纳米材料力学性质定量分析中的反问题

献给林群教授 80 华诞

包刚^①, 刘华彦^①, 李明^②, 徐翔^{①*}

① 浙江大学数学系, 杭州 310027;

② 太原理工大学数学系, 太原 030021

E-mail: baog@zju.edu.cn, 3090100865@zju.edu.cn, liming01@tyut.edu.cn, xxu@zju.edu.cn

收稿日期: 2014-12-25; 接受日期: 2015-03-02; * 通信作者

国家自然科学基金 (批准号: 91130004, 11421110002, 11426235, 11471284 和 11401423) 和浙江大学科研启动经费资助项目

摘要 本文对纳米材料力学性质定量分析中出现的反问题理论、计算和应用进行了探讨. 这类问题在纳米材料科学以及功能器件开发等方面中有着重要的应用, 对纳米尺度下的测量、优化设计、研发及应用有着重大的指导意义. 根据工程测量方法的不同, 纳米材料力学性质的定量分析方法一般可以分为两类, 静态法和动态法. 本文针对两种方法, 率先研究 Euler-Bernoulli 方程的反演随机源项、反演系数和反谱问题, 得到了对于一般非均匀纳米材料性质测定的方法, 其中对于反演随机源项, 本文得到在依概率意义下的收敛性; 对于反谱问题, 本文将其转化为优化问题求解, 并给出数值算例验证. 最后提出这些反问题新的应用和数学上新的研究方向.

关键词 反随机源问题 反系数问题 反谱问题 Euler-Bernoulli 方程

MSC (2010) 主题分类 34F05, 45B05, 45C05, 45Q05, 74G75

1 引言

近些年来, 数学物理反问题的理论研究、数值计算和分析方法在众多科学前沿和国家战略重大需求等领域中 (如国防工业、环境监测、医学诊断、设备安检、纳米材料和地质勘探等) 得到了广泛应用, 随之也涌现出许多新的研究方向和科学问题. 本文对近些年来纳米材料力学性质定量分析中反问题的理论、计算及应用进行概括和总结.

纳米材料通常是指, 在三维空间中至少有一维处于纳米尺度范围 (1–100nm) 或由它们作为基本单元构成的材料. 自从 20 世纪 70 年代纳米颗粒材料问世以来, 对纳米材料性质的研究一直是人们关注的话题. 通过探索纳米材料不同于普通材料的特殊性能 (如强度、硬度、刚性和塑性等), 挖掘其物理和化学特性, 设计复合纳米材料, 组装复杂的二维及三维纳米体系, 并将其广泛应用于医疗、纺织、环境和机械等工业领域, 已成为当下纳米领域研究的热点. 当物质的尺度极小时, 材料的力学性质也会随之发生重大的变化, 例如, Treacy^[1] 研究发现, 碳纳米管具有超高的杨氏模量, 因此可以作为某些金属的轻便替代材料. 此外, 利用纳米材料的力学性能和电学性能相互耦合的体系 (Nano-Electro-Mechanical-Systems), 也越来越受到人们的关注, 特别是纳米压电电子学^[2] 的兴起, 使纳米发电机^[3]

(将机械能转化为电能) 和触屏电子器件 (将机械能转化为电学信号) 等成为现实. 特别地, Roukes 等人^[4] 利用纳米电学力学性能耦合体系 (NEMS) 研究出了一种纳米尺度下的 “秤”, 可以得到单个金原子的重量. 因此, 准确地刻画纳米材料的力学性能, 是实现纳米材料广泛应用的重要前提之一.

研究纳米材料力学性质的物理方法, 与研究普通材料相似, 主要有静力试验和动力试验两大类. 静力试验包括拉伸、压缩、弯曲、剪切、扭转、硬度、蠕变和应力松弛等, 而动力试验包括冲击、疲劳和共振等. 本文主要集中讨论纳米材料力学性质中的弹性模量试验. 因此也有两类测量方法, 我们会在后面文中分别阐述. 考虑到现阶段的复合纳米材料主要是由一维纳米材料基本组件构成, 如纳米管或纳米线等, 这里主要研究一维的纳米材料. 由于一维纳米材料尺寸非常小, 实验操作困难, 测量数据也极不稳定, 因此, 准确地测量纳米材料的力学性质, 特别是弹性模量, 是该领域内的一个重要课题, 例如, Treacy 等人^[1] 使用热振动方法 (即在不同温度下, 将一维纳米材料振动看作等效弹簧振动, 并建立振幅与温度的关系), Wong^[5] 等人使用静态应力 - 应变曲线法 (如使用原子力显微镜研究外力作用下一维纳米材料的弯曲形变), 而 Poncharal 等人^[6] 使用简谐振动实验方法 (即研究一维纳米材料在电场中的共振现象). 在这些方法中, 需要用到精密的测量仪器, 如扫描隧道显微镜 (STM) 和原子力显微镜 (AFM) 等, 因此, 这些测量结果都依赖于很多非确定因素, 如实验环境、选取的样品和探针的大小等. 这些不确定因素通常会导致对纳米材料力学性质的错误估计, 例如, Wagner^[7] 将这些测量过程中产生的不确定性源都归结为局部的纳米材料力学性质. 此外, 近期在去除试验中产生的系统误差方面还有许多工作, 例如, Hu 等人^[8] 使用经验 Buckingham 型的势函数研究了氧化锌纳米线和纳米管的弹性模量与纳米尺寸的关系; Mai 和 Wang^[9] 通过拟合 AFM 所成图像也得到了一维纳米带的弹性模量; Deng 等人^[10,11] 使用统计建模中的逐次回归方法 (sequential profile adjustment by regression) 研究纳米材料的弹性模量. 最近, Bao 和 Xu^[12] 提出了一种基于静力试验方法的新模型, 在该模型里, 作者将测量过程中的不确定因素 (如环境噪声和仪器系统误差等) 均归结为一项具有简单结构并且由 Winner 过程驱动的随机源, 可通过重复试验, 精确地刻画出随机源的结构, 由此去除系统误差得到更准确的弹性模量.

从数学上来说, 定量分析纳米材料的力学性质, 可以看成是通过一些测量数据确定偏微分方程的系数, 因此可以看成是数学物理反问题中的反演系数问题. 特别地, 对于本文中的求解弹性模量是基于弹性力学方程, 而在一维的情形可以简化为 Euler-Bernoulli 方程. 以上文献中讨论的各类方法, 如文献 [1,5-7,9-12], 也都是基于常系数的一维 Euler-Bernoulli 方程. 本文首先总结以上几种模型, 然后对一般系数的情形进行讨论和求解, 并得到相应的收敛性分析, 特别是针对于文献 [6] 中提出的利用振动频率的动态测量法, 在系数为一般情形时, 可以将其归结为求解一类反谱问题, 因此在数学上也有很多新的研究方法和理论.

2 反源问题

在静态测量法中, 通常的实验方法是将一维的纳米材料两端固定 (或简易支撑), 如图 1 所示, 然后使用原子力显微镜对一维的纳米材料施加恒定的点外力, 并测量出该点处的弯曲形变量, 当原子力显微镜施加的外力的探头沿着被试一维纳米材料移动时, 我们就可以观测到一系列弯曲变形量, 进而得到对应的应力 - 应变曲线, 最终求出被试材料的弹性模量. 该物理过程可以由经典的 Euler-Bernoulli 弹性方程控制, 即

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(E(x) I(x) \frac{d^2 w}{dx^2} \right) = F(x), \quad x \in (0, L), \quad (2.1)$$

$$w(0) = w''(0) = w(L) = w''(L) \equiv 0, \quad (2.2)$$

其中 $w(x)$, $E(x)$, $I(x)$, $F(x)$ 和 L 分别表示纳米材料的弯曲形变、杨氏模量、惯性模量、外力分布和纳米材料的长度、边界条件为简单支撑边界条件. 这里需要指出的是, 如果采用其他边界条件, 也有相应的结果, 如固定 (clamped) 和自由振动 (free) 等. 在一般的文献 (如文献 [5, 9–12]) 中, 都会假定 $E(x)$ 和 $I(x)$ 为常数, 这样可以通过降阶法或 Green 函数法, 求出方程 (2.1) 的解析解

$$w(x) = \int_0^L G(x, s) F(s) ds, \quad (2.3)$$

其中

$$G(x, s) = \begin{cases} \frac{x(L-s)(L^2 - x^2 - (L-s)^2)}{6EIL}, & 0 < x \leq s, \\ \frac{x(L-s)(L^2 - x^2 - (L-s)^2)}{6EIL} + \frac{(x-s)^3}{6EI}, & s \leq x < L. \end{cases} \quad (2.4)$$

如果如图 1 所示, 使用原子力显微镜产生的点外力, 即

$$F(x) = F_k \delta(x - y),$$

并且根据观测数据就在 $x = y$ 处产生, 由方程 (2.3) 可以得到

$$w(y) = F_k G(y, y) = F_k \frac{y^2(L-y)^2}{3EIL}, \quad 0 < y < L. \quad (2.5)$$

很显然, 通过以上公式, 就可以建立起弯曲形变与杨氏模量之间的关系. Wong 等人^[5] 利用该模型在不同的边界条件下得到相应的解析解表达式. 而 Deng 等人^[10] 也是利用上述公式及统计方法中的逐次线性回归方法校正得到更为精确的杨氏模量. Bao 和 Xu^[12] 利用同样的模型, 但是不同的方法去除实验中的系统误差. 具体方法将测量过程中产生的噪声, 以及实验环境、实验设备等产生的系统偏好, 都归结为随机的外力因素, 并且假设此由 Winner 过程所驱动的随机源项与空间位置相关, 并具有良好的结构, 即假设

$$F(x) = F_k \delta(x - y) + g(x) + h(x) W'_x, \quad (2.6)$$

其中 $g(x)$ 和 $h(x)$ 是具有紧支集的确定性函数. 当外力项变为随机源项时, 对应的解 $w(x, y)$ 也变为随机的, 我们可以得到如下的解的唯一性结论:

定理 1 假设 $EI > 0$, 则对于每一次 Winner 过程的实现, 带有随机源项的两点边值问题 (2.1) 均存在唯一路径解 (pathwise solution).

证明过程可参见文献 [13–15] 中一维随机 Helmholtz 方程的证明思路. 其方法主要是使用降阶或 Green 函数法, 将解写成积分表达式, 并通过边界条件的限制, 得到定理的结论. 其次, 文献 [12] 还对

图 1 静态法测量弹性模量示意图

反源问题进行了深入研究, 即通过观测数据 $w(y, y)$, 反演出随机源项的主要特征结构, 即期望 $g(x)$ 和协方差 $h(x)$. 其主要思想是建立在正问题的解可以有以下精确的积分表达式:

$$w(y, y) = F_k G(y, y) + \int_0^L G(y, s)g(s)ds + \int_0^L G(y, s)h(s)dW_s. \quad (2.7)$$

对上述方程求期望, 并且利用 Itô 引理^[14], 即

$$\mathbb{E}\left(\int_0^L G(y, s)h(s)dW_s\right) = 0,$$

可以得到关于 $g(x)$ 的第一类 Fredholm 型积分方程:

$$F_k G(y, y) + \int_0^L G(y, z)g(z)dz = \mathbb{E}[w(y)], \quad (2.8)$$

其中 $G(y, s)$ 含有未知常数 E . 再对方程 (2.7) 求方差, 可以得到关于 $h^2(x)$ 的第一类 Fredholm 型积分方程:

$$\int_0^L G^2(y, z)h^2(z)dz = \mathbb{V}[w(y) - F_k G(y, y)]. \quad (2.9)$$

一般而言, 第一类 Fredholm 型积分方程没有解的唯一性, 其求解过程也是不适定的. 这里由于 Green 函数 $G(x, y)$ 的性质, 可以简单地证明 $G(x, y)$ 是一类 Hilbert-Schmidt 核, 因此以此为积分核的算子是紧算子, 所以, 其零空间非退化, 而且其特征值以 0 为聚点, 这些性质导致了求解上述两方程 (2.8) 和 (2.9) 需要用到一些正则化方法. 最近, Bao 和 Xu^[12] 使用了 Tikhonov 正则化方法, 即通过求解一个带有 Tikhonov 正则项的极小化泛函来替代原来的不适定问题. 这里需要说明的是, 由于 Green 函数 $G(x, y)$ 中仍然含有未知常数杨氏模量 E , 文献 [12] 使用了伸缩变换, 将 E 从 $G(x, y)$ 分离出来, 并重新得到 $g(x)$ 和 $h^2(x)$ 的线性法方程 (可对 Tikhonov 正则化泛函求 Frechlet 导数后得到). 通常来说, 使用 Tikhonov 正则化方法的求解与正则化参数的选取有极大的关系, 而在正则化理论中也有一系列的选取策略 (参见文献 [16, 17]), 如先验、后验选取和偏差原理等. 在这里为了简便起见, 我们使用 L 曲线法选择最优的正则化参数. 如果 $g(x)$ 和 $h(x)$ 有不连续性, 那么, 使用传统的 L^2 正则项会使原问题的解过度正则化, 因此可以选取 ℓ^1 正则项来进行求解, 文献 [12] 针对不同的情形, 如低频的、高频的以及间断的 $g(x)$ 和 $h(x)$ 均有数值算例验证.

3 反系数问题

在实际的纳米材料制备中, 通常并不能得到纯粹的具有各向均匀性质的一维纳米材料, 如文献 [2] 中所述: 制备完美的各向同性纳米材料是制备工艺过程中的一大挑战. 事实上, 各向异性的纳米材料 (如复合纳米材料) 也有广泛的应用, 如文献 [18–20]. 而文献中的分析方法一般只适用于弹性模量是常数的情形, 因为只有在常数的假设下, 我们才能得到控制方程 Euler-Bernoulli 方程的解析解, 并以此从测量数据中提取有用的信息. 这里基于 Euler-Bernoulli 方程的特殊形式, 结合 Poisson 方程的基本解, 可以推导出一般情形下带有随机源项的形式解. 与文献 [12] 中的方法类似, 我们可以得到相应的第一类 Fredholm 型积分方程, 利用 Itô 积分, 可以将各个未知函数从非线性的积分方程中解耦, 得到独立的积分方程进行求解.

首先介绍一维 Poisson 方程的基本解

$$M(x, y) = \begin{cases} \frac{(L-y)x}{L}, & 0 \leq x \leq y, \\ \frac{y(L-x)}{L}, & y \leq x \leq L. \end{cases}$$

考虑到方程 (2.1) 的特殊性以及边界条件, 我们可以得到如下的公式:

$$\begin{aligned} w(x, y) = & F_k \int_0^L \frac{M(x, s)M(s, y)}{E(s)I(s)} ds + \int_0^L \int_0^L \frac{M(x, s)M(s, z)}{E(s)I(s)} g(z) dz ds \\ & + \int_0^L \int_0^L \frac{M(x, s)M(s, z)}{E(s)I(s)} h(z) dW_z dz. \end{aligned} \quad (3.1)$$

由原子力显微镜观测时, 取 $x = y$ 和 Itô 公式, 可得

$$\mathbb{E}_k[w(y)] = F_k \int_0^L K_1(y, s) f(s) ds + \int_0^L K_2(y, z) g(z) dz, \quad (3.2)$$

$$\int_0^L K_2^2(y, z) h^2(z) dz = \mathbb{V}[w(y)], \quad (3.3)$$

其中

$$K_1(y, s) = M(y, s)M(s, y) = \begin{cases} \frac{(L-y)^2 s^2}{L^2}, & 0 \leq s \leq y, \\ \frac{y^2 (L-s)^2}{L^2}, & y \leq s \leq L, \end{cases}$$

$$K_2(y, z) = \int_0^L M(y, s)M(s, z) f(s) ds,$$

$$f(s) = \frac{1}{E(s)I(s)}.$$

很显然, 方程 (3.2) 中 $f(x)$ 和 $g(x)$ 以及 $K_2(y, z)$ 均是未知函数, 因此, 我们需要求解一个非线性的积分方程. 考虑到我们可以使用不同的 F_k 重复试验, 因此可以通过 2 组测量, 就可以将其作如下的解耦, 得到独立的方程:

$$\int_0^L K_1(y, s) f(s) ds = \tilde{\mathbb{E}}[w(y)], \quad (3.4)$$

其中

$$\tilde{\mathbb{E}}[w(y)] = \frac{\mathbb{E}_2[w(y)] - \mathbb{E}_1[w(y)]}{F_2 - F_1}.$$

当求出未知弹性模量 $f(x)$ 后, 直接代入方程 (3.2) 可以求出 $g(x)$, 最后代入方程 (3.3) 中求解 $h^2(x)$. 在求解第一类 Fredholm 型积分方程时, 我们会遇到常数情形下求解一样的困难, 即求解不适定问题的正则化方法. 这里需要指出的是, 求解过程中需要用到测量数据的期望, 即 $\mathbb{E}[w(y)]$. 在计算该期望时, 文献 [12–14] 均是定性地指出由大数定理可以保证数值计算会收敛到真实期望, 这为选取最优正则化参数带来一定的困难, 因为测量数据期望的计算会影响到误差水平的控制, 并传递到选取策略时正则化参数的选取. 最近, Bao 和 Xu^[21] 定量地分析出测量次数与最优 Tikhonov 正则化参数先验选取的关系:

定理 2 假设 $f(x) \in H^1(0, L)$, $\sigma(w(y))$ 有界, $f^{\alpha, n}$ 是 Tikhonov 正则化解, 其中 n 实验次数,

$$\alpha \sim \frac{1}{\sqrt[3]{n^{2\epsilon}}},$$

则我们有如下依概率为 $1 - \frac{1}{n^{1-2\epsilon}}$ 的估计:

$$\left\| f^{\alpha, n}(x) - \frac{1}{E(x)I(x)} \right\|_{L^2} \leq C \frac{1}{\sqrt[3]{n^{2\epsilon}}}, \quad (3.5)$$

其中 C 为依赖于 $\sigma(w(y))$ 即 $h^2(x)$ 的某个常数.

上述定理保证了, 在实验次数充分多时, 只要取相应的正则化参数, 求得的数值解高概率地收敛到精确解. 下面求解两个数值例子.

例 1 假设 $E(x)I(x)$ 是光滑的, 随机源项的期望 $g(x)$ 和标准方差函数 $h(x)$ 与文献 [12, 14] 中一致, 即

$$\begin{aligned} E(x)I(x) &= \frac{L^3}{(x+L)^3}, \\ g(x) &= \frac{2}{5} \left[\left(1 - \cos\left(\frac{6\pi x}{L}\right) \right) - \frac{1215}{2783} \left(1 - \cos\left(\frac{22\pi x}{L}\right) \right) + \frac{7}{23} \left(1 - \cos\left(\frac{24\pi x}{L}\right) \right) \right], \\ h(x) &= \frac{1}{2}e - \frac{3}{10}e^{\cos(4\pi x/L)} - \frac{1}{5}e^{\cos(6\pi x/L)}. \end{aligned}$$

使用两组不同的点外力, 参照文献 [12] 中的方法, 求解正问题, 并记录下每次正问题的解. 当正问题求解达到指定次数后, 可以求出利用期望公式求解 $\mathbb{E}[w(y)]$. 然后再求解相应的反问题, 并根据定理 2 中指示的最优化正则化参数选取策略选取 α . 这里选取了

$$n = 10^5, \quad \alpha = 3 \times 10^{-2} \sim \frac{1}{\sqrt[3]{n}}.$$

在该数值求解中, 运算量最大的是正问题的模拟, 幸运的是每个正问题均是一维的, 并且是相互独立的, 因此可以使用并行运算来克服巨大的运算量. 反问题求解的结果可以在图 2 中看到, 其中图 2(a) 中红色实线是精确的刚度 $E(x)I(x)$, 蓝色点线是数值反演的解, 图 2(b) 和 2(c) 也与图 2(a) 类似, 分别是随机源项的期望和方差反演结果.

例 2 在第二个例子中, 我们假设纳米材料的刚度有一相对高频的震荡, 即

$$E(x)I(x) = 1 + \frac{1}{4}e^{-x} \sin\left(\frac{6\pi x}{L}\right),$$

对此当实验次数增加时, 即取 $n = 10^6$, 以及按照定理 2 中最优参数选取策略, 我们可以得到图 3 相似的结果.

图 2 例 1: 反演系数及随机源项的数值结果. (a) 刚度反演结果; (b) 期望 $g(x)$ 反演结果; (c) 方差反演数值结果

图 3 例 2: 反演系数及随机源项的数值结果. (a) 刚度 $E(x)I(x)$ 反演结果; (b) 期望 $g(x)$ 反演结果; (c) 方差反演数值结果

4 反谱问题

在第 1 节中, 我们指出了工程中测定材料的弹性模量通常有两种方法: 静态法与动态法. 其中静态法就是我们以上研究反源问题和反系数问题所用的模型. 下面讨论动态测量法. 在纳米材料领域, 使用振动法计算弹性模量开始于文献 [1], 该文献将振动的纳米管看成等效的弹簧, 并利用振动能量的不同表示方法, 得到求解弹性模量的公式. 文献 [6] 将纳米材料置于电场中, 并通入不同频率的电流, 使其振动, 当输入的电流频率达到纳米材料的共振频率时, 会从电子显微镜观察到振幅最大, 这样避免了测量微小的弯曲形变所导致的系统误差过大. 如果继续增大输入电流频率, 会观察到第二共振模式, 因此, 通过纳米材料的共振频率与弹性模量的关系, 也可以计算出一维纳米材料的杨氏模量.

从数学上看, 使用共振模式测定材料的性质可以看作是一个反谱问题. 在介绍该内容前, 我们先叙述反谱问题的历史. 早在 1910 年, 丹麦物理学家 Lorentz 在哥廷根在系列讲演——“物理学中的新、旧问题”中提到了一个有趣的问题: 不用眼睛来看, 仅仅通过聆听鼓的声音能否判断出鼓的形状? 该问题是一个著名的反谱问题, 并在 1992 年由 Gordon 等人 [22] 给出了反例, 即两面不同形状的鼓所产生的音色完全一样. 在反谱问题的研究方面, Gel'fand 和 Levitan [23, 24] 在 1951 年首先系统地研究了二阶 Sturm-Liouville 问题, 提出了利用谱数据 (特征值) 反演势函数的构造性证明. 此后, 对于二阶方程也有很多研究, 特别是对于四阶方程, Barcilon, Gladwell 以及 McLaughlin 等人也有很多工作. 例如, Barcilon [25–27] 研究了反谱问题 (特别是四阶问题) 的唯一性, 得出了对于 $2n$ 阶 Sturm-Liouville 问题, 需要 $n+1$ 组不同边界条件 (如自由、固定、简单支撑、滑动和反共振等) 得到的特征值才能唯一确定, 并且这些特征值需要满足一定的交错关系. Gladwell [28] 改进了文献 [26] 中的结果, 指出仅需要一组特征值和两组对应的归一化常数 (对应于特征函数在零点处的值以及导数值) 也可以唯一地确定四阶 Sturm-Liouville 问题的系数. McLaughlin [29, 30] 使用 Gel'fand-Levitan 类似的方法构造性地证明了利用一组谱数据和两组对应的归一化常数构造系数的方法. 此后, Papanicolaou [31, 32] 研究了一类特殊的可以转化为“完全平方”四阶算子反谱问题. 这些理论研究表明, 对于四阶的 Euler-Bernoulli 方程, 使用振动法测得的共振频率, 即四阶 Sturm-Liouville 问题的特征值是可以用来构造方程的系数 (即材料的弹性模量和密度分布等) 的. 下面研究如下的特征值问题:

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(M(x) \frac{d^2 y_j(x)}{dx^2} \right) = \omega_j^2 m(x) y_j(x), \quad (4.1)$$

$$y_j''(0) = (My_j'')'(0) = 0, \quad y_j(L) = y_j'(L) = 0, \quad (4.2)$$

其中 $M(x) = E(x)I(x)$ 是一维纳米材料的刚度, $m(x)$ 是密度分布, ω_j 是第 j 个特征值, y_j 为对应的特征函数. 为了简便起见, 这里介绍一种基于优化算法的方法来反演系数. 假设可以测得 3 组不同的特征值 $\omega_{i,j}$, $i = 1, 2, 3$, 我们求解如下的最小二乘问题:

$$G(M, m) = \sum_{(i,j)} h_{i,j} (\omega_{i,j} - \omega_{i,j}^*)^2, \quad i = 1, 2, 3, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (4.3)$$

其中 $\omega_{i,j}^*$ 是测量得到的特征值, $\omega_{i,j}$ 是系数为 M 和 m 所对应的特征值, $h_{i,j}$ 是预先给定的一些权重. 这些权重对后面的计算影响非常大, 通常我们取成 $(Lj^{-1}\pi^{-1})^4$. 这是因为对于四阶问题,

$$\omega_j \sim \frac{n^4 \pi^4}{L^4},$$

为了平衡每个特征值对计算结果的贡献, 我们选取了如上的权重. 求解该最小二乘优化问题, 我们可以使用简单的最速下降法求解. 在该算法中, 主要计算量为要找到梯度方向, 即 $\frac{\partial G}{\partial M}$ 和 $\frac{\partial G}{\partial m}$. 经过计算发现, 以上两个梯度分别可以由如下公式计算:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial M} &= 2 \sum_{(i,n)} h_{i,n} (\omega_{i,n} - \omega_{i,n}^*) (y_{i,n}'')^2, \\ \frac{\partial G}{\partial m} &= 2 \sum_{(i,n)} h_{i,n} (\omega_{i,n} - \omega_{i,n}^*) (-\omega_{i,n}) \times (y_{i,n})^2. \end{aligned}$$

可以看出, 梯度方向仅仅是特征值和特征函数的组合, 因此能发展一套快速计算正问题的算法是最速下降法的关键. 幸运的是, 文献中已经有丰富的计算四阶 Sturm-Liouville 问题的快速算法, 读者可以参见文献 [33, 34] 中提供的 SLEUTH 软件包. 我们可以写出如下的迭代算法:

最速下降算法求解 (4.3)

输入: 初始猜测系数 M_0, m_0 , 容忍误差 Tol , 以及测量数据 $\omega_{i,j}^*$

输出: 近似的材料刚度 $M_n(x)$ 和质量分布 $m_n(x)$, 其中 n 迭代次数

1. 设 $n = 0$, 使用 SLEUTH 计算正问题, 得到 $\omega_{i,n}$, 并计算 $G(M_n, m_n)$
 2. While $|G(M_n, m_n)| > Tol$
 3. 计算梯度: $\frac{\partial G}{\partial M}$ 和 $\frac{\partial G}{\partial m}$
 4. 计算一维线搜索问题 $\min_{\alpha > 0, \beta > 0} G(M_n - \alpha \frac{\partial G}{\partial M}, m_n - \beta \frac{\partial G}{\partial m})$
 5. $M_{n+1} = M_n - \alpha \frac{\partial G}{\partial M}$, $m_{n+1} = m_n - \beta \frac{\partial G}{\partial m}$
 6. 使用 SLEUTH 计算正问题, 得到 $\omega_{i,n}$, 并计算 $G(M_{n+1}, m_{n+1})$
 7. $n = n + 1$
 8. End
-

下面, 我们看两个数值例子. 在第一个例子中, 我们选取 3 组每组 30 个精确的特征值作为观测值 $\{\omega_{i,n}^*\}_{i=1, n=1}^{3,30}$. 精确的刚度和质量分布分别为常数的扰动, 即

$$\begin{aligned} M(x) &= 1 + 0.12 \times \sin(\pi x), \\ m(x) &= 1 + 0.22 \times \cos(\pi x), \\ L &= 1. \end{aligned}$$

如下是迭代的解, 初值选为常数 $M(x) = m(x) = 1$, 其中图 4(a) 中红蓝实线表示精确的 $M(x)$ 和 $m(x)$, 圆圈虚线和菱形虚线是使用精确的特征值反演的数值结果, 图 4(b) 表示测量数据带有 1% 误差的数值反演结果. 我们可以发现, 即使只有 1% 的测量误差, 数值反演结果仍然会相差很大, 这也进一步暗示了反谱问题的稳定性是非常弱的.

在第二个算例中, 我们仍然选取 $M(x)$ 和 $m(x)$ 为常数的扰动, 即

$$M(x) = 1 + 0.12 \times \exp\left(-\left(x - \frac{L}{2}\right)^2\right) \times \sin(6x),$$

$$m(x) = 1 + 0.25 \times \exp\left(-\left(x - \frac{L}{2}\right)^2\right) \times \cos(6x),$$

以及 $L = \pi$. 测量数据与第一个算例类似, 3 组特征值, 每组 30 个, 并且带有 0.1% 的随机误差, 数值结果显示在图 5 中.

图 4 反谱问题最速下降法的数值解. (a) 使用精确的特征值反演结果; (b) 使用带有 1% 误差的特征值反演结果

图 5 反谱问题最速下降法的数值求解. (a) 带有 0.1% 误差的数值反演结果; (b) 残差 $G(M_n, m_n)$ 随迭代次数的变化

5 总结与展望

本文对纳米材料力学性质定量分析的两类方法 (静态法和动态法) 在数学上进行了细致讨论, 总结了文献中提到的各种测量手段和分析方法, 并将这些方法推广到更一般的纳米材料, 即有非均匀的力学性质, 得到了更为一般的结论. 我们将这些问题描述为数学上的反系数问题和反谱问题. 解决这些反问题的方法在工程中有广泛的应用背景, 除了本文讨论的纳米材料性质定量分析之外, 例如, 文献 [35, 36] 将原子力显微镜作用在病变细胞上, 得到了早期病变细胞的弹性模量远小于正常细胞, 并以此来诊断细胞的早期诊断, 而文献 [37] 利用光声成像技术来计算细胞的弹性模量并得到病变细胞与正常细胞的区别. 目前, 这些研究正处于起步阶段, 因为在这些研究中都假设弹性模量是常数, 即整个细胞相对于原子力显微镜是均匀的、无限大的平面弹性体, 为了得到更准确的结果, 应该是考虑更一般各向异性的介质和模型.

反问题的研究 (包括反源问题、反系数问题和反谱问题) 除了在工程的应用, 本身在数学理论上的研究也是非常重要的. 例如, 我们在文中提到的随机源项的反演问题的唯一性和稳定性都没有很好地解决, 这方面的研究方兴未艾, 许多问题的研究才刚刚起步. 本文只给出了依概率意义下收敛性的结果. 在实际问题中, 往往介质是随机的, 即方程中的系数是随机的, 到目前为止, 随机系数反演这个反问题还没有任何数学结果. 另外, 对于反谱问题, 高效稳定的算法也是亟需解决的问题. 在反谱问题理论上, 要求每一组谱数据, 都必须是完整的, 即有无穷多个特征值, 才能得到反演系数的唯一性, 但在实际问题中, 得到高频的特征值是几乎不可能的, 因此, 如何仅利用少数的特征值来反演偏微分方程中的系数, 也是极具挑战的一个问题, 该问题最近已有部分数值结果, 如文献 [38] 中提出的“增加质量”法.

参考文献

- 1 Treacy M, Ebbesen T W, Gibson J M. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes. *Nature*, 1996, 381: 678–680
- 2 Wang Z L. *Piezotronics and Piezo-Phototronics*. Berlin: Springer-Verlag, 2012
- 3 Qin Y, Wang X D, Wang Z L. Microfibre-nanowire hybrid structure for energy scavenging. *Nature*, 2008, 451: 809–813
- 4 Ekinci K L, Huang X M H, Roukes M L. Ultrasensitive nanoelectromechanical mass detection. *Appl Phys Lett*, 2004, 84: 4469–4471
- 5 Wong E, Sheehan P, Lieber C. Nanobeam mechanics: Elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes. *Science*, 1997, 277: 1971–1975
- 6 Poncharal P, Wang Z L, Ugarte D, et al. Electrostatic deflections and electromechanical resonances of carbon nanotubes. *Science*, 1999, 283: 1513–1516
- 7 Wagner R, Moon R, Pratt J, et al. Uncertainty quantification in nanomechanical measurements using the atomic force microscope. *Nanotechnology*, 2011, 22: 455703
- 8 Hu J, Liu X, Pan B. A study of the size-dependent elastic properties of ZnO nanowires and nanotubes. *Nanotechnology*, 2008, 19: 285710
- 9 Mai W, Wang Z L. Quantifying the elastic deformation behavior of bridged nanobelts. *Appl Phys Lett*, 2006, 89: 073112
- 10 Deng X, Joseph V, Mai W, et al. Statistical approach to quantifying the elastic deformation of nanomaterials. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2009, 106: 11845–11850
- 11 Mai W, Deng X. The applications of statistical quantification techniques in nanomechanics and nanoelectronics. *Nanotechnology*, 2010, 21: 405704
- 12 Bao G, Xu X. An inverse random source problem in quantifying the elastic modulus of nanomaterials. *Inverse Problems*, 2013, 29: 015006
- 13 Bao G, Chow S N, Li P, et al. Numerical solution of an inverse medium scattering problem with a stochastic source. *Inverse Problems*, 2010, 26: 074014

- 14 Bao G, Chow S N, Li P, et al. An inverse random source problem for the Helmholtz equation. *Math Comp*, 2014, 83: 215–233
- 15 Li P. An inverse random source scattering problem in inhomogeneous media. *Inverse Problems*, 2011, 27: 035004
- 16 Engl H, Hanke M, Neubauer A. *Regularization of Inverse Problems*. Kluwer: Dordrecht, 1996
- 17 Pereverzev S V, Schock E. On the adaptive selection of the parameter in regularization of ill-posed problems. *SIAM J Numer Anal*, 2005, 43: 2060–2076
- 18 Allen J, Perea D, Hemesath E, et al. Nonuniform nanowire doping profiles revealed by quantitative scanning photocurrent microscopy. *Adv Mater*, 2009, 21: 3067–3072
- 19 Lee H, Chang R, Chang W. Buckling analysis of nonuniform nanowires under axial compression. In: *Proceedings of the World Congress on Engineering*, vol. III. London: Newswood Limited, 2011
- 20 Yang J, Ying J. Nanocomposites of Ag₂S and Noble Metals. *Angew Chem Int Edit*, 2011, 50: 4637–4643
- 21 Bao G, Xu X. Quantifying mechanical properties of nonuniform nano-materials. Submitted
- 22 Gordon C, Webb D, Wolpert S. Isospectral plane domains and surfaces via Riemannian orbifolds. *Invent Math*, 1992, 110: 1–22
- 23 Gel'fand I M, Levitan B M. On the determination of a differential equation from its spectral function. *Izv Akad Nauk SSSR Ser Mat*, 1951, 15: 309–360
- 24 Gel'fand I M, Levitan B M. On the determination of the differential equation from its spectral function. *Amer Math Soc Transl Ser 2*, 1951, 1: 253–304
- 25 Barcilon V. On the uniqueness of inverse eigenvalue problems. *Geophys J R Astron Soc*, 1974, 38: 287–298
- 26 Barcilon V. On the solution of inverse eigenvalue problems of high orders. *Geophys J R Astron Soc*, 1974, 39: 143–154
- 27 Barcilon V. Sufficient conditions for the solution of the inverse problem for a vibrating beam. *Inverse Problems*, 1987, 3: 181–193
- 28 Gladwell G M. The inverse problem for the Euler-Bernoulli beam. *Proc R Soc Lond Ser A*, 1986, 407: 199–218
- 29 McLaughlin J R. On constructing solutions to an inverse Euler-Bernoulli problem. In: *Inverse Problems of Acoustic and Elastic Waves*. Philadelphia: SIAM, 1984
- 30 McLaughlin J R. Analytical methods for recovering coefficients in differential equations from spectral data. *SIAM Rev*, 1986, 28: 53–72
- 31 Papanicolaou V G. The spectral theory of the vibrating periodic beam. *Comm Math Phys*, 1995, 170: 359–373
- 32 Papanicolaou V G. The periodic Euler-Bernoulli equation. *Trans Amer Math Soc*, 2003, 355: 3727–3759
- 33 Greenberg L, Marletta M. Oscillation theory and numerical solution of fourth order Sturm-Liouville problems. *IMA J Numer Anal*, 1995, 15: 319–356
- 34 Greenberg L, Marletta M. The code SLEUTH for solving fourth order Sturm-Liouville problems. *ACM Trans Math Software*, 1997, 23: 453–493
- 35 Cross S E, Jin Y S, Rao J, et al. Nanomechanical analysis of cells from cancer patients. *Nature Nanotech*, 2007, 2: 780–783
- 36 Shi X, Qin L, Zhang X, et al. Elasticity of cardiac cells on the polymer substrates with different stiffness: An atomic force microscopy study. *Phys Chem Chem Phys*, 2011, 13: 7540–7545
- 37 Silva Neto A J, Cella N. A regularized solution with weighted Bregman distances for the inverse problem of photoacoustic spectroscopy. *Comput Appl Math*, 2006, 25: 139–165
- 38 Rundell W, Sacks P. Inverse eigenvalue problem for a vibrating string with an added mass. Submitted

Inverse problems in quantifying mechanical properties in nanomaterials

BAO Gang, LIU HuaYan, LI Ming & XU Xiang

Abstract In this paper, we study three inverse problems on quantifying mechanical properties of nanomaterials, including an inverse source problem, an inverse coefficient problem and an inverse spectral problem. These problems are of significant importance to nanosciences, especially on developing functional devices, measurements, optimal designs and their applications. According to engineering applications, we mainly have two methods on quantifying mechanical properties of nanomaterials: static and dynamical methods. In this paper, we first

investigate an inverse random source problem, inverse coefficient problem and inverse spectral problem based upon these two methods. Specifically, first convergence result is obtained with overwhelming probability for the inverse random source and coefficient problem. For the inverse spectral problem, we propose an iterative method to solve the approximated optimization problem. Numerical examples are presented to illustrate the validity and effectiveness of the proposed method. Several new applications of these inverse problems and future work are mentioned at the end of this paper.

Keywords inverse random source problem, inverse coefficient problem, inverse spectral problem, Euler-Bernoulli equation

MSC(2010) 34F05, 45B05, 45C05, 45Q05, 74G75

doi: 10.1360/N012014-00275