

Resolviendo las ecuaciones de Poisson y Laplace con métodos de Monte Carlo

Marcos Jiménez Mata

Universidad de Costa Rica

1. Introducción

Las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (PDEs, por sus siglas en inglés) aparecen en muchas ramas de la física: la ecuación de calor, la ecuación de Poisson, la ecuación de onda, etc. Salvo para ciertas configuraciones simples y simétricas, la solución a estas ecuaciones no se encuentra analíticamente, sino que se aproxima mediante métodos numéricos.

En electromagnetismo, el campo eléctrico se puede obtener por medio de la ley de Coulomb, o de la ley de Gauß o a partir del potencial. La ecuación de Poisson para el potencial está dada por

$$\nabla^2 \varphi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon_0} \quad (1)$$

junto con condiciones de frontera. Cuando la distribución de carga es cero en la región de interés, ésta se reduce a la ecuación de Laplace.

En una dimensión, la solución es simplemente una línea recta. Para dos dimensiones la PDE se puede resolver analíticamente por el método de imágenes o de separación de variables para algunos casos, pero en general se debe usar el método de relajación o de diferencias finitas del análisis numérico. Una alternativa es usar métodos de Monte Carlo.

Un método de Monte Carlo usa caminatas aleatorias aproximar el potencial solución de la PDE. Este método es el más simple pero tiene algunas ventajas, como la independencia de los cálculos y su facilidad de adaptarse a tres dimensiones.

En este trabajo vamos a investigar el costo computacional de estos métodos y qué tan bien aproximan el potencial, comparados con la solución analítica de varios problemas de electromagnetismo.

1.1. Objetivo general

Aprender cómo funcionan los métodos de Monte Carlo para resolver las ecuaciones de Poisson

y Laplace para problemas de electromagnetismo.

1.2. Objetivos específicos

- Implementar el clásico método de relajación como punto de comparación.
- Aprender cómo se usan las caminatas aleatorias en los métodos de Monte Carlo.
- Hacer una implementación básica de diversos métodos de Monte Carlo.
- Aplicar métodos de Monte Carlo con y sin rejilla a la solución de ecuaciones diferenciales parciales con condiciones de frontera.
- Comparar las simulaciones de Monte Carlo con la solución analítica de algunos problemas de electromagnetismo.

2. Marco teórico

La ecuación de Poisson, con condiciones de frontera de Dirichlet, es un caso de ecuación diferencial elíptica y está dada por:

$$\nabla^2 \varphi = f \quad \text{en } \Omega \quad (2)$$

$$\varphi = g \quad \text{en } \partial\Omega \quad (3)$$

donde Ω es una bola abierta en \mathbb{R}^n y $\partial\Omega$ su frontera, $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ y $g : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$ [1].

Su solución está dada por:

$$\varphi(\vec{r}) = \int_{\Omega} f(\vec{r}') \mathcal{G}^{\Omega} d^n r' + \int_{\partial\Omega} g(\vec{r}') \mathcal{P}^{\Omega} d^n r' \quad (4)$$

donde \mathcal{G}^{Ω} es la función de Green de φ en Ω y \mathcal{P}^{Ω} es su núcleo de Poisson. Estas dos funciones no tienen expresiones analíticas, excepto en algunas geometrías simétricas simples [1].

La ecuación de Poisson aparece en muchas aplicaciones científicas. Para el caso del electromagnetismo, una ecuación de Maxwell es la ley de

Gauß en forma diferencial, de la que surge una ecuación de Poisson [2]:

$$\nabla \cdot E = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (5)$$

$$\Rightarrow \nabla \cdot (-\nabla \varphi) = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (6)$$

$$\Rightarrow \nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (7)$$

Para el caso electrostático, $\rho = 0$, y (7) se reduce a una ecuación de Laplace:

$$\nabla^2 \varphi = 0 \quad (8)$$

Las soluciones a estas ecuaciones cumplen con que:

- los puntos extremos se dan siempre en la frontera y
- el valor de la solución en un punto es el valor medio de su vecindario

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{\mathcal{A}} \oint_{\mathcal{V}} \varphi da \quad (9)$$

Además, las condiciones de frontera garantizan que la solución es única [2].

Métodos como el de imágenes y el de separación de variables permiten resolver (7) de manera analítica, pero están limitados a configuraciones particulares. Existen varios métodos numéricos iterativos para aproximar la solución en una rejilla o retículo. Uno de éstos es el método de relajación o de diferencias finitas, que discretiza (7) en dos dimensiones como:

$$\begin{aligned} \varphi(x, y) = & \frac{1}{4} (\varphi(x+h, y) + \varphi(x, y+h) \\ & + \varphi(x-h, y) + \varphi(x, y-h) \\ & - h^2 f(x, y)) \end{aligned} \quad (10)$$

donde h es el espaciado de la rejilla [3].

El siguiente experimento se conoce como una caminata aleatoria [4]: comenzando con un punto en una retícula, se camina hacia uno de los cuatro vecinos en cada turno; luego de n turnos, la probabilidad de estar a una distancia r del origen tiende a

$$\frac{2}{n} e^{-r^2/n} r dr \quad (11)$$

Los métodos de Monte Carlo son procedimientos computacionales para resolver problemas determinísticos mediante métodos estocásticos. La

ecuación de Poisson (7) se puede resolver haciendo una caminata aleatoria w para cada punto interior $r_0 \in \Omega$ sobre una rejilla de grueso h , y que termina en la frontera $r_f \in \partial\Omega$. Sea

$$F(w) = \sum_{r_i \in w} f(r_i) h^2 \quad (12)$$

Se repite el proceso anterior N veces. Luego

$$P_{r_0}(r_f) = \frac{\# \text{ w de } r_0 \text{ a } r_f}{N} \quad (13)$$

Entonces, la solución es [5]:

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{r_f} g(r_f) P_{r_0}(r_f) - \sum_w F(w) \quad (14)$$

Una caminata sobre esferas (WoS, *Walk on Spheres*) es un experimento que no necesita de una retícula. Se avanza sobre un cascarón esférico de radio variable (sin intersectar la esfera) hasta llegar a una distancia ϵ de la frontera, como muestra la figura 1 [6].

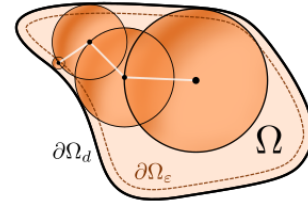


Figura 1: Caminata sobre esferas (WoS) [7].

El método de Monte Carlo WoS, soluciona (7) así:

$$\varphi(\vec{r}) = \mathbb{E}_r g(W_\tau) \sim \frac{1}{n} \sum_i^n g(W_\tau^i) \quad (15)$$

donde

$$W_\tau(t) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum^{[nt]} X_k \quad (16)$$

es un proceso de Wiener con $\{X_k\}$ variables aleatorias independientes [8].

Una generalización de este método se llama caminata sobre estrellas (WoSt, *Walk on Stars*). Resuelve la ecuación de Poisson con condiciones de frontera de Neumann:

$$\partial_n \varphi = h \quad \text{en } \Omega_n \quad (17)$$

El procedimiento es similar al anterior, pero se continúa caminando reflejándose en la frontera de las derivadas, como muestra la figura 2 [9].

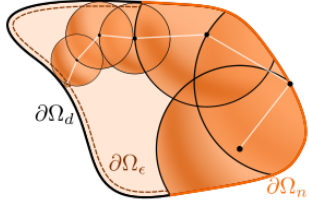


Figura 2: Caminata sobre estrellas (WoSt) [7].

3. Metodología

1. Implementar el método de diferencias finitas.
2. Implementar el método de Monte Carlo de caminos aleatorios y sus variantes.
3. Intentar hacer una implementación básica del método de caminos sobre esferas.
4. Intentar hacer una implementación básica del método de caminos sobre estrellas.
5. Implementar la definición general de la ecuación de Poisson (Laplace) con sus condiciones de frontera.
6. Aplicar los métodos a varios problemas electromagnéticos para compararlos con su solución analítica.

3.1. Alcances y limitaciones

Existen implementaciones de vanguardia como *Zombie* [10], pero el objetivo de este proyecto es aprender cómo funcionan los métodos de Monte Carlo para resolver ecuaciones diferenciales parciales, por lo que se utilizarán implementaciones simples, aunque no muy eficientes.

Es posible que las implementaciones simplificadas de los métodos libres de rejilla fallen, pero se quieren incluir para su estudio. Se usarán rejillas de 30×30 máximo para limitar el tiempo de ejecución.

Si bien estos métodos se pueden aplicar a muchos tipos de ecuaciones diferenciales parciales con mínimos cambios, el enfoque de este proyecto es resolver las ecuaciones de Poisson y Laplace para problemas de electromagnetismo. Los problemas se definirán posteriormente. Un ejemplo puede ser: resolver la ecuación de Laplace en $[0, 1]^2$ con $\varphi(x, y) = \sin(\pi x)$ en la frontera de arriba y $\varphi(x, y) = 0$ en el resto de la frontera, cuya solu-

ción analítica es

$$\varphi(x, y) = \frac{\sin(\pi x) \sinh(\pi y)}{\sinh \pi} \quad (18)$$

4. Resultados

La implementación para reproducir estos resultados se encuentra en el repositorio

<https://github.com/marcosj/mcpde>.

Primero se realizó un experimento para medir el tiempo de ejecución de los métodos de relajación y Monte Carlo por caminatas aleatorias, variando la cantidad de divisiones del retículo, para el problema 4 definido más adelante. El cuadro 1 compila los tiempos además del error RMSE que se analizará más tarde.

n	Relajación		Monte Carlo	
	t (s)	RMSE	t (s)	RMSE
10	0.007 91	5.31×10^{-5}	0.185	3.10×10^{-2}
20	0.103	2.94×10^{-5}	3.08	3.45×10^{-2}
30	0.507	4.80×10^{-5}	15.9	3.29×10^{-2}
40	1.43	8.12×10^{-5}	51.4	3.33×10^{-2}
50	3.37	1.25×10^{-4}	127	3.34×10^{-2}

Cuadro 1: Duración y error de los métodos de relajación y Monte Carlo en función del tamaño de la cuadrícula $n \times n$, con el número de caminatas fijo en 100.

La figura 3 muestra la discretización del potencial para los extremos de rejilla considerados.

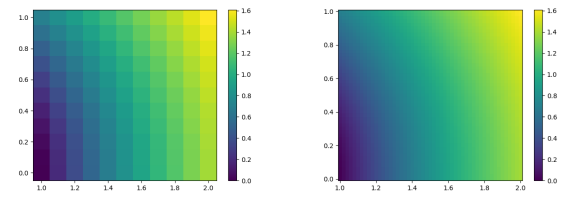


Figura 3: Ejemplo de rejilla, 10×10 (izquierda) y 50×50 (derecha), para el potencial del problema 4.

Como el tiempo de ejecución del método de Monte Carlo es tan alto, se fijó la rejilla en 25×25 celdas. Un segundo experimento para encontrar la relación entre el error de aproximación del método de Monte Carlo en función de la cantidad de caminatas aleatorias se recopila en el cuadro 2.

N	Monte Carlo	
	t (s)	RMSE
100	8.08	3.38×10^{-2}
300	23.6	1.80×10^{-2}
500	40.5	1.55×10^{-2}
700	56.0	1.28×10^{-2}
900	72.6	1.13×10^{-2}

Cuadro 2: Duración y error del método de Monte Carlo en función del número de caminatas aleatorias N , con el tamaño de rejilla fijo en 25×25 .

La figura 4 ilustra como para 100 caminatas la cantidad de artefactos es mucho mayor que para 900 caminatas.

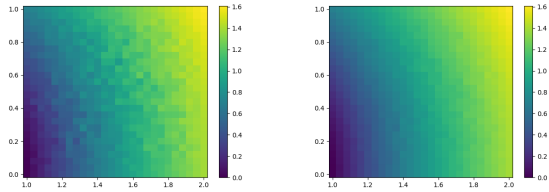


Figura 4: Potencial del problema 4 obtenido con el método de Monte Carlo, con 100 caminatas (izquierda), con 200 caminatas (derecha).

Para realizar las simulaciones, vamos a escoger $n = 25$ y $N = 250$ para tener un compromiso razonable en tiempo de ejecución. Además, vamos a definir las PDEs en términos de $f(x, y)$ en vez de la distribución de carga ρ , las cuales están relacionadas por

$$f(x, y) = -\frac{\rho(x, y)}{\varepsilon_0} \quad (19)$$

Problema 1 Ecuación de Laplace

$$\nabla^2 \varphi(x, y) = 0 \quad \in \quad \Omega = \left[0, \frac{1}{2}\right] \times \left[0, \frac{1}{2}\right] \quad (20)$$

$$\varphi(0, y) = 0 \quad \varphi\left(\frac{1}{2}, y\right) = 200y \quad (21)$$

$$\varphi(x, 0) = 0 \quad \varphi\left(x, \frac{1}{2}\right) = 200x \quad (22)$$

$$(23)$$

Solución analítica:

$$\varphi(x, y) = 400xy \quad (24)$$

El potencial obtenido con ambos métodos se muestra en la figura 5.

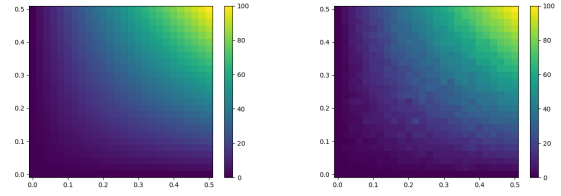


Figura 5: Potencial del problema 1 obtenido con el método de relajación (izquierda) y Monte Carlo (derecha), para una rejilla de 25×25 y 250 caminatas.

Problema 2 Ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \varphi(x, y) = xe^y \quad \in \quad \Omega = [0, 2] \times [0, 1] \quad (25)$$

$$\varphi(0, y) = 0 \quad \varphi(2, y) = 2e^y \quad (26)$$

$$\varphi(x, 0) = x \quad \varphi(x, 1) = ex \quad (27)$$

$$(28)$$

Solución analítica:

$$\varphi(x, y) = xe^y \quad (29)$$

El potencial obtenido con ambos métodos se muestra en la figura 6.

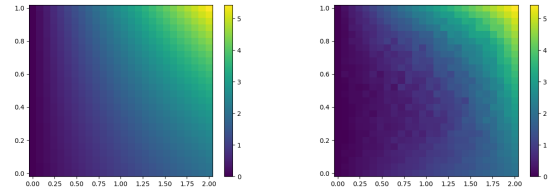


Figura 6: Potencial del problema 2 obtenido con el método de relajación (izquierda) y Monte Carlo (derecha), para una rejilla de 25×25 y 250 caminatas.

Problema 3 Ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \varphi(x, y) = 4 \quad \in \quad \Omega = [0, 1] \times [0, 2] \quad (30)$$

$$\varphi(0, y) = y^2 \quad \varphi(1, y) = (y - 1)^2 \quad (31)$$

$$\varphi(x, 0) = x^2 \quad \varphi(x, 2) = (x - 2)^2 \quad (32)$$

$$(33)$$

Solución analítica:

$$\varphi(x, y) = (x - y)^2 \quad (34)$$

El potencial obtenido con ambos métodos se muestra en la figura 7.

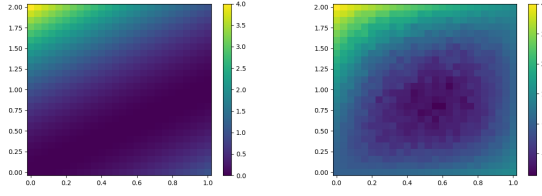


Figura 7: Potencial del problema 3 obtenido con el método de relajación (izquierda) y Monte Carlo (derecha), para una rejilla de 25×25 y 250 caminatas.

Problema 4 Ecuación de Laplace

$$\nabla^2 \varphi(x, y) = 0 \quad \in \quad \Omega = \left[0, \frac{1}{2}\right] \times \left[0, \frac{1}{2}\right] \quad (35)$$

$$\varphi(0, y) = 0 \quad \varphi\left(\frac{1}{2}, y\right) = 200y \quad (36)$$

$$\varphi(x, 0) = 0 \quad \varphi\left(x, \frac{1}{2}\right) = 200x \quad (37)$$

$$(38)$$

Solución analítica:

$$\varphi(x, y) = \ln(x^2 + y^2) \quad (39)$$

El potencial obtenido con ambos métodos se muestra en la figura 8.

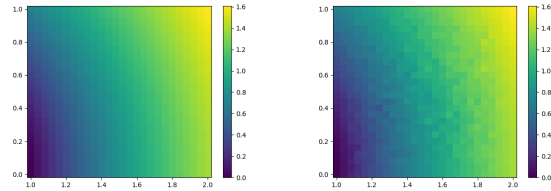


Figura 8: Potencial del problema 4 obtenido con el método de relajación (izquierda) y Monte Carlo (derecha), para una rejilla de 25×25 y 250 caminatas.

El cuadro 3 recoge los errores para los problemas electromagnéticos propuestos.

Prob.	Relajación RMSE	Monte Carlo RMSE
1	2.99×10^{-5}	1.27
2	1.65×10^{-5}	0.487
3	2.97×10^{-5}	0.877
4	3.62×10^{-5}	0.0230

Cuadro 3: Error RMSE para los métodos de relajación y Monte Carlo en relación a la solución analítica del potencial.

5. Análisis

Del cuadro 1 obtenemos la tendencia del tiempo de ejecución al refinar la cuadrícula. La figura 9 muestra como aumenta el tiempo del método de relajación con n

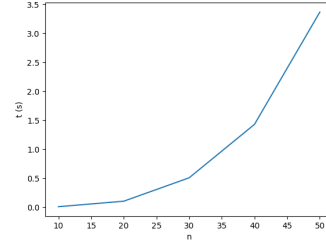


Figura 9: Tiempo de ejecución del método de diferencia finitas en función del tamaño de la rejilla.

mientras que la figura 10 muestra la comparación entre el aumento del tiempo para ambos métodos. Se aprecia como el método de Monte Carlo domina el tiempo de ejecución.

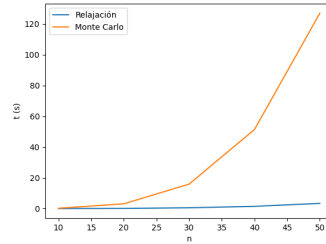


Figura 10: Tiempo de ejecución de los métodos de relajación y Monte Carlo en función del tamaño de la rejilla.

El método de relajación o de diferencias finitas consta de dos partes. Primero se propagan iterativamente hacia el interior los valores en la frontera mediante la ecuación (10). Esto genera un sistema de $(n - 1)^2$ ecuaciones, para un retículo de $(n + 1) \times (n + 1)$ vértices. Para resolver el sistema se utilizó el método de Gauß-Seidel, pero se puede emplear cualquier otro método.

El método de Monte Carlo de caminatas aleatorias es una simple aplicación de las ecuaciones (12)–(14) a cada punto del interior. Del cuadro 2 podemos obtener relaciones entre su tiempo de ejecución y la cantidad de caminatas aleatorias. Como muestra la figura 11 esta relación es lineal.

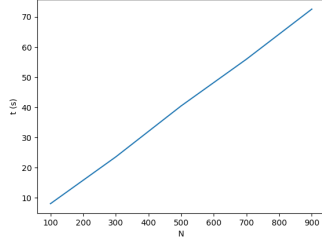


Figura 11: Tiempo de ejecución del método de Monte Carlo en función de la cantidad de caminatas aleatorias.

La figura 12 muestra la desviación del error entre la solución analítica y la aproximación por el método de Monte Carlo. Se observa como el RMSE cae exponencialmente ante el aumento de caminatas aleatorias.

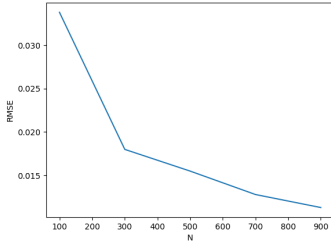


Figura 12: Raíz del error cuadrático medio (RMSE) entre la solución analítica y la aproximación por el método de Monte Carlo en función de la cantidad de caminatas aleatorias.

Se utilizó la raíz del error cuadrático medio (RMSE, por sus siglas en inglés) como métrica de desempeño de la estimación, para comparar la solución analítica con la aproximación

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{(n+1)^2} \sum (\varphi_{ij} - \hat{\varphi}_{ij})^2} \quad (40)$$

En la figura 13 se observa una comparación del RMSE entre ambos métodos para los problemas electromagnéticos estudiados. El error del método de diferencias finitas es muy pequeño, mientras que en las gráficas del potencial para el método de Monte Carlo se pueden observar artefactos donde la aproximación no es muy buena. En particular, la solución del problema 3 presenta muchos problemas. Cabe destacar que entre más caminatas mejor sería la aproximación.

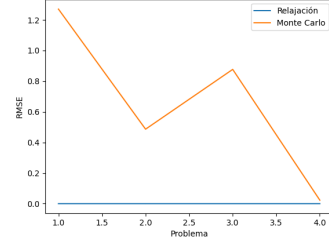


Figura 13: Raíz del error cuadrático medio (RMSE) entre la solución analítica y ambos métodos para los problemas electromagnéticos estudiados.

6. Conclusiones

El método de relajación o diferencias finitas sigue siendo la mejor opción para aproximar la solución de PDEs, cuando se dispone de un sólo procesador. El sistema de ecuaciones lineales generado representa su mayor costo computacional, pero existen bibliotecas de álgebra lineal que pueden resolverlo muy eficientemente.

El método de Monte Carlo de caminatas aleatorias es una alternativa que, si bien es muy pesada computacionalmente para un sólo procesador, es muy fácil de implementar y es completamente paralelizable. Cada caminata es independiente de cualquier otra, por lo que se pueden dividir entre varios procesadores en un clúster. Teóricamente, la aproximación perfecta se obtiene al tender las caminatas a infinito.

Mientras que el método de relajación está limitado a dos dimensiones, es trivial generalizar las caminatas aleatorias a una y tres dimensiones (o a más si la PDE lo permitiera).

Ambos métodos sufren de la limitante de una frontera rectangular que se divide en una cuadrícula. Otros métodos de Monte Carlo son libres de rejilla, como la caminata sobre esferas y la caminata sobre estrellas. Éstas a cada paso avanzan la mayor distancia posible en cualquier dirección por lo que convergen más rápido y se adaptan a cualquier geometría física.

6.1. Trabajo futuro

- Optimizar el código.
- Crear versiones más robustas de WoS y WoSt.
- Paralelizar los métodos para su ejecución en un clúster.

- Agregar métodos cuánticos de Monte Carlo.

Referencias

- [1] Z. Yu, L. Wu, Z. Zhou y S. Zhao, “A Differential Monte Carlo Solver For the Poisson Equation,” en *ACM SIGGRAPH 2024 Conference Papers*, Association for Computing Machinery, 2024. DOI: [10.1145/3641519.3657460](https://doi.org/10.1145/3641519.3657460).
- [2] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 5.^a ed. Cambridge University Press, 2023.
- [3] R. Burden, J. Faires y A. Burden, *Numerical Analysis*, 10.^a ed. Cengage Learning, 2015.
- [4] K. Pearson, “The Problem of the Random Walk,” *Nature*, vol. 72, n.º 294, pág. 292, 1905. DOI: [10.1038/072294b0](https://doi.org/10.1038/072294b0).
- [5] A. S. Sonawane, *Monte Carlo Method for Solving Laplace and Poisson Equations*, 2020. dirección: <https://github.com/s-ankur/montecarlo-pde>.
- [6] M. E. Muller, “Some Continuous Monte Carlo Methods for the Dirichlet Problem,” *The Annals of Mathematical Statistics*, vol. 27, n.º 3, págs. 569-589, 1956. DOI: [10.1214/aoms/1177728169](https://doi.org/10.1214/aoms/1177728169).
- [7] E. F. Yilmazer, D. Vicini y W. Jakob, *Solving Inverse PDE Problems using Grid-Free Monte Carlo Estimators*, 2022. arXiv: [2208.02114](https://arxiv.org/abs/2208.02114).
- [8] R. Sawhney y K. Crane, “Monte Carlo geometry processing: a grid-free approach to PDE-based methods on volumetric domains,” *ACM Trans. Graph.*, vol. 39, n.º 4, ago. de 2020. DOI: [10.1145/3386569.3392374](https://doi.org/10.1145/3386569.3392374).
- [9] R. Sawhney, B. Miller, I. Gkioulekas y K. Crane, “Walk on Stars: A Grid-Free Monte Carlo Method for PDEs with Neumann Boundary Conditions,” *ACM Transactions on Graphics*, vol. 42, n.º 4, págs. 1-20, jul. de 2023. DOI: [10.1145/3592398](https://doi.org/10.1145/3592398).
- [10] R. Sawhney y B. Miller, *Zombie: Grid-Free Monte Carlo Solvers for Partial Differential Equations*, 2023. dirección: <https://github.com/rohan-sawhney/zombie>.