Równanie Poissona: relaksacja i nadrelaksacja

16 kwietnia 2025

Rozwiązujemy równanie Poissona w 2D

$$\nabla^2 u = -\rho(x, y), \tag{1}$$

gdzie gęstość ładunku $\rho(x, y) = \exp(-\frac{(x-x_0)^2+y^2}{d^2}) - \exp(-\frac{(x+x_0)^2+y^2}{d^2})$, $d = 4$, $x_0 = 4$. Pracujemy na siatce $[-N, \ldots, N] \times [-N, \ldots, N]$ z krokiem $dx = 1$ w obydwu kierunkach. Układ umieszczony jest w metalowym kwadratowym uziemionym pudle, co uwzględniamy wstawiając warunek brzegowy $u(x, y) = 0$ gdy $|x| = N$ lub $|y| = N$. Przyjmujemy $N = 31$.

Z dyskretyzacji równania dostajemy przepis relaksacyjny

$$u(i, j) := \frac{u(i+1, j) + u(i-1, j) + u(i, j+1) + u(i, j-1) + \rho(i, j)dx^2}{4}. \tag{2}$$

Jedna iteracja procedury relaksacji polega na zastosowaniu wzoru (2) dla wszystkich punktów na siatce poza brzegiem.

Zbieżność iterowanej funkcji do rozwiązania równania Poissona można (wykład) śledzić licząc całkę z gęstości lagranżjanu dla układu ładunek-pole

$$S = \int_P \left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 - \rho(i, j)u(i, j)\right] dxdy, \tag{3}$$

Ze względu na to, że operator pochodnej jest antyhermitowski, wyrażenie to można przepisać do formy

$$S = -\int_P \left[\frac{1}{2}\left(u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) + \frac{1}{2}\left(u\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) + \rho(i, j)u(i, j)\right] dxdy, \tag{4}$$

czyli w wersji dyskretnej

$$S = -\sum_{i,j=-N+1}^{N-1} [\frac{1}{2}u(i,j)\frac{u(i+1,j)+u(i-1,j)-2u(i,j)}{dx^2} \tag{5}$$

$$+ \quad \frac{1}{2}u(i,j)\frac{u(i,j+1)+u(i,j-1)-2u(i,j)}{dx^2} \tag{6}$$

$$+ \quad \rho(i,j)u(i,j)]dx^2. \tag{7}$$

Im niższa wartość S tym bliżej jesteśmy dokładnego rozwiązania. Jakość rozwiązania przybliżonego można również ocenić odwracając równanie Poissona. Wstawiamy do równania (1) u jakim dysponujemy i liczymy

$$\rho'(x,y) = -\frac{u(i+1,j)+u(i-1,j)+u(i,j-1)+u(i,j+1)-4u(i,j)}{dx^2}. \tag{8}$$

Można sprawdzić w jakim stopniu ρ' odtwarza ρ.

Zadanie 1 (30 pkt) Liczymy do 500 iteracji pętli relaksacyjnej. Startujemy od $u = 0$.

1.1. Narysować S od numeru iteracji.

1.2. Po setnej i pięćsetnej iteracji narysować u oraz:

1.3. ρ' i $\delta(x,y) = \rho'(x,y) - \rho(x,y)$.

Zadanie 2 (25 pkt)

Modyfikacja wzoru relaksacyjnego

$$u(i,j) := (1-w)u(i,j) + w\frac{u(i+1,j)+u(i-1,j)+u(i,j+1)+u(i,j-1)+\rho(i,j)dx^2}{4}, \tag{9}$$

z $w > 1$ daje przepis na iterację nazywaną nadrelaksacją, która bywa szybciej zbieżna od relaksacji dla $w > 1$. Przyjąć $w = 1.9$ i powtórzyć zadanie 1.1.

Zadanie 3 (15 pkt)

Rozwiązanie równania Poissona można uzyskać również minimalizując bezpośrednio funkcjonał S.

W tym celu, zbudujemy iterację, w której będziemy starać się poprawić wartość $u(i,j)$ w każdym punkcie w pudle poza brzegiem.

Wyznaczymy wartość $S(\delta)$ w zależności od zmiany wartości potencjału w punkcie (i,j) z $u(i,j)$ na $u(i,j)+\delta$. W tym celu policzymy

1. $S_1 = S(\delta_1 = 0)$

2. $S_2 = S(\delta_2 = 0.5)$
3. $S_3 = S(\delta_3 = 1)$

Poprowadzimy parabolę przez te 3 punkty i wyznaczymy δ dla którego parabola ma ekstremum $\delta_4 = \frac{1}{4}\frac{3S_1-4S_2+S_3}{S_1-2S_2+S_3}$. Wyznaczamy $S_4 = S(\delta_4)$. S_4 będzie odpowiadać minimum o ile zależność $S(\delta)$ jest paraboliczna i jesteśmy blisko optimum. Niestety nie zawsze tak jest, zwłaszcza na początku rachunku. Dlatego: (a) Wyznaczamy indeks i_{min} najmniejszego $S(\delta_i)$ dla $i = 1, 2, 3, 4$ i przesuwamy wartość potencjału w punkcie $u(i, j)$ o $\delta_{i_{min}}$.

Do osiągnięcia zbieżności powinno wystarczyć kilkaset iteracji, przy czym w jednej iteracji staramy się poprawić po kolei każdy punkt siatki (tak jak w przepisach relaksacyjnych).

Uwaga: wyliczenie S jest czasochłonne. Gdy zmieniamy potencjał u w jednym punkcie – nie ma potrzeby wyliczania zmiany S w całym pudle, tylko w jego okolicach, w których następuje lokalna zmiana pola elektrycznego. Lokalny przyczynek do funkcjonału od potencjału w punkcie (i', j') możemy zdefiniować jako

$$S_{loc}(u_{i',j'}) = -\sum_{i=i'-1}^{i'+1}\sum_{j=j'-1}^{j'+1}[\frac{1}{2}u(i,j)\frac{u(i+1,j)+u(i-1,j)-2u(i,j)}{dx^2} \tag{10}$$

$$+ \frac{1}{2}u(i,j)\frac{u(i,j+1)+u(i,j-1)-2u(i,j)}{dx^2} \tag{11}$$

$$+ \rho(i,j)u(i,j)]dx^2. \tag{12}$$

Wtedy S przy zmianie wartości $u(i', j')$ o δ można wyznaczyć jako $S(\delta) = S(0) - S_{loc}(u_{i',j'}) + S_{loc}(u_{i',j'} + \delta)$.

Narysować S od numeru iteracji. Porównać tempo zbieżności z zadaniem 1 oraz 2. Warunek początkowy bez zmian.

Zadanie 3 (15 pkt)

Iterację minimalizującą S można również poprowadzić w kierunku spadku S jako funkcji wartości u_{ij}. Jak w zadaniu 2 liczymy wartość S po zmianie wartości potencjału w oczku siatki i, j o plus oraz minus d. Oznaczamy te wartości odpowiednio przez $S_+ = S(\mathbf{u} + d\delta_{ij})$ oraz $S- = S(\mathbf{u} - d\delta_{ij})$. W każdym pudle siatki liczymy gradient działania w zależności $\nabla_{ij}S = \frac{dS}{du_{ij}} \simeq \frac{S_+-S_-}{2d}$. Następnie zmieniamy wartość potencjału w punkcie i, j w kierunku spadku wartości S: $u(i, j) = u(i, j) - \beta\nabla_{ij}S$, gdzie β jest parametrem iteracji. Optymalne β znajduje się gdzieś $\beta < 0.5$. Można przyjąć $d = 0.001$.

Do osiągnięcia zbieżności powinno wystarczyć kilkaset iteracji, przy czym w jednej iteracji staramy się poprawić po kolei każdy punkt siatki (tak jak w przepisach relaksacyjnych).

Znaleźć optymalne β. Narysować S od numeru iteracji. Porównać tempo zbieżności z zadaniem 1 oraz 2. Warunek początkowy bez zmian.

Zadanie 4 (15 pkt)

Minimum S można starać się szukać zmieniając w sposób losowy wartość potencjału w punkcie u_{ij} i akceptując tylko kroki, które obniżają wartość S. Użyć generatora liczb losowych o rozkładzie równomiernym z przedziału $(-r, r)$. Dobrać rozsądne r.

W jednej iteracji staramy się poprawić po kolei każdy punkt siatki (tak jak w przepisach relaksacyjnych).