热-力耦合的原子-连续关联模型及递归式并发多尺度算法

向美珍

摘要

人们从长期的科学实践中总结出，材料的行为本构特性和服役失效取决于材料的原子结构和各尺度的微观结构。建立有效的跨大尺度的多尺度分析方法是当前材料科学中的重要且具挑战性的研究问题。材料及其结构在宏观尺度（微米及其以上尺度）的行为由传统连续介质模型描述，在纳米尺度的行为可由原子模型描述。对于材料及其结构在微米到纳米尺度的行为，必须将连续介质模型与原子模型结合起来处理。由于材料及其结构的许多行为是热场和力场共同作用的结果，使得对材料及其结构的多尺度分析变得更加复杂。本文对适用于微-纳米尺度的原子-连续关联模型进行了系统的研究，针对微-纳米尺度的热-力耦合行为构造了原子-连续关联模型和多尺度算法，所做的主要工作如下：

第一个工作是基于原子模型建立了一个非局部应力-应变关系，它与传统连续介质模型的动量守恒方程相结合，组成了一个适用于微-纳米尺度的原子-连续关联动力学模型。在本模型中，除了原子势函数的形式外，没有采用其他经验本构假设和局部均匀变形假设。它用嵌入于原子团簇的代表体积元来刻画材料的微纳-米结构，用扩展代表体积元消除代表体积元的表面效应；用本文提出的“变形环境函数”的概念将材料体的变形与扩展代表体积元的变形联系起来。非局部应力应变关系严格地基于原子模型，原子间相互作用的非局部性和非线性被嵌入到应力-应变关系中，使得该模型能够反映微-纳米尺度下原子团簇内的非均匀结构，描述原子尺度的非均匀变形。在局部均匀变形情况下，本文模型退化为Cauchy-Born 模型；基于本模型，在一定的近似假设下可以得到高阶应变梯度模型。

第二个工作是基于原子模型推导了微-纳米尺度下热-力耦合行为的原子-连续关联模型。我们将原子运动分为“结构形变”和“热振动”，对“热振动”采

用统计力学的方法分析其综合热效应；对“结构形变”，考虑了微-纳米尺度下原子团簇的非均匀结构和非均匀变形。基于这种处理，我们推导了代表体积元的内能变化率表达式，并利用准简谐近似，推导了非均匀原子团簇的自由能的计算表达式。然后，利用变形环境假设将代表体积元的变形与材料体的变形联系起来，推导了依赖于变形环境的自由能密度、熵密度、内能密度表达式，并结合动量守恒方程和能量守恒方程，得到了微-纳米尺度的热-力耦合的原子-连续关联方程组。原子间相互作用的非线性和非局部性嵌入到热-力学的本构关系中。在局部均匀变形假设下，本模型退化为热力学本构参数仅依赖于局部变形梯度和温度的传统宏观热-力耦合连续介质模型。本文给出了基于原子势函数的宏观热力学本构参数的计算表达式。

第三个工作是建立了热-力耦合问题的宏观连续模型、微观原子-连续关联模型和分子动力学模型的递归式并发多尺度算法。在此算法中，被研究的材料结构件的区域被分成线性小变形区域，弱非线性变形区域和强非线性变形区域。总的算法流程是递归式的。粗尺度模型与细尺度模型的耦合是一个预测-校正的过程，粗尺度计算是预测过程，细尺度计算是校正过程。在热-力耦合情况下，分子动力学模拟的热边界条件构造是并发多尺度算法构建中的难点之一，本文利用原子模型与连续模型在热传输率上的一致性来构造分子动力学模拟的热边界条件。另外，本文给出了将细尺度计算结果粗尺度化以校正粗尺度物理量的一种方法。

关键词：热-力耦合，多尺度分析，微-纳米结构，原子-连续关联模型，分子动力学