

# Capítulo 3

## Método cuasicontinuo

En los últimos años, se ha producido un gran desarrollo de los métodos multiescalas, éstos tienen como objetivo facilitar el modelado de los materiales en diferentes escalas espaciales y temporales. El principal motor de este desarrollo ha sido el rápido progreso en el área de la nanotecnología, con la búsqueda de la miniaturización de las máquinas y el diseño de materiales a pequeña escala con propiedades específicas. Además, el aumento de la capacidad de los ordenadores ha permitido que los modelos computacionales sirvan como complemento a los estudios teóricos y experimentales de los fenómenos naturales. De esta manera, es posible estudiar el comportamiento de un sistema formado por una gran cantidad de átomos mediante una simulación multiescala utilizando modelos atomísticos. Por lo tanto, el gran interés que despierta el análisis multiescala se debe principalmente a que los métodos atomísticos emplean una escala del orden del espacio interatómico y de femptosegundos, por lo que el tamaño del material y el tiempo que se quiera simular están bastante limitados. Como conclusión se puede decir que el modelado multiescala debe ser visto como un paradigma cuya meta final es la predicción del comportamiento de un material realizando una simulación en todas las escalas sobre la única base de las teorías fundamentales y, por lo tanto:

- Reduciendo el empirismo de los modelos macroscópicos, estableciendo la relación entre la respuesta macroscópica del material y el proceso microscópico en el que se basa.
- Facilitando la simulación en escalas de tamaño y tiempo inaccesibles en modelos atomísticos.

Uno de los métodos multiescala que ha sido desarrollado es el llamado método cuasicontinuo (QC). La teoría, basada en un esquema computacional para establecer un puente entre el dominio atomístico y el continuo, fue originalmente desarrollada por Tadmor et al. [23]. La relación entre ambos dominios se logra introduciendo restricciones cinemáticas que se seleccionan y diseñan en base a dos objetivos: primero, que la resolución atomística se localice en la región de interés y que los átomos se traten de forma colectiva a medida que nos alejamos

de dicha zona y, segundo, que el campo de desplazamiento sufra pequeñas variaciones respecto a la escala de la red. El estado de equilibrio se determina minimizando la energía del sistema construido mediante el potencial interatómico. Una de las características del método QC es que el cálculo de la energía en todas las regiones de la simulación, tanto en las que tienen resolución atómica como en las que ésta es menor, está basado en el modelo atomístico, es decir, que no existen interfaces que separen las regiones con distinto tamaño de grano. Algunas variantes del método han sido aplicadas para estudiar nanoindentación, fracturas a escalas atómicas, bordes de grano y nanohuecos; de entre todas ellas se va a utilizar la desarrollada por Knap y Ortiz [10] a temperatura cero.

Se establece como referencia un cristal de  $N$  átomos que ocupa el subconjunto  $\mathcal{L}$  de una red de Bravais  $d$ -dimensional definida por vectores básicos  $\{\mathbf{a}_i; i = 1, \dots, d\}$ .

$$\mathbf{X}(\mathbf{l}) = \sum_{i=1}^d l^i \mathbf{a}_i, \mathbf{l} \in Z \subset \mathbb{R}^d \quad (3.1)$$

$\mathbf{l}$  son las coordenadas asociadas individualmente a cada átomo,  $Z$  es el espacio de integración y  $d$  es la dimensión del espacio. Se define  $\mathbf{q} \in X \equiv \mathbb{R}^{Nd}$  como un vector que recoge las coordenadas de todos los átomos en la configuración deformada, por lo tanto, se puede usar  $\mathbf{q}(\mathbf{l}), \mathbf{l} \in \mathcal{L}$  para mostrar las coordenadas de un átomo en particular.

A temperatura cero, la energía de un cristal se asume que se puede expresar como una función  $E(\mathbf{q})$ , por ejemplo, mediante el uso de un potencial interatómico. Si existen cargas aplicadas, se asumen que son conservativas y que derivan de un potencial externo  $\Phi^{ext}(\mathbf{q})$ . En consecuencia, la energía potencial total es:

$$\Phi(\mathbf{q}) = E(\mathbf{q}) + \Phi^{ext}(\mathbf{q}) \quad (3.2)$$

Además, si la red cristalina está sujeta a condiciones de contorno en desplazamientos, el problema de determinar la configuración de equilibrio estable se reduce a encontrar el mínimo local de  $\Phi(\mathbf{q})$  consistente con dichas condiciones de contorno. Esto se resume en:

$$\min_{\mathbf{q} \in X} \Phi(\mathbf{q}) \quad (3.3)$$

El fundamento del método cuasicontinuo consiste en sustituir esta ecuación por una minimización aproximada del problema que tenga suficiente flexibilidad como para preservar la resolución atomística en la región de interés y para tratar colectivamente a los átomos que sufran pequeñas variaciones en la escala de la red. Dicho método se basa en tres claves: la minimización condicionada de la energía, los grupos de átomos y el mallado adaptativo.

### 3.1. Minimización condicionada de la energía

Como se ha explicado anteriormente, el paso más importante del método es sustituir la ecuación (3.3) por una minimización restringida a un subespacio  $X_h$  de  $X$  apropiado.  $X_h$  se construye seleccionando un conjunto reducido  $\mathcal{L}_h \subset \mathcal{L}$  de  $N_h < N$  átomos o nodos característicos. Esta selección se basa en las variaciones locales de las deformaciones. Además se introduce una triangulación  $\mathcal{T}_h$  en  $\mathcal{L}_h$ .

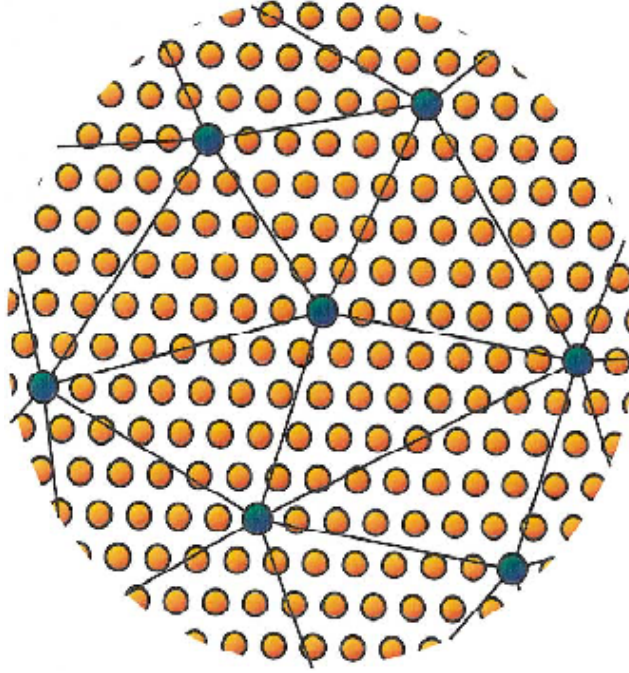


Figura 3.1: Ejemplo de triangulación del cristal

La posición del resto de los átomos se determina mediante la interpolación lineal de las coordenadas nodales, por ejemplo, la posición de un átomo  $\mathbf{q}_h(\mathbf{l})$  es:

$$\mathbf{q}_h(\mathbf{l}) = \sum_{\mathbf{l}_h \in \mathcal{L}_h} \varphi(\mathbf{l}|\mathbf{l}_h) \mathbf{q}_h(\mathbf{l}_h) \quad (3.4)$$

Donde  $\varphi(\mathbf{l}|\mathbf{l}_h)$  es la función de forma lineal a trozos y continua asociada con el átomo característico,  $\mathbf{l}_h \in \mathcal{L}_h$ , evaluado en el punto  $\mathbf{X}(\mathbf{l})$ . Su dominio se restringe al simplex (análogo en  $n$  dimensiones de un triángulo)  $K \in \mathcal{T}_h$  que incide en  $\mathbf{l}_h$ , y satisface:

$$\varphi(\mathbf{l}'_h|\mathbf{l}_h) = \delta(\mathbf{l}'_h|\mathbf{l}_h) \quad (3.5)$$

$$\sum_{\mathbf{l}_h \in \mathcal{L}_h} \varphi(\mathbf{l}|\mathbf{l}_h) = 1 \quad (3.6)$$

donde  $\delta$  es la función delta de Dirac. El problema de minimización queda reducido a:

$$\min_{\mathbf{q}_h \in X_h} \Phi(\mathbf{q}) \quad (3.7)$$

Y las ecuaciones de equilibrio quedan:

$$\mathbf{f}_h(\mathbf{l}_h) = \sum_{\mathbf{l} \in \mathcal{L}} \mathbf{f}(\mathbf{l}|\mathbf{q}_h) \varphi(\mathbf{l}|\mathbf{l}_h) = 0 \quad (3.8)$$

donde,

$$\mathbf{f}(\mathbf{l}|\mathbf{q}_h) = \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{q}(\mathbf{l})}(\mathbf{q}) \quad (3.9)$$

son las fuerzas correspondiente a  $\mathbf{q}$  y  $\mathbf{f}(\mathbf{l}|\mathbf{q})$  es el valor de  $\mathbf{f}(\mathbf{q})$  en el sitio  $\mathbf{l}$ .

## 3.2. Grupos de átomos

Lo práctico del método se basa en evitar el cálculo del vector de fuerzas  $\mathbf{f}$  para todos los átomos y los sumatorios para toda la red. Una forma de hacerlo es mediante la observación del comportamiento del cristal sobre los grupos de átomos alrededor de los átomos representativos. Para ello, definimos  $\mathcal{C}(\mathbf{l}_h) = \{\mathbf{l} : |\mathbf{X}(\mathbf{l}) - \mathbf{X}(\mathbf{l}_h)| \leq r(\mathbf{l}_h)\}$  como el grupo de posiciones de la red dentro de una esfera centrada en el nodo  $\mathbf{l}_h$  y de radio  $r(\mathbf{l}_h)$ .

El problema ahora es aproximar un sumatorio de forma general:

$$S = \sum_{\mathbf{l} \in \mathcal{L}} g(\mathbf{l}) \quad (3.10)$$

donde  $g(\mathbf{l})$  es una función de la red.

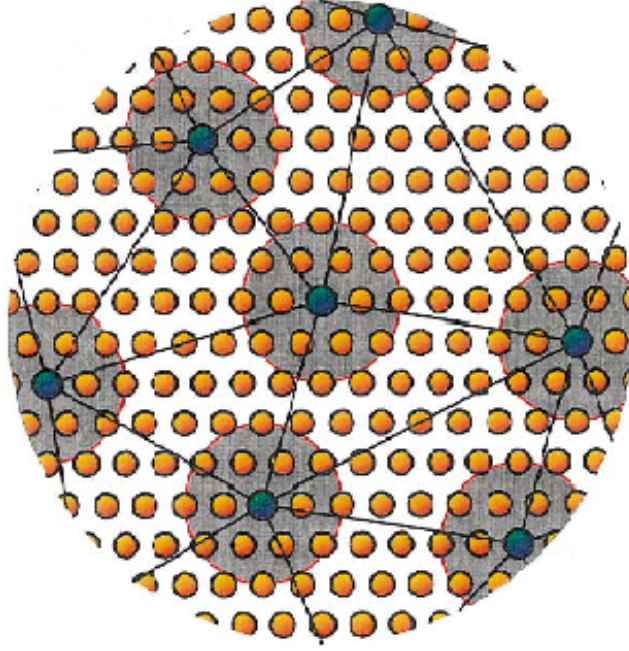


Figura 3.2: Grupos de átomos en la triangulación del cristal

Las reglas matemáticas para grupos aproximan  $S$  mediante:

$$S \approx S_h = \sum_{\mathbf{l}_h \in \mathcal{L}_h} n_h(\mathbf{l}_h) S(\mathbf{l}_h) \quad (3.11)$$

donde  $S(\mathbf{l}_h)$  es la suma para todos los átomos en el grupo  $\mathcal{C}(\mathbf{l}_h)$ :

$$S(\mathbf{l}_h) = \sum_{\mathbf{l} \in \mathcal{C}(\mathbf{l}_h)} g(\mathbf{l}) \quad (3.12)$$

El peso de cada grupo  $n_h(\mathbf{l}_h)$  asociado a los nodos,  $\mathbf{l}_h \in \mathcal{L}_h$  se calcula con la condición de que la ecuación 3.11 sea exacta para todas las funciones bases:

$$\sum_{\mathbf{l} \in \mathcal{L}} \varphi(\mathbf{l}|\mathbf{l}_h) = \sum_{\mathbf{l}'_h \in \mathcal{L}_h} n_h(\mathbf{l}'_h) \sum_{\mathbf{l} \in \mathcal{C}(\mathbf{l}'_h)} \varphi(\mathbf{l}|\mathbf{l}_h), \quad \forall \mathbf{l}_h \in \mathcal{L}_h \quad (3.13)$$

Usando la regla para grupos, las ecuaciones de equilibrio se reducen a:

$$\mathbf{f}(\mathbf{l}_h) \approx \sum_{\mathbf{l}'_h \in \mathcal{L}_h} n_h(\mathbf{l}'_h) \left[ \sum_{\mathbf{l} \in \mathcal{C}(\mathbf{l}'_h)} \frac{\partial F}{\partial \bar{\mathbf{q}}(\mathbf{l})} \varphi(\mathbf{l}|\mathbf{l}_h) \right] = \mathbf{0} \quad (3.14)$$

### 3.3. Mallado adaptativo

La tercera clave del método cuasicontinuo es una malla que se adapta a la estructura del campo de deformaciones. Idealmente, la malla debería variar en cuanto a criterios energéticos, pero al no estar disponible la energía del contorno en el modelo, se hace necesario el uso de un indicador empírico. Por lo que se usa el indicador  $\epsilon(K)$  para el simplex  $K$  medido como:

$$\epsilon(K) = \sqrt{|II_E(K)|} h(K) \quad (3.15)$$

donde  $II_E(K)$  es el segundo invariante del tensor de deformación del Langrangiano del simplex  $K$ , y  $h(K)$  es el tamaño de  $K$ . El elemento  $K$  se acepta si:

$$\frac{\epsilon(K)}{b} < TOL \quad (3.16)$$

Se recomienda que  $TOL < 1$ ,  $b$  es la magnitud del vector de Burgers más pequeño del cristal. Por lo tanto, el criterio de adaptación se diseña así para que la resolución atomística detecte cuando un simplex se deslice por un vector de Burgers. Evidentemente en la elección del valor de la tolerancia hay que llegar a un compromiso entre el coste computacional y la exactitud a la que queremos llegar. En general, es mucho más pequeña que 1 para que sea capaz de recoger el proceso de nucleación de las dislocaciones.

### 3.4. Evaluación de los errores

Los errores cometidos en las simulaciones realizadas con el método cuasicontinuo vienen determinados por tres factores:

- El valor del parámetro  $r(\mathbf{l}_h)$  que determina el tamaño de los grupos. Influye en la exactitud de las reglas matemáticas para grupos. El error cometido es muy grande para grupos

muy pequeños, sin embargo, decrece rápidamente a medida que el tamaño de los grupos aumentan.

- La aproximación introducida a la hora de calcular mediante el programa los pesos de los grupos. Para grupos muy pequeños la diferencia entre el valor exacto y el aproximado es pequeño, a medida que crecen los grupos se hace insignificante.
- El valor de la tolerancia (TOL) que controla el proceso a la hora de introducir nuevos nodos en la malla.