

절점 비활성화 기법을 적용한 나노-연속체 멀티스케일 해석 기법

Nano-continuum multiscale analysis using node deactivation techniques

이 승 윤* · 조 맹 효**

Rhee, Seung-Yun · Cho, Maenghyo

ABSTRACT

In analyzing the nano-scale phenomena or behaviors of nano devices or materials, it is often desirable to deal with more atoms than can be treated only with a full atomistic simulation. However, even now, it is advisable to apply the atomistic simulation to the narrow region where the deformation field changes rapidly but to apply the conventional continuum model to the region far from that region. This equivalent continuum model can be formulated by applying the Cauchy-Born rule to the exact atomistic potential as in the quasicontinuum method. To couple the atomistic model with the equivalent continuum model, continuum displacements are conformed to the molecular displacements at the discrete positions of the atoms within the bridging domain. To satisfy the coupling constraints, we apply the Lagrange multiplier method. The continuum model in the bridging model should be applied on the region where the deformation field changes gradually. Then we can make the nodal spacing in the continuum model be much larger than the atomic spacing. In the first step, we generate the atomic-resolution mesh with the nodal spacing equal to the atomic spacing, and then we eliminate the nodal degrees of freedom adaptively using the node deactivation techniques. We eliminate more DOFs as the regions are more far from the atomistic region. Computing time and computational resources can be greatly reduced by the present node deactivation technique in multiscale analysis.

Keywords: multiscale analysis, bridging scale, Cauchy-Born rule, node deactivation technique

1. 서 론

나노 스케일에서의 현상 및 나노 소재를 연구할 때, 격자정역학 및 분자동역학 모델에서 다룰 수 있는 것 보다 훨씬 큰 모델이 요구되는 경우가 빈번하게 발생한다. 균열에 의한 파단을 해석하고자 하는 경우, 균열 끝 단 주변의 수십 마이크로 스케일 이상의 영역에 대한 모델링을 통해서만 컴플라이언스(compliance) 및 임피던스(impedance)를 올바르게 예측할 수 있다. 하지만, 현재 컴퓨터의 계산 능력이 비추어 볼 때, 원자 수준의 시뮬레이션으로 해석 가능한 영역은 수백 나노미터 스케일 정도이다. 따라서 변형이 급격하게 변하는 국부적 영역에서만 원자 스케일의 시뮬레이션을 수행하고 나노 스케일 현상의 영향이 거의 사라지는 주변 영역에서는 기존의 연속체 모델을 적용하는 멀티스케일 모델링이 바람직하다.

* 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 박사과정 E-mail: syrhee8@snu.ac.kr

** 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 부교수 E-mail: mhcho@snu.ac.kr

Abraham에 의해 FE/MD/TB를 연결한 멀티스케일 해석 방법이 제시된 이후, 여러 연구자들에 의해 동시적 멀티스케일 해석 기법이 연구되어 왔다(Abraham 등, 1996). Rudd와 Broughton이 제시한 coarse-grained 분자동역학(Rudd와 Broughton, 1998), Tadmor 등에 의해 제시된 준연속체 방법(Tadmor 등, 1996; Knap과 Ortiz, 2001; Miller와 Tadmor, 2002) 등이 대표적인 방법론들이다. 최근에 Liu에 의해 제시된 bridging scale decomposition에 기초한 멀티스케일 해석 기법에서는 Langevin 방정식을 이용하여 경계면에서 발생하는 반사파 문제를 해결하였다(Wagner와 Liu, 2003). 또한 Belytschko는 bridging domain method에 기초하여 분자적 모델(절대온도 0K)과 연속체 모델을 연계한 방법론을 제시하였으며(Belytschko와 Xiao, 2003), 이를 온도를 고려한 동역학적 문제에 적용하였다(Xiao와 Belytschko, 2004). 또한, 나노 영역과 연속체 영역의 경계면에서의 반사파 문제를 해결하기 위해 E 등의 연구가 있었다(E와 Huang, 2002).

본 연구에서는 준연속체 방법에서처럼, 코시-본 법칙(Cauchy-Born rule)을 이용하여 원자스케일 포텐셜과 등가인 연속체 에너지 밀도 함수를 구성하였다. 변형 구배가 큰 영역에서는 원자스케일 모델을 그대로 적용하고, 변형 구배가 작은 영역에서는 등가 연속체 모델을 적용하였다. 두 모델은 경계면에서 일정 간격 중첩되며, 이러한 중첩되는 구간을 브릿징(bridging) 영역이라고 한다. 브릿징 영역에서의 원자들의 위치에서 각 원자의 변위와 연속체 변위장이 동일하도록 하는 구속 조건을 라그랑지 승수(Lagrange multiplier)를 이용하여 부가하였다. 이러한 브릿징 모델에서 연속체 모델은 변형 구배가 작은 영역에 적용되므로, 절점 간격이 원자 간격보다 훨씬 크게 설정되어야 효율적으로 계산이 수행된다. 본 연구에서는, 원자 간격과 동일한 절점 간격을 갖는 원자스케일 격자(atomic-resolution mesh)를 구성한 후, 절점 비활성화 기법(node deactivation technique)을 이용하여 절점 자유도를 선택적으로 소거함으로써 계산 효율을 증가시켰다(조진연 등, 2003).

정적 분포하중을 받는 1차원 원자 고리(atomic chain)가 다항 함수 형태의 변위장을 갖는 문제를 고려하였다. Harmonic 포텐셜과 Lennard-Jones 포텐셜과 같은 원자스케일 포텐셜로부터 각각 등가 연속체 모델을 구성하였고 그 타당성을 검토하였다. 이러한 등가 연속체 모델과 분자역학 모델을 연결하는 브릿징(bridging) 모델이 2차원, 3차원 문제로 확장되어 적용되면, 분자역학 모델에 비해 계산 효율이 상당히 증가할 수 있다.

2. 등가 연속체 모델의 정식화

그림 1에서 Ω_0^M 은 분자 영역, Ω_0^C 는 연속체 영역, Ω_0^{BR} 은 두 영역이 겹처지는 브릿징 영역을 나타낸다. Γ_0^B 는 연속체 영역의 분자 영역에 걸쳐져 있는 경계를 의미한다. 분자 영역에서는 분자역학 모델을 적용하고, 연속체 영역에서는 등가 연속체 모델을 적용한다. 브릿징 모델은 3장에서 설명하고자 한다.

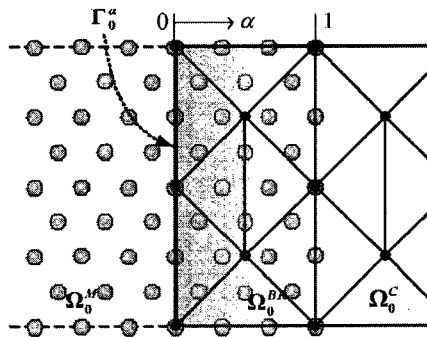


그림 1 Bridging model

2.1 분자역학(Molecular Mechanics, MM) 모델

원자 간 상호작용을 묘사하기 위해 사용되는 간단한 원자간 포텐셜 모델로는 Harmonic 포텐셜(식(1)), Lennard-Jones(L-J) 포텐셜(식(2)) 등이 있다. 아래 식에서 포텐셜 함수는 원자 간 거리의 함수로 주어진다.

$$U^{HM}(r_{ij}) = \frac{1}{2}k(r_{ij} - r_0)^2, \quad r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \tag{1}$$

$$U^{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad r_{ij} \leq r_c \tag{2}$$

여기서, r_0 는 두 원자 간 평형 상태의 거리, r_c 는 cut-off 반경, harmonic 포텐셜에서의 k 는 원자간 상호작용력을 나타내는 스프링 상수이며, L-J 포텐셜에서의 ϵ 와 σ 또한 각각 상호작용의 크기와 길이 스케일을 나타내는 파라미터이다. 이렇게 정의된 포텐셜 함수로부터 유도되는 원자 간 상호작용력은 다음과 같이 포텐셜의 구배로서 정의된다.

$$\vec{f} = -\nabla U(r_{ij}) \tag{3}$$

초기 위치 $\vec{X}_i (i=1, 2, \dots, n_M)$ 을 갖는 n_M 개의 원자를 고려한다. 각 원자의 변위를 \vec{u}_i^M 라고 하면, 변형 후의 위치는 다음과 같다.

$$\vec{x}_i = \vec{X}_i + \vec{u}_i^M \tag{4}$$

외부 포텐셜을 포함한 총 포텐셜 에너지를 $W^M(\vec{u}^M)$ 이라고 하면, 주어진 포텐셜 함수에 대해, 평형 상태는 다음과 같이 주어진다.

$$dW^M(\vec{u}^M) = 0 \tag{5}$$

2.2 등가 연속체(Equivalent Continuum) 모델

2.2.1 등가 연속체 변형 에너지 밀도 함수

본 연구에서 제안하는 등가 연속체 모델은 기본적으로 국부 준연속체(local quasicontinuum) 모델링에 해당한다. 그 근본 개념은, 현상학적으로 정의되는 거시적 개념의 변형률 에너지 밀도 함수를 격자정역학 및 분자동역학에서 사용하는 원자스케일의 포텐셜로부터 직접 유도한다는 것이다. 이러한 등가성 개념은, 하나의 원자가 전체 에너지에 미치는 기여도를 정의한 후 이러한 한 원자의 에너지가 그 원자를 포함하는 Voronoi 다각형 내에 균일하게 분포한다는 가정으로부터 시작한다. 이러한 가정에 의해 한 원자의 에너지는 다음과 같이 정의된다.(Suyuk와 Steinmann, 2003)

$$U_\theta(r_{i1}, \dots, r_{im_M}) \doteq \frac{U_i(r_{i1}, \dots, r_{im_M})}{V_i} \tag{6}$$

위의 식에서 한 원자의 에너지는 원자 간 거리의 함수이므로, 이를 코시-본 법칙(Cauchy-Born rule)에 의해 연속체 모델에서 표현가능한 1차 변형구배(deformation gradient)에 대한 표현식으로 바꿀 수 있다.

코시-본 법칙은, 무한히 반복되는 결정 구조의 균일(homogeneous) 변형이 국부적인 1차 변형 구배 \mathbf{F} 에 의해 사상(mapping)된다는 것이다. 즉, 변형 전의 격자 벡터(lattice vector) \vec{R}_{ij} 와 변형 후의 격자 벡터 \vec{r}_{ij} 의 관계가 다음과 같이 정의될 수 있다.

$$\vec{r}_{ij} = \mathbf{F} \cdot \vec{R}_{ij} \tag{7}$$

여기서, 1차 변형 구배 F 는 다음과 같이 정의된다.

$$F = \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{X}} = I + \frac{\partial \vec{u}}{\partial \vec{X}} \quad (8)$$

1차 코시-본 법칙을 적용하여 연속체 변형률 에너지 밀도 함수를 구하면 다음과 같다.

$$U_0(F) = U_0 \left(\left| F \cdot \vec{R}_{i1} \right|, \dots, \left| F \cdot \vec{R}_{im_m} \right| \right) = w^c(F) \quad (9)$$

여기서 \vec{R}_{ij} 는 결정 격자 구조에 의해 미리 주어져 있는 상수 벡터이며, 연속체의 한 점은 균일 변형을 하는 무수히 많은 격자들에 의해 모델링된다.

2.2.2 절점 비활성화 기법 (Node Deactivation Technique)

격자 생성이 필요치 않은 대표적 무요소법 중 하나인 이동최소자승법(moving least squares method)을 이용하여 유한요소 절점들 가운데에서 필요하지 않은 부분의 절점들을 비활성화하여 문제를 해석할 수 있는 절점 비활성화 기법을 적용하였다. 무요소법에서 사용되는 근사함수를 사용하여 새로 보간한 형상함수 $\tilde{N}_i(X)$ 는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\tilde{N}_i(X) = \sum_{j=1}^N \phi_j(X_j) N_j(X) \quad (10)$$

여기서, $N_j(X)$ 는 선형 유한요소 형상함수이고, N 은 전체 유한요소 절점수, $\phi_j(X)$ 는 무요소법에서 사용되는 근사함수(interpolant)로서 여기서는 활성화커널(activating kernel)이라고 부른다. 그림 2에 지수함수 형태의 활성화커널에 의해 활성화된 절점과 비활성화되는 절점을 표시하였다.

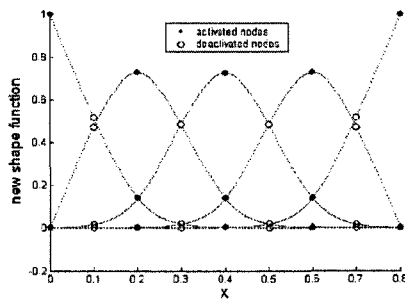


그림 2 New shape functions

본 연구에서는 무요소법 중 EFG 방법(Belytschko 등, 1994)에서 사용된 근사함수를 활성화커널로 사용하였다. EFG 방법에서 근사되는 변위 자유도를 유한요소법에 익숙한 표현식으로 나타내면 아래와 같다.

$$u^h(\vec{X}) = \sum_{i=1}^N \phi_i(\vec{X}) \tilde{u}_i = \phi(\vec{X}) \tilde{u} \quad (11)$$

여기서, \tilde{u}_i 는 절점 미지수를 의미하며, $\phi_i(\vec{X})$ 는 아래식과 같이 지수함수 형태의 가중치 함수(weight function)를 포함하는 근사함수이다.

$$w(\vec{X} - \vec{X}_i) = w(r) = \begin{cases} e^{-r^2/a^2} & , 0 \leq r \leq 1 \\ 0 & , r > 1 \end{cases} \quad (12)$$

여기서, $r = d_i/d_{mi} = |X - X_i|/d_{mi}$ 이고, i 번째 절점의 영향 영역(influence domain, support)의 크기 d_{mi}

는 $d_{ml}=d_{max}c_l$ 에 의해 구해진다. 거리 c_l 는 l 번째 절점에서 가장 가까운 절점까지의 최대 거리이고, d_{max} 는 영향 영역 내에 포함되는 절점의 개수를 정의하는 파라미터이다.

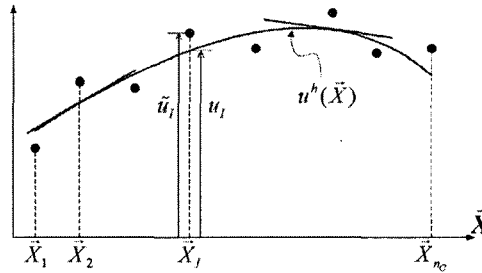


그림 3 Approximation not passing through the data

유한요소법과 달리 무요소법에서는, 절점 미지수 \tilde{u}_j 는 일반적으로 절점 자유도 u_j 와 일치하지 않으므로 (그림 3), 필수(essential) 경계 조건을 다룰 때 추가적인 고려가 필요하다. 본 연구에서는 라그랑지 승수(Lagrange multiplier)를 이용하여 필수 경계 조건을 부가하였다.

라그랑지 승수에 의해 경계 조건이 부가된 켈러킨 약식(weak formulation)은 다음과 같다.

$$\int_{\Omega_0^c} \delta w^c d\Omega - \int_{\Omega_0^c} \delta \bar{u}^T \bar{b} d\Omega - \int_{\Gamma_u} \delta \bar{u}^T \bar{t} d\Omega - \int_{\Gamma_u} \delta \bar{u}^T \bar{\mu} d\Omega - \int_{\Gamma_u} \delta \bar{u}^T (\bar{u} - \bar{u}) d\Omega = 0 \quad (12)$$

여기서, Γ_u 는 변위 경계, Γ_t 는 하중 경계를 나타내고, $\bar{\mu}$ 는 라그랑지 승수, \bar{u} 는 경계에서의 변위값, \bar{b} 는 체력(body force), \bar{t} 는 표면력(traction force)이다.

3. 브릿징 모델 (Bridging Model)

3.1 라그랑지 승수법을 이용한 브릿징

그림 1에서 분자 영역과 연속체 영역이 접치는 브릿징 영역 Ω_0^{BR} 내에 존재하는 원자(혹은 분자)의 위치에서 원자의 변위와 절점의 변위가 같다는 조건을 만족시키기 위해 라그랑지 승수법을 적용한다. 그 구속 조건은 harmonic 포텐셜과 L-J 포텐셜에 대해 다음과 같이 각각 정의된다.

$$g_I|_{Harmonic} = \|\tilde{u}^C(\bar{X}_I) - \bar{u}^M\|^2 = 0, \quad g_I|_{L-J} = \|\tilde{u}^C(\bar{X}_I) - \bar{u}^M\|^2 = 0 \quad (14)$$

여기서, I 는 Ω_0^{BR} 내에 존재하는 원자에 대한 첨자이다. ($I=1, 2, \dots, n_M^{BR}$)

라그랑지 승수를 이용한 브릿징 영역에서의 변위 구속 조건에 벌칙함수를 적용하여 구성한 에너지 범함수는 다음과 같이 정의된다.

$$W_{LP} = W_{int} - W_{ext} - \tilde{\mu} (u_{\Gamma_u}^C - \bar{u}_{\Gamma_u}^C) + \sum_{I=1}^{n_M^{BR}} \lambda_I g_I + \frac{1}{2} p \sum_{J=1}^{n_M^{BR}} g_J g_J \quad (15)$$

여기서, W_{int} 는 내부 포텐셜 에너지이고, W_{ext} 는 외력에 의한 에너지이며 p 는 벌칙함수이다.

3.2 브릿징 영역에서의 가중치

브릿징 영역에서 총 내부 포텐셜 에너지를 표현할 때, 각각의 모델로부터의 에너지에 가중치 α 를 적용한

다. 가중치 α 는 다음과 같이 정의된다.

$$\alpha = l(\bar{X})/l_0 \quad (16)$$

여기서, $l(\bar{X})$ 는 \bar{X} 의 Γ_0^a 상으로의 정사영(projection)의 최소 자승이며, α 는 Γ_0^a 상에서 0이며, Ω_0^{BR} 의 다른 경계에서 1이 되도록 선형적으로 증가한다. 이러한 가중치를 적용한 내부 포텐셜 에너지와 외력에 의한 에너지는 다음과 같고, M 은 분자 영역, C 는 연속체 영역을 의미하는 첨자이다.

$$\begin{cases} W_{int}^M = \frac{1}{2} \sum_{I=1}^{n_M} \sum_{K \neq I}^{r \times K} [1 - \alpha(\bar{X}_I)] w^M(\bar{X}_I, \bar{X}_K) \\ W_{int}^C = \int_{\Omega_0^C} \alpha(\bar{X}) \rho_0 w^C(F) d\Omega \end{cases} \quad (17)$$

$$\begin{cases} W_{ext}^M = \sum_I [1 - \alpha(\bar{X}_I)] \bar{f}_{ext,I}^M \cdot \bar{n}_I^M \\ W_{ext}^C = \int_{\Omega_0^C} \alpha(\bar{X}) \rho_0 \bar{b} \cdot \bar{u}^C d\Omega + \int_{\Gamma_0^C} \alpha(\bar{X}) \rho_0 \bar{t} \cdot \bar{u}^C d\Gamma \end{cases} \quad (18)$$

4. 수치 예제

1차원 원자 고리 시스템이 4차 다항식 형태의 변위해를 갖는 문제에 대해 등가 연속체 모델 및 브릿징 모델을 이용하여 해석하였다. 그림 4에 주어진 모델에서 오른쪽 끝단은 고정된 것으로 간주한다. 전체 변위 오차는 아래 식과 같이 각 분자 위치에서 계산하여 합한다.

$$Error_{Displacement} = \frac{\sum_{I=1}^{n_M} |u^C(X_I) - u^M(X_I)|}{\sum_{I=1}^{n_M} |u^M(X_I)|} \quad (19)$$

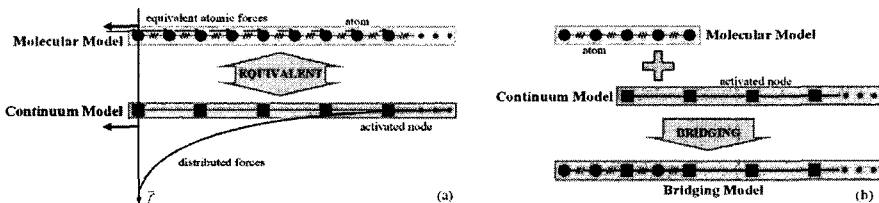


그림 4 1-D atomic chain under distributed load: (a) equivalent continuum model (b) bridging model

4.1 등가 연속체 모델

그림 5에 선형 유한요소법과 절점 비활성화 기법을 적용한 경우에 대해 각각 절점 간격에 따르는 변위 오차를 나타내었다. 그림 5에서 가로축은 분자역학 모델에서 사용된 원자 간격에 대한 절점 간격의 비율 의미한다. L-J 포텐셜 모델은 harmonic 포텐셜과는 달리 비선형 모델이므로, Newton-Raphson 알고리즘을 사용하여 해를 구하였다. L-J 포텐셜 모델의 경우 harmonic 포텐셜 모델에 비해 비선형성이 크므로, 어느 정도 큰 절점 간격에서는 오차가 크게 발생한다는 것을 알 수 있었다. 하지만 절점 간격이 60 이하인 경우에는 그 오차가 8% 이하가 발생하였고 이로부터 본 연구에서 제시한 등가 모델이 타당하다고 판단된다. 또한, 선형 유한요소법을 통한 해석에 비해 절점 비활성화 기법을 통한 절점 간격의 확장(혹은 자유도의 축소)이 보다 유효함을 알 수 있었다.

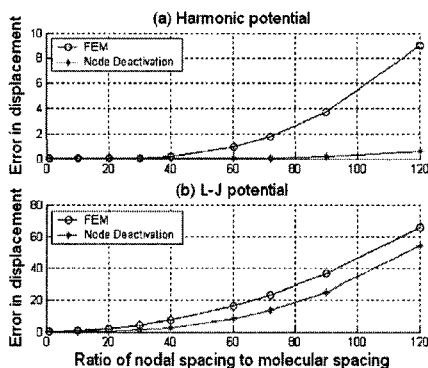


그림 5 Errors in displacement with respect to various nodal spacings

4.2 브릿징 모델

전체 영역 중 왼쪽 영역은 분자역학 영역(M), 가운데 영역은 첫 번째 연속체 영역(C1), 오른쪽 영역은 두 번째 연속체 영역(C2)의 세 영역으로 나누어 연결한 모델로 해석하였다. 분자역학 영역에서 멀어질수록 변형 구배는 급격히 줄어들기 때문에, C1 영역에서는 절점 간격이 원자 간격의 5배, C2 영역은 10배로 설정하여 해석하였다. 그림 6에서 변위 해가 분자역학 모델의 해와 거의 일치하며 오차는 harmonic 모델의 경우 0.21%이며, L-J 모델의 경우 2.15%이다.

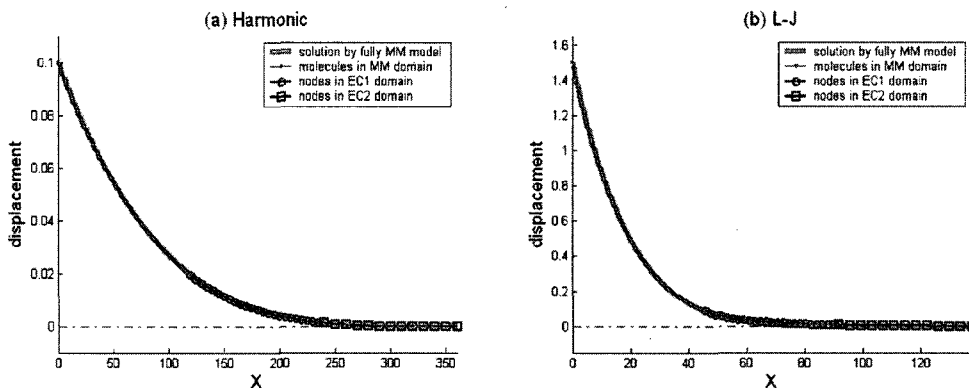


그림 7 Solution of displacements by bridging model: (a) harmonic (b) L-J

6. 결론

분자역학에서 사용되는 원자 스케일 수준의 포텐셜로부터 코시-본 법칙을 적용하여 등가의 고차 연속체 에너지 밀도 함수를 유도하였으며, 무요소 갤러킨법의 근사함수를 이용한 절점 비활성화 기법을 적용하였다. 절점 비활성화를 통해 변형장이 급격히 변하는 영역에서 멀리 떨어진 영역에서는 많은 자유도를 소거시킴으로써 계산 효율을 높일 수 있었다. 급격히 변하는 변위장을 갖는 1차원 원자 고리 분체에 대해 harmonic 포텐셜과 L-J 포텐셜 모델의 등가 연속체 모델링을 하였으며, 이러한 연속체 모델과 원자스케일 모델을 연계한 동시적(concurrent) 멀티스케일 모델의 해석 결과를 제시하였다. 그 결과로부터 본 논문에서 제시한 방법론이 상당히 타당함을 알 수 있었다. 또한 이러한 1차원 모델링을 2차원 또는 3차원 문제에 확장한다면, 계

산의 효율성 증대에 기여하는 바가 클 것이라고 사료된다.

원자스케일의 격자가 유한요소 모델이 최대의 정확도를 가질 수 있는 분해능(resolution)이므로, 이러한 스케일의 기본 격자로부터 원하는 영역에서 원하는 개수의 절점 자유도를 소거할 수 있다는 것은 멀티스케일 모델링을 통한 설계에서 커다란 장점이라고 판단된다. 크랙 틈이나 dislocation 및 defect 등이 전체 구조물의 거동에 미치는 영향은 지극히 국소적이므로, 이러한 문제에서 선택적으로(adaptively) 자유도를 소거함으로써 적당한 수준의 신뢰성과 함께 계산 효율을 상당히 증가시킬 수 있을 것이다. 본 연구에서 제시한 절점 비활성화 기법을 적용한 동시적 멀티스케일 해석 모델링은, 나노 스케일에서의 거동이 보다 큰 스케일에서의 구조물의 거동에 밀접한 영향을 미치는 시스템이나 연속체 수준 스케일의 구조물과 직접 연결되어 있는 나노 스케일 디바이스의 설계 도구가 될 것으로 사료된다.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단이 주관하는 서울대학교 마이크로 열시스템 연구센터의 지원을 받아 진행되었으며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

- 조진연, 김도년, 김승조 (2003) 유한요소 모델의 절점 활성화 기법: I. 이론, *한국항공우주학회지*, 31(4), pp.26~34.
- Abraham, F.F., Berstein, N. and Kaxiras, E. (1998) Spanning the Length Scales in Dynamic Simulation, *Computers in Physics*, 12(6), pp.538~546.
- Belytschko, T., Lu, Y.Y. and Gu, L. (1994) Element-Free Galerkin Methods, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37(2), pp.229~256.
- Belytschko, T. and Xiao, S.P. (2003) Coupling Methods for Continuum Model with Molecular Model, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 1, pp.115~126.
- E, W. and Huang, Z. (2002) A Dynamic Atomistic-Continuum Method for the Simulation of Crystalline Materials, *Journal of Computational Physics*, 182, pp.234~261.
- Knap, J. and Ortiz, M. (2001) An Analysis of the Quasicontinuum Method, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9), pp.1899~1923.
- Miller, R.E. and Tadmor, E.B. (2002) The Quasicontinuum Method: Overview, Applications and Current Directions, *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 9, pp.203~239.
- Rudd, R.E. and Broughton, J.Q. (1998) Coarse-Grained Molecular Dynamics And the Atomic Limit of Finite Elements, *Physical Review B*, 58(10), R5893~5896.
- Sunyk, R. and Steinmann, P. (2003) On Higher Gradients in Continuum-Atomistic Modelling, *International Journal of Solids and Structures*, 40, pp.6877~6896.
- Tadmor, E.B., Ortiz, M. and Phillips, R. (1996) Quasicontinuum Analysis of Defects in Solids, *Philosophical Magazine A*, 73(6), pp.1529~1563.
- Wagner, G.J. and Liu, W.K. (2003) Coupling of Atomic and Continuum Simulations Using a Bridging Scale Decomposition, *Journal of Computational Physics*, 190, pp.249~274.
- Xiao, S.P. and Belytschko, T. (2004) A Bridging Domain Method for Coupling Continua with Molecular Dynamics, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193, pp.1645~1669.