

Momentenmethode im Simulationsverfahren

Lucas Böttcher

1. April 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Methode nach Harrington	1
1.1	Grundlegende mathematische Begriffe	1
1.2	Momentenmethode	1
1.3	Segmentabgleich	4
1.4	Segmentierte Basen	5
2	Elektrostatische Simulation	8

1 Methode nach Harrington

Zu aller erst folgt eine Beschreibung der verwendeten Methode aus Harringtons *Field Computation by Moment Methods*.

1.1 Grundlegende mathematische Begriffe

Zur Grundlage der nachfolgenden Simulationen geht man von einer Anregungsfunktion g aus, welche für spezifische Änderungen in der Feldfunktion *sorgt*. Die Änderung wird durch einen linearen Operator T beschrieben.

$$T(f) = g \tag{1}$$

Eine geschickte Beschreibung der Operatoren, Anregungs- und Feldfunktionen soll genutzt werden, um die Fragestellungen als Matrizen aufzufassen und diese entsprechend nach bekannten Algorithmen zu lösen. Um die und Anregungs- bzw. Feldfunktion zu wichten, wird ein Skalarprodukt¹ definiert:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)dx \tag{2}$$

Welche Möglichkeiten hat man nun einen inversen Operator T^{-1} zu finden? Es sei an dieser Stelle auf die Ausarbeitung zu Fourierreihen- und transformationen verwiesen. Über die Greensche Funktion ($G(x, x')$) lässt sich ein Inverses finden:

$$f = T^{-1}g = \int_a^b G(x, x')g(x')dx' \tag{3}$$

1.2 Momentenmethode

Diese grundlegende Methode geht wiederum von der inhomogenen Differentialgleichung zur Beschreibung der zu betrachtenden Phänomene aus:

$$T(f) = g \tag{4}$$

¹vergleichbar mit einem Skalarprodukt auf dem L^p - Banach- bzw. Hilbertraumskalarprodukt. Der Operator T ist selbstadjungiert wenn für: $\langle Tf, g \rangle = \langle f, T^*g \rangle$, gilt: $T = T^*$.

Man entwickelt nun die Feldfunktion in eine Reihe, mit den Basiselementen $(f_i)_{i \in \mathbb{N}}$ und den Koeffizienten $(\alpha_i)_{i \in \mathbb{N}}$ im Definitionsbereich des linearen Operators T :

$$f = \sum_i \alpha_i f_i \quad (5)$$

Die Reihenentwicklung kann natürlich für näherungsweise Darstellungen, für den Summationsindex auch: $i \subset \mathbb{N}$ gelten. Mit dem linearen Operator T schreibt man:

$$g = \sum_i \alpha_i T(f_i) \quad (6)$$

Nun definiert man eine Menge an Wichtungsfunktionen $(w_j)_{j \in \mathbb{N}}$ zu dem definierten Skalarprodukt, um die betrachteten Funktionen anteilig zu projizieren.

$$\langle w_j, g \rangle = \sum_i \alpha_i \langle w_j, T f_i \rangle \quad (7)$$

Mit der Menge $(w_j)_{j \in \mathbb{N}}$ lässt sich in Matrixschreibweise formulieren:

$$[g_i] = [t_{ji}][\alpha_i] \quad (8)$$

wobei die Matrizen wie folgt dargestellt werden können:

$$[t_{ji}] = \begin{pmatrix} \langle w_1, T f_1 \rangle & \cdots & \langle w_1, T f_i \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle w_3, T f_1 \rangle & \cdots & \langle w_j, T f_i \rangle \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$[a_i] = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_i \end{pmatrix} [g_i] = \begin{pmatrix} \langle w_1, g \rangle \\ \langle w_2, g \rangle \\ \vdots \\ \langle w_i, g \rangle \end{pmatrix} \quad (10)$$

Ist die Matrix $[t_{ji}]$ invertierbar, kann man für die Koeffizienten $(\alpha_i)_{i \in \mathbb{N}}$ schreiben:

$$[\alpha_i] = [t_{ji}^{-1}][g_i] \quad (11)$$

Ebenfalls lässt sich die Feldfunktion f in Matrixschreibweise darstellen:

$$[\tilde{f}_i] = (f_1 \quad f_2 \quad \cdots \quad f_i) \quad (12)$$

Mit dieser Darstellung findet man für f folgenden Zusammenhang:

$$f = [\tilde{f}_i][\alpha_i] = [\tilde{f}_i][t_{ji}^{-1}][g_i] \quad (13)$$

Je nach Wahl der Intervalle und der Wichtungsfunktionen erhält man eine gute Approximation der Feldfunktion. Wählt man die Wichtungsfunktionen w_n identisch den Basiselementen der Feldfunktion f_n , nennt man dies die *Galerkin Methode*.

Beispiel 1 (Momentenmethode am Polynom). *Vorgegeben sei ein Polynom $g(x) = (x - 2)^2$ und der Operator $T := \frac{d^2}{dx^2} = \Delta$. Es soll für eine Funktion f mit der Randbedingung $f(0) = f(1) = 0$ gelten:*

$$\Delta f = (x - 2)^2 \quad (14)$$

Diese Differentialgleichung hat die Lösung:

$$f(x) = \frac{1}{12}(x^4 - 8x^3 + 24x^2 - 17x) \quad (15)$$

Natürlich ergibt sich diese Lösung trivial. Trotzdem soll die Momentenmethode an diesem Beispiel veranschaulicht werden. Man wähle für die Basisfunktionen $(f_i)_{i \in \mathbb{N}}$ (sollten Randbedingungen erfüllen):

$$f_i = x^{i+1} - x \quad (16)$$

, sodass sich die Reihendarstellung

$$f = \sum_{i=1}^n \alpha_i (x^{i+1} - x) \quad (17)$$

ergibt. Die Potenz lautet $i + 1$, da sonst die Lösungsmatrix singulär wird. Man geht für dieses Beispiel nach der Methode nach Galerkin vor, wählt damit $w_i = f_i$. Diese Wichtungsfunktionen liegen ebenso wie die Feldbasisfunktionen im Definitionsbereich des Operators. Mit dem definierten Skalarprodukt (Grenzen gemäß der Randbedingung) berechnet man:

$$t_{ji} = \langle w_j, T f_i \rangle = \int_0^1 w_j \frac{d^2 f_i}{dx^2} dx = -\frac{ij}{1 + i + j} \quad (18)$$

$$g_j = \langle w_j, g \rangle = \int_0^1 w_j \frac{d^2 g}{dx^2} dx = \frac{1}{4 + j} - \frac{4}{3 + j} + \frac{4}{2 + j} - \frac{11}{12} \quad (19)$$

Gemäß $[g_j] = [t_{ji}][\alpha_i]$ soll nun das Näherungsverhalten für $n > 1$ untersucht werden. Für $n=1$ ergibt sich für $t_{11} = -1/3$ für $g_1 = -23/60$ und damit für $\alpha_1 = 23/20$.

Für $n=2$:

$$\begin{pmatrix} -1/3 & -1/2 \\ -1/2 & -4/5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -23/60 \\ -11/20 \end{pmatrix} \quad (20)$$

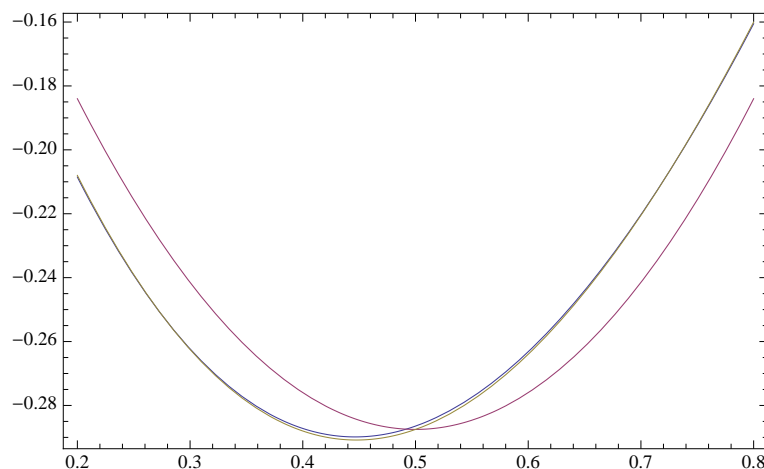


Abbildung 1: Momentenapproximation für $\Delta f = (x - 2)^2$; Darstellungen violett ($n=1$), gelb ($n=2$), blau exakte Lösung

Die invertierte Matrix liefert für die Koeffizienten:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 19/10 \\ -1/2 \end{pmatrix} \quad (21)$$

Für $n=3$:

$$\begin{pmatrix} -1/3 & -1/2 & -3/5 \\ -1/2 & -4/5 & -1 \\ -3/5 & -1 & -9/7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -23/60 \\ -11/20 \\ -269/420 \end{pmatrix} \quad (22)$$

Wiederum erhält man über das Inverse:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2/3 \\ 1/12 \end{pmatrix} \quad (23)$$

Für $n=3$ erhält man mit der Momentenmethode die exakte Lösung. Entscheidend ist die richtige Basenwahl, passend zu den Randbedingungen.

1.3 Segmentabgleich

Die Momentenmethode beinhaltet das Berechnen von $[t_{ji}] = \langle w_j, T f_i \rangle$. Es ist vorstellbar, dass die Integration bei speziellen Fragestellungen zu Problemen

führen kann. Deshalb soll eine erste Diskussion, was in solchen Fällen ratsam ist hier erfolgen. Statt eine kontinuierliche Untersuchung vorzunehmen, kann man beispielsweise über diskrete Punkte integrieren. Man verwendet also Delta-Distributionen δ .

Beispiel 2 (Segmentableich am Polynom). *Man wählt für das Polynom $g(x) = (x - 2)^2$ und den definierten Operator $T := \Delta$ aus Beispiel 1 nun diskrete Punkte über die integriert wird:*

$$x_j = \frac{j}{n+1} \quad (24)$$

, wobei $N \in \mathbb{N}$ und $0 \leq j \leq n+1$. Über die Delta-Distribution führt dies zu folgendem Skalarprodukt:

$$t_{ji} = \langle \delta, \Delta f_i \rangle = \int_0^1 \delta(x - x_j) \Delta f_i(x) dx = i(1+i) \left(\frac{j}{n+1}\right)^{i-1} \quad (25)$$

$$g_j = \langle \delta, g \rangle = \int_0^1 \delta(x - x_j) g(x) dx = \left(\frac{j}{n+1} - 2\right)^2$$

Zu bemerken ist, dass die Notation der Integration etwas umständlich wirkt. Man integriere einfach die Erreger- und Feldfunktion und definiere danach die diskreten Punkte so, dass die Grenzen eingehalten werden. Für $n = 1$ erhält man für $t_{11} = 2$ und $g_1 = 9/4$ und damit für $\alpha_1 = 9/8$.

Für $N=2$:

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9/4 \\ 16/9 \end{pmatrix} \quad (26)$$

Man erhält analog zum vorherigen Beispiel für die Koeffizienten:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 49/36 \\ -17/72 \end{pmatrix} \quad (27)$$

Wieder kann man das Konvergenzverhalten beobachten. Für $N=3$ erreichte man wieder die exakte Lösung.

1.4 Segmentierte Basen

Neben dem Segmentableich kann man auch die verwendeten Basisfunktionen nur über bestimmte Intervalle definieren. Auch das kann bei komplexen Problemen helfen. Es ist auch denkbar beide Methoden mit einander zu kombinieren. Beispielsweise könnte man von einer Stufenfunktion ausgehen:

$$s(x) = \begin{cases} 1, & |x| < \frac{1}{n+1} \\ 0, & |x| > \frac{1}{n+1} \end{cases} \quad (28)$$

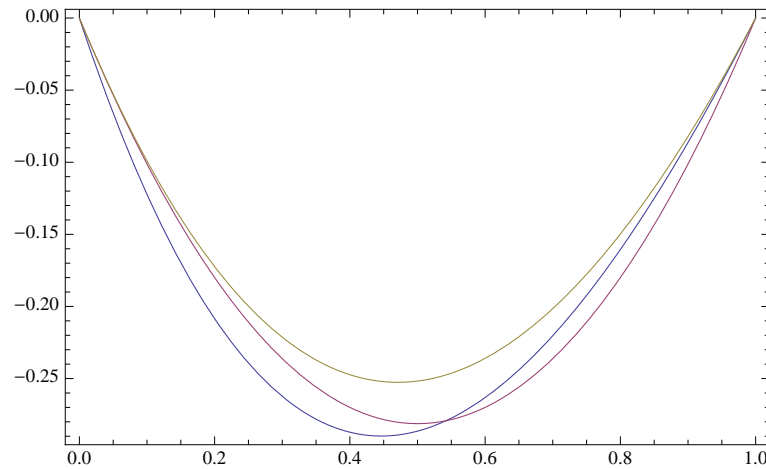


Abbildung 2: Segmentweise Approximation für $\Delta f = (x - 2)^2$; Darstellungen violett ($N=1$), gelb ($N=2$), blau exakte Lösung

Für das besprochene Beispiel folgt, dass $s(x)$ nicht im Definitionsbereich des Operators liegt. Deshalb verwendet man periodische Dreieckspulse:

$$tri(x) = \begin{cases} 1 - |x|(n + 1), & |x| < \frac{1}{2(n+1)} \\ 0, & |x| > \frac{1}{2(n+1)} \end{cases} \quad (29)$$

Beispiel 3 (Segmentableich und segmentierte Basen am Polynom). *Ausgehend von den definierten Segmenten x_j aus dem vorherigen Beispiel lässt sich die Feldfunktion schreiben als:*

$$f = \sum_{i=1}^n \alpha_i t(x - x_j) \quad (30)$$

Über die Entwicklung in eine Fourierreihe folgt für den angewandten Operator:

$$\Delta tri(x - x_j) = (n + 1)[- \delta(x - x_{j-1}) + 2\delta(x - x_j) - \delta(x - x_{j+1})] \quad (31)$$

Man wählt als Feldbasen f_i die Dreieckspulse $t(x)$ und für die Wichtungsfunk-

tionen die Stufenfunktionen $s(x)$ ergeben sich für die Skalarprodukte:

$$\begin{aligned}
 t_{ji} = \langle s, \Delta tri_i \rangle &= \int_0^1 s(x - x_i) \Delta tri(x - x_i) dx = \begin{cases} 2(n+1), i = j \\ -(n+1), |i - j| = 1 \\ 0, |i - j| > 1 \end{cases} \\
 g_j = \langle s, g \rangle &= \int_0^1 s(x - x_i) g(x) dx \\
 &= \frac{((1 - j + N)(j^2 - 5j(1 + N) + 7(1 + N)^2) + j(j^2 - 6j(1 + N) + 12(1 + N)^2))}{3(1 + N)^3}
 \end{aligned} \tag{32}$$

Analog zu den berechneten Beispielen kann man nun auch noch hier verschiedene Approximationsstufen untersuchen.

2 Elektrostatistische Simulation

Beispiel 4 (Dünne Platte). *Man betrachte eine Platte vernachlässigbarer Dicke (z -Richtung) und einer x, y -Ausdehnung von $2a$, deren Zentrum sich im Ursprung eines kartesischen Koordinatensystems befindet. Die Ladungsflächen-dichte $\sigma(x, y)$ führt zum abgeleiteten Potenzial:*

$$\phi(x, y, z) = \int_{-a}^a \int_{-a}^a \frac{\sigma(x', y')}{4\pi\epsilon R} dx' dy' \quad (33)$$

Die gesamte Platte befindet sich auf dem gleichen Potenzial $\phi = V$, womit gilt:

$$V = \int_{-a}^a \int_{-a}^a \frac{\sigma(x', y')}{4\pi\epsilon R} dx' dy' \quad (34)$$

Für den Abstand R gilt: $R = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + z^2}$. Ebenso ist die Kapazität der Platte von Interesse:

$$C = \frac{q}{V} = \frac{1}{V} \int_{-a}^a \int_{-a}^a \sigma(x', y') dx' dy' \quad (35)$$

Die Platte wird nun in N quadratische Segmente unterteilt. Die Funktion

$$f_i = \begin{cases} 1, & \Delta s_i \\ 0, & \Delta s_{j \neq i} \end{cases} \quad (36)$$

führt für die Ladungsdichte zur näherungsweise Darstellung:

$$\sigma(x, y) \approx \sum_{i=1}^n \alpha_i f_i \quad (37)$$

Damit erhält man für das definierte Potenzial:

$$V = \sum_{i=1}^n I_{ji} \alpha_i \quad (38)$$

mit $j \in \mathbb{N}$ und:

$$I_{ji} = \int_{\Delta x_i} \int_{\Delta y_i} \frac{1}{4\pi\epsilon \sqrt{(x_j - x')^2 + (y_j - y')^2}} dx' dy' \quad (39)$$

Damit lässt sich näherungsweise auch für die Kapazität schreiben:

$$C \approx \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \alpha_n \Delta s_i = \sum_{ji} I_{ji}^{-1} \Delta s_i \quad (40)$$

Diese ersten Ergebnisse sollen jetzt mit geeigneten mathematischen Mitteln weiter verarbeitet werden, um die geforderten Resultate zu berechnen. Man definiert die zu betrachtende Funktion: $f(x, y) = \sigma(x, y)$ und das Potenzial $V = g(x, y)$ für $|x| < a, |y| < a$. Das betrachtete Funktional erhält man durch:

$$I(f) = \int_{-a}^a \int_{-a}^a \frac{f(x', y')}{4\pi\epsilon \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}} dx' dy' \quad (41)$$

Die Testfunktionen erhält man über die Delta-Distributionen:

$$w_m = \delta(x - x_j) \delta(y - y_j) \quad (42)$$

Man betrachtet mit dem definierten Funktional die Kapazität mit dem Skalarprodukt:

$$C = \frac{\langle \sigma, \phi \rangle}{V^2} \quad (43)$$

Man kann nun für die I_{ji} nun schreiben:

$$I_{ji} = \int_{-b}^b \int_{-b}^b \frac{1}{4\pi\epsilon \sqrt{x^2 + y^2}} dx dy \quad (44)$$

$$I_{mn} \approx \frac{\Delta s_n}{4\pi\epsilon R_{mn}} = \frac{b^2}{\pi\epsilon \sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}} \quad (45)$$

Damit erhält man die geforderten Ergebnisse.