Πανεπιστήμιο Κρήτης –Τμήμα Επιστήμης Φυσικής

PH351– Υπολογιστική Φυσική

Διδάσκων: Ξ. Ζώτος

Εαρινό Εξάμηνο 2019-2020

Επίλυση της κλασσικής εξίσωσης Poisson

Κωνσταντίνος Ψυχιάς

ph3131

15/3/2020

Περιεχόμενα

Εισαγωγή

Η ανάλυση που ακολουθεί έχει ως σκοπό την παρουσίαση της υπολογιστικής λύσης της κλασσικής εξίσωσης Poisson. Για την επίλυση, έγινε χρήση της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών(Finite Differences) και της τεχνικής Successive overrelaxation (SOR) για τον υπολογισμό της μήτρας δυναμικού. Ο υπολογισμός της συνολικής ενέργειας του συστήματος και του ηλεκτρικού πεδίου βασίστηκαν στο αποτέλεσμα της μήτρας δυναμικού.

Η γλώσσα προγραμματισμού που χρησιμοποιήθηκε είναι Typescript.

Η εξίσωση πηγής που επιλέχθηκε είναι:

$$S(x,y) = co\,\mathrm{s}(x * \pi) + \, y^2 * \sin(y * \pi)$$

Θεωρία

Εξίσωση Poisson

Σε μία, διάσταση, η εξίσωση έχει την μορφή :

$$-\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = S(x)$$

όπου φ(χ) ορίζεται το ηλεκτρικό δυναμικό και S(x) η γραμμική πυκνότητα φορτίου.

Αντίστοιχα, σε δύο διαστάσεις, η εξίσωση γίνεται:

$$-\nabla^2\varphi(r) = S(r)$$

όπου $\boldsymbol{r} = x\hat{\boldsymbol{x}} + \, y\hat{\boldsymbol{y}}$

Μέθοδος υπολογισμού δυναμικού

Για τον υπολογισμό της μήτρας δυναμικού κάνουμε την παραδοχή ότι ο χώρος αποτελείται από ένα πλέγμα με ενιαία σημεία στα οποία η συνάρτηση δυναμικού μπορεί να εφαρμοστεί. Αν τα σημεία απέχουν μεταξύ τους απόσταση ***h,*** τα σημεία που ανήκουν στο πλέγμα είναι διαθέσιμα με τις παρακάτω εξισώσεις

$$x_i = i * h$$

$$y_j = j * h$$

Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor και αντικαθιστώντας τα παραπάνω καταλήγουμε στην εξίσωση

$$\mathrm{\varphi(i,j)} = \frac{1}{4}\{\mathrm{\varphi(i\,+\,1,j)\,+\,\varphi(i\,-\,1,j)\,+\,\varphi(i,j\,+\,1)\,+\,\varphi(i,j\,-\,1)\,+\,h^2\,S(i,j)}\}$$

Στην παραπάνω εξίσωση, κάνουμε χρήση της μεθόδου SOR, οπότε προσθέτουμε και τον παράγοντα

$$(1 - \omega)\varphi^{\nu-1}(i,j)$$

Η τελική μορφή γίνεται

$$\varphi(i,j) = (1-\omega)\varphi^{\nu-1}(i,j) + \frac{\omega}{4}\{\varphi(i+1,j) + \varphi(i-1,j) + \varphi(i,j+1) + \varphi(i,j\ 1) + h^2 S(i,j)\}$$

Υπολογισμός συνολικής ενέργειας

Για τον υπολογισμό της ενέργειας έγινε χρήση του τύπου

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left((\phi(i,j)-\phi(i-1,j))^2 + (\phi(i,j)-\phi(i,j-1))^2\right) \\ &- h^2 \sum_{i=1}^{N-1}\sum_{i=1}^{N-1} S(i,j)\phi(i,j) \end{aligned}$$

Υπολογισμός ηλεκτρικού πεδίου

Ο υπολογισμός του ηλεκτρικού πεδίου γίνεται αξιοποιώντας τις τιμές του δισδιάστατου πίνακα δυναμικού. Για τις τιμές του πεδίου στον άξονα ***x,y*** χρησιμοποιούμε τις παρακάτω εξισώσεις:

$$E_x(i,j) = -\frac{V(i+1,j) - V(i,j)}{h}$$
$$E_y(i,j) = -\frac{V(i,j+1) - V(i,j)}{h}$$

Μετά τον υπολογισμό των παραπάνω μητρών, κανονικοποιούμε τις τιμές με βάση τις παρακάτω εξισώσεις:

$$E'_x(i,j) = \frac{1}{2}\Big[E_x(i,j+1) + E_x(i,j)\Big]$$
$$E'_y(i,j) = \frac{1}{2}\Big[E_y(i+1,j) + E_y(i,j)\Big]$$

Επίλυση

Οι μεταβλητές που χρησιμοποιήθηκαν είναι:

Ω = 0,3

Επαναλήψεις = 3000

Μέγεθος πλέγματος = 30

Βήμα 1 – Δήλωση Μεταβλητών

Η δήλωση των μεταβλητών αφορά :

1. Τον δισδιάστατο πίνακα φορτίου
2. Τον δισδιάστατο πίνακα δυναμικού
3. Την συνολική ενέργεια
4. Τον πίνακα με το ηλεκτρικό πεδίο του άξονα x
5. Τον πίνακα με το ηλεκτρικό πεδίο του άξονα y

Βήμα 2 – Προετοιμασία πίνακα φορτίου

Μηδενίζουμε τον πίνακα φορτίου με τον ακόλουθο κώδικα:

```
for (let i = 0; i < this.SIZE; i++) {

   for (let j = 0; j < this.SIZE; j++) {
      this.chargeMatrix[i][j] = 0;
       }
   }
```

Βήμα 3 – Δημιουργία συνοριακών συνθηκών

Το πρώτο βήμα για να εφαρμόσουμε τις συνοριακές συνθήκες είναι να γνωρίζουμε ποια σημεία της μήτρας ανήκουν σε άκρο.

Στην περίπτωση που ένα σημείο ανήκει σε άκρο, κατά τον υπολογισμό του δυναμικού αυτό το σημείο επιστρέφει 0, όπως φαίνεται και παρακάτω στην συνάρτηση υπολογισμού του δυναμικού.

Βήμα 4 – Δημιουργία συνάρτησης πηγής

Η συνάρτηση πηγής σε μορφή κώδικα είναι :

```
Math.pow(h, 2) * ((cos(x * Math.PI)) + Math.pow(y, 2) * (sin(y * Math.PI)))
```

Βήμα 5 – Επαναληπτική διαδικασία βελτίωσης δυναμικού

Αρχικά υπολογίζουμε το φορτίο με τον ακόλουθο κώδικα

```
private calculateCharge(i: number, j: number): number {
  const x = this.getRealXY(i);
  const y = this.getRealXY(j);
  const result = this.chargeEquation(x, y, this.H);
  return result;
}
```

Όπου

```
private getRealXY(i: number) {
  return i / (this.SIZE - 1);
}
```

SIZE είναι η μεταβλητή που περιέχει τον αριθμό των σημείων του πλέγματος.

Στη συνέχεια υπολογίζουμε με ***N*** επαναλήψεις το δυναμικό.

```
for (let k = 0; k < this.ITERATIONS; k++) {
     for (let i = 0; i < this.SIZE; i++) {
       for (let j = 0; j < this.SIZE; j++) {
         const prevVoltageValue = this.calculatePotential(i, j);
         this.lab.voltageMatrix[i][j] = prevVoltageValue;
       }
     }
```

Όπου η calculatePotential είναι:

```
private calculatePotential(i: number, j: number): number {
  if (this.isAtBoundaries(i, j)) return 0.0;
  let p = (1 - this.OMEGA) * this.lab.voltageMatrix[i][j] +
    (this.OMEGA / 4.0) *
    (this.lab.voltageMatrix[i + 1][j] +
      this.lab.voltageMatrix[i - 1][j] +
      this.lab.voltageMatrix[i][j + 1] +
      this.lab.voltageMatrix[i][j - 1] +
      this.chargeMatrix[i][j]);
  return p;
}
```

Βήμα 6 – Υπολογισμός Δυναμικού και Ενέργειας

Για τον υπολογισμό της ενέργειας έγινε χρήση του παρακάτω κώδικα:

```
private calculateTotalEnergy(): number {
  let sumOne = 0.0;
  let sumTwo = 0.0;
  for (let i = 0; i < this.SIZE; i++) {
    for (let j = 0; j < this.SIZE; j++) {
      let firstTerm = Math.pow(this.getVoltage(i, j) - this.getVoltage(i - 1, j), 2);
      let secondTerm = Math.pow(this.getVoltage(i, j) - this.getVoltage(i, j - 1), 2);
      let thirdTerm = this.chargeMatrix[i][j] * this.lab.voltageMatrix[i][j];
      sumOne += firstTerm + secondTerm;
      if (i < this.SIZE - 2 || j < this.SIZE - 2) {
        sumTwo += thirdTerm;
      }
    }
  }
  let final = (1.0 / 2.0) * sumOne - Math.pow(this.H, 2) * sumTwo;
  return final;
}
```

Η ενέργεια βρέθηκε $E = -0.0043$.

Βήμα 7 – Υπολογισμός Ηλεκτρικού πεδίου

Για τον υπολογισμό του ηλεκτρικού πεδίου χρειαζόμαστε τον πίνακα του δυναμικού. Για την διάσταση ***x,*** η συνάρτηση υπολογισμού είναι

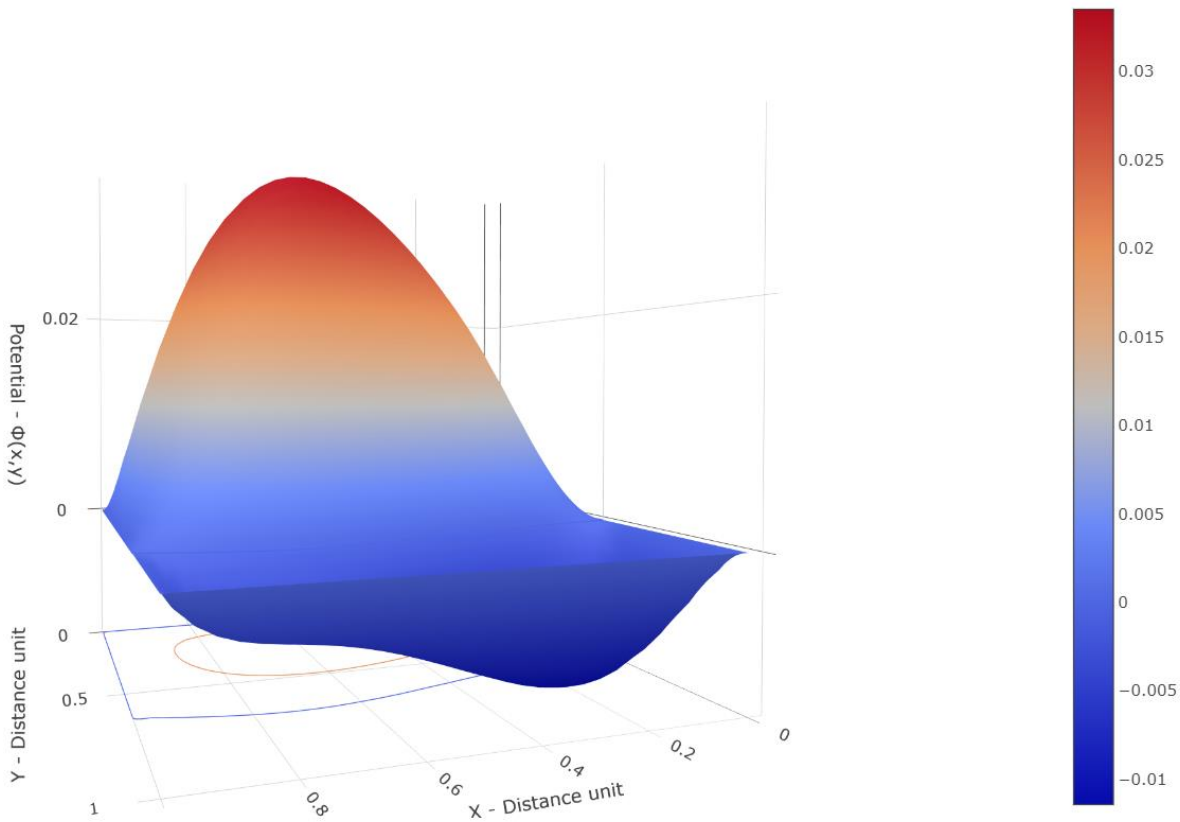
```
 // initial calculation
  for (let i = 0; i < size - 1; i++) {
    if (!this.xVector[i]) {
      this.xVector[i] = [];
    }
    for (let j = 0; j < size - 1; j++) {
      this.xVector[i][j] =
        -(this.voltageMatrix[i + 1][j] - this.voltageMatrix[i][j]) / this.h; // eq 24
    }
  }

  // normalization
  for (let i = 0; i < size - 1; i++) {
    for (let j = 0; j < size - 1; j++) {
```

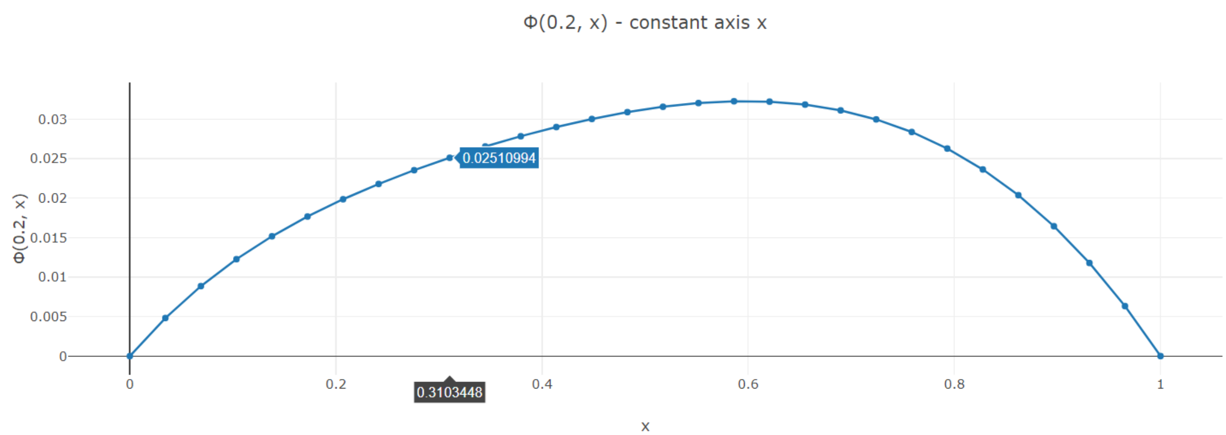
```
        this.xVector[i][j] =
          0.5 * (this.xVector[i][j + 1] + this.xVector[i][j]); // eq 26
      }
    }
```

Αντίστοιχα, γίνεται και ο υπολογισμός για τον άξονα y.

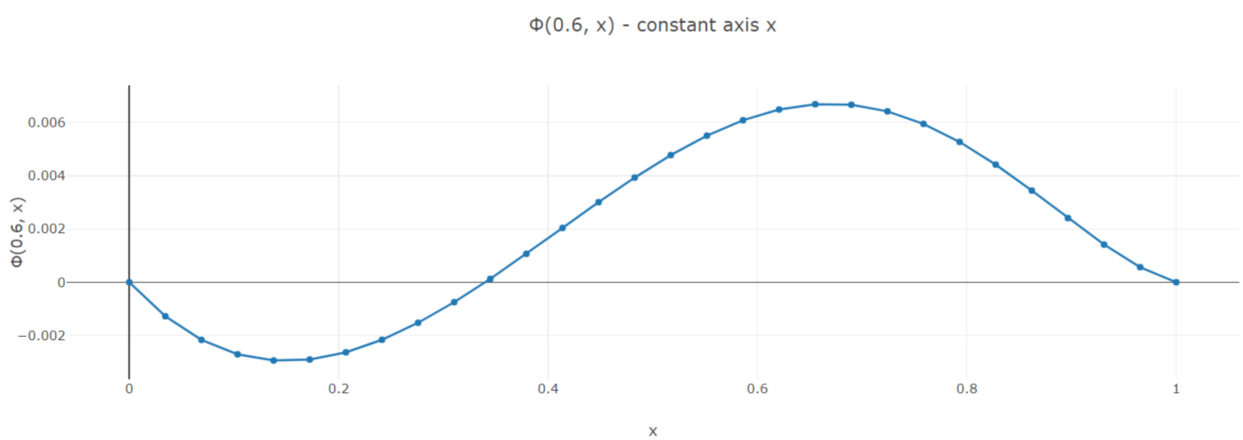
Βήμα 8 – Γραφικές παραστάσεις



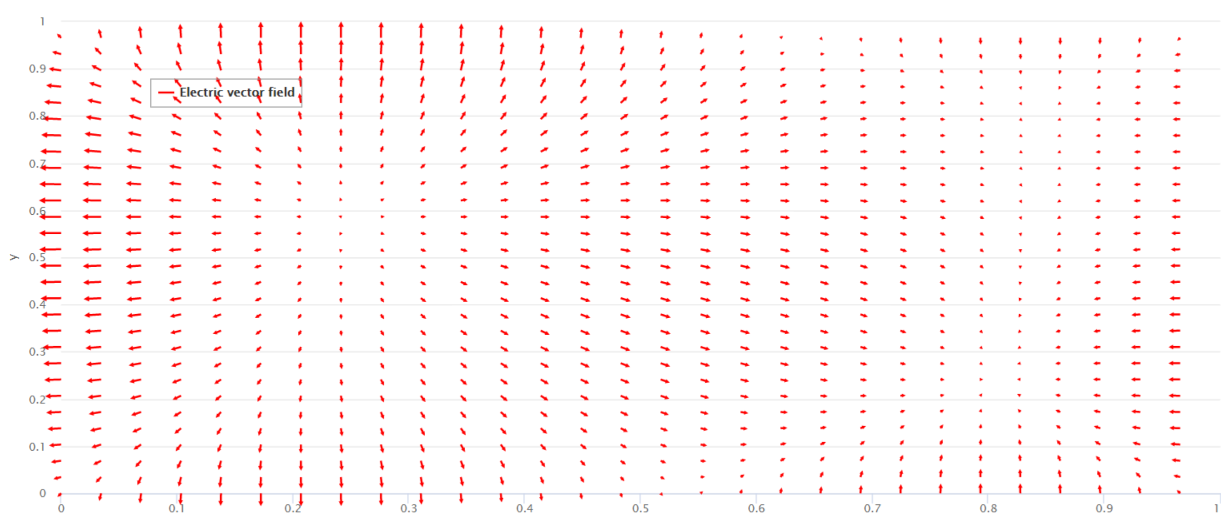
Εικόνα 1- Δυναμικό στις διαστάσεις x,y



Εικόνα 2 - Δυναμικό για x = 0,2 (Σημείο 6)



Εικόνα 3 - Δυναμικό για x = 0,6 (Σημείο 18)



Εικόνα 4 – Ηλεκτρικό πεδίο