Верификация числовых значений потенциальной энергии изгиба нанокантилевера

Бочкарёв А.О., Орехов А.В., Павилайнен Г.В.
a.bochkarev@spbu.ru, a.orekhov@spbu.ru, g.pavilaynen@spbu.ru
Санкт-Петербургский государственный университет,
199034, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Аннотация. Проверка точности вычислительных алгоритмов при помощи верификации полученных результатов имеет важное значение и является необходимым этапом для обеспечения точности и надежности математических исследований. Рассматривается задача аппроксимации изгиба нанокантилевера в трёх классах трансцендентных функций и кубическим многочленом. Оценивается погрешность аппроксимации и вычисляется потенциальная энергия деформации при изгибе нанокантилевера как интеграл от квадрата второй производной аппроксимирующей функции.

Ключевые слова: нанокантилевер, стохастическая аппроксимация, относительная погрешность, энергия изгиба.

Нанотехнологии играют значительную роль в разработке новых устройств для различных отраслей науки и техники. В связи с этим изучение механических свойств наноструктур является актуальной задачей, для решения которой широко используются континуальные модели. Одна из их особенностей, в отличие от моделей макромеханики, состоит в том, что упругие характеристики в обычном понимании (как усреднённые по объему коэффициенты определяющих соотношений объемной фазы) перестают быть константами материала, так как зависят от размеров нанообъекта. Поэтому такие упругие модули называют эффективными. К подобному поведению упругих модулей приводит, в частности, применение моделей поверхностной упругости. Другой немаловажный аспект наномеханики состоит в том, что эти эффективные модули проблематично измерить классическим способом, скажем, на наностенде. Вместо этого прибегают к атомистическому моделированию. Чаще всего это моделирование проводят на растяжение и изгиб, в частности, нанокантилевера [1]. В результате средствами физики твёрдого тела определяются значения потенциальной энергии, а также соответствующие им значения меры деформации. Одна из задач наномеханики как раз и состоит в том, чтобы подобрать параметры континуальной модели так, чтобы полученные значения энергии адекватно описывались формулами энергии деформации континуальной модели.

В данной работе рассматриваются способы аппроксимации дискретных значений прогиба нанокантилевера с целью восстановления его энергии изгиба. В зависимости от принятой континуальной модели, энергия изгиба может быть выражена интегралами

$$U = A\int_0^L (w'')^2 dx + B\int_0^L (w')^2 dx = A\tilde{U} + B\tilde{V}, \tag{1}$$

где L — длина нанобалки, A, B — неизвестные величины, пропорциональные эффективным модулям, w — прогиб нанобалки. В результате, мы приходим к задаче аппроксимации энергии изгиба по точкам прогиба [2].

Сравним результаты аппроксимации прогиба консольных балок (нанокантилеверов) тремя трансцендентными функциями и кубическим многочленом:

$$W_1(x) = b(\mathbf{e}^{-ax^2} - 1), \quad W_2(x) = b(\mathrm{sech}^2 ax - 1),$$

$$W_3(x) = b(-\operatorname{th}^2 ax), \quad W_4(x) = ax^3 + bx^2.$$

К аппроксимирующим функциям $W_i(x,\ a,\ b)$, которые зависят от вещественной переменной x и двух параметров a, b, предъявляется дополнительные условия:

$$W_i(0,\,a,\,b) = 0, \quad {W_i}'(0,\,a,\,b) = 0, \quad {W_i}''(x,\,a,\,b) \leqslant 0, \quad W_i^{\mathrm{IV}}(x,\,a,\,b) \cong 0.$$

Модельный набор числовых значений прогиба нанокантилевера [3, 4] представлен в виде кортежа:

$$\begin{aligned} Y = \{&0,000,\ -0,004,\ -0,012,\ -0,028,\ -0,046,\ -0,066,\ -0,088,\ -0,112,\ -0,138,\\ &-0,166,\ -0,200,\ -0,240,\ -0,290,\ -0,340,\ -0,390,\ -0,440,\ -0,500,\ -0,560,\\ &-0,630,\ -0,700,\ -0,770,\ -0,840,\ -0,920,\ -1,000,\ -1,080,\ -1,170,\ -1,260,\\ &-1,360,\ -1,460,\ -1,560,\ -1,660,\ -1,760,\ -1,870,\ -1,980,\ -2,100,\ -2,220,\\ &-2,340,\ -2,460,\ -2,580,\ -2,700,\ -2,830,\ -2,960,\ -3,090,\ -3,220,\ -3,350,\\ &-3,480,\ -3,610,\ -3,740,\ -3,870,\ -4,000,\ -4,140,\ -4,280,\ -4,420,\ -4,560,\\ &-4,700,\ -4,840,\ -4,980,\ -5,120,\ -5,270,\ -5,420,\ -5,570,\ -5,720,\ -5,870,\\ &-6,020\} \times 10^{-10}\ \text{м}, \end{aligned}$$

компоненты которого соответствуют значениям длины нанокантилевера от 0 до 180×10^{-10} м.

Коэффициенты a и b для аппроксимирующих функций W_1, W_2, W_3 вычисляются при помощи метода стохастической аппроксимации [5]. На рис. 1–3 слева непрерывными красными линиями изображены графики функций W_1, W_2, W_3, аппроксимирующих значения прогиба (серые точки) модельного набора данных, и справа — графики их вторых производных, которые в первом приближении совпадают с кривизной изогнутой оси нанокантилевера. Адекватная аппроксимация прогиба нанокантилевера возможна при малых значениях x до тех пор, пока вторая производная функций W_1, W_2, W_3 остается отрицательной. Параметр a связан с длиной отрезка изменения x, на котором W_1, W_2, W_3 имеют отрицательную кривизну, а параметр b — масштабирующий множитель.

Относительная погрешность аппроксимации числовых значений прогиба нанокантилевера функцией $W_1 = 0,637\%$, функцией $W_2 = 0,608\%$, функцией $W_3 = 0,639\%$.

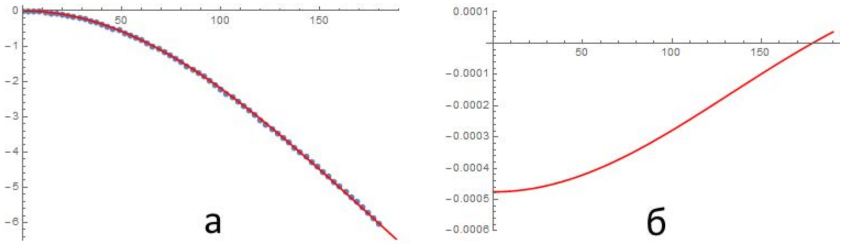

Рис. 1. График W_1 при $a = 1,57 \times 10^{-5}$, $b = 15,14$ (а). График $W_1^{''}$ (б).

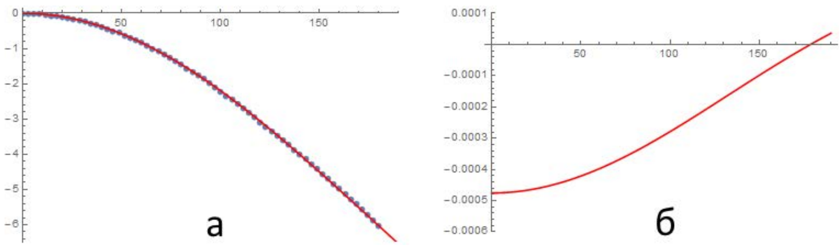

Рис. 2. График W_2 при $a = 3,6 \times 10^{-3}$, $b = 18,53$ (а). График $W_2^{''}$ (б).

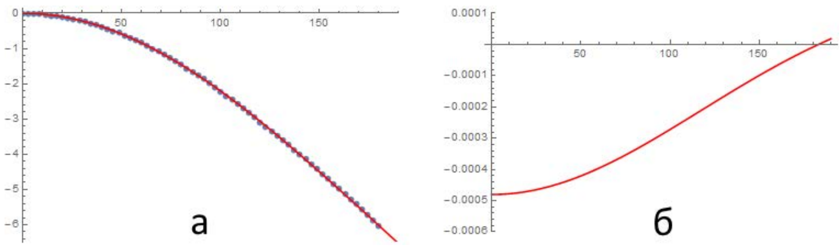

Рис. 3. График W_3 при $a = 3,495 \times 10^{-3}$, $b = 19,45$ (а). График $W_3^{''}$ (б).

В отличие от трансцендентных функций W_1, W_2, W_3, коэффициенты кубического многочлена W_4 можно вычислить точно, при помощи метода наименьших квадратов; для модельного набора данных Y получим: $a = 4,471 \times 10^{-7}$, $b = -2,664 \times 10^{-4}$.

Относительная погрешность аппроксимации прогиба нанокантилевера функцией $W_4(x) = 0,421\%$. На рис. 4 представлены график функции W_4 и её второй производной.

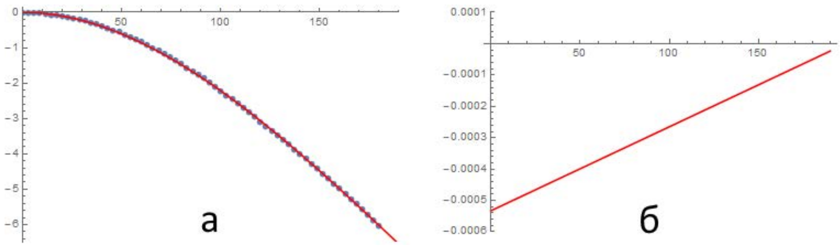

Рис. 4. График W_4 при $a = 4,471 \times 10^{-7}$, $b = -2,664 \times 10^{-4}$ (а). График $W_4^{''}$ (б).

Верификации подлежат, прежде всего, значения второго сомножителя первого слагаемого энергии изгиба — $\tilde{U}$ в формуле (1), поскольку графики кривизны на рис. 1(б)–4(б), в отличие от самого прогиба, имеют свои особенности поведения. Значения интеграла $\tilde{U}$ для аппроксимирующих функций W_1, W_2, W_3, W_4 принимают следующие значения:

$$\tilde{U}_1 = 1,888\times10^{-5}, \quad \tilde{U}_2 = 1,878\times10^{-5}, \quad \tilde{U}_3 = 1,894\times10^{-5}, \quad \tilde{U}_4 = 1,879\times10^{-5}.$$

Проведённые расчёты показывают, что разница полученных величин не превышает 10^{-7}. Эти результаты позволяют утверждать, что вычисленные значения потенциальной энергии изгиба модельного нанокантилевера соответствуют физическим реалиям, поскольку были получены при аппроксимации изгиба в разных классах функций. Такая верификация вычислительных алгоритмов необходима в тех случаях, когда физический эксперимент над реальными объектами невозможен.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант № 22-11-00087, `https://rscf.ru/en/project/22-11-00087`.

Литература

[1] Nanocantilever Beams: Modeling, Fabrication, and Applications. 1st Ed. Edited By Ioana Voiculescu, Mona Zaghloul. Jenny Stanford Publishing, 2016. 544 p.

[2] Bochkarev A. Buckling of a nano-rod with taken into account of surface effect // Z. Angew. Math. Mech. 2024. Vol. 104. No. 3. P. e202300738.

[3] Chhapadia P., Mohammadi P., Sharma P. Curvature-dependent surface energy and implications for nanostructures // J. Mech. Phys. Solids. 2011. Vol. 59. P. 2103–2115.

[4] Chhapadia P., Mohammadi P., Sharma P. Erratum to: “Curvature-dependent surface energy and implications for nanostructures” [J. Mech. Phys. Solids. 2011. Vol 9. P. 2103–2115] // J. Mech. Phys. Solids. 2012. Vol. 60. P. 1241–1242.

[5] Невельсон М. Б., Хасьминский Р. З. Стохастическая аппроксимация и рекуррентное оценивание. М.: Наука, 1972. 304 с.