

Rozwiązywanie równania Poissona na siatce metodą błędzenia przypadkowego

Metody Monte Carlo w Fizyce

Julia Potempa (411073)



Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

28. maja 2025r.

Cel ćwiczenia

Rozwiązanie równania Poissona:

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

za pomocą dwóch metod: relaksacji oraz błędzenia losowego (Monte Carlo).

1 Wstęp

1.1 Ogólne założenia

W celu rozwiązania zagadnienia należy zdefiniować siatkę równoodległych węzłów ($\Delta_x = \Delta_y = \Delta$), które określają położenie na niej:

$$x = x_i = \Delta \cdot i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n_x$$

$$y = y_j = \Delta \cdot j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, n_y$$

Definiujemy również gęstość ładunku:

$$\rho(x, y) = \rho_{max} \exp \left\{ \left(-\frac{(\vec{r} - \vec{r}_{max})^2}{2 \cdot \sigma_\rho^2} \right) \right\}$$

$$\vec{r}_{max} = [x_{max}, y_{max}] = [\Delta \cdot n_x, \Delta \cdot n_y]$$

oraz warunki brzegowe:

- Dirichleta na lewym (L), górnym (T) oraz dolnym (B) brzegu:

$$V(0, y) = V_L \sin \left(\frac{\pi y}{y_{max}} \right)$$

$$V(x, 0) = V_B \sin \left(\frac{\pi x}{x_{max}} \right)$$

$$V(x, y_{max}) = V_T \sin \left(\frac{\pi x}{x_{max}} \right)$$

- von Neumanna na prawym brzegu:

$$\left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=x_{max}} = 0$$

1.2 Metoda relaksacji

Metoda relaksacji, czy też nadrelaksacji to metoda numerycznego rozwiązywania równania Poissona. Aby przeprowadzić taką symulację należy zdyskretyzować równanie różniczkowe:

$$\frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{\Delta^2} + \frac{V_{i,j+1} - 2V_{i,j} + V_{i,j-1}}{\Delta^2} = -\frac{\rho_{i,j}}{\epsilon}$$

a następnie wyraz centralny przedstawić za pomocą pozostałych z dodatkiem wyrazu relaksacyjnego ω :

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

Kontrola zbieżności jest zaimplementowana za pomocą funkcjonału energii, który osiąga minimum dla dokładnego potencjału:

$$F = \int \left(\frac{1}{2} \vec{E}^2 - \rho V \right) d^2r, \quad \vec{E} = -\nabla V$$

Proces relaksacji kończymy po osiągnięciu minimum, czyli musi być spełniony warunek:

$$\left| \frac{F^{(k+1)} - F^{(k)}}{F^{(k+1)}} \right| < tol$$

1.3 Metoda błędzenia losowego na siatce

Metoda błędzenia losowego polega na wygenerowaniu N łańcuchów Markowa na siatce (poza brzegami). Każdy taki łańcuch próbkuje rozkład gęstości i po dotarciu do brzegu z warunkiem Dirichleta to zostaje zaabsorbowany dając wkład do rozwiązania. Na brzegu z warunkiem von Neumanna może się od niego odbić lub poruszać wzdłuż. Rozwiązanie to uśrednienie informacji z każdego wędrowca startującego z tego samego (wybranego) węzła.

$$V(x_0, y_0) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N V^{(l)}(x_{end}, y_{end}) \Big|_{\text{warunek Dirichleta}} + \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \sum_{p=1}^{d_l-1} \frac{\Delta^2 \rho_{i_p, j_p}}{4\epsilon}$$

gdzie: d_l to długość l -tego łańcucha. Można to skrócić do:

$$V(x_0, y_0) = \frac{1}{N} \sum \Delta V_l$$

$$\Delta V_l = V^{(l)}(x_{end}, y_{end}) \Big|_{\text{warunek Dirichleta}} + \sum_{p=1}^{d_l-1} \frac{\Delta^2 \rho_{i_p, j_p}}{4\epsilon}$$

Na podstawie tych wzorów można znaleźć oszacowania wartości średniej oraz odchylenia standardowego:

$$\bar{V}_{i_0, j_0} = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \Delta V_l$$

$$\overline{V^2}_{i_0,j_0} = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N (\Delta V_l)^2$$

$$\sigma_{\overline{V}_{i_0,j_0}} = \sqrt{\frac{\overline{V^2}_{i_0,j_0} - (\overline{V}_{i_0,j_0})^2}{N}}$$

Do implementacji w tym ćwiczeniu zostały również zastosowane macierze $B_{i,j}$ oraz $S_{i,j}$. Macierz $B_{i,j}$ służy do oznaczania zablokowanych węzłów, czyli takich, dla których został już wyznaczony potencjał. Elementy przyjmują wartość 1 lub 0 odpowiednio jeżeli zachodzi absorpcja i jeżeli nie zachodzi absorpcja. Wyrazy macierzy $S_{i,j}$ przechowują wartości ułamków zaabsorbowanych łańcuchów.

2 Metodyka

Algorytmy metody nadrelaksacji oraz błędzenia losowego zostały zaimplementowane w języku C++ a wizualizacje powstały za pomocą języka Python. Parametry przyjęte w symulacji:

- $n_x = n_y = 30$, $\Delta = 0, 1$, $V_L = 1$, $V_T = V_B = -1$, $\epsilon = 1$,
- $x_{max} = \Delta \cdot n_x$, $y_{max} = \Delta \cdot n_y$, $\rho_{max} = 1$, $\sigma_\rho = \frac{x_{max}}{10}$
- $tol = 10^{-6}$, $itmax = 10^4$, $\omega = 1, 8$

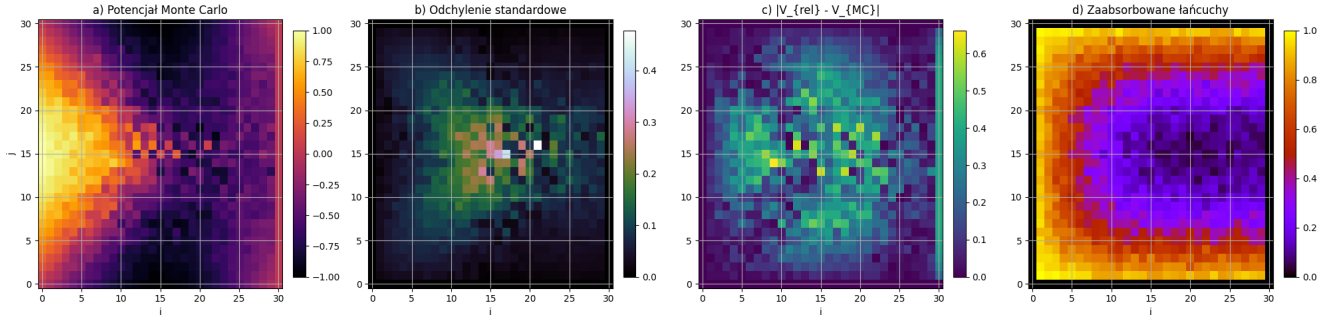
Do symulacji metodą Monte Carlo zostały wykorzystane trzy zestawy parametrów:

1. $N_{chains} = 100$, $n_{length} = 100$, $B_{i_0,j_0} = 0$ - brak blokady węzłów z wyznaczonym potencjałem,
2. $N_{chains} = 100$, $n_{length} = 100$, $B_{i_0,j_0} = 0$ = blokada węzłów po wyznaczeniu w nich potencjału,
3. $N_{chains} = 100$, $n_{length} = 100$, $B_{i_0,j_0} = 0$ - ponownie blokada węzłów

Zostały przygotowane mapy:

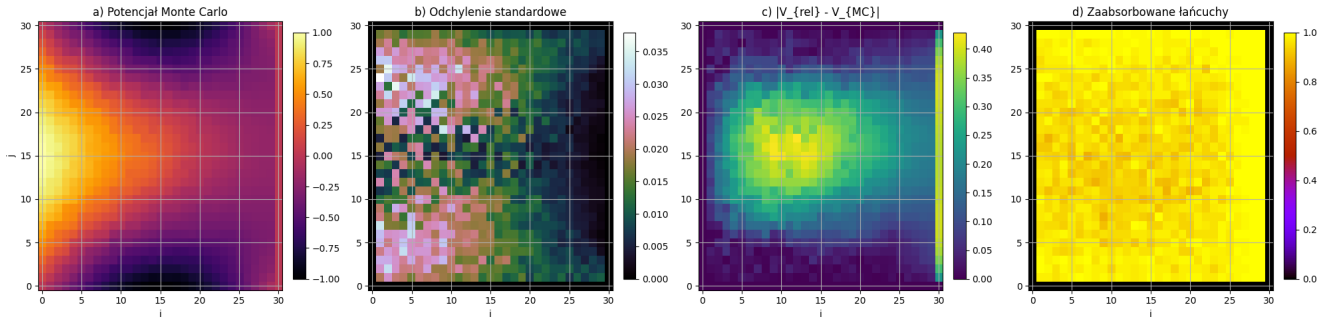
- a) Potencjału uzyskanego metodą Monte Carlo,
- b) Odchylenia standardowego,
- c) Wartości bezwzględnej z różnicy między wynikiem dla potencjału uzyskanego metodą nadrelaksacji a metodą Monte Carlo,
- d) Macierzy S_{i_0,j_0} .

3 Wyniki



Rysunek 1: Zestaw map dla pierwszego zestawu parametrów - brak blokady.

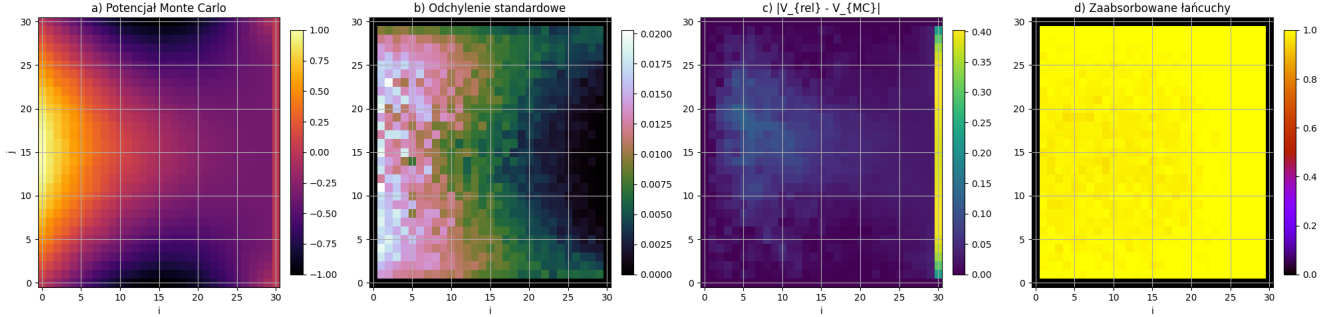
Rozkład potencjału jest charakterystyczny dla zadanego problemu. Wartości potencjału rosną od lewego brzegu ($V_L = 1$) zgodnie z warunkami brzegowymi Dirichleta. Niepewność statystyczna jest największa w obszarach o dużych gradientach potencjału i w pobliżu maksimum gęstości ładunku. Brzezi z warunkami Dirichleta wykazują zerową niepewność (absorpcja), podczas gdy obszary wewnętrzne charakteryzują się zmienną niepewnością zależną od liczby łańcuchów przechodzących przez dany węzeł. Różnice bezwzględne między metodami są największe w centralnej części siatki, gdzie występuje maksimum gęstości ładunku. Rozkład błędów wskazuje na większą czułość metody Monte Carlo na lokalne fluktuacje w obszarach o wysokich gradientach. Rozkład ułamków zaabsorbowanych łańcuchów pokazuje niejednorodność próbkowania przestrzeni. Węzły bliższe brzegów mają wyższe wartości $S_{i,j}$ ze względu na większe prawdopodobieństwo absorpcji krótkich łańcuchów.



Rysunek 2: Zestaw map dla drugiego zestawu parametrów - z blokadą.

Wprowadzenie blokady węzłów poprawia stabilność wyników. Rozkład potencjału jest bardziej gładki w porównaniu do zestawu 1, szczególnie w obszarach o niskich gradientach, gdzie węzły są szybciej blokowane po pierwszym wyznaczeniu. Znacząca redukcja niepewności statystycznej w porównaniu do zestawu 1. Blokada węzłów eliminuje nadmiarowe obliczenia, koncentrując zasoby obliczeniowe na obszarach wymagających większej liczby próbek. Różnice między metodami

są mniejsze, co wskazuje na poprawę dokładności metody Monte Carlo przy zastosowaniu mechanizmu blokady. Największe różnice nadal występują w pobliżu maksimum gęstości ładunku. Bardziej jednorodny rozkład ułamekó zaabsorbowanych łańcuchów. Mechanizm blokady prowadzi do efektywniejszych obliczeń.



Rysunek 3: Zestaw map dla trzeciego zestawu parametrów - z blokadą.

Mapa potencjału, analiza niepewności oraz różnice między V_{rel} , a V_{MC} są podobne do zestawu 2. Macierz S wykazała prawie brak różnic.

4 Wnioski

Mechanizm blokowania węzłów (macierz $B_{i,j}$) znacząco poprawia wydajność i dokładność metody Monte Carlo. Zestawy 2 i 3 wykazują lepszą zgodność z metodą nadrelaksacji, która była odniesieniem oraz mniejsze odchylenia standardowe w porównaniu do zestawu 1. Odchylenie standardowe nie jest jednorodne na siatce - największe wartości występują w obszarach o wysokich gradientach potencjału i w pobliżu maksimum gęstości ładunku. Brzeży z warunkami Dirichleta charakteryzują się zerową niepewnością ze względu na natychmiastową absorpcję. Metoda nadrelaksacji i Monte Carlo wykazują dobrą zgodność jakościową, jednak różnice ilościowe są największe w obszarze maksimum gęstości ładunku $\rho(x, y)$. Powtarzalność wyników między zestawami 2 i 3 potwierdza stabilność i niezawodność zaimplementowanego algorytmu. Rozbieżności między powtórzeniami mieszczą się w granicach oczekiwanej niepewności statystycznej.