

DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.06

УДК 539.3

**С.А. Лурье<sup>1,2</sup>, Ю.О. Соляев<sup>1,2</sup>**<sup>1</sup>Институт прикладной механики РАН, Москва, Россия<sup>2</sup>Вычислительный центр РАН, Москва, Россия

## **МЕТОД ИДЕНТИФИКАЦИИ ПАРАМЕТРОВ ГРАДИЕНТНЫХ МОДЕЛЕЙ НЕОДНОРОДНЫХ СТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИСКРЕТНО-АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Рассматриваются градиентные теории упругости, дается их характеристика, обсуждаются особенности, приводятся соответствующие постановки краевых задач. Дается краткое описание прикладных однопараметрических вариантов градиентных теорий упругости. Представлена континуальная градиентная модель неоднородных двухкомпонентных композитных структур, позволяющая оценивать влияние масштабных параметров на эффективные механические свойства.

Предлагается метод идентификации дополнительных физических параметров градиентных моделей теории упругости, основанный на сравнении результатов континуального и дискретно-атомистического моделирования конкретных тестовых гетерогенных структур. В результате предложена процедура определения дополнительного параметра прикладных градиентных континуальных моделей гетерогенных сред, характеризующего протяженность межфазной зоны в области контакта фаз двухкомпонентного композита и определяющего масштабные эффекты полей когезионных взаимодействий, локализованных около границ контакта фаз. Дается описание алгоритма, в соответствии с которым дополнительный физический параметр градиентной модели находится через параметры потенциалов, используемых для описания рассматриваемых конкретных структур при их дискретном атомистическом моделировании.

Для обоснования метода используются численные результаты сравнения решений дискретных и континуальных моделей, показывающих чрезвычайно высокую степень точности континуальной однопараметрической градиентной теории при описании счетного множества тестовых гетерогенных двухкомпонентных структур, образованных атомарными подструктурами с различными свойствами (с различными параметрами потенциалов межатомного взаимодействия).

Демонстрация метода идентификации параметров градиентных теорий упругости проводится для гетерогенных структур, хорошо описываемых с помощью потенциала Леннарда-Джонса или потенциала Морзе. Считается, что параметры потенциалов известны, а перекрестное взаимодействие атомов разного типа определяется по правилу Лоренца-Бергло.

**Ключевые слова:** градиентные теории, градиентные модули, критерий симметрии, однопараметрические модели, слоистый композит, дискретно-атомистическое моделирование, масштабный параметр, идентификация

S.A. Lurie<sup>1,2</sup>, Y.O. Solyaev<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Applied Mechanics RAS, Moscow, Russian Federation

<sup>2</sup>Computing Centre RAS, Moscow, Russian Federation

## IDENTIFICATION METHOD OF GRADIENT MODELS PARAMETERS OF INHOMOGENEOUS STRUCTURES BASED ON DISCRETE ATOMISTIC SIMULATIONS

This paper considers characteristics, features and corresponding boundary value problems of gradient theories of elasticity. A brief description of one-parametric applied model, which is one of the several variants of the gradient elasticity theories is given here. In relation to that, we represent a continuum gradient model of two-phase composite structures that allow evaluation of the influence of scale parameters on their effective mechanical properties.

In identifying the additional physical parameters of gradient elasticity models, a new method is introduced where a comparison of the results of continuum and discrete-atomistic modelling for specific tested heterogeneous structures is made. As a result we suggested a procedure and the respective algorithm defining the additional parameter of applied gradient continuum model of heterogeneous media; and in such procedure, an interphase zone is characterized at the contact surface of a two-phase composite and the scale effects represented by cohesions-interaction fields, which are localized near to the boundaries of contact surfaces. This additional physical parameter of gradient model is found through parameters of potentials, which are used to describe the specific studied structure in the discrete-atomistic modelling.

To justify and validate the proposed method, a numerical investigation is conducted and comparison is made between the results of continuum and discrete-atomistic modelling. The examination reveals that a high degree of accuracy of prediction can be provided by the continuum one-parametric gradient theory when describing the effective properties of countable multiple set of two-phase heterogeneous studied structures, which are formed by atomic substructures with various properties (various parameters of potentials).

Finally, it is demonstrated that the identification method of parameters in gradient elasticity theories for heterogeneous structures is well described by Leonard-John potential and Morse potential. Furthermore, we consider that when the parameters of potentials are known, the various types of cross interactions of atoms can be treated as 'ideal' or 'damaged' interactions as per Lorentz-Berthelot's rule.

**Keywords:** gradient theory, gradient moduli, criterion of symmetry, one-parametrical model, layered composite, discrete atomistic modelling, scale parameter, identification

### Введение

Исторически развитие градиентных теорий упругости началось благодаря пионерским работам [1–4]. В противоположность классической теории упругости, для которой в определяющих уравнениях не принимаются во внимание какие-либо масштабные параметры, градиентные теории деформации включают параметры размерности длины, и поэтому вполне подходят для моделирования масштабных эффектов.

В настоящее время градиентные теории упругости широко используются для описания размерных эффектов и нелокального поведения, наблюдаемых в полукристаллических и наноструктурированных

материалах, геоматериалах, биоматериалах, а также для моделирования аномальных свойств сверхтонких структур (микро- и наночастиц, сверхтонких консольных балок и плит, углеродных нанотрубок и металлических нанопроволок) [5–9]. Размерные эффекты в сверхтонких структурах наблюдались экспериментально, например, при испытании на изгиб стержней из алюминия, эпоксидных и полипропиленовых консольных балок [10–12]. Градиентные теории упругости применяются при оценке эффективных свойств наполненных композитов с микро-/нановключениями для учета так называемых эффектов второго порядка [13–20], а также привлекаются для оценки соответствия между дискретным атомистическим уровнем моделирования и континуальным уровнем моделирования, используемым в механике сплошной среды [21].

Для моделирования масштабных эффектов в различных физико-механических процессах, как правило, используются градиентные теории второго порядка в силу их относительной простоты [8, 18, 22, 23]. В градиентной теории второго порядка тензор напряжений Коши  $\sigma$  и псевдотензор моментных напряжений  $\mu$  линейно связаны с тензором деформаций  $\epsilon$  и тензором градиента деформаций  $\chi$ . Из условий симметрии (градиентная теория деформаций с симметричным тензором деформаций) в общем случае имеется 300 независимых коэффициентов материалов, в то время как для изотропных центросимметричных материалов это число физических постоянных снижается до 7 (см., например, [2, 5, 6]). Большое количество коэффициентов материалов, с одной стороны, подчеркивает богатство градиентных теорий, но с другой – указывает на очевидные трудности, возникающие на пути определения физических параметров из имеющегося набора экспериментальных исследований. Отметим, что, для того чтобы градиентная теория могла быть использована при моделировании в конкретных теоретических и инженерных задачах, физические постоянные должны быть определены достаточно надежно и достоверно. Следовательно, даже корректно построенная теория, но определенная с точностью до большого количества физических постоянных, которые невозможно достоверным образом извлечь из экспериментальных испытаний, становится несостоятельной с точки зрения конкретных приложений. Поэтому проблема определения дополнительных физических параметров в градиентных теориях упругости является весьма актуальной. Следует

отметить, что в некоторых случаях эту проблему удастся решить, используя не прямые методы, основанные, например, на сравнении теоретических результатов с данными экспериментальных исследований эффективных свойств нанокompозитов, наполненных жесткими наночастицами [18].

В данной работе мы обсуждаем вопрос о прямой оценке дополнительной физической постоянной, отвечающей за градиентные (масштабные) эффекты в прикладных вариантах градиентной теории упругости. Развивается методика определения неклассической физической постоянной, основанная на сравнении результатов прямого дискретно-атомистического моделирования неоднородных структур и результатов континуального моделирования, проведенного с использованием однопараметрической градиентной теории. Прямым обоснованием предлагаемой методики являются результаты предварительных исследований [21], показывающие, что градиентная теория дает очень точное описание свойств одномерных композитных цепочек, моделирование эффективных свойств которых проведено на основе прямого дискретного атомистического моделирования с использованием потенциала Леннарда-Джонса (6–12).

В статье развивается методика, основанная на рассмотрении соответственно одномерной дискретной модели системы композитов и одномерной континуальной модели композитов. В рассматриваемом случае континуальное решение, учитывающее масштабные эффекты и полученное для периодических композитных структур с использованием градиентной теории упругости, представлено в аналитическом виде, что облегчает процедуру определения неклассической физической постоянной. При этом формально при построении дискретной модели может быть использован любой потенциал, наиболее подходящий для моделирования рассматриваемого типа материалов.

## **1. Градиентные теории упругости**

Дадим краткое введение в градиентные теории упругости и представим варианты прикладных однопараметрических теорий упругости. Используем вариационную постановку для формулировки линейной градиентной теории упругости в перемещениях для изотропных центросимметричных материалов:

$$E = \frac{1}{2} \int C_{ijkl} R_{i,j} R_{k,l} dV + \frac{1}{2} \int C_{ijklmn} R_{i,jk} R_{l,mn} dV - \int f_i R_i dV - \oint (t_i R_i + q_i R_{i,j} n_j) dS. \quad (1)$$

Здесь  $R_i$  – вектор перемещений;  $f_i$  и  $t_i$ ,  $q_i$  – векторы заданных сил в объеме тела и на его поверхности;  $n_i$  – нормаль к поверхности тела в рассматриваемой точке;  $C_{ijkl}$  и  $C_{ijklmn}$  – соответственно тензор модулей классической теории упругости и тензор шестого ранга градиентных модулей для изотропных материалов.

Компоненты тензоров обычных и «моментных» напряжений определяются равенствами Грина:

$$\sigma_{ij} = \partial E / \partial R_{i,j} = C_{ijkl} R_{k,l}, \quad \mu_{ijk} = \partial E / \partial R_{i,jk} = C_{ijklmn} R_{l,mn}. \quad (2)$$

Тензор «моментных напряжений» учитывает «моментные» взаимодействия в объеме тела.

Предполагается, что для тензоров классических и градиентных модулей выполняются следующие необходимые условия потенциальности:

$$C_{ijkl} = C_{klij}, \quad C_{ijklmn} = C_{lmnijk}. \quad (3)$$

Для градиентной теории деформаций, более частной, чем градиентная теория дисторсий, следует ввести дополнительно условия симметрии по первой паре индексов:

$$C_{ijklmn} = C_{jiklmn}. \quad (4)$$

Для изотропной теории упругости тензор модулей упругости  $C_{ijkl}$  определяется через коэффициенты Ламе  $\lambda$ ,  $\mu$ :  $C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$ , где  $\delta_{ij}$  – дельта Кронекера. При вариации функционала потенциальной энергии (1) получаем уравнения равновесия и естественные статические граничные условия для градиентной теории упругости:

$$\sigma_{ij,j} - \mu_{ijk,kj} + f_i = 0, \quad (5)$$

$$\mu_{ijk} n_j n_k = q_i, \quad \sigma_{ij} n_j - \mu_{ijk,k} n_j - (\mu_{ijk} n_k)_{,j} + (\mu_{ijk} n_j n_k)_{,l} n_l = t_i. \quad (6)$$

Система разрешающих уравнений имеет повышенный порядок по сравнению с уравнениями Ламе классической теории упругости. Неклассические граничные условия для «моментных» напряжений позволяют дополнительно к усилиям на поверхности учесть влияние заданных внешних моментных факторов, приложенных на границе поверхности тела.

Уравнения (6) в контактных задачах дополняются условиями непрерывности перемещений и их первых производных.

## 2. О принципе симметрии в градиентных теориях упругости

Учитывая, что тензор дисторсии  $R_{i,j}$  считается непрерывным при вариационной постановке (1), имеет место независимость от порядка дифференцирования вектора перемещений  $R_{i,jk} = R_{i,kj}$ , и тензор вторых производных от перемещений  $\chi_{ijk} = R_{i,jk}$  является симметричным по последним двум индексам. Таким образом, следствием равенства (3) являются дополнительные условия симметрии для тензора градиентных модулей:

$$C_{ijklmn} = C_{ikjlmn}, \quad C_{ijklmn} = C_{ijklmn}. \quad (7)$$

Отметим, что антисимметричная часть градиентных модулей упругости  $(C_{ijklmn} - C_{ikjlmn}) / 2$  может быть произвольной в определяющих соотношениях для моментных напряжений  $\mu_{ijk}$  в (3). Нетрудно видеть, что антисимметричная часть градиентных модулей также не входит в выражение для плотности потенциальной энергии  $(C_{ijklmn} R_{i,jk} R_{l,mn}) / 2$ . Следовательно, можно говорить об энергетической невидимости несимметричных компонент градиентных тензоров  $(C_{ijklmn} - C_{ikjlmn}) / 2$ . Можно показать, что несимметричную часть градиентных тензоров упругости можно также игнорировать и при записи разрешающих уравнений равновесия (5) в перемещениях. Однако важно отметить, что несимметричная часть градиентных тензоров упругости может давать паразитный вклад в статические краевые условия (6):  $\sigma_{ij} n_j - \mu_{ijk,k} n_j - (\mu_{ijk} n_k) + (\mu_{ijk} n_j n_k)$ ,  $n_l = t_l$ , и должна быть исключена. Следовательно, в градиентной теории упругости условия симметрии для тензора градиентных модулей (7) являются критериями корректности и должны быть отнесены к дополнительным необходимым услови-

ям на тензоры упругости. Критерий симметрии градиентных теорий впервые установлен вместе с проф. А. Гусевым (ETH, Цюрих).

### 3. Прикладные градиентные теории упругости

В работах [2–4] показано, что плотность энергии деформации  $\bar{E}$  для градиентной теории,  $E = \int \bar{E} dV$ , для изотропного тела может быть записана через пять дополнительных градиентных модулей упругости  $c_1, c_2, c_3, c_4, c_5$  в следующем виде:

$$\bar{E} = \frac{1}{2} \left[ C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} + C_{ijklmn} R_{i,jk} R_{l,mn} \right] = \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} + c_1 \theta_{,i} \nabla^2 R_i + c_2 \theta_{,i} \theta_{,i} + \quad (8)$$

$$+ c_3 \nabla^2 R_i \nabla^2 R_i + c_4 R_{i,jk} R_{i,jk} + c_5 R_{i,jk} R_{j,ik}.$$

Нетрудно установить, что модули упругости  $C_{ijklmn}$  для градиентной теории деформаций (имеется симметрия по первым двум индексам (4)) могут быть также выражены через пять независимых физических констант  $c_1, c_2, c_3, c_4, c_5$  в представлении (8). Однако в общем случае тензор градиентных модулей упругости не удовлетворяет критерию симметрии (7). Используя дополнительно условия симметрии (7), можно установить, что в случае полной симметрии в модели Миндлина имеют место соотношения  $c_1 = 4c_3, c_1 = c_2, c_5 = 2c_4$ . Следовательно, независимыми дополнительными параметрами являются только две физических константы:  $c_3$  и  $c_4$ . В этом случае выражение для моментных напряжений  $\mu_{ijk}$  принимает следующий вид:

$$\mu_{ijk} = c_3 \left[ \nabla^2 (\delta_{ij} R_k + \delta_{ik} R_j + \delta_{jk} R_i) + 2(\delta_{ij} \theta_{,k} + \delta_{ik} \theta_{,j} + \delta_{jk} \theta_{,i}) \right] + \quad (9)$$

$$+ c_4 (R_{k,ij} + R_{j,ik} + R_{i,jk}).$$

В результате условия симметрии (7) позволяют уменьшить число независимых дополнительных постоянных до двух. Вариационная постановка при этом дает следующие разрешающие уравнения в перемещениях:

$$H_{ij} L_{jk} R_k + f_i = 0, H_{ij} = \delta_{ij} - l_1^2 \delta_{ij} \nabla^2 - l_2^2 \partial_i \partial_j, \quad (10)$$

$$L_{jk} = \mu \delta_{jk} \nabla^2 + (\lambda + \mu) \partial_j \partial_k,$$

$$l_1^2 = (c_3 + c_4)/\mu, \quad l_2^2 = [\mu(c_1 + c_2 + c_5) - (\lambda + \mu)(c_3 + c_4)]/[\mu(\lambda + 2\mu)].$$

Эти уравнения записываются через два масштабных параметра  $l_1^2, l_2^2$ .

В приложениях широко используется однопараметрическая градиентная теория деформации, предложенная в работах [8, 22, 23]. Плотность градиентной энергии деформации такой теории имеет вид

$$\bar{E} = (1/2)C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl} + l^2 \left[ (1/2)\lambda\theta_{,k}\theta_{,k} + \mu\varepsilon_{ij,k}\varepsilon_{ij,k} \right]. \quad (11)$$

Эту теорию формально можно получить из модели (1)–(6), полагая

$$c_1 = c_3 = 0, \quad c_2 = (1/2)l^2\lambda, \quad c_4 = c_5 = (1/2)l^2\mu. \quad (12)$$

Система разрешающих уравнений для прикладной модели [22, 23] выглядит так:

$$(1 - l^2\Delta)L_{ij}R_j + f_i = 0. \quad (13)$$

Отметим, что эта теория никогда не удовлетворяет условию симметрии (7), т.е. является не вполне корректной.

Другим примером однопараметрической модели является градиентная модель межфазного слоя [18–20], в которой плотность градиентной энергии деформации определяется через дополнительный масштабный параметр  $C$  (когезионный модуль) по формуле

$$\bar{E} = (1/2) \left[ C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl} + (L_{jk}R_k)(L_{jk}R_k)/C \right]. \quad (14)$$

Этой теории соответствует следующее соотношение между физическими константами в модели Миндлина  $c_1, c_2, c_3, c_4, c_5$  и масштабными параметрами  $l_1$  и  $l_2$ :

$$c_1 = 2\mu(\mu + \lambda)/C, \quad c_2 = (\mu + \lambda)^2/C, \quad c_3 = \mu^2/C, \quad c_4 = c_5 = 0, \quad l_1^2 = (1 - 2\nu)l_2^2,$$

где  $\nu$  – коэффициент Пуассона.

Система разрешающих уравнений (уравнений равновесия) для градиентной теории межфазного слоя имеет вид

$$-\frac{1}{C}(L_{ij} - C\delta_{ij})L_{jk}R_k + f_i = 0. \quad (15)$$

Отметим здесь, что модель межфазного слоя (14) удовлетворяет критерию симметрии, являясь при этом градиентной теорией дисторсии, но не теорией деформаций.

В дальнейшем для реализации процедуры идентификации дополнительного параметра в градиентной теории упругости мы будем использовать решение одномерной задачи градиентной теории упругости. Фактически для этого мы должны записать градиентную модель слоистой среды. Нетрудно убедиться, что для одномерной задачи все рассмотренные выше прикладные градиентные теории (8)–(10), (11)–(13) и теория межфазного слоя (14), (15) дают эквивалентные постановки. Разрешающее уравнение для одномерной задачи имеет вид

$$\begin{aligned} LL_C(R) &= 0, L(R) = (2\mu + \lambda)(\partial^2 R / \partial x^2), \\ L_C(R) &= (2\mu + \lambda)(\partial^2 R / \partial x^2) - CR. \end{aligned} \quad (16)$$

Краевые условия следуют из вариационной постановки. Для кинематических граничных условий они записываются относительно перемещений  $R$ , производных от перемещений  $\partial R / \partial x$ , а в случае статических граничных условий краевые условия записываются относительно моментных напряжений  $[(2\mu + \lambda)/C]L(R)$  и напряжений  $[(2\mu + \lambda)/C]\partial L_C(R) / \partial x$ .

Рассмотрим теперь одномерную модель слоистой среды. В этом случае краевые контактные условия для представительного фрагмента периодичности записываются с условием скачка периодичности и могут быть представлены в виде

$$U(-d_1 - d_2) = U(d_1 + d_2) - 2(d_1 + d_2), \quad \frac{\partial U(-d_1 - d_2)}{\partial x} = \frac{\partial U(d_1 + d_2)}{\partial x}, \quad (17)$$

$$u(-d_1 - d_2) = u(d_1 + d_2), \quad \frac{\partial u(-d_1 - d_2)}{\partial x} = \frac{\partial u(d_1 + d_2)}{\partial x}. \quad (18)$$

Здесь  $U$  и  $u$  – две составляющие общего поля перемещений,  $R = U - u$ , удовлетворяющие соответственно классическому уравнению  $L(U) = 0$  и уравнению когезионного поля  $L_C(u) = 0$ :  $U = -L_C(R)/C$ ,  $u = -L(R)/C$ ;  $2d_2$  – длина включения;  $d_1$  – длина слоя матрицы справа и слева от включения (рис. 1); общая длина слоя матрицы в представительном фрагменте слоистой системы равна  $2d_1$ .

Решение краевой задачи (16)–(18) может быть получено в явном аналитическом виде и выражено через три функции в различных диапазонах изменения аргумента:  $R = R_1(x)$ ,  $-d_1 - d_2 < x < -d_2$ ,  $R = R_2(x)$ ,  $-d_2 < x < -d_1$ ,  $R = R_3(x)$ ,  $d_2 < x < d_1 + d_2$ , где

$$\begin{aligned} R_1(x) &= H_1 x + (H_1 - 1)(d_1 + d_2) - d_1 \operatorname{sh} \kappa_1(x + d_1 + d_2), \\ R_2(x) &= H_2 x - d_2 \operatorname{sh} \kappa_2 x, \\ R_3(x) &= H_1 x - (H_1 - 1)(d_1 + d_2) - d_1 \operatorname{sh} \kappa_1(x - d_1 - d_2). \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь  $\kappa_{1,2} = 1/l_{1,2} = \sqrt{C_{1,2}/k_{1,2}}$ ,  $k_{1,2} = 2\mu_{1,2} + \lambda_{1,2}$ ; индекс 1 относится к фазе матрицы, индекс 2 – к фазе включения.

Эффективный модуль упругости  $\hat{E}$  для слоистой среды по методу асимптотического усреднения определяется на основе решения (19) как средние напряжения на ячейке периодичности от классической составляющей решения  $U(x)$ . Для рассматриваемой модели это дает следующее выражение для  $\hat{E}$ :

$$\hat{E} = E_1 E_2 (d_1 + d_2) / \left[ E_1 d_2 + E_2 d_1 - \frac{(E_1 - E_2)^2}{(E_1 \alpha_2 + E_2 \alpha_1)} \right], \quad (20)$$

где  $\alpha_{1,2} = \kappa_{1,2} / \operatorname{th}(\kappa_{1,2} d_{1,2})$ .

Выражение (20) сводится к классической формуле Рейса в отсутствие градиентных эффектов ( $l_1 = 0, l_2 = 0$ ).

#### 4. Методика идентификации масштабных параметров градиентных моделей на основе молекулярно-динамического моделирования

Рассматриваются две одномерные модели композита – дискретная и континуальная. Одномерный композит (слоистый композит) представляет собой периодическую структуру, которая характеризуется представительным фрагментом – ячейкой периодичности (рис. 1). В статье проводится сопоставление эффективного модуля упругости, рассчитанного для дискретной композитной структуры, состоящей из  $2n_1$  атомов первой фазы и  $n_2$  атомов второй фазы с результатами расчетов эффективного модуля упругости слоистого композита, рассчитанного по континуальной градиентной модели (см. рис. 1). Длины континуальных ячеек каждой из фаз соответствуют длинам дискретных це-

почек атомов, моделирующих эти фазы. Для дискретной модели композита длина фаз рассчитывается через равновесные межатомные расстояния. В свою очередь, равновесные расстояния для дискретной модели находятся путем минимизации потенциальной энергии, вычисленной по заданным потенциалам взаимодействий. В результате рассматриваемый дискретный фрагмент соответствует одномерному континуальному фрагменту композита.

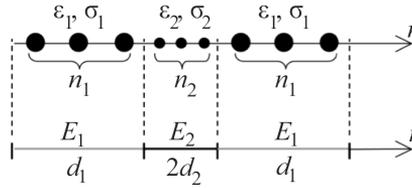


Рис. 1. Дискретная и континуальная модели двухкомпонентной композитной структуры

Для моделирования межатомного взаимодействия используем потенциал Леннарда-Джонса (6–12) и потенциал Морзе:

$$U(r) = 4\varepsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right),$$

$$U(r) = \varepsilon \left( e^{-2\alpha(r-\sigma)} - 2e^{-\alpha(r-\sigma)} \right).$$

Параметры взаимодействия между атомами различного вида будем определять по правилу Лоренца-Бертло [24]:

$$\varepsilon_{12} = \chi \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}, \quad \sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}, \quad \alpha_{12} = \sqrt{\alpha_1 \alpha_2},$$

где  $\chi$  изменяется от 0 до 1, а параметры  $\varepsilon_1, \sigma_1$  и  $\varepsilon_2, \sigma_2$  определяют характеристики потенциалов каждого из двух типов атомов.

Равновесное расположение атомов находится путем определения минимума значения потенциальной энергии рассматриваемой атомарной системы. Заметим, что в случае модели «ближайших соседей», в рамках которой предполагается наличие взаимодействия только между двумя соседними атомами, равновесные межатомные расстояния определяются аналитически по известным параметрам потенциалов межатомного взаимодействия. Модуль упругости находится из соотношения, связывающего приращение потенциальной энергии с эффек-

тивным модулем:  $\Delta U = \hat{E}(d_1 + d_2)$ , где  $\Delta U$  – приращение потенциальной энергии фрагмента при приложении к ячейке периодичности единичной деформации.

В случае составной цепочки процедура не изменяется, и найденное значение является эффективным модулем упругости рассматриваемого одномерного композита, при этом учитывается не только объемное содержание фаз (отношение  $n_1/n_2$ ), но и размерные факторы (величины  $n_1$  или  $n_2$ ), которые в дискретной структуре являются естественными размерными параметрами. Они характеризуют и число межфазных границ, и протяженность межфазного слоя.

Следует отметить, что масштабные эффекты оказываются существенными для материалов, в которых свойства фаз (в данном случае – модули упругости) значительно отличаются. Примером могут служить полимерные композиты, армированные углеродными нановключениями (нанотрубками), для которых модули упругости могут различаться более чем в 80 раз. В рассмотренных в настоящей работе структурах модули упругости фаз отличаются не более чем на порядок, поэтому масштабные эффекты здесь не столь ярко выражены. Эти эффекты, поддающиеся прямому моделированию в рамках одномерной дискретной модели, позволяют качественно прогнозировать аномальное изменение свойств микро-наноструктур для рассматриваемых композитов.

Метод идентификации параметров градиентных моделей основан на сравнении результатов расчета эффективных модулей упругости, найденных с помощью дискретного и континуального моделирования. Сопоставление получаемых решений проводится по следующему алгоритму:

1. Выбираем тип потенциала межатомного взаимодействия. Отметим, что в общем случае представленная методика позволяет работать с любыми потенциалами. Выбор потенциалов, которые привлекаются для моделирования, основывается на предварительных физико-химических исследованиях и должен соответствовать рассматриваемым структурам и материалам. В данной работе в соответствии с указанными требованиями используются потенциал Ленарда–Джонса (6–12) и потенциал Морзе.

2. Задаем число атомов в цепочке и их тип, то есть выбираем значения параметров потенциалов. В данной работе значения параметров потенциалов были взяты из работ [24–26].

3. Определяем равновесные расстояния и значения модулей упругости для каждой из однородных цепочек атомов, из которых обра-

зована составная цепочка. В дальнейшем эти значения используются в качестве исходных данных – модулей упругости и длин фаз в формуле (20). Рассчитываемые модули цепочек соответствуют рассматриваемым идеализированным одномерным атомарным структурам. Они, вообще говоря, отличаются от реальных свойств объемных структур материалов. Тем не менее представленный алгоритм определения масштабных параметров на основе соответствующих одноатомных структур может быть полезен для идентификации градиентных моделей и оценки свойств рассматриваемых композитных материалов.

4. Определяем эффективную жесткость цепочки в рамках дискретной модели.

5. Определяем масштабный параметр континуальной модели таким образом, чтобы эффективный модуль, получаемый в континуальной модели для данной цепочки по формуле (20), был равен модулю, полученному в рамках дискретной модели для всех рассматриваемых значений параметров структуры  $n_1$  (или  $n_2$ ) и  $n_1/n_2$ . При этом предполагаем, что рассматриваемая структура (т.е. обе фазы) при континуальном моделировании характеризуется единственным масштабным параметром  $l_1 = l_2 = l$ .

В общем случае для каждой фазы в двухкомпонентном композите имеется по одной характеристике, учитывающей характерный размер структуры. Однако мы полагаем, что эти характеристики структуры различных фаз совпадают. Считаем, что при континуальном моделировании для двухкомпонентного композита имеется единственный масштабный параметр  $l_1 = l_2 = l$  в соотношениях (19), (20). Дальнейшие прямые расчеты, проведенные с использованием дискретного моделирования, показали, что и при этом упрощении предлагаемая процедура идентификации единственного масштабного параметра двухкомпонентного композита позволяет с чрезвычайно высокой точностью описать все множество композитов для конкретных фаз. Физический смысл полученного результата состоит в том, что найденный единый масштабный параметр ( $l$ ) достаточно полно характеризует протяженность межфазного слоя, имеющего место в композитной структуре в окрестности границы контакта фаз.

6. Варьируем параметры  $n_1$  и  $n_2$ , чтобы убедиться, что найденное значение масштабного параметра  $l$  позволяет получить совпадение решений континуальной и дискретной моделей для любых цепочек, составленных из атомов выбранного типа.

Важно отметить главную особенность предложенного метода идентификации градиентного параметра, состоящую в том, что всегда удается найти масштабный параметр, позволяющий с высокой степенью точности описать все счетное множество рассматриваемых одномерных композитов.

### 5. Результаты расчетов и примеры идентификации параметров градиентной модели

Рассмотрим примеры решения проблемы идентификации неклассического параметра, определяющего характерный размер конкретной структуры, на примерах двух типов композитов, образованных из фаз-атомов кремния и углерода и, соответственно, атомов свинца и железа. При этом обе фазы композита  $(\text{Si})_{n_1} - (\text{C})_{n_2}$  хорошо описываются потенциалом Ленарда-Джонса [24, 25], а взаимодействия атомов в фазах второго композита, составленного из атомов железа и свинца  $(\text{Fe})_{n_1} - (\text{Pb})_{n_2}$  хорошо моделируются потенциалом Морзе [26]. Рассмотрим дискретную периодическую структуру с ячейкой периодичности, состоящей из атомов кремния и атомов углерода.

На рис. 2 представлены зависимости эффективного модуля упругости структур, образованных из атомов кремния и углерода, с различным числом и соотношением атомов в цепочке. Результаты дискретного моделирования с применением потенциала Ленарда-Джонса показаны на всех последующих графиках рис. 2 точками. Сплошные линии соответствуют решениям, полученным с использованием градиентной теории упругости (20). Численные исследования показали, что при реализации дискретного метода исследования структур достаточно учитывать взаимодействия только между ближайшими соседними атомами. При этом возможная относительная погрешность во всех случаях не превышала 0,1 %. Значения параметров потенциала для атомов кремния:  $\epsilon_1 = 0,0025 \text{ eV}$ ,  $\sigma_1 = 29,43 \text{ \AA}$  [25] атомов углерода:  $\epsilon_2 = 0,0024 \text{ eV}$ ,  $\sigma_2 = 3,37 \text{ \AA}$  [24]. Для данной структуры найденный масштабный параметр континуальной модели оказался равным 19,5 А. На рис. 2, а показаны зависимости эффективного модуля упругости от масштабного фактора, т.е. от числа атомов одной из фаз в ячейке периодичности. Пунктиром показано классическое решение, которое не позволяет учесть влияние масштабных эффектов. На рис. 2, б представлено со-

поставление дискретного и континуального решений при изменении числа атомов в фазе, состоящей из атомов углерода.

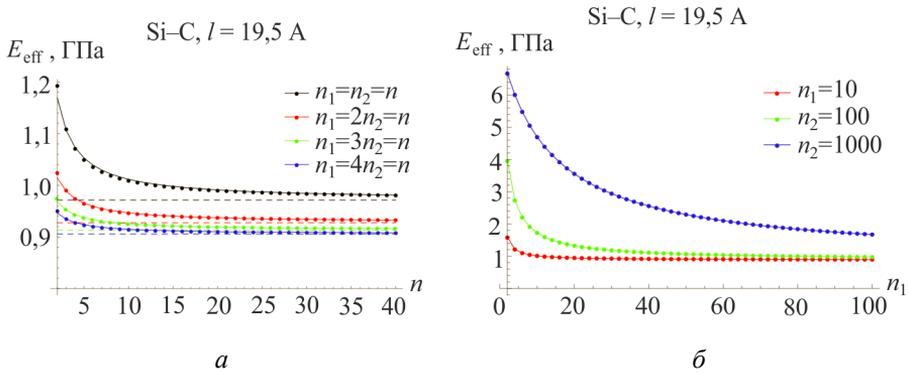


Рис. 2. Зависимость эффективного модуля упругости от числа атомов в структуре Si-C, рассчитанная по дискретной модели с использованием потенциала Леннарда–Джонса: *a* – изменяется размер ячейки,  $n_1/n_2 = \text{const}$ ; *б* – изменяется число атомов кремния  $n_1$ ,  $n_2 = \text{const}$

На рис. 3 представлена зависимость модулей упругости цепочек, образованных атомами железа и свинца, от числа атомов одной из фаз. Для моделирования использовался потенциал Морзе с параметрами для атомов железа:  $\epsilon_1 = 0,4216 \text{ eV}$ ,  $\sigma_1 = 2,849 \text{ \AA}$ ,  $\alpha_1 = 1,3765 \text{ \AA}^{-1}$ , для атомов свинца:  $\epsilon_2 = 0,2455 \text{ eV}$ ,  $\sigma_2 = 2,667 \text{ \AA}$ ,  $\alpha_2 = 1,2624 \text{ \AA}^{-1}$  [26]. Масштабный параметр оказался равным  $4 \text{ \AA}$ .

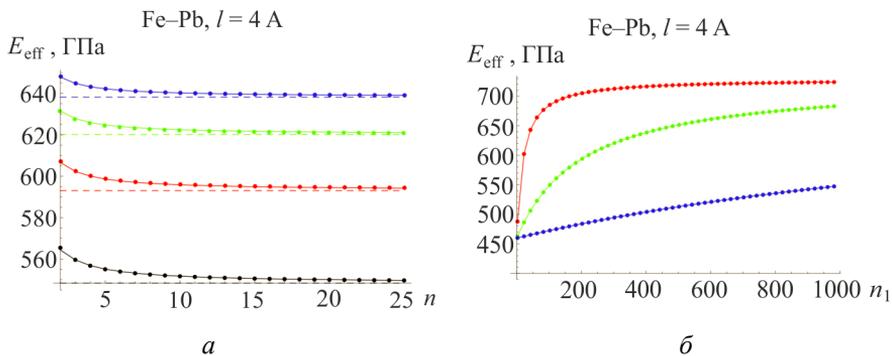


Рис. 3. Зависимость эффективного модуля упругости от числа атомов в структуре Fe-Pb, рассчитанная по дискретной модели с использованием потенциала Морзе: *a* – изменяется размер ячейки,  $n_1/n_2 = \text{const}$ ; *б* – изменяется число атомов железа  $n_1$ ,  $n_2 = \text{const}$ . Тип и цвет линий соответствуют приведенным на рис. 2

В таблице представлены значения масштабных параметров, найденные по предложенной методике для структур, состоящих из атомов различных металлов. Для дискретного моделирования использовался потенциал Морзе, параметры потенциалов взяты из работы [26]. Таблица является симметричной относительно центральной диагонали, т.е. значения масштабных параметров не изменяются в рамках одномерной модели при перестановке местами фазы включения и матрицы.

Значения масштабных параметров модели (в ангстремах) градиентной теории упругости, идентифицированные для цепочек, состоящих из различных атомов металлов двух типов, например, Fe-Mo, Fe-Nb и т.д.

	Mo	Nb	Ta	V	W	Ag	Au	Cu	Pb	Pt	Ni
Fe	1,3	1,4	0,2	8	1,3	4	1,2	1,4	4	1,4	9
Mo		1,4	2,5	1,7	1,3	1,7	1,5	1,3	2,4	2	1,2
Nb			2	1,7	1,4	1,7	1,4	1,4	2,4	0,9	1,3
Ta				1,1	2,2	1,1	4,8	0,7	2,2	2,6	0,3
V					1,7	1,8	1,7	0,5	3,5	1,8	11
W						1,7	1,4	1,4	2,4	0,5	1,2
Ag							1,7	1,3	4	1,8	4,5
Au								1,3	2,5	1,9	1,1
Cu									6,5	1,5	1,6
Pb										2,5	4
Pt											1,3

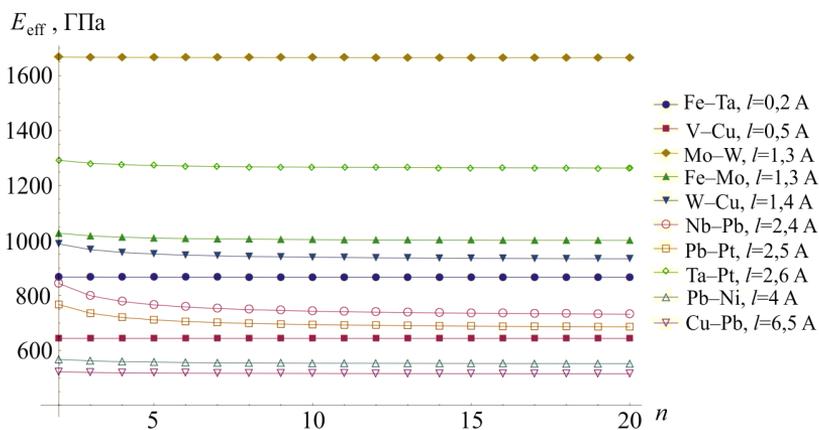


Рис. 4. Примеры зависимостей эффективного модуля упругости некоторых двухфазных композитов от размеров фаз (масштабный эффект),  $n_1/n_2 = 1$

На рис. 4 представлена зависимость эффективного модуля упругости от длины одной из фаз (числа атомов атомарной цепочки). Композит составлен из атомов различных металлов с одинаковым количеством атомов каждого типа ( $n_1=n_2=n$ ), что означает, что процентное объемное содержание фаз равно 50 %.

### **Заключение**

Предложен метод определения масштабных параметров в градиентных теориях. Показано, что данный метод является достаточно точным, ибо прямые расчеты, проведенные с найденным масштабным параметром, с использованием градиентной теории дают значения эффективных свойств для всего счетного множества соответствующих дискретных композитов с относительной погрешностью, не превышающей 1 %. В предложенном методе масштабный параметр определяет фактически протяженность межфазной зоны в рассмотренных двухкомпонентных композитах, которая формируется в каждой из фаз в областях, примыкающих к границе контакта. Прямыми расчетами показано, что для композитов, жесткости которых существенно различны, формирование межфазной зоны происходит за счет фазы с меньшей жесткостью и масштабным параметром жесткой фазы можно фактически пренебречь. Другими словами, найденный масштабный параметр определяет характерный масштаб материала меньшей жесткости.

Результаты численных расчетов показывают, что значения масштабных параметров, найденные для идеализированных структур, состоящих из атомов металлов, являются малыми и не превышают нескольких десятков ангстрем. Масштабные эффекты для всех рассмотренных структур проявляются на очень малых размерах ячеек, т.е. для материалов с большой плотностью границ контакта фаз, что вполне соответствует физическому смыслу. Для систем, определяемых потенциалом Леннарда–Джонса, существенное влияние масштабных эффектов прогнозируется на структурах с фрагментом длиной до 40 атомов, для систем, описываемых потенциалом Морзе, проявление масштабных эффектов становится существенным для фрагментов периодичности длиной до 15 атомов. Однако эти эффекты существенно зависят от соотношения жесткостей фаз. Так, для полимерных композитов с жесткими наноразмерными включениями отношение жесткостей фаз может достигать 80, и масштабные эффекты могут проявляться на ячей-

ках периодичности, достигающих десятков микрон. Анализ таких структур в рамках предложенной методики ограничивается только тем, что авторам неизвестны достоверные данные о потенциалах, описывающих полимерное связующее.

Можно сделать качественный вывод о том, что получаемые прогнозы для модулей упругости с использованием потенциала Леннарда–Джонса оказываются заниженными, а с использованием потенциала Морзе – завышенными по сравнению с известными характерными макромасштабными характеристиками исследуемых материалов. Этот результат, по-видимому, может быть уточнен путем расширения предложенной методики на случай плоской или трехмерной постановки. Некоторых уточнений можно ожидать при использовании в дискретном моделировании более сложных и точных потенциалов межатомного взаимодействия.

В структурах, для которых значение масштабного параметра меньше одного ангстрема (Fe–Ta, V–Cu), масштабные эффекты практически не проявляются. Таким образом, масштабные эффекты отсутствуют в структурах, в которых протяженность локальных полей (в терминологии континуального подхода) очень мала. С другой стороны, для больших значений масштабного параметра (см. рис. 4) при объемном содержании 50% имеет место эффект насыщения, который проявляется вне зависимости модуля упругости от размера армирующей фазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект №14-11-00782).

### **Библиографический список**

1. Toupin R.A. Elastic materials with couple stresses // Arch. Rational Mech. Anal. – 1962. – Vol. 11. – P. 385–414. DOI: 10.1007/BF00253945
2. Mindlin R.D. Micro-structure in linear elasticity // Arch. Rational Mech. Anal. – 1964. – Vol. 16. – P. 51–78. DOI: 10.1007/BF00248490
3. Mindlin R.D. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity // Int. J. Solids Struct. – 1965. – Vol. 1. – P. 417–438. DOI: 10.1016/0020-7683(65)90006-5
4. Mindlin R.D., Eshel, N.N. On first strain-gradient theories in linear elasticity // Int. J. Solids Struct. – 1968. – Vol. 4. – P. 109–124. DOI: 10.1016/0020-7683(68)90036-X

5. Auffray N., Le Quang H., He H.C. Matrix representations for 3D strain-gradient elasticity // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2013. – Vol. 61. – P. 1202–1223. DOI: 10.1016/j.jmps.2013.01.003

6. Papanicolopulos S.A. Chirality in isotropic linear gradient elasticity // *Int. J. Solids Struct.* – 2011. – Vol. 48. – P. 745–752. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2010.11.007

7. Dell'Isola F., Sciarra G., Vidoli, S. Generalized Hooke's law for isotropic second gradient materials // *Proc. R. Soc. A.* – 2009. – Vol. 465. – P. 2177–2196. DOI: 10.1098/rspa.2008.0530

8. Gao X.-L., Park S.K. Variational formulation of a simplified strain gradient elasticity theory and its application to a pressurized thick-walled cylinder problem // *Int. J. Solids Struct.* – 2007. – Vol. 44. – P. 7486–7499. – DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2007.04.022

9. Ma H.M., Gao X.-L., Reddy J.N. A microstructure-dependent Timoshenko beam model based on a modified couple stress theory // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2008. – Vol. 56. – P. 3379–3391. DOI: 10.1016/j.jmps.2008.09.007

10. Kakunai S., Masaki J., Kuroda R., Iwata K., Nagata R. Measurement of apparent Young's modulus in the bending of cantilever beam by heterodyne holographic interferometry // *Exp. Mech.* – 1985. – Vol. 25. – P. 408-412. DOI: 10.1007/BF02321341

11. Experiments and theory in strain gradient elasticity / D.C.C. Lam, F. Yang, A.C.M. Chong, J. Wang, P. Tong // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2003. – Vol. 51. – P. 1477–1508. DOI: 10.1615/IntJMultCompEng.2013006064

12. McFarland A.W., Colton J.S. Role of material microstructure in plate stiffness with relevance to microcantilever sensors // *J. Micromech. Microeng.* – 2005. – Vol. 15. – P. 1060–1067. DOI: 10.1088/0960-1317/15/5/024

13. Mura T. *Micromechanics of defects in solids.* – Boston, MA: Martinus Nijhoff Publishers, 1982. – 587 p.

14. Li T., Lang E. Stiffness predictions for unidirectional short-fiber composites: review and evaluation // *Comp Sci Technol.* – 1999. – Vol. 59. – P. 655–671. DOI: 10.1016/S0266-3538(98)00120-1

15. Odegard G.M, Gates T.S. Constitutive modeling of nanotube/polymer composites with various nanotube orientation // *Proceedings Annual Conference on Experimental and Applied Mechanics.* – Milwaukee 2002. – P. 1–4.

16. Mori T., Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions // *Acta Metallurg.* – 1973. – Vol. 21. – P. 571–574.

17. Tibbetts G.G., McHugh J.J. Mechanical properties of vapor-grown carbon fiber composites with thermoplastic matrices // *J Mater Res.* – 1999. – Vol. 14. – P. 2871–2880. DOI: 10.1007/978-94-010-0777-1\_17

18. Advanced theoretical and numerical multiscale modeling of cohesion/adhesion interactions in continuum mechanics and its applications for filled nanocomposites / S. Lurie, D. Volkov-Bogorodsky, V. Zubov, N. Tuchkova // *Computational Materials Science.* – 2009. – Vol. 45. – No. 3. – P. 709–714. DOI: 10.1016/j.commatsci.2008.08.010

19. Лурье С.А., Соляев Ю.О. Моделирование механических свойств наноструктурированных пористых керамик // *Деформация и разрушение материалов.* – 2012. – № 1. – С. 6–16. DOI: 10.1134/S0036029513040083

20. Eshelby's inclusion problem in the gradient theory of elasticity. Applications to composite materials / S. Lurie, D. Volkov-Bogorodsky, A. Leontiev, E. Aifantis // *International Journal of Engineering Science.* – 2011. – Vol. 49. – P. 1517–1525. DOI: 10.1016/j.ijengsci.2011.05.001

21. Gusev A.A., Lurie S.A. Strain-gradient elasticity for bridging continuum and atomistic estimates of stiffness of binary Lennard-Jones crystals // *Adv. Eng. Mater.* – 2010. – Vol. 12. – P. 529–533. DOI: 10.1002/adem.201000004

22. Altan B.S., Aifantis E.C. On the structure of the mode III crack-tip in gradient elasticity. *Scripta Met.* – 1992. – Vol. 26. – P. 319–324. DOI: 10.1016/0956-716X(92)90194-J

23. Altan B.S., Aifantis E.C. On some aspects in the special theory of gradient elasticity // *J. Mech. Behav. Mater.* – 1997. – Vol. 8. – No. 3. – P. 231–282. DOI: 10.1515/JMBM.1997.8.3.231

24. Unraveling the Argon Adsorption Processes in MFI-Type Zeolite / E. Garcia-Perez, J.B. Parra, C.O. Ania, D.T. Dubbeldam, J.H. Vlugt, J.M. Castillo, P.J. Merkling, S. Calero // *J. Phys. Chem. C.* – 2008. – Vol. 112. – No. 27. – P. 9976–9979. DOI: 10.1021/j100025a018

25. Ordered Phases of Cesium in Carbon Nanotubes / W.K. Jeong, J.H. Ho, O.S. Ki, Y.C. Won, R.B. Ki // *J. Kor. Phys. Soc.* – 2003. – Vol. 43. – No. 4. – P. 534–539.

26. Flahive P.G., Graham W.R. Pair potential calculations of single atom self-diffusion activation energies // *Surface Science.* – 1980. – Vol. 91. – P. 449–462. DOI: 10.1016/0039-6028(80)90344-1

## References

1. Toupin R.A. Elastic materials with couple stresses. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 1962, vol. 11, pp. 385-414. DOI: 10.1007/BF00253945
2. Mindlin R.D. Micro-structure in linear elasticity. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 1964, vol. 16, pp. 51-78. DOI: 10.1007/BF00248490
3. Mindlin R.D. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity. *Int. J. Solids Struct.*, 1965, vol. 1, pp. 417-438. DOI: 10.1016/0020-7683(65)90006-5
4. Mindlin R.D., Eshel, N.N. On first strain-gradient theories in linear elasticity. *Int. J. Solids Struct.*, 1968, vol. 4, pp. 109-124. DOI: 10.1016/0020-7683(68)90036-X
5. Auffray N., Le Quang H., He H.C. Matrix representations for 3D strain-gradient elasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 2013, vol. 61, pp. 1202-1223. DOI: 10.1016/j.jmps.2013.01.003
6. Papanicolopoulos S.A. Chirality in isotropic linear gradient elasticity. *Int. J. Solids Struct.*, 2011, vol. 48, pp. 745-752. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2010.11.007
7. Dell'Isola F., Sciarra G., Vidoli, S. Generalized Hooke's law for isotropic second gradient materials. *Proc. R. Soc. A.*, 2009, vol. 465, pp. 2177-2196. DOI: 10.1098/rspa.2008.0530
8. Gao X.-L., Park S.K. Variational formulation of a simplified strain gradient elasticity theory and its application to a pressurized thick-walled cylinder problem. *Int. J. Solids Struct.*, 2007, vol. 44, pp. 7486-7499. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2007.04.022
9. Ma H.M., Gao X.-L., Reddy J.N. A microstructure-dependent Timoshenko beam model based on a modified couple stress theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 2008, vol. 56, pp. 3379-3391. DOI: 10.1016/j.jmps.2008.09.007
10. Kakunai S., Masaki J., Kuroda R., Iwata K., Nagata R. Measurement of apparent Young's modulus in the bending of cantilever beam by heterodyne holographic interferometry. *Exp. Mech.*, 1985, vol. 25, pp. 408-412. DOI: 10.1007/BF02321341
11. Lam D.C.C., Yang F., Chong A.C.M., Wang J., Tong P. Experiments and theory in strain gradient elasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 2003, vol. 51, pp. 1477-1508. DOI: 10.1615/IntJMCompEng.2013006064
12. McFarland A.W., Colton J.S. Role of material microstructure in plate stiffness with relevance to microcantilever sensors. *J. Micromech. Microeng.*, 2005, vol. 15, pp. 1060-1067. DOI: 10.1088/0960-1317/15/5/024

13. Mura T. *Micromechanics of defects in solids*. Boston. MA: Martinus Nijhoff Publishers, 1982. 587 p.

14. Li T., Lang E. Stiffness predictions for unidirectional short-fiber composites: review and evaluation. *Comp Sci Technol.*, 1999, vol. 59, pp. 655-71. DOI: 10.1016/S0266-3538(98)00120-1

15. Odegard G.M, Gates T.S. Constitutive modeling of nanotube/polymer composites with various nanotube orientation. *Proceedings Annual Conference on Experimental and Applied Mechanics*. Milwaukee, 2002, pp. 1-4.

16. Mori T., Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurg.*, 1973, vol. 21, pp. 571-574.

17. Tibbetts G.G., McHugh J.J. Mechanical properties of vapor-grown carbon fiber composites with thermoplastic matrices. *J Mater Res.*, 1999, vol. 14, pp. 2871-2880. DOI: 10.1007/978-94-010-0777-1\_17

18. Lurie S., Volkov-Bogorodsky D., Zubov V., Tuchkova N. Advanced theoretical and numerical multiscale modeling of cohesion/adhesion interactions in continuum mechanics and its applications for filled nanocomposites. *Computational Materials Science*, 2009, vol. 45, no. 3, pp. 709-714. DOI: 10.1016/j.commatsci.2008.08.010

19. Lurie S.A., Solyaev Yu.O. Simulation of the Mechanical Properties of Nanostructured Porous Ceramics. *Russian Metallurgy (Metally)*, 2013, no. 4, pp. 272-281. DOI: 10.1134/S0036029513040083

20. Lurie S., Volkov-Bogorodsky D., Leontiev A., Aifantis E. Eshelby's inclusion problem in the gradient theory of elasticity. Applications to composite materials. *International Journal of Engineering Science*, 2011, vol. 49, pp. 1517-1525. DOI: 10.1016/j.ijengsci.2011.05.001

21. Gusev A.A., Lurie S.A. Strain-gradient elasticity for bridging continuum and atomistic estimates of stiffness of binary Lennard-Jones crystals. *Adv. Eng. Mater.*, 2010, vol. 12, pp. 529-533. DOI: 10.1002/adem.201000004

22. Altan B.S., Aifantis E.C. On the structure of the mode III crack-tip in gradient elasticity. *Scripta Met.*, 1992, vol. 26, pp. 319-324. DOI: 10.1016/0956-716X(92)90194-J

23. Altan B.S., Aifantis E.C. On some aspects in the special theory of gradient elasticity. *J. Mech. Behav. Mater.*, 1997, vol. 8, no. 3, pp. 231-282. DOI: 10.1515/JMBM.1997.8.3.231

24. Garcia-Perez E., Parra J.B., Ania C.O, Dubbeldam D., T. Vlugt J.H., Castillo J.M., Merkling P.J., Calero S. Unraveling the Argon Adsorption

Processes in MFI-Type Zeolite. *J. Phys. Chem. C.*, 2008, vol. 112, no. 27, pp. 9976-9979. DOI: 10.1021/j100025a018

25. Jeong W.K., Ho J.H., Ki O.S., Won Y.C., Ki R.B. Ordered Phases of Cesium in Carbon Nanotubes. *J. Kor. Phys. Soc.*, 2003, vol. 43, no. 4, pp. 534-539.

26. Flahive P.G., Graham W.R. Pair potential calculations of single atom self-diffusion activation energies. *Surface Science*, 1980, vol. 91, pp. 449-462. DOI: 10.1016/0039-6028(80)90344-1

### **Об авторах**

**Лурье Сергей Альбертович** (Москва, Россия) – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник, завлаб Института прикладной механики Российской академии наук, ведущий научный сотрудник Вычислительного центра Российской академии наук (125040, г. Москва, Ленинградский пр., 7, e-mail: lurie@ccas.ru).

**Соляев Юрий Олегович** (Москва, Россия) – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института прикладной механики Российской академии наук, Вычислительного центра Российской академии наук (125040, г. Москва, Ленинградский пр., 7, e-mail: yos@iam.ras.ru).

### **About the authors**

**Sergey A. Lurie** (Moscow, Russian Federation) – Doctor of Technical Sciences, Professor, Head of Scientist and Head of Laboratory of Institute of Applied Mechanics of RAS, Leading scientist of Dorodnicyn Computing Centre of RAS (7, Leningradsky av., 125040, Moscow, Russian Federation, e-mail: lurie@ccas.ru).

**Yury O. Solyaev** (Moscow, Russian Federation) – Ph.D. in Technical Sciences, Researcher at Institute of Applied Mechanics of RAS, Dorodnicyn Computing Centre of RAS (7, Leningradsky av., 125040, Moscow, Russian Federation, e-mail: yos@iam.ras.ru).

Получено 18.08.2014

Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:

Лурье С.А., Соляев Ю.О. Метод идентификация параметров градиентных моделей неоднородных структур с использованием дискретно- атомистического моделирования // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2014. – № 3. – С. 89–112. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.06

Please cite this article in English as:

Lurie S.A., Solyaev Y.O. Identification method of gradient models parameters of inhomogeneous structures based on discrete atomistic simulations. *PNRPU Mechanics Bulletin*. 2014. No. 3. Pp. 89-112. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.06