

Scuola Dottorale di Cisterna di Latina e Sermoneta  
19–23 aprile 2010

# Lagrangiane alla APR e termomeccanica dei continui

Antonio Di Carlo



LaMS & Dottorato di Ricerca in Fisica, Università Roma Tre

I recenti sviluppi della scienza dei materiali e dei procedimenti di fabbricazione rendono possibile la realizzazione di strutture e di materiali con proprietà microscopiche (e sub-microscopiche) finemente calibrate.

I recenti sviluppi della scienza dei materiali e dei procedimenti di fabbricazione rendono possibile la realizzazione di strutture e di materiali con proprietà microscopiche (e sub-microscopiche) finemente calibrate. Per una migliore comprensione del loro comportamento sono necessari modelli matematici che tengano conto dell'interazione tra fenomeni che hanno luogo su differenti scale spaziali e temporali.

I recenti sviluppi della scienza dei materiali e dei procedimenti di fabbricazione rendono possibile la realizzazione di strutture e di materiali con proprietà microscopiche (e sub-microscopiche) finemente calibrate. Per una migliore comprensione del loro comportamento sono necessari modelli matematici che tengano conto dell'interazione tra fenomeni che hanno luogo su differenti scale spaziali e temporali. Poiché il loro divario può essere enorme, i fenomeni che interessano sono spesso descritti da teorie fisiche diverse:

I recenti sviluppi della scienza dei materiali e dei procedimenti di fabbricazione rendono possibile la realizzazione di strutture e di materiali con proprietà microscopiche (e sub-microscopiche) finemente calibrate. Per una migliore comprensione del loro comportamento sono necessari modelli matematici che tengano conto dell'interazione tra fenomeni che hanno luogo su differenti scale spaziali e temporali. Poiché il loro divario può essere enorme, i fenomeni che interessano sono spesso descritti da teorie fisiche diverse: per esempio, dalla meccanica quantistica a scala atomica e sub-atomica,

I recenti sviluppi della scienza dei materiali e dei procedimenti di fabbricazione rendono possibile la realizzazione di strutture e di materiali con proprietà microscopiche (e sub-microscopiche) finemente calibrate. Per una migliore comprensione del loro comportamento sono necessari modelli matematici che tengano conto dell'interazione tra fenomeni che hanno luogo su differenti scale spaziali e temporali. Poiché il loro divario può essere enorme, i fenomeni che interessano sono spesso descritti da teorie fisiche diverse: per esempio, dalla meccanica quantistica a scala atomica e sub-atomica, dalla meccanica statistica su una scala mesoscopica

I recenti sviluppi della scienza dei materiali e dei procedimenti di fabbricazione rendono possibile la realizzazione di strutture e di materiali con proprietà microscopiche (e sub-microscopiche) finemente calibrate. Per una migliore comprensione del loro comportamento sono necessari modelli matematici che tengano conto dell'interazione tra fenomeni che hanno luogo su differenti scale spaziali e temporali. Poiché il loro divario può essere enorme, i fenomeni che interessano sono spesso descritti da teorie fisiche diverse: per esempio, dalla meccanica quantistica a scala atomica e sub-atomica, dalla meccanica statistica su una scala mesoscopica e da una qualche teoria di (termo-)meccanica dei continui su scale abbastanza grandi

I recenti sviluppi della scienza dei materiali e dei procedimenti di fabbricazione rendono possibile la realizzazione di strutture e di materiali con proprietà microscopiche (e sub-microscopiche) finemente calibrate. Per una migliore comprensione del loro comportamento sono necessari modelli matematici che tengano conto dell'interazione tra fenomeni che hanno luogo su differenti scale spaziali e temporali. Poiché il loro divario può essere enorme, i fenomeni che interessano sono spesso descritti da teorie fisiche diverse: per esempio, dalla meccanica quantistica a scala atomica e sub-atomica, dalla meccanica statistica su una scala mesoscopica e da una qualche teoria di (termo-)meccanica dei continui su scale abbastanza grandi (ma, in parecchi casi fortunati, non così grandi come ci si aspetterebbe).

I recenti sviluppi della scienza dei materiali e dei procedimenti di fabbricazione rendono possibile la realizzazione di strutture e di materiali con proprietà microscopiche (e sub-microscopiche) finemente calibrate. Per una migliore comprensione del loro comportamento sono necessari modelli matematici che tengano conto dell'interazione tra fenomeni che hanno luogo su differenti scale spaziali e temporali. Poiché il loro divario può essere enorme, i fenomeni che interessano sono spesso descritti da teorie fisiche diverse: per esempio, dalla meccanica quantistica a scala atomica e sub-atomica, dalla meccanica statistica su una scala mesoscopica e da una qualche teoria di (termo-)meccanica dei continui su scale abbastanza grandi (ma, in parecchi casi fortunati, non così grandi come ci si aspetterebbe). L'approccio che propongo alla risoluzione di questi problemi è l'accoppiamento 'on the fly' tra dinamica molecolare e termomeccanica dei continui

I recenti sviluppi della scienza dei materiali e dei procedimenti di fabbricazione rendono possibile la realizzazione di strutture e di materiali con proprietà microscopiche (e sub-microscopiche) finemente calibrate. Per una migliore comprensione del loro comportamento sono necessari modelli matematici che tengano conto dell'interazione tra fenomeni che hanno luogo su differenti scale spaziali e temporali. Poiché il loro divario può essere enorme, i fenomeni che interessano sono spesso descritti da teorie fisiche diverse: per esempio, dalla meccanica quantistica a scala atomica e sub-atomica, dalla meccanica statistica su una scala mesoscopica e da una qualche teoria di (termo-)meccanica dei continui su scale abbastanza grandi (ma, in parecchi casi fortunati, non così grandi come ci si aspetterebbe). L'approccio che propongo alla risoluzione di questi problemi è l'accoppiamento 'on the fly' tra dinamica molecolare e termomeccanica dei continui, basato su una reinterpretazione multi-scala e un'estensione del metodo introdotto trent'anni fa da Andersen, Parrinello e Rahman.



# LaMS

Modelling & Simulation Lab

## APR seminal papers

- H.C. Andersen, Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *Journal of Chemical Physics*, **72**(4):2384–2393, 1980.
- M. Parrinello and A. Rahman, Crystal structure and pair potentials: A molecular-dynamics study. *Physical Review Letters*, **45**(14):1196–1199, 1980.
- M. Parrinello and A. Rahman, Polymorphic transitions in single crystals: A new molecular dynamics method. *Journal of Applied Physics*, **52**(12):7182–7190, 1981.

## Newtonian MD

$$\mathcal{L} : (\mathbf{p}, \dot{\mathbf{p}}) \mapsto \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\dot{\mathbf{p}}_i|^2 - U(\mathbf{p})$$

## Newtonian MD

$$\mathcal{L} : (\mathbf{p}, \dot{\mathbf{p}}) \mapsto \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\dot{\mathbf{p}}_i|^2 - U(\mathbf{p})$$

$$\mathbf{p} := (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_i, \dots, \mathbf{p}_N)$$

## Newtonian MD

$$\mathcal{L} : (\mathbf{p}, \dot{\mathbf{p}}) \mapsto \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\dot{\mathbf{p}}_i|^2 - U(\mathbf{p})$$

$$\mathbf{p} := (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_i, \dots, \mathbf{p}_N)$$

$$U(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N U_1^i(\mathbf{p}_i) + U_{>}(\mathbf{p})$$

## Newtonian MD

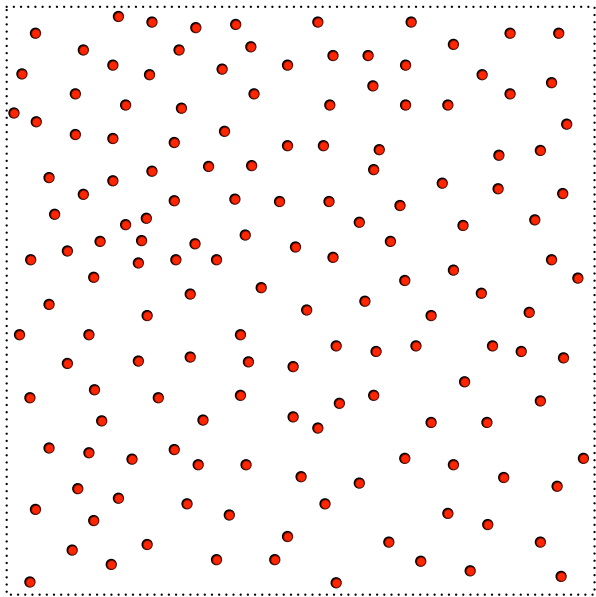
$$\mathcal{L} : (\mathbf{p}, \dot{\mathbf{p}}) \mapsto \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\dot{\mathbf{p}}_i|^2 - U(\mathbf{p})$$

$$\mathbf{p} := (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_i, \dots, \mathbf{p}_N)$$

$$U(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N U_1^i(\mathbf{p}_i) + U_{>}(\mathbf{p})$$

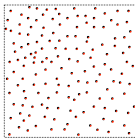
$$U_{>}(\mathbf{p}^{\circ}) = U_{>}(\mathbf{p})$$

## MD cell: a cartoon

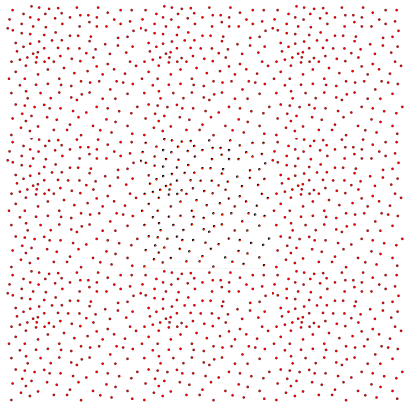


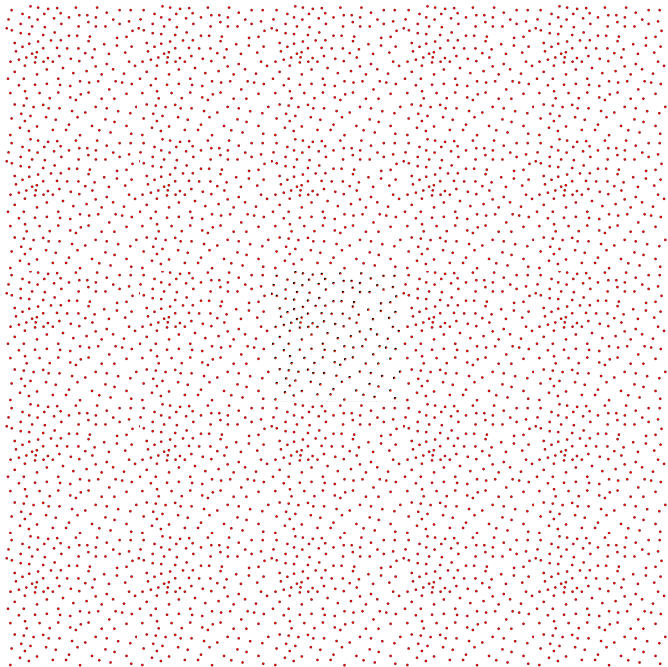
# The periodicity trick

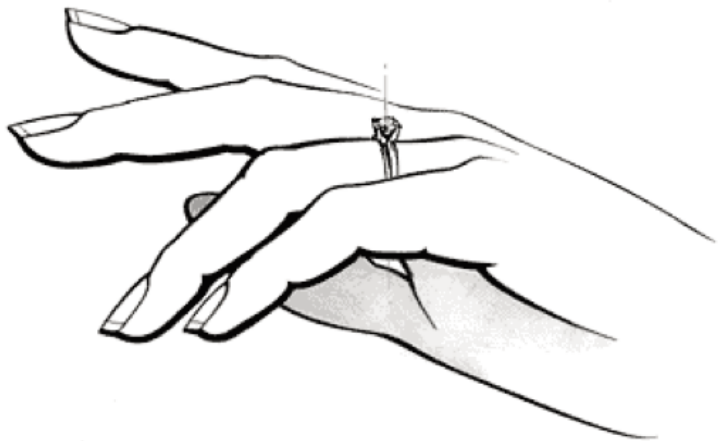
# The periodicity trick



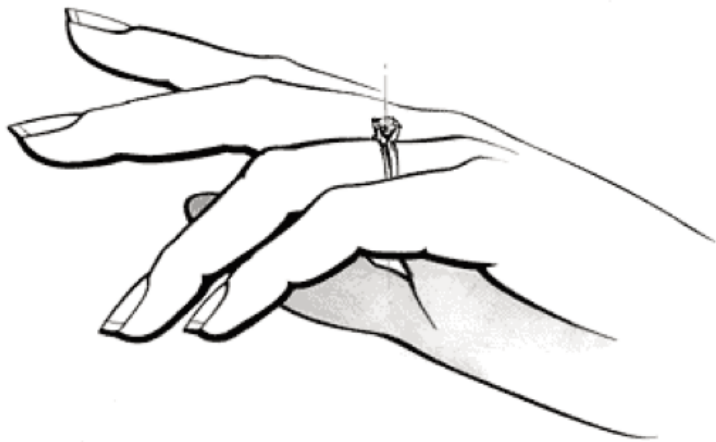
## The periodicity trick







$$\frac{1}{2} \text{ carat} \simeq 10^{-2} \text{ mol}$$



$\frac{1}{2}$  carat  $\simeq 10^{-2}$  mol  $\simeq$  an array of  $(\simeq 2 \cdot 10^5)^3 \simeq$   
 $\simeq 6 \cdot 10^{15}$  cells, each containing  $\simeq 10^6$  C atoms

# Basic Lagrangian

(per cell)

$$\mathcal{L} : (\mathbf{p}, \dot{\mathbf{p}}) \mapsto$$

# Basic Lagrangian

(per cell)

$$\mathcal{L} : (\mathbf{p}, \dot{\mathbf{p}}) \mapsto \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\dot{\mathbf{p}}_i|^2 - \sum_{i=1}^N U_1^i(\mathbf{p}_i)$$

# Basic Lagrangian

(per cell)

$$\mathcal{L} : (\mathbf{p}, \dot{\mathbf{p}}) \mapsto \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\dot{\mathbf{p}}_i|^2 - \sum_{i=1}^N U_1^i(\mathbf{p}_i) - \tilde{U}(\mathbf{p})$$

## Basic Lagrangian

(per cell)

$$\mathcal{L} : (\mathbf{p}, \dot{\mathbf{p}}) \mapsto \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\dot{\mathbf{p}}_i|^2 - \sum_{i=1}^N U_1^i(\mathbf{p}_i) - \tilde{U}(\mathbf{p})$$

$$\tilde{U}(\mathbf{p}) := \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} U_{>}(\mathfrak{P}_M)$$

$$\mathfrak{P}_M := (\mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_m, \dots, \mathbf{p}_M), \quad \mathbf{p}_m := \mathbf{p} + \mathbf{t}_m$$

# Basic Lagrangian

(per cell)

$$\mathcal{L} : (\mathbf{p}, \dot{\mathbf{p}}) \mapsto \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\dot{\mathbf{p}}_i|^2 - \sum_{i=1}^N U_1^i(\mathbf{p}_i) \\ - \tilde{U}(\mathbf{p}) - U_{\text{inh}}(\mathbf{p})$$

$$\tilde{U}(\mathbf{p}) := \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} U_{>}(\mathfrak{P}_M)$$

$$\mathfrak{P}_M := (\mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_m, \dots, \mathbf{p}_M), \quad \mathbf{p}_m := \mathbf{p} + \mathbf{t}_m$$

- $U_{\text{inh}}$  ... far-field effective potential

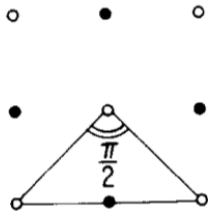
# Drawbacks

## Drawbacks

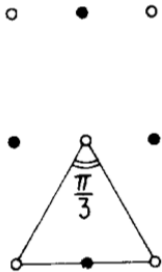
- **Number** of particles, total **energy**, and **volume** ( $N, E, V$ ) stay constant ( $\implies$  *microcanonical ensemble*).

## Drawbacks

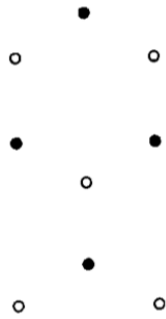
- **Number** of particles, total **energy**, and **volume** ( $N, E, V$ ) stay constant ( $\implies$  *microcanonical ensemble*).
- Also the **shape** of the MD cell does not change.



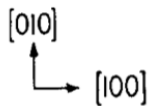
(a)



(b)



(c)



# APR cure

(my reconstruction)

# APR cure

(my reconstruction)

$$\tau \mapsto (\mathbf{a}_1(\tau), \dots, \mathbf{a}_\ell(\tau), \dots, \mathbf{a}_n(\tau))$$

# APR cure

(my reconstruction)

$$\tau \mapsto (\mathbf{a}_1(\tau), \dots, \mathbf{a}_\ell(\tau), \dots, \mathbf{a}_n(\tau))$$

$$\mathbf{a}_\ell(\tau) = \mathbf{F}(\tau) \mathbf{e}_\ell \quad (1 \leq \ell \leq n)$$

## APR cure

(my reconstruction)

$$\tau \mapsto (\mathbf{a}_1(\tau), \dots, \mathbf{a}_\ell(\tau), \dots, \mathbf{a}_n(\tau))$$

$$\mathbf{a}_\ell(\tau) = \mathbf{F}(\tau) \mathbf{e}_\ell \quad (1 \leq \ell \leq n)$$

$$\mathbf{p}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{r}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{F}(\tau) \mathbf{s}_i(\tau)$$

## APR cure

(my reconstruction)

$$\tau \mapsto (\mathbf{a}_1(\tau), \dots, \mathbf{a}_\ell(\tau), \dots, \mathbf{a}_n(\tau))$$

$$\mathbf{a}_\ell(\tau) = \mathbf{F}(\tau) \mathbf{e}_\ell \quad (1 \leq \ell \leq n)$$

$$\mathbf{p}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{r}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{F}(\tau) \mathbf{s}_i(\tau)$$

- $\mathbf{p}_o$  ... cell centre

## APR cure

(my reconstruction)

$$\tau \mapsto (\mathbf{a}_1(\tau), \dots, \mathbf{a}_\ell(\tau), \dots, \mathbf{a}_n(\tau))$$

$$\mathbf{a}_\ell(\tau) = \mathbf{F}(\tau) \mathbf{e}_\ell \quad (1 \leq \ell \leq n)$$

$$\mathbf{p}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{r}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{F}(\tau) \mathbf{s}_i(\tau)$$

- $\mathbf{p}_o$  ... cell centre
- $\mathbf{r} := (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N)$  ... radius vectors  
(w.r.t.  $\mathbf{p}_o$ )

## APR cure

(my reconstruction)

$$\tau \mapsto (\mathbf{a}_1(\tau), \dots, \mathbf{a}_\ell(\tau), \dots, \mathbf{a}_n(\tau))$$

$$\mathbf{a}_\ell(\tau) = \mathbf{F}(\tau) \mathbf{e}_\ell \quad (1 \leq \ell \leq n)$$

$$\mathbf{p}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{r}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{F}(\tau) \mathbf{s}_i(\tau)$$

- $\mathbf{p}_o$  ... cell centre
- $\mathbf{r} := (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N)$  ... radius vectors  
(w.r.t.  $\mathbf{p}_o$ )
- $\mathbf{F}$  ... cell deformation

## APR cure

(my reconstruction)

$$\tau \mapsto (\mathbf{a}_1(\tau), \dots, \mathbf{a}_\ell(\tau), \dots, \mathbf{a}_n(\tau))$$

$$\mathbf{a}_\ell(\tau) = \mathbf{F}(\tau) \mathbf{e}_\ell \quad (1 \leq \ell \leq n)$$

$$\mathbf{p}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{r}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{F}(\tau) \mathbf{s}_i(\tau)$$

- $\mathbf{p}_o$  ... cell centre
- $\mathbf{r} := (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N)$  ... radius vectors  
(w.r.t.  $\mathbf{p}_o$ )
- $\mathbf{F}$  ... cell deformation
- $\mathbf{s} := (\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_i, \dots, \mathbf{s}_N)$  ... scaled radius vectors

## APR cure

(my reconstruction)

$$\tau \mapsto (\mathbf{a}_1(\tau), \dots, \mathbf{a}_\ell(\tau), \dots, \mathbf{a}_n(\tau))$$

$$\mathbf{a}_\ell(\tau) = \mathbf{F}(\tau) \mathbf{e}_\ell \quad (1 \leq \ell \leq n)$$

$$\mathbf{p}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{r}_i(\tau) = \mathbf{p}_o(\tau) + \mathbf{F}(\tau) \mathbf{s}_i(\tau)$$

- $\mathbf{p}_o$  ... cell centre
- $\mathbf{r} := (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N)$  ... radius vectors  
(w.r.t.  $\mathbf{p}_o$ )
- $\mathbf{F}$  ... cell deformation
- $\mathbf{s} := (\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_i, \dots, \mathbf{s}_N)$  ... scaled radius vectors

# APR cure

(discussion)

# APR cure

(discussion)

(a)  $\mathbf{F}(\tau) = \mathbf{F}(\tau_0) \dots$  pre-Andersen MD

# APR cure

(discussion)

(a)  $\mathbf{F}(\tau) = \mathbf{F}(\tau_0) \dots$  pre-Andersen MD

(b)  $\mathfrak{s}(\tau) = \mathfrak{s}(\tau_0) \dots$  Cauchy-Born rule

# APR cure

(discussion)

(a)  $\mathbf{F}(\tau) = \mathbf{F}(\tau_0) \dots$  pre-Andersen MD

(b)  $\mathfrak{s}(\tau) = \mathfrak{s}(\tau_0) \dots$  Cauchy-Born rule

(c)  $\mathfrak{s}(\tau) = \mathfrak{S}(\mathbf{F}(\tau); \mathfrak{s}(\tau_0)) \dots$  static condensation

# APR recipe: extended Lagrangian

$$\mathcal{L}_{APR} : (\mathfrak{s}, \dot{\mathfrak{s}}; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto$$

APR recipe:  
extended Lagrangian

$$\mathcal{L}_{APR} : (\mathfrak{s}, \dot{\mathfrak{s}}; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto$$
$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathfrak{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathfrak{s}}_i) + \frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}})$$

## APR recipe: extended Lagrangian

$$\mathcal{L}_{APR} : (\mathfrak{s}, \dot{\mathfrak{s}}; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathfrak{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathfrak{s}}_i) + \frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}})$$

- $\mathbf{C} := \mathbf{F}^\top \mathbf{F}$  ... cell metric

APR recipe:  
extended Lagrangian

$$\mathcal{L}_{APR} : (\mathfrak{s}, \dot{\mathfrak{s}}; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathfrak{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathfrak{s}}_i) + \frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}})$$

- $\mathbf{C} := \mathbf{F}^\top \mathbf{F}$  ... cell metric
- $\mathbf{M} (= W \mathbf{I})$  ... scaled cell inertia tensor (given)

APR recipe:  
extended Lagrangian

$$\mathcal{L}_{APR} : (\mathfrak{s}, \dot{\mathfrak{s}}; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathfrak{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathfrak{s}}_i) + \frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}}) - \tilde{U}(\mathbf{F}\mathfrak{s}) + V_0 \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}$$

- $\mathbf{C} := \mathbf{F}^\top \mathbf{F}$  ... cell metric
- $\mathbf{M} (= W \mathbf{I})$  ... scaled cell inertia tensor (given)

APR recipe:  
extended Lagrangian

$$\mathcal{L}_{APR} : (\mathfrak{s}, \dot{\mathfrak{s}}; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathfrak{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathfrak{s}}_i) + \frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}}) - \tilde{U}(\mathbf{F}\mathfrak{s}) + V_0 \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}$$

- $\mathbf{C} := \mathbf{F}^\top \mathbf{F}$  ... cell metric
- $\mathbf{M} (= W \mathbf{I})$  ... scaled cell inertia tensor (given)
- $V_0 \mathbf{S}$  ... prototype volume  $\times$  applied stress (given)

▷ assuming:  $U_1^i = 0$ ,  $U_{\text{inh}}(\mathfrak{p}) = -V_0 \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}$

# APR recipe:

equations of motions

## APR recipe: equations of motions

$$m_i(\ddot{\mathbf{s}}_i + \mathbf{C}^{-1}\dot{\mathbf{C}}\dot{\mathbf{s}}_i) = -\mathbf{F}^{-1} D_i \tilde{U}|_{\mathbf{F}\mathbf{s}}$$

## APR recipe: equations of motions

$$m_i(\ddot{\mathbf{s}}_i + \mathbf{C}^{-1}\dot{\mathbf{C}}\dot{\mathbf{s}}_i) = -\mathbf{F}^{-1} D_i \tilde{U}|_{\mathbf{F}\mathbf{s}}$$

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{F}} = V_0\mathbf{S} - \sum_{i=1}^N \left( \mathbf{s}_i \otimes D_i \tilde{U}|_{\mathbf{F}\mathbf{s}} - \mathbf{F}(m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \dot{\mathbf{s}}_i) \right)$$

## A quote from Parrinello & Rahman 1981

*Whether such a Lagrangian is derivable from first principles is a question for further study.*

# Behind APR recipe:

the artless Lagrangian

$$\mathcal{L}_{\text{artl}}: (\mathfrak{s}, \dot{\mathfrak{s}}; \mathbf{p}_0, \dot{\mathbf{p}}_0; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto$$

## Behind APR recipe: the artless Lagrangian

$$\mathcal{L}_{\text{artl}}: (\mathbf{s}, \dot{\mathbf{s}}; \mathbf{p}_0, \dot{\mathbf{p}}_0; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto$$
$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathbf{s}}_i) + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}})$$

## Behind APR recipe:

the artless Lagrangian

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{artl}} : (\mathbf{s}, \dot{\mathbf{s}}; \mathbf{p}_o, \dot{\mathbf{p}}_o; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto \\ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathbf{s}}_i) + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}}) \\ + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \right) |\dot{\mathbf{p}}_o|^2 \end{aligned}$$

## Behind APR recipe:

the artless Lagrangian

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{artl}} : (\mathbf{s}, \dot{\mathbf{s}}; \mathbf{p}_o, \dot{\mathbf{p}}_o; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto \\ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathbf{s}}_i) + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}}) \\ + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \right) |\dot{\mathbf{p}}_o|^2 + \left( \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F}) \end{aligned}$$

## Behind APR recipe:

the artless Lagrangian

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{artl}}: (\mathbf{s}, \dot{\mathbf{s}}; \mathbf{p}_o, \dot{\mathbf{p}}_o; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto & \\ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathbf{s}}_i) + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}}) & \\ + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \right) |\dot{\mathbf{p}}_o|^2 + \left( \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F}) & \\ + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i (\mathbf{F} \mathbf{s}_i) \right) \cdot \dot{\mathbf{p}}_o & \end{aligned}$$

## Behind APR recipe:

the artless Lagrangian

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{artl}}: (\mathbf{s}, \dot{\mathbf{s}}; \mathbf{p}_o, \dot{\mathbf{p}}_o; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto & \\ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathbf{s}}_i) + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}}) & \\ + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \right) |\dot{\mathbf{p}}_o|^2 + \left( \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F}) & \\ + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i (\mathbf{F} \mathbf{s}_i) \right) \cdot \dot{\mathbf{p}}_o - \tilde{U}(\mathbf{F} \mathbf{s}) + V_0(\mathbf{S} \cdot \mathbf{F} + \mathbf{b} \cdot (\mathbf{p}_o - \mathbf{o})) & \end{aligned}$$

▷ assuming:

$$\sum_{i=1}^N U_1^i(\mathbf{p}_i) = -V_0 \mathbf{b} \cdot (\mathbf{p}_o - \mathbf{o})$$

## Behind APR recipe:

the artless Lagrangian

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{artl}}: (\mathbf{s}, \dot{\mathbf{s}}; \mathbf{p}_o, \dot{\mathbf{p}}_o; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto & \\ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathbf{s}}_i) + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}}) & \\ + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \right) |\dot{\mathbf{p}}_o|^2 + \left( \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F}) & \\ + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i (\mathbf{F} \mathbf{s}_i) \right) \cdot \dot{\mathbf{p}}_o - \tilde{U}(\mathbf{F} \mathbf{s}) + V_0(\mathbf{S} \cdot \mathbf{F} + \mathbf{b} \cdot (\mathbf{p}_o - \mathbf{o})) & \end{aligned}$$

▷ assuming:

$$\sum_{i=1}^N U_1^i(\mathbf{p}_i) = -V_0 \mathbf{b} \cdot (\mathbf{p}_o - \mathbf{o})$$

## Behind APR recipe:

the artless Lagrangian

$$\mathcal{L}_{\text{artl}}: (\mathbf{s}, \dot{\mathbf{s}}; \mathbf{p}_o, \dot{\mathbf{p}}_o; \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}) \mapsto$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \cdot (\mathbf{C} \dot{\mathbf{s}}_i) + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \dot{\mathbf{F}})$$

$$+ \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i \right) |\dot{\mathbf{p}}_o|^2 + \left( \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \right) \cdot (\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F})$$

$$+ \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N m_i (\mathbf{F} \mathbf{s}_i) \right) \cdot \dot{\mathbf{p}}_o - \tilde{U}(\mathbf{F} \mathbf{s}) + V_0(\mathbf{S} \cdot \mathbf{F} + \mathbf{b} \cdot (\mathbf{p}_o - \mathbf{o}))$$

▷ assuming:

$$\sum_{i=1}^N U_1^i(\mathbf{p}_i) = -V_0 \mathbf{b} \cdot (\mathbf{p}_o - \mathbf{o})$$

# Beyond APR recipe

Key question:

# Beyond APR recipe

Key question:

Under which conditions  $\mathcal{L}_{APR} \sim \mathcal{L}_{artl}$  ?

# Beyond APR recipe

Answer:

## Beyond APR recipe

Answer:

- $$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \quad \& \quad \dot{\mathbf{M}} = 0$$

## Beyond APR recipe

Answer:

- $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \quad \& \quad \dot{\mathbf{M}} = 0$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \in \text{Skw}$$

## Beyond APR recipe

Answer:

- $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \quad \& \quad \dot{\mathbf{M}} = 0$

$\Rightarrow \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \in \text{Skw}$

- $\text{skw}(\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F}) = 0 \quad \iff \quad \text{skw}(\dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}) = 0$

## Beyond APR recipe

Answer:

- $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \quad \& \quad \dot{\mathbf{M}} = 0$

$\Rightarrow \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \in \text{Skw}$

- $\text{skw}(\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F}) = 0 \quad \iff \quad \text{skw}(\dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}) = 0$

- $\dot{\mathbf{p}}_o = 0$

## Beyond APR recipe

Answer:

- $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \quad \& \quad \dot{\mathbf{M}} = 0$

$\Rightarrow \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \in \text{Skw}$

- $\text{skw}(\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F}) = 0 \quad \iff \quad \text{skw}(\dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}) = 0$

- $\dot{\mathbf{p}}_o = 0$

## Beyond APR recipe

Answer:

- $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \quad \& \quad \dot{\mathbf{M}} = 0$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \in \text{Skw}$$

- $\text{skw}(\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F}) = 0 \quad \iff \quad \text{skw}(\dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}) = 0$

- $\dot{\mathbf{p}}_o = 0$

## Beyond APR recipe

Interpretation:

- $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i \quad \& \quad \dot{\mathbf{M}} \simeq 0$

$\Rightarrow \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \mathbf{s}_i \in \text{Skw}$

- $\text{skw}(\dot{\mathbf{F}}^\top \mathbf{F}) = 0 \quad \iff \quad \text{skw}(\dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}) \simeq 0$

- $\dot{\mathbf{p}}_o \simeq 0$

# Beyond APR recipe

Scale separation:

# Beyond APR recipe

Scale separation:

- The **scaled** cell inertia tensor is **slowly varying**.

# Beyond APR recipe

Scale separation:

- The **scaled** cell inertia tensor is **slowly varying**.
- The **rigid** component of the cell motion is **slow**, i.e., it cannot be gauged on the cell scale.

# Beyond APR recipe

Scale separation:

- The **scaled** cell inertia tensor is **slowly varying**.
- The **rigid** component of the cell motion is **slow**, i.e., it cannot be gauged on the cell scale.
- The **stress** is **nearly uniform** over the cell, i.e., its divergence cannot be gauged on the cell scale.

# Beyond APR recipe

Scale separation:

- The **scaled** cell inertia tensor is **slowly varying**.
- The **rigid** component of the cell motion is **slow**, i.e., it cannot be gauged on the cell scale.
- The **stress** is **nearly uniform** over the cell, i.e., its divergence cannot be gauged on the cell scale.
- The **stress-strain relation** is gauged on the cell scale.

## APR-like recipe:

equations of motions

$$m_i(\ddot{\mathbf{s}}_i + \mathbf{C}^{-1}\dot{\mathbf{C}}\dot{\mathbf{s}}_i) = -\mathbf{F}^{-1} D_i \tilde{U}|_{\mathbf{F}\mathbf{s}}$$

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{F}} = V_0\mathbf{S} - \sum_{i=1}^N \left( \mathbf{s}_i \otimes D_i \tilde{U}|_{\mathbf{F}\mathbf{s}} - \mathbf{F}(m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \dot{\mathbf{s}}_i) \right)$$

## APR-like recipe:

equations of motions

$$m_i(\ddot{\mathbf{s}}_i + \mathbf{C}^{-1}\dot{\mathbf{C}}\dot{\mathbf{s}}_i) = -\mathbf{F}^{-1} D_i \tilde{U}|_{\mathbf{F}\mathbf{s}}$$

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{F}} = V_0\mathbf{S} - \sum_{i=1}^N \left( \mathbf{s}_i \otimes D_i \tilde{U}|_{\mathbf{F}\mathbf{s}} - \mathbf{F}(m_i \dot{\mathbf{s}}_i \otimes \dot{\mathbf{s}}_i) \right)$$

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i$$

# Interacting APR-like cells

## Interacting APR-like cells

- Construct macroscopic fields by interpolation (denoted by  $\uparrow$ ) over an array of widely spaced cells:

$$\uparrow \mathbf{F}, \uparrow \mathbf{S}, \uparrow \mathbf{p}_o, \uparrow \mathbf{b}, \uparrow \rho_0 \quad \left( \rho_0 := \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^N m_i \right)$$

## Interacting APR-like cells

- Construct macroscopic fields by interpolation (denoted by  $\uparrow$ ) over an array of widely spaced cells:

$$\uparrow\mathbf{F}, \uparrow\mathbf{S}, \uparrow\mathbf{p}_o, \uparrow\mathbf{b}, \uparrow\rho_0 \quad \left( \rho_0 := \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^N m_i \right)$$

- Enforce **balance** of force at supra-cell scale:

$$\widetilde{\text{div}}\uparrow\mathbf{S} + \uparrow\mathbf{b} - \uparrow\rho_0\ddot{\mathbf{p}}_o = 0$$

## Interacting APR-like cells

- Construct macroscopic fields by interpolation (denoted by  $\uparrow$ ) over an array of widely spaced cells:

$$\uparrow\mathbf{F}, \uparrow\mathbf{S}, \uparrow\mathbf{p}_o, \uparrow\mathbf{b}, \uparrow\rho_0 \quad \left( \rho_0 := \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^N m_i \right)$$

- Enforce **balance** of force at supra-cell scale:

$$\widetilde{\text{div}}\uparrow\mathbf{S} + \uparrow\mathbf{b} - \uparrow\rho_0\ddot{\mathbf{p}}_o = 0$$

- Enforce **compatibility** of deformation at supra-cell scale:

$$\uparrow\mathbf{F} = \widetilde{\nabla}\uparrow\mathbf{p}_o$$

## Interacting APR-like cells

- Construct macroscopic fields by interpolation (denoted by  $\uparrow$ ) over an array of widely spaced cells:

$$\uparrow \mathbf{F}, \uparrow \mathbf{S}, \uparrow \mathbf{p}_o, \uparrow \mathbf{b}, \uparrow \rho_0 \quad \left( \rho_0 := \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^N m_i \right)$$

- Enforce **balance** of force at supra-cell scale:

$$\widetilde{\text{div}} \uparrow \mathbf{S} + \uparrow \mathbf{b} - \uparrow \rho_0 \ddot{\mathbf{p}}_o = 0$$

- Enforce **compatibility** of deformation at supra-cell scale:

$$\uparrow \mathbf{F} = \widetilde{\nabla} \uparrow \mathbf{p}_o$$

- These conditions determine the stress  $\mathbf{S}$  and the mean position  $\mathbf{p}_o$  (to within a rigid motion).