

AGH UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

WYDZIAŁ FIZYKI I INFORMATYKI STOSOWANEJ
KIERUNEK STUDIÓW: FIZYKA TECHNICZNA



METODY MONTE CARLO

Laboratorium 9

Rozwiązanie równania Poissona na siatce metodą błędzenia przypadkowego

zrealizował
Przemysław Ryś

Kraków, 6 Maj 2024

1 Opis zagadnienia

Naszym celem jest znalezienie rozwiązania równania Poissona opisującego rozkład potencjału elektrycznego $\rho(\mathbf{r})$ na kwadratowej siatce 2D. Równanie to ma postać:

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon}, \quad (1)$$

gdzie ϵ jest stałą dielektryczną.

Metody rozwiązania

1.1 Metoda relaksacji

Metoda relaksacji polega na dyskretyzacji równania różniczkowego oraz iteracyjnym poprawianiu wartości potencjału $V(\mathbf{r})$ aż do uzyskania zbieżności. Dyskretna forma równania Poissona w dwóch wymiarach na siatce przedstawia się następująco:

$$V_{i,j}^{\text{new}} = (1 - \omega)V_{i,j} + \frac{\omega}{4}(V_{i+1,j} + V_{i-1,j} + V_{i,j+1} + V_{i,j-1}) + \frac{\Delta^2}{\epsilon}\rho_{i,j}, \quad (2)$$

gdzie ω jest parametrem relaksacji, Δ to odległość między węzłami siatki, a $\rho_{i,j}$ to gęstość ładunku w punkcie (i, j) .

1.2 Metoda Monte Carlo

Metoda Monte Carlo jest wykorzystywana do symulacji losowych błędzeń na siatce. Dla każdego punktu (i_0, j_0) wewnątrz siatki generujemy N łańcuchów Markowa, które próbują dotrzeć do brzegu z warunkiem Dirichleta. Każdy łańcuch, który dotrze do brzegu, jest absorbowany, a jego koniec daje wkład do rozwiązania. Na brzegu z warunkiem Neumanna łańcuch może się odbić lub poruszać wzdłuż brzegu z odpowiednimi prawdopodobieństwami.

1.3 Parametry

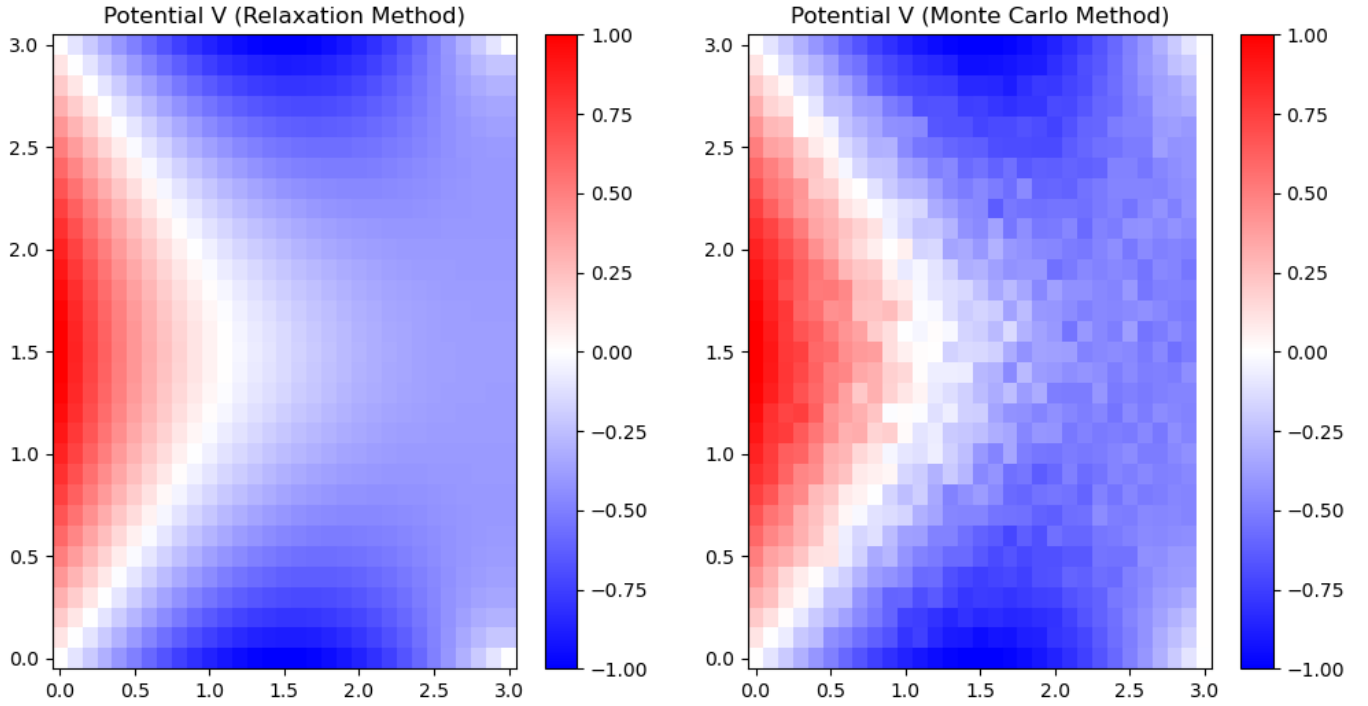
Przyjmujemy następujące wartości parametrów:

- $nx = ny = 30$
- $\Delta = 0.1$
- $V_L = 1, V_T = V_B = -1$
- $\epsilon = 1$
- $x_{max} = \Delta \cdot nx, y_{max} = \Delta \cdot ny$
- $\rho_{max} = 1$
- $\sigma_\rho = \frac{x_{max}}{10}$

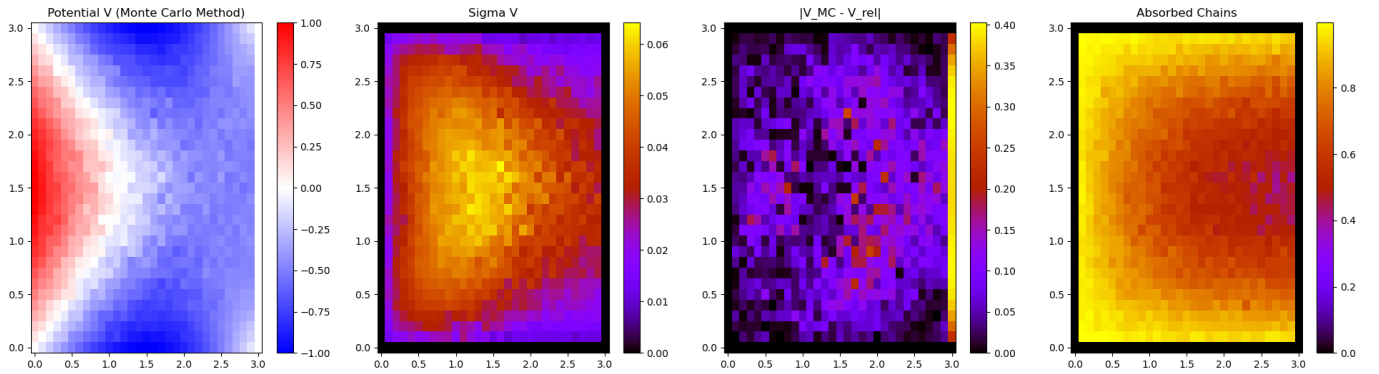
W symulacji wykorzystujemy również poniższe zestawy parametrów:

- $N_{\text{chains}} = 100, n_{\text{length}} = 100, B_{i_0, j_0} = 0$ (nie blokujemy węzłów z wyznaczonym potencjałem)
- $N_{\text{chains}} = 100, n_{\text{length}} = 100, B_{i_0, j_0} = 1$ (blokujemy węzły po wyznaczeniu w nich potencjału)
- $N_{\text{chains}} = 300, n_{\text{length}} = 300, B_{i_0, j_0} = 1$ (blokujemy węzły po wyznaczeniu w nich potencjału)

2 Wyniki



Rys. 1: Rozkład potencjału dla metody nadrelaksacji oraz Monte Carlo.



Rys. 2: Mapa 2D dla kolejno potencjału V_{MC} , rozkładu odchylenia standardowego potencjału, różnicy potencjałów dla metod MC oraz nadrelaksacji oraz ułamka zaabsorbowanych łańcuchów Markowa.

Porównanie metod

Porównujemy zmiany potencjału V_{MC} uzyskanego metodą Monte Carlo (MC) z potencjałem V_{rel} z metodą relaksacji (rel). Metoda MC, bazująca na losowych błędzeniach, może wykazywać większe fluktuacje w potencjale, szczególnie w obszarach wymagających dokładnych warunków brzegowych.

Błąd i odchylenie standardowe

Błąd $|V_{MC}(x, y) - V_{rel}(x, y)|$ oraz odchylenie standardowe $\sigma_{V_{MC}}(x, y)$ są miarami różnic między wynikami metod MC i rel. Duże różnice mogą wskazywać na obszary, gdzie metoda MC jest mniej precyzyjna.

Wpływ liczby zaabsorbowanych łańcuchów

Obszary z większą liczbą zaabsorbowanych łańcuchów zazwyczaj mają mniejsze odchylenie standardowe $\sigma_{V_{MC}}(x, y)$ oraz mniejszy błąd $|V_{MC}(x, y) - V_{rel}(x, y)|$. Obszary z mniejszą liczbą zaabsorbowanych łańcuchów mogą wykazywać większe odchylenie standardowe i błąd.

Wpływ blokady w węzłach

Blokada w węzłach po wyznaczeniu potencjału może wpływać na dokładność wyniku MC oraz na jego efektywność. Skuteczna strategia blokady jest kluczowa dla poprawy dokładności wyników i optymalizacji czasu obliczeń.

3 Wnioski

Oczywiste jest, że metoda relaksacji oferuje stabilne i dokładne rozwiązania w przypadku dobrze określonych warunków brzegowych. Z drugiej strony, metoda Monte Carlo jest bardziej uniwersalna, ale wymaga większej liczby iteracji w obszarach złożonych warunków brzegowych, co może prowadzić do większych fluktuacji wyników. Wnioski te podkreślają znaczenie odpowiedniego doboru metody w zależności od specyfiki problemu oraz warunków brzegowych.