale propagazione al variare delle funzioni di forma e dello spessore della zona di sovrapposizione.

Per completare il quadro generale il lavoro cerca di delineare i principali concetti che ruotano attorno al tema: la panoramica degli aspetti base e delle relative applicazioni delle simulazioni di dinamica molecolare, i concetti della meccanica del continuo e la descrizione dei più diffusi metodi di accoppiamento che è possibile trovare in letteratura.

In ultimo va notato che tale lavoro è inserito all'interno di un progetto di KMM-NoE N° NMP3-CT-2004-502243 (2004 - 2008), network europeo relativo allo studio di materiali ad elevate prestazioni.

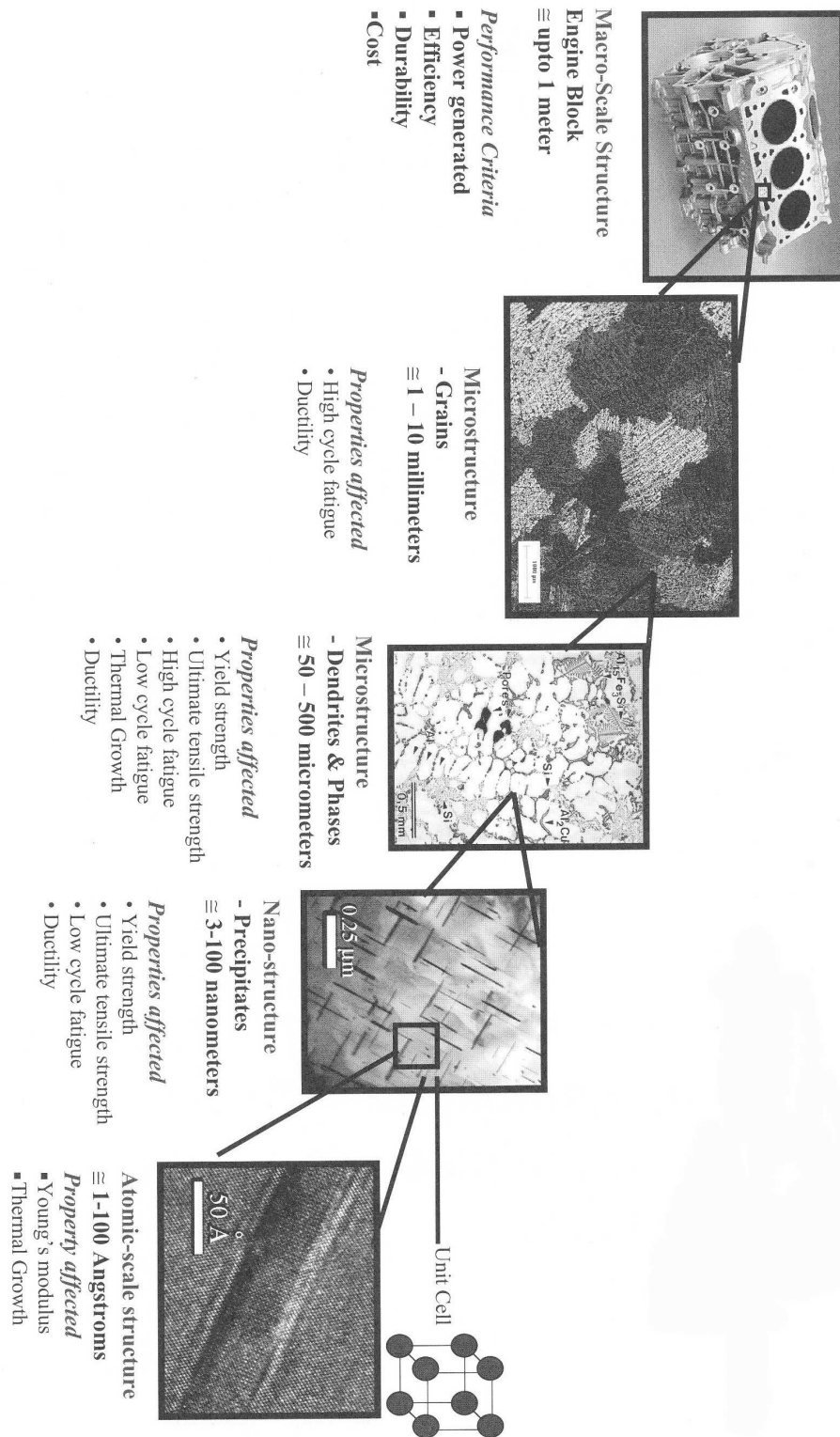


Figura 2.9: Schema delle caratteristiche microstrutturali a diverse lunghezze di scala [4].



## Capitolo 3

# Classificazione e analisi dei principali Modelli Multiscala

Come abbiamo visto precedentemente, per poter accoppiare domini schematizzati mediante diverse lunghezze di scala, dobbiamo riferirci ai Modelli Multiscala. In questo capitolo si vuole definire in modo abbastanza chiaro ed esauriente cosa la letteratura ci offre su tali modelli. È importante, per capire appieno tale disciplina, conoscere l'evoluzione che questi metodi hanno avuto nel corso degli anni e dei vari ambiti di applicazione in cui sono stati impiegati. Nonostante la letteratura si presenti piuttosto ricca, non sempre risulta da una rapida lettura, altrettanto chiara. Nonostante ciò si è cercato di dare una classificazione dei vari modelli multiscala dividendoli secondo due approcci. Il primo implica una risoluzione sequenziale dei due domini, partendo da quello alla scala minore. Il secondo si basa sulla risoluzione simultanea dei domini microscopici e macroscopici, nella fattispecie quello atomistico e continuo, mediante l'introduzione di un appropriato legame tra le due scale. A partire da questa classificazione si tratteranno, seppur brevemente, i principali metodi che afferiscono alle due categorie.

### 3.1 Aspetti generali

Abbiamo concluso il precedente capitolo focalizzando l'attenzione sui metodi multiscala o meglio *Multiscale Material Modelling* i quali ci permettono di accoppiare scale di diverse lunghezze utilizzando la dinamica molecolare (MD) solamente in una regione localizzata e schematizzando l'interno corpo mediante i concetti base della meccanica del continuo. Questo, come già accennato nel precedente capitolo, per ridurre gli oneri computazionali derivanti dalle simulazioni atomistiche e per descrivere adeguatamente determinate regioni senza comprometterne l'accuratezza. Affacciandosi a questa disciplina è opportuno citare le parole di Albert Einstein 'the model used should be the simplest one possible, but not simpler ([24])'; pertanto il metodo multiscala più corretto dovrà essere attentamente pesato a seconda dei casi che si presenteranno. Per esempio nel caso di MMCs con presenza periodica di fibre l'introduzione di scale più piccole porta ad una migliore conoscenza del materiale a partire dai costituenti su scala atomica mediante il metodo dell'omogenizzazione (Paragrafo 3.2.1).

In letteratura esistono numerosi metodi che descrivono più o meno dettagliatamente il passaggio di informazioni dal dominio continuo a quello atomistico. Tale abbondanza non ha tuttavia una ben definita schematizzazione. In alcuni casi l'insieme di tali metodi viene distinto in due o talvolta tre famiglie; in altri non si attribuisce alcuna separazione. Nonostante quindi il panorama si presenti sotto tale aspetto è possibile identificare due approcci concettualmente diversi che si sono sviluppati nel corso degli anni. Il primo, tuttora utilizzato, viene definito in letteratura come *Information-Passing Multiscale Approach* [24], [12] oppure *Hierarchical Approach* [15],[6] ed implica una risoluzione sequenziale dei due domini. Esso si basa sulla soluzione del modello alla scala atomistica ed il passaggio delle informazioni da essa ottenute per utilizzarle poi all'interno del dominio continuo. Il secondo approccio, definito *Concurrent* nella maggior parte della documentazione, o *Embedded, Integrated, Hand-Shaking*, risolve simultaneamente il dominio continuo e quello atomistico mediante l'introduzione di un appropriato modello

che legni le differenti scale. I vari metodi che si andranno ad analizzare si differenzieranno quindi in base all'approssimazione della zona critica rappresentata dal dominio di transizione tra le due scale. Oltre a questa principale distinzione in [15] si fa riferimento ad un terzo approccio *Multi-Scale Boundary Condition* più recente rispetto ai precedenti a differenza dei quali non risolve il modello continuo con un algoritmo di tipo esplicito.

In seguito si definiranno quali metodi appartengono alle famiglie appena evidenziate soffermandosi su quelli più utilizzati o di cui la letteratura fornisce una maggior documentazione.

## 3.2 Information-passing o Hierarchical Multiscale Methods

Questo approccio, usato per alcune decadi con diverse tecniche, include le proprietà intrinseche del solido all'interno della formulazione continua. Nei casi più semplici costanti elastiche, coefficienti di espansione termica e altre proprietà relative ai difetti nei cristalli possono essere estratti da modelli atomistici ed utilizzati come parametri di input per definire le proprietà del materiale nel modello continuo. Il passaggio delle informazioni dalle scale più piccole a quelle maggiori è quindi un meccanismo potente in quanto non è necessario unire computazionalmente metodi di diverse scale. Ciononostante tali metodi possono essere limitati in quanto i fenomeni nelle scale minori vengono parametrizzati attraverso lo studio della semplice geometria. In tal modo non si potrà definire appieno la complessità delle deformazioni che emergerebbero da un ipotetica trattazione puramente atomistica.

Come già accennato, in letteratura si trovano numerosi metodi afferenti a tale categoria; se ne riportano alcuni con riferimento a [24]. Il *Generalized Mathematical Homogenization* (GMH); il *Multiscale Enrichment based on Partition of Unity* (MEPU); l'*Heterogeneous Multiscale Method* (HMM); il *Variational Multiscale Method* (VMS); il *Discontinuous Galerkin Method* (DG); l'*Equation-Free Method* (EFM); il *Kinetic Monte Carlo* (KMC).

### 3.2.1 Generalized Mathematical Homogenization (GMH)

Questa tecnica viene utilizzata nel caso si debbano studiare materiali compositi a struttura periodica ossia quei materiali la cui struttura è decomponibile in un determinato numero di componenti o *celle di periodicità*. La teoria dell'omogenizzazione si prefigge di ricavare il comportamento globale di un sistema eterogeneo periodico a partire dalle proprietà elastiche dei singoli costituenti della cella di periodicità. L'obiettivo è quello di trovare le caratteristiche elastiche di un materiale omogenizzato equivalente il cui comportamento meccanico sia il più vicino possibile a quello del mezzo eterogeneo periodico. Con tale tecnica vengono studiati oggi giorno fili di  $\text{Nb}_3\text{Sn}$ , (Cap.2) la cui struttura periodica è indicata in Figura (3.1).

Nello studio delle proprietà globali di tale materiale possono essere consi-

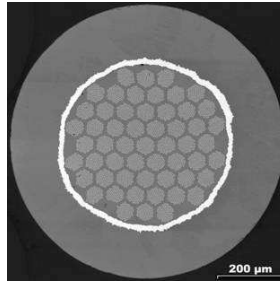


Figura 3.1: Esempio di filo superconduttivo costituito da  $\text{Nb}_3\text{Sn}$ .

derate due differenti scale: una macroscopica o globale  $\mathbf{x}$  relativa all'intera struttura ed una microscopica o locale  $\mathbf{y}$ , relativa alle singole celle di periodicità come mostrato in Figura (3.2). Tra queste due variabili viene stabilita la seguente correlazione:

$$\varepsilon = \frac{\mathbf{x}}{\mathbf{y}} \quad (3.1)$$

Il punto di partenza del metodo consiste nell'assumere che la periodicità della struttura imponga una perturbazione periodica sulle quantità che descrivono il comportamento meccanico del corpo. A partire da questa assunzione gli spostamenti possono essere espressi dalla seguente relazione:

$$\mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{u}^0(\mathbf{x}) + \varepsilon \mathbf{u}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + O(\varepsilon^2) \quad (3.2)$$

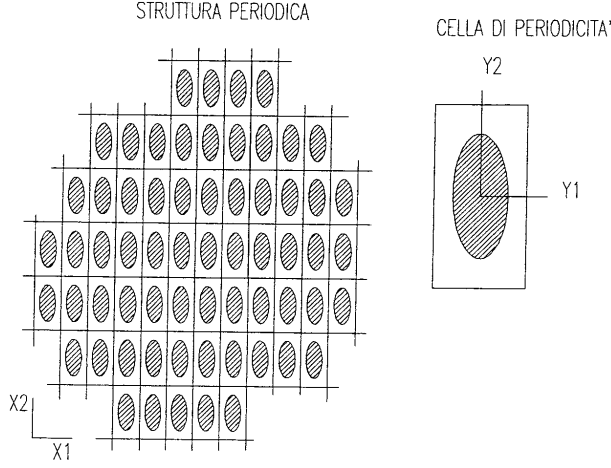


Figura 3.2: Esempio di struttura periodica bidimensionale (riferimento macroscopico  $(x_1, x_2)$ ) e cella di periodicit  (riferimento microscopico  $(y_1, y_2)$ ).

dove l'apice 0 indica che il campo di spostamenti pu  essere interpretato come campo globale e l'apice 1 indica la perturbazione locale incognita. Il vettore  $\mathbf{u}^1$  viene calcolato in funzione degli spostamenti globali  $\mathbf{u}^0$  e delle funzioni di omogenizzazione  $\chi_{pq}(\mathbf{y})$  da:

$$u_i^1 = \frac{\partial u_p^0}{\partial x_q} \chi_i^{pq}(\mathbf{y}) + C_i(\mathbf{x}) \quad (3.3)$$

La matrice delle funzioni  $\chi_{pq}(\mathbf{y})$  ([32], [33]) dipende solamente dalla geometria e dalle propriet  dei materiali della singola cella di periodicit . Analogamente il campo delle deformazioni viene definito dalla relazione:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^\varepsilon(\mathbf{x}) \equiv \boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon \boldsymbol{\varepsilon}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + O(\varepsilon^2) \quad (3.4)$$

dove:

$$\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i^0}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^0}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i^1}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^1}{\partial x_i} \right) \quad (3.5)$$

cio :

$$\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i^0(x)}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^0(x)}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \chi_i^{pq}(y)}{\partial x_j} + \frac{\partial \chi_j^{pq}(y)}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_p^0(x)}{\partial x_q} \quad (3.6)$$

che rappresenta la deformazione a livello locale. L'applicazione delle equazioni costitutive all'Equazione (3.6) porta alla seguente definizione di tensione:

$$\sigma_{kl}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = a_{ijkl}(y) \left( \delta_{ip} \delta_{jq} + \frac{\partial \chi_i^{pq}(y)}{\partial y_j} \right) \varepsilon_{pq}^0 \quad (3.7)$$

Dalla media di (3.8) sulla cella di periodicità le effettive equazioni costitutive possono essere dedotte da:

$$a_{ijkl}^{eff} = |Y|^{-1} \int_y a_{ijpq}(y) (\delta_{kp} \delta_{lq} - \chi_{k,l}^{pq}(y)) dY \quad (3.8)$$

Segue poi una procedura chiamata 'recovery' o 'unsmearing' per dedurre la soluzione locale da quella globale nell'intorno di un punto arbitrario nel composito.

### 3.2.2 Multiscale enrichment based on the partition of unity (MEPU)

Tale metodo è una sintesi del metodo precedente unito al *Partition of Unity Method*. Esso viene usato per integrare la descrizione alla scala continua estendendo il range di applicabilità della teoria matematica dell'omogenizzazione a problemi dove non si può effettuare la separazione di scale. Senza tale modifica nel caso di materiali non periodici la soluzione a livello del continuo può variare rapidamente all'interno del dominio della cella unitaria e pertanto i risultati non sarebbero attendibili.

MEPU appartiene alla categoria di metodi che impiegano una decomposizione gerarchica secondo la forma

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^c + \mathbf{u}^f \quad (3.9)$$

dove  $\mathbf{u}^c$  e  $\mathbf{u}^f$  sono le soluzioni alle due scale. Si ha quindi

$$\mathbf{u} = \sum \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{d} + \sum \mathbf{H}(\mathbf{x}) \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{a} \quad (3.10)$$

dove  $\mathbf{N}$  sono le funzioni di forma del continuo,  $\mathbf{H}(\mathbf{x})$  rappresentano delle funzioni ottenute dalla soluzione della cella unitaria,  $\mathbf{d}$ ,  $\mathbf{a}$  sono i gradi di libertà

nodali e atomistici.

Il metodo permette quindi di trattare problemi non periodici associando diverse celle unitarie con diversi punti Gauss negli elementi rappresentanti il continuo. Per ridurre il costo computazionale si è progettato uno schema di implementazione come l'omogenizzazione. Per mezzo di questo approccio il valore di una funzione in un punto Gauss di un elemento del continuo è ricollocato con un valore medio calcolato su un dominio di una cella unitaria centrata nel punto Gauss. È stato dimostrato che l'accuratezza di questo schema è dell'ordine di  $O(1/n)$  dove  $n$  è il numero delle celle unitarie nel dominio continuo.

### 3.2.3 Equation free method (EFM)

In tale metodo il problema alla scala inferiore si sviluppa su alcuni punti campione del dominio continuo. Questi punti campione possono essere rappresentati da una cella unitaria atomistica. Diversamente da altri metodi il problema a scala maggiore non è considerato noto. Quindi la soluzione viene calcolata in due intervalli successivi alla scala più piccola e successivamente definita alla scala maggiore mediante  $u^c(t) = Ru^f(t)$  e  $u^c(t+dt) = Ru^c(t+dt)$ . Di conseguenza quest'ultima soluzione al tempo  $t + \Delta t$  ( $\Delta t \gg \delta t$ ) è allora la soluzione alla scala maggiore ottenuta grazie ad un'estrapolazione nella scala temporale. Il metodo definisce in maniera accurata il passaggio di informazioni dalla scala minore a quella maggiore, mentre ciò non si può ancora affermare per il contrario. Solitamente il metodo viene applicato a complessi bio-sistemi dove il comportamento alle scale più grandi è spesso sconosciuto.

### 3.2.4 KMC-based information-passing method

La maggior parte dei summenzionati approcci multiscala, con l'eccezione di EFM e GMH, trattano di collegamenti tra scale spaziali. L'idea base di questo metodo invece è la seguente.

Sia  $P(\sigma_i, t)$  la probabilità di trovare un sistema in uno stato  $\sigma_i$  al tempo  $t$

e  $W(\sigma_i, \sigma - i + 1)$  la velocità di transizione da  $\sigma_i$  a  $\sigma - i + 1$ . KMC è un algoritmo che risolve la funzione di probabilità  $P(\sigma_i, t)$  tale che

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum (P(\sigma_i, t)W(\sigma_i, \sigma_{i+1}) - P(\sigma_{i+1}, t)W(\sigma_{i+1}, \sigma_i))$$

La velocità di transizione può essere espressa come prodotto fra una velocità di tentativo e la probabilità di successo per il tentativo stesso. La velocità di tentativo per l'evento  $i$  è definita dal seguente esponenziale:

$$r_i = \mu_i \exp(-E_i/k_B T) \quad (3.11)$$

dove  $\mu_i$  è un fattore di frequenza espresso in termini di una frequenza vibrazionale ed  $E$  è l'energia del sistema. Tale metodo ricade in questa categoria in quanto sia  $\mu_i$  che  $E$  possono essere calcolate mediante dinamica molecolare o simulazioni di meccanica quantistica ([24]).

### 3.3 Concurrent Multiscale Methods

Questi metodi non sono interamente nuovi nello scenario letterario riferito all'accoppiamento tra continuo e dominio atomistico. Già agli inizi del 1970 si trovano lavori ([25],[26],[27]) in cui mediante la trattazione del continuo elastico si prevedevano realistiche condizioni al contorno per regioni atomistiche molto piccole. Dalle limitazioni evidenziate dall'approccio precedente si sono sviluppati modelli in cui il comportamento di ogni scala dipende fortemente da quello dell'altra. I dettagli derivanti da una piena simulazione atomistica vengono definiti e conservati in una o più regioni critiche del materiale mentre il modello continuo è impiegato a descrivere le deformazioni in zone del materiale che sono più lontane dal comportamento atomistico. In tal modo si evita la perdita di informazioni nel passaggio da una scala all'altra. Tale descrizione risulta appropriata e utile in fenomeni localizzati come in vicinanza della punta di una frattura, in fenomeni di attrito o turbolenza e per studiare nano meccanismi. Nonostante questa famiglia di metodi richieda tempi computazionali maggiori rispetto ai precedenti sono attualmente più utilizzati in quanto sono in grado di risolvere zone critiche della



scala atomistica con maggior dettaglio. Ciò che caratterizza questa categoria di metodi sono le diverse condizioni con cui si studia la zona di interfaccia tra i due modelli matematici. Anche in questo caso, e forse in misura maggiore, la letteratura ci fornisce un'ampia panoramica dei vari metodi, più o meno dettagliatamente. Se ne riportano alcuni con riferimento a [15] e [12]. Il MAAD (Macroatomistic ab initio dynamics), il *Quasi-continuum Method* (QC), CLS, FEA, CCAD, *Edge-to-edge decomposition method*, *Overlapping domain decomposition method*

### 3.3.1 MAAD Method

Questo metodo, sviluppato da Broughton e altri [28], prende il nome dal calcolo a tre lunghezze di scala diverse: macroscopica, atomistica e dinamica *ab initio*. In questo metodo tre diversi metodi computazionali, precisamente tight-binding (TB), molecular dynamics (MD) e finite element (FE), vengono risolti contemporaneamente per simulare la propagazione di una frattura in un solido fragile. Il Tight binding è usato per simulare la rottura di un legame atomico in corrispondenza della punta di una frattura; la dinamica molecolare è usata nella regione circostante la frattura; gli elementi finiti sono usati in una zona molto lontana dalla frattura dove il campo delle deformazioni è generalmente omogeneo. La dinamica dell'intero sistema è governata dalla funzione dell'Hamiltoniano totale che combina gli Hamiltoniani delle tre diverse regioni. In questo metodo il reticolo realizzato con gli elementi finiti viene maggiormente infittito man mano che si scende alla scala atomica.

Il MAAD è stato applicato con buoni risultati nel caso della frattura del silicio, ma rimangono ancora aperte due sfide. La prima è che le tre equazioni del moto sono state integrate utilizzando lo stesso time step, ossia quello del TB. La seconda dipende dal fatto che, per ora, l'accoppiamento tra i diversi domini è realizzato in modo tale che nella regione di transizione ognuno contribuisca all'energia totale in ugual proporzione.

### 3.3.2 Quasi-continuum method (QC)

Il metodo QC è stato usato per studiare una vasta gamma di aspetti della deformazione nei solidi cristallini fin dalla fine degli anni novanta [10] per subire poi varie rivisitazioni nel corso degli anni. In questo metodo una parte del continuo viene identificata tramite una particella o cristallo rappresentativo, di raggio  $R_C$ , centrata rispetto ad un atomo (atomo rappresentativo). La particella, formata da un insieme di atomi, viene deformata in accordo con il campo degli spostamenti del modello continuo mentre la sua energia è calcolata mediante un appropriato modello atomistico. In questo modo le proprietà del modello continuo sono automaticamente introdotte in tale descrizione. L'intero solido viene invece discretizzato mediante il metodo degli elementi finiti quindi la deformazione all'interno di un elemento è ottenuta tramite interpolazione dei corrispondenti spostamenti nodali che diventano le incognite del problema.

In situazioni quasi statiche l'energia viene calcolata tramite il minimo della somma dell'energia dei cristalli rappresentativi e quella derivante dalla soluzione agli elementi finiti. Ci deve quindi essere una correlazione tra il campo degli spostamenti nel continuo e la deformazione del cristallo. Un approccio standard è l'applicazione della legge di Cauchy-Born dove le posizioni atomiche sono collegate al campo continuo tramite il gradiente locale di deformazione  $\mathbf{F}$ . In questo modo ogni particella di continuo è rappresentata da un cristallo infinitesimo sottoposto ad una deformazione omogenea. Tale formulazione prende il nome di 'local QC formulation'. Oltre a questa in letteratura si parla anche della 'non-local QC formulation' dove ogni atomo appartenente al cristallo rappresentativo subisce uno spostamento a seconda del campo degli spostamenti del continuo nella sua posizione. Questo implica che la posizione dell'atomo  $\mathbf{R}_n$  dopo la deformazione è data da  $\mathbf{r}_n = \mathbf{R}_n + \mathbf{u}(\mathbf{R}_n)$ , dove  $\mathbf{u}$  è lo spostamento del campo continuo.

Le due formulazioni sono equivalenti se l'elemento è sufficientemente grande da contenere il cristallo rappresentativo, Figura (3.3) mentre se gli elementi sono più piccoli del raggio  $R_C$  gli atomi contenuti nella particella rappre-

sentativa apparterranno a diversi elementi, Figura (3.4). In generale però la mesh sarà composta da elementi 'local' lontano dalle zone con difetti o altre non uniformità, mentre da elementi 'non-local' in vicinanza di questi.

Consideriamo quindi di deformare una piccola regione attorno all'atomo

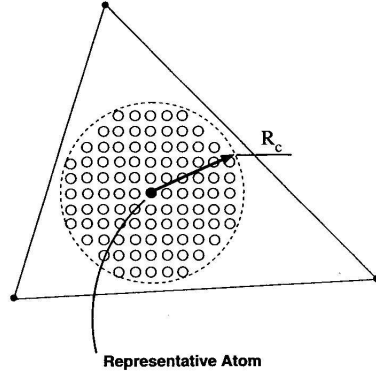


Figura 3.3: Elemento locale contenente l'intero cristallo rappresentativo di raggio  $R_C$ .

rappresentativo secondo il gradiente locale di deformazione, se siamo in un elemento locale, o sulla base dell'attuale spostamento di ogni atomo in relazione al campo degli spostamenti del continuo, se siamo in un elemento non-locale. Possiamo quindi calcolare l'energia totale dell'atomo rappresentativo usando un appropriato modello atomistico e fornire al modello continuo l'energia e le sue derivate in corrispondenza del punto Gauss (punto di integrazione numerico). L'energia totale di un cristallo è data da:

$$\mathbf{W} = \frac{1}{V} = \sum_i [U_i(\rho_i) + \Phi_i] \quad (3.12)$$

dove  $i$  indica la somma su tutti gli atomi appartenenti al cristallo,  $V$  il volume totale del cristallo,  $\rho_i$  è la densità elettronica dell'atomo  $i$ ,  $U_i$  l'energia dell'atomo  $i$  e  $\Phi_i$  l'energia totale di interazione dell'atomo  $i$  con tutti gli atomi vicini. Quest'ultimo termine tiene conto dell'interazione a coppie tra i vari atomi secondo la seguente relazione:

$$\Phi_i = \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} \Phi_{ij}(r_{ij}) \quad (3.13)$$

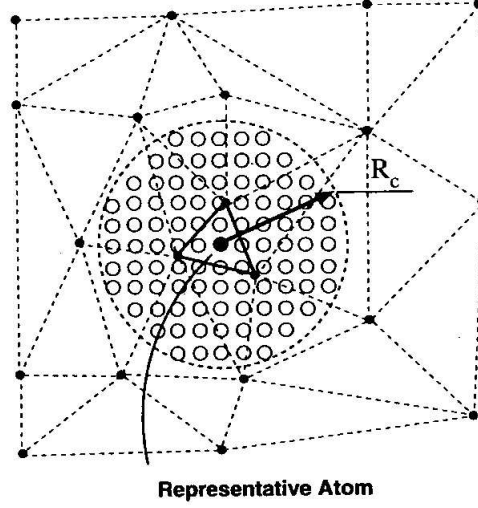


Figura 3.4: Vari elementi non locali comprendono il cristallo rappresentativo di raggio  $R_C$ .

dove  $i$  e  $j$  sono atomi all'interno del cristallo e  $\Phi_{ij}$  rappresenta il potenziale a coppie. Invece  $\rho_i$  è definita da:

$$\rho_i = \sum_{j(\neq i)} f_j(r_{ij}) \quad (3.14)$$

dove  $f_j$  è la densità elettronica generata dall'atomo  $j$  ad una distanza  $r_{ij}$  dal suo nucleo.

Nel caso di una trattazione local QC con deformazioni omogenee la (3.13) e la (3.14) possono essere scritte come

$$\Phi_i = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m}} \Phi(r^{\mathbf{m}}) \quad (3.15)$$

$$\rho_i = \sum_{\mathbf{m}} f(r^{\mathbf{m}}) \quad (3.16)$$

dove  $\mathbf{m} = (m_1, m_2, m_3)$  è sommato su tutti gli atomi all'interno della sfera di cut-off dell'atomo rappresentativo e  $r^{\mathbf{m}} = |\mathbf{x}(\mathbf{m})|$ . Ovviamente la (1) diventa:

$$\mathbf{W} = \frac{1}{\Omega} = [\mathbf{U}(\rho)] + \Phi \quad (3.17)$$

dove  $\Omega$  è il volume della cella unitaria. Data quindi la (3.17) si possono derivare in ogni punto del cristallo le tensioni locali. Differenziando la (3.17) rispetto alle componenti del gradiente di deformazione otteniamo il primo tensore di Piola-Kirchhoff :

$$\mathbf{P}_{iJ} = \frac{1}{\Omega} = \left[ \mathbf{U}'(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial F_{iJ}} + \frac{\partial \Phi}{\partial F_{iJ}} \right] \quad (3.18)$$

e da questo tramite la  $P_{iJ} = \tau_{ij} F_{Ji}^{-1}$  le tensioni.

### 3.3.3 FEAt model

In questo metodo la zona di transizione tra i due domini é mostrata in Figura (3.5). A sinistra é presente la regione atomistica nella quale ogni atomo é esplicitamente rappresentato e trattato usando un potenziale interatomico. Dalla parte opposta si trova la regione discretizzata mediante elementi finiti con i suoi nodi associati. Nella zona di interfaccia c'è una corrispondenza biunivoca tra atomi e nodi. Muovendosi da questa zona verso il dominio continuo, i cui elementi vanno via via ingrandendosi, si incontra una regione 'cuscinetto' (pad region) dove esistono quelli che vengono definiti 'pseudotomi' (pseudoatoms) sul dominio continuo. In seguito indicheremo con 'A', 'I', 'P' rispettivamente gli atomi nella regione atomistica, gli atomi all'interfaccia e i pseudoatomi. In tale metodo la regione continua é risolta fino alla scala atomica nella regione 'cuscinetto' la quale ha un'estensione doppia rispetto al raggio di cutoff del potenziale interatomico. Concettualmente il metodo é risolto iterativamente come segue: gli atomi  $I$  di interfaccia sono usati per fornire condizioni al contorno per il modello continuo. La soluzione del modello continuo per gli atomi  $I$  fissati fornisce le posizioni  $\mathbf{r}_p$  dei pseudoatomi che sono usati come atomi fissi al contorno per aggiornare gli atomi reali. Nel metodo la densità di energia di deformazione, e quindi l'energia  $E_\mu$  di ogni elemento, viene definita in due diversi modi. Fuori dalla 'pad region' viene usata un'elasticità non lineare

$$W_{nonlin}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}[\mathbf{C} \cdot \epsilon(\mathbf{X})] : \epsilon(\mathbf{X}) + \frac{1}{6}[\epsilon(\mathbf{X})^T \cdot \mathbf{C}' \cdot \epsilon(\mathbf{X})] : \epsilon(\mathbf{X})f \quad (3.19)$$

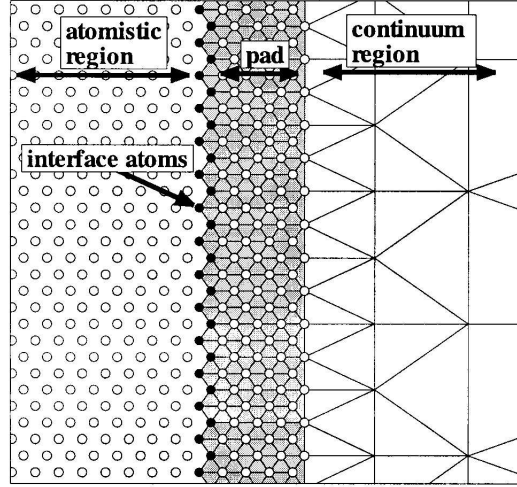


Figura 3.5: Zona di transizione tra il dominio continuo e atomistico.

dove  $\mathbf{C}'$  (tensore del sesto ordine) é il modulo di ordine maggiore nell'espansione di Taylor dell'energia di deformazione. I moduli elastici  $\mathbf{C}$  e  $\mathbf{C}'$  sono scelti per uniformare esattamente la risposta non lineare del modello atomistico al secondo ordine, che diminuisce le discrepanze (mismatch) nei modelli costitutivi del materiale attraverso la regione di transizione. Usando questa definizione dell'energia di deformazione e sapendo che l'energia su un elemento finito é definita come l'integrale di quest'ultima abbiamo:

$$E_\mu = \int_{\Omega_\mu} W_{nonlin}(\mathbf{X}) dV \quad (3.20)$$

Cercando di mitigare gli effetti dovuti alla netta separazione dalla regione atomistica a quella continua tale metodo usa una formulazione continua non-locale per descrivere le energie degli elementi nella zona 'cuscinetto'. Cioé per questi elementi la densità di energia di deformazione é:

$$W_{nonlin}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega'} [\mathbf{C}^*(\mathbf{X} - \mathbf{X}') \cdot \epsilon(\mathbf{X}')] : \epsilon(\mathbf{X}) dV' \quad (3.21)$$

dove l'integrale é calcolato sul volume  $\Omega'$  dell'intero corpo.

In questi elementi l'energia é:

$$E_\mu = \int_{\Omega_\mu} W_{nonloc}(\mathbf{X}) dV \quad (3.22)$$

L'energia della regione continua é ottenuta sommando il contenuto locale e quello non locale:

$$E_{FEAt}^c = \sum_{\mu \in P} E_{\mu}^{nonloc}(\mathbf{r}_I, \mathbf{r}_P) + \sum_{\mu \notin P} E_{\mu}^{nonlin} \quad (3.23)$$

L'energia della regione atomistica é invece data dalla seguente somma, estesa a tutti gli atomi, compresi i pseudo atomi.

$$E_{FEAt}^a = \sum_{i \in A, I, P} E_i(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_I, \mathbf{r}_P) \quad (3.24)$$

### 3.3.4 Coarse-grained Molecular dynamics

Tale metodo costruisce le equazioni Hamiltoniane a scala grossa a partire dalle equazioni di dinamica molecolare sotto determinate condizioni termodinamiche. Gli atomi rappresentativi sono rafforzati per mantenere una posizione e momento medio degli atomi alla scala minore:

$$\mathbf{u}^c = \mathbf{R}\mathbf{u}^f(t) \quad \mathbf{p}^c = \mathbf{R}\mathbf{p}^f(t) \quad (3.25)$$

dove  $R$  è l'operatore di restrizione,  $p^c$  e  $p^d$  sono rispettivamente i momenti alla scala continua e atomistica. L'Hamiltoniano alla scala maggiore,  $H_c$ , è definito come il classico insieme canonico medio dell'Hamiltoniano della dinamica molecolare  $H^f$  nello spazio momenti-spostamenti soggetto al vincolo dato dall'Equazione (3.25).

$$H^c = \frac{1}{Z} \int \Delta P H^f dp^f du^f \quad (3.26)$$

dove  $P = \exp(-H^f/k_B T)$  è la funzione di probabilità,  $T$  la temperatura,  $H$  l'Hamiltoniano a scala minore,  $k_B$  la costante di Boltzmann,  $\Delta$  i vincoli imposti in (3.25) e  $Z$  la funzione di partizione.

### 3.3.5 Edge-to-edge Decomposition Method

L'edge-to-edge decomposition method è schematizzato in Figura (3.6(a)) Si possono identificare tre tipi di particelle: i nodi, appartenenti al dominio continuo, gli atomi, appartenenti al dominio molecolare e gli atomi virtuali che

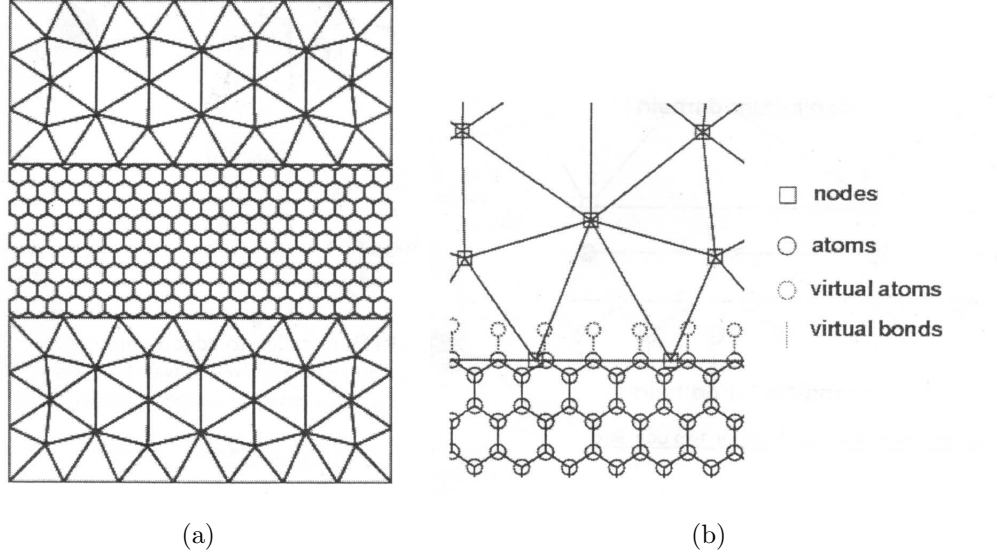


Figura 3.6: a) Schematizzazione del dominio complessivo. b) Definizione della zona di interfaccia.

collegano mediante legami virtuali ( Figura 3.6(b)) i due precedenti domini. L'energia potenziale interna per l'intero dominio è fornita dalla relazione:

$$W^{int} = W^C + W^M = \int_{\Omega_0^C} \rho_0 w_C(\mathbf{F}) d\Omega_0^C + \frac{1}{2} \sum_I \sum_J w_M(\mathbf{x}_I, \mathbf{x}_J) \quad (3.27)$$

dove  $W^M$  include il potenziale dovuto al cambiamento dell'angolo di legame risultante dalla variazione dell'angolo di legame tra i legami virtuali e quelli adiacenti al dominio molecolare. Il moto dell'atomo virtuale  $f$  dipenderà dai nodi dell'elemento ABC che contiene l'atomo stesso. Quindi possiamo esprimere  $\mathbf{u}_f$  in termini di  $\mathbf{u}_I$  tramite:

$$\mathbf{u}_f(\mathbf{X}, t) = \sum_I N_I(\mathbf{X}) \mathbf{u}_I(t) \quad I = A, B, C \quad (3.28)$$

Si noti che è l'energia dovuta all'allungamento del legame virtuale  $fg$  è già inclusa nel potenziale del modello continuo  $W^C$ . La sola energia potenziale che contribuisce al potenziale totale è dovuta quindi all'energia potenziale del legame virtuale grazie alla variazione dell'angolo del legame virtuale con i legami adiacenti. Essa è definita come:

$$W_f^{interface} = E_{angle}(\Theta_{fge}) + E_{angle}(\Theta_{fgd}) \quad (3.29)$$



L'equazione che lega gli atomi ai nodi è la seguente:

$$g_I = \|\mathbf{u}(\mathbf{X}_I) - \mathbf{d}_I\|^2 = \sum_i [u_i(\mathbf{X}_I) - d_{iI}]^2 = 0 \quad (3.30)$$

dove gli spostamenti  $\mathbf{u}(\mathbf{X}_I)$  sono espressi mediante approssimazione lineare del metodo agli elementi finiti come mostrato in Figura (3.7) e dalla seguente relazione:

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}_K) = N_{1K}\mathbf{u}_1 + N_{2K}\mathbf{u}_2 \quad (3.31)$$

Applicando quindi il Metodo dei Moltiplicatori di Lagrange, i moltiplicatori

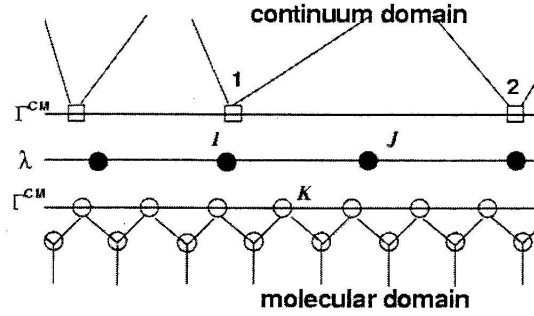


Figura 3.7: Interfaccia tra i due domini

$\lambda_K$  sono espressi mediante approssimazione lineare agli elementi finiti. Ossia:

$$\lambda_K = \Lambda_{IK}\bar{\lambda}_I + \Lambda_{JK}\bar{\lambda}_J = (1 - \xi_K)\bar{\lambda}_I + \xi_K\bar{\lambda}_J \quad (3.32)$$

Nel caso si applicasse l'augmented Lagrange multiplier method il potenziale per il modello di accoppiamento sarebbe dato da:

$$W_{AL} = W^{int} - W^{ext} + \lambda^T \mathbf{g} + \frac{1}{2} p \mathbf{g}^T \mathbf{g} \quad (3.33)$$

dove  $W^{int}$  è data dall'Equazione (3.27) mentre l'energia potenziale esterna  $W^{ext}$  è espressa come:

$$W^{ext} = \mathbf{F}_I^{ext} \cdot \mathbf{u}_I + \sum_I \mathbf{f}_I^{ext} \cdot \mathbf{d}_I \quad (3.34)$$

### 3.3.6 Bridging domain coupling method

Il metodo considera una zona di sovrapposizione evidenziata in Figura (6.1(a)) e (6.1(b)). In esso l'energia totale è assunta come combinazione lineare delle energie del dominio atomistico e continuo. Viene introdotto, nel

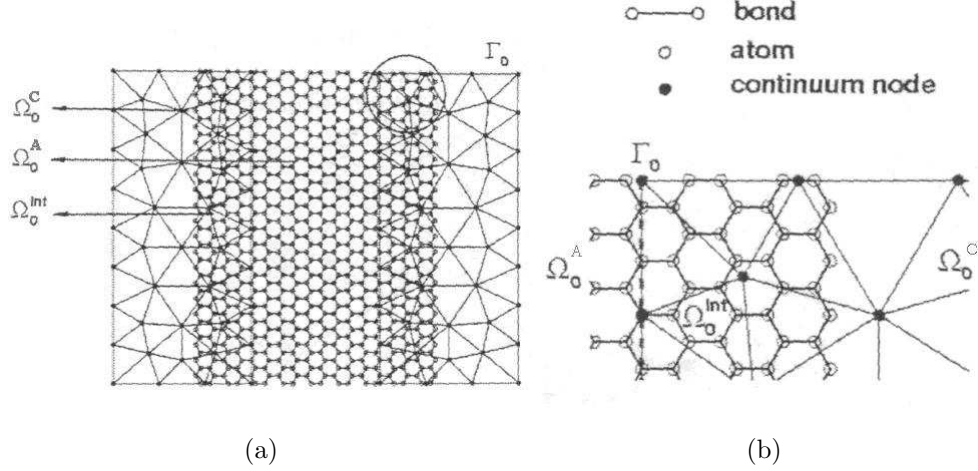


Figura 3.8: a) Schematizzazione del dominio complessivo. b) Definizione della zona di interfaccia.

dominio di sovrapposizione, un parametro di scala,  $\psi$ , definito come:

$$\psi = \begin{cases} 1 & \text{in } \Omega_0^C - \Omega_0^{int} \\ [0, 1] & \text{in } \Omega_0^{int} \\ 0 & \text{in } \Omega_0^A - \Omega_0^{int} \end{cases} \quad (3.35)$$

L'Hamiltoniano per il dominio complessivo è combinazione lineare degli Hamiltoniani dei due domini come indicato nella seguente relazione:

$$\begin{aligned} H &= (1 - \psi)H^A + \psi H^C \\ &= \sum_I (1 - \psi(\mathbf{X}_I)) \frac{\mathbf{p}_I^A \cdot \mathbf{p}_I^A}{2m_I} + (1 - \psi)W^A + \sum_\alpha \psi(\mathbf{X}_\alpha) \frac{\mathbf{p}_\alpha^C \cdot \mathbf{p}_\alpha^C}{2M_\alpha} + \psi W^C \end{aligned} \quad (3.36)$$

dove  $W^M$  è l'energia potenziale del dominio atomistico,  $W^C$  l'energia potenziale del dominio continuo e  $\mathbf{p}_I$  il momento del nodo o atomo  $I$ . I due

modelli sono vincolati nella zona di sovrapposizione  $\Omega_0^{int}$  tramite la seguente equazione

$$\mathbf{g}_I = \{g_{iI}\} = \{u_i(\mathbf{X}_I) - d_{iI}\} = \left\{ \sum_{\alpha} N_{\alpha}(\mathbf{X}_I) u_{i\alpha} - d_{iI} \right\} = 0 \quad (3.37)$$

dove  $u_i(\mathbf{X}_I)$  è lo spostamento del punto materiale  $\mathbf{X}_I$  e  $d_{ij}$  è lo spostamento atomistico nello stesso punto. Tali vincoli possono essere applicati tramite il metodo dei moltiplicatori di Lagrange ; pertanto l'Hamiltoniano è definito da:

$$H_L = H + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g} = H + \sum_I \boldsymbol{\lambda}_I^T \mathbf{g}_I \quad (3.38)$$

dove  $\boldsymbol{\lambda}_I = \{\lambda_{iI}\}$  è il vettore dei moltiplicatori di Lagrange le cui componenti corrispondono alle componenti degli spostamenti dell'atomo  $I$ .

Per una trattazione più completa del metodo e relative applicazioni si faccia riferimento al Capitolo 6.



## Capitolo 4

# La dinamica molecolare: teoria e applicazioni

Dopo aver spiegato i motivi per cui sono necessari i metodi multiscala ed averne dato spiegazione risulta utile, per poter approfondire l'argomento, studiare le basi delle equazioni dei sistemi a scale minori. Si vuole quindi in questo capitolo fornire alcune nozioni base relative alla dinamica molecolare (MD) e al suo diretto utilizzo. Si presentano quindi le equazione del moto scritte secondo la formulazione Lagrangiana e mediante le equazioni Hamiltoniane. Tramite l'introduzione di alcuni concetti fondamentali (condizioni periodiche al contorno, principio della minima immagine, etc) si prosegue identificando l'algoritmo di Verlet e il Predictor-Corrector come integratori numerici per la risoluzione delle equazioni del moto. Si introducono poi due tipi di potenziali interatomici: Lennard-Jones (LJ) e Tight-Binding (TB). Mediante lo sviluppo di quest'ultimo si sono eseguite applicazioni volte a migliorare l'efficienza computazionale del sistema tramite l'introduzione delle liste di Verlet e delle Linked Cell. Ulteriori applicazioni sono relative allo sviluppo della funzione di correlazione a coppie e al termostato di Andersen.

## 4.1 Concetti base di dinamica molecolare

La dinamica molecolare (MD) è stata usata inizialmente in termodinamica per calcolare l'insieme o la media delle proprietà termodinamiche di vari sistemi fisici inclusi gas, liquidi e solidi. Recentemente è stata applicata per simulare il comportamento atomico istantaneo di un sistema materiale. Le assunzioni che stanno alla base delle simulazioni di dinamica molecolare:

1. molecole e atomi sono definiti come un sistema di punti materiali interagenti tra loro, il cui moto è descritto dinamicamente con vettori di posizioni e velocità istantanee. L'interazione atomica ha una forte dipendenza sull'orientazione spaziale e sulle distanze tra atomi distinti.
2. non c'è scambio di massa nel sistema; di conseguenza il numero di atomi nel sistema rimane invariato.
3. i sistemi trattati sono considerati come isolati in cui l'energia viene conservata.

### 4.1.1 Equazioni lagrangiane del moto

Il metodo della dinamica molecolare è basato sulla risoluzione delle equazioni del moto di un sistema di punti materiali (atomi o particelle) interagenti tra loro. Dato un sistema di  $s$  particelle questo avrà in totale  $s$  gradi di libertà, che possono essere generalmente scritti in termini della funzione Lagrangiana  $L$ , cioè:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, s. \quad (4.1)$$

dove  $q$  rappresenta la coordinata generalizzata che definisce unicamente la posizione spaziale degli atomi e  $\dot{q}$  ne è la derivata temporale. Una simulazione di dinamica molecolare è descritta tipicamente tramite un sistema di coordinate cartesiane, dove l'Equazione (4.1) può essere semplificata per dare

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i} - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.2)$$

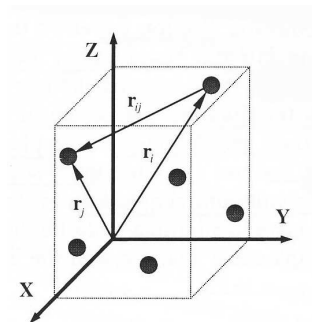


Figura 4.1: Coordinate nel sistema atomico.

Qui,  $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$  è il raggio vettore che indica la posizione dell'atomo  $i$ , Figura (4.1) e  $N$  è il numero totale di atomi ( $N = s/3$  all'interno di una cella cubica). Il volume solitamente occupato da questi  $N$  atomi è indicato come il *dominio* di MD.

L'Equazione del moto (4.2) non dipende dalla scelta della posizione all'istante iniziale il che è equivalente a richiedere che la funzione Lgrangiana non dipenda direttamente dal tempo, dalla direzione del vettore della posizione  $\mathbf{r}_i$  e della velocità  $\dot{\mathbf{r}}_i$ , ma solamente dal valore assoluto del vettore velocità  $\dot{\mathbf{r}}_i$ . Al fine di fornire equazioni del moto identiche in tutti i sistemi di coordinate inerziali, la funzione Lagrangiana deve anche soddisfare il principio di relatività Galileiana. Una funzione che soddisfa a tali requisiti è:

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2 + \dot{z}_i^2) \equiv \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} \quad (4.3)$$

per un sistema di particelle libere e non interagenti tra loro dove  $m_i$  è la massa della particella  $i$ -esima.

L'interazione tra le particelle può essere descritta aggiungendo all'Equazione (4.3) una particolare funzione delle coordinate atomiche  $U$  dipendente dalle proprietà di questa interazione. Tale funzione è definita tramite segno negativo così che il sistema Lagrangiano assume la forma:

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} - U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (4.4)$$

I due termini rappresentano rispettivamente il sistema di energia cinetica e potenziale. L'Equazione (4.4) rappresenta la formulazione generale Lagrangiana per una sistema conservativo di punti materiali, interagenti tra loro, in coordiante cartesiane. È importante notare due caratteristiche della formulazione Lagrangiana: l'additività del termine dell'energia cinetica e l'assenza di una esplicita dipendenza dal tempo. Il fatto che il termine dell'energia potenziale dipenda solamente dalla configurazione spaziale delle particelle implica che ogni variazione di questa configurazione ha come conseguenza un immediato effetto sul moto delle particelle all'interno del dominio simulato. L'inevitabilità di questa assunzione è connessa con il principio di relatività. Infatti, se tale effetto si propaga con una velocità finita, la precedente relazione dipenderà dalla scelta del sistema inerziale. In questo caso le leggi del moto (in particolare le soluzioni di MD) saranno diverse nei vari sistemi.

Sostituendo l'Equazione (4.4) nella (4.2) l'equazione del moto può infine essere scritta nella forma newtoniana da:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = - \frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i} \equiv \mathbf{F}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.5)$$

dove  $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(t)$  rappresenta la traiettoria delle particelle e la forza  $\mathbf{F}_i$  indica solitamente la forza interna, cioè la forza esercitata dall'atomo  $i$  dovuta alle caratteristiche dell'ambiente a cui l'atomo è posto. L'Equazione (4.5) viene risolta inoltre, per un dato sistema di condizioni iniziali note al tempo  $t$ , per ottenere poi le traiettorie del moto degli atomi nell'intero sistema simulato. Per tradurre ciò in una forma utilizzabile dai calcolatori, si introduce la discretizzazione dell'evoluzione temporale tramite un passo temporale  $\delta t$  rappresentante l'unità dell'intervallo temporale. Si assume che la forza  $\mathbf{F}_i$  rimanga costante all'interno dell'intervallo  $\delta t$ .

Simulazioni di MD solitamente possono comprendere oltre il milione di atomi, a cui corrispondono domini dalle dimensioni di qualche centinaio di Å. In simulazioni di quest'ordine e, a maggior ragione, in simulazioni molto più piccole la presenza delle superfici può influenzare radicalmente la dinamica e quindi lo studio della proprietà del materiale. Inoltre il singolo dominio, detto anche cella di simulazione, non può rappresentare un sistema costituito



da milioni di atomi. Per superare entrambi i problemi le simulazioni vengono eseguite usando condizioni periodiche al contorno come indicato nella Figura (4.2). In tal modo il numero totale degli atomi e quindi l'energia totale del sistema rimane costante. Si può notare come una molecola si sposta da un sotto dominio all'altro la sua immagine periodica si muoverà dai sotto domini vicini allo stesso modo. Analogamente se la molecola uscirà dalla cella di simulazione la sua immagine entrerà dalla faccia opposta. Per evitare

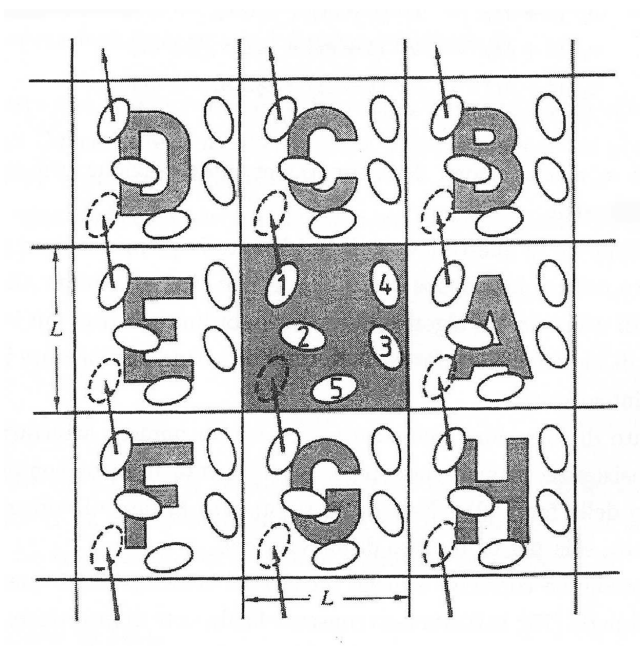


Figura 4.2: Condizioni periodiche al contorno in due dimensioni.

però che un atomo possa interagire con uno ad esso equivalente, presente in una replica della cella di simulazione, deve essere rispettata la disuguaglianza  $L \geq 2r_{cut}$ , dove  $L$  è la dimensione lineare della cella e  $r_{cut}$  è il raggio di cut-off del potenziale. Tale condizione rappresenta la *convenzione della minima immagine* e stabilisce il limite inferiore della cella.

### 4.1.2 Equazioni Hamiltoniane del moto

La formulazione Lagrangiana per le equazioni del moto della dinamica molecolare sono state scritte in funzione delle coordinate e delle velocità generalizzate come pure tramite le coordinate Cartesiane. Tale descrizione non è però l'unica possibile. Un'alternativa è utilizzata all'interno della formulazione Hamiltoniana in termini di coordinate e momenti generalizzati. Tale formulazione offre una serie di vantaggi, in particolare nello studio di caratteristiche generali o mediate di sistemi simulati, come la distribuzione di energia e il flusso termico, e come pure nel calcolo delle quantità termodinamiche come temperatura, volume e pressione. Solitamente i metodi di meccanica statistica utilizzano la formulazione Hamiltoniana per descrivere lo stato e l'evoluzione di un sistema costituito da molte particelle.

Definiamo prima il differenziale completo della funzione Lagrangiana espressa nell'Equazione (4.1):

$$dL = \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} d\dot{q}_{\alpha} \quad \alpha = 1, 2, \dots, s \quad (4.6)$$

e la riscriviamo come:

$$dL = \sum_{\alpha} \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha} p_{\alpha} d\dot{q}_{\alpha} \quad (4.7)$$

dove  $q_{\alpha}$  sono le coordinate generalizzate che definiscono le posizioni degli atomi mentre  $p_{\alpha}$  rappresentano i momenti generalizzati definiti tramite la relazione:

$$\dot{p}_{\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} dq_{\alpha} \quad (4.8)$$

Il secondo termine dell'Equazione (4.7) può essere scritto nella forma:

$$dL = \sum_{\alpha} \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} + d\left(\sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha}\right) - \sum_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha} \quad (4.9)$$

$$d\left(\sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - L\right) = \sum_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha} - \sum_{\alpha} \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} \quad (4.10)$$

dove la funzione:

$$H(p, q, t) = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - L(q, \dot{q}, t) \quad (4.11)$$

rappresenta l'Hamiltoniano del sistema. Essa è la trasformata di Legendre della Lagrangiana. Il valore della funzione Hamiltoniana è l'integrale del moto per sistemi conservativi ed è definita come l'energia totale del sistema in termini di coordinate e momenti generalizzati. Cioè otteniamo:

$$dH = \sum_{\alpha} q_{\alpha} dp_{\alpha} - \sum_{\alpha} \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} \quad (4.12)$$

e quindi:

$$\dot{q}_{\alpha} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}}, \quad \dot{p}_{\alpha} = -\frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} \quad (4.13)$$

Queste rappresentano le equazioni del moto nell'Hamiltoniana in termini delle variabili  $p$  e  $q$ . Tali equazioni costituiscono un sistema di equazioni differenziali del primo ordine nelle due incognite  $p(t)$  e  $q(t)$ . Nonostante siano più semplici delle equazioni di Lagrange (che sono del secondo ordine) i passaggi che portano alle equazioni del moto sono più onerosi che in meccanica Lagrangiana: si parte con le coordinate generalizzate e la Lagrangiana, si calcola l'Hamiltoniana, si esprime ogni velocità generalizzata in termini dei momenti coniugati e si sostituiscono nell'Hamiltoniana le velocità generalizzate con i momenti coniugati. Pertanto non è più semplice risolvere un problema in meccanica Hamiltoniana, la quale viene usata solitamente in quanto fornisce le basi per risultati più profondi nella teoria della meccanica quantistica. Cionostante un insieme di valori delle funzioni Hamiltoniane rappresentano ad un dato tempo lo stato del sistema. Questo può essere visto come un vettore in uno spazio bidimensionale conosciuto come spazio *fase*. Un insieme completo di questi vettori, osservati nel corso dell'evoluzione temporale del sistema, definisce la *traiettoria* dello *spazio fase* la quale fornisce una completa descrizione della dinamica del sistema.

Si può notare che, se l'Hamiltoniano non dipende esplicitamente dal tempo, l'Equazione (4.13) conserva l'energia totale del sistema; infatti la derivata

temporale dell'Hamiltoniano è uguale a zero essendo il sistema conservativo.

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_{\alpha} \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} \dot{p}_{\alpha} = \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (4.14)$$

Questo perchè non vi è una diretta dipendenza dal tempo, come segue dalla (4.11) e dalla (4.3). Pertanto l'energia totale si conserva se sul sistema non agiscono forze direttamente dipendenti dal tempo o dalla velocità delle particelle.

Per un sistema conservativo costituito da  $N$  atomi in coordinate Cartesiane, la descrizione Hamiltoniana assume la seguente forma:

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N) = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (4.15)$$

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (4.16)$$

dove i momenti sono espressi in funzione del vettore posizione  $\mathbf{p}_i = m_i \dot{\mathbf{r}}_i$ . Se è noto lo stato iniziale degli atomi e la funzione Hamiltoniana, si può calcolare la posizione istantanea e i momenti degli atomi negli istanti successivi risolvendo l'Equazione (4.16). Questo fornisce la traiettoria dello spazio fase del moto degli atomi che può essere di particolare importanza nello studio dell'evoluzione dei legami e della struttura atomica come pure per lo stato termodinamico del sistema.

Utilizzando le Equazioni (4.13) si ricavano alcune leggi di conservazione: supponendo che il potenziale sia della forma (4.15) e che sul sistema non agisca nessun campo esterno, il momento lineare totale:

$$\mathbf{P} \equiv \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i \quad (4.17)$$

e il momento angolare totale:

$$\mathbf{L} \equiv \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \times \mathbf{p}_i \quad (4.18)$$

sono costanti del moto. Più precisamente, la conservazione di una generica componente di  $\mathbf{P}$  lungo una direzione è associata all'invarianza dell'Hamiltoniana per traslazioni in quella direzione. Analogamente, se il sistema è

invariante per rotazioni attorno ad un certo asse, la componente di  $\mathbf{L}$  lungo lo stesso asse è una costante del moto. Da ciò si può dedurre che, oltre che nei sistemi isolati, solo in quelli a simmetria sferica si ha la conservazione del momento angolare totale.

Concludendo si può notare che l'Equazione (4.5), derivando dalla formulazione Lagrangiana (4.1), può essere più adatta per studiare particolari dettagli della simulazione atomistica, specialmente nei solidi. La formulazione newtoniana è di solito più conveniente in termini di forze esterne e condizioni periodiche al contorno, come pure per post-processare e visualizzare i risultati.

## 4.2 Integratori numerici

Le equazioni (4.5) vengono risolte numericamente mediante il Metodo delle Differenze Finite, basato sulla discretizzazione dell'evoluzione temporale in passi d'integrazione. L'intervallo temporale della simulazione  $[t_i, t_f]$  viene suddiviso in un numero finito di partizioni di lunghezza  $\delta t$ . Assegnate le posizioni e le velocità al generico tempo  $t$  possiamo ottenere le medesime grandezze al tempo  $t + \delta t$  mediante un opportuno algoritmo. Il procedimento viene ripetuto per il numero di volte necessario per descrivere l'evoluzione del sistema durante l'intervallo richiesto. L'intervallo  $\delta t$  viene scelto in modo tale che sia significativamente inferiore al tempo che impiegherebbe una particella a percorrere la sua lunghezza. Solitamente è dell'ordine dei fs (femtosecondi); si ricorda che  $1\text{fs}=1.018050697\text{d}-14\text{s}$ .

Esistono due classi di integratori delle equazioni del moto : l'algoritmo di Verlet e il Predictor-Corrector (algoritmo di Gear).

### 4.2.1 Algoritmo di Verlet

Poichè il valore dell'intervallo  $\delta t$  è molto piccolo rispetto al tempo delle vibrazioni temporali, è possibile sviluppare in serie di Taylor le traiettorie

atomiche, ottenendo le relazioni seguenti:

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 \mathbf{a}_i(t) + \dots \quad (4.19)$$

$$\mathbf{r}_i(t - \delta t) = \mathbf{r}_i(t) - \delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 \mathbf{a}_i(t) - \dots \quad (4.20)$$

Sommando e sottraendo si ottiene:

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \delta t) + \delta t^2 \mathbf{a}_i(t) \quad (4.21)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = \frac{\mathbf{r}_i(t + \delta t) - \mathbf{r}_i(t - \delta t)}{2\delta t} \quad (4.22)$$

Dal momento che l'Equazione (4.21) è corretta eccetto che per errori del quarto ordine ( $\delta t^4$ ) le velocità derivanti dalla (4.22) sono soggette ad errori del secondo ordine ( $\delta t^2$ ). Una prima osservazione è che non è possibile conoscere le velocità  $\mathbf{v}_i(t)$  ad un determinato istante ma solo al passo di integrazione successivo. In secondo luogo l'algoritmo ha la proprietà di essere centrato, cioè  $r(t - \delta t)$  e  $r(t + \delta t)$  giocano un ruolo simmetrico nell'Equazione (4.21) tanto da renderlo reversibile rispetto al tempo. Questa caratteristica garantisce la conservazione del momento angolare. Inoltre il metodo conserva molto bene le proprietà della cella di simulazione anche quando si considerano time step maggiori.

Esiste una variante di tale algoritmo '*velocity Verlet*' che consente di determinare posizioni, velocità e accelerazioni allo stesso tempo  $t$ . Le equazioni diventano allora le seguenti:

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 \mathbf{a}_i(t) \quad (4.23)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t [\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + \delta t)] \quad (4.24)$$

A partire da  $\mathbf{r}_i(t)$ ,  $\mathbf{v}_i(t)$ ,  $\mathbf{a}_i(t)$  si determinano le posizioni  $\mathbf{r}_i(t + \delta t)$  mediante la relazione (4.23). Si calcolano quindi le forze e, di conseguenza, le  $\mathbf{a}_i(t + \delta t)$  e le  $\mathbf{v}_i(t + \delta t)$  tramite la (4.24).

### 4.2.2 Algoritmo Predictor-Corrector

Si suppone di poter sviluppare in serie di Taylor le posizioni atomiche e di conoscere al tempo  $t$  tutte le variabili dinamiche. È possibile eseguire una 'predizione' delle stesse grandezze al tempo  $t + \delta t$ :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}_i^P(t + \delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \delta t \mathbf{v}_i + \frac{1}{2} \delta t^2 \mathbf{a}_i(t) + \dots \\
 \mathbf{v}_i^P(t + \delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \delta t \mathbf{a}_i + \dots \\
 \mathbf{a}_i^P(t + \delta t) &= \mathbf{a}_i(t) + \dots \\
 &\dots
 \end{aligned}
 \tag{4.25}$$

dove l'apice P indica che sono dei valori predetti. Le Equazioni (4.25) non generano la dinamica corretta perchè risultano indipendenti dalle equazioni del moto (4.5). L'errore commesso sulle accelerazioni risulta:

$$\Delta \mathbf{a}_i(t + \delta t) = \mathbf{a}_i^C(t + \delta t) - \mathbf{a}_i^P(t + \delta t)
 \tag{4.26}$$

dove  $\mathbf{a}_i^C$  viene calcolato utilizzando le posizioni predette. Attraverso l'Equazione (4.26) è possibile effettuare una correzione dei valori predetti:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}_i^C(t + \delta t) &= \mathbf{r}_i^P(t + \delta t) + c_0 \Delta \mathbf{r}_i(t + \delta t) \\
 \mathbf{v}_i^C(t + \delta t) &= \mathbf{v}_i^P(t + \delta t) + c_1 \Delta \mathbf{v}_i(t + \delta t) \\
 \mathbf{a}_i^C(t + \delta t) &= \mathbf{a}_i^P(t + \delta t) + c_2 \Delta \mathbf{a}_i(t + \delta t) \\
 &\dots
 \end{aligned}
 \tag{4.27}$$

dove i coefficienti  $c_0, c_1, c_2, \dots$  sono determinati per interpolazione utilizzando una traiettoria classica esatta.

## 4.3 Potenziali interatomici

In accordo con l'Equazione (4.5), la struttura generale delle equazioni che governano le simulazioni di dinamica molecolare è data da una semplice equazione differenziale del secondo ordine. Tuttavia la funzione potenziale da

inserire nella (4.5) può essere estremamente complicata quando si voglia rappresentare accuratamente l'interazione atomica all'interno del sistema simulato. La natura di questa interazione è dovuta ai complicati effetti quantistici che sono presenti a livello subatomico e sono i responsabili delle proprietà chimiche come la valenza, l'energia di legame, la disposizione spaziale, la formazione e la rottura dei legami interatomici. Per ottenere risultati attendibili nelle simulazioni di dinamica molecolare il potenziale interatomico classico dovrebbe tener conto di questi processi di meccanica quantistica. Le formulazioni della forma del potenziale interatomico per vari classi di sistemi sono state largamente studiate in letteratura.

La struttura generale di questa funzione è la seguente:

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_i W_1(\mathbf{r}_i) + \sum_{i,j>i} W_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i,j>i,k>j} W_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad (4.28)$$

dove  $\mathbf{r}_n$  è il vettore dell' $n$ -esima particella,  $W_m$  il potenziale del corpo  $m$ -esimo. Il primo termine della (4.28) rappresenta l'energia dovuta al campo di forze esterne, come l'energia gravitazionale o elettrostatica in cui il sistema è inserito. Il secondo termine mostra un'interazione delle particelle a coppie (pair-wise); esso dipende solamente dalla distanza  $r_{ij} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$ . Il terzo indica l'interazione tra triplette di particelle (three-body); etc. Solitamente  $W_1$  viene ignorato mentre gli effetti dovuti all'interazione tra più corpi sono incorporati in  $W_2$  per ridurre il costo computazionale della simulazione.

### 4.3.1 Potenziale a due corpi

A livello subatomico il campo elettrostatico dovuto ai nuclei atomici caricati positivamente, viene neutralizzato dalle nuvole elettroniche, che circondano i nuclei, caricate negativamente. Nella meccanica quantistica la descrizione del moto dell'elettrone è sviluppata mediante un approccio probabilistico per valutare la densità di probabilità alla quale gli elettroni possono occupare posizioni spaziali particolari. Il termine nuvola elettronica è



generalmente usato in relazione alla distribuzione spaziale di queste densità. Le nuvole elettroniche caricate negativamente, tuttavia, si attraggono di più man mano che la distanza tra i nuclei diminuisce. Raggiunta una particolare distanza, che è la distanza di equilibrio del legame, questa attrazione risulta uguale alla forza repulsiva dei nuclei, caricati positivamente. Un'ulteriore diminuzione della distanza tra i nuclei è il risultato di una veloce crescita della risultante della forza repulsiva.

Esistono vari modelli matematici per descrivere il fenomeno fisico sopra descritto. Nel 1924 Jones propose il seguente potenziale per descrivere l'interazione tra coppie di atomi:

$$W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = W(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad r = r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \quad (4.29)$$

Tale formulazione è conosciuta come il *potenziale Lennard-Jones* (LJ) (Figura (4.3)) ed è utilizzato per una grande varietà di sistemi atomici. Qui  $\mathbf{r}_{ij}$  è il raggio vettore ossia la distanza tra la particella  $i$  e  $j$  (Figura (4.1));  $\sigma$  è il diametro di collisione ossia la distanza alla quale  $W(r) = 0$  e  $\varepsilon$  rappresenta l'energia di legame, ossia il minimo della funzione (4.3) affinché una coppia di atomi sia in equilibrio. Il primo termine rappresenta il termine repulsivo che agisce a piccole distanze mentre il secondo mostra l'attrazione tra due atomi. L'energia  $\varepsilon$  rappresenta il lavoro necessario per portare uno di due atomi accoppiati dalla loro posizione di equilibrio all'infinito. Le corrispondenti forze tra i due atomi possono essere espresse in funzione delle distanze interatomiche:

$$W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = W(r) = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[ \left( 2 \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{13} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^7 \right] \quad (4.30)$$

### 4.3.2 Potenziale a più corpi

Potenziali a più corpi vengono solitamente usate in simulazioni di solidi e per complesse strutture molecolari per poter tener conto della formazione

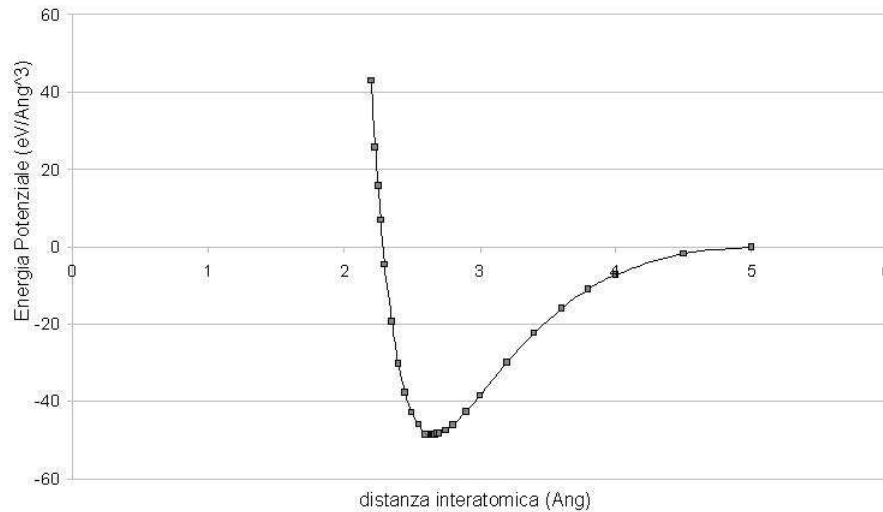


Figura 4.3: Andamento del potenziale Lennard-Jones.

dei legami chimici, della distribuzione spaziale e della valenza chimica degli atomi. Tuttavia dal punto di vista pratico un'implementazione con tali potenziali può essere estremamente complicata; quindi i termini di ordine più elevato vengono solitamente ignorati.

Il potenziale che consideriamo è il *Potenziale Tight-Binding* (TB) [34]. Tale potenziale è stato largamente utilizzato per analizzare le proprietà elastiche dei materiali metallici e alcune loro leghe. In generale, nell'ambito dei materiali metallici, i potenziali utilizzati sono tipicamente di origine empirica il cui schema si basa sull'utilizzo di funzionali a coppie. Questi sono stati sviluppati per definire con buona accuratezza le proprietà dinamiche e strutturali dei metalli di transizione ed il loro principale vantaggio è la capacità di riprodurre in maniera migliore, rispetto ai potenziali a due corpi, alcune caratteristiche, come il calcolo del legame metallico e dell'energia. Numerosi sono stati i potenziali a molti corpi esistenti in letteratura ma spesso sono di difficile applicazione a causa, o di una forma troppo complessa per essere implementata, o perchè il potenziale ha un raggio d'azione troppo lungo.

L'energia totale del sistema viene espressa come somma di due termini:

$$E_C = \sum_i (E_R^i + E_B^i) \quad (4.31)$$

i quali sono espressi dalle seguenti relazioni:

$$E_B^i = - \left\{ \sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 e^{-2q_{\alpha\beta}(r_{ij}/r_0^{\alpha\beta}-1)} \right\}^{1/2} \quad (4.32)$$

$$E_R^i = \sum_j A_{\alpha\beta}^2 e^{-p_{\alpha\beta}(r_{ij}/r_0^{\alpha\beta}-1)} \quad (4.33)$$

e rappresentano rispettivamente un termine di banda, nel quale sono inclusi gli effetti dovuti al fatto di considerare più corpi, e un potenziale a coppie di tipo repulsivo a corto raggio (il quale contiene la parte di struttura non di banda dell'energia). Entrambi i termini sono espressi in funzione delle distanze tra gli atomi  $i$  e  $j$  mediante  $r_{ij}$ ;  $r_0$  è invece la distanza tra i primi vicini ossia  $r_0 = a_0/\sqrt{2}$  con  $a_0$  lunghezza della cella unitaria;  $A, \xi, p, q$  sono invece delle costanti che dipendono solo dall'interazione atomica delle specie  $\alpha$  e  $\beta$  e sono stati determinati per metalli di transizione con struttura cristallina fcc ( face-centered cubic) e hcp (hexagonal close-packed structure) [36]) e per leghe  $\text{Cu}_3\text{Au}$  e  $\text{NiAl}$  a temperatura  $T=0\text{K}$ . È importante sottolineare nello studio di tale potenziale la scelta del raggio di cutoff. Inizialmente si utilizzavano valori ristretti, limitati ai primi vicini, in seguito invece è stato esteso ad un numero sufficiente di vicini tale da ottenere dei risultati migliori e più accurati in relazione ai risultati sperimentali. In particolare per materiali con struttura fcc ha un valore compreso tra i quinti e i sesti vicini mentre in quelli che presentano struttura hcp è stato esteso fino oltre i noni vicini. Per maggiori approfondimenti si faccia riferimento a [40]. Applicazioni ottenute con l'implementazione di tale potenziale sono riportate nel Paragrafo 4.4.

## 4.4 Applicazioni

A partire da un codice di MD, basato inizialmente su un potenziale interatomico a due corpi, Lennard Jones, è stato implementato un potenziale

multi corpi: il potenziale Tight Binding. Utilizzando entrambi questi potenziali si sono sviluppate alcune applicazioni al fine di comprendere meglio alcuni concetti della dinamica molecolare e per ottimizzare il funzionamento del codice stesso. L'algoritmo implementato è il velocity Verlet. Tutte le simulazioni sono state eseguite considerando un insieme microcanonico (NVE) in cui l'energia potenziale rimane costante e la temperatura varia o canonico (NVT) in cui l'energia varia e la temperatura rimane costante. Semplici esempi di simulazione NVT e NVE sono riportati in Figura (4.4) e (4.5).

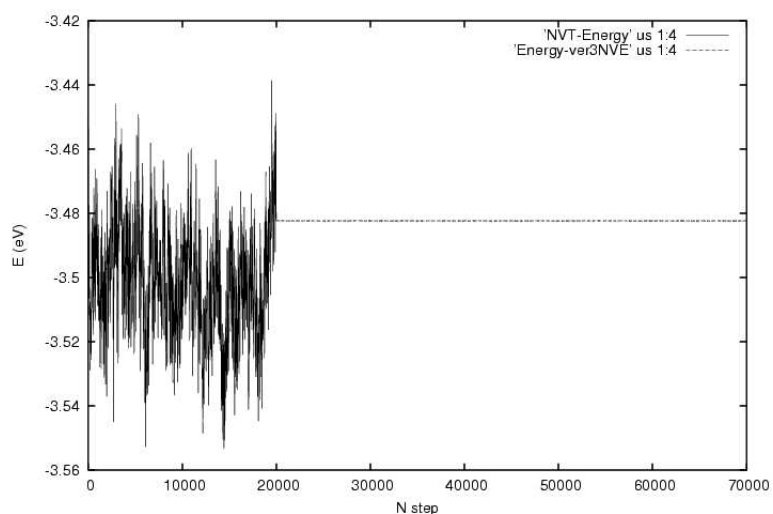


Figura 4.4: Andamento dell'energia in seguito ad una simulazione NVT seguita da una NVE.

#### 4.4.1 Liste di Verlet e Linked Cell

Ogni simulazione di MD, definite opportunatamente le condizioni periodiche al contorno e rispettato il principio della minima immagine, prevede il calcolo delle forze agenti tra tutti gli atomi. Dal punto di vista computazionale ciò richiede l'analisi di  $N(N-1)$  iterazioni, con un costo che scala come  $O(N^2)$ . Riducendo invece questo calcolo agli atomi distanti dall'atomo generico meno di un raggio di cutoff, il costo computazionale scala linearmente con  $N$  invece che quadraticamente, con un gran vantaggio sui tempi di elabo-

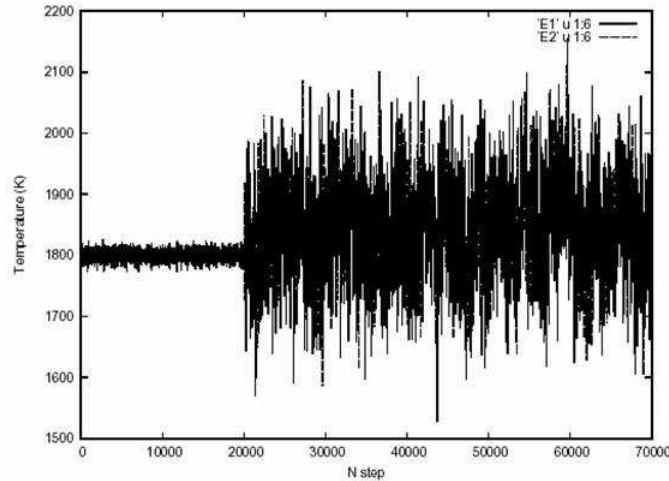


Figura 4.5: Andamento della temperatura in seguito ad una simulazione NVT seguita da una NVE.

razione specialmente in sistemi con  $N$  elevato. A questo scopo si presuppone per ogni atomo una lista degli atomi, definita *lista di Verlet*, distanti meno di un raggio di cutoff  $r_{cut}$ . Se il raggio della sfera contenente gli atomi elencati nella lista di Verlet è esattamente uguale al cutoff del potenziale, la lista va aggiornata ad ogni time step perchè gli atomi interagenti potrebbero essere cambiati. In alternativa, si può utilizzare come raggio per costruire la lista di Verlet un valore  $r_v$  maggiore del cutoff  $r_{cut}$  ed aggiornare la lista con una frequenza minore. Nel caso del potenziale TB si è considerato un raggio di cutoff pari a  $7.45\text{\AA}$  e un passo reticolare di  $3.615\text{\AA}$  avendo considerato atomi di rame. Per determinare invece il raggio di Verlet si è risolto un problema di minimo facendolo variare tale distanza da un valore minimo (corrispondente al valore del raggio di cutoff) ed un valore massimo (imposto da  $l_{cell}/2$ , con  $l_{cell}$  lato della cella globale di simulazione) per la convenzione della minima immagine. Si riportano a riguardo le Figure (4.6) e (4.7) dove si evidenzia un rapporto tra il raggio di Verlet e quello di cutoff par a  $1.0295\text{\AA}$ .

Tale accorgimento risulta ulteriormente migliorato dall'introduzione del metodo delle *celle concatenate* (*linked cell*) che consiste nel suddividere la cella di simulazione in sotto-celle di dimensioni minori possibili compatibilmente

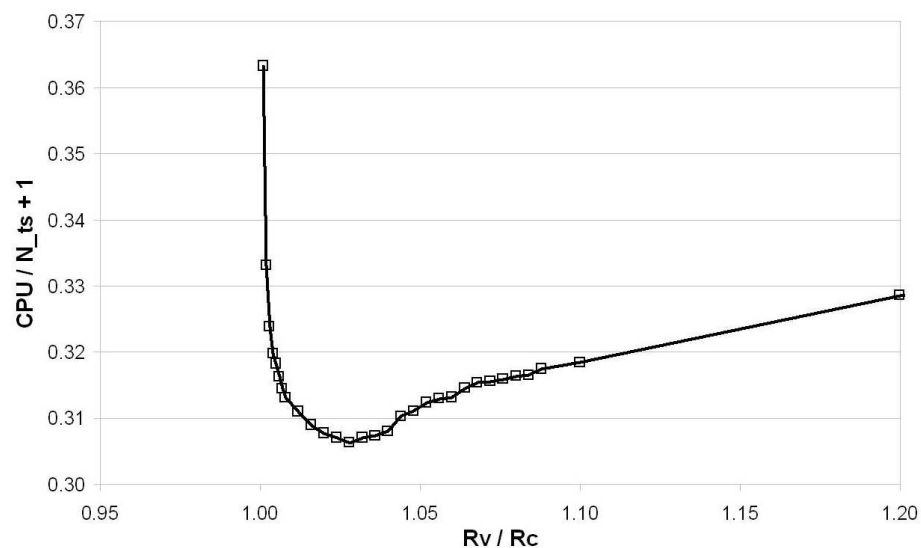


Figura 4.6: Andamento del tempo di CPU in funzione del rapporto tra il raggio di Verlet e il raggio di cutoff per il potenziale TB.

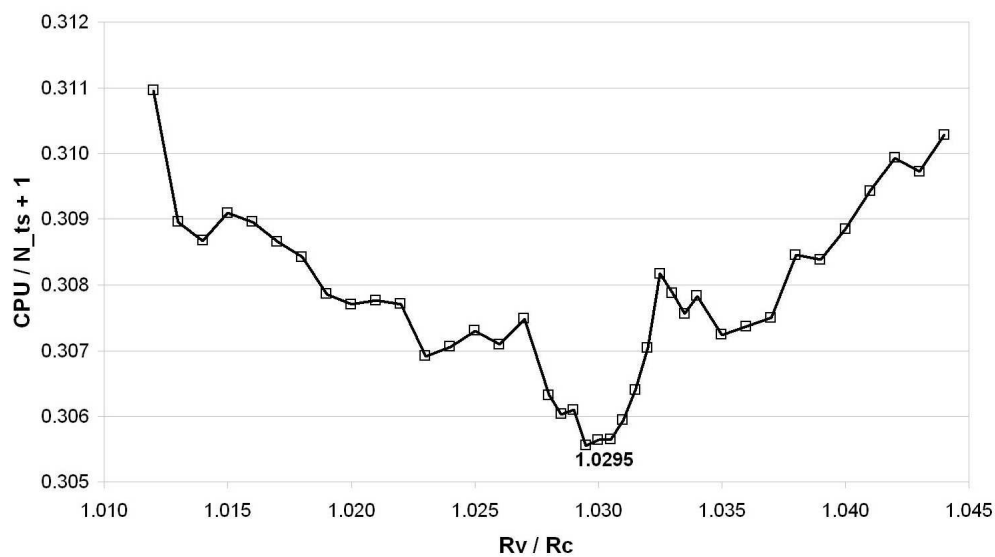


Figura 4.7: Andamento del tempo di CPU in funzione del rapporto tra il raggio di Verlet e il raggio di cutoff in una zona piú ristretta per individuare meglio il valore del minimo.

con il vincolo  $d \geq r_v$  dove  $r_v$  é il raggio della sfera contenente gli atomi della lista di Verlet e  $d$  é lo spigolo di una sotto-cella. La cella complessiva di simulazione viene suddivisa invece in  $Nlc$  linked cell il che porta ad avere  $d = N_{cell} \cdot L_0 / Mlc$ , con  $L_0$  passo reticolare e  $Mlc$  costante necessaria per definire in numero totale di linked cell ( $Nlc = Mlc^3$  in 3D). Ad ogni time step gli atomi vengono ripartiti nelle sotto-celle per procedere poi alla costruzione delle liste di Verlet: per ogni atomo si esaminano gli atomi nella medesima cella ed in 13 delle 26 prime vicine se consideriamo una cella cubica o 4 delle 8 se siamo in due dimensioni come mostrato in Figura (4.8).

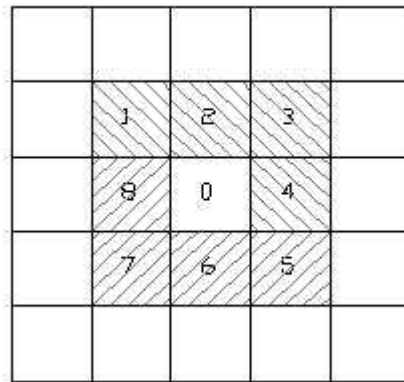


Figura 4.8: Struttura delle linked cell in due dimensioni. Alla cella 0 vengono associate le celle 1,2,3,4, metà delle prime vicine (4 su 8 in due dimensioni o 13 su 26 in tre dimensioni), le quali vengono esplorate durante la costruzione delle liste di Verlet degli atomi contenuti nella cella 0. Analogamente la cella 0 viene considerata come prima vicina delle celle 5,6,7,8. In tal modo si evita di duplicare il calcolo delle distanze tra atomi appartenenti a celle diverse.

Nel caso del potenziale TB si riporta la Tabella (4.1). in cui si evidenziano i tempi computazionali in funzione del numero di atomi e di linked cell selezionate.

N° atomi	4000	5324	10976	19652	32000	55296
senza LC	3.46	6.52	25.37	1m 19.11	3m 32.79	10m 32.35
Mlc=3	3.92	6.56	25.39	1m 19.27	3m 34.92	10m 40.44
Mlc=4	3.89	6.56	25.39	1m 19.71	3m 25.83	10m 9.21
Mlc=5		6.56	25.39	1m 19.93	3m 20.54	9 m 51.70
Mlc=6			24.74	1m 15.89	3m 19.00	9m 49.86
Mlc=7				1m 15.08	3m 18.33	9 m 45.16
Mlc=8				1m 15.04	3m 17.79	9 m 43.46
Mlc=9					3m 17.01	9m 43.14
Mlc=10						9 m 42.02
Mlc=11						9m 41.54

Tabella 4.1: Tempi di esecuzione al variare di Mlc e del numero di atomi. I dati sono stati ottenuti con processore Pentium IV.

#### 4.4.2 Termostato di Anderson

Nelle simulazioni precedenti il controllo della temperatura era implementato secondo l'algoritmo *velocity rescaling*. Si vuole ora spiegare l'implementazione dell'algoritmo noto come *termostato di Andersen* il quale permette di accoppiare un termostato al sistema in modo che questo possa passare da una temperatura  $t_1$  ad una  $t_2$  (per esempio maggiore di  $t_1$ ) non in maniera istantanea, ma piú realisticamente in maniera crescente. L'accoppiamento con un termostato é rappresentato da forze impulsive stocastiche che agiscono occasionalmente su alcune particelle prese casualmente tra quelle del sistema. Tra due collisioni stocastiche successive il sistema evolve ad energia costante in accordo con le normali leggi Newtoniane del moto. Per verificare la correttezza di tale implementazione bisognerà che il termostato riproduca le stesse proprietà ottenute da un noto insieme canonico; tenendo presente inoltre che in un sistema termodinamico all'equilibrio alla temperatura T, la distribuzione delle velocità dei suoi costituenti elementari é descritta dalla legge di Maxwell-Boltzmann. Dimostrare quindi il funzionamento del termostato di Andersen equivale a dimostrare che le velocità dei vari atomi sono



distribuiti secondo la legge di Maxwell-Boltzmann. Essa é espressa dalla seguente espressione:

$$f(v_i) = 4\pi N \left( \frac{m_i}{2\pi KT} \right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{m_i v_i^2}{2KT}} \quad (4.34)$$

dove  $K$  é la costante di Boltzmann,  $m_i$  e  $v_i$  la massa e la velocità dell' $i$ -esima particella,  $T$  la temperatura e  $N$  il numero delle particelle. Si riportano prima i risultati in cui vengono confrontate le velocità ottenute sperimentalmente e quelle secondo la distribuzione teorica, come in Figura (4.9) per una temperatura di 1500K. Appurato ciò si procede ad attivare il termostato andando

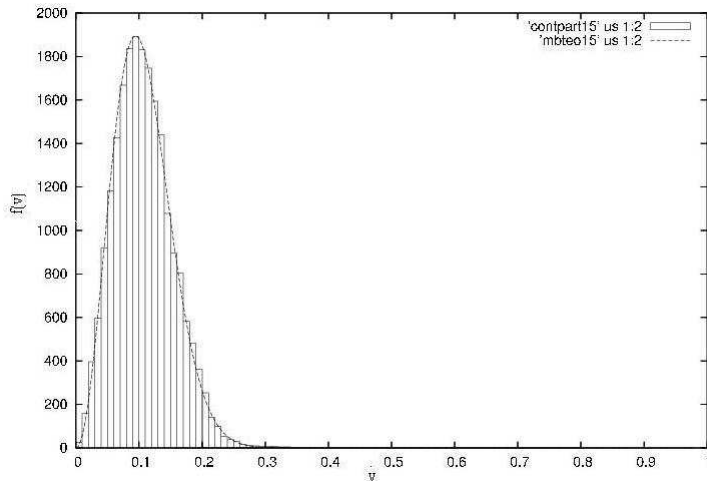


Figura 4.9: Confronto tra la curva sperimentalmente e quella teorica secondo Maxwell-Boltzmann per una temperatura  $T=1500K$ .

a sostituire, con una frequenza scelta dall'operatore, ad una particella presa casualmente, la sua velocità con quella calcolata secondo la distribuzione di Maxwell-Boltzmann. Si riportano in Figura (4.10) e in Figura (4.11) l'andamento di cicli termici secondo tale algoritmo e quello precedente velocity rescaling.

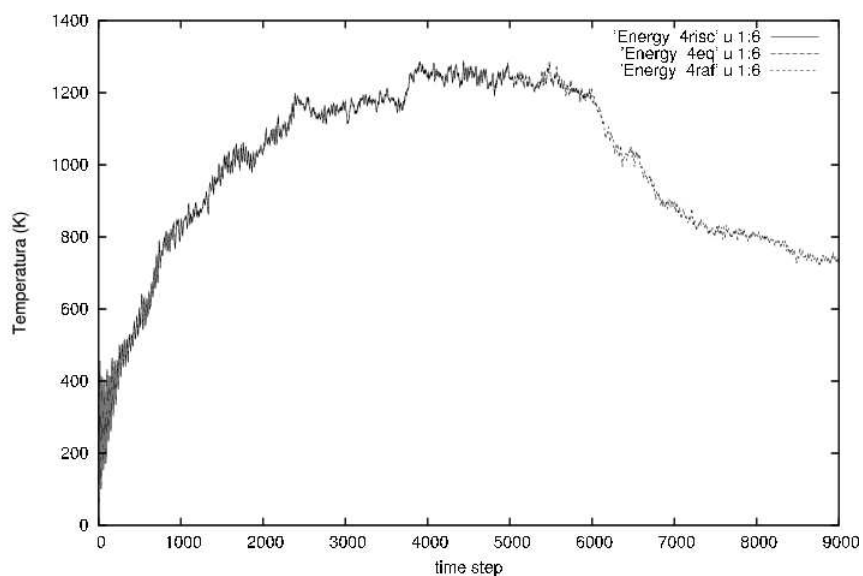


Figura 4.10: Andamento di alcuni cicli termici secondo l'algoritmo del termostato di Anderson. 1) Riscaldamento da 0K a 1200K; 2) Equilibratura a 1200K; 3) Raffreddamento da 1200K a 800K.

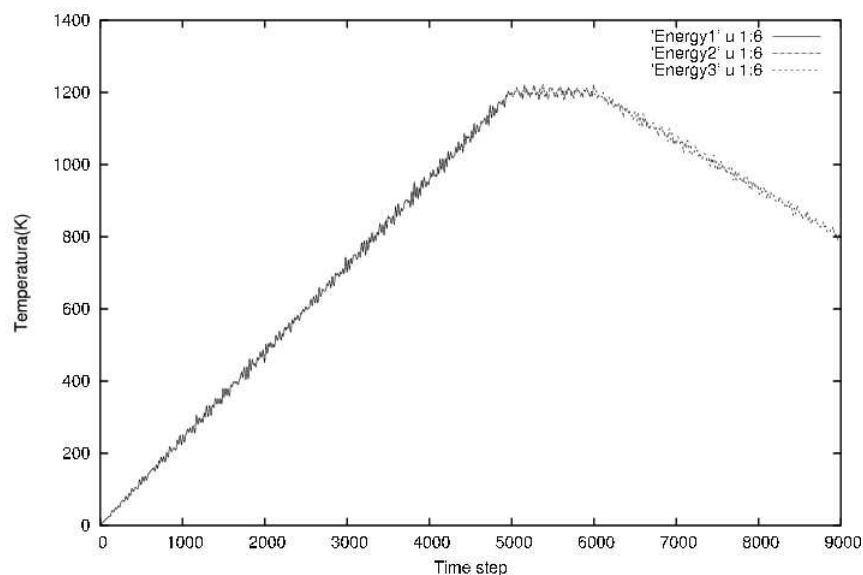


Figura 4.11: Andamento di alcuni cicli termici secondo l'algoritmo velocity rescaling. 1) Riscaldamento da 0 a 1200K; 2) Equilibratura a 1200K; 3) Raffreddamento da 1200K a 800K.

### 4.4.3 Funzione di distribuzione a coppie

La struttura di un semplice fluido monoatomico é caratterizzata da un set di funzioni di distribuzione per le posizioni atomiche, la piú semplice delle quali prende il nome di *funzione di distribuzione a coppie* indicata con  $g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$  o semplicemente  $g(r)$ . Tale funzione é definita, in un insieme canonico (NVT), dalla seguente relazione:

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{N(N-1) \int e^{-U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)/T} d\mathbf{r}_3 \dots \mathbf{r}_N}{\rho^2 \int e^{-U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)/T} d\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N} \quad (4.35)$$

dove l'integrale al denominatore é la configurazione integrale dell'insieme canonico (indicata solitamente con  $Z_{NVT}$ ) che differisce da quello al numeratore in quanto in quest'ultimo sono esclusi  $\mathbf{r}_1$  e  $\mathbf{r}_2$ .

Una definizione equivalente nel caso di sistemi omogenei, utilizzata nel calcolo computazionale, é invece:

$$g(\mathbf{r}) = \rho^{-2} \left\langle \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(\mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}) \right\rangle = \frac{V}{N^2} \left\langle \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}) \right\rangle \quad (4.36)$$

Tale funzione descrive l'organizzazione locale media nell'intorno di un dato atomo e rappresenta una caratteristica significativa nella fisica dello stato liquido. La definizione delle  $g(r)$  implica che  $\rho g(r) d\mathbf{r}$  sia proporzionale alla probabilitá di trovare un atomo nel volume dell'elemento  $d\mathbf{r}$  ad una distanza  $r$  da un dato atomo e, in tre dimensioni,  $4\pi\rho g(r)r^2\Delta r$  é il numero medio di atomi in una sfera di raggio  $r$  e spessore  $\Delta r$  che circonda l'atomo in esame. Dalla definizione della  $g(r)$  secondo la (4.36) risulta evidente che puó essere misurata utilizzando un istogramma delle distanze tra le coppie di atomi. Quindi se  $h_m$  é il numero delle coppie di atomi  $(i, j)$  per le quali:

$$(n-1)\Delta r \leq r_{ij} < n\Delta r \quad (4.37)$$

e, assumendo che  $\Delta r$  sia sufficientemente piccolo, si ottiene come risultato:

$$g(r_n) = \frac{V h_n}{2\pi N^2 r_n^2 \Delta r} \quad (4.38)$$

dove:

$$r_n = (n-1/2)\Delta r \quad (4.39)$$

Ovviamente la  $g(r)$  può essere calcolata solo per  $r < L/2$  con  $L$  lunghezza della cella di simulazione, in accordo con il principio della minima immagine.

Si riportano ora esempi di quanto sopra esposto.

Si sono effettuate simulazioni con atomi di silicio utilizzando il potenziale Lennard-Jones. In tutti i casi riportati il sistema è stato opportunatamente equilibrato in modo da permettergli di raggiungere una condizione strutturale e dinamica corrispondente alla temperatura di osservazione desiderata. La fase di equilibratura è tanto più importante quanto più il sistema è disordinato. In Figura (4.12) si può notare il perfetto andamento della  $g(r)$ , confrontato con risultati noti [37], per un cristallo di silicio alla temperatura di 300K. Come si vede la  $g(r)$  a basse temperature è sostanzialmente formata dalla somma di varie delta di Dirac, ognuna delle quali è centrata intorno alla distanza cristallina tra coppie di primi, secondi, terzi, quarti vicini. L'intensità di questi picchi è il rapporto tra la probabilità di trovare una coppia di atomi a quella ben precisa distanza nel cristallo rispetto ad un continuo ideale alla stessa densità. Calcolando poi l'area del primo picco si evidenzia un valore pari a 4.0277 il quale corrisponde esattamente al numero dei primi vicini. Ripetendo la simulazione per il silicio liquido a 1800K, si ottiene il grafico rappresentato in Figura (4.13) dal quale si deduce che l'area del primo picco è pari a 5,26.

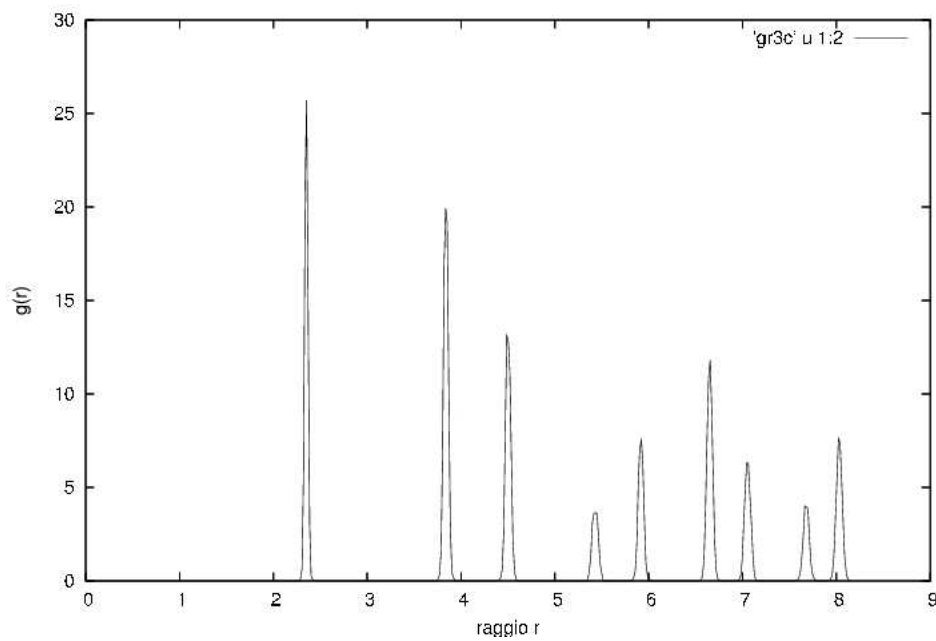


Figura 4.12: Andamento della funzione di correlazione a coppie  $g(r)$  per il silicio cristallino alla temperatura di 300K.

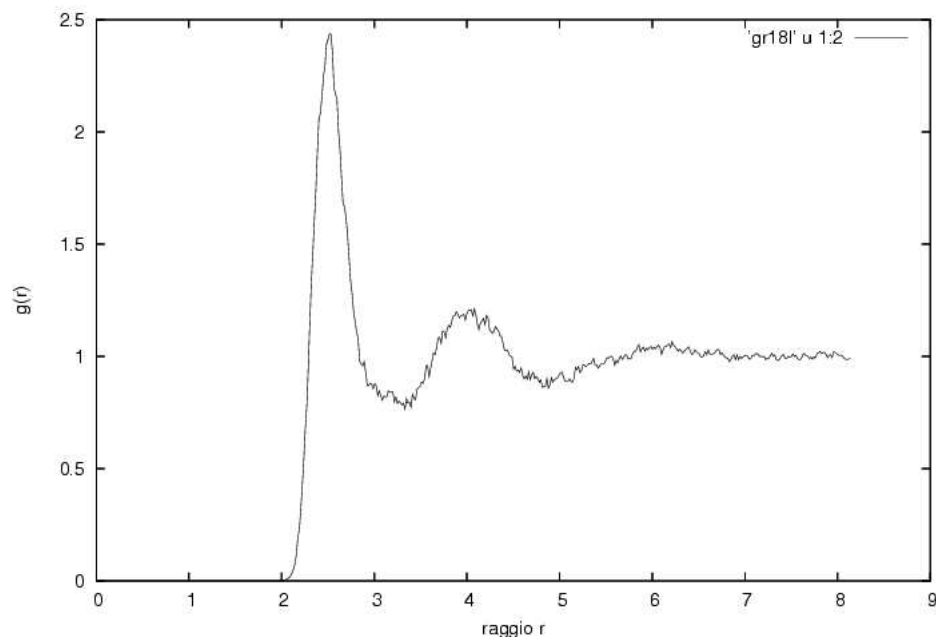


Figura 4.13: Andamento della funzione di correlazione a coppie  $g(r)$  per il silicio liquido alla temperatura di 1800K.



# Capitolo 5

## La meccanica del continuo

Tale capitolo descrive le equazioni base che regolano la meccanica del continuo mediante l'approccio lagrangiano totale. Si prosegue quindi con un rapido accenno al metodo degli elementi finiti per poter introdurre il concetto delle funzioni di forma. Esse infatti entrano in gioco, nella definizione delle equazioni del continuo e quindi anche nella zona di interfaccia del metodo multiscala considerato. In particolare si definiscono in coordinate locali funzioni di forma lineari, quadratiche e cubiche.

### 5.1 Generalità

La meccanica del continuo è quella branca della fisica, in particolare della meccanica, che si occupa dello studio dei corpi continui. Un sistema continuo è quindi un modello fenomenologico adatto a descrivere sistemi fisici macroscopici in quei casi in cui la dimensione dei fenomeni osservati sia tale che la fenomenologia non sia affetta dalla struttura molecolare della materia. Caratteristiche come la struttura di un cristallo appaiono quindi come in un modello continuo attraverso le equazioni costitutive. Lo scopo della meccanica del continuo è quello di descrivere il comportamento di solidi, fluidi, o strutture in generale.

Per problemi che comprendono complicate geometrie, condizioni di carico e particolari proprietà dei materiali, l'approccio continuo, pur permettendo una formulazione matematicamente coerente e meccanicamente ben fondata, richiederebbe la soluzione di equazioni differenziali ordinarie (ODE) o alle derivate parziali (PDE) di difficile risoluzione. Anche nell'ambito di validità dell'ipotesi di piccoli spostamenti, soluzioni di problemi concreti sono disponibili solo per un certo numero di casi particolari. Tali soluzioni sono indubbiamente importanti ma non esaustive dei problemi di interesse ingegneristico. Dobbiamo quindi far riferimento a metodi numerici basati sulla discretizzazione del modello continuo e in particolare al Metodo degli Elementi Finiti (FEM) <sup>1</sup>.

La formulazione di tale metodo si basa sulla ricerca della soluzione di un sistema di equazioni algebriche come soluzione approssimata del sistema di equazioni differenziali di partenza in punti discreti del continuo. Si procede quindi alla discretizzazione del corpo il quale viene suddiviso in un certo numero di porzioni dette appunto *elementi finiti*, il cui comportamento sarà specificato da un certo numero di parametri. Su questa base viene definito il comportamento di ogni singolo elemento e quello dell'intera struttura viene poi ricostruito *assemblando* gli elementi di cui è composta, che sono connessi tra di loro e con il supporto esterno solo in determinati punti detti *nodi*. Gli spostamenti dei punti nodali sono le incognite del problema. L'insieme di elementi finiti e nodi rappresenta la discretizzazione del corpo continuo e ne rappresenta la *mesh*. Così facendo potranno essere noti spostamenti o tensioni in ogni punto di ogni elemento finito dipendendo questi solo dagli spostamenti o dalle tensioni presenti nei nodi. Tale approccio ci permette quindi di convertire un problema con un infinito numero di gradi di libertà ad uno con un numero finito semplificando notevolmente la risoluzione del problema. Per avere una buona accuratezza della soluzione, il numero di nodi

---

<sup>1</sup>Il moderno sviluppo del FEM inizia nel 1940 nel campo dell'ingegneria strutturale con i lavori di Hrennikoff [41] nel 1941 e di McHenry [42] nel 1943 i quali usarono un elemento monodimensionale per ricavare lo stato tensionale di un solido continuo.



dovrà essere abbastanza elevato, il che comporterà, per problemi con geometrie complicate, una costo computazionale maggiore. Sarà quindi necessario, a seconda dei casi, scegliere un compromesso tra un'accurata discretizzazione e tempi computazionali richiesti.

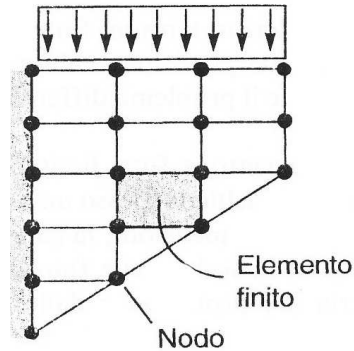


Figura 5.1: Esempio di corpo discretizzato con il metodo agli elementi finiti.

## 5.2 Concetti base di meccanica del continuo

Consideriamo un corpo in uno stato iniziale al tempo  $t = 0$  come mostrato in Figura (5.2); il dominio del corpo nello stato iniziale è indicato con  $\Omega_0$  ed è chiamata *configurazione iniziale*, *configurazione di riferimento* o *configurazione indeformata* essendo priva di deformazioni iniziali. Nel descrivere il moto e la deformazione del corpo bisogna però fare riferimento alla configurazione  $\Omega$  che prende il nome di *corrente* o *configurazione deformata*. Il dominio può essere mono-, bi- o tri-dimensionale;  $\Omega$  si riferirà quindi ad una linea, ad un'area o ad un volume. Il vettore posizione di un punto materiale nella configurazione di riferimento è dato da  $\mathbf{X}$  secondo

$$\mathbf{X} = X_i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^{n_{SD}} X_i \mathbf{e}_i \quad (5.1)$$

dove  $X_i$  sono le componenti del vettore posizione ed  $\mathbf{e}_i$  sono i vettori della base unitaria di un sistema in coordinate cartesiane;  $n_{SD}$  indica invece generalmente la dimensione del modello. La variabile  $\mathbf{X}$  prende il nome di *coordinata*

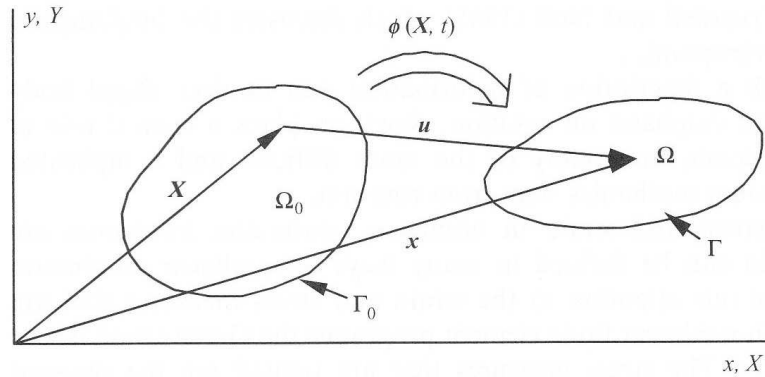


Figura 5.2: Configurazione deformata (corrente) e indeformata (iniziale) di un corpo.

*materiale o Lagrangiana*. Invece la posizione di un punto nella configurazione corrente è chiamata *coordinata spaziale o Euleriana* ed è definita da

$$\mathbf{x} = x_i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^{n_{SD}} x_i \mathbf{e}_i \quad (5.2)$$

con analogo significato dei simboli. Il moto del corpo è quindi descritto da

$$\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{X}, t) \quad (5.3)$$

dove  $\mathbf{x}$  è la posizione del punto materiale  $\mathbf{X}$  al tempo  $t$  e la funzione  $\Phi$  associa punti della configurazione di riferimento a quella corrente.

In base a quanto detto possiamo descrivere la risposta del continuo secondo due approcci. Nel primo le variabili indipendenti sono le coordinate materiali  $X_i$  e il tempo  $t$  prende il nome di *descrizione lagrangiana o materiale*. Nel secondo le variabili indipendenti sono le coordinate spaziali  $\mathbf{x}$  e il tempo  $t$  prende il nome di *descrizione Euleriana o spaziale*. Solitamente, per lo studio della meccanica dei solidi, si preferisce riferirsi ad una descrizione lagrangiana in quanto le tensioni su un corpo dipendono dalla deformazione e dalla sua storia; diversamente per lo studio della meccanica dei liquidi si preferisce il secondo approccio in quanto le tensioni ed il comportamento di un fluido newtoniano non dipendono dalla sua storia.

Nello sviluppo del metodo degli elementi finiti la mesh può essere descritta con riferimento alla formulazione Lagrangiana o Euleriana. Per quanto riguarda la formulazione Lagrangiana si possono considerare, a sua volta, due approcci:

- Formulazione in termini di misure Lagrangiane di tensione e deformazione nelle quali le derivate e gli integrali sono considerati in rispetto alle coordinate Lagrangiane (materiali)  $X$ , chiamata *formulazione Lagrangiana totale* (total Lagrangian formulations)
- Formulazione in termini di misure Euleriane di tensione e deformazione nelle quali le derivate e gli integrali sono considerati rispetto alla coordinata Euleriane (spaziali)  $x$ , chiamata *formulazione Lagrangiana aggiornata* (updated Lagrangian formulations)

La maggiore differenza tra le due formulazioni è nel diverso punto di vista: le variabili sono descritte nella total Lagrangian formulations nella configurazione originale, nella updated Lagrangian formulations nella configurazione corrente. Nonostante ciò i meccanismi che vi stanno alla base sono identici; è quindi possibile trasformare espressioni definite nella total formulation nell'updated formulation e viceversa. Per quanto riguarda la formulazione Euleriana i nodi sono fissi nello spazio e le variabili dipendenti sono funzione delle coordinate spaziali euleriane  $x$  e  $t$ .

In questa sede faremo riferimento alla total Lagrangian formulation.

### 5.2.1 Le equazioni fondamentali

La meccanica del continuo è governata da un gruppo di equazioni fondamentali che derivano dalle leggi di conservazione conosciute anche come leggi di bilancio. Per avere il quadro completo dobbiamo considerare anche le equazioni costitutive, necessarie per descrivere il comportamento del materiale tramite una relazione tra tensione e deformazione, le condizioni al contorno e le condizioni iniziali. Vediamo nel dettaglio queste relazioni.

**Equazione di conservazione della massa.**

Dato un corpo  $\Omega$  nello spazio la massa di tale materiale è definita da:

$$m(\Omega) = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{X}, t) d\Omega \quad (5.4)$$

dove  $\rho(\mathbf{X}, t)$  è la densità. In accordo con il principio di conservazione della massa, ossia la massa di un materiale rimane costante nel tempo, si ha che:

$$\frac{Dm}{Dt} = \frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \rho d\Omega = 0 \quad (5.5)$$

e applicando il teorema di Reynolds <sup>2</sup>

$$\int_{\Omega} \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div}(\mathbf{v}) \right) d\Omega = 0 \quad (5.7)$$

Estraendo la PDE dalla forma integrale: <sup>3</sup> otteniamo:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div}(\mathbf{v}) = 0 \quad (5.8)$$

che rappresenta l'*equazione di conservazione della massa*, detta anche *equazione di continuità*.

In coordinate Lagrangiane l'Equazione (5.5) può essere integrata nel tempo per ottenere la seguente equazione algebrica

$$\int_{\Omega} \rho d\Omega = \text{constant} = \int_{\Omega_0} \rho_0 d\Omega_0 \quad (5.9)$$

Utilizzando lo Jacobiano (che ricordiamo essere  $J = \det \mathbf{F}$  con  $\mathbf{F} = \partial \Phi / \partial \mathbf{X}$  gradiente di deformazione) ed estraendo dalla forma integrale otteniamo:

$$\rho(\mathbf{X}, t) = J(\mathbf{X}, t) = \rho_0(\mathbf{X}) \quad \rho J = \rho_0 \quad (5.10)$$

---

<sup>2</sup>Si è fatto riferimento alla seguente forma del Teorema del trasporto di Reynolds:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}, t) d\Omega = \int_{\Omega} \left( \frac{Df(\mathbf{x}, t)}{Dt} + f \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) d\Omega \quad (5.6)$$

<sup>3</sup>Se  $f(\mathbf{x}, t)$  è  $C^{-1}$  e  $\int_{\Omega} f(\mathbf{x}, t) d\Omega = 0$  per ogni sottodominio  $\Omega$  di  $\bar{\Omega}$  e il tempo  $t \in [0, \bar{t}]$  allora  $f(\mathbf{x}, t) = 0$  in  $\Omega$  per  $t \in [0, \bar{t}]$

che rappresenta l'equazione di conservazione della massa in coordinate Lagrangiane.

### Equazione di conservazione del momento lineare.

L'equazione di conservazione del momento lineare o principio di bilancio del momento è equivalente alla seconda legge del moto di Newton.

In termini lagrangiani l'equazione del momento nella configurazione di riferimento è espressa da:

$$\mathbf{p}(t) = \int_{\Omega_0} \rho_0 \mathbf{v}(\mathbf{X}, t) d\Omega_0 \quad (5.11)$$

mentre le forze totali agenti sul corpo sono date dalla somma delle forze di massa  $\mathbf{b}(\mathbf{X}, t)$  agenti nel dominio stesso e dalle forze di trazione agenti su una parte del suo contorno  $\mathbf{t}_0(\mathbf{X}, t)$  secondo la relazione

$$\mathbf{f}(t) = \int_{\Omega_0} \rho_0 \mathbf{b}(\mathbf{X}, t) d\Omega_0 + \int_{\Gamma_0} \mathbf{t}_0(\mathbf{X}, t) d\Gamma_0 \quad (5.12)$$

Dalla seconda legge di Newton abbiamo che:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{f} \quad (5.13)$$

e, sostituendo in essa la (5.11) e la (5.12) otteniamo:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} \rho_0 \mathbf{v} d\Omega_0 = \int_{\Omega_0} \rho_0 \mathbf{b} d\Omega_0 + \int_{\Gamma_0} \mathbf{t}_0 d\Gamma_0 \quad (5.14)$$

Portando dentro la derivata materiale nel termine a sinistra dell'uguale, in quanto il dominio di riferimento è costante nel tempo, ed applicando al secondo termine a destra dell'uguale la legge di Cauchy <sup>4</sup> e successivamente il Teorema di Gauss (si veda a riguardo l'Appendice A) otteniamo:

$$\int_{\Omega_0} \left( \rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} - \rho_0 \mathbf{b} - \nabla_0 \cdot \mathbf{P} \right) d\Omega_0 \quad (5.15)$$

---

<sup>4</sup>La legge di Cauchy definisce il tensore della tensione  $\boldsymbol{\sigma}$  secondo la relazione:  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} d\Gamma = \mathbf{t} d\Gamma$  dove  $\mathbf{t}$  indica le forze di trazione. Nella configurazione di riferimento la precedente relazione diventa  $\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{P} d\Gamma_0 = \mathbf{t}_0 d\Gamma_0$ .  $\mathbf{P}$  rappresenta il tensore di Piola-Kirchhoff

e, data l'arbitrarietà di  $d\Omega_0$  si ha:

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \nabla_0 \cdot \mathbf{P} + \rho_0 \mathbf{b} \quad \text{o} \quad \rho_0 \ddot{u}_i = \frac{\partial P_{ij}}{\partial X_j} + \rho_0 b_i \quad (5.16)$$

che rappresenta l'*equazione di conservazione del momento* in forma Lagrangiana, con  $\mathbf{P}$  tensore di Piola-Kirchhoff.

### Equazione di equilibrio.

L'equazione di equilibrio si ottiene dalla (5.16) quando l'accelerazione è nulla:

$$\nabla_0 \cdot \mathbf{P} + \rho_0 \mathbf{b} = 0 \quad \text{o} \quad \frac{\partial P_{ij}}{\partial X_j} + \rho_0 b_i = 0 \quad (5.17)$$

Se siamo in piccole deformazioni la tensione nominale è sostituita dal tensore di Cauchy e si ottiene:

$$\nabla_0 \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho_0 \mathbf{b} = 0 \quad (5.18)$$

### Equazione di conservazione del momento angolare.

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P}^T \cdot \mathbf{F}^T \quad (5.19)$$

dove  $\mathbf{P}$  è il primo tensore di Piola Kirchoff ovvero la tensione nominale e  $\mathbf{F}$  è il gradiente di deformazione.

Si riporta solo l'equazione finale per maggiori dettagli si faccia riferimento all'Appendice B.

### Equazione di conservazione dell'energia.

$$\rho_0 \dot{w}^{int} = \rho_0 \frac{\partial w^{int}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \dot{\mathbf{F}}^T : \mathbf{P} - \nabla_0 \cdot \tilde{\mathbf{q}} + \rho_0 s \quad (5.20)$$

$$\rho_0 \dot{w}^{int} = \dot{\mathbf{F}}^T : \mathbf{P} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}^T \quad (5.21)$$

La (5.20) nel caso in cui sia presente conduzione di calore, la (5.20) se questa è assente.

Si riporta solo l'equazione finale per maggiori dettagli si faccia riferimento all'Appendice C.

### Equazioni costitutive.

Rappresentano in generale il legame tra la tensione nominale  $P$  e la deformazione  $\varepsilon$  secondo la relazione:

$$P(X, t) = E^{PF} \varepsilon(X, t) \quad (5.22)$$

Nel caso di piccole deformazioni il parametro del materiale  $E^{PF}$  corrisponde alla matrice  $\mathbf{D}$  e la tensione nominale al tensore di Cauchy. Si ha pertanto in notazione matriciale:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (5.23)$$

Nel caso di grandi deformazioni è utile notare che la tensione nominale è definita in termini di potenziale:

$$\mathbf{F}^T = \frac{\partial w(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} \quad \text{o} \quad P_{ji} = \frac{\partial w}{\partial F_{ij}} \quad (5.24)$$

dove  $w = \rho w^{int}$  rappresenta l'energia interna per unità di volume e  $w^{int}$  l'energia interna per unità di massa. Il lavoro interno totale è dato da:

$$W^{int} = \int_{\Omega_0} w d\Omega_0 \quad (5.25)$$

### Condizioni al contorno.

Dato un corpo  $\Omega$  e di contorno  $\Gamma$  le condizioni al contorno definite in esso sono di due tipi: condizioni al contorno di Dirichlet applicate su una parte del contorno  $\Gamma_u$  su cui sono presenti degli spostamenti imposti, ovvero il corpo è ivi vincolato, condizioni al contorno di Neumann su una parte del contorno  $\Gamma_t$  dove sono applicate delle forze di trazione:

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{su} \quad \Gamma_u \quad (5.26)$$

$$\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}, t) = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{su } \Gamma_t \quad (5.27)$$

È importante notare che  $\Gamma_u \cap \Gamma_t = 0$  e  $\Gamma_u \cup \Gamma_t = \Gamma$

### Condizioni iniziali.

Per poter risolvere le equazioni differenziali abbiamo bisogno delle condizioni iniziali. Queste possono essere espresse in funzione di spostamenti e velocità (5.28) o tensioni e velocità (5.29).

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, 0) = u_0(\mathbf{X}) \quad \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, 0) = \dot{\mathbf{u}}_0(\mathbf{X}) \quad (5.28)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}, 0) = \boldsymbol{\sigma}_0(\mathbf{X}) \quad \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, 0) = \dot{\mathbf{u}}_0(\mathbf{X}) \quad (5.29)$$

## 5.3 Alcuni concetti del metodo degli elementi finiti

Tale metodo si basa sulla ricerca della soluzione di un sistema di equazioni algebriche come soluzione approssimata del sistema di equazioni differenziali di partenza in punti discreti del continuo. I punti in cui sarà nota la soluzione sono i nodi del nostro dominio. Il dominio  $\Omega$  viene quindi diviso in  $e = 1, n_e$  elementi finiti, ognuno dei quali definisce un proprio sottodominio  $\Omega_e$ . Ogni elemento finito è a sua volta definito tramite un certo numero di nodi  $X_I$  con  $I = 1, n_N$  numero di nodi di un elemento. In totale il corpo avrà invece  $X_I$ ,  $I = 1, m$  nodi. Gli spostamenti, incogniti, in qualunque punto del dominio vengono definiti come combinazione lineare degli spostamenti calcolati nei nodi dell'elemento  $a_{iI}$  ( $I = 1, n_N$ ), per delle opportune funzioni, secondo la seguente relazione

$$u_i(X, t) \approx \hat{u}_i(X, t) = \sum_{I=1}^{n_N} N_I(X) a_{iI}(t) \quad (5.30)$$

Le funzioni  $\mathbf{N}$  (indicazione matriciale) prendono il nome di *funzioni di forma* e sono definite in modo tale da soddisfare la condizione:

$$N_I(X_J) = \delta_{IJ} \quad (5.31)$$



dove  $\delta_{IJ}$  è il simbolo di Kronecker:  $\delta_{IJ} = 1$  se  $I = J$ ,  $\delta_{IJ} = 0$  se  $I \neq J$ .

Secondo tale assunzione e mediante il Metodo dei residui pesati o tramite principi variazionali si arrivano a definire le equazioni discretizzate a partire da quelle continue che descrivono il comportamento di un corpo. Per quanto riguarda l'equazione del moto, in termini Lagrangiani, essa è espressa dalla seguente relazione:

$$\int_{\Omega} N_I \rho_0 b_i d\Omega + \int_{\Gamma_t^0} N_I \bar{t}_i d\Gamma - \int_{\Omega} \frac{\partial N_I}{\partial X_j} P_{ji} d\Omega = \int_{\Omega} N_I \rho_0 \ddot{u}_i d\Omega \quad (5.32)$$

o, in termini matriciali da:

$$\int_{\Omega} \mathbf{N}^T \rho_0 \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma_t^0} \mathbf{N}^T \bar{\mathbf{t}} d\Gamma - \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{a} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \rho_0 \mathbf{N} \ddot{\mathbf{a}} d\Omega \quad (5.33)$$

I termini a primo membro della (5.32) e della (5.33) rappresentano le forze nodali esterne ed interne <sup>5</sup> presenti nel dominio:

$$f_{iI}^{ext} = \int_{\Omega} N_I \rho_0 b_i d\Omega + \int_{\Gamma_t^0} N_I \bar{t}_i d\Gamma \quad \mathbf{f}^{ext} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \rho_0 \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma_t^0} \mathbf{N}^T \bar{\mathbf{t}} d\Gamma \quad (5.34)$$

$$f_{iI}^{int} = \int_{\Omega} \frac{\partial N_I}{\partial X_j} P_{ji} d\Omega \quad \mathbf{f}^{int} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{a} d\Omega \quad (5.35)$$

Con riferimento al termine a destra dell'equazione (5.33) possiamo ricavare:

$$\mathbf{M}_e = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}^T \rho_0 \mathbf{N} d\Omega_e \quad (5.36)$$

che rappresenta la matrice di massa del singolo elemento finito. Dall'espressione delle forze interne si definisce invece:

$$\mathbf{K}_e = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega_e \quad (5.37)$$

la matrice di rigidezza del singolo elemento finito.

In base a queste considerazioni si può definire l'equazione del moto in forma

---

<sup>5</sup>Le forze nodali esterne ed interne possono essere definite anche in termini di lavoro virtuale esterno ed interno rispettivamente:  $\delta W^{int} = \delta u_{iI} f_{iI}^{int} = \delta u_{iI} \int_{\Omega_0} \frac{\partial N_I}{\partial X_j} P_{ji} d\Omega_0$  e  $\delta W^{ext} = \delta u_{iI} f_{iI}^{ext} = \delta u_{iI} \left\{ \int_{\Omega_0} N_I \rho_0 b_i d\Omega_0 + \int_{\Gamma_t^0} \bar{t}_i d\Gamma_0 \right\}$ . Per maggiori chiarimenti si faccia riferimento a ([18])

matriciale sulla base dello studio del continuo discretizzato con il metodo agli elementi finiti.

$$\mathbf{f}^{ext} - \mathbf{K}\mathbf{a} = \mathbf{M}\ddot{\mathbf{a}} \quad \text{o} \quad \mathbf{f}^{ext} - \mathbf{f}^{int} = \mathbf{M}\ddot{\mathbf{a}} \quad (5.38)$$

Le matrici e i vettori appena calcolati sono relativi al singolo elemento finito; l'unione di tali quantità per tutti gli elementi finiti in cui il dominio è stato discretizzato porterà alle matrici e vettori globali. Con riferimento alla matrice di rigidezza

$$\mathbf{K} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \mathbf{K}_e \quad \text{con} \quad \mathbf{K}_e = \int_{\Omega_e} B_i^T \mathbf{D} B_j d\Omega_e \quad (5.39)$$

dove  $n_e$  è il numero di elementi finiti in cui il dominio è stato discretizzato.

## 5.4 Le funzioni di forma

In generale gli elementi finiti (FE) possono essere mono-, bi- o tridimensionali a seconda della dimensione del problema che dobbiamo trattare. A parità di dimensione, ogni elemento finito può essere definito da un numero più o meno elevato di nodi. Maggiore sarà il numero di nodi e più accurata sarà la soluzione, a scapito ovviamente del costo computazionale. Vari sono i tipi di elementi finiti che si possono utilizzare: Lagrangiani, Hermitiani, Isoparametrici o Serendipity. Ognuno di questi è definito tramite opportune funzioni di forma  $N$  (shape function) le quali sono alla base del metodo degli elementi finiti.

Consideriamo in questa sede elementi finiti di tipo lagrangiano in quanto le funzioni di forma sono definite secondo il Polinomio di Lagrange:

$$N_i^e(x) = \prod_{j=1(j \neq i)}^n \left( \frac{x - x_j^e}{x_i^e - x_j^e} \right) \quad (5.40)$$

Per descrivere elementi finiti lineari a due nodi (Figura 5.3) gli spostamenti nodali saranno dati, secondo la (5.30) da:

$$u = N_1^{(e)} a_1^{(e)} + N_2^{(e)} a_2^{(e)} \quad (5.41)$$

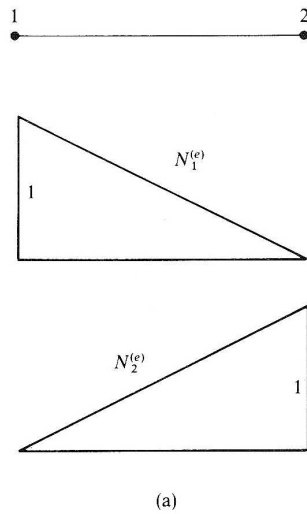


Figura 5.3: Andamento della funzione di forma per elementi finiti lineari a due nodi.

dove:

$$\begin{aligned}
 N_1^{(e)} &= \frac{x - x_2^{(e)}}{x_1^{(e)} - x_2^{(e)}} = \frac{x_2^{(e)} - x}{l^{(e)}} \\
 N_2^{(e)} &= \frac{x - x_1^{(e)}}{x_2^{(e)} - x_1^{(e)}} = \frac{x - x_1^{(e)}}{l^{(e)}}
 \end{aligned}
 \tag{5.42}$$

con  $l^{(e)}$  lunghezza totale dell'elemento.

Solitamente, però, non ci si riferisce alle coordinate (cartesiane) nella configurazione di riferimento, bensì a delle coordinate  $(\xi, \eta)$  dette locali o intrinseche. Queste possono essere considerate come un set di coordinate materiali in una mesh lagrangiana; sarà quindi analogo descrivere le funzioni di forma in una delle due formulazioni. Le coordinate intrinseche sono indicate con  $\xi_i$  e sono descritte nel dominio locale o biunitario indicato con  $\square$ . La funzione che identifica il passaggio dal dominio locale alla configurazione corrente è  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t)$ , mentre dal dominio locale alla configurazione iniziale è  $\mathbf{X} = \mathbf{X}(\boldsymbol{\xi})$

<sup>6</sup> Il moto di ogni elemento può essere quindi descritto (Figura (5.4)) da:

<sup>6</sup>Si ricorda che la funzione che definisce il moto è  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) \equiv \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{X}, t)$  ossia il passaggio dalla configurazione iniziale a quella di riferimento.

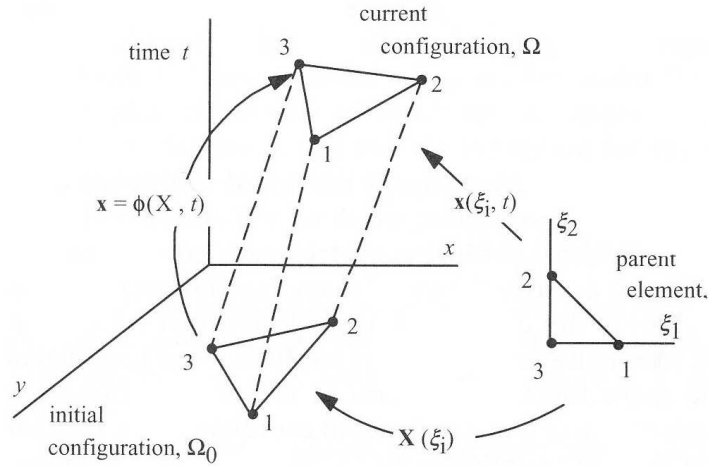


Figura 5.4: Configurazione iniziale e corrente di un elemento lagrangiano e le relazioni tra questo e l'elemento locale rappresentativo.

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{X}), t) \quad \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t) \quad (5.43)$$

e, tramite le funzioni di forma, mediante la seguente relazione:

$$\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t) = N_I(\boldsymbol{\xi})\mathbf{x}_I(t) \quad (5.44)$$

dove le funzioni di forma dipendono solamente dalle coordinate intrinseche, mentre la dipendenza dal tempo risiede solo nelle coordinate nodali. In analogia anche spostamenti, velocità e accelerazioni sono definiti come la (5.44). Introducendo quindi il sistema delle coordinate locali  $\xi$  per l'elemento lineare si ha che:

$$\xi = -1 \quad \text{all'estremo sinistro dell'elemento} \quad (5.45)$$

$$\xi = 0 \quad \text{al centro dell'elemento} \quad (5.46)$$

$$\xi = +1 \quad \text{all'estremo destro dell'elemento} \quad (5.47)$$

Possiamo quindi scrivere la relazione generale delle funzioni di forma tramite il polinomio di Lagrange in termini delle coordinate locali mediante:

$$N_i^e(\xi) = \prod_{j=1(j \neq i)}^n \left( \frac{\xi - \xi_j^e}{\xi_i^e - \xi_j^e} \right) \quad (5.48)$$

Nel caso quindi di un elemento lineare a due nodi, con  $\xi_1 = -1$  e  $\xi_2 = +1$ , le funzioni di forma assumono la seguente espressione:

$$\begin{aligned} N_1^e(\xi) &= \frac{\xi - \xi_2}{\xi_1 - \xi_2} = \frac{1}{2}(1 - \xi) \\ N_2^e(\xi) &= \frac{\xi - \xi_1}{\xi_2 - \xi_1} = \frac{1}{2}(1 + \xi) \end{aligned} \quad (5.49)$$

Analogamente possiamo esprimere le funzioni di forma per un elemento quadratico a tre nodi (Figura (5.5)):

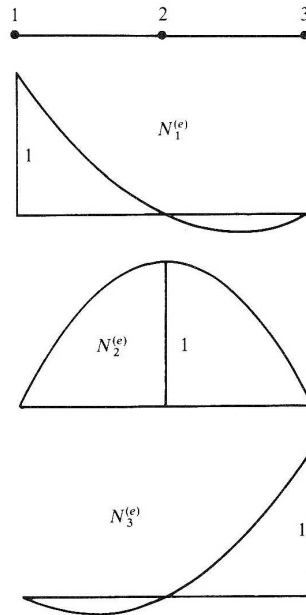


Figura 5.5: Andamento della funzione di forma per elementi finiti lineari a tre nodi.

$$N_1^e(\xi) = \frac{(\xi - \xi_2)(\xi - \xi_3)}{(\xi_1 - \xi_2)(\xi_1 - \xi_3)} = \frac{\xi}{2}(\xi - 1) \quad (5.50)$$

$$N_2^e(\xi) = \frac{(\xi - \xi_1)(\xi - \xi_3)}{(\xi_2 - \xi_1)(\xi_2 - \xi_3)} = (1 + \xi)(1 - \xi) \quad (5.51)$$

$$N_3^e(\xi) = \frac{(\xi - \xi_1)(\xi - \xi_2)}{(\xi_3 - \xi_1)(\xi_3 - \xi_2)} = \frac{\xi}{2}(\xi + 1) \quad (5.52)$$

e per un elemento cubico a quattro nodi Figura 5.6):

$$N_1^e(\xi) = \frac{(\xi - \xi_2)(\xi - \xi_3)(\xi - \xi_4)}{(\xi_1 - \xi_2)(\xi_1 - \xi_3)(\xi_1 - \xi_4)} = -\frac{9}{16}\left(\xi + \frac{1}{3}\right)\left(\xi - \frac{1}{3}\right)(\xi - 1) \quad (5.53)$$

$$N_2^e(\xi) = \frac{(\xi - \xi_1)(\xi - \xi_3)(\xi - \xi_4)}{(\xi_2 - \xi_1)(\xi_2 - \xi_3)(\xi_2 - \xi_4)} = \frac{27}{16}\left(\xi + 1\right)\left(\xi - \frac{1}{3}\right)(\xi - 1) \quad (5.54)$$

$$N_3^e(\xi) = \frac{(\xi - \xi_1)(\xi - \xi_2)(\xi - \xi_4)}{(\xi_3 - \xi_1)(\xi_3 - \xi_2)(\xi_3 - \xi_4)} = -\frac{27}{16}\left(\xi + 1\right)\left(\xi + \frac{1}{3}\right)(\xi - 1) \quad (5.55)$$

$$N_4^e(\xi) = \frac{(\xi - \xi_1)(\xi - \xi_2)(\xi - \xi_3)}{(\xi_4 - \xi_1)(\xi_4 - \xi_2)(\xi_4 - \xi_3)} = -\frac{9}{16}\left(\xi + 1\right)\left(\xi + \frac{1}{3}\right)\left(\xi - \frac{1}{3}\right) \quad (5.56)$$

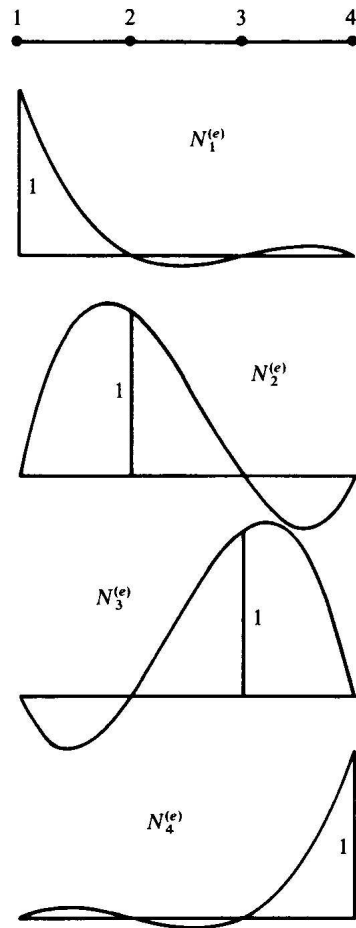


Figura 5.6: Andamento della funzione di forma per elementi finiti lineari a quattro nodi.

## 5.5 Metodi per l'integrazione numerica nel tempo

Le equazioni del moto (5.38) vengono risolte mediante opportuni metodi che permettono di determinare gli spostamenti nodali in successivi incrementi temporali. Questi metodi si dividono in *Metodi Impliciti* o *Espliciti*. Alla prima categoria appartengono il Metodo di Newmark (Newmark  $\beta$ -method) e il Metodo di Wilson-Theta; alla seconda categoria il Metodo delle differenze centrali il quale risulta essere il piú usato in meccanica computazionale ed in fisica, di cui si riporta una breve descrizione.

### 5.5.1 Metodo delle differenze centrali

Sia  $0 \leq t \leq t_E$  il tempo totale di una simulazione, suddiviso in intervalli (time step)  $\Delta t^n$  con  $n = 1, n_{TS}$  il numero di tali intervalli. Indichiamo con  $t^n$  e  $\mathbf{d}^n \equiv \mathbf{d}(t^n)$  il tempo e lo spostamento rispettivamente al tempo  $t$  e definiamo gli incrementi di tempo tramite le seguenti relazioni:

$$\Delta t^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n \quad t^{n+1/2} = \frac{1}{2}(t^{n+1} + t^n) \quad \Delta t^n = t^{n+1/2} - t^{n-1/2} \quad (5.57)$$

La relazione delle differenze centrali per la velocità é:

$$\dot{\mathbf{d}}^{n+1/2} \equiv \mathbf{v}^{n+1/2} = \frac{\mathbf{d}^{n+1/2} - \mathbf{d}^n}{t^{n+1} - t^n} = \frac{1}{\Delta t^{n+1/2}}(\mathbf{d}^{n+1/2} - \mathbf{d}^n) \quad (5.58)$$

e, con opportuni passaggi può essere convertita nella seguente formula di integrazione:

$$\mathbf{d}^{n+1} = \mathbf{d}^n + \Delta t^{n+1/2} \mathbf{v}^{n+1/2} \quad (5.59)$$

L'accelerazione e la corrispondente relazione che ne deriva sono espresse da:

$$\ddot{\mathbf{d}}^n = \mathbf{a}^n = \frac{\mathbf{v}^{n+1/2} - \mathbf{v}^{n-1/2}}{t^{n+1/2} - t^{n-1/2}} \quad \mathbf{v}^{n+1/2} = \mathbf{v}^{n-1/2} + \Delta t^n \mathbf{a}^n \quad (5.60)$$

Sostituendo la (5.58) e la sua controparte per il time step precedente nella (5.60) si può esprimere direttamente l'accelerazione in funzione degli spostamenti:

$$\ddot{\mathbf{d}}^n = \mathbf{a}^n = \frac{\Delta t^{n-1/2}(\mathbf{d}^{n+1} - \mathbf{d}^n) - \Delta t^{n+1/2}(\mathbf{d}^n - \mathbf{d}^{n-1})}{\Delta t^{n+1/2} \Delta t^n \Delta t^{n-1/2}} \quad (5.61)$$

Nel caso di intervalli uguali la precedente relazione si riduce in:

$$\ddot{\mathbf{d}}^n = \mathbf{a}^n = \frac{(\mathbf{d}^{n+1} - 2\mathbf{d}^n + \mathbf{d}^{n-1})}{(\Delta t^n)^2} \quad (5.62)$$

Se consideriamo l'integrazione nel tempo applicata all'equazione (5.38), che al time step  $n$  si ha:

$$\mathbf{M}\mathbf{a}^n = \mathbf{f}^n = \mathbf{f}^{ext}(\mathbf{d}^n, t^n) - \mathbf{f}^{int}(\mathbf{d}^n, t^n) \quad (5.63)$$

soggetta alle condizioni al contorno identificate da: (5.38), che al time step  $n$  é data da

$$g_I(\mathbf{d}^n) = 0 \quad I = 1, n_C \quad (5.64)$$

dove  $n_C$  rappresentano le componenti degli spostamenti.

Infine l'equazione per aggiornare le velocità é ottenuta sostituendo la (5.63) nella (5.60):

$$\mathbf{v}^{n+1/2} = \mathbf{v}^{n-1/2} + \Delta t^n \mathbf{M}^{-1} \mathbf{f}^n \quad (5.65)$$

mentre gli spostamenti  $\mathbf{d}^{n+1}$  possono essere determinati tramite la (5.59) avendo precedentemente calcolato  $\mathbf{v}^{n+1/2}$  con la (5.65).



## Capitolo 6

# Metodo di accoppiamento tra dinamica molecolare e dominio continuo

Dopo aver descritto, nei precedenti capitoli, i concetti base che regolano il continuo e la dinamica molecolare ed avendo studiato diversi modelli multiscala, si è identificato un metodo in particolare *Bridging domain coupling method*, per procedere allo studio del comportamento di un modello così definito in seguito alla propagazione del campo di spostamento attraverso l'interfaccia.

La prima parte del capitolo viene quindi dedicata ad una descrizione rigorosa del metodo in esame. Adottando un punto di vista Lagrangiano si considera l'energia del dominio globale come funzione delle singole energie dei due domini mediati con un opportuno parametro di scala. Nella seconda parte del capitolo vengono presentate le applicazioni effettuate in riferimento a quanto esposto. Si è quindi studiato come un'onda ultrasonica si propaga nel passaggio tra i due domini; questo in funzione della forma e della dipendenza spaziale dell'onda stessa.

## 6.1 Inquadramento del problema

Tra i vari metodi di accoppiamento che sono stati descritti il *Bbridging domain coupling method*. È stato ritenuto più adatto per lo studio del comportamento di un materiale discretizzato in parte con la dinamica molecolare e in parte con il modello continuo grazie anche alla vasta letteratura di cui si è potuto disporre.

Come già accennato il modello studiato dal metodo è mostrato in Figura (6.1(a)) e (6.1(b)). Il dominio completo nella configurazione iniziale è indicato tramite  $\Omega_0$ . Il dominio è suddiviso in due sottodomini: quello atomistico, indicato con  $\Omega_0^A$  e quello continuo indicato con  $\Omega_0^C$ . La zona di sovrapposizione dei due sottodomini è invece  $\Omega^{int}$ .  $\Gamma_0^\alpha$  e  $\Gamma_1^\alpha$  sono invece rispettivamente i bordi del sottodominio continuo e di quello atomistico.

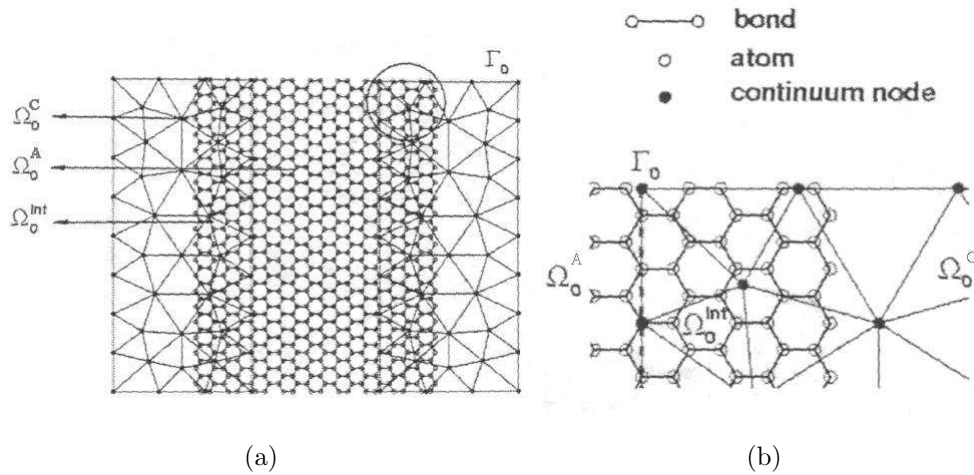


Figura 6.1: a) Shematizzazione del dominio complessivo. b) Definizione della zona di interfaccia.

### 6.1.1 Modello Atomistico

In un isolato sistema di atomi o molecole, l'energia totale, somma di energia cinetica e potenziale, è costante nel tempo ed identificata con l'Ha-

miltoniano  $H_A$ :

$$H^A(\mathbf{x}_I(t), \mathbf{p}_I^A(t)) = \sum_I \frac{1}{2m_I} \mathbf{p}_I^A \cdot \mathbf{p}_I^A + W^A(\mathbf{x}_I(t)) = \text{constant} \quad (6.1)$$

dove  $m_I$  è la massa dell'atomo I,  $\mathbf{x}_I$  è la posizione dell'atomo I,  $\mathbf{x}_I = \mathbf{X}_I + \mathbf{d}_I$  ( $\mathbf{X}_I$ ) è la posizione originale dell'atomo I and  $\mathbf{d}_I$  è lo spostamento dell'atomo I);  $\mathbf{p}_I^A$  è il momento definito da

$$\mathbf{p}_I^A = m_I \dot{\mathbf{x}}_I = m_I \dot{\mathbf{d}}_I \quad (6.2)$$

D'ora in avanti identificheremo la posizione del generico atomo con lettere italiane maiuscole. La funzione del potenziale totale  $W^A(\mathbf{x})$  è espresso come somma tra il potenziale dovuto alle forze esterne e il potenziale interatomico identificato con  $w_{IJ} = w_M(\mathbf{x}_I, \mathbf{x}_J)$ . Quindi:

$$W^A = -W_A^{ext} + W_A^{int} = - \sum_I \mathbf{f}_I^{ext} \mathbf{d}_I + \sum_{I,J>I} w_A(\mathbf{x}_I, \mathbf{x}_J) \quad (6.3)$$

Tramite le equazioni di Hamilton (Capitolo 4) possiamo ottenere l'equazione del moto per il dominio atomistico, data dalla seguente relazione:

$$m_I \ddot{\mathbf{d}}_I = - \frac{\partial W^A}{\partial \mathbf{x}_I} = \frac{\partial W_A^{ext}}{\partial \mathbf{d}_I} - \frac{\partial W_A^{int}}{\partial \mathbf{d}_I} = \mathbf{f}_I^{ext} - \mathbf{f}_I^{int} \quad (6.4)$$

dove  $\mathbf{f}_I^{int} = \partial W_A^{int} / \partial \mathbf{d}_I$

### 6.1.2 Modello Continuo

Per la spiegazione di tale modello adotteremo un punto di vista Lagrangiano come descritto nel Capitolo 5. Questo presuppone che ogni atomo che appartiene anche al dominio continuo rimangano in tale dominio. Con questa assunzione il metodo non sarà applicabile a gas, liquidi o solidi il cui comportamento è caratterizzato dalla diffusione degli atomi, ma solo a solidi amorfi o cristallini. Si assume inoltre che le deformazioni siano sufficientemente piccole così che vuoti o dislocazioni non si sviluppino nel dominio continuo.

Il continuo è governato da un insieme di equazioni tra cui l'equazione del momento lineare:

$$\frac{\partial P_{ji}}{X_j} + \rho_0 b_i = \rho_0 \ddot{u}_i \quad (6.5)$$

dove  $\rho_0$  è la densità iniziale,  $\mathbf{P}$  è il primo tensore di Piola-Kirchhoff,  $\mathbf{b}$  sono le forze di massa e  $\mathbf{u}$  gli spostamenti. Il primo tensore di Piola Kirchhoff è definit tramite il gradiente di deformazione  $\mathbf{F}$ :

$$\mathbf{P} = \frac{\partial w_c(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} \quad (6.6)$$

dove  $w_c$  è l'energia potenziale per unità di volume. Tale relazione serve come equazione costitutiva per un modello continuo basato su un potenziale atomistico. Il potenziale totale del continuo è:

$$W_C^{int} = \int_{\Omega_0^C} w_c(\mathbf{F}) d\Omega_0^C \quad (6.7)$$

Nel dominio continuo l'Hamiltoniano è dato da:

$$\begin{aligned} H^C &= K^C + W^C = \int_{\Omega_0^C} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^T \mathbf{v} d\Omega_0^C + W^C \\ W^C &= -W_C^{ext} + W_C^{int} = \sum_{\alpha} \mathbf{f}_{\alpha}^{extC} \mathbf{u}_{\alpha} + \int_{\Omega_0^C} w_c(\mathbf{F}) d\Omega_0^C \\ &= \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} \mathbf{p}_{\alpha}^C \mathbf{p}_{\alpha}^C + W^C \end{aligned} \quad (6.8)$$

dove i pedici in lettere greche indicano la posizione del generico nodo. Le velocità  $\mathbf{v}(\mathbf{X}, t)$  sono approssimate tramite

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \sum_{\alpha} N_{\alpha}(\mathbf{X}) \mathbf{v}_I(t) \quad (6.9)$$

e  $N_{\alpha}(\mathbf{X})$  rappresentano le funzioni di forma.

Le equazioni discrete del moto sono:

$$M_{\alpha} \ddot{u}_{i\alpha} = f_{i\alpha}^{extC} - f_{i\alpha}^{intC}, \quad M_{\alpha} = \rho_0 V_{\alpha}^0 \quad (6.10)$$

dove  $M_\alpha$  è la massa del generico nodo  $\alpha$ ;  $f_{i\alpha}^{extC}$  e  $f_{i\alpha}^{intC}$  sono rispettivamente le forze esterne ed interne date da:

$$f_{i\alpha}^{extC} = \frac{\partial W_C^{ext}}{\partial X_{i\alpha}} \quad (6.11)$$

$$\begin{aligned} f_{i\alpha}^{intC} &= \int_{\Omega_0^C} \frac{\partial N_\alpha(\mathbf{X})}{\partial X_j} \frac{\partial w_C(\mathbf{F})}{\partial F_{ij}} d\Omega_0^C \\ &= \int_{\Omega_0^C} \frac{\partial N_\alpha(\mathbf{X})}{\partial X_j} P_{ji} d\Omega_0^C = \int_{\Omega_0^C} \frac{\partial N_\alpha(\mathbf{X})}{\partial x_j} \sigma_{ji} d\Omega^C \end{aligned} \quad (6.12)$$

## 6.2 Bridging domain coupling method

### 6.2.1 Coupling method

In tale metodo l'energia totale è espressa come combinazione lineare dell'energia atomistica e continua. Viene introdotto nel dominio di accoppiamento un parametro di scala  $\psi$  definito come  $\psi = \frac{l(\mathbf{X})}{l_0}$  dove  $l(\mathbf{X})$  è la proiezione ortogonale di  $\mathbf{X}$  su  $\Gamma_0^\psi$  e  $l_0$  è la lunghezza di questa proiezione ortogonale su  $\Gamma_1^\psi$  come mostrato in in Figura (6.2). Quindi il parametro  $\psi$  è

$$\psi = \begin{cases} 1 & \text{in } \Omega_0^C - \Omega_0^{int} \\ [0, 1] & \text{in } \Omega_0^{int} \\ 0 & \text{in } \Omega_0^A - \Omega_0^{int} \end{cases} \quad (6.13)$$

L'Hamiltoniano del dominio complessivo è quindi combinazione lineare dei singoli Hamiltoniani secondo la relazione:

$$\begin{aligned} H &= (1 - \psi)H^A + \psi H^C \\ &= \sum_I (1 - \psi(\mathbf{X}_I)) \frac{\mathbf{p}_I^A \cdot \mathbf{p}_I^A}{2m_I} + (1 - \psi)W^A + \sum_\alpha \psi(\mathbf{X}_\alpha) \frac{\mathbf{p}_\alpha^C \cdot \mathbf{p}_\alpha^C}{2M_\alpha} + \psi W^C \end{aligned} \quad (6.14)$$

dove  $W^A$  è definita in (6.3) e  $W^C$  in (6.7).

I due modelli sono vincolati nel dominio di sovrapposizione  $\Omega_0^{int}$  a rispettare

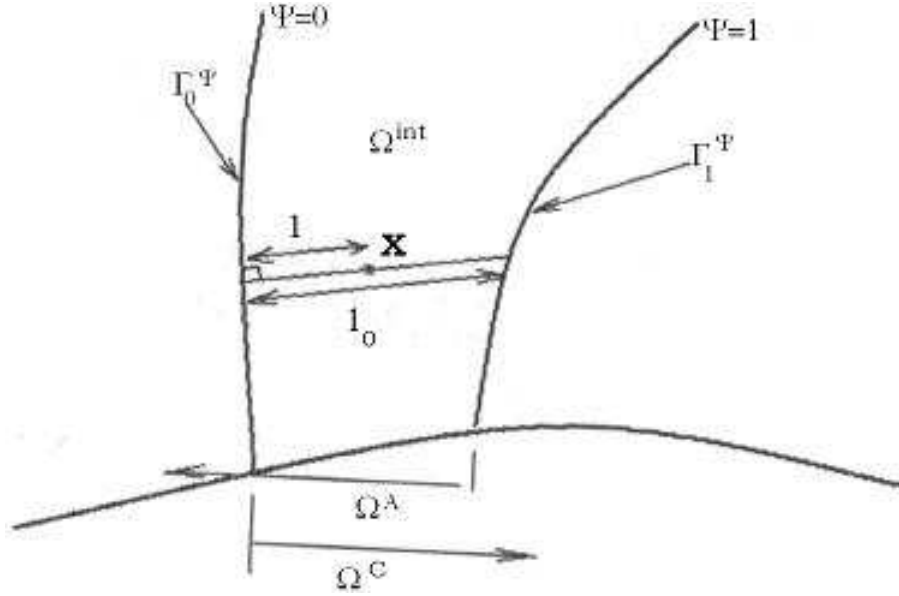


Figura 6.2: Definizione del dominio di sovrapposizione tra il modello atomistico e continuo

la seguente relazione:

$$\mathbf{g}_I = \{g_{iI}\} = \{u_i(\mathbf{X}_I) - d_{iI}\} = \left\{ \sum_{\alpha} N_{\alpha}(\mathbf{X}_I) u_{i\alpha} - d_{iI} \right\} \quad (6.15)$$

cioè gli spostamenti atomici si devono adattare agli spostamenti del modello continuo nella posizione degli atomi. Tali condizioni al contorno sono applicate a tutte le componenti degli spostamenti.

Nel metodo dei moltiplicatori di Lagrange (Appendica D), l'Hamiltoniano totale è scritto come:

$$H_L = H + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g} = H + \sum_I \boldsymbol{\lambda}_I^T \mathbf{g}_I \quad (6.16)$$

dove  $\boldsymbol{\lambda}_I = \{\lambda_{iI}\}$  è il vettore di moltiplicatori di Lagrange le cui componenti corrispondono alle componenti degli spostamenti dell'atomo I. Da notare che i moltiplicatori di Lagrange sono definiti in corrispondenza delle posizioni atomiche.

Nel caso si facesse riferimento invece all'augmented Lagrangian method (ap-

pendice D) l'Hamiltoniano viene modificato mediante l'aggiunta di un parametro  $\beta$  definito 'penalty' secondo la seguente relazione.

$$H_L = H + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g} + \frac{1}{2} \beta \mathbf{g}^T \mathbf{g} = H + \sum_I \boldsymbol{\lambda}_I^T \mathbf{g}_I + \frac{1}{2} \sum_I \beta \mathbf{g}_I^T \mathbf{g}_I \quad (6.17)$$

In tale sede si farà riferimento al metodo dei moltiplicatori di Lagrange.

### 6.2.2 Equazioni discrete

Le equazioni del moto per il metodo dei moltiplicatori di Lagrange sono in questo caso espresse da:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{X}_\alpha) \dot{\mathbf{p}}_\alpha^C &= -\frac{\partial H_L}{\partial \mathbf{u}_\alpha} & \psi(\mathbf{X}_\alpha) \dot{\mathbf{u}}_\alpha &= \frac{\partial H_L}{\partial \mathbf{p}_\alpha^C} & \text{in } \Omega_0^C \\ (1 - \psi(\mathbf{X}_I)) \dot{\mathbf{p}}_I^A &= -\frac{\partial H_L}{\partial \mathbf{d}_I} & (1 - \psi(\mathbf{X}_I)) \dot{\mathbf{d}}_I &= \frac{\partial H_L}{\partial \mathbf{p}_I^A} & \text{in } \Omega_0^A. \end{aligned} \quad (6.18)$$

che portano a:

$$\begin{aligned} \bar{M}_\alpha \ddot{\mathbf{u}}_\alpha &= \mathbf{f}_\alpha^{extC} - \mathbf{f}_\alpha^{intC} - \mathbf{f}_\alpha^{LC} & \text{in } \Omega_0^C \\ \bar{m}_I \ddot{\mathbf{u}}_I &= \mathbf{f}_I^{extA} - \mathbf{f}_I^{intA} - \mathbf{f}_I^{LA} & \text{in } \Omega_0^A \end{aligned} \quad (6.19)$$

dove:

$$\bar{M}_\alpha = \psi(\mathbf{X}_\alpha) M_\alpha \quad \bar{m}_I = (1 - \psi(\mathbf{X}_I)) m_I \quad (6.20)$$

rappresentano la generica massa nodale e atomica. Le forze esterne, nodali e atomistiche sono invece definite come:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_\alpha^{extC} &= \int_{\Omega_0^C} \psi(\mathbf{X}) N_\alpha \rho_0 \mathbf{b} d\Omega_0^C + \int_{\Gamma_0^t} \psi(\mathbf{X}) N_\alpha \bar{\mathbf{t}} d\Gamma_0^t \\ \mathbf{f}_I^{extA} &= (1 - \psi(X_I)) \bar{\mathbf{f}}_I \end{aligned} \quad (6.21)$$

e in maniera analoga quelle interne:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_\alpha^{intC} &= \int_{\Omega_0^C} \psi(\mathbf{X}) \frac{\partial N_\alpha(\mathbf{X})}{\partial X_j} P_{ij} d\Omega_0^C \\ \mathbf{f}_I^{intA} &= (1 - \psi(X_I)) \sum_{I, J > I} \frac{\partial w_A(\mathbf{x}_I, \mathbf{x}_J)}{\partial \mathbf{d}_I} \end{aligned} \quad (6.22)$$

Le forze  $\mathbf{f}_\alpha^{LC}$  e  $\mathbf{f}_I^{LA}$  dipendono invece dal legame esistente tra i due domini, esplicitato tramite la (4). Esse sono espresse tramite:

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_\alpha^{LC} &= \sum_J \lambda_J^T \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{u}_\alpha} = \sum_J \lambda_J^T \mathbf{G}_{J\alpha}^C \\ \mathbf{f}_I^{LA} &= \sum_J \lambda_J^T \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{d}_I} = \sum_J \lambda_J^T \mathbf{G}_{JI}^A\end{aligned}\quad (6.23)$$

dove  $N_{\alpha J} = N_\alpha(\mathbf{X}_J)$  e

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{J\alpha}^C &= \left[ \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{u}_\alpha} \right] = [N_{J\alpha} \mathbf{I}] \\ \mathbf{G}_{JI}^A &= \left[ \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{d}_I} \right] = [-\delta_{IJ} \mathbf{I}]\end{aligned}\quad (6.24)$$

Anche se ci riferiremo alle equazioni appena definite riportiamo per completezza le relazioni analoghe nel caso si volesse applicare l'augmented Lagrangian method:

$$\begin{aligned}\bar{M}_\alpha \ddot{\mathbf{u}}_\alpha &= \mathbf{f}_\alpha^{extC} - \mathbf{f}_\alpha^{intC} - \mathbf{f}_\alpha^{ALC} \quad \text{in } \Omega_0^C \\ \bar{m}_I \ddot{\mathbf{u}}_I &= \mathbf{f}_I^{extA} - \mathbf{f}_I^{intA} - \mathbf{f}_I^{ALA} \quad \text{in } \Omega_0^A\end{aligned}\quad (6.25)$$

dove  $\mathbf{f}_\alpha^{ALC}$  e  $\mathbf{f}_I^{ALA}$  sono date da

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_\alpha^{LC} &= \sum_J \lambda_J^T \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{u}_\alpha} + \sum_J p \mathbf{g}_J^T \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{u}_\alpha} \\ &= \sum_J \lambda_J^T [N_{\alpha J} \mathbf{I}] + \sum_J p \left[ \sum_\alpha N_{\alpha J} \mathbf{u}_\alpha - \mathbf{d}_J \right]^T [N_{\alpha J} \mathbf{I}]\end{aligned}\quad (6.26)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_I^{LA} &= \sum_J \lambda_J^T \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{d}_I} + \sum_J p \mathbf{g}_J^T \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{d}_I} \\ &= \sum_J \lambda_J^T [-\delta_{IJ} \mathbf{I}] + \sum_J p \left[ \sum_I N_{IJ} \mathbf{u}_I - \mathbf{d}_J \right]^T [-\delta_{IJ} \mathbf{I}]\end{aligned}\quad (6.27)$$

### 6.3 Algoritmo esplicito

Per risolvere il modello dinamico accoppiato mediante i moltiplicatori di Lagrange si fa riferimento all'algoritmo di Verlet (Cap.4) il quale coincide



con l'algoritmo delle differenze centrali. Noti quindi gli spostamenti  $\mathbf{u}$ , le velocità  $\dot{\mathbf{u}}$  e le accelerazioni  $\ddot{\mathbf{u}}$  all'istante  $t$  si possono calcolare le medesime quantità all'istante  $t + \Delta t$  come mostrato nelle seguenti equazioni dove è stata troncata l'espansione in serie di Taylor.

$$\mathbf{u}(t + \Delta t) = \mathbf{u}(t) + \dot{\mathbf{u}}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{u}}(t)\Delta t^2 \quad (6.28)$$

$$\dot{\mathbf{u}}(t + \Delta t) = \dot{\mathbf{u}}(t) + \frac{1}{2}[\ddot{\mathbf{u}}(t) + \ddot{\mathbf{u}}(t + \Delta t)] \Delta t \quad (6.29)$$

Vediamo ora in dettaglio le varie fasi dell'algoritmo:

1. Dalle condizioni iniziali sono noti gli spostamenti, velocità e accelerazioni all'istante  $t$  per atomi e nodi.
2. si calcolano gli spostamenti di tentativo all'istante  $t + 1$  mediante le:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{\alpha(n+1)}^* &= \mathbf{u}_{\alpha(n)} + \dot{\mathbf{u}}_{\alpha(n)}\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{u}}_{\alpha(n)}\Delta t^2 & \text{in } \Omega_0^C \\ \mathbf{d}_{I(n+1)}^* &= \mathbf{d}_{I(n)} + \dot{\mathbf{d}}_{I(n)}\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{d}}_{I(n)}\Delta t^2 & \text{in } \Omega_0^A \end{aligned} \quad (6.30)$$

3. Si calcolano le accelerazioni tramite le equazioni del moto (6.19) senza considerare le forze  $\mathbf{f}_{\alpha}^{LC}$  e  $\mathbf{f}_I^{LA}$  derivanti dall'equazione di legame (4) tra i due domini :

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{u}}_{\alpha(n+1)} &= \frac{1}{M_{\alpha}} [\mathbf{f}_{\alpha(n+1)}^{extC} - \mathbf{f}_{\alpha(n+1)}^{intC}] & \text{in } \Omega_0^C \\ \ddot{\mathbf{d}}_{I(n+1)} &= \frac{1}{m_I} [\mathbf{f}_{I(n+1)}^{extA} - \mathbf{f}_{I(n+1)}^{intA}] & \text{in } \Omega_0^A \end{aligned} \quad (6.31)$$

4. Si calcolano le velocità di tentativo

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_{\alpha(n+1)}^* &= \dot{\mathbf{u}}_{\alpha(n)} + \frac{1}{2} [\ddot{\mathbf{u}}_{\alpha(n)} + \ddot{\mathbf{u}}_{\alpha(n+1)}] \Delta t & \text{in } \Omega_0^C \\ \dot{\mathbf{d}}_{I(n+1)}^* &= \dot{\mathbf{d}}_{I(n)} + \frac{1}{2} [\ddot{\mathbf{d}}_{I(n)} + \ddot{\mathbf{d}}_{I(n+1)}] \Delta t & \text{in } \Omega_0^A \end{aligned} \quad (6.32)$$

5. Si calcolano i moltiplicatori di Lagrange necessari per determinare le velocità effettive secondo i seguenti passaggi:

- Si calcoli la matrice  $\mathbf{A}_{IL}$

$$\mathbf{A}_{IL} = \Delta t \overline{M}_\alpha^{-1} \sum_{\beta} N_{\beta I} \mathbf{G}_{L\beta}^C - \Delta t \overline{m}_I^{-1} \mathbf{G}_{LI}^A \quad (6.33)$$

- Si calcoli la derivata dell'equazione (4)

$$\dot{\mathbf{g}}_I^* = \sum_{\alpha} N_{\alpha I} \dot{\mathbf{u}}_{\alpha}^* - \dot{\mathbf{d}}_I^* \quad (6.34)$$

- Si calcoli la matrice  $\mathbf{A}_{II}$

$$\mathbf{A}_{II} = \sum_L \mathbf{A}_{IL} = \sum_L \left[ \Delta t \overline{M}_\alpha^{-1} \sum_{\beta} N_{\beta I} \mathbf{G}_{L\beta}^C - \Delta t \overline{m}_I^{-1} \mathbf{G}_{L\beta}^A \right] \quad (6.35)$$

Tale matrice è costituita da una matrice relativa alla parte continua e una relativa a quella atomistica, diagonale. In generale la  $\mathbf{A}_{IL}$  ha dimensione  $n \times n$  con  $n = n_{SD} n_\lambda$ ;  $n_{SD}$  il numero dello spazio dimensionale e  $n_\lambda$  il numero dei moltiplicatori di Lagrange.

- Si calcolino i moltiplicatori di Lagrange

$$\boldsymbol{\lambda}_I = \mathbf{A}_{II}^{-1} \dot{\mathbf{g}}_I^* \quad (6.36)$$

6. Si calcolino le forze dovute dovute all'Equazione (4)

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_\alpha^{LC} &= \sum_J \boldsymbol{\lambda}_J^T \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{u}_\alpha} + \sum_J p \mathbf{g}_J^T \frac{\partial \mathbf{g}_J}{\partial \mathbf{u}_\alpha} \\ &= \sum_J \boldsymbol{\lambda}_J^T [N_{\alpha J} \mathbf{I}] + \sum_J p \left[ \sum_{\alpha} N_{\alpha J} \mathbf{u}_\alpha - \mathbf{d}_J \right]^T [N_{\alpha J} \mathbf{I}] \end{aligned} \quad (6.37)$$

7. Si calcolino le velocità effettive allo step  $t + 1$

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_{\alpha(n+1)} &= \dot{\mathbf{u}}_{\alpha(n)} + \frac{1}{2} \left[ \ddot{\mathbf{u}}_{\alpha(n)} - \overline{M}_\alpha^{-1} \mathbf{f}_{\alpha(n)}^{LC} + \ddot{\mathbf{u}}_{\alpha(n+1)} - \overline{M}_\alpha^{-1} \mathbf{f}_{\alpha(n+1)}^{LC} \right] \Delta t \\ &= \dot{\mathbf{u}}_{\alpha(n)} + \frac{1}{2} \left[ \ddot{\mathbf{u}}_{\alpha(n)} + \ddot{\mathbf{u}}_{\alpha(n+1)} \right] \Delta t - \overline{M}_\alpha^{-1} \Delta t \sum_J \mathbf{G}_{J\alpha}^C \boldsymbol{\lambda}_J \\ &= \dot{\mathbf{u}}_{\alpha(n+1)}^* - \overline{M}_\alpha^{-1} \Delta t \sum_J \mathbf{G}_{J\alpha}^C \boldsymbol{\lambda}_J \end{aligned}$$

(6.38)

$$\begin{aligned}
\dot{\mathbf{d}}_{I(n+1)} &= \dot{\mathbf{d}}_{I(n)} + \frac{1}{2} \left[ \ddot{\mathbf{d}}_{I(n)} - \bar{m}_I^{-1} \mathbf{f}_{I(n)}^{LA} + \ddot{\mathbf{d}}_{I(n+1)} - \bar{m}_I^{-1} \mathbf{f}_{I(n+1)}^{LA} \right] \Delta t \\
&= \dot{\mathbf{d}}_{I(n)} + \frac{1}{2} \left[ \ddot{\mathbf{d}}_{I(n)} + \ddot{\mathbf{d}}_{I(n+1)} \right] \Delta t - \bar{m}_I^{-1} \Delta t \sum_J \mathbf{G}_{JI}^A \boldsymbol{\lambda}_J \\
&= \dot{\mathbf{d}}_{I(n+1)}^* - \bar{m}_I^{-1} \Delta t \sum_J \mathbf{G}_{JI}^A \boldsymbol{\lambda}_J
\end{aligned}
\tag{6.39}$$

dove  $\boldsymbol{\lambda} = \frac{1}{2} [\boldsymbol{\lambda}_{I(n)} + \boldsymbol{\lambda}_{I(n+1)}]$

8. Si ripeta il ciclo da 2 a 7.

## 6.4 Applicazioni

Come già accennato nel corso del lavoro si vuole analizzare come si propaga un campo di spostamenti nell'interfaccia tra i due domini. È noto che, per lo studio di strutture o componenti di materiali, molto spesso si faccia riferimento a tecniche non distruttive mediante la propagazione di onde ad ultrasuoni. Nel caso in esame, pur essendo un'applicazione di carattere metodologico, si presenteranno degli studi di come un'onda di tale tipo si riesca a propagare dal dominio atomistico a quello continuo.

Si è considerato un esempio monodimensionale il cui schema è riportato in Figura (6.3) nel quale è stato utilizzato il potenziale interatomico Lennard-Jones espresso da:

$$W^M(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]
\tag{6.40}$$

dove  $\varepsilon = 0.2J$  e  $\sigma = 0.11nm$ . L'intero dominio comprende 3000 atomi e 300 nodi. La lunghezza di un elemento, ossia la distanza tra due nodi, è di circa 1nm. La zona di sovrapposizione può variare a seconda delle singole applicazioni come riportato in seguito. Il tempo totale della simulazione è di 14 ps discretizzato in intervalli di 0.002ps.

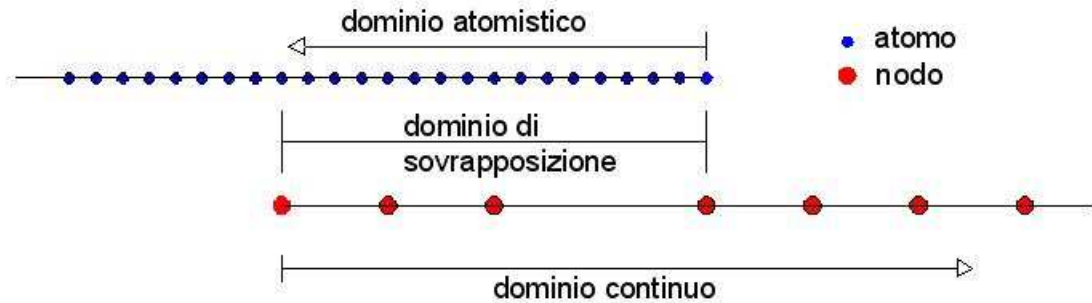


Figura 6.3: Schema del metodo di accoppiamento tra il dominio atomistico e continuo in una dimensione.

#### 6.4.1 Comportamento della zona di interfaccia al variare della forma del campo degli spostamenti

Tale applicazione consiste nell'attribuire degli spostamenti iniziali ad una parte di atomi sotto forma di un'onda sinusoidale semplice ottenuta come combinazione di basse ed alte frequenze, come presentato in Figura (6.4). L'onda si propaga poi fino al continuo attraverso la zona di sovrapposizione che è pari a 3 nm (3 elementi) o 9 nm (9 elementi). Si riportano i grafici degli spostamenti finali per questi due casi nelle Figure (6.5) e (6.6). Ingrandendo tali grafici, Figure (6.7(a)) e (6.7(b)), si può notare come nel caso in cui la zona di interfaccia sia meno estesa (3nm) una parte delle alte frequenze venga riflessa nel dominio atomistico in maniera maggiore rispetto all'altro caso (9nm).

Consideriamo ora la stessa onda, ma costituita da un numero crescente di periodi. Si riportano quindi gli spostamenti iniziali e finali di alcuni casi fino ad arrivare al caso limite dovuto alle condizioni del sistema.

Con tale sequenza di grafici si nota che, in accordo con quanto ricavato precedentemente, la parte delle alte frequenze che viene riflessa è maggiore nel caso in cui la zona di sovrapposizione sia di 3nm. Inoltre all'aumentare del numero dei periodi che descrivono gli spostamenti iniziali tali riflessioni aumentano fino al punto che, nelle Figure (6.19(a)) e (6.19(b)), non si riesce più ad apprezzare nettamente il miglioramento dovuto dall'estensione della

zona di sovrapposizione. Quest'ultimo caso, Figure da (6.16) a (6.19(b)), è stato considerato, in tale situazione, come caso limite poichè, con le dimensioni definite nel sistema di partenza, permetteva al massimo la propagazione di un'onda con tali caratteristiche attraverso i due domini; ovviamente si potrebbe estendere il tutto a sistemi maggiori. Tuttavia, già in questa situazione, è stato necessario portare la simulazione ad un tempo complessivo di 24 ps per permettere all'onda di spostarsi totalmente nel dominio continuo.

Successivamente si sono analizzati gli spostamenti finali di un'onda sinusoidale semplice, al variare della sua lunghezza d'onda. Si è riscontrato che, se la lunghezza dell'onda comprende una distanza di soli due nodi, ossia rappresenta una delta di Dirac, Figure (6.20(a)) e (6.20(b)), la sua propagazione nel dominio continuo avviene, ma con notevoli fluttuazioni che, di conseguenza, comportano delle riflessioni nel dominio atomistico. Tale risultato trova conferma anche dal punto di vista concettuale in quanto, essendo l'onda compresa all'interno di due nodi, il dominio stesso non è in grado di descrivere la sua evoluzione mediante gli spostamenti di tali nodi. Man mano che si aumenta la lunghezza d'onda tali fluttuazioni diminuiscono, Figure (6.21(a)) e (6.21(b)), fino ad arrivare ad un caso, che potremmo chiamare limite, nel quale si annullano, Figura (6.22). Ovviamente, se la lunghezza d'onda comprende alcune centinaia di atomi, Figura (6.23), gli spostamenti finali che si ottengono non presentano tali interferenze. Queste analisi sono state condotte considerando una zona di sovrapposizione tra i due domini di 9nm.

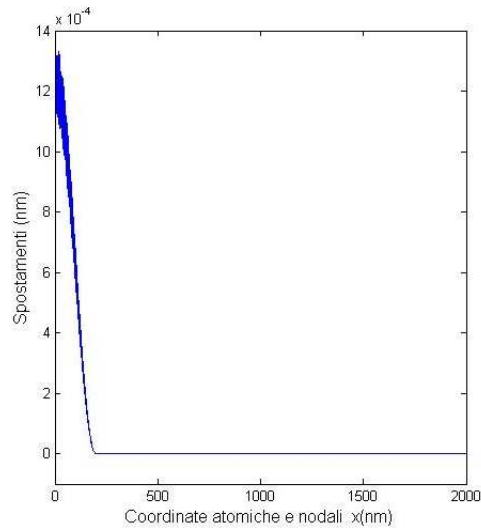


Figura 6.4: Andamento degli spostamenti iniziali

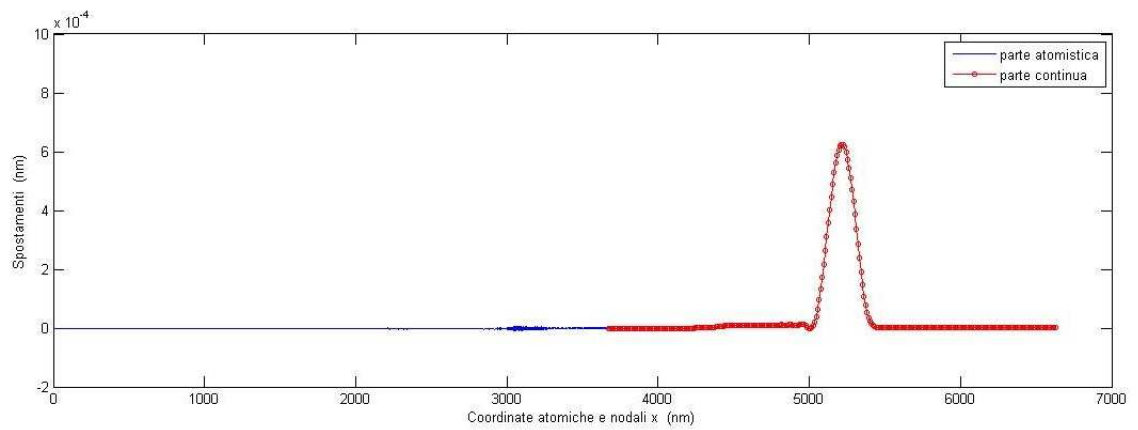


Figura 6.5: Andamento degli spostamenti finali ottenuti in seguito al passaggio dell'onda attraverso la zona di sovrapposizione di lunghezza pari a 3 nm.

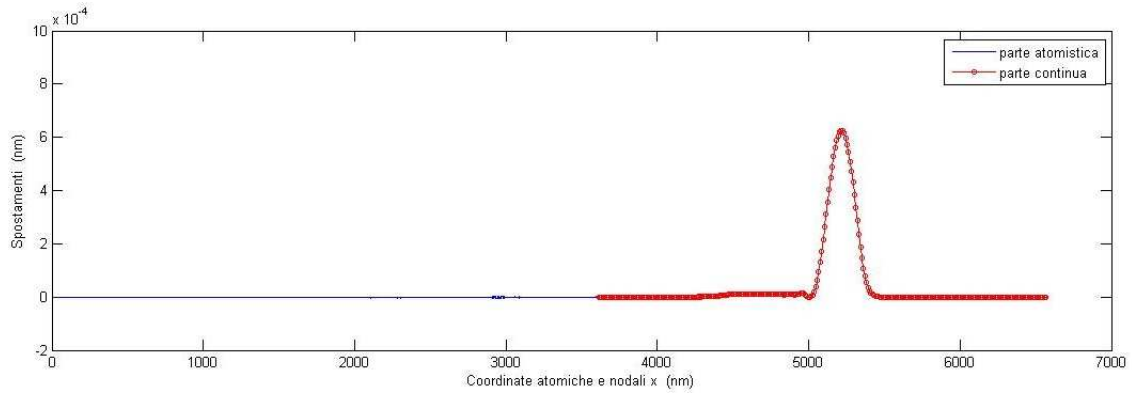
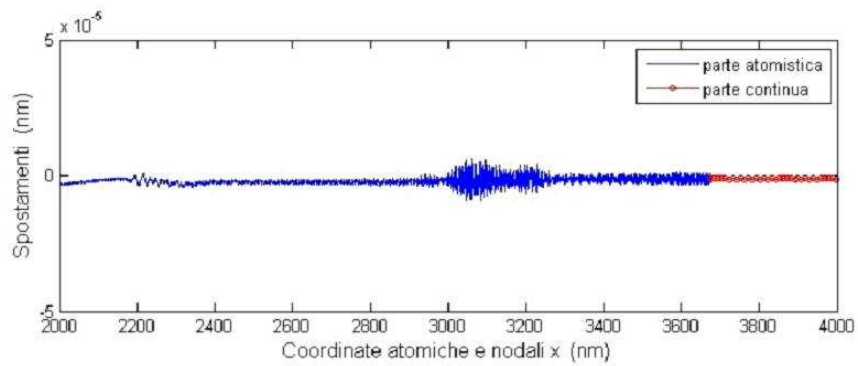
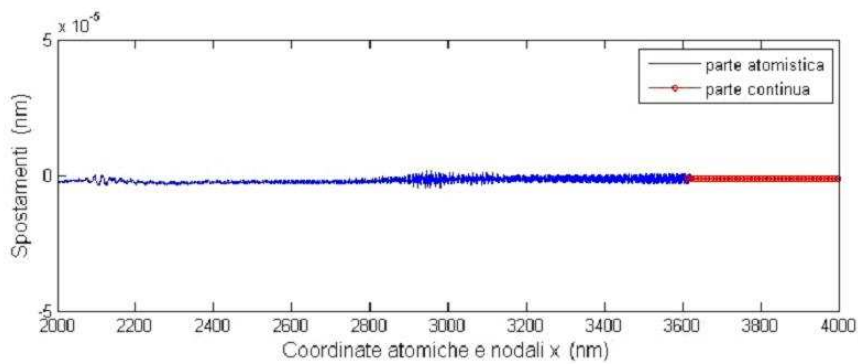


Figura 6.6: Andamento degli spostamenti finali ottenuti in seguito al passaggio dell'onda attraverso la zona di sovrapposizione di lunghezza pari a 9 nm.



(a) 3nm



(b) 9nm

Figura 6.7: Ingrandimento degli spostamenti finali per evidenziare le riflessioni nel dominio atomistico.

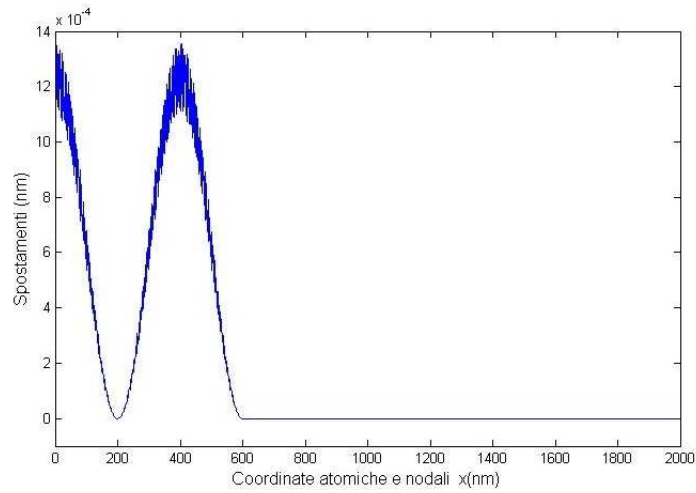


Figura 6.8: Andamento degli spostamenti iniziali ottenuti con un'onda formata da un periodo.

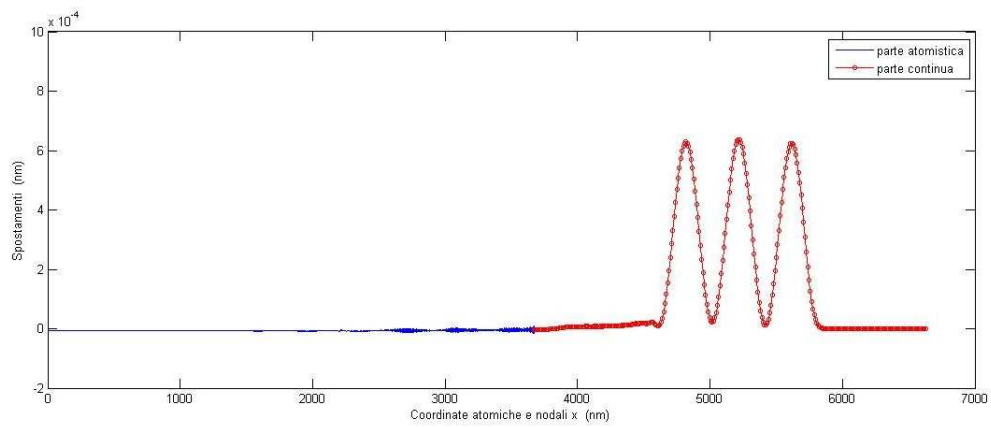


Figura 6.9: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con una zona di sovrapposizione pari a 3 nm e con un'onda formata da un periodo.



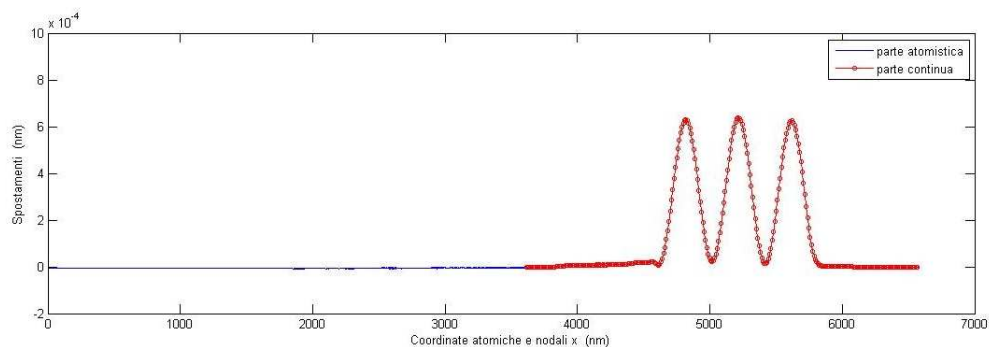
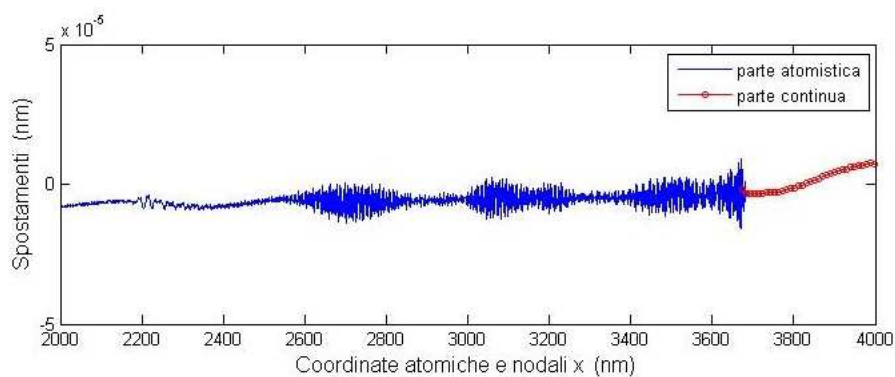
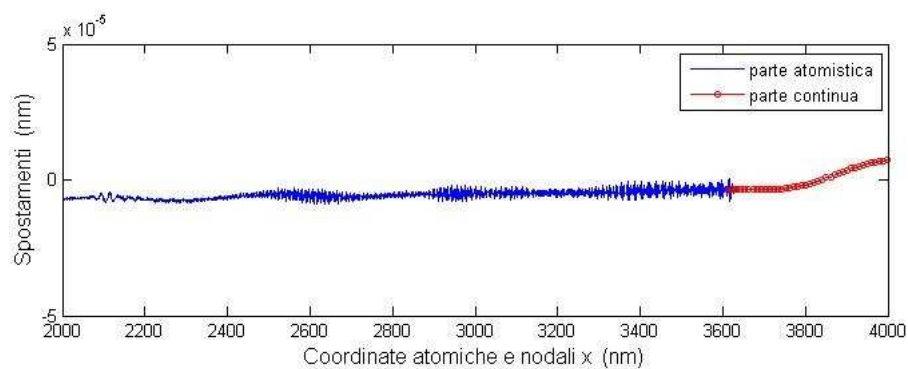


Figura 6.10: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con una zona di sovrapposizione pari a 9 nm e con un'onda formata da un periodo.



(a) 3nm



(b) 9nm

Figura 6.11: Ingrandimento degli spostamenti finali per evidenziare le riflessioni nel dominio atomistico con un'onda formata da un periodo.

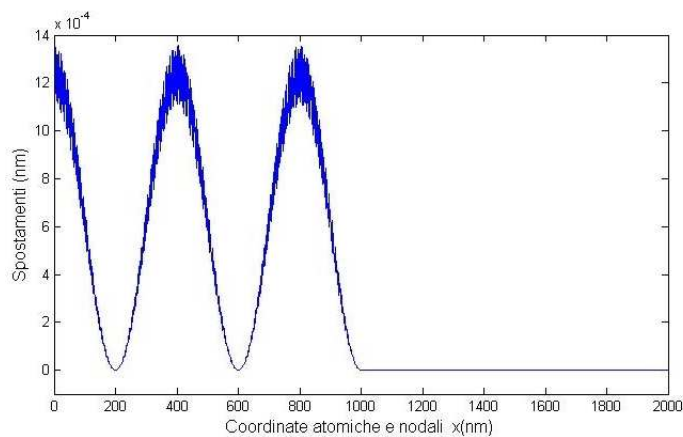


Figura 6.12: Andamento degli spostamenti iniziali ottenuti con un'onda formata da due periodi.

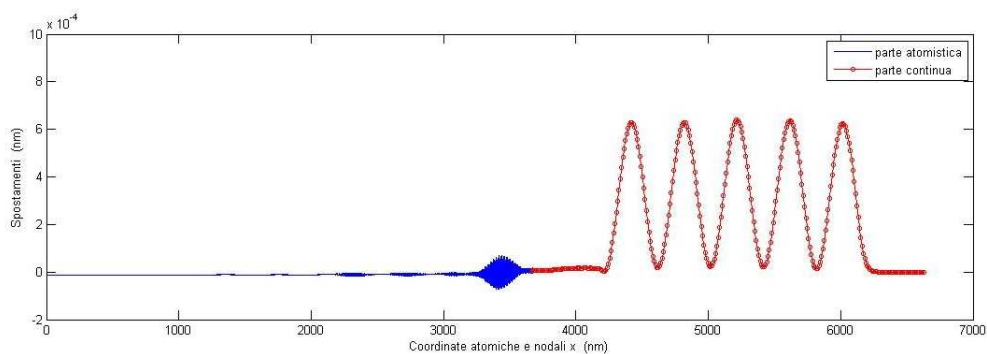


Figura 6.13: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con una zona di sovrapposizione pari a 3 nm e con un'onda formata da due periodi.

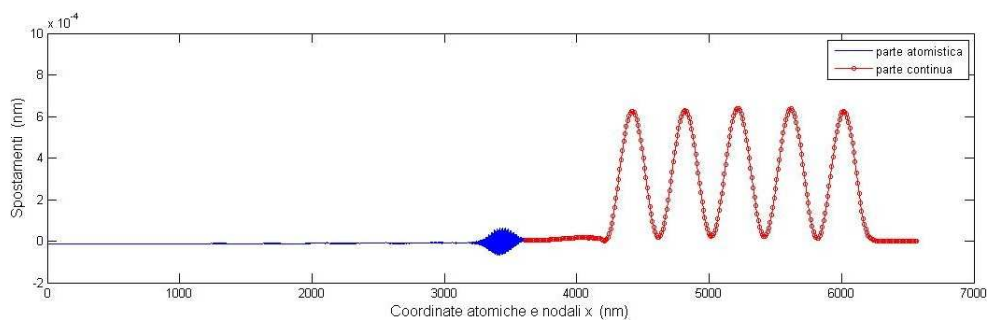
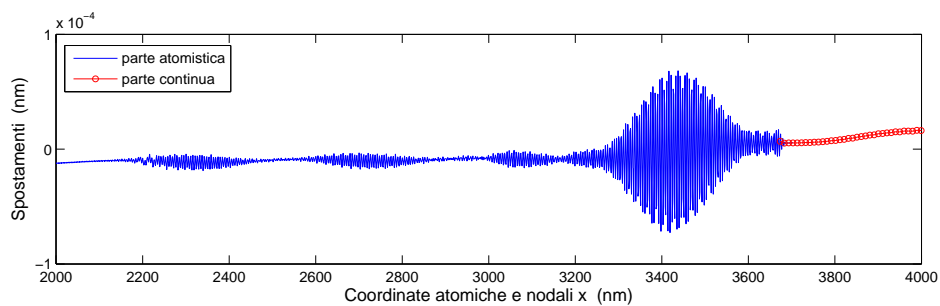
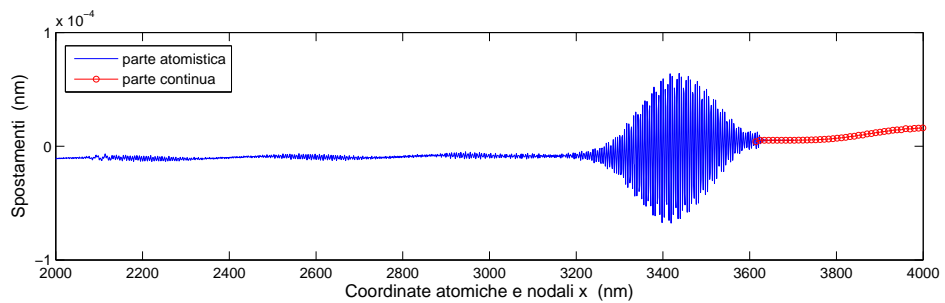


Figura 6.14: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con una zona di sovrapposizione pari a 9 nm e con un'onda formata da due periodi.



(a) 3nm



(b) 9nm

Figura 6.15: Ingrandimento degli spostamenti finali per evidenziare le riflessioni nel dominio atomistico con un'onda formata da due periodi.

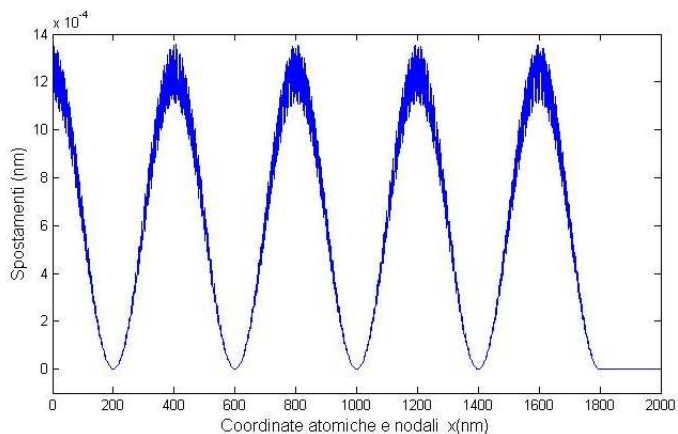


Figura 6.16: Andamento degli spostamenti iniziali ottenuti con un'onda formata da quattro periodi.

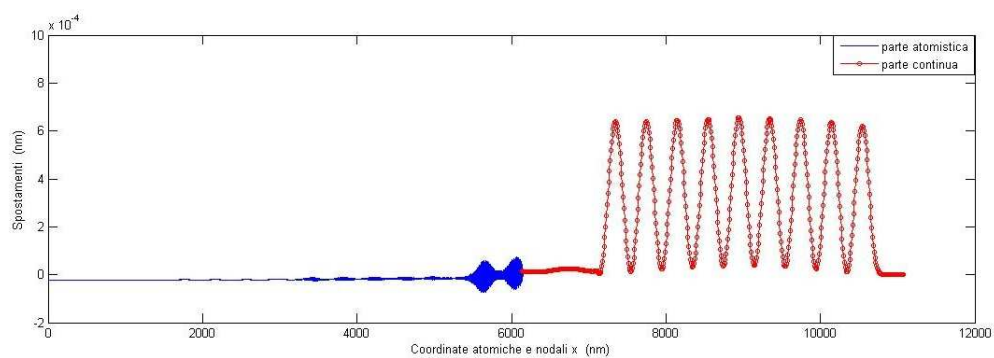


Figura 6.17: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con una zona di sovrapposizione pari a 3 nm e con un'onda formata da quattro periodi.

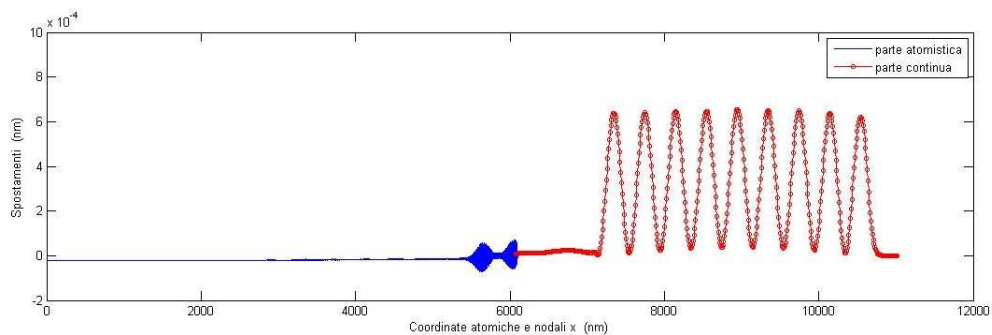
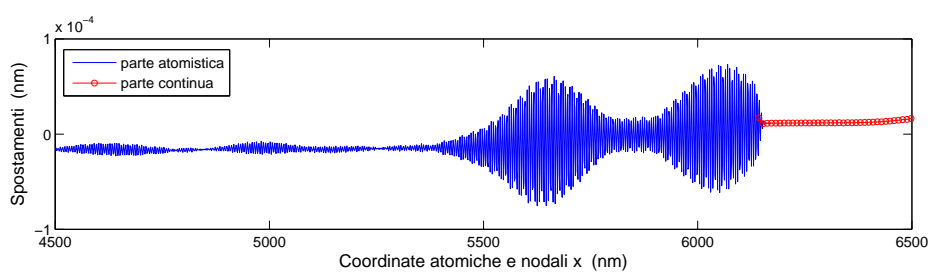
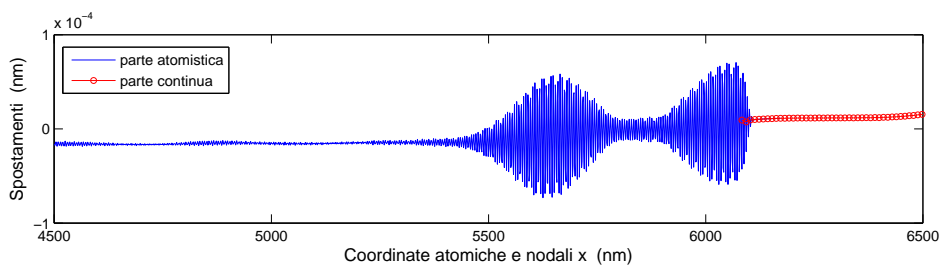


Figura 6.18: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con una zona di sovrapposizione pari a 9 nm e con un'onda formata da quattro periodi.

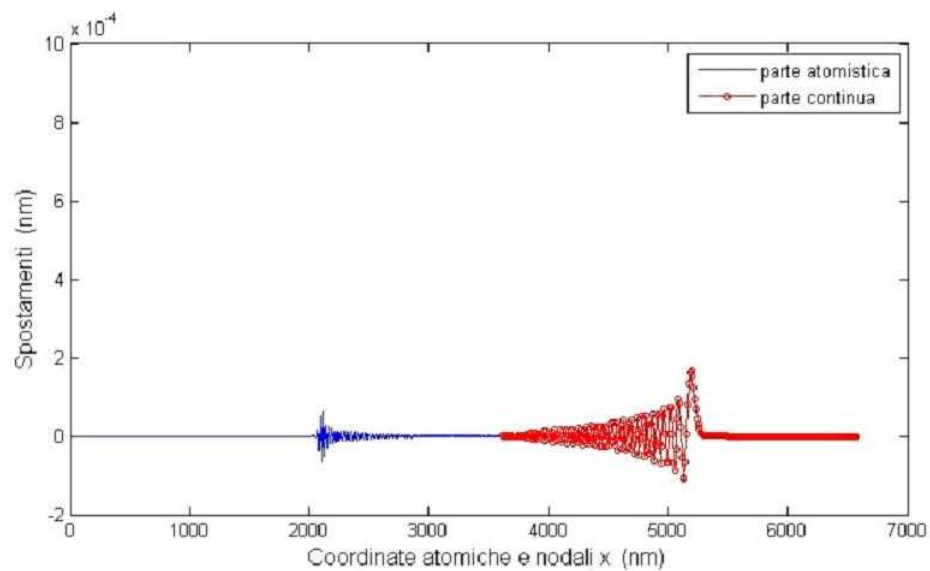


(a) 3nm

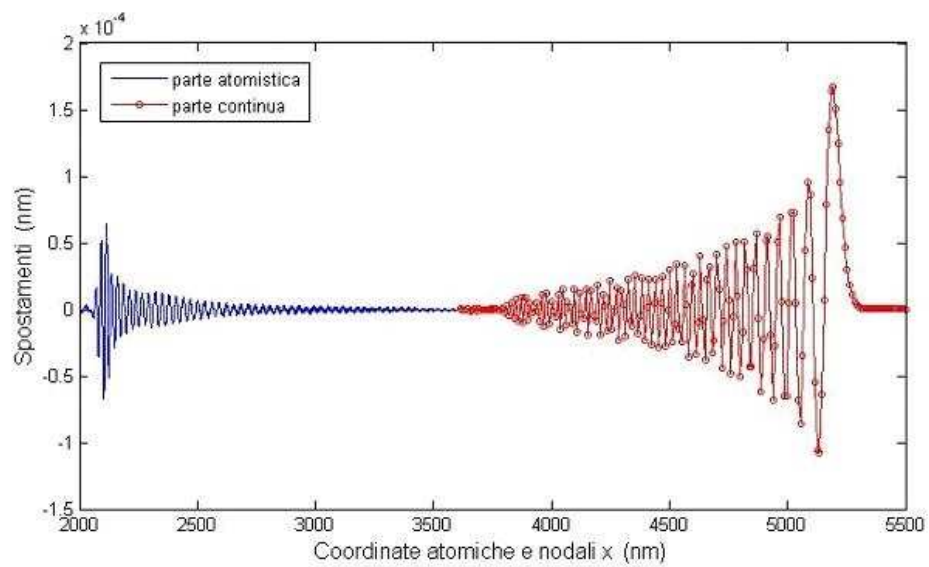


(b) 9nm

Figura 6.19: Ingrandimento degli spostamenti finali per evidenziare le riflessioni nel dominio atomistico con un'onda formata da quattro periodi.

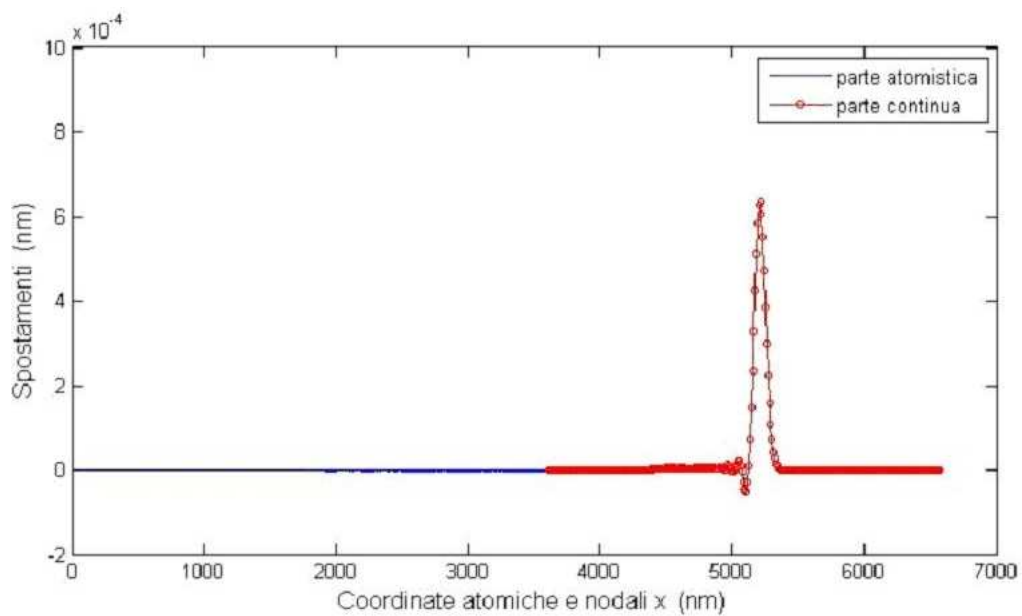


(a) spostamenti finali complessivi

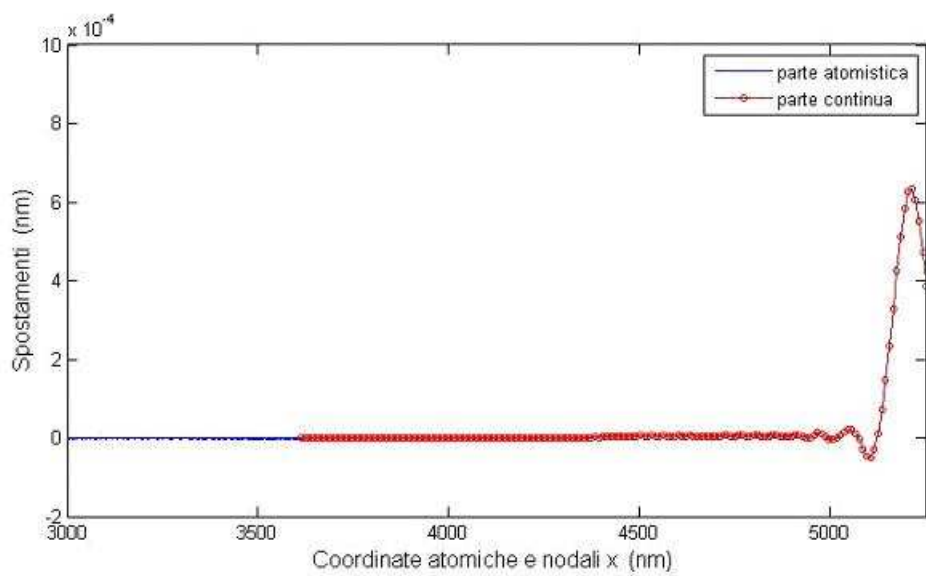


(b) ingrandimento degli spostamenti atomici

Figura 6.20: Propagazione di un'onda comprendente nella sua lunghezza due nodi



(a) spostamenti finali complessivi



(b) ingrandimento degli spostamenti atomici

Figura 6.21: Propagazione di un'onda comprendente nella sua lunghezza dieci nodi

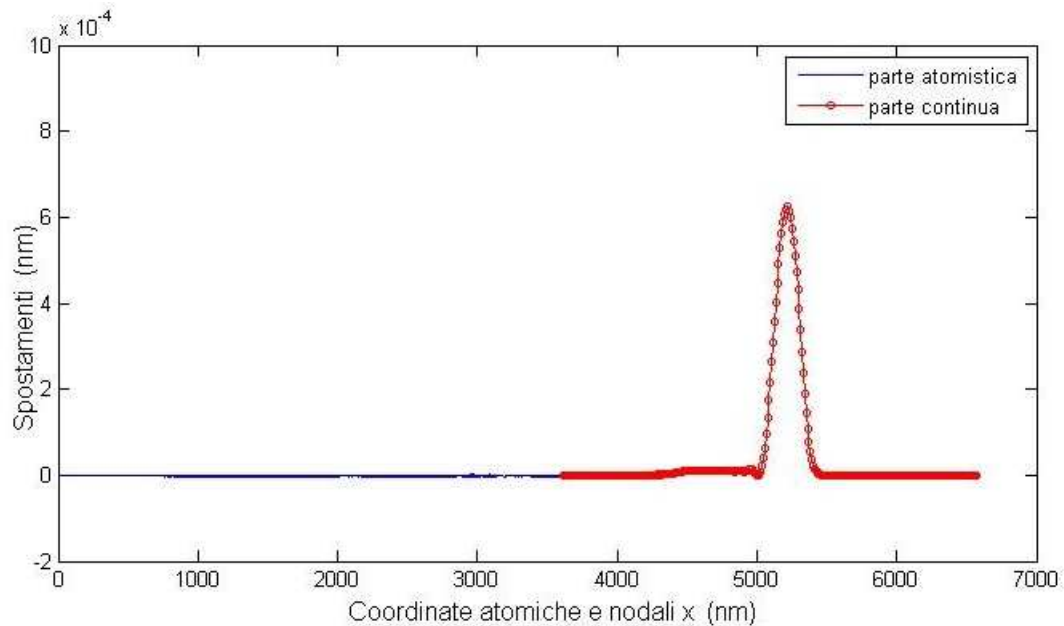


Figura 6.22: Propagazione di un'onda comprendente nella sua lunghezza venti nodi.

#### 6.4.2 Comportamento della zona di interfaccia al variare della funzione di forma

Tale applicazione vuole analizzare il campo degli spostamenti finali in seguito ad un cambiamento delle funzioni di forma. Fino ad ora, si sono sempre considerate funzioni di forma lineari; analizzeremo quindi il comportamento dell'onda nel caso queste siano quadratiche o cubiche. Si ricorda che la definizione di funzioni di forma di tale tipologia è stata data nel Capitolo 5. Applicando quindi funzioni di forma quadratiche, Figure da (6.24(a)) a (6.27(b)) e modificando lo spessore della zona di sovrapposizione da 3 fino a 12 elementi si nota che l'onda si propaga in maniera simile al caso di funzioni di forma lineari. Precisamente, pur notando che sono necessari nove elementi affinché le riflessioni siano di lieve entità, la lunghezza effettiva che comprende tale zona di interfaccia è in realtà il doppio rispetto a quella del caso con funzioni di forma lineari. Infatti la distanza tra due nodi rimane inalterata



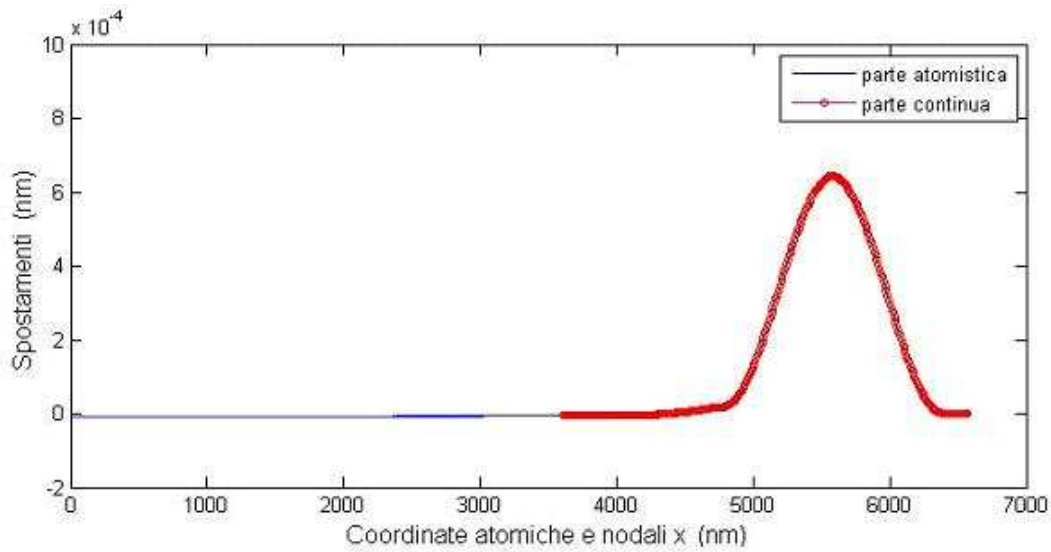
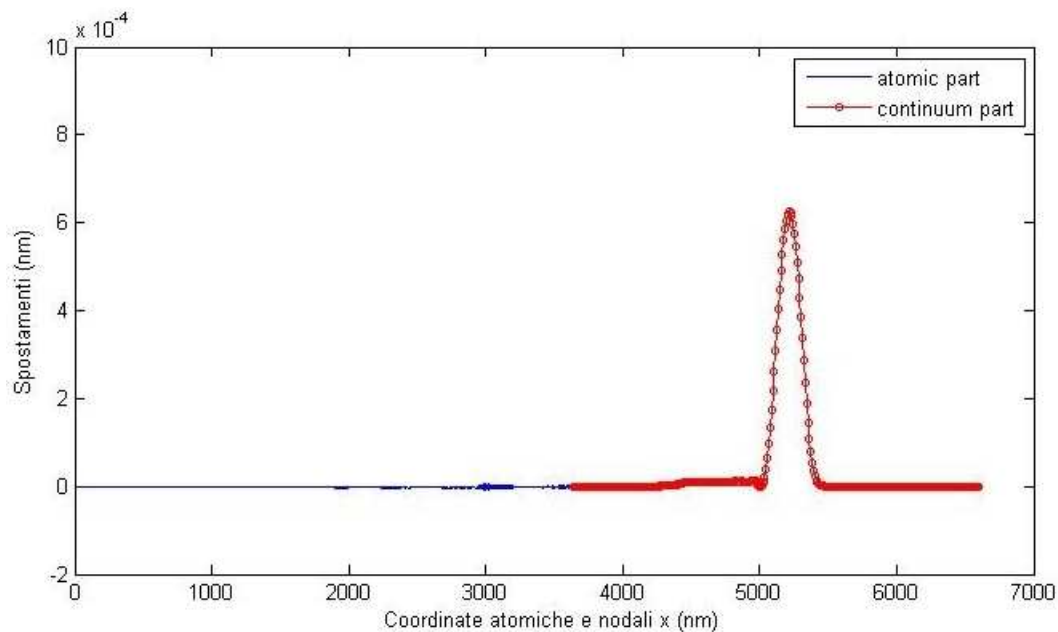
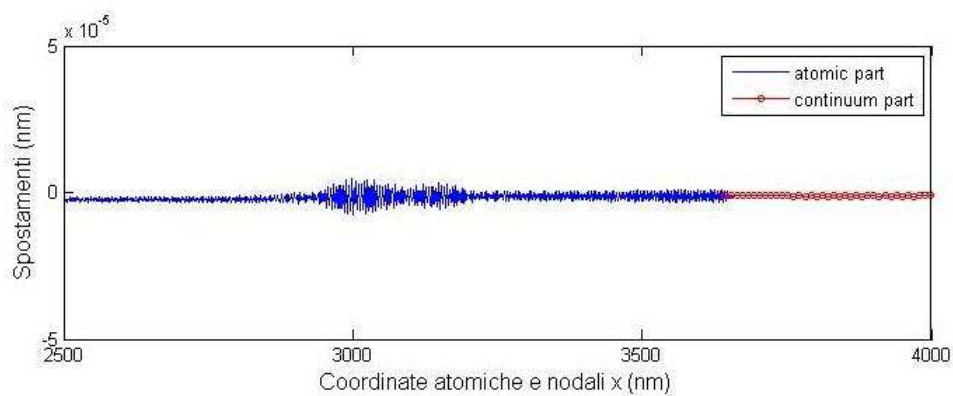


Figura 6.23: Propagazione di un'onda comprendente nella sua lunghezza centosessanta nodi.

nei due casi, ma per funzioni di forma quadratiche l'elemento comprende tre nodi quindi la sua lunghezza è due volte quella dell'elemento a due nodi. Ripetendo la stessa analisi con funzioni di forma cubiche, Figure da (6.28(a)) a (6.30(b)) si osserva che esse non riescono a descrivere il passaggio dell'onda tra i due domini i quali non combaciano più nella zona di sovrapposizione. Tale comportamento risulta maggiore all'aumentare del numero degli elementi che compongono la zona di interfaccia. Non si riesce pertanto in questo a caso trovare un legame tra l'ordine della funzione di forma e l'estensione della zona di sovrapposizione.

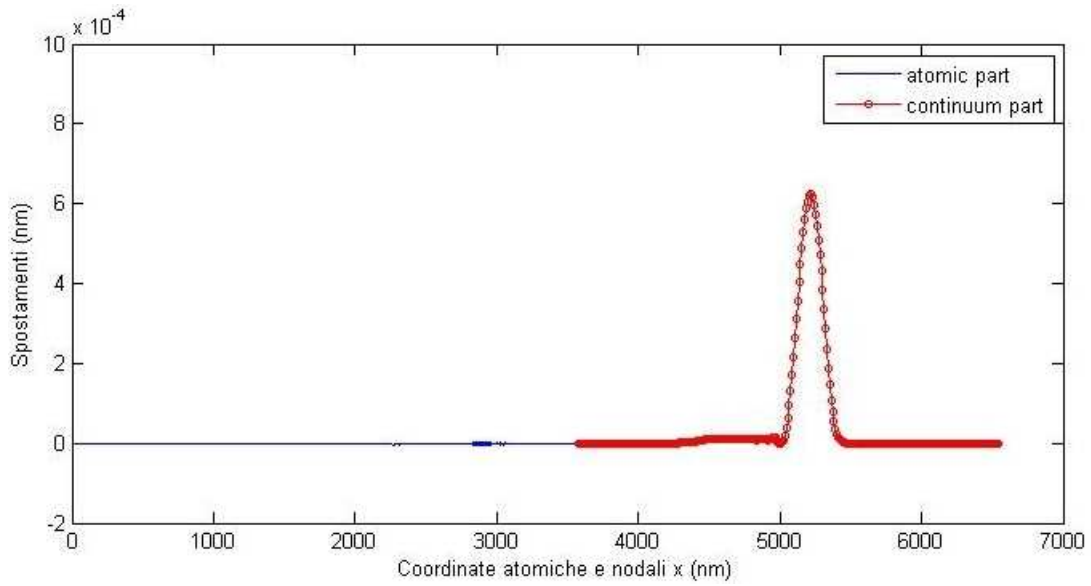


(a) spostamenti finali complessivi

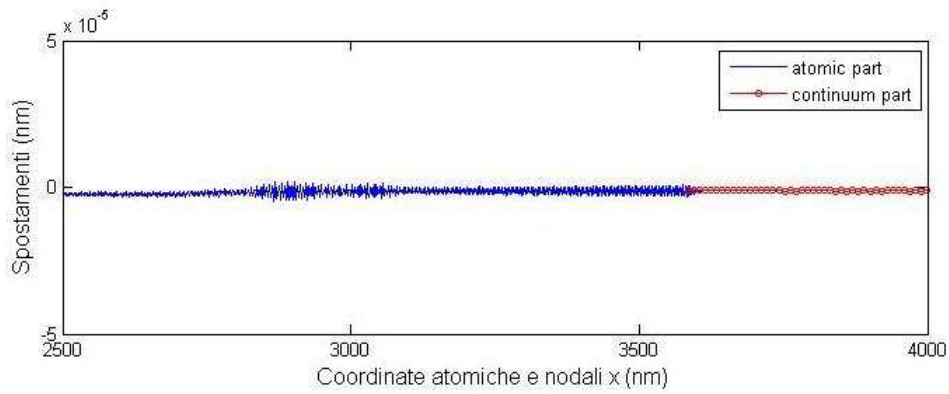


(b) ingrandimento degli spostamenti atomici

Figura 6.24: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con funzioni di forma quadratiche e lunghezza della zona di sovrapposizione pari a 3 elementi.

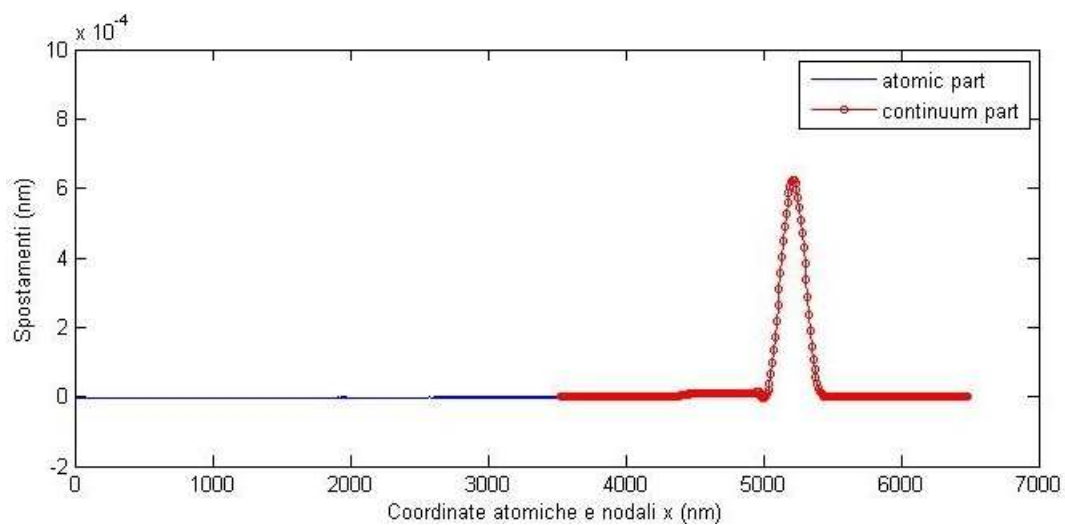


(a) spostamenti finali complessivi

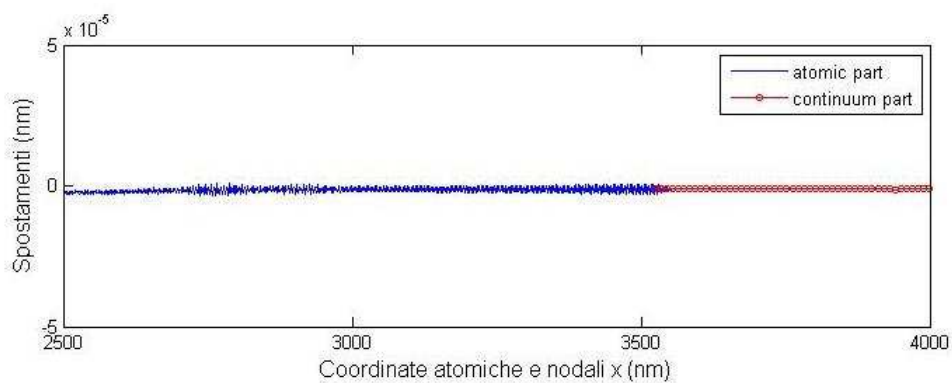


(b) ingrandimento degli spostamenti atomici

Figura 6.25: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con funzioni di forma quadratiche e lunghezza della zona di sovrapposizione pari a 6 elementi.

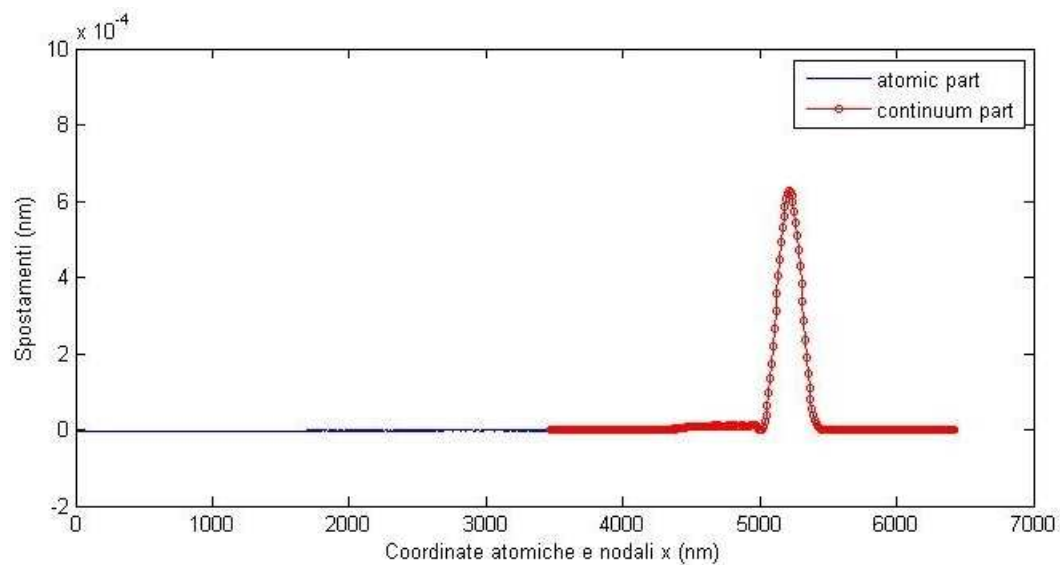


(a) spostamenti finali complessivi

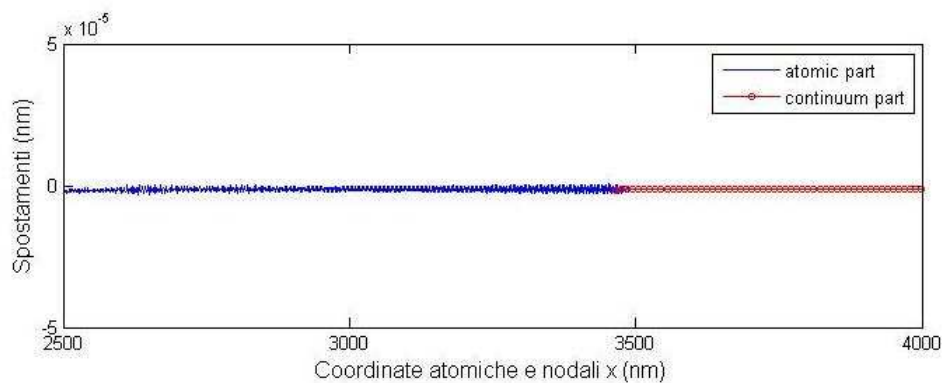


(b) ingrandimento degli spostamenti atomici

Figura 6.26: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con funzioni di forma quadratiche e lunghezza della zona di sovrapposizione pari a 9 elementi.

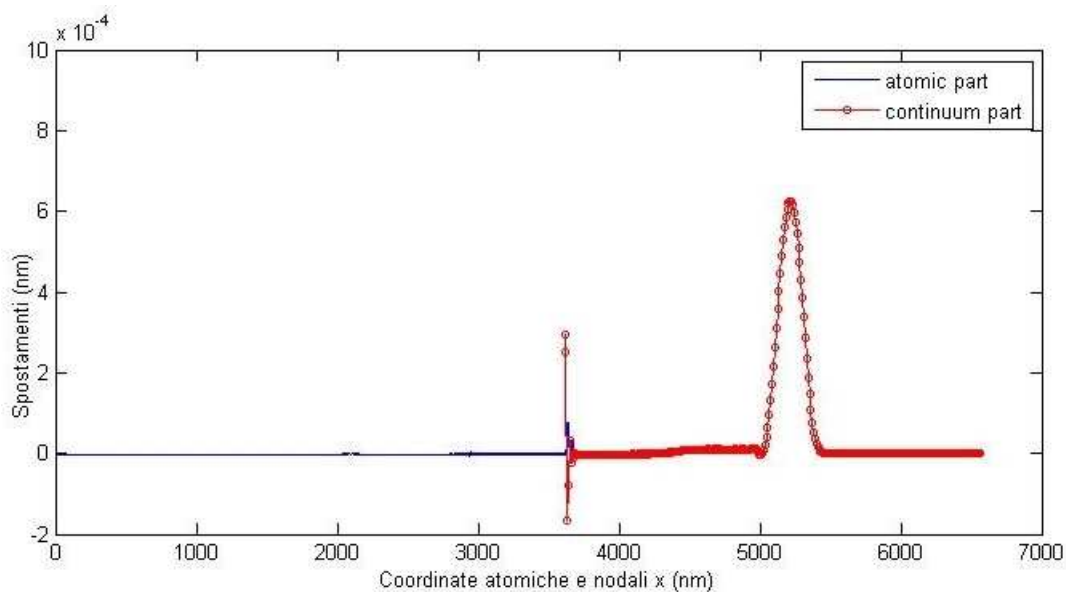


(a) spostamenti finali complessivi

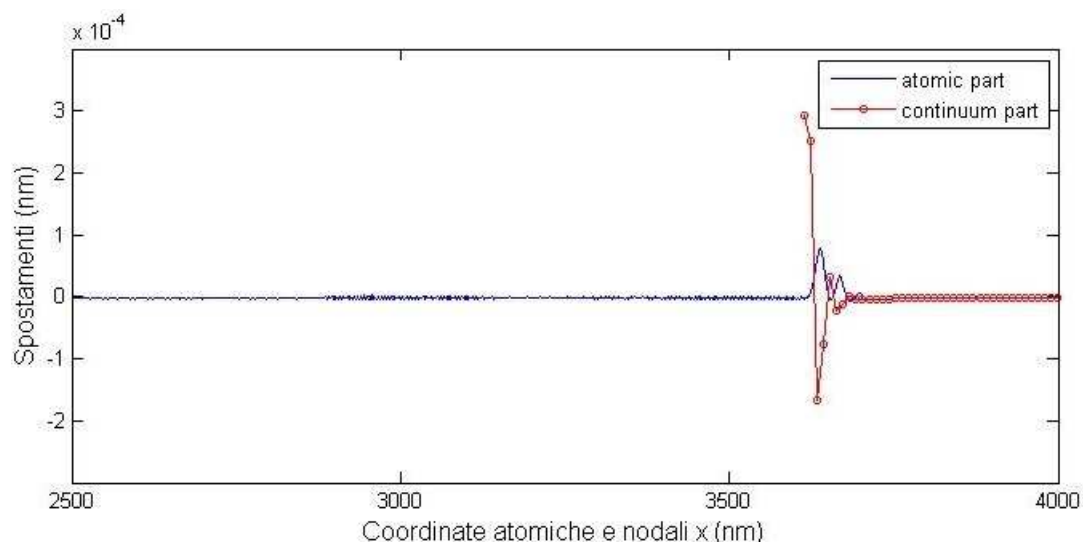


(b) ingrandimento degli spostamenti atomici

Figura 6.27: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con funzioni di forma quadratiche e lunghezza della zona di sovrapposizione pari a 12 elementi.

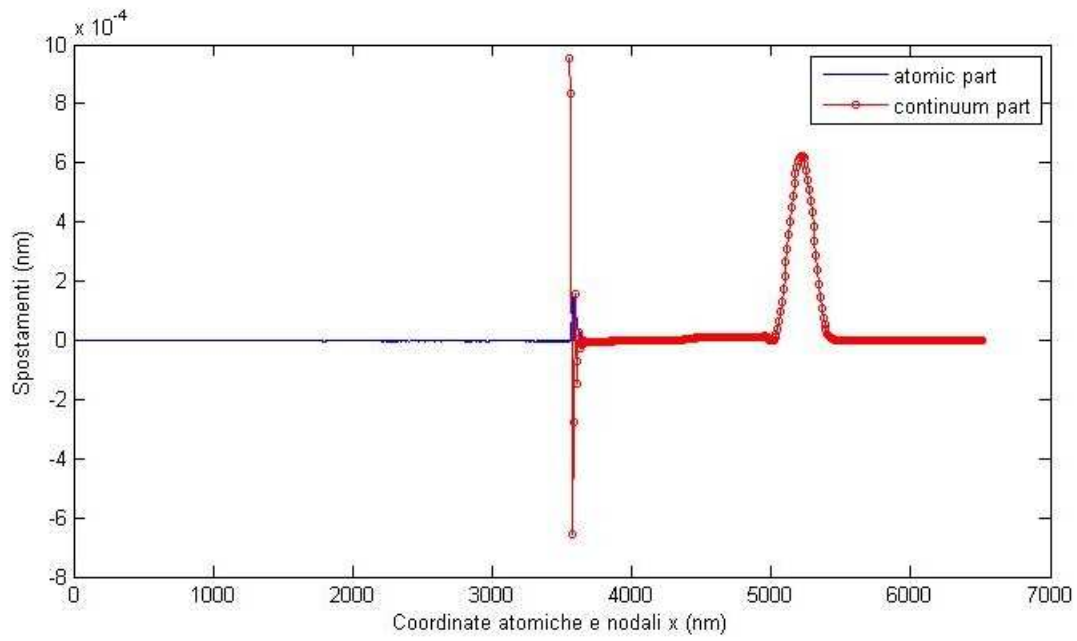


(a) spostamenti finali complessivi

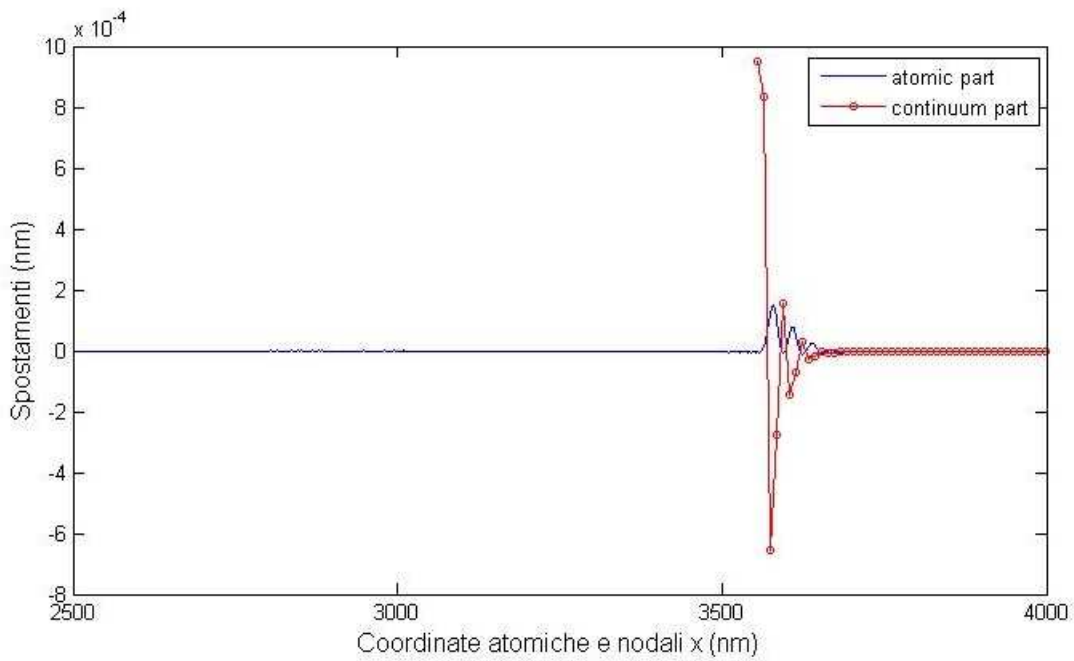


(b) ingrandimento degli spostamenti atomici

Figura 6.28: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con funzioni di forma cubiche e lunghezza della zona di sovrapposizione pari a 3 elementi.

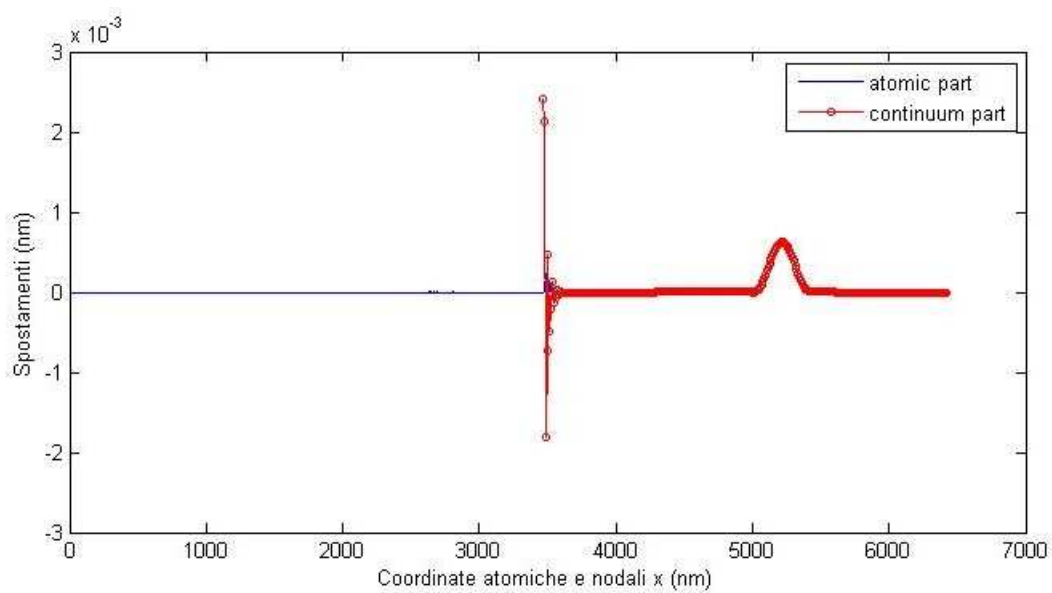


(a) spostamenti finali complessivi

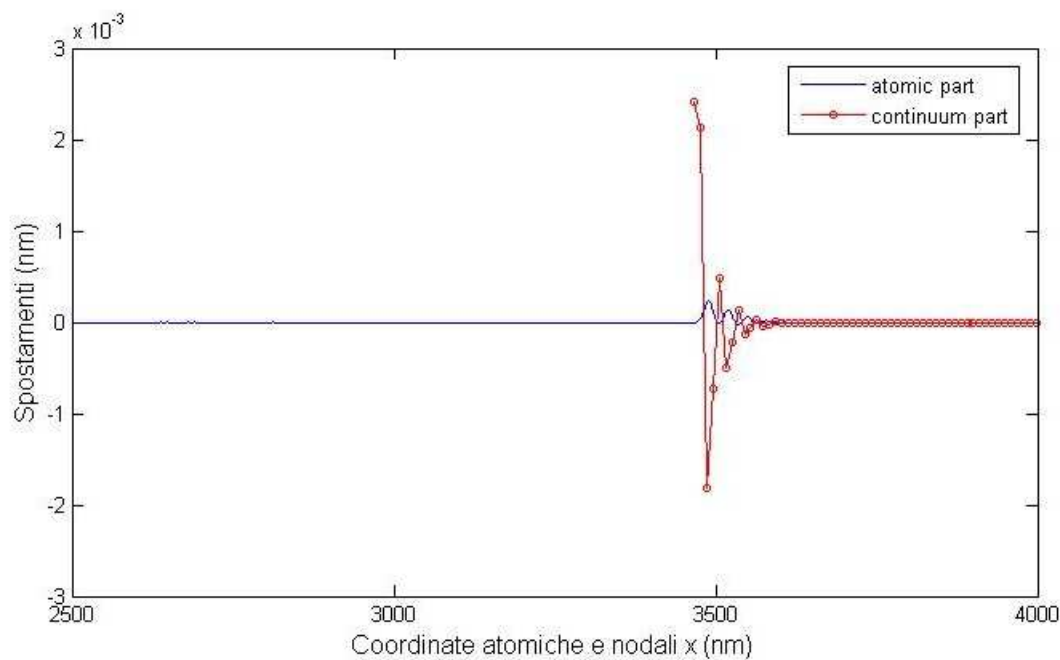


(b) ingrandimento degli spostamenti atomici

Figura 6.29: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con funzioni di forma cubiche e lunghezza della zona di sovrapposizione pari a 6 elementi.



(a) spostamenti finali complessivi



(b) ingrandimento degli spostamenti atomici

Figura 6.30: Andamento degli spostamenti finali ottenuti con funzioni di forma cubiche e lunghezza della zona di sovrapposizione pari a 9 elementi.



# Appendice A

## Teorema di Gauss

### Caso monodimensionale:

Tale teorema indica che, per una funzione  $f(x)$  di classe  $C^0$  l'integrale delle derivate è definito da

$$\int_a^b f_{,x} dx = f(b) - f(a) \quad (1)$$

e prende il nome di teorema fondamentale del calcolo integrale. Se la funzione è di classe  $C^{-1}$  invece:

$$\int_a^b f_{,x} dx = f(b) - f(a) + \sum_i \llbracket f(x_i) \rrbracket \quad (2)$$

### Caso generale:

Il teorema di Gauss afferma che, quando  $f(\mathbf{X})$  è una funzione di classe  $C^0$ , allora nella configurazione di riferimento abbiamo:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Gamma} n_i f(\mathbf{x}) d\Gamma \quad \text{o} \quad \int_{\Omega} \nabla f(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{n} f(\mathbf{x}) d\Gamma \quad (3)$$

ossia trasforma un integrale di volume in un integrale di superficie.

L'equazione suddetta è valida per un tensore di qualsiasi ordine; in particolare se ho un tensore del primo ordine si ha:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial g_i(\mathbf{x})}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Gamma} n_i g_i(\mathbf{x}) d\Gamma \quad \text{o} \quad \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{g}(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{g}(\mathbf{x}) d\Gamma \quad (4)$$

La (4) è spesso conosciuta come il teorema della divergenza.

Il teorema è valido anche per gradienti del campo vettoriale per i quali si ha:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial g_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Gamma} n_j g_i(\mathbf{x}) d\Gamma \quad \circ \quad \int_{\Omega} \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{g}(\mathbf{x}) d\Gamma \quad (5)$$

e per tensori di vario ordine.

Si noti che se la funzione  $f(\mathbf{x})$  non è differenziabile, cioè le sue derivate sono discontinue lungo un numero finito di linee (in 2D) o superfici (in 3D) allora  $\Omega$  deve essere diviso in sottodomini così che le funzioni siano di classe  $C^0$  all'interno di ogni sottodominio. Le discontinuità nelle derivate delle funzioni si troveranno tra le interfacce dei sottodomini. Il teorema di Gauss è applicato ad ogni sottodominio e, sommando i risultati si ottengono le relazioni analoghe alle (3) e alle (4):

$$\int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Gamma} f n_i d\Gamma + \int_{\Gamma_{int}} \llbracket f n_i \rrbracket d\Gamma \quad \int_{\Omega} \frac{\partial g_i}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Gamma} n_i g_i d\Gamma + \int_{\Gamma_{int}} \llbracket n_i g_i \rrbracket d\Gamma \quad (6)$$

dove  $\Gamma_{int}$  è l'insieme delle interfacce tra i sottodomini e  $\llbracket f \mathbf{n} \rrbracket$  e  $\llbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{g} \rrbracket$  sono i salti (jumps) definiti da:

$$\begin{aligned} \llbracket f \mathbf{n} \rrbracket &= f^A \mathbf{n}^A + f^B \mathbf{n}^B \quad ; \quad \llbracket f \mathbf{n} \rrbracket \cdot \mathbf{n}^A = f^A - f^B \\ \llbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{g} \rrbracket &= \llbracket g_i n_i \rrbracket = g_i^A n_i^A + g_i^B n_i^B = (g_i^A - g_i^B) n_i^A = (g_i^B - g_i^A) n_i^B \end{aligned} \quad (7)$$

$A$  e  $B$  rappresentano due sottodomini che confinano con l'interfaccia  $\Gamma_{int}$ ,  $\mathbf{n}^A$  e  $\mathbf{n}^B$  sono le normali esterne ai due sottodomini,  $f^A$  e  $f^B$  sono i valori della funzione nei punti adiacenti all'interfaccia nei sottodomini  $A$  e  $B$ .

# Appendice B

## Equazione di conservazione del momento angolare

La forma integrale dell'equazione di conservazione del momento angolare è ottenuta come prodotto vettoriale di ogni termine dell'equazione del corrispondente principio del momento lineare con il vettore posizione  $\mathbf{x}$ :

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \times \rho \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{x} \times \rho \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{x} \times \mathbf{t} d\Gamma \quad (1)$$

In altri termini l'equazione di conservazione del momento angolare richiede che il tensore di Cauchy sia un tensore simmetrico, ossia:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \quad \text{o} \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (2)$$

Quindi il tensore di Cauchy rappresenta, in un problema bidimensionale, un tensore in tre variabili distinte, mentre in un problema tridimensionale con sei variabili.

È noto che il tensore di Cauchy e la tensione nominale (primo tensore di Piola Kirchhoff), definita sulla configurazione di riferimento, sono definite dalle rispettive relazioni:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} d\Gamma = \mathbf{t} d\Gamma = d\mathbf{f} \quad ; \quad \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{P} d\Gamma_0 = \mathbf{t}_0 d\Gamma_0 = d\mathbf{f} \quad (3)$$

Uguagliando le (3) e tenendo presente la relazione:

$$\mathbf{n} d\Gamma = J \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{F}^{-1} d\Gamma_0 \quad (4)$$

si ottiene:

$$J\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} d\Gamma_0 = \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{P} d\Gamma_0 \quad (5)$$

e, con le opportune semplificazioni:

$$\mathbf{P} = J_{\mathbf{F}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad ; \quad \boldsymbol{\sigma} = J^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{P} \quad (6)$$

Utilizzando la seconda relazione delle (5) e inserendola nella (2) abbiamo:

$$J^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{P} = (J^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{P})^T \quad (7)$$

Moltiplicando entrambi i membri per  $J$  e calcolando la trasposta della parentesi si ottiene la relazione generale dell'equazione del momento angolare

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P}^T \cdot \mathbf{F}^T \quad \text{o} \quad F_{ik} P_{kj} = P_{ik}^T F_{kj}^T = F_{jk} P_{ki} \quad (8)$$

Nel caso bidimensionale essa si presenta sotto la forma

$$F_{11} P_{12} + F_{12} P_{22} = F_{21} P_{11} + F_{22} P_{21} \quad (9)$$

Nel caso in cui si esprima la tensione nominale in funzione del secondo tensore di Piola-Kirchhoff (PK2),  $\mathbf{P} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}^T$ , si ottiene

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}^T = \mathbf{F} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{F}^T \quad (10)$$

È utile notare che la conservazione del momento angolare richiede che il tensore PK2 sia simmetrico.

# Appendice C

## Equazione di conservazione dell'energia

Il principio di conservazione dell'energia, cioè il principio di bilancio dell'energia, afferma che la velocità di cambiamento dell'energia totale è equivalente al lavoro fatto dalle forze di massa e dalle forze superficiali più l'energia di calore data ad un corpo da un flusso di calore e da altre sorgenti di calore. Si indichi con  $\rho w_{int}$  l'energia interna per unità di volume, dove  $w_{int}$  è l'energia interna per unità di massa. Il flusso di calore per unità di area è indicato dal vettore  $\mathbf{q}$  e la sorgente di calore per unità di volume è indicata da  $\rho s$ . La conservazione dell'energia richiede che la velocità di cambiamento dell'energia nel corpo, che include sia energia interna che cinetica, sia uguale all'energia delle forze applicate e all'energia aggiunta al corpo dalla conduzione di calore (e da altre sorgenti di calore).

La velocità di cambiamento dell'energia totale nel corpo è data da:

$$\mathcal{P}^{tot} = \mathcal{P}^{int} + \mathcal{P}^{kin} \quad (1)$$

con

$$\mathcal{P}^{int} = \frac{D}{DT} \int_{\Omega} \rho w^{int} d\Omega \quad \mathcal{P}^{kin} = \frac{D}{DT} \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} d\Omega \quad (2)$$

che indicano rispettivamente la velocità di cambiamento dell'energia interna e cinetica. La velocità del lavoro fatto dalle forze di massa e dalle forze di

superficie è:

$$\mathcal{P}^{ext} = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \rho \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{t} d\Gamma = \int_{\Omega} v_i \rho b_i d\Omega + \int_{\Gamma} v_i t_i d\Gamma \quad (3)$$

L'energia sviluppata dalla sorgente di calore  $s$  e dal flusso di calore  $\mathbf{q}$  è:

$$\mathcal{P}^{heat} = \int_{\Omega} \rho s d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} d\Gamma = \int_{\Omega} \rho s d\Omega - \int_{\Gamma} n_i q_i d\Gamma \quad (4)$$

dove il segno del flusso termico di calore è negativo in quanto il flusso di calore positivo è uscente dal corpo. La relazione della conservazione dell'energia è:

$$\mathcal{P}^{tot} = \mathcal{P}^{ext} + \mathcal{P}^{heat} \quad (5)$$

cioè la velocità di cambiamento dell'energia totale nel corpo (consistente di energia interna e cinetica) è uguale alla velocità di lavoro fatto dalle forze esterne e dalla velocità di energia sviluppata da un flusso di calore e da sorgenti di energia. Questo è conosciuto come primo principio della termodinamica.

La disposizione dell'energia interna dipende dal materiale. Se il materiale è elastico essa è immagazzianta come energia interna elastica ed è totalmente recuperabile dopo lo scarico. In un materiale elasto-plastico, parte dell'energia interna è convertita in calore e parte dissipata nel modificare la struttura interna del materiale.

Sostituendo le (1,2,3,4) nella (5) si ottiene l'equazione globale di conservazione dell'energia:

$$\frac{D}{DT} \int_{\Omega} \left( \rho w^{int} + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \rho \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{t} d\Gamma + \int_{\Gamma} \rho s d\Gamma - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} d\Gamma \quad (6)$$

Facendo riferimento alla (6), ma nella configurazione di riferimento, possiamo scrivere

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} \left( \rho_0 w^{int} + \frac{1}{2} \rho_0 \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) d\Omega_0 \\ & = \int_{\Omega_0} \mathbf{v} \cdot \rho_0 \mathbf{b} d\Omega_0 + \int_{\Gamma_0} \mathbf{v} \cdot \mathbf{t}_0 d\Gamma_0 + \int_{\Gamma_0} \rho_0 s d\Gamma_0 - \int_{\Gamma_0} \mathbf{n}_0 \cdot \tilde{\mathbf{q}} d\Gamma_0 \end{aligned} \quad (7)$$

Il flusso di calore nella formulazione Lagrangiana totale è definita come energia per unità di area di riferimento ed è indicata da  $\tilde{\mathbf{q}}$  per distinguerla dal flusso di calore per unità di area corrente; essi sono legati tra loro tramite la relazione:

$$\tilde{\mathbf{q}} = J^{-1} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{q} \quad (8)$$

L'energia interna per unità di volume iniziale è collegata all'energia interna per unità di volume corrente nella (6) come segue:

$$\rho_0 w^{int} d\Omega_0 = \rho_0 w^{int} J^{-1} d\Omega = \rho_0 w^{int} d\Omega \quad (9)$$

Nella (7) la derivata temporale a primo membro può essere portata dentro il segno di integrale in quanto il dominio è fissato. Si ha quindi:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} \left( \rho_0 w^{int} + \frac{1}{2} \rho_0 \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) d\Omega_0 \\ &= \int_{\Omega_0} \left( \rho_0 \frac{\partial w^{int}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} + \rho_0 \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \right) d\Omega_0 \end{aligned} \quad (10)$$

Il secondo termine a destra della (7) può essere modificato come segue utilizzando la relazione

$$\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{P} d\Gamma_0 = \mathbf{t}_0 d\Gamma_0 \quad (11)$$

e il Teorema di Gauss:

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_0} \mathbf{v} \cdot \mathbf{t}_0 d\Gamma_0 &= \int_{\Gamma_0} v_j t_j^0 d\Gamma_0 = \int_{\Gamma_0} v_j n_i^0 P_{ij} d\Gamma_0 \\ &= \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial X_i} (v_j P_{ij}) d\Omega_0 = \int_{\Omega_0} \left( \frac{\partial v_j}{\partial X_i} P_{ij} + v_j \frac{\partial P_{ij}}{\partial X_i} \right) d\Omega_0 \\ &= \int_{\Omega_0} \left( \frac{\partial F_{ji}}{\partial t} P_{ij} + \frac{\partial P_{ij}}{\partial X_i} v_j \right) d\Omega_0 = \int_{\Omega_0} \left( \frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial t} : \mathbf{P} + (\nabla_0 \cdot \mathbf{P}) \cdot \mathbf{v} \right) d\Omega_0 \end{aligned} \quad (12)$$

Applicando quindi il teorema di Gauss al termine del flusso di calore dell'Equazione (7) otteniamo:

$$\int_{\Gamma_0} \left( \rho_0 \frac{\partial w^{int}}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial t} : \mathbf{P} + \nabla_0 \cdot \tilde{\mathbf{q}} - \rho_0 s + \left( \rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} - \nabla_0 \cdot \mathbf{P} - \rho_0 \mathbf{b} \right) \cdot \mathbf{v} \right) d\Omega_0$$

(13)

Il termine contenuto nella parentesi più interna è l'espressione dell'equazione del momento pertanto è nullo; di conseguenza, data l'arbitrarietà del dominio l'integrale svanisce e si ottiene:

$$\rho_0 \dot{w}^{int} = \rho \frac{\partial w^{int}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \dot{\mathbf{F}}^T : \mathbf{P} - \nabla_0 \cdot \tilde{\mathbf{q}} + \rho_0 s \quad (14)$$

e in assenza di conduzione di calore o sorgenti di calore:

$$\rho_0 \dot{w}^{int} = F_{ji} \dot{P}_{ij} = \dot{\mathbf{F}}^T : \mathbf{P} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}^T \quad (15)$$

L'equazione (14) e (15) rappresentano le equazioni di conservazione di energia in coordinate Lagrangiane.



# Appendice D

## Metodo dei Moltiplicatori di Lagrange

Il metodo dei moltiplicatori di Lagrange o *Lagrange Multiplier Method* ha come scopo quello di definire le condizioni al contorno associate all'equazione differenziale che descrive il problema da trattare. Nel metodo le condizioni al contorno sono aggiunte alla funzione tramite i moltiplicatori di Lagrange. In problemi conservativi tale funzione, cioè la funzione da minimizzare, é rappresentata dal potenziale, come espresso nella relazione (1):

$$W_L = W + \lambda_I g_I \equiv W + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g} \quad (1)$$

dove  $\boldsymbol{\lambda} = \{\lambda_I\}$  sono i moltiplicatori di Lagrange. I punti di equilibrio si trovano quindi imponendo:

$$0 = dW_L = dW + d(\lambda_I g_I) \equiv W + d(\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}) \quad \forall d\mathbf{d} \quad \text{e} \quad \forall d\boldsymbol{\lambda} \quad (2)$$

Da notare che un punto di equilibrio stabile é un punto di minimo rispetto a  $\mathbf{d}$  e un punto di massimo rispetto a  $\boldsymbol{\lambda}$ , cioè é un punto di sella. Le derivate di (1) rispetto a  $\mathbf{d}$  e  $\boldsymbol{\lambda}$  si annullano in corrispondenza del punto di stazionarietá, cosí che:

$$\frac{\partial W_L}{\partial d_a} = \frac{\partial W}{\partial d_a} + \lambda_I \frac{\partial g_I}{\partial d_a} \equiv r_a + \lambda_I \frac{\partial g_I}{\partial d_a} = 0 \quad a = 1, n_{dof} \quad (3)$$

$$g_I = 0 \quad a = 1, n_C \quad (4)$$

Le relazioni (3) e (4) indicano un sistema di  $n_{dof} + n_C$  equazioni algebriche. Riscrivendo la (3) per mezzo della (4) otteniamo:

$$f_a^{int} - f_a^{ext} + \lambda_I \frac{\partial g_I}{\partial d_a} = 0 \quad (5)$$

dove si vede che le condizioni al contorno introducono delle forze addizionali  $\lambda_I \partial g_I / \partial d_a$  che sono combinazioni lineari dei moltiplicatori di Lagrange. Se i vincoli sono lineari, le forze addizionali sono indipendenti dagli spostamenti nodali.

Per ottenere un modello lineare per le relazioni (3) e (4) consideriamo la loro espansione di Taylor e imponiamo che sia nulla:

$$r_a + \lambda_I \frac{\partial g_I}{\partial d_a} + \frac{\partial r_a}{\partial d_b} \Delta d_b + \frac{\partial g_I}{\partial d_a} \Delta \lambda_I + \lambda_I \frac{\partial^2 g_I}{\partial d_a \partial d_b} \Delta d_b = 0 \quad (6)$$

$$g_I + \frac{\partial g_I}{\partial d_a} \Delta d_a = 0 \quad (7)$$

In notazione matriciale definiamo quindi:

$$\mathbf{G} = [G_{Ia}] = \left[ \frac{\partial g_I}{\partial d_a} \right] \quad \mathbf{H} = [H_{ab}]_I = \left[ \frac{\partial^2 g_I}{\partial d_a \partial d_b} \right] \quad (8)$$

Pertanto le relazioni (6) e (7) diventano:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} + \lambda_I \mathbf{H}_I & \mathbf{G}^T \\ \mathbf{G} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{d} \\ \Delta \lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{r} - \lambda^T \mathbf{G} \\ -\mathbf{g} \end{Bmatrix} \quad (9)$$

dove  $\mathbf{A} = \partial^2 W / \partial \mathbf{d} \partial \mathbf{d}$ . Nel caso di problemi statici lineari con vincoli lineari  $\mathbf{G} \mathbf{d} = \mathbf{a}$ , l'equazione (9) diventa:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G}^T \\ \mathbf{G} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{d} \\ \lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}^{ext} \\ \mathbf{a} \end{Bmatrix} \quad (10)$$

avendo assunto:  $\mathbf{A} = \mathbf{K}$ ,  $\mathbf{K}$  matrice di rigidezza;  $\mathbf{H}_I = \mathbf{0}$ ;  $\Delta \mathbf{d} = \mathbf{d}$  e  $\Delta \lambda = \lambda$ . Una variante di tale metodo prende il nome di *Augmented Lagrangian Method* dove nell'equazione (1) viene considerato un termine aggiuntivo  $\beta$  definito 'penalty parameter'. Quindi, per un dato  $\beta$ , si determinano gli spostamenti  $\mathbf{d}$  e i moltiplicatori di Lagrange  $\lambda$  così che:

$$W_{AL}(\mathbf{d}, \lambda, \beta) = W(\mathbf{d}) + \lambda^T \mathbf{g}(\mathbf{d}) + \frac{1}{2} \beta \mathbf{g}^T(\mathbf{d}) \mathbf{g}(\mathbf{d}) \quad (11)$$

é punto di minimo. Si nota che se  $\beta = 0$  si ricade nel metodo precedente, mentre se  $\lambda = 0$  il metodo prende il nome di *Penalty method*. In esso l'equazione per ottenere il punto di stazionarietà é:

$$W_P(\mathbf{d}) = W(\mathbf{d}) + \frac{1}{2}\beta \mathbf{g}_I(\mathbf{d})\mathbf{g}_I(\mathbf{d}) \equiv \frac{1}{2}\beta \mathbf{g}^T \mathbf{g} \quad (12)$$



# Bibliografia

- [1] Luca Bertolini, Fabio Bolzoni, Marina Cabrini, Piero Pedferri, Tecnologia dei materiali ceramici, polimerici e compositi, CittàStudiEdizioni, 2000.
- [2] Autar K.Kaw, Mechanics of Composite materials, CRC Press, 1997.
- [3] Series in Materials Science and Engineering, Metal and Ceramic matrix Composites, Series Editors: B Cantor and M J Goringe, 2004
- [4] Donald R. Askeland, Pradeep P. Phulè, The Science and Engineering of Materials, Fourth Edition, Brooks/Cole.
- [5] S.P.Xiao, T.Belytschko, A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 193 (2004) 1645-1669.
- [6] T.Belytschko, S.P.Xiao, Multiscale Analysis with Atomistic/Continuum for Fracture, Computational Mechanics, WCCM VI in conjunction with APCOM'04,Sept.5-10,2004,Beijing, China
- [7] S.Tang, T.Y.Hou, W.K.Liu, A mathematical framework of the bridging scale method, Int. J. Numer. Meth. Engng 2006, 65:1688-1713
- [8] S.Zhang, R.Khare, Q.Lu, T.Belytschko, A bridging domain and strain computation method for coupled atomistic-continuum modelling of solids, Int. J. Numer. Engng. 2007, 70:913-933.

- 
- [9] E.B.Tadmor, R.Philips, M.Ortiz, Hierarchical modeling in the mechanics of materials, *International Journal of solids and Structures* 37 (2000) 379-389.
- [10] E.B.Tadmor, M.Ortiz, R.Philips, Quasicontinuum analysis of defects in solids, *Phil.Mag.A*, 73 (6) (1996) 1529-63.
- [11] R.E.Miller, E.B.Tadmor, The quasicontinuum method: overview, applications and current directions, *J.Comput.-Aided Mater.Des.* 9 (3), 203-239, 2002.
- [12] W.A.Curtin, R.E.Miller, Atomistic/Continuum coupling in computational materials science, *Model.Simulat.Mater.Sci.Engrg.* 11 (2003) R33-R68.
- [13] J.Knap, M.Ortiz, An analysis of the quasicontinuum method, *J.Mech.Phys.Solids* 49 (9) (2001) 1899-1923.
- [14] G.J.Wagner, W.K.Liu, Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition, *Journal of Computational Physics* 190 (2003) 249-274.
- [15] W.K.Liu, E.G.Karpov, S.Zhang, H.S.Park, An introduction to computational nanomechanics and materials, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 193 (2004) 1529-1578.
- [16] T.Belytschko, S.P.Xiao, Coupling Methods for Continuum Model with Molecular Model, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 1(1)115-126, (2003).
- [17] F.Cleri, V.Rosato, Tight-binding potentials for transition metals and alloys, *Phys. Rev. B*, vol 48, No 4 (1993).
- [18] Ted Belytschko, Wing Kam Liu, Brian Moran, *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*, John Wiley & Sons Ltd, 2000.

- 
- [19] M.Arroyo, T.Belytschko, An atomistic-based finite deformation membrane for single layer crystalline films, *J.Mech.Phys.Solids*, 50 (2002) 1941-1977.
- [20] M.Arroyo, T.Belytschko, A finite deformation membrane based on inter-atomic potentials for the transverse mechanics of nanotubes, *Mech.Mater.* 35 (2003) 193-215.
- [21] J.Salencon, *Handbook of Continuum Mechanics*, Springer, 2001.
- [22] L.A.Grifalco, R.A.Lad, Energy of cohesion, compressibility and the potential energy functions of the graphite system, *J.Chem.Phys.* 25 (1956) 693-697.
- [23] Y.P.Chen, J.D.Lee, Y.J.Lei, L.M.Xiong, A multiscale field theory: Nano/micro materials, *Multiscaling in Molecular and Continuum Mechanics: Interaction of Time and Size from Macro to Nano*, G.C.Sith, Springer 2007.
- [24] J.Fish, Discrete-to-continuum bridging, *Multiscaling in Molecular and Continuum Mechanics: Interaction of Time and Size from Macro to Nano*, G.C.Sith, Springer 2007.
- [25] P.C.Gehlen, G.T.Hahn, M.F.Kanninen, Crack extension by bond rupture in a model of bcc iron, *Scr.Meter.* 6 (1972) 1087-1090.
- [26] P.C.Gehlen, Crack extension in a model of  $\alpha$ -iron, *Scr.Meter.* 7 (1973) 1115-1118.
- [27] J.E.Sinclair, The influence of the interatomic force law and of kinds on the propagation of brittle cracks, *Phil.Mag.* 31 (1975) 647-671.
- [28] J.Q.Broughton, F.F.Abraham, N.Bernstein, E.Kaxiras, Concurrent coupling of length scales: methodology and applications, *Phys.Review B* 60 (4) 1999, 2391-2403.

- 
- [29] D.P.Boso, M.Lefik, B.A.Schrefler, Multiscale analysis of the influence of the triplet helicoidal geometry on the strain state of a Nb<sub>3</sub>Sn based strand for iter coils, *Cryogenics*, 45 (9), 589-605, 2005.
- [30] D.P.Boso, M.Lefik, B.A.Schrefler, A multilevel homogenised model for superconducting strand thermomechanics, *Cryogenics*, 45 (4), 259-271, 2005.
- [31] D.P.Boso, M.Lefik, B.A.Schrefler, A 3D beam-to-beam contact Finite Element for coupled electric-mechanical fields, *Int.J.Num.Meth.Eng.* 64 (13), 1800-1815, 2005.
- [32] M.Lefik, B.A.Schrefler, 3D finite element analysis of composite beams with parallel fibres based on the homogenization theory, *Computational Mechanics*, 14, 1, 2-15 (1994).
- [33] B.A.Schrefler, M.Lefik, Multiscale modelling and computational tools for the analysis of superconducting coils for a thermonuclear fusion device, VII International Conference of Computational Plasticity COMPLAS 2003, E. Oñate and D.R.J.Owen (Eds), CIMNE, Barcellona 2003.
- [34] M.P.Allen, D.J.Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford Science Publications, 1990.
- [35] M.Ippolito, G.Fugallo, A.Mattoni and L.Colombo, Fracture in brittle materials: the atomic-scale viewpoint, *Strength Fracture and Complexity*, 3, 89 (2005).
- [36] C.Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 5th edition, Springer.
- [37] D.C.Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, second edition, Cambridge University Press, 2004.
- [38] A.Mattoni, L.Colombo, The atomic scale origin of crack resistance in brittle fracture, *Physical Review Letters* 95 (11), 2005.



- 
- [39] A.Mattoni, L.Colombo, Atomistic study of the interaction between a microcrack and a hard inclusion in  $\beta$ -SiC, Phys.Rev.B 70, 094108 (2004).
- [40] F.Cleri, V.Rosato, Tight-Binding potentials for transition metals and alloys, Phys.Rev.B, 48,1, 1-july 1993.
- [41] Hrennikoff, A., Solution of Problems in Elasticity by the Frame Work Method, Journal of Applied Mechanics, Vol.8 No. 4, pp. 169-175, Dec. 1941.
- [42] McHenry, D., A lattice Analogy for the Solution of Plane Stress Problems, Journal of Institution of Civil Engineering, Vol. 21, pp 59-82, Dec. 1943.
- [43] William Weaver, Jr., Paul R. Johnston, Structural Dynamics by Finite Elements, Prentice-Hall, Inc., 1987.
- [44] O.C.Zienkiewicz & R.L.Taylor, The Finite Element Method, Vol 1, The Basis, Butterworth-Heinemann, Fifth Edition.
- [45] Leone Corradi dell'Acqua, Meccanica delle Strutture, Vol 1, Il comportamento dei mezzi continui, McGraw-Hill Libri Italia srl, 1992
- [46] Leone Corradi dell'Acqua, Meccanica delle Strutture, Vol 2, Le teorie strutturali e il metodo degli elementi finiti, McGraw-Hill Libri Italia srl, 1992
- [47] Alberto Carpinteri, Scienza delle Costruzioni 1, Vol1, Pitagora Editrice Bologna, 1995.
- [48] E.Hinton, D.R.J.Owen, An Introduction to Finite Element Computations, Pineridge Press Limited, Swansea, U.K.,1979.
- [49] D.R.J.Owen, E.Hinton, Finite Element in Plasticity - Theory and Practice, Pineridge Press Limited, Swansea, U.K., 1980.

- 
- [50] Daryl L.Logan, A First Course in the Finite Element Method, Third Edition, Brooks/Cole, 2002
- [51] Samuel K. Clark, Dynamics of Continuous Elements, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey,1972.
- [52] John M.Biggs, Intorduction to Structural Dynamics, McGraw-Hill Book Company, 1964.
- [53] Thomas J.R.Hughes, The Finite Element Method - Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis, Dover Publications, Inc., Mineola, New York, 2000.
- [54] N.M.Newmark, A method of Computation for Structural dynamics, Journal of Enginnering Mechanics Division, American Society of Civil Engineers, Vol. 85, No.EM3, 67-94, 1959.

# Ringraziamenti

L'esperienza del dottorato di ricerca, come lo é ogni esperienza della vita, é stata per me, non solo un arricchimento culturale e scientifico, ma un cammino compiuto e vissuto accanto ad altre persone, che talvolta sono amici o anche di piú.

Il mio ringraziamento piú grande va a Luigi: per avermi sempre incoraggiata, sostenuta, capita e per aver portato tanta pazienza...soprattutto in quest'ultimo periodo.

Grazie ai miei genitori per l'affetto, il sostegno e la comprensione che non mi hanno mai fatto mancare.

Grazie a tutti i dottorandi del XX ciclo ed il 'gruppo mensa' per i preziosi consigli e per l'amicizia che mi hanno saputo dare.

Grazie al Prof. Colombo per la sua professionalitá, coerenza e grande disponibilitá; grazie al suo competente gruppo di ricerca e a tutti coloro che ho conosciuto durante le mi trasferte a Cagliari.

Grazie al Prof. Schrefler e ai suoi collaboratori per avermi accompagnata durante questi tre anni.

Grazie a tutti i miei amici, da quelli che vedo piú spesso a coloro che, purtroppo, incontro piú raramente; da coloro che hanno vissuto con me, in prima persona, l'avventura del dottorato, a coloro che indirettamente l'hanno condivisa. Grazie ad un amico in particolare, per il tempo trascoro insieme e per i saggi ed onesti consigli che non mi ha mai fatto mancare.

Ognuno di voi, con il proprio sorriso, mi ha sostenuto ed accompagnata durante questa esperienza.

Un' esperienza che mi ha aiutato a crescere, sia dal punto di vista professionale che come persona e che ricorderó sempre come una tappa positiva della vita.