

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za matematiko in fiziko



# Zaključni projekt iz modelske analize

Avtor  
**Andrej Kolar - Požun**

4. December, 2019

## Kazalo

1 Naloga	1
2 Metoda robnih elementov	1
3 Težave s konvergenco pri periodičnem problemu	2
4 Alternativna rešitev	8
5 Ostale oblike elektrod	14
6 Reference	19

# 1 Naloga

Izračunaj potencial in električno polje za primer 1D periodične razporeditve elektrod z metodo robnih elementov (predpostavi 2D fiziko). Periodična razširitev spremeni Greenovo funkcijo v neskončno vsoto prispevkov. Analitično razišči konvergenco te vrste in poišči način za njen izračun.

## 2 Metoda robnih elementov

Elektrostatični potencial v vakuumu zadošča Laplaceovi enačbi:

$$\nabla^2 u(x, y) = 0. \quad (1)$$

Domena na kateri enačbo rešujemo je prostor  $\mathbb{R}^2 \setminus E$ , kjer so elementi množice  $E$  območja elektrod. Z drugimi besedami: Zanima nas potencial kjerkoli v prostoru zunaj elektrod. Za enoličnost rešitve Laplaceove enačbe potrebujemo še robne pogoje. Ker so elektrode prevodniki, mora veljati, da je  $u(x, y) = \text{konst}$  na njihovi površini. V nalogi bom privzel, da so elektrode nabite na  $u(x, y) = \pm 1$  (hočemo pozitivno in negativno nabite elektrode, da bo celoten sistem električno nevtralen).

Za trenutek pozabimo na elektrode in se spomnimo, da elektrostatični potencial v celiem prostoru  $\mathbb{R}^2$ , ki ga povzroči neka gostota naboja  $\sigma(x, y)$  opisuje Poissonova enačba:

$$\nabla^2 u(x, y) = -\sigma(x, y), \quad (2)$$

kjer sem influenčno konstanto postavil na ena. Rešitev zgornjega problema lahko izrazimo v zakjučeni obliki s pomočjo Greenove funkcije, ki je definirana z enačbo:

$$\nabla^2 G(x - x_0, y - y_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0). \quad (3)$$

opazimo, da Greenova funkcija predstavlja potencial, ki ga povzroči (do predfaktorja natančno) točkast nabolj, ki se nahaja na koordinatah  $(x_0, y_0)$ . S pomočjo Greenove funkcije se rešitev zgornje Poissonove enačbe glasi:

$$u(x, y) = - \int \int dx_0 dy_0 G(x - x_0, y - y_0) \sigma(x_0, y_0). \quad (4)$$

Vrnimo se na naš problem. V domeni (torej zunaj elektrod), kjer nas potencial zanima ne nastopa nikakršna gostota naboja, torej je relevantna enačba Laplaceova in ne Poissonova. Vendar pa nam elektrode na enačbo dajo netrivialne robne pogoje. Pri metodi robnih elementov pravzaprav prevedemo Laplaceovo enačbo z netrivialnimi robnimi pogoji v Poissonovo enačbo na domeni  $\mathbb{R}^2$ . To storimo tako, da rob domene (v našem primeru so to elektrode) razdelimo na manjše odseke - tako imenovane plakete  $l_i$  (pri dovolj fini delitvi roba bodo to kar ravne črte), za katere rečemo, da so nabite in nosijo neko gostoto naboja  $\sigma_i$ . Te gostote bomo izbrali na tak način, da bo našim robnim pogojem zadoščeno. Ker smo gostote postavili le na rob domene je relevantna enačba znotraj domene torej še vedno Laplaceova, ki pa bo zaradi naboja na robu zadoščala danim robnim pogojem. Po ustreznih izrekih o enoličnosti bo to predstavljal rešitev našega problema.

Formulirajmo zgoraj povedano podrobnejše: Za 2D Laplaceovo enačbo na  $\mathbb{R}^2$  se Greenova funkcija glasi:

$$G(x - x_0, y - y_0) = \frac{1}{4\pi} \ln((x - x_0)^2 + (y - y_0)^2). \quad (5)$$

Recimo, da imamo na plaketi  $l_i$  gostoto naboja  $\sigma_i$ . Po (4) bo potencial, ki ga taka plaketa povzroča enak:

$$u_i(x, y) = -\frac{\sigma_i}{4\pi} \int_{l_i} \ln((x - x_0)^2 + y^2) dx_0 = \sigma_i \Gamma_i(x, y). \quad (6)$$

V zgornji enačbi smo privzeli, da je plaketa horizontalna daljica, ki se nahaja na  $y_0 = 0$ . To v splošnem seveda ni res, vendar bom pri izračunah vedno koordinate ustrezno transliral in rotiral, da bo to veljalo. Z  $\Gamma_i(x, y)$  sem označil potencial, ki ga na koordinati  $(x, y)$  povzroči i-ta plaketa z enotskim naboljem. (Tukaj sem malce zlorabil označke in pisal  $\sigma_i$ , čeprav gre pravzaprav za dolžinsko in ne ploskovno gostoto naboja,

ker privzamemo, da je rob neskončno tanek in smo trivialno integracijo po  $y_0$  že naredili. Ti detajli ne bodo pomembni, saj so  $\sigma_i$  tako ali tako neznane količine, ki jih bomo šele zdaj določili).

Zgornji integral se da analitično izračunati. Izkaže se, da je vrednost  $\Gamma_i(x, y)$  enaka:

$$\Gamma_i(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \left( -l + y \left( \arctan \frac{x_-}{y} - \arctan \frac{x_+}{y} \right) + \frac{x_-}{2} \ln(x_-^2 + y^2) - \frac{x_+}{2} \ln(x_+^2 + y^2) \right), \quad (7)$$

kjer  $l$  označuje dolžino plakete in  $x_{\pm} := x \mp l/2$ .

Celoten potencial je podan z vsoto prispevkov vseh plaket:

$$U(x, y) = \sum_i u_i(x'_i(x), y'_i(y)) = \sum_i \sigma_i \Gamma_i(x'_i(x), y'_i(y)), \quad (8)$$

kjer vsota teče po plaketah,  $u_i$  je prispevek i-te plakete k potencialu, kjer moramo upoštevati transformacijo koordinatnega sistema (kar sem shematsko napisal kot  $(x'_i(x))$ ). V splošnem ima lahko vsaka plaketa drugačno gostoto naboja  $\sigma_i$ .

Do rešitve nas loči le še določitev gostot naboja  $\sigma_i$ . Te določimo z zahtevo da je potencial na plaketah enak predpisanim robnim pogoju:

$$u_i = \sum_j a_{ij} \sigma_j, \quad (9)$$

kjer gredo indeksi  $i$  in  $j$  po plaketah.  $u_i$  je potencial na i-ti plaketi,  $a_{ij}$  pa je prispevek j-te plakete (z enotskim nabojem) na i-to plaketo podan z (4). Enačba (9) je torej enostavno matrični sistem enačb, katerega rešitve so iskane gostote nabojev.

Zgodba se tukaj še ne konča - do sedaj nismo še ničesar povedali o tem, kje je ničla potenciala. Recimo, da želimo ničlo potenciala fiksirati na točko  $(x^0, y^0)$ . Z zgornjo formulo bo na tem mestu potencial v splošnem neničelen. Lahko bi ga postavili na nič s tem, da bi zgoraj pridobljeni rešitvi preprosto prišteli konstanto, vendar potem ta ne bi več zadoščala našim robnim pogojem. Primerno konstantno moramo torej iskati skupaj z gostotami naboja, da je obem pogojem (robnimi na elektrodah in ničli potenciala) zadoščeno.

To storimo takole: V naš vektor neznank dodamo  $\sigma_{N+1} = C$  - aditivno konstanto k potencialu (Če je število vseh plaket  $N$ ). V matriki  $a_{ij}$  potem dodamo na desni stolpec enk, kar predstavlja aditivno konstanto  $C$  k izračunanim potencialom  $u_i$ . Na dno pa dodamo še vrstico  $a_{N+1,j}$ , ki predstavlja prispevek j-te plakete na mesto  $(x^0, y^0)$ . Ker hočemo, da je skupni prispevek na to mesto enak 0, moramo vektorju  $u_i$ , dodati  $u_{N+1} = 0$ . S tem se dimenzija našega matričnega sistema poveča za 1 in ga še vedno lahko brez problema rešimo.

### 3 Težave s konvergenco pri periodičnem problemu

Najprej se na preprost način prepričajmo, da ima vrsta, ki izraža naš potencial  $u(x, y)$  slabe lastnosti, kar se konvergencije tiče in si poglejmo od kod te težave izhajajo.

Naloga sprašuje po potencialu, ki ga povzroči periodična razporeditev elektrod dolžine  $d$ . Recimo, da so elektrode horizontalne in paličaste oblike, katerih središča so med seboj razmaknjena za  $a$  (seveda morda veljati  $a > d$ ). Središča elektrod se torej nahajajo na koordinatah  $(ka, 0)$ ,  $k \in \mathbb{Z}$ .

Vsako izmed elektrod razdelimo na  $n$  plaket dolžine  $l = d/n$ . Središča plaket lahko tako parametriziramo z  $y_i = 0$ ,  $x_i = ka - d/2 + l/2 + k_2 l$ , kjer so  $k_1 \in \mathbb{Z}$ ,  $k_2 = 0, 1, 2, \dots, n-1$ .

Raziskimo, kako je z konvergenco vrste v (8). Za začetek recimo, da vsako elektrodo opišemo z eno plaketo, zanima pa naš potencial v neki točki  $(x, y) = (0, y)$ . Potencial je po enačbi (8) enak:

$$U(0, y) = \sum_{i=-1}^{-\infty} \sigma_i \Gamma_i(x', y') + \sigma_0 \Gamma_0(x', y') + \sum_{i=1}^{\infty} \sigma_i \Gamma_i(x', y') + C, \quad (10)$$

kjer prva vsota opisuje prispevke plaket, ki se nahajajo pri  $x < 0$  druga pa tiste, ki se nahajajo pri  $x > 0$ . Z  $i = 0$  sem tokrat označil sredinsko plaketo, aditivna konstanta pa je  $C$ . Člen pri  $i = 0$  in aditivna konstanta sta pač neki številki in za konvergenco celotne vrste nista pomembni. Ker nas zanima potencial v točki, za katero velja  $x = 0$ , imamo simetrijo (zaradi enostavnosti bomo robne pogoje izbrali take, da imamo res to

simetrijo) glede na zrcaljenje preko ordinatne osi, kar pomeni, da mora biti prispevek k-te elektrode na levi (in v našem primeru tudi plakete) enak prispevku k-te elektrode na desni:

$$U(0, y) = \sigma_0 \Gamma_0(x', y') + 2 \sum_{i=1}^{\infty} \sigma_i \Gamma_i(x', y') + C. \quad (11)$$

Poglejmo si podrobnejše prispevek k-te elektrode, kjer privzamemo, da je  $k$  dovolj velik, da je integrand v (4) ves čas pozitiven. Števil  $k$  za katere to ni res, je le končno in h konvergenci vrste ne prispevajo. Prispevek k-te elektrode je:

$$\Gamma(0, y)_k = \frac{1}{4\pi} \int_{ka-L/2}^{ka+L/2} \ln(x_0^2 + y^2) dx_0 \geq \frac{L}{4\pi} \ln((ka - L/2)^2 + y^2). \quad (12)$$

Integrand smo zamenjali z njegovim infimumom (ki ga sedaj lahko izpostavimo) in integrirali, kar prinese faktor  $L$ . S tem smo vrednost integrala kvečjemo zmanjšali. Rezultat je logaritemska funkcija, ki gre proti neskončno, ko gre  $k$  proti neskončno. Podoben razmislek, bi lahko naredili, če bi bila posamezna elektroda iz več plaket, le da bi potem dobljeni rezultat veljal za eno izmed plaket.

Tako opazimo, da vrsta očitno divergira, če so naboji  $\sigma_i$  vsi enaki neki (neničelni) konstanti. Vrsta bo lahko konvergentna le, če  $\sigma_i$  po absolutni vrednosti dovolj hitro padajo ali če morda po predznaku alternirajo.

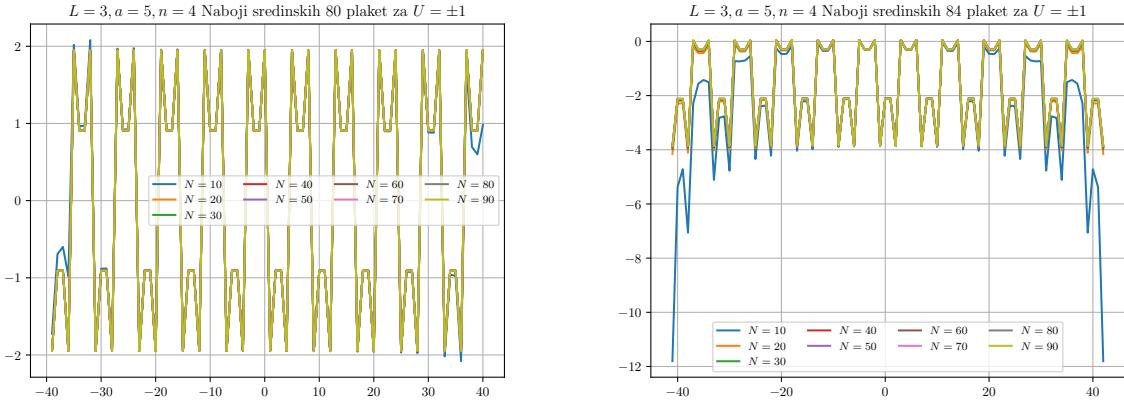
Vendar je naš problem periodičen s periodo  $a$ . Naboji elektrod torej z  $i$  ne morejo ves čas padati. Ostane la možnost, da naboji po predznaku alternirajo. Tako pridemo do znanega primera alternirajočih vrst, kjer vrsta sicer morda konvergira pogojno, ne konvergira pa absolutno. Takšne vrste so problematične, ker je poleg tega, da konvergirajo zelo počasi, njihov rezultat odvisen od vrstnega reda seštevanja členov. Iz teorije ionskih kristalov vemo, da bo treba seštevati na tak način, da bodo delne vsote, s katerimi bomo vrsto aproksimirali, zaobjele elektrode na tak način, da bo celoten sistem električno nevtralen [1].

Če nas potencial zanima pri točki, ki ni točno  $x = 0$  ne pričakujemo velike spremembe, saj imamo opravka z zveznimi funkcijami. Eden izmed možnih poti iz zagate bi lahko bilo dejstvo, da so potenciali (klasično) zgorj matematičen pripomoček. Fizikalno pomembna količina pa je gostota električnega polja, vendar pa ta oddaljenostjo v 2D pada kot  $1/r$ , kar tudi ni dovolj hitro, da bi vrsta postala absolutno konvergentna (Dobro znana divergentna harmonična vrsta). Sklep torej v splošnem ostaja enak.

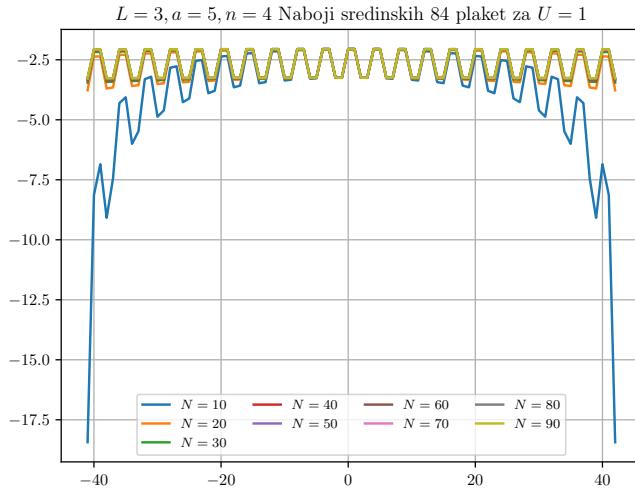
Do zdaj smo problem le teoretično raziskali. Poglejmo si še kaj se zares zgodi, če naš problem napademo z (naivno) numeriko iz prejšnjega poglavja.

V nadaljevanju bom z  $n$  označeval število plaket na elektrodi, z  $N$  pa število elektrod na eni strani (skupaj bo torej  $2N$  elektrod oziroma  $2N + 1$ , če je še ena na sredini). Za ničlo potenciala bom izbral  $(x, y) = (0, 1)$ . Obravnaval bom tri različne primere:

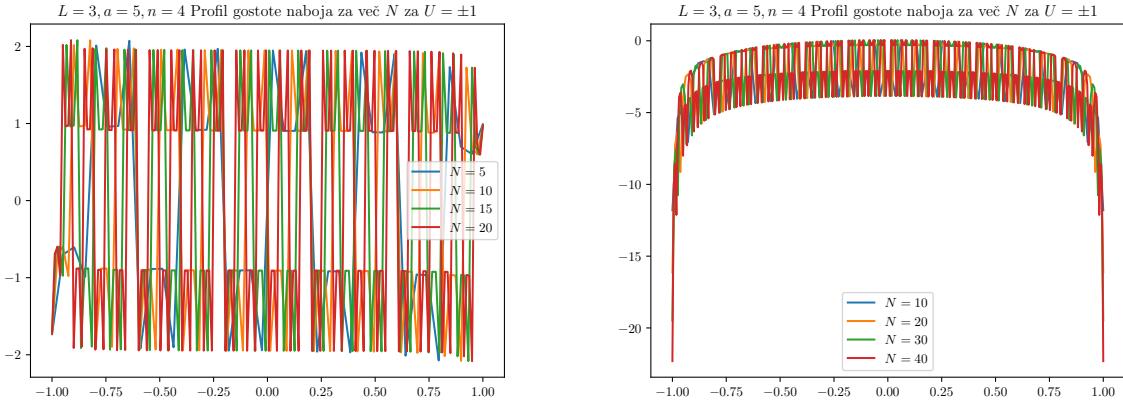
- Napetosti (in torej naboji) elektrod po predznaku alternirajo - elektrod je  $2N$  - vsakega predznaka  $N$ . Po prejšnjem premisleku bi tu vrsta lahko konvergirala.
- Napetosti elektrod po predznaku alternirajo, vendar je v sistemu za ena več pozitivnih elektrod. Fizikalno je tudi za velik  $N$  ta primer bistveno drugačen, ker nimamo več električne nevtralnosti.
- Napetosti elektrod so vse istega predznaka  $U = 1$ . Vrsta, ki jo seštevamo bi tu morala biti divergentna.



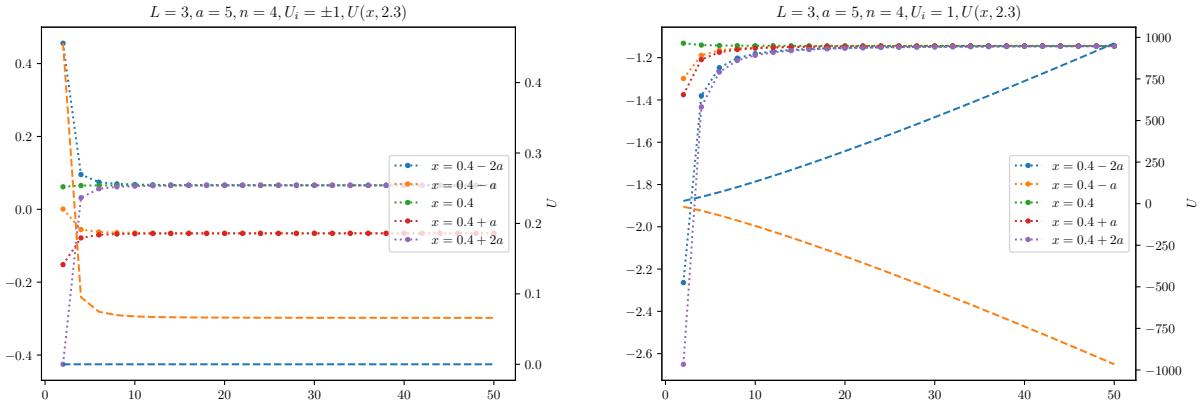
Na sliki vidimo naboje sredinskih plaket, kjer napetosti elektrod alternirajo. Na levi je enako število pozitivnih in negativnih elektrod, na desni je ena pozitivna več. pri  $N = 10$  je vseh plaket 80/84 in vidimo robne efekte pri čemer so ti pri slednji konfiguraciji veliko hujši. V obeh primer je stvar periodična, kot mora biti na levi tudi alternira po predznaku. Na desni opazimo veliko razliko: naboji alternirajo okoli nekega negativnega povprečja.



Profil sredinskih nabojev v primeru  $U = 1$  na vseh elektrodah. Naboji nihajo veliko manj kot prej, vendar spet okoli nekega negativnega. Robni efekti imajo podobno obliko kot v prejšnjem primeru alternirajočih elektrod, kjer sistem ni bil električno neutralen, le da so še malo močnejši.

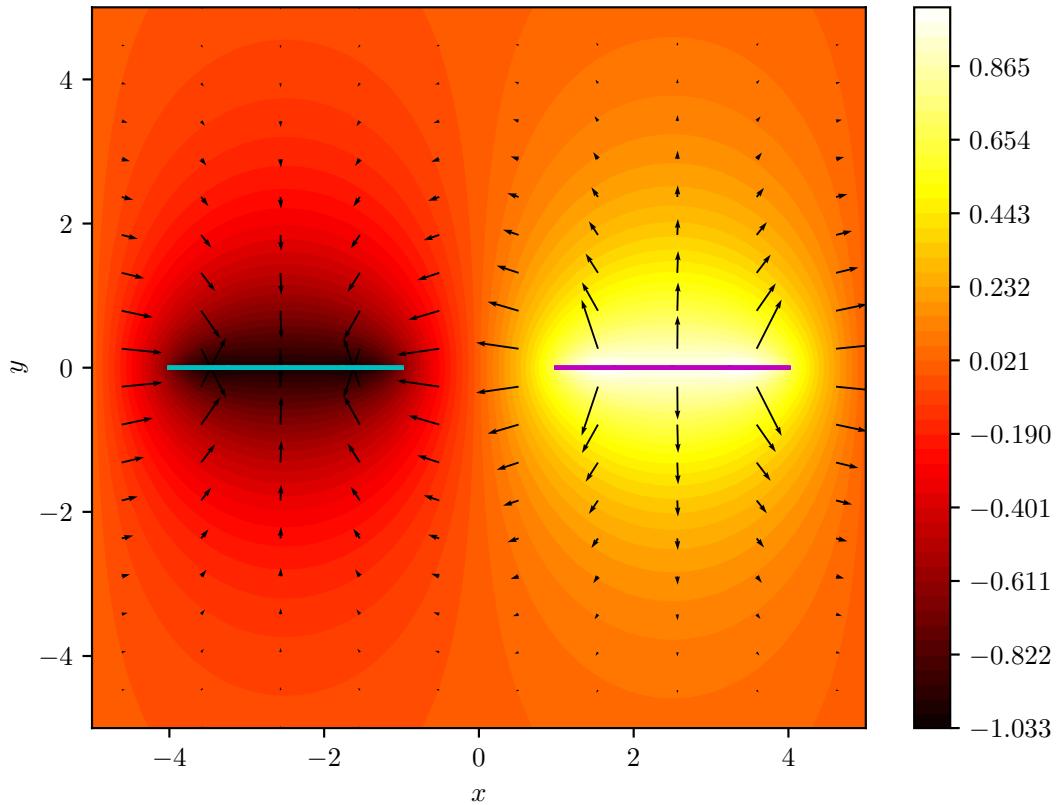


Na sliki vidimo celoten profil naboja, reskaliran na interval  $[-1, 1]$ . Na levi je enako število pozitivnih in negativnih elektrod, na desni je ena pozitivna več. Spet vidimo veliko razliko: Na levi so robni efekti komaj opazni in so nepravilnosti bolj lokalizirane na robu. Na desni so robni efekti zelo močni pa tudi kar daleč od roba se povprečje okoli katerega naboji oscilirajo ni še ustalilo.

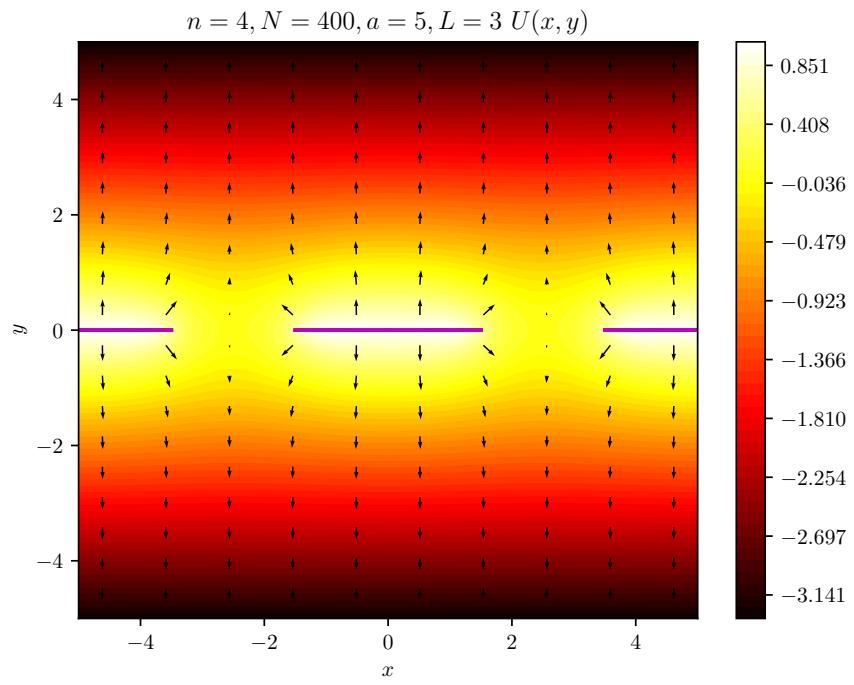


Na sliki vidimo potencial v ovisnosti od  $N$ , na levi v primeru nevtralnega sistema alternirajočih elektrod na desni pa imamo iste elektrode. Opazimo, da potencial v  $N$  v obeh primerih hitro konvergira do neke vrednosti. Tudi v potencialu je periodičnosti seveda zadoščeno (na levi je perioda  $2a$ , ker imamo dve vrsti elektrod). Z modro črtkano črto je prikazana vrednost vrste, ki jo seštevamo, z oranžno pa aditivna konstanta (vrednosti le teh so na desni  $y$  osi). Opazimo, da v primeru enakih elektrod vrsta torej res divergira, vendar z aditivno konstanto prisilimo končnost rezultata. Izkaže se, da ima podobno obnašanje vrednosti vrste in aditivne konstante tudi primer alternirajočih elektrod, kjer sistem ni električno nevtralen. Na levi pa vidimo, da je v primeru nevtralnega sistema spremenjanje aditivne konstante čisto drugačno (ozioroma, sploh se ne spreminja).

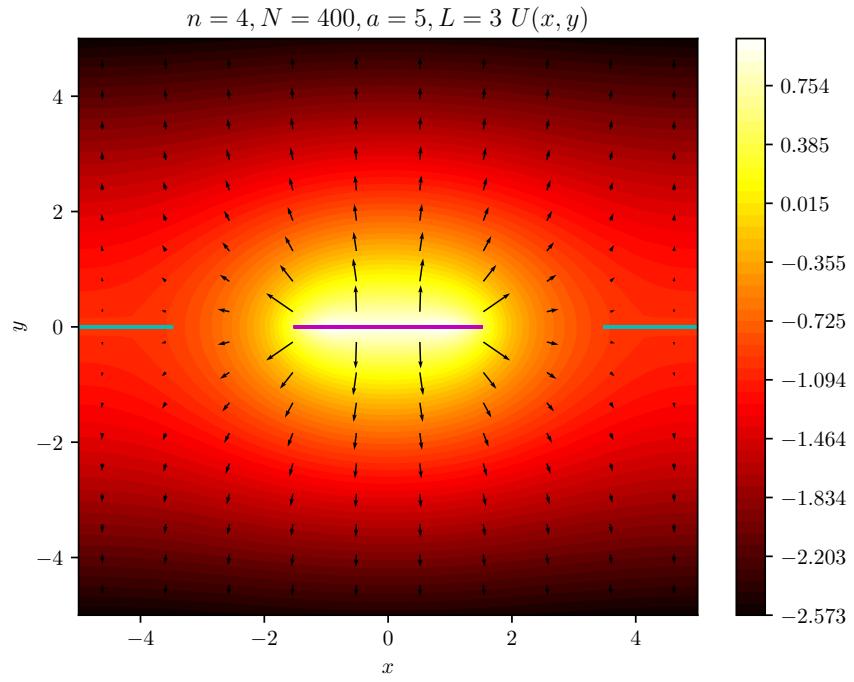
$$n = 4, N = 400, a = 5, L = 3 \quad U(x, y)$$



Prikazana je slika potenciala za primer, ko potenciali elektrod alternirajo med  $U = 1$  (obarvano vijolično)  $U = -1$  (Obarvano modro). Ničla potenciala je pri  $(x, y) = (0, 1)$ . Narisana je "osnovna celica" problema, ki se v x smeri ponavlja (periodičnost je v tem primeru  $2a$ ).



Prikazana je slika potenciala za primer enako nabitih elektrod pri  $U = 1$ .



Slika potenciala za primer, ko napetosti na elektroda alternirajo.

## 4 Alternativna rešitev

Problem bom sedaj rešil še tako, da bom skonstruiral Greenovo funkcijo, ki bo že sama poskrbela za periodičnost problema. Poiskati želimo rešitev enačbe:

$$\nabla^2 G(x - x_0, y - y_0) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0 + ka) \delta(y - y_0). \quad (13)$$

Takšna Greenova funkcija že sama "ve", da moramo poleg točkastega naboja na  $(x_0, y_0)$  imeti zaradi periodičnosti problema enake naboje na točkah  $(x_0 + ka, y_0)$  in tako predstavlja potencial periodično razporejenih točkastih nabojev.

Vrsta na desni predstavlja znani Diracov glavnik, katerega lahko ekvivalentno izrazimo s pomočjo naslednje formule:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0 + na) = \frac{1}{a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i2\pi n(x-x_0)/a}. \quad (14)$$

Tudi Greenova funkcija mora biti periodična v smeri  $x$  s periodo  $a$  in jo lahko razvijemo v Fourierovo vrsto:

$$G(x - x_0, y - y_0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n(y - y_0) e^{i2\pi n(x-x_0)/a}. \quad (15)$$

Laplaceova enačba se potem v Fourierovi sliki glasi:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( -(2\pi n/a)^2 g_n(y - y_0) + g_n''(y - y_0) \right) e^{i2\pi n(x-x_0)/a} = \frac{1}{a} \delta(y - y_0) \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i2\pi n(x-x_0)/a}. \quad (16)$$

Ker  $\{e^{i2\pi nx/a}\}_n$  tvorijo ortonormirano bazo, mora zgornja enakost velja za vsak člen v vsotah oziroma:

$$g_0''(y - y_0) = \frac{1}{a} \delta(y - y_0) \quad (17)$$

$$g_n''(y - y_0) - (2\pi n/a)^2 g_n(y - y_0) = \frac{1}{a} \delta(y - y_0), n \neq 0 \quad (18)$$

Enačbi bomo rešili s pomočjo Fourierove transformacije (konvencija  $f(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$ ). Pripadajoče Fourierove transformiranke lahko najdemo kar v tabelah [2]. Transformirajmo in rešimo najprej prvo enačbo:

$$\begin{aligned} (ik)^2 g_0(k) &= \frac{1}{a} \\ g_0(k) &= -\frac{1}{ak^2} \\ g_0(y - y_0) &= \frac{1}{2a} |y - y_0| \end{aligned} \quad (19)$$

Pa še drugo enačbo:

$$\begin{aligned} (ik)^2 g_n(k) - (2\pi n/a)^2 g_n(k) &= \frac{1}{a} \\ g_n(k) &= -\frac{1}{a} \frac{1}{(k^2 + (2\pi n/a)^2)} \\ g_n(y - y_0) &= -e^{-2\pi|n|/a|y-y_0|} \frac{1}{4\pi|n|} \end{aligned} \quad (20)$$

Tako dobimo:

$$\begin{aligned} G(x - x_0, y - y_0) &= \frac{1}{2a} |y - y_0| - \sum_{n \neq 0} \frac{1}{4\pi|n|} e^{-2\pi|n||y-y_0|/a} e^{i2\pi n(x-x_0)/a} = \\ &= \frac{1}{2a} |y - y_0| - \sum_{n>0} \frac{1}{4\pi n} e^{-2\pi n|y-y_0|/a} (e^{i2\pi n(x-x_0)/a} + e^{-i2\pi n(x-x_0)/a}) = \\ &= \frac{1}{2a} |y - y_0| - \sum_{n>0} \frac{1}{2\pi n} e^{-2\pi n|y-y_0|/a} \cos(2\pi n(x - x_0)/a) \end{aligned} \quad (21)$$

Naša naslednja naloga je torej seštevi vrsto oblike:

$$\sum_{n>0} \frac{1}{n} e^{-an} \cos bn, \quad (22)$$

kjer je  $a \geq 0$ . Računajmo:

$$\begin{aligned} \sum_{n>0} \frac{1}{n} e^{-an} \cos bn &= \operatorname{Re} \left( \sum_{n>0} \frac{1}{n} e^{-an+ibn} \right) = \operatorname{Re} \left( \sum_{n>0} \frac{1}{n} (e^{-a+ib})^n \right) = -\operatorname{Re} (\ln(1 - e^{-a+ib})) = \\ &= -\ln(|1 - e^{-a+ib}|) = -\frac{1}{2} \ln((1 - e^{-a+ib})(1 - e^{-a-ib})) = -\frac{1}{2} \ln(1 - e^{-a}(e^{ib} + e^{-ib}) + e^{-2a}) = \\ &= -\frac{1}{2} \ln(e^{-a}(e^a - 2 \cos(b) + e^{-a})) = -\frac{1}{2}(-a + \ln(2 \cosh(a) - 2 \cos(b))) \end{aligned} \quad (23)$$

Kjer smo kosinus s pomočjo Eulerjeve formule napisali z eksponentno funkcijo in vrsto, ki smo jo tako dobili, prepoznali kot Taylorjevo vrsto logaritemsko funkcije. Vrsta bo konvergirala, če velja  $|e^{-a+ib}| < 1$ , oziroma  $|e^{-a}| < 1$ , oziroma  $a \neq 0$ . V nadaljevanju smo uporabili formulo za realni del kompleksnega algoritma in z nekaj algebraičnimi prijemi poenostavili rezultat.

Nadaljujemo torej:

$$\begin{aligned} G(x - x_0, y - y_0) &= \frac{1}{2a} |y - y_0| + \frac{1}{4\pi} \left( -\frac{2\pi}{a} |y - y_0| + \ln(2 \cosh(2\pi|y - y_0|/a) - 2 \cos(2\pi(x - x_0)/a)) \right) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \ln(2(\cosh(2\pi|y - y_0|/a) - \cos(2\pi(x - x_0)/a))) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \ln \left( 2(\cosh(\pi|y - y_0|/a)^2 + \sinh(\pi|y - y_0|/a)^2 - \cos(\pi(x - x_0)/a)^2 + \sin(\pi(x - x_0)/a)^2) \right) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \ln \left( 4(\sinh(\pi|y - y_0|/a)^2 + \sin(\pi(x - x_0)/a)^2) \right) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \left( \ln 4 + \ln(\sinh(\pi|y - y_0|/a)^2 + \sin(\pi(x - x_0)/a)^2) \right) \end{aligned} \quad (24)$$

Ker je aditivna konstanta nepomembna lahko zapišemo Greenovo funkcijo v naslednji obliki:

$$G(x - x_0, y - y_0) = \frac{1}{4\pi} \ln(\sinh(\pi|y - y_0|/a)^2 + \sin(\pi(x - x_0)/a)^2) \quad (25)$$

Še komentar o veljavnosti rezultata: Videli smo, da vrsto, na katero naletimo med izpeljavo, lahko seštejemo le, če velja  $|y - y_0| > 0$ . Ker je končna funkcija zvezna v  $y$  in pričakujemo, da bo tudi naš potencial tak, pričakujemo, da bo rezultat v redu, tudi če velja  $|y - y_0| = 0$ . Greenova funkcija v tem primeru gre proti neskončno, če je tudi drugi člen v logaritmu ničelen, kar pa je smiselno saj so ravno na teh koordinatah točkasti naboji.

Z odvajanjem lahko preprosto dobimo še formuli za gostoto električnega polja, ki jo povzročijo točkasti, periodično razporejeni naboji:

$$E_x = -\frac{\partial G(x - x_0, y - y_0)}{\partial x} = -\frac{1}{4a} \frac{\sin(2\pi(x - x_0)/a)}{\sinh(\pi(y - y_0)/a)^2 + \sin(\pi(x - x_0)/a)^2} \quad (26)$$

$$E_y = -\frac{\partial G(x - x_0, y - y_0)}{\partial y} = -\frac{1}{4a} \frac{\sinh(2\pi(y - y_0)/a)}{\sinh(\pi(y - y_0)/a)^2 + \sin(\pi(x - x_0)/a)^2} \quad (27)$$

V metodi robnih elementov integriramo Greenovo funkcijo, da dobimo prispevek celotne plakete k potencialu. Tukaj je oblika Greenove funkcije tako, da integrala ne moremo narediti analitično in bo treba integrirati numerično. Uporabljal bom scipy-jev integrator quad.

Težava se pojavi, ko računamo potencial, ki ga i-ta plaketa povzroči na sredini i-te plakete. Takrat imamo namreč opravka z integralom oblike:

$$\Gamma_i(0, 0) = \int_{-l/2}^{l/2} G(-x_0, 0) dx_0 = \frac{1}{4\pi} \int_{-l/2}^{l/2} \ln(\sin(\pi x_0/a)^2) dx_0. \quad (28)$$

Integrand gre proti  $-\infty$ , ko gre  $x_0$  proti 0, kar numerični metodi quad ni všeč. Problema se rešimo tako, da malce preoblikujemo zgornji integral:

$$\frac{1}{4\pi} \int_{-l/2}^{l/2} \ln(\sin(\pi x_0/a)^2) dx_0 = \quad (29)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_0^{l/2} \ln(\sin(\pi x_0/a)) dx_0 = \quad (30)$$

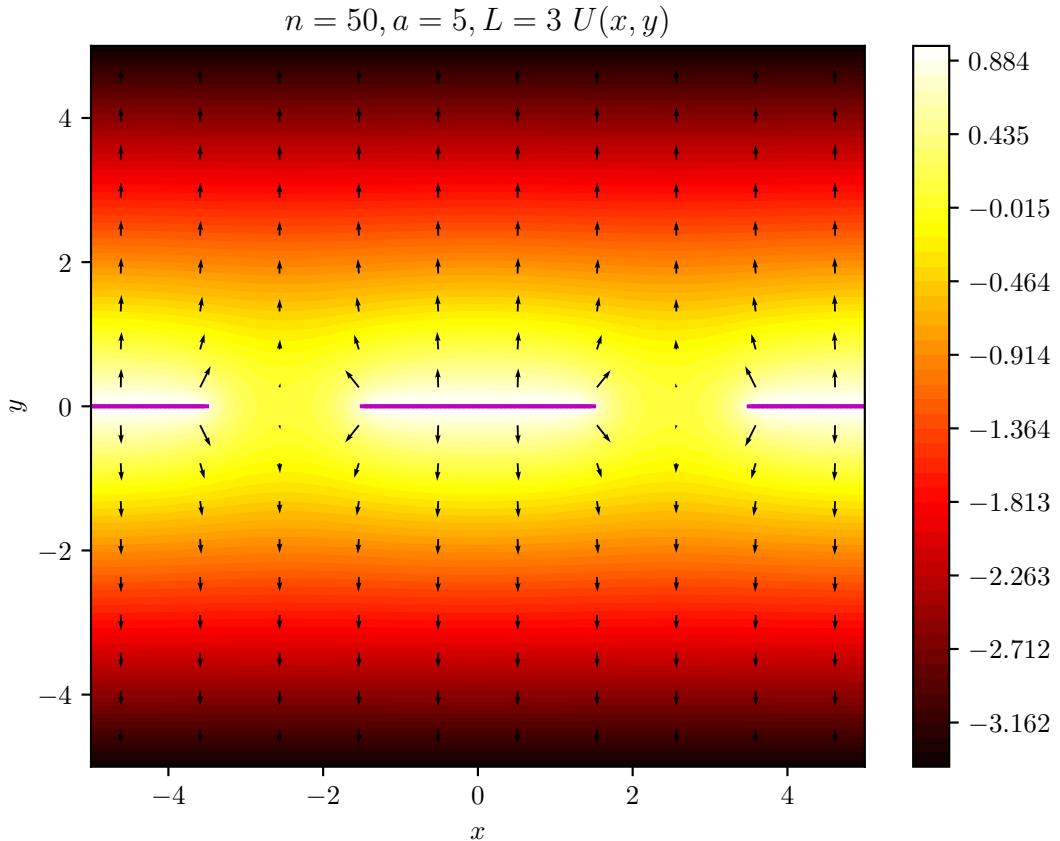
$$= \frac{a}{\pi^2} \int_0^{(\pi l)/(2a)} \ln(\sin(u)) du = \quad (31)$$

$$= \frac{a}{\pi^2} \left( u \ln \sin(u) \Big|_0^{(\pi l)/(2a)} - \int_0^{(\pi l)/(2a)} u \cot u du \right) = \quad (32)$$

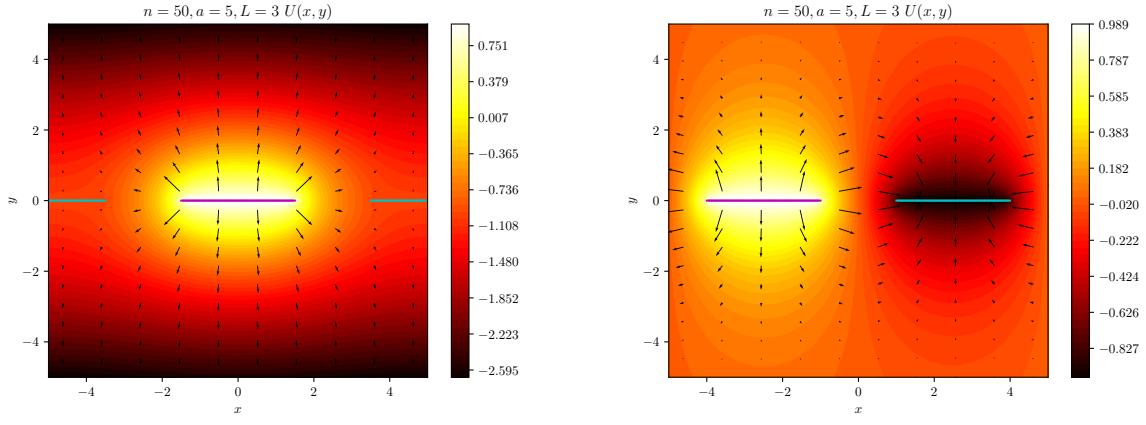
$$= \frac{a}{\pi^2} \left( \frac{\pi l}{2a} \ln \sin \frac{\pi l}{2a} - \int_0^{(\pi l)/(2a)} u \cot u du \right) \quad (33)$$

Upoštevali smo dejstvo, da velja  $l < a$ , kar pomeni, da je sinus v logaritmu ves čas nenegativen. Na koncu nam vseeno ostane integral, ki ga moramo narediti numerično, vendar lahko singularnost odstranimo, saj ima integrand  $u \cot u$  dobro definirano limito  $u \rightarrow 0$  (ki je enaka 1).

Profil potenciala, pridobljen s to metodo je sledeč:



Na sliki je predstavljen potencial, pridobljen z periodično Greenovo funkcijo. Rezultat je zelo podoben tistemu, pridobljenemu z navadno Greenovo funkcijo.



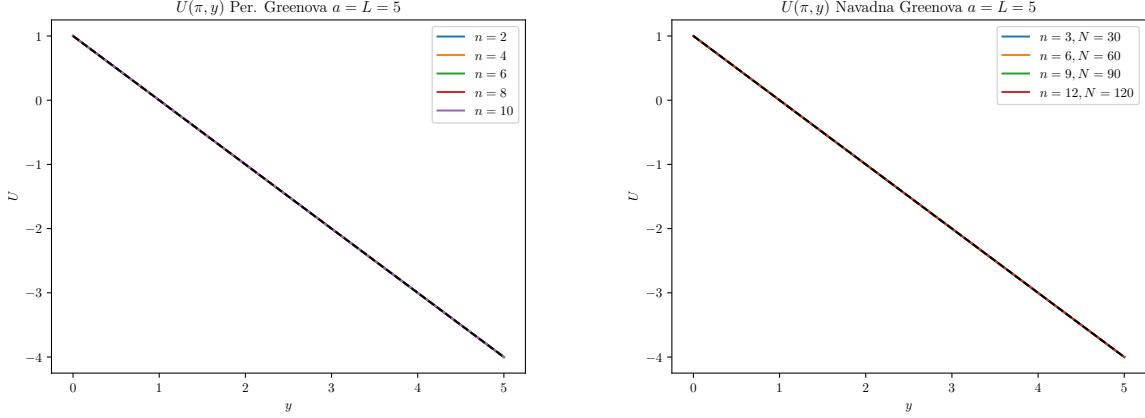
Na sliki sta še potenciala, ko napetosti na elektrodah alternirajo. Slika na desni se sklada s prejšnjo metodo, na levi pa je numerična vrednost potenciala spet močno drugačna. Razlog za tako napako je sledeč: Sistem ni električno nevtralen (sredinska elektroda nima nasprotno nabitega para), kar se pozna ko imamo končno število elektrod. Pri periodični Greenovi funkciji pa imamo vedno zares neskončno elektrod in tega problema ni.

Metodi bomo še dodatno preverili in ju primerjali na primeru, ki je analitično rešljiv: Ko je  $a = L$ , torej pravzaprav, ko imamo le eno neskončno dolgo elektrodo pri  $y = 0$ . V tem primeru imamo v  $x$  smeri zvezno translacijsko simetrijo in torej velja  $u(x, y) = u(y)$ . Laplaceovo enačbo lahko v tem primeru preprosto integriramo:

$$\nabla^2 u(y) = u''(y) = 0 \rightarrow u(y) = Ay + B \quad (34)$$

Z robnima pogojema  $u(x, 0) = 1, u(x, 1) = 0$  dobimo:

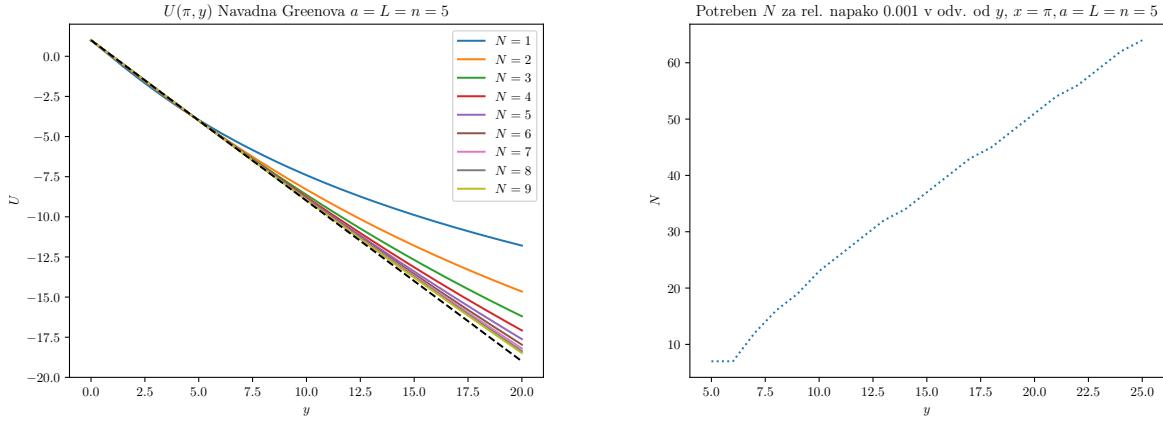
$$u(y) = -y + 1 \quad (35)$$



Na sliki je predstavljena odvisnost potenciala od  $y$  v primeru ene same neskončno dolge elektrode. Z obema metodoma dobimo pravilno rešitev tudi z manjšimi  $n$  in  $N$ . Točka v kateri računamo potencial  $(\pi, y)$  je izbrana, ker je "grša" (Nimamo simetrije v primeru navadne Greenove funkcije, ni točno nad/vmes sredinami elektrod..).

Spomnimo, da je  $2N + 1$  število vseh elektrod dolžine  $L = 5$ . Pri večjih  $y$  bi morala biti vidna odvisnost potenciala od  $N$  (ko je oddaljenost od elektrode primerljiva z njeno dolžino in torej ni več "približno

neskončna”). Poglejmo podrobneje to odvisnost. Pri periodični Greenovi seveda to ni problem, saj imamo vedno opravka z zares neskončno elektrodo.



Na levi opazimo, da za premajhen  $N$  nimamo več prave, linearne rešitve. Z večanjem  $N$  pa se ta seveda izboljšuje. Na desnem grafu sem raziskal, kakšen  $N$  potrebujemo, da je za dan  $y$  relativna napaka glede na analitično vrednost manjša od 0.1%. Vidimo, da je odvisnost  $N(y)$  približno linearна z naklonom, ki je malo manjši kot 3.

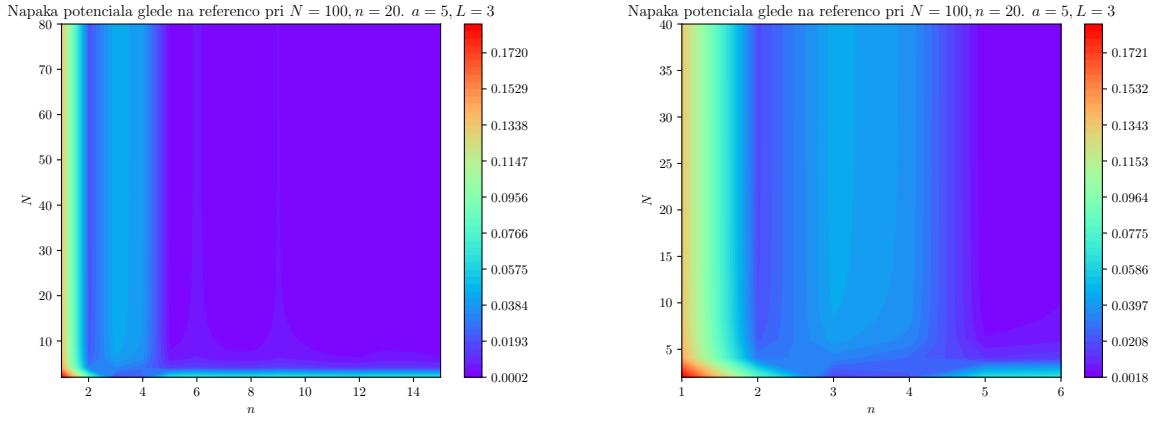
Pomislimo torej, kako se potrebni  $N$  spreminja, glede na to kje se nahaja točka  $(x, y)$ , ki nas zanima.

Ker je naklon zgornjega grafa manjši od 3, bi moral  $N$ , ki je trikrat večji od  $|y|$  (za  $-y$  je zgodba enaka) zadostovati. V enotah dolžine (en  $N$  ustreza  $L = 5$  dolgi elektrodi) to pomeni, da mora biti širina celotnega sistema elektrod (torej recimo kar  $2N$  elektrod, ker je  $N$  itak velik in +1 ni pomemben) 30-kratnik  $y$ , da bomo dovolj dobro opisali "neskončno periodičnost".

Kaj pa odvisnost  $N$ -ja od  $x$ ? Zaradi periodičnosti lahko hitro naredimo oceno: V tem poročilu bom naredil analizo potrebnega  $N$  za želeno natančnost za  $x$  ki so velikostnega reda  $a$ . Če nas  $x$ , ki je veliko večji od  $a$  moramo enostavno paziti, da število elektrod  $2N$  zunaj območja, ki nas zanima ni manjše od števila vseh elektrod, ko imamo opravka z  $x$ , ki je velikostnega reda  $a$ , saj bolj oddaljene elektrode nimajo tako velikega vpliva.

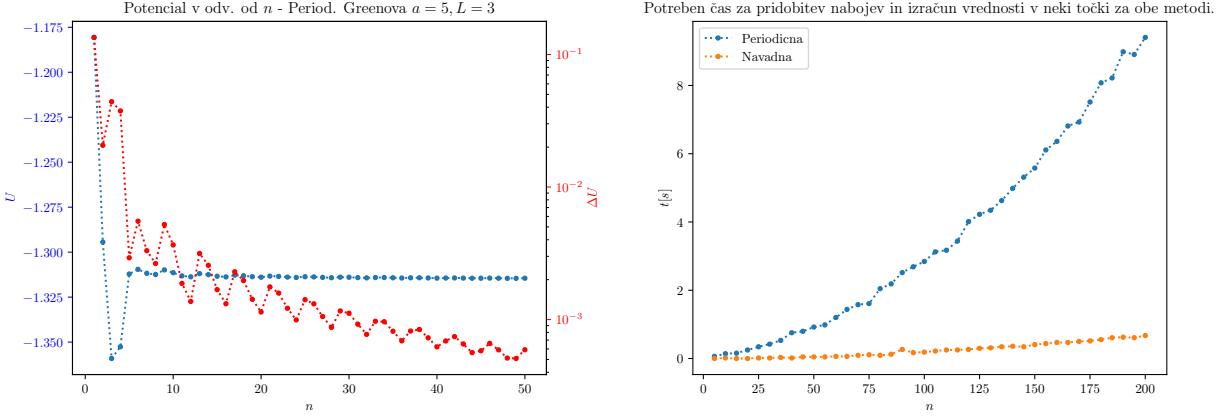
V zgornjem primeru sem opazil, da je odvisnost od  $n$  zelo šibka, kar je pravzaprav smiselno, saj smo v tem primeru fizikalno imeli samo eno elektrodo v  $x$  smeri in ni bilo treba podrobno opisati lastnosti elektrode z več plaketami. Za analizo odvisnosti od  $n$  se bom torej vrnil k primeru alternirajočih elektrod (električno nevtralen sistem) z  $a = 5, L = 3$ .

Računal bom vsoto potencialov v točkah  $(\pi, e), (\sqrt{2}, -\pi), (\sqrt{3}, 0)$  in jo primerjal z neko referenco pri visokih  $n = 20, N = 100$ . Z vsoto po takih "grdih" točkah bom kar se da izboljšal robustnost mere učinkovitosti metode, saj bo majhna napaka v tej meri pomenila zelo dobro ujemanje na več različnih točkah.



Gledal sem odvisnost napake v odvisnosti od  $N$  in  $n$  kot je opisano zgoraj. Vidimo, da sta optimalen  $N$  in  $n$  v zelo dobrem pribilžku kar neodvisna. V obeh primerih pa ni kakega počasnega manjšanja napake ampak ta pada na neko konstantno vrednost kar sunkovito. Relativna napaka v vijolično obarvanih območjih je že izjemno majhna, saj je vrednost reference tu okoli 1.3. Na desni je približan zanimivejši del levega grafa, opazimo, da je pri  $n = 2$  zaradi nekega razloga napaka veliko manjša kot pri  $n = 3, 4$ . V raziskovanje tegale se ne bom spuščal, moji  $n$ -ji bodo zaradi zanesljivosti tako ali tako večji.

Dovolj dober  $n$  za zelo veliko natančnost torej v tem primeru dobimo že pri  $n = 5$ . Za splošne elektrode, bi bilo treba analizo ponoviti, zgornji graf pa da idejo, kako to narediti čim hitreje: Odvisnost napake od  $n$  je skorajda neodvisna od  $N$  (nad nekim majhnim  $N$ ). Za izbiro  $n$ -ja torej ni treba it do velikih  $N$ -jev ampak lahko napake gledamo tudi pri manjših.  $N$  je lahko tudi manjši od tistega "optimalnega za 0.1% rel. napake" od prej, kjer smo rekli, da mora bit dolžina elektrode 30 kratnik ipsilon, ki nas zanima. V tem primeru nas zanima  $y$ , ki je manjši od 3, kar ustreza  $N \approx 9$ , mi pa na vijolično barvo pridemo že pri  $N = 4$ .



Na levi vidimo potencial na istih točkah kot prej in relativno napako na referenco  $n = 200$  v odvisnosti od  $n$  še za primer periodične Greenove funkcije. Na približno pravo rešitev tu pridemo že pri  $n = 10$  napaka pa potem z  $n$  še pada. Na desni vidimo primerjavo časovne zahtevnosti metod z obema Greenovima funkcijama, kjer gre zmeraj za eno elektrodo z  $n$  plaketami. Prikazan je čas za pridobitev vseh nabojev in aditivne konstante in potem izračuna vrednosti potenciala v neki točki. Čeprav rabimo z navadno Greenovo funkcijo veliko večji  $n$  za dobro natančnost (ker moramo na roke opisati več elektrod), je metoda toliko hitrejša, da se jo splača uporabiti, če elektrode nimajo preveč zapletenih oblik, oziroma če nas ne zanima obnašanje pri večjih  $y$ . Razlog za tako razliko v času je ta, da pri navadni Greenovi potencial plakete hitro izračunamo z zgoraj podano analitično formulo, medtem ko moramo pri periodični vsakič znova numerično integrirati.

V nadaljevanju bom obdeloval kompleksnejše elektrode in bom zato uporabil periodično greenovo funkcijo (Čeprav bi pri kakih primerih bila navadna Greenova lahko boljša izbira). Zanimala me bo le groba oblika potenciala in zato ne bom potreboval zelo velikih  $n$  za izjemno natančnost.

## 5 Ostale oblike elektrod

Za konec bom prikazal še profile potenciala ter smeri električnega polja za več različnih oblik periodično razporejenih elektrod. Če imamo opravka z plaketami, ki niso horizontalne, ampak pod kotom pridemo do težave. Če transformiramo koordinatni sistem v koordinatni sistem plakete (kar v tem primeru vključuje tudi rotacijo koordinatnega sistema), se Greenova funkcija v integrandu spremeni, saj periodična Greenova funkcija nima rotacijske simetrije.

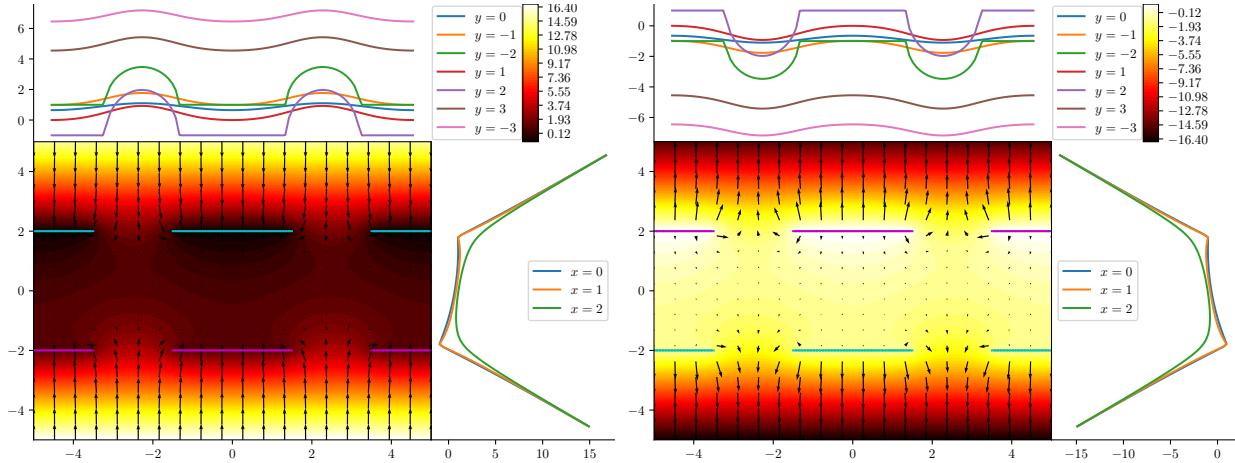
Krivuljni integral po neki plaketi bom torej izračunal kar bo definiciji:

$$\int_{l_i} G(x - x_0, y - y_0) ds = \int_0^1 G(x - x_0(s), y - y_0(s)) |r'(s)| ds, \quad (36)$$

kjer je  $r(s) = (x_0(s), y_0(s))$  parametrizacija plakete.  $s$  pa gre med 0 in 1. Ker je plaketa daljica, katerega levi  $(x_L, y_L)$  in desni  $(x_R, y_R)$  krajišča sta znani, je primerna parametrizacija preprosto

$$r(s) = (x(s), y(s)) = ((1-s)x_L + sx_R, (1-s)y_L + sy_R), \quad (37)$$

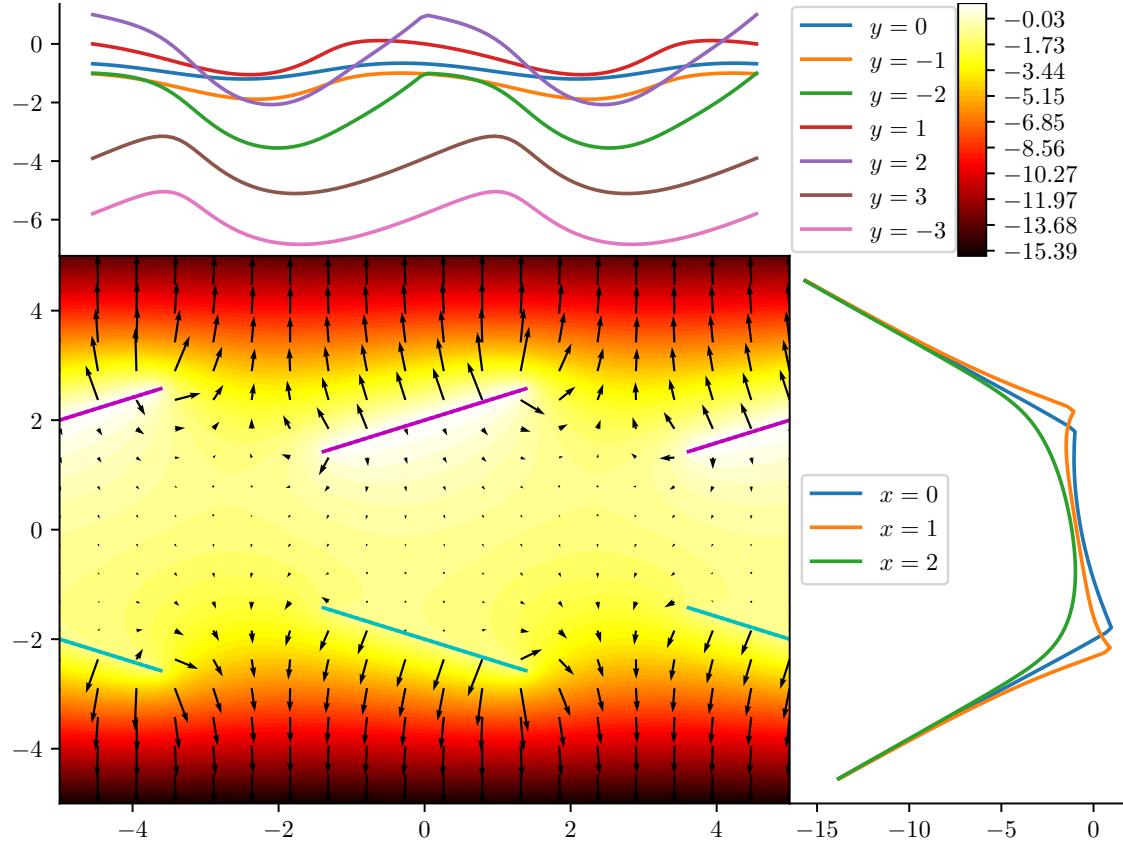
od koder sledi  $r'(s) = (x_R - x_L, y_R - y_L)$ . Integrator ima v tem primeru spet težave v točkah, kjer Greenova funkcija divergira. Tokrat je integrand bolj zapleten in ga ne moremo preprosto zamenjati z njegovo limito v problematičnih točkah. Take integrale moramo ponavadi nadomestiti z njihovimi Cauchyjevimi glavnimi vrednostmi [3], torej interval razdeliti na dva dela  $[0, 0.5 - \epsilon]$  in  $[0.5 + \epsilon, 1]$ , da se singularnosti (ki se pojavi na sredini plakete - sredini intervala) izognemo in narediti limito  $\epsilon \rightarrow 0$ . Opazil sem, da v našem primeru del intervala zelo blizu singularnosti k vrednosti integrala tako ali tako ne doprinese veliko in zato v algoritmu postopam tako, da če je argument logaritma v integrandu manjši od  $10^{-6}$ , ta argument zamenjam kar z  $10^{-6}$  in se znebim singularnosti.



Periodična razporeditev negativno in pozitivno ( $U = \pm 1$ ) nabitih elektrod. Na vsakem grafu je levo spodaj contourni profil potenciala, ob njem pa horizontalni/vertikalni profili pri več točkah  $x/y$ . Z vijoločno je označena elektroda z napetostjo 1, z modro pa  $-1$ . Na desnem grafu sta elektrodi zamenjani, vendar potencial ni zgolj zrcalna slika prejšnjega (spremeni predznak), ker je ničla potenciala v obeh primerih fiksna pri  $(x, y) = (0, 1)$ . Uporabljen je bilo  $n = 30$  plaket na elektrodo.

Na priloženi animaciji priblizevanje.mp4 lahko opazujemo približevanje spodnje elektrode (nabita pri  $U = 1$ ) zgornji. Pri tem se potencial močno spremeni, ko spodnja elektroda prečka  $x$  os: Vrednost potenciala se močno spremeni (postane zelo negativen), območje z največjim potencialom pa se premakne v območje

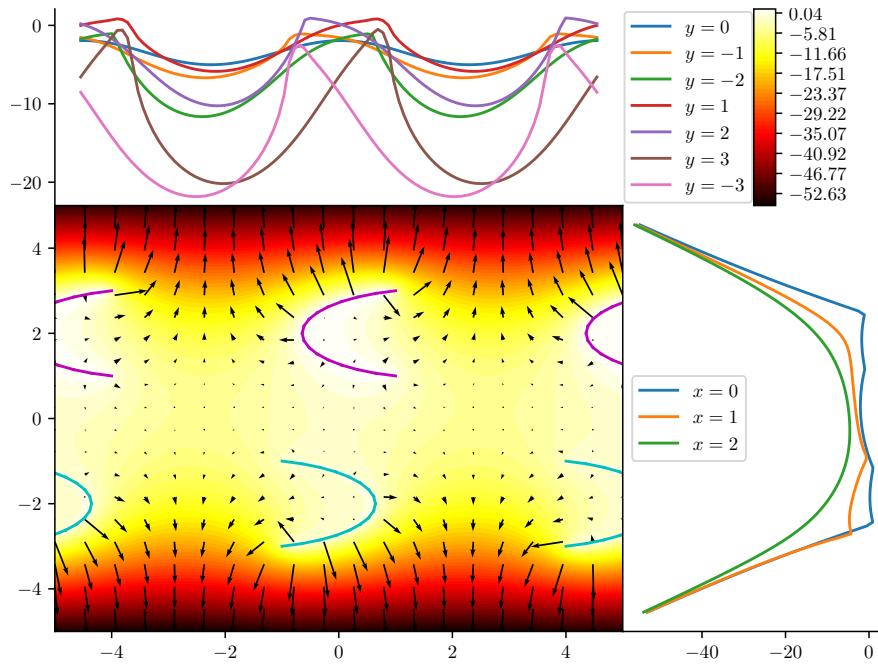
med elektrodama. Na animaciji priblizevanje2.mp4 sem podrobneje prikazal ta prehod in lahko vidimo da, čeprav se potencial spremeni zelo hitro, je ta sprememba še vedno zvezna.



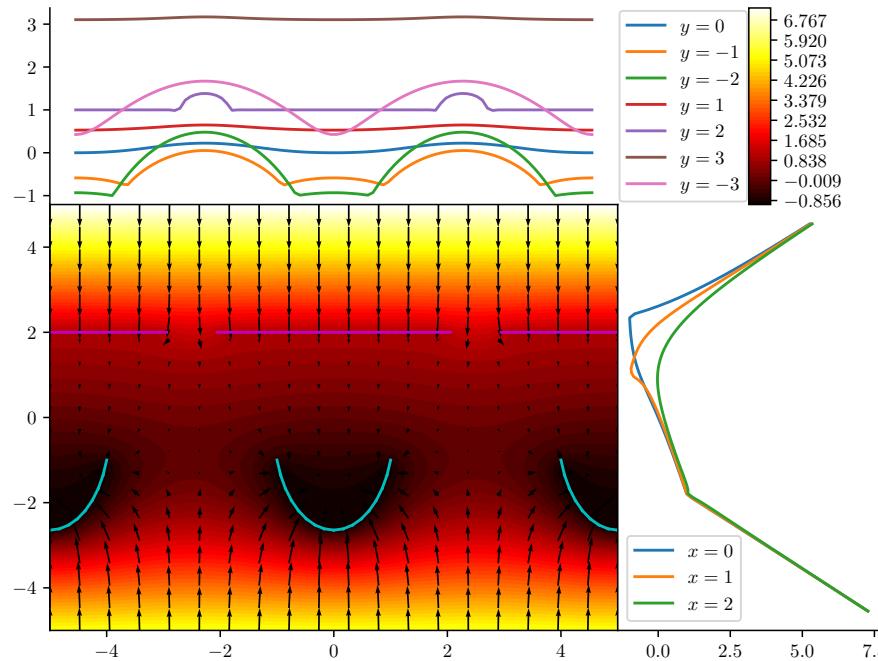
Elektrode z dolžino  $L = 3$  pod kotom  $\pi/8$  razmagnjene za  $a = 5$ . Elektrodo sem razdelil na  $n = 10$  plaket. Ničla potenciala je pri  $(x, y) = (0, 1)$

Spreminjanje profila potenciala v odvisnosti od kota elektrod se lepo vidi v priloženih animacijah rotiranje.mp4 in rotiranje2.mp4, kjer sem prav tako uporabil  $n = 10$  plaket ter  $L = 3, a = 5$ .

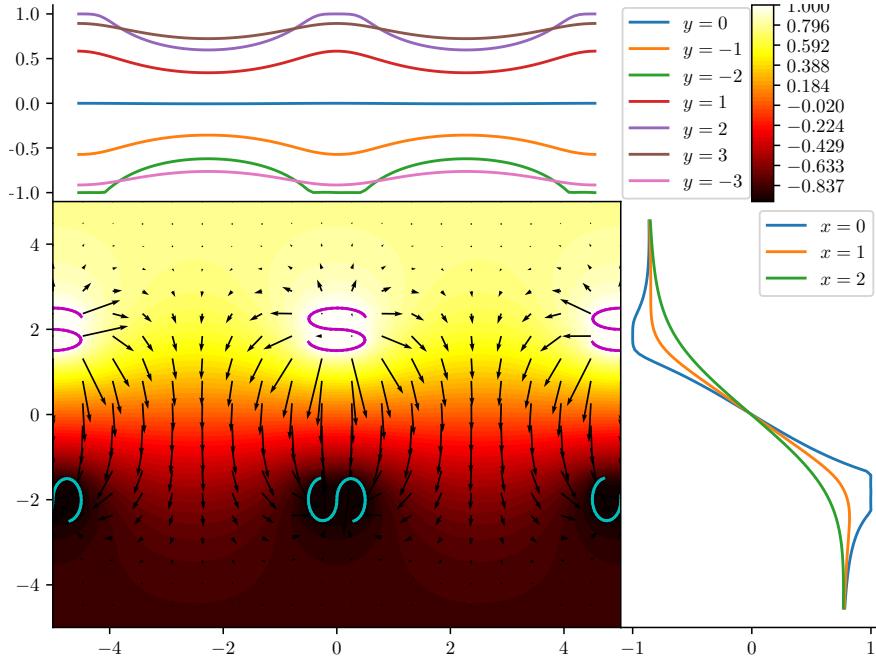
Za lažjo generacijo zanimivejših oblik elektrod bom postopal takole. V programu za vektorsko risanje Inkscape preprosteje narišem komplikiran lik, ki bo predstavljal elektrodo. V Inkscapu lahko ta lik pretvorim v tako imenovan "path", kar pomeni, da lik razdelim na preprostejše segmente - krivulje. V programu je možno spremeniti število segmentov, ki opisujejo lika. Torej lahko dobim poljubno fino delitev na segmente, kar izboljša natančnost metode, saj je število segmentov tu analogno številu plaket  $n$ . Popolno analogijo s plaketami dobimo, če uporabimo funkcijo, ki vse segmente izravna (torej niso več splošne krivulje ampak premice). Sliko shramim v svg formatu, ki ga lahko Python bere s pomočjo knjižnice xml.dom, ki sliko predstavi v xml formatu, kjer so vsi segmenti/plakete predstavljeni z koordinatama krajišč. Tako lahko z Inkscapeom enostavno dobim plakete, ki opisujejo želen lik.



Tokrat imajo elektrode oblike črke C kot vidimo na sliki. Vsako opišemo z  $n = 16$  plaketami. Pri takih elektrodah potencial z  $y$  zunaj območja elektrod zelo močno pada. Ničla potenciala je pri  $(x, y) = (0, 0)$

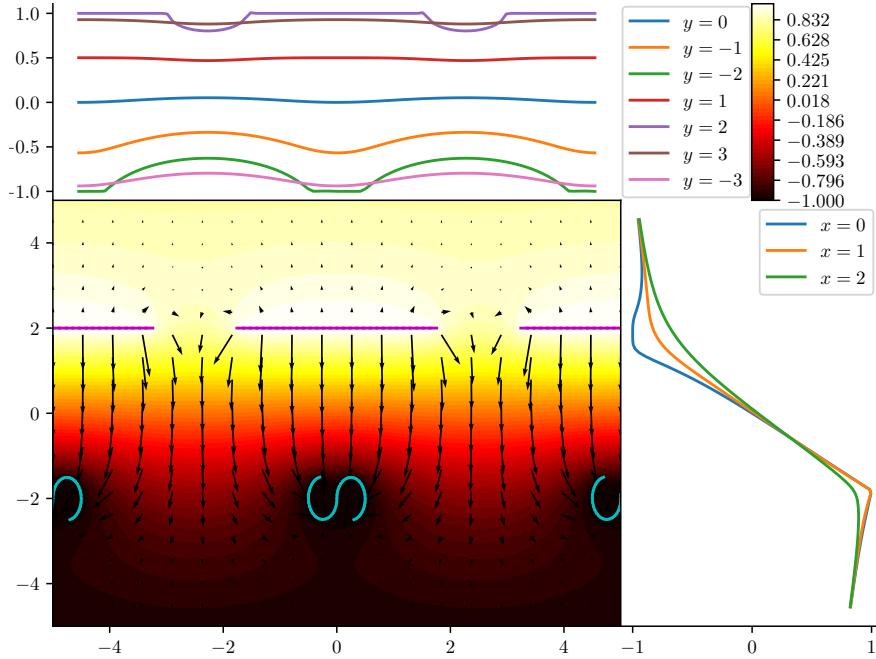


Še kombinacija ravne in C-jaste elektrode (obe sta pravzaprav enako dolgi). Numerična vrednost potenciala tokrat ni tako velika na tem območju. Ničla potenciala je pri  $(x, y) = (0, 0)$ .

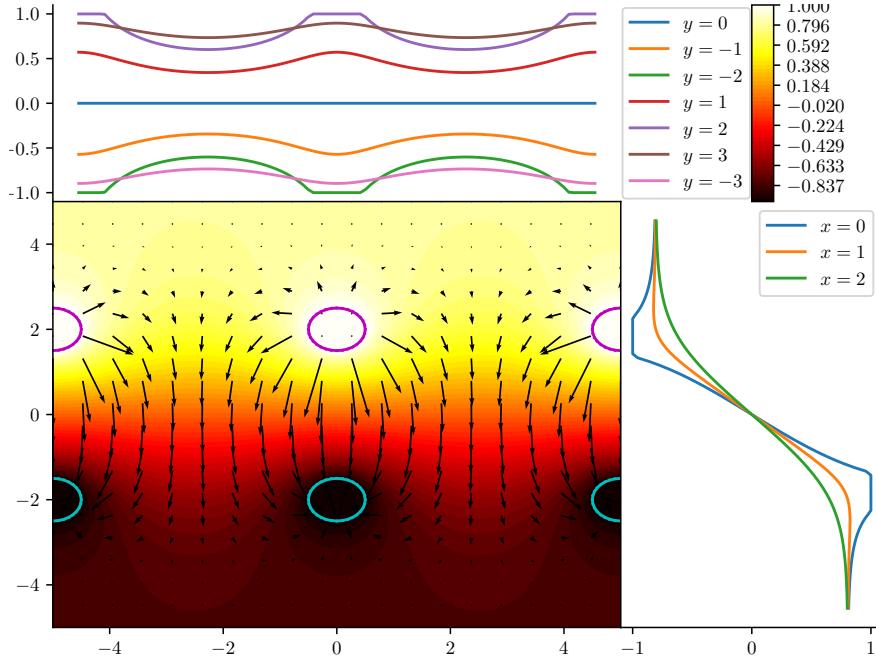


Še primer, ko imajo elektrode obliko črke S. Za vsako sem porabil  $n = 48$  plaket, ničla potenciala pa je pri  $(x, y) = (0, 0)$ . V tem primeru je zanimivo, kako potencial ni veliko večji od vrednosti na elektordah  $\pm 1$ , električno polje pa je najmočnejše med elektrodama. Čisto nasprotje od kakršnih prejšnjih primerov.

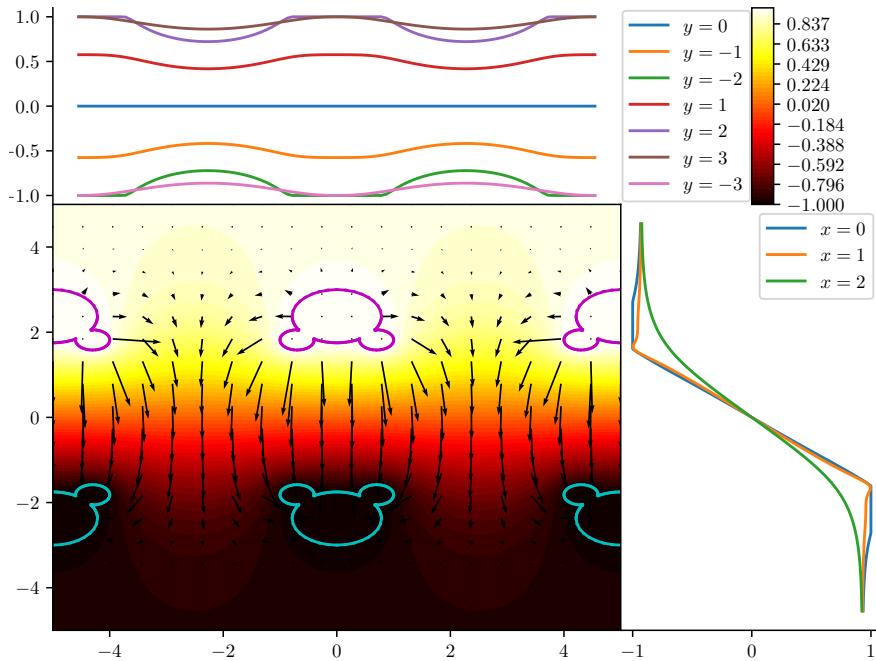
Na animaciji skaliranje.mp4 sem postopoma povečeval velikost obeh elektrod. Pri manjših elektordah imamo nekaj časa zgornje obnašanje (potencial ne odstopa veliko od vrednosti napetosti na elektordah), pozneje pa začne vrednost potenciala z velikostjo elektrod zelo hitro naraščati.



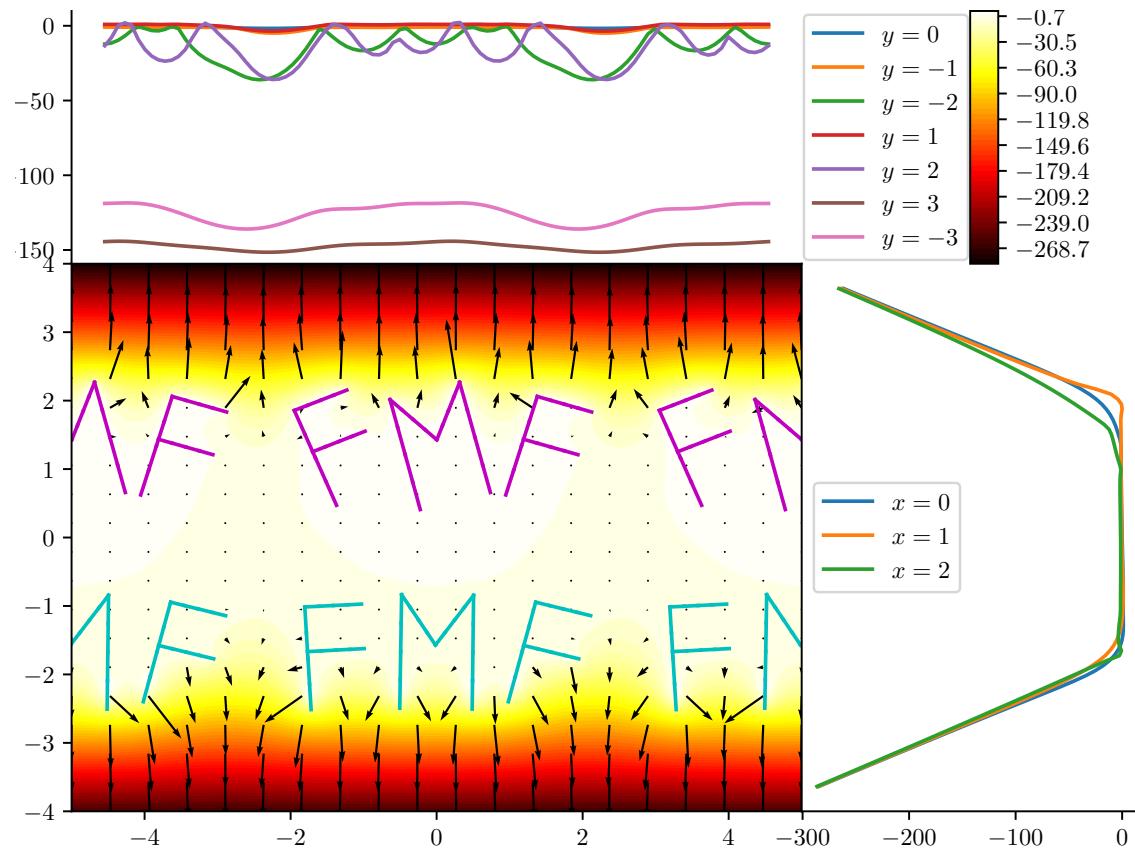
Podoben primer le, da je zdaj ena izmed elektrod izravnana. Obnašanje je zelo podobno, razen tega, da se potenciali in polja pač prilegajo novi obliki.



Zaprte elektrode v obliki kroga. Uporabljenih je 32 plaket na elektrodo, ničla potenciala je pri  $(x, y) = (0, 0)$ . Spet opazimo, da potencial ni večji od  $U = \pm 1$ , znotraj kroga pa je potencial praktično konstanten in enak napetosti na elektrodi (krogu). Potencial je pri  $y = 0$  čisto konstantno neodvisen od  $x$  in enak 0.



Še elektrode v obliki "Mikija miške". Št. plaket na elektrodo je 128. Obnašanje je dokaj podobno okroglim elektrodam, le da tokrat potencial ni čisto konstanten znotraj "Mikija".



Elektrode, ki tvorijo kratico "FMF", ki so hkrati še malce naključno nagnjene.

## 6 Reference

- [1] N. David Mermin Neil W.(Neil W. Ashcroft) Ashcroft. Solid State Physics. Brooks Cole, 1 edition, 1976.
- [2] Wikipedia contributors. Fourier transform — Wikipedia, the free encyclopedia, 2019. [Online; accessed 2-December-2019].
- [3] Ang Whye-Teong. *A Beginner's Course in Boundary Element Methods*.