

Metody Monte Carlo - laboratorium 5

Temat: Metody Monte Carlo w układach siatkowych – część 1

Proszę zapoznać się z kodem przykładowej aplikacji (umieszczonej w katalogu */MMC_lab5/perkolacja*) która umożliwia badanie zjawiska perkolacji. Wykorzystuje ona obiekt klasy *perkolacja* i demonstruje sposób użycia jego podstawowych metod (*main.cpp*).

Wśród nich najważniejsze to:

- *void perkolacja(int L)* – konstruktor tworzący siatkę perkolacji o rozmiarze $L \times L$,
- *void wypelnij_siatke_perkolacji(float p)* – wypełnia węzły siatki z zadanim prawdopodobieństwem p ,
- *void wyswietl_siatka_perkolacji()* – wyświetla zawartość węzłów siatki,
- *void znajdz_agregaty()* – znajduje i numeruje wszystkie powstałe agregaty (w oparciu o algorytm Hoshena i Kopelmana), a wynik tego działania umieszcza w tablicy, której zawartość możemy wyświetlić wywołując metodę:
void wyswietl_siatka_perkolacji_numery_agregatow(),
- *int znajdz_agregat_perkolujacy(int kierunek)* – zwraca numer agregatu perkolującego lub zero w przypadku braku takiego agregatu; parametr *kierunek* umożliwia wybór przeszukiwania w pionie (z góry do dołu) lub w poziomie (z lewej do prawej).

Uwaga! Funkcja *perkolacja* tworzy m.in. generator liczb pseudolosowych i inicjuje go **ustalonym** zarodkiem. Dlatego chcąc zbadać zbiór losowo wypełnionych siatek o danym rozmiarze, należy tę funkcję wywołać tylko **raz** na samym początku (poza pętlą).

Zadanie 1

Wykorzystać omawiany kod do stworzenia aplikacji, która umożliwi wyznaczenie zależności funkcyjnej: $P_s^L(p)$, gdzie P_s^L oznacza prawdopodobieństwo wystąpienia agregatu perkolującego **poziomo** w kwadratowej siatce o boku L , a p – prawdopodobieństwo wypełnienia węzła sieci. Obliczenia wykonać dla rozmiarów siatki $L = 10, 30, 50, 70$ i 90 . Dla każdej wartości p wykonać badanie kilku tysięcy konfiguracji losowych. Wyznaczyć wartość progu perkolacji p_c jako wartość p w punkcie przecięcia się wszystkich znalezionych krzywych (powinno być ich 5). Jako początkowy zakres zmienności p przyjąć przedział $[0,1 - 0,9]$, potem ewentualnie powtórzyć symulację w ograniczonym zakresie, by dokładniej oszacować wartość p_c .

Metody Monte Carlo - laboratorium 5

Zadanie 2

Proszę uzupełnić definicję klasy *perkolacja* o metodę:

int masa_agregatu(int numer_agregatu) – wyznaczającą masę agregatu, czyli liczbę węzłów zajętych przez agregat wskazany przez argument funkcji. Następnie wyznaczyć średnią masę agregatu perkolującego dla $L = 10, 30, 50, 70$ i 90 i $p = p_c$. Każdorazowo wykonać badanie dla kilku tysięcy konfiguracji losowych. Wykreślić znalezioną masę (być może po normalizacji) w funkcji L .

Zadanie 3

Wprowadzenie

Typowym problemem w elektrostatyce i transporcie ciepła jest rozwiązanie równania Laplace'a, które w przestrzeni dwuwymiarowej ma postać

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0, \quad (1)$$

gdzie funkcja $\psi(x, y)$ jest zwana potencjałem – może to być np. potencjał elektrostatyczny lub temperatura. Równanie to rozwiązuje się na danym obszarze (w ogólności wielospójnym), na którego brzegach są zdefiniowane wartości potencjału $V(x, y)$. Z reguły konieczne jest użycie metod numerycznych, np. metody różnic skończonych. Okazuje się jednak, że przybliżone rozwiązanie tego problemu można również uzyskać za pomocą metod Monte Carlo. Wykorzystuje się przy tym podobieństwo wyrażenia przybliżającego (1) do wyrażenia opisującego pewną zmienną losową, której wartość można oszacować za pomocą eksperymentów z błędzeniem losowym (ang. *random walk*). Poniżej przedstawimy uzasadnienie, a następnie gotową procedurę.

Niech ψ_q oznacza potencjał w dowolnym punkcie q . Niech przy tym B będzie zbiorem punktów brzegowych b , tj. takich, w których narzucona jest wartość potencjału V_b . Dokonajmy dyskretyzacji rozpatrywanej przestrzeni dwuwymiarowej za pomocą siatki o kwadratowych oczkach. Skok siatki, czyli długość boku każdego oczka, wynosi h . Po dyskretyzacji punkt q będzie miał czterech sąsiadów: lewego l , prawego p , górnego g i dolnego d . Rozwinięcie w szereg Taylora potencjałów w tych czterech punktach daje:

$$\begin{aligned}\psi_p &= \psi_q + h \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_q + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_q + \frac{h^3}{6} \left(\frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right)_q + \dots \\ \psi_l &= \psi_q - h \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_q + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_q - \frac{h^3}{6} \left(\frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right)_q + \dots \\ \psi_g &= \psi_q + h \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)_q + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right)_q + \frac{h^3}{6} \left(\frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3} \right)_q + \dots \\ \psi_d &= \psi_q - h \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)_q + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right)_q - \frac{h^3}{6} \left(\frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3} \right)_q + \dots\end{aligned}$$

Metody Monte Carlo - laboratorium 5

Po zsumowaniu stronami powyższych czterech równań zauważamy, że:

1. składniki nieparzystego rzędu zerują się ze względu na przeciwne znaki występujące w wyrażeniach opisujących potencjał po przeciwnych stronach punktu q ;
2. suma składników rzędu drugiego jest również zerem, co wynika z równania Laplace'a (1);
3. składniki rzędu czwartego i wyższych pomijamy jako mało istotne.

Ostatecznie potencjał w punkcie q możemy zapisać jako

$$\psi_q = \begin{cases} V_q, & q \in B, \\ \frac{\psi_l + \psi_p + \psi_g + \psi_d}{4}, & q \notin B. \end{cases} \quad (2)$$

Poniżej pokażemy, że wyrażenie o postaci identycznej jak (2) opisuje pewną wielkość otrzymywaną w wyniku serii błędzeń losowych wychodzących z punktu q .

Niech $P_{q \rightarrow b}$ oznacza prawdopodobieństwo, że błądzenie przypadkowe wychodzące z punktu q zakończy się w pewnym ustalonym punkcie brzegowym $b \in B$. Uzyskana droga musi oczywiście w pierwszym kroku przechodzić przez jednego z czterech sąsiadów q . Wybór każdego z nich jest jednakowo prawdopodobny, co prowadzi do następującego wzoru:

$$P_{q \rightarrow b} = \frac{P_{l \rightarrow b} + P_{p \rightarrow b} + P_{g \rightarrow b} + P_{d \rightarrow b}}{4}.$$

Po obustronnym pomnożeniu powyższego wyrażenia przez potencjał punktu docelowego V_b otrzymujemy

$$V_b P_{q \rightarrow b} = \frac{1}{4} V_b P_{l \rightarrow b} + \frac{1}{4} V_b P_{p \rightarrow b} + \frac{1}{4} V_b P_{g \rightarrow b} + \frac{1}{4} V_b P_{d \rightarrow b}.$$

Jeśli takie równanie zapiszemy osobno dla każdego punktu brzegowego $b \in B$, a następnie uzyskany układ równań zsumujemy stronami, to otrzymamy

$$\sum_{b \in B} V_b P_{q \rightarrow b} = \frac{1}{4} \sum_{b \in B} V_b P_{l \rightarrow b} + \frac{1}{4} \sum_{b \in B} V_b P_{p \rightarrow b} + \frac{1}{4} \sum_{b \in B} V_b P_{g \rightarrow b} + \frac{1}{4} \sum_{b \in B} V_b P_{d \rightarrow b}. \quad (3)$$

Proszę zauważyć, że każde błądzenie losowe musi ostatecznie dotrzeć do jakiegoś punktu brzegowego, co można zapisać jako

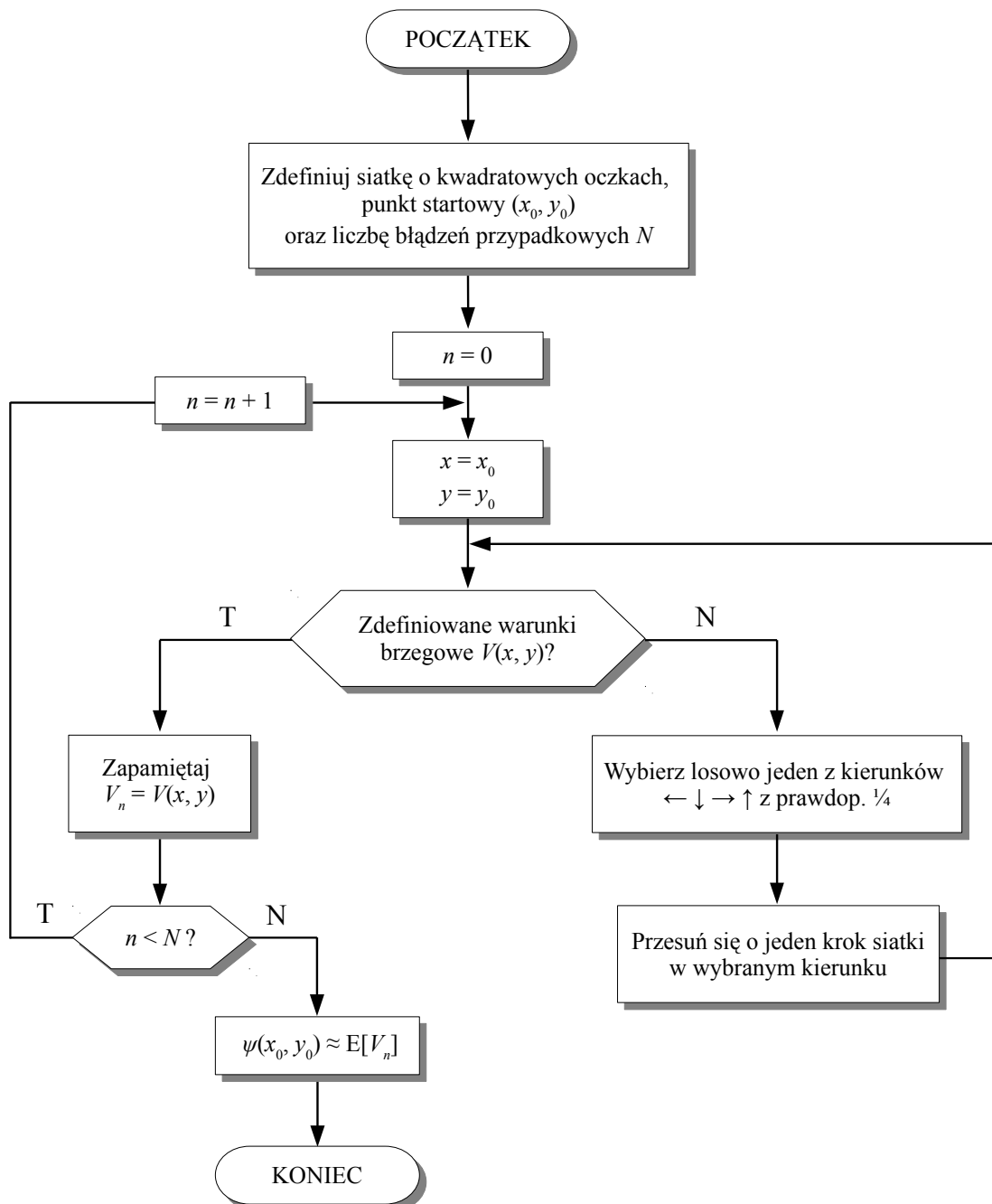
$$\sum_{b \in B} P_{x \rightarrow b} = 1, \quad x \in \{q, l, p, g, d\}.$$

Skoro tak, to każdą z pięciu sum we wzorze (3) można traktować jako wartość oczekiwaną potencjału punktu brzegowego, do którego dotrze błądzenie losowe wychodzące z punktu x . Oznaczmy tę wartość oczekiwaną jako $E[V_x]$. Oczywiście jeśli punkt początkowy leży na brzegu, to błądzenie kończy się jeszcze przed wykonaniem pierwszego kroku, zaś wartość potencjału jest zdefiniowana przez warunki brzegowe Dirichleta. Zatem wzór (3) możemy zapisać następująco

Metody Monte Carlo - laboratorium 5

$$E[V_q] = \begin{cases} V_q, & q \in B, \\ \frac{E[V_l] + E[V_p] + E[V_g] + E[V_d]}{4}, & q \notin B. \end{cases}$$

Wzór ten ma identyczną postać jak (2). Skoro dwie wielkości – ψ_q i $E[V_q]$ – mają identyczną wartość w punktach brzegowych rozważanego obszaru i zmieniają się w identyczny sposób w pozostałych jego punktach, to muszą być równe w całym tym obszarze. Przy tym estymatę $E[V_q]$ można łatwo uzyskać w drodze eksperymentu losowego. Całą procedurę opisuje sieć działań przedstawiona na Rys. 1. Oczywiście wyznaczenie *rozkładu* potencjału w obszarze wymaga wielokrotnego uruchomienia tej procedury dla różnych x_0 i y_0 .



Rys. 1. Algorytm Monte Carlo do estymacji rozwiązania równania Laplace'a w wybranym punkcie (x_0, y_0)

Metody Monte Carlo - laboratorium 5

Zadanie do wykonania

Proszę zastosować opisaną powyżej procedurę do wyznaczenia rozkładu potencjału w strukturze podobnej do jednej z tych przedstawionych na Rys. 2 (własne modyfikacje mile widziane). Rozkład ten proszę wykreślić np. za pomocą programu *gnuplot*. Zadowalającą gładkość rozkładu uzyskuje się przy kilku tysiącach błędzeń wychodzących z każdego punktu. Rozsądna wielkość siatki, dla której całość obliczeń powinna trwać poniżej 3 minut, to 50 x 50 oczek.

Wykres poziomicowy

```
set view map      # Widok z góry
unset surface     # Nie chcemy serii danych jako linii
set contour base  # Rysuj poziomicę na podstawie wykresu
set cntrparam levels 10 # Chcemy 10 poziomic
splot "laplace.txt" with l
```

Mapa temperaturowa

```
set pm3d map interpolate 0,0
splot "laplace.txt"
```

Wykres 3D – „siatkowy” lub kolorowy

```
set xrange [0 : 1] # Ustalamy zakres na osi X (poziomej)
set yrange [0 : 1] # Ustalamy zakres na osi Y (poziomej)
set zrange [0 : 1] # Ustalamy zakres na osi Z (pionowej)
set ticslevel 0     # Podstawa wykresu będzie na poziomie 0V
set hidden3d        # Chcemy (?), by wykres był nieprzezroczysty
splot "laplace.txt" with lines # Wykres „siatkowy”
splot "laplace.txt" with pm3d  # Wykres kolorowy
```



Rys. 2. Przykładowe struktury do wyznaczenia rozkładu potencjału metodą Monte Carlo. Czarną linią oznaczono kształty ekwipotencjalne, na których zostały zdefiniowane warunki brzegowe Dirichleta. Na rysunku z lewej strony pokazano trzy przykładowe realizacje błędzenia przypadkowego startujące z punktu oznaczonego czarną kropką. Ile wynosi estymata potencjału w tym punkcie po przeprowadzeniu takiego eksperymentu?