

Rozwiązywanie równania Poissona na siatce metodą błędzenia przypadkowego

Metody Monte Carlo w fizyce
Nanoinżynieria materiałów

Łukasz Ruba



Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

13 maja 2024

Spis treści

	Cel ćwiczenia	3
1	Wstęp teoretyczny	3
2	Metodyka	4
3	Wyniki	5
4	Wnioski	7
	Literatura	8

Cel ćwiczenia

Celem ćwiczenia było rozwiązanie równania Poissona opisującego rozkład potencjału elektrycznego na siatce 30 na 30. Porównano ze sobą metodę relaksacyjną oraz Monte Carlo.

1 Wstęp teoretyczny

Równanie Poissona dla potencjału elektrycznego wyrażone jest wzorem:

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

Problem ten rozwiązano metodą relaksacji oraz Monte Carlo. Siatkę opisującą naszą przestrzeń potencjału zdefiniowano poprzez równoodległe od siebie węzły $\Delta_x = \Delta_y = \Delta$, zaś położenie opisano jako [1]:

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

$$y = y_j = \Delta \cdot j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, n_y. \quad (3)$$

Gęstość ładunku określa wyrażenie:

$$\rho(x, y) = \rho_{max} \exp \left[-\frac{(\vec{r} - \frac{\vec{r}_{max}}{2})^2}{2\sigma_p^2} \right], \quad (4)$$

$$\vec{r}_{max} = [x_{max}, y_{max}] = [\Delta \cdot n_x, \Delta \cdot n_y]. \quad (5)$$

W tak zdefiniowanej przestrzeni narzucono warunki Dirichleta na lewy (L), górny (T) i dolny (B) brzeg:

$$V(0, y) = V_L \sin \left(\frac{\pi y}{y_{max}} \right), \quad (6)$$

$$V(x, 0) = V_B \sin \left(\frac{\pi x}{x_{max}} \right), \quad (7)$$

$$V(x, y_{max}) = V_T \sin \left(\frac{\pi x}{x_{max}} \right), \quad (8)$$

oraz warunek Neumanna na prawy brzeg:

$$\left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=x_{max}} = 0. \quad (9)$$

W celu porównania skuteczności metody Monte Carlo porównano ją z **metodą relaksacji**. W tej metodzie najpierw dyskretyzujemy równanie różniczkowe w 2D:

$$\frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial y^2} = -\frac{\rho(x, y)}{\epsilon}, \quad (10)$$

zastępując je ilorazem różnicowym zdefiniowanym na siatce:

$$\frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{\Delta^2} + \frac{V_{i,j+1} - 2V_{i,j} + V_{i,j-1}}{\Delta^2} = -\frac{\rho(x, y)}{\epsilon}, \quad (11)$$

a następnie element centralny $V_{i,j}$ wyrażamy za pomocą pozostałych wyrazów i dodajemy parametr relaksacyjny ω :

$$V_{i,j}^{new} = (1 - \omega)V_{i,j} + \frac{\omega}{4} \left(V_{i+1,j} + V_{i,j+1} + V_{i-1,j} + V_{i,j-1} + \frac{\Delta^2}{\epsilon} \rho_{i,j} \right). \quad (12)$$

W ten sposób obliczony potencjał zostaje przypisany jako nowy potencjał w punkcie (i, j) . Do kontroli zbieżności rozwiązania wykorzystano funkcjonal energii, który powinien osiągnąć minimum dla dokładnego potencjału:

$$F = \int \left(\frac{1}{2} \vec{E}^2 - \rho V \right) d^2 r, \quad \vec{E} = -\nabla V. \quad (13)$$

Wyznaczając wartość F w kolejnych iteracjach, proces relaksacji kończy się po osiągnięciu minimum co sprawdzano przez warunek:

$$\left| \frac{F(k+1) - F(k)}{F(k+1)} \right| < tol, \quad (14)$$

gdzie za wartość parametru tol przyjęto 10^{-6} .

Przy rozwiązaniu tego problemu **metodą Monte Carlo** wykorzystano łańcuchy Markowa, których N ilość zostaje wygenerowanych w każdym punkcie siatki poza brzegami. Każdy łańcuch próbkuje rozkład gęstości i jeśli dotrze do brzegu z warunkiem Dirichleta (x_{end}, y_{end}) to zostaje tam zaabsorbowany dając wkład do rozwiązania. Na brzegach z warunkiem Neumanna wędrowiec może się odbić lub poruszać wzdłuż brzegu z odpowiednim prawdopodobieństwem. Rozwiązanie konstruuje się poprzez uśrednienie informacji pochodzących od wędrowców startujących z wybranego węzła (x_0, y_0) dla którego chcemy znaleźć potencjał. Matematycznie problem formułuje się następująco:

$$V(x_0, y_0) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N V^{(l)}(x_{end}, y_{end}) \Big|_{boundary \ Dirichlet} + \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \left(\sum_{p=1}^{d_l-1} \frac{\Delta^2 \rho_{i_p, j_p}}{4\epsilon} \right), \quad (15)$$

gdzie: d_l to długość l -tego łańcucha, a wyrażenie można zapisać w bardziej zwartej postaci:

$$V(x_0, y_0) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \Delta V^{(l)}, \quad (16)$$

$$\Delta V_l = V^{(l)}(x_{end}, y_{end}) \Big|_{boundary \ Dirichlet} + \sum_{p=1}^{d_l-1} \frac{\Delta^2 \rho_{i_p, j_p}}{4\epsilon}. \quad (17)$$

Wzorów powyżej można użyć do oszacowania wartości średniej w dowolnie wybranym węźle (i_0, j_0) oraz odchylenia standardowego:

$$\bar{V}_{i_0, j_0} = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M \Delta V^{(l)}, \quad (18)$$

$$\bar{V}^2_{i_0, j_0} = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M (\Delta V^{(l)})^2, \quad (19)$$

$$\sigma_{\bar{V}_{i_0, j_0}} = \sqrt{\frac{\bar{V}^2_{i_0, j_0} - (\bar{V}_{i_0, j_0})^2}{M}}, \quad (20)$$

przy czym M oznacza liczbę łańcuchów, które zostały zaabsorbowane na brzegach z warunkiem Dirichleta. Liczba łańcuchów zaabsorbowanych M może różnić się od całkowitej liczby łańcuchów N , ze względu na warunek kończący wędrówkę po przekroczeniu pewnej długości łańcucha l_{max} .

Dodatkowo w metodzie Monte Carlo można blokować węzły dla których został już wyznaczony potencjał, co oznacza modyfikację warunku brzegowego Dirichleta:

- $B_{i,j} = 1$ to WB Dirichleta (absorpcja),
- $B_{i,j} = 0$ brak absorpcji.

2 Metodyka

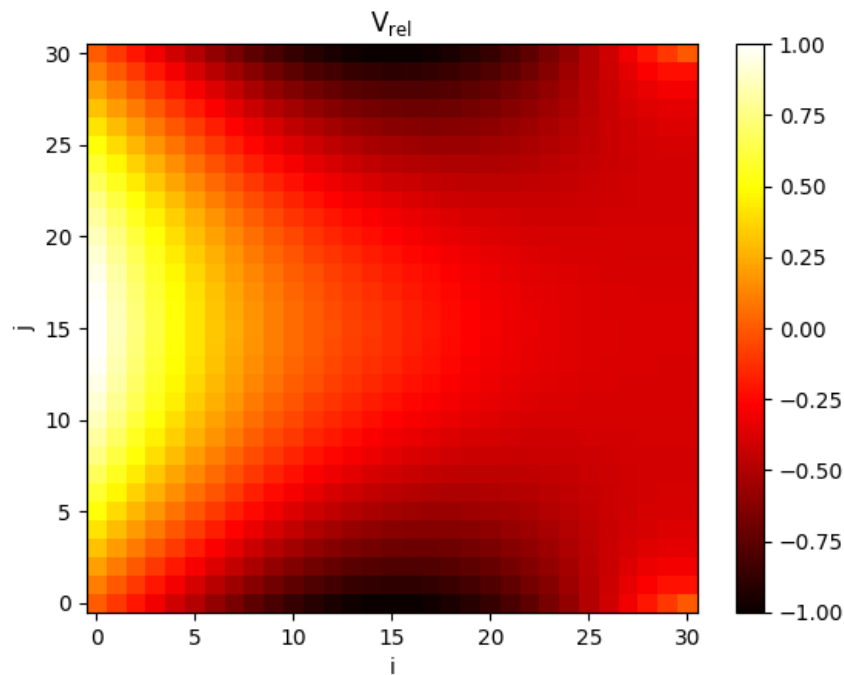
Opisane algorytmy we wstępie teoretycznym (1), relaksacji i Monte Carlo, zaimplementowano w kodzie napisanym w języku *C++*.

Wykonano jedną symulację dla metody relaksacji oraz trzy dla metody Monte Carlo. W pierwszym eksperymencie MC ustawiono ilość łańcuchów wychodzących z każdego punktu N_{chains} na wartość 100 oraz przyjęto maksymalną długość łańcucha n_{length} równą 100. Założono również, że warunek Dirichleta występuje tylko w na brzegach siatki. W eksperymencie drugim wprowadzono założenie, że warunek Dirichleta obowiązuje również dla punktu siatki dla której został już obliczony potencjał $V_{i,j}$. Eksperyment trzeci również miał narzuconą modyfikację warunku Dirichleta, jak w eksperymencie drugim, ale wydłużono n_{length} do wartości 300 oraz zwiększono N_{chains} również do wartości 300.

Wszystkie grafiki wykonano przy pomocy biblioteki *matplotlib* w *Python*.

3 Wyniki

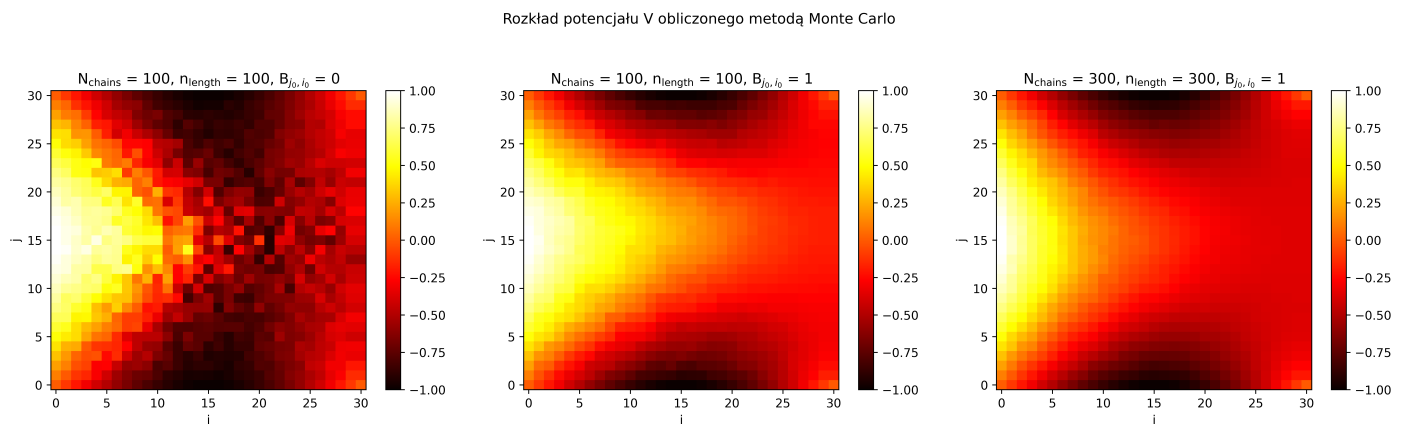
Na Rysunku 1 przedstawiono rozkład potencjału na siatce 30 na 30 obliczony metodą relaksacji. Potencjał ten uznano za model idealny względem którego porównano wyniki z pozostałych eksperymentów.



Rysunek 1: Rozkład potencjału obliczony metodą relaksacji.

Na Rysunku 2 pokazano trzy mapy potencjałów obliczone metodą Monte Carlo. Zgodnie z tytułami pierwsza obejmuje warunki $N_{chains} = 100$, $n_{length} = 100$ i $B_{j_0, i_0} = 0$, druga $N_{chains} = 100$, $n_{length} = 100$ i $B_{j_0, i_0} = 1$ oraz trzecia $N_{chains} = 300$, $n_{length} = 300$ i $B_{j_0, i_0} = 1$.

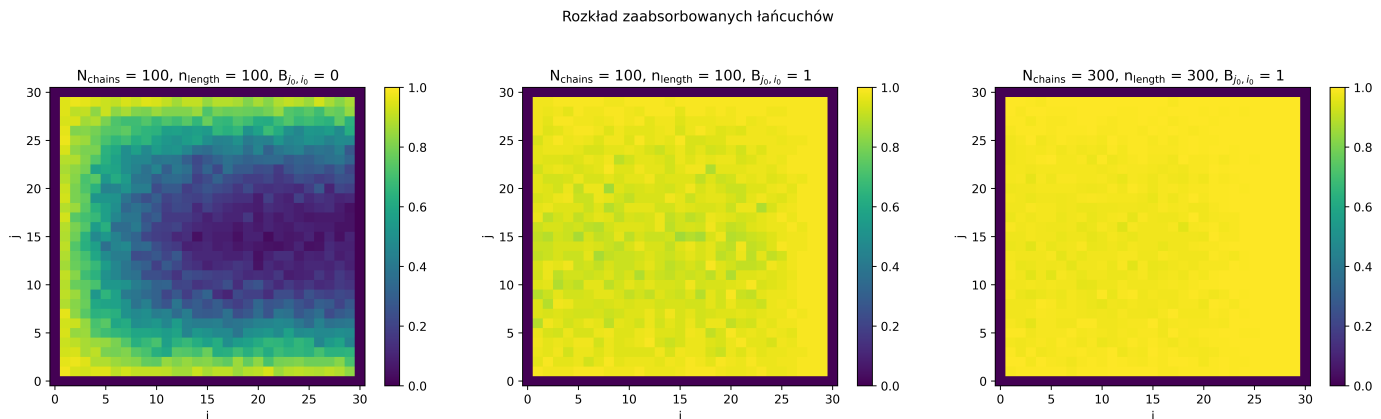
Pierwszą obserwacją jest fakt, że modyfikacja warunku Dirichleta ($B_{j_0, i_0} = 0 \rightarrow B_{j_0, i_0} = 1$) znacząco poprawia jakość otrzymanych wyników, co objawia się płynnymi zmianami potencjału pomiędzy komórkami siatki. Zwiększenie liczby łańcuchów oraz ich dozwolonej długości pozwoliło uzyskać bardziej dokładną mapę dzięki większej liczbie uśrednień.



Rysunek 2: Rozkłady potencjału obliczone metodą Monte Carlo.

Rysunek 3 pokazuje stosunek łańcuchów Markowa $S(x, y)$, które zakończyły się na brzegu z warunkiem Dirichleta do wszystkich wygenerowanych łańcuchów, dając wkład do rozwiązania. Dla eksperymentu pierwszego w znaczącej części mapy (od środka do prawego brzegu) stosunek ten był niewielki, jednak poprzez dodanie warunku $B_{j_0, i_0} = 1$ już w

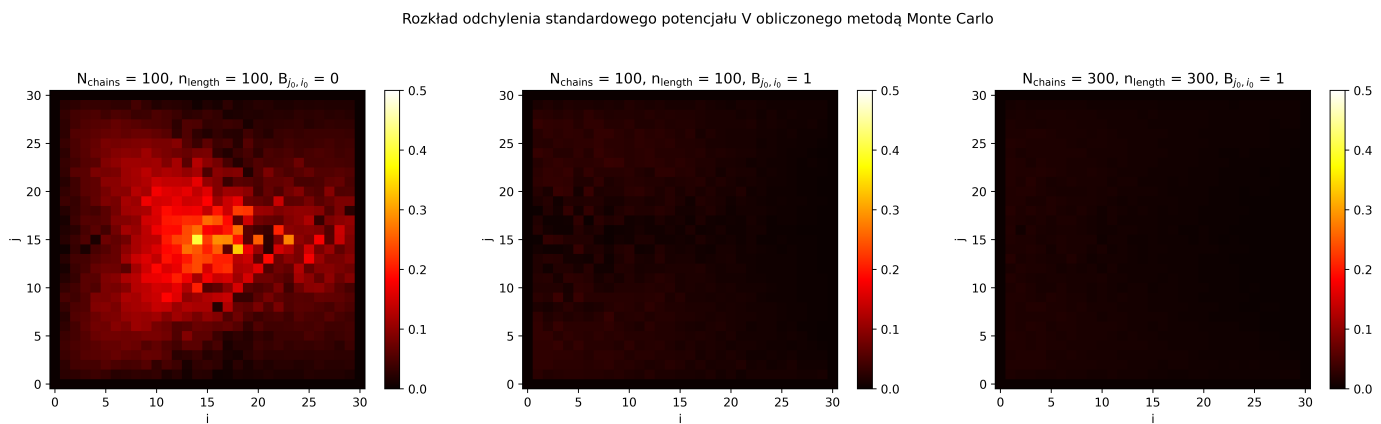
eksperymentcie drugim widać drastyczny skok jego wartości. Jedynie pojedyncze komórki nie były bliskie wartości 1. W eksperymencie trzecim pokazano, że zgodnie z intuicją, wydłużenie maksymalnej długości łańcucha skutecznie zwiększyło szansę dotarcia łańcucha do brzegu z warunkiem Dirichleta.



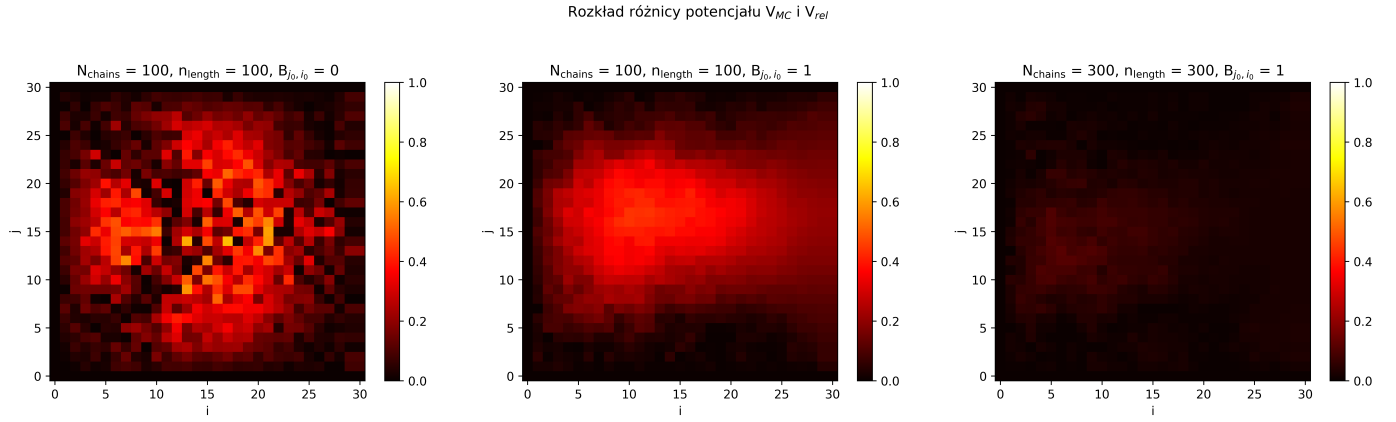
Rysunek 3: Rozkład zaabsorbowanych łańcuchów.

Na Rysunku 4 przedstawiono wartości odchylenia standardowego dla każdej komórki. Dla eksperymentu pierwszego największe wartości osiągała ona w centrum i na lewym brzegu. Jak wspomniano przedtem, w eksperymencie pierwszym widnieją duże różnice potencjału między kolejnymi komórkami, co widać dodatkowo na mapie odchylenia standardowego. Dla eksperymentów drugiego i trzeciego odchylenie jest znacząco niższe i prawie jednorodne. Dodatkowo jego wartości w centrum dla tych eksperymentów są ponad dwukrotnie mniejsze od tych z eksperymentu pierwszego.

Porównując mapy odchyłeń standardowych do map różnic między potencjałami uzyskanymi metodą Monte Carlo i metodą relaksacji (Rys. 5) zauważono nieoczywistą zależność. W drugim i trzecim przypadku różnice były największe w części siatki na lewo od centrum, ale odchylenia standardowe nie były tam maksymalne. Wpatrując się uważnie w te rysunki można zobaczyć, że w rejonach z niskim odchyleniem różnice były większe. Podobnie jest również dla eksperymentu pierwszego, chociaż ten lepiej już pokrywa się z mapą odchylenia standardowego.



Rysunek 4: Rozkład odchylenia standardowego potencjału V dla obliczeń wykonanych metodami Monte Carlo.



Rysunek 5: Rozkłady różnic potencjałów uzyskanych z metody Monte Carlo oraz metody relaksacyjnej.

4 Wnioski

Metoda Monte Carlo radzi sobie z rozwiązywaniem równań różniczkowych, ale wypada gorzej pod względem tempa jej wykonywania oraz w zależności od przyjętych warunków symulacji różni się znacząco od wartości otrzymywanych z metody różnic skończonych. W powyższym sprawozdaniu pokazano, że warunek absorpcji $B_{j_0, i_0} = 1$ znacząco przyczynia się do poprawy trafności wyników. Ponadto zgodnie z oczekiwaniami zwiększenie ilości łańcuchów oraz ich maksymalnej długości rozwiązanie coraz lepiej oddaje wynik uzyskany analitycznie.

Literatura

- [1] Tomasz Chwiej, dr hab. inż., skrypt do zadania “*Monte Carlo: Rozwiązywanie równania Poissona na siatce metodą błędzenia przypadkowego*”, AGH, Kraków, 6 marca 2024.