

# Monte Carlo: Rozwiązywanie równania Poissona na siatce metodą błędzenia przypadkowego

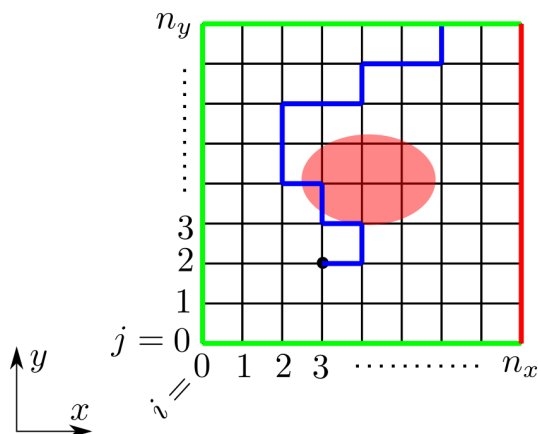
6 marca 2024

## 1 Wstęp

Naszym zadaniem jest znaleźć rozwiązanie równania Poissona opisującego rozkład potencjału elektrycznego

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

Problem rozwiążemy na siatce dwiema metodami: (a) relaksacji oraz (b) Monte Carlo. Wynik uzyskany metodą relaksacji potraktujemy jako "dokładny" i do niego porównamy wynik z MC. Problem definiujemy na siatce kwadratowej w 2D, geometrię przedstawia rys.1



Rysunek 1: Siatka węzłów na której szukamy rozwiązania równania Poissona. Na lewym, górnym i dolnym brzegu narzucony jest warunek Dirichleta, a na prawym brzegu (czerwony) warunek Neumanna. Kolorem niebieskim zaznaczono przykładową ścieżkę (łańcuch Markowa), który kończy się (absorpcja) na brzegu z warunkiem Dirichleta.

Definiujemy siatkę równoodległych węzłów  $\Delta_x = \Delta_y = \Delta$ , a położenie na siatce określamy następująco

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

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

Gęstość ładunku określa wyrażenie

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

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

Wprowadzamy warunki brzegowe:

- Dirichleta: lewy (L), górny (T) i dolny (B) brzeg

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

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

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

- Neumanna: prawy brzeg

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

Te informacje wystarczą aby znaleźć rozkład potencjału wewnątrz układu. Wartości parametrów:  $\epsilon$ ,  $\Delta$ ,  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $\rho_{max}$ ,  $\sigma_\rho$ ,  $V_L$ ,  $V_B$ ,  $V_T$  zostaną podane w sekcji 2

## 1.1 Metoda relaksacji

Aby sprawdzić czy otrzymane rozwiązanie MC jest poprawne, porównamy je z rozwiązaniem uzyskanym metodą nadrelaksacji. 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 pochodne ilorazami różnicowymi zdefiniowanymi na siatce

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

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

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

po obliczeniu prawej strony równania modyfikujemy wartość potencjału w punkcie (relaksacja punktowa). Do kontroli zbieżności rozwiązania wykorzystamy funkcjonal energii, który powinien osiągać minimum dla dokładnego potencjału

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

Wyznaczając wartość  $F$  w kolejnych iteracjach, proces relaksacji kończymy po osiągnięciu minimum co sprowadza się do spełnienia warunku

$$\left| \frac{F^{(k+1)} - F^{(k)}}{F^{(k+1)}} \right| < tol, \quad (np. tol = 10^{-6}) \quad (14)$$

Do wyznaczenia potencjału metodą relaksacji można posłużyć się poniższym pseudokodem

```

=====
                          NADRELAKSACJA
=====
inicjalizacja parametrów:
       $n_x, n_y, \Delta, \epsilon,$ 
       $\omega = 1.8, tol = 10^{-6}, itmax = 10^4$ 
       $F_{old} = 0, F_{new} = 0$ 
tworzymy tablice:
       $V[n_x + 1][n_y + 1], \rho[n_x + 1][n_y + 1]$ 
inicjalizacja tablic:
       $V_{i,j} = 0 (i = 0, 1, \dots, n_x; j = 0, 1, \dots, n_y)$ 
       $\rho_{i,j} = \rho(x, y)$ 

WB Dirichleta:
      for(j=0; j<=ny; j++)       $V_{0,j} = \text{wzór (6)}$ 
      for(i=0; i<=nx; i++){
           $V_{i,0} = \text{wzór (7)}$ 
           $V_{i,ny} = \text{wzór (8)}$ 
      }

for(it=1; it<itmax; it++){

    for(i=1; i<n_x; i++)
        for(j=1; j<n_y; j++)
             $V_{i,j} = (1 - \omega)V_{i,j} + \frac{\omega}{4} [V_{i+1,j} + V_{i-1,j} + V_{i,j+1} + V_{i,j-1} + \frac{\Delta^2}{\epsilon} \rho_{i,j}]$ 

WB: Neumanna
for(j=1; j<ny; j++)  $V_{n_x,j} = V_{n_x-1,j}$ 

Sprawdzamy warunek zbieżności potencjału - liczymy funkcjonal
 $F_{old} = F_{new}$ 
 $F_{new} = 0$ 
for(i=1; i<n_x; i++){
    for(j=1; j<n_y; j++){
         $E_x = (V_{i+1,j} - V_{i-1,j})/(2\Delta)$ 
         $E_y = (V_{i,j+1} - V_{i,j-1})/(2\Delta)$ 
         $F_{new} = F_{new} + (E_x^2 + E_y^2)/2 - \rho_{i,j} \cdot V_{i,j}$ 
    }
}
if (  $\left| \frac{F_{new} - F_{old}}{F_{new}} \right| < tol$  ) break
}
=====

```

Tablicę z wartościami potencjału zachowujemy do porównania z wynikami MC.

## 1.2 MC: metoda błędzenia przypadkowego na siatce

Do rozwiązywania równania Poissona zastosujemy metodę w wersji podanej na wykładzie. Zatem dla każdego punktu na siatce (poza brzegami) generujemy ciąg  $N$  łańcuchów Markowa. Każdy łańcuch

próbkujemy rozkład gęstości i jeśli dotrze do brzegu z warunkiem Dirichleta ( $x_{end}, y_{end}$ ) tam zostaje zaabsorbowany dając wkład do rozwiązania. Na brzegu z warunkiem Neumanna, wędrowiec może się od niego odbić lub poruszać wzdłuż brzegu z odpowiednimi prawdopodobieństwami. Rozwiązanie konstruujemy uśredniając informacje pochodzące od wędrowców startujących z wybranego węzła ( $x_0, y_0$ ) dla którego chcemy znaleźć potencjał. Matematycznie problem formułujemy następująco

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

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

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

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

Wzory (16) i (17) wykorzystamy do znalezienia oszacowania wartości średniej w dowolnie wybranym węźle ( $i_0, j_0$ ) oraz odchylenia standardowego

$$\overline{V_{i_0, j_0}} = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \Delta V_l \quad (18)$$

$$\overline{V_{i_0, j_0}^2} = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N (\Delta V_l)^2 \quad (19)$$

$$\sigma_{\overline{V_{i_0, j_0}}} = \sqrt{\frac{\overline{V_{i_0, j_0}^2} - (\overline{V_{i_0, j_0}})^2}{N}} \quad (20)$$

Uwaga: we wzorach (18) i (19) wartość  $N$  oznacza liczbę łańcuchów, które zostały zaabsorbowane na brzegu z warunkiem Dirichleta. Liczba generowanych łańcuchów może być większa, lecz ze względu na skończoną długość pojedynczego łańcucha jeśli nie dotrze on do brzegu określonej liczbie kroków to jest kasowany i nie daje wkładu do wyniku końcowego.

Do znalezienia potencjału metodą MC można wykorzystać poniższy pseudokod. Wykorzystamy w nim możliwość blokowania węzłów (tablica elementów  $B_{i,j}$ ), 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

```
=====
MONTE CARLO
=====
```

```
inicjalizacja parametrów:
```

```
  nx, ny, Δ, ε
```

```
  Nchains <- maksymalna liczba łańcuchów
```

```
  nlength <- maksymalna długość łańcucha
```

```
tworzymy tablice:
```

```

V[nx + 1][ny + 1]
σV[nx + 1][ny + 1] <- tablica odchyłeń std potencjału
ρ[nx + 1][ny + 1]
B[nx + 1][ny + 1] <- wskaźnik WB Dirichleta
S[nx + 1][ny + 1] <- tablica łańcuchów zakończonych absorpcją
inicjalizacja tablic:

```

```

Vi,j = 0 (i = 0, 1, ..., nx; j = 0, 1, ..., ny)
Bi,j = 0 (i = 0, 1, ..., nx; j = 0, 1, ..., ny)
ρi,j = ρ(x, y)

```

WB Dirichleta:

```

for(j=0; j<=ny; j++){
    V0,j = wzór (6)
    B0,j = 1
}
for(i=0; i<=nx; i++){
    Vi,0 = wzór (7)
    Vi,ny = wzór (8)
    Bi,0 = 1
    Bi,ny = 1
}

```

potencjał wyznaczamy dla każdego węzła (i<sub>0</sub>, j<sub>0</sub>) w tablicy:

```

for(i0=1; i0 < nx; i0++){
    for(j0=1; j0 < ny; j0++){
        sum_V1 = 0 <-wkłady do  $\overline{V_{i_0, j_0}}$ 
        sum_V2 = 0 <-wkłady do  $\overline{V_{i_0, j_0}^2}$ 
        kchains = 0 <-rzeczywista liczba zaabsorbowanych łańcuchów
        dla węzła generujemy N łańcuchów:
        for(N=1; N<=Nchains; N++){
            i = i0 <-każdy łańcuch startuje z tego samego węzła
            j = j0
            g = 0 <-akumulujemy wkłady od gęstości ładunku
            tworzymy pojedynczy łańcuch:
            for(n=1; n<=nlength; n++){
                błądzenie:
                U1 ~ U(0,1)
                m=floor(4U1) //m={0,1,2,3}
                if(m==0) i--;
                else if(m==1) i++;
                else if(m==2) j--;
                else if(m==3) j++;
                odbicie na prawym brzegu:
                if(i==(nx+1))i=nx-1
            absorpcja - WB Dirichleta - kończymy łańcuch:
            if(Bi,j==1){
                dV=Vi,j+g <- wzór (17)
                sum_V1=sum_V1+dV <- wzór (18)
                sum_V2=sum_V2+(dV)2 <- wzór (19)
            }
        }
    }
}

```

```

                                kchains++ <- liczba zaabsorbowanych węzłów
                                break <-kończymy łańcuch
                                }
                                wkład od gęstości gdy brak absorpcji:
                                 $g = g + \frac{\rho_{i,j} \Delta^2}{4\epsilon}$ 
                                }//n
                                }//N
liczymy wartość średnią i odchylenie std:
V1 =  $\frac{sum\_V1}{kchains}$ 
V2 =  $\frac{sum\_V2}{kchains}$ 
Vi0,j0 = V1 <-zachowujemy wartość potencjału w tablicy
σVi0,j0 =  $\sqrt{\frac{V2-(V1)^2}{kchains}}$  <- zachowujemy odchylenie std
Bi0,j0 = 0/1 <-modyfikacja warunku Dirichleta
Si0,j0 =  $\frac{kchains}{Nchains}$  <- procent zaabsorbowanych łańcuchów

}//j0
}//i0

```

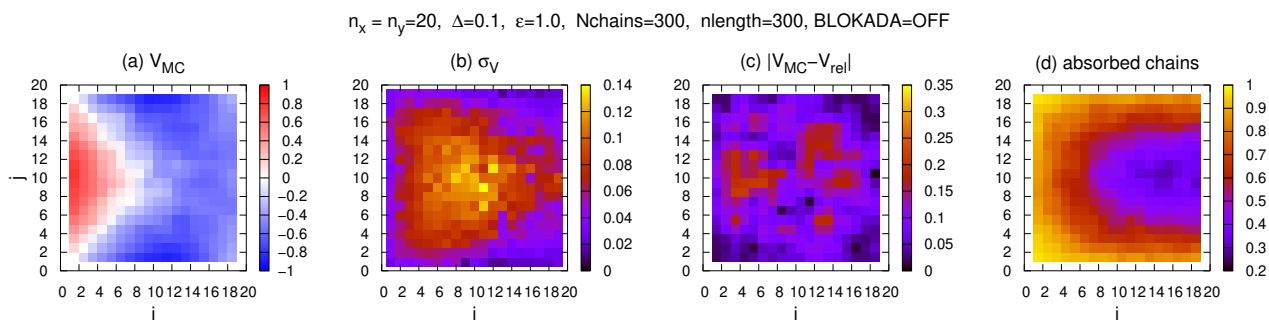
=====

## 2 Zadania do wykonania

1. Przyjmujemy wartości parametrów:  $n_x = n_y = 30$ ,  $\Delta = 0.1$ ,  $V_L = 1$ ,  $V_T = V_B = -1$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $x_{max} = \Delta \cdot n_x$ ,  $y_{max} = \Delta \cdot n_y$ ,  $\rho_{max} = 1$ ,  $\sigma_\rho = x_{max}/10$
2. Zaimplementować metodę nadrelaksacji i wyznaczyć potencjał, przyjęc warunek zakończenia  $tol = 10^{-6}$ , maksymalną liczbę iteracji  $itmax = 10^4$ , parametr relaksacji  $\omega = 1.8$ . Potencjał zachować w tablicy  $V_{rel}$  do porównania z wynikami MC.
3. Zaimplementować metodę MC, następnie wyznaczyć rozkład potencjału, odchylenia standardowego oraz procent zaabsorbowanych łańcuchów dla każdego węzła w układzie oraz poniższych zestawów parametrów:
  - $N_{chains} = 100$ ,  $n_{length} = 100$ ,  $B_{i_0,j_0} = 0$  (nie blokujemy węzłów z wyznaczonym potencjałem)
  - $N_{chains} = 100$ ,  $n_{length} = 100$ ,  $B_{i_0,j_0} = 1$  (blokujemy węzły po wyznaczeniu w nich potencjału)
  - $N_{chains} = 300$ ,  $n_{length} = 300$ ,  $B_{i_0,j_0} = 1$  (blokujemy węzły po wyznaczeniu w nich potencjału)
4. Po wykonaniu obliczeń dla każdego przypadku proszę sporządzić mapy 2D:
  - potencjału  $V_{MC}(x, y)$  (z metody MC)

- różnicy potencjałów dla metod MC i nadrelaksacji  $|V_{MC}(x, y) - V_{rel}(x, y)|$
  - rozkładu odchylenia standardowego znalezionej potencjału  $\sigma_{V_{MC}}(x, y)$
  - tablicy  $S(x, y)$  czyli ułamka zaabsorbowanych łańcuchów
5. W raporcie proszę przeanalizować zmiany potencjału  $V_{MC}$  dla trzech przypadków, wielkość błędu  $|V_{MC}(x, y) - V_{rel}(x, y)|$  porównać z rozkładem odchylenia standardowego  $\sigma_{V_{MC}}(x, y)$ , określić wpływ liczby zaabsorbowanych łańcuchów na dokładność wyniku (w których punktach mapy liczba zaabsorbowanych łańcuchów jest duża a w których mała?). Proszę skomentować wpływ blokady w węzłach, w których wyznaczono potencjał na wynik końcowy oraz wydajność metody.

### 3 Przykładowe wyniki



Rysunek 2: Przykładowe wyniki uzyskane dla  $n_x = n_y = 20$  przy założeniu, że punkty w których znaleziono potencjał nie są blokowane ( $B_{i_0, j_0} = 0$  w pseudokodzie MC). Rysunek (d) pokazuje procent łańcuchów Markowa  $S(x, y)$ , które zakończyły się na brzegu z warunkiem Dirichleta dając wkład do rozwiązania (pozostałe zostały skasowane).