

HÜCREDE-PARÇACIK YÖNTEMİNDE FARKLI POISSON DENKLEMİ ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ

Buğra Aydın¹, Said Semih Karadoğan², Elif Kaya³ Enes Kocabaş⁴ ve Nevsan Şengil⁵
Türk Hava Kurumu Üniversitesi, Ankara

ÖZET

Bu çalışmada Hücrede-Parçacık yöntemi kullanılarak pozitif yüklü oksijen moleküllerinin 2-boyutlu bir geometride bir elektrik potansiyeli altındaki hareketleri incelendi. Hücrede-Parçacık yöntemi kullanılarak gerçekleştirilen benzetimde eksi yüklü elektronlar ve artı yüklü oksijen molekülleri birbirleri ile doğrudan Coulomb kuvveti yolu ile değil, yüklü parçacıkların oluşturduğu elektrik alanı üzerinden etkileşmektedirler. Böylelikle hesaplama zamanından tasarruf sağlanmaktadır. İlâveten bu benzetimde sadece elektron ve oksijen iyonları arasındaki etkileşimler göz önüne alınmış olup, elektron, iyon ve yüksüz parçacıklar arasında meydana gelen çarpışmalar benzetime dahil edilmemiştir. Hücrede-Parçacık yönteminde elektrik potansiyelinin hesaplanmasında Poisson denklemi farklı yöntemler kullanılarak çözülmektedir. Yapılan çalışmada Poisson denkleminin çözümünde Gauss-Seidel, Çoklu çözüm ağı (Multigrid) ve Monte Carlo yöntemleri kullanılmış ve elde edilen hesaplama süreleri ve çözüm hataları birbirleri ile karşılaştırılarak en uygun çözüm yöntemi belirlenmeye çalışılmıştır.

GİRİŞ

Madde doğada katı, sıvı, gaz ve plazma şekilde bulunabilmektedir. Evrenin büyük bir kısmı plazmadan oluşmaktadır [Chu, ve Lu, 2013]. Normal şartlar altında elektronlar ve çekirdek birbirlerine kuvvetli bağlar ile bağlanarak yüksüz moleküller oluştururlar. Bu bağların çeşitli etkilerden dolayı kırılması ile eksi yüklü elektronlar ve artı/eksi yüklü moleküller oluşur. Genelde bir plazma ortamında eksi ve artı yüklü parçacıkların sayısı yaklaşık olarak birbirine eşittir (sanki-yüksüz). Plazmaların incelenmesinde manyeto akışkanlar dinamiği gibi matematiksel modellerin yanı sıra Hücrede-Parçacık gibi matematiksel ve fiziksel benzetim modellerinin bir arada kullanıldığı melez yöntemler de kullanılmaktadır.

Hücrede-Parçacık yöntemi genelde çok sayıda parçacığın uzun erişimli kuvvetler yolu ile birbirleri ile etkileştikleri astrofizik ve plazma problemlerinin çözümünde kullanılmaktadır. N sayıda parçacığın hareket denklemlerinin çözümü için gereken hesaplama yükü $O(N^2)$ olmaktadır. Çok sayıda parçacığın yer aldığı bir hesaplamada, çözüm süreleri en kuvvetli bilgisayar sistemlerinin kullanıldığı durumlarda bile makul beklentilerin dışında kalabilmektedir. Hücrede-Parçacık yöntemi ile bu hesaplama yükü $O(N \log N)$ ile orantılı olmaktadır [Almojel, 2000].

Hücrede-Parçacık yönteminde hesaplama yükünü azaltmak için her bir yüklü parçacığın birbiri ile Coulomb kuvvetleri aracılığı ile etkileşmesi yerine, yüklü parçacıklar toplamda oluşturdukları elektro-manyetik alanlar üzerinden birbirleri ile etkileşirler [Fitzpatrick, 2015]. Bu alanların hesaplanması için Maxwell denklemlerinin çözülmesi gerekmektedir. Manyetik alan bu çalışmada olduğu gibi ihmal edilecek derecede düşükse, sadece durağan elektrik alanın hesaplanması yeterli olmaktadır. Elektrik alanının hesaplanması için çözüm ağı üzerinde ayrılaştırılmış Poisson denkleminin çözülmesi gerekmektedir. Bu işlemin çözüm süresinin kısaltılması ile Hücrede-Parçacık yönteminin toplam çözüm süresi üzerinde önemli bir tasarruf sağlanabilmektedir. Poisson denkleminin çözümü için Gauss-Seidel, Çoklu ağ, Monte-Carlo gibi farklı yöntemler geliştirilmiştir. Bu çalışmada Poisson denkleminin çözümü için önerilen başlıca yöntemler incelenmiştir. Bahse konu yöntemler çözüm süreleri ve çözüm hataları temelinde karşılaştırılarak en etkin çözüm yöntemi belirlenmeye çalışılmıştır.

¹ Lisans öğrencisi, E-posta: s180222006@stu.thk.edu.tr

² Lisans öğrencisi, E-posta: s170222001@stu.thk.edu.tr

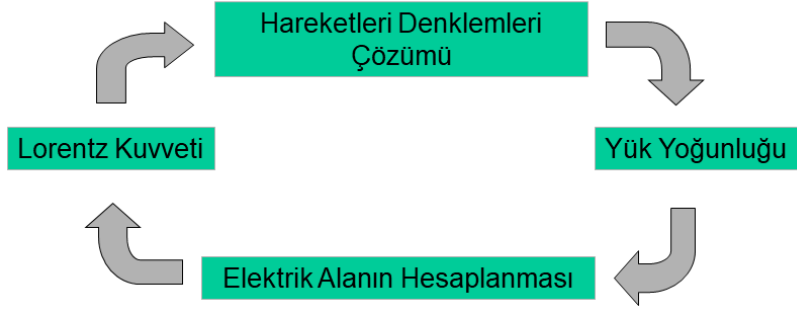
³ Lisans öğrencisi, E-posta: s180222002@stu.thk.edu.tr

⁴ Lisans öğrencisi, E-posta: s170222004@stu.thk.edu.tr

⁵ Prof. Dr., E-posta: nsengil@thk.edu.tr

YÖNTEM

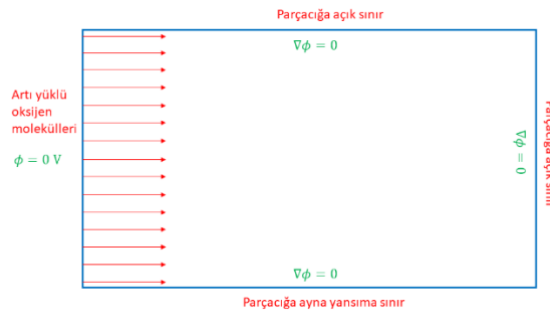
Hücrede-Parçacık yöntemi dört ana adımdan oluşur (Şekil 1). İlk safhada yüklü parçacıkların konumları ve yük değerleri kullanılarak, çözüm ağı üzerinde yük yoğunluğu hesaplanır. İkinci safhada yük yoğunluğu temel alınarak Poisson denklemi çözülür ve ardından çözüm ağı üzerinde oluşan durağan elektrik alanı hesaplanır. Üçüncü safhada yüklü parçacıkların üzerine etkiyen Lorentz kuvveti hesaplanır. Son dördüncü safhada ise yüklü parçacıkların hareket denklemleri çözülerek bu parçacıkların yeni hız ve konumları hesaplanır [Dawson, 1983].



Şekil 1: Hücrede-Parçacık yöntemi safhaları

UYGULAMALAR VE DEĞERLENDİRME

Bu çalışmada daha önceden üzerinde çalışılan bir probleminin [Brieda, 2010] benzeri ele alınmıştır (Şekil 2). Bu problemde artı yüklü oksijen molekülleri 2-boyutlu çözüm alanının sol sınırından içeri atılmaktadır. Diğer sınır koşulları parçacıklar için açık sınırdır. Elektrik potansiyeli için olan sınır koşulları ise sol kenarda Dirichlet, diğer kenarlarda ise Neumann sınır koşulu olarak verilmiştir. Hesaplama alanında uzunluk ölçeği Debye uzunluğu, zaman adımı ise yüklü oksijen moleküllerinin en fazla bir Debye uzunluğu kadar yer değiştirmesine olanak verecek şekilde hesaplanmıştır.



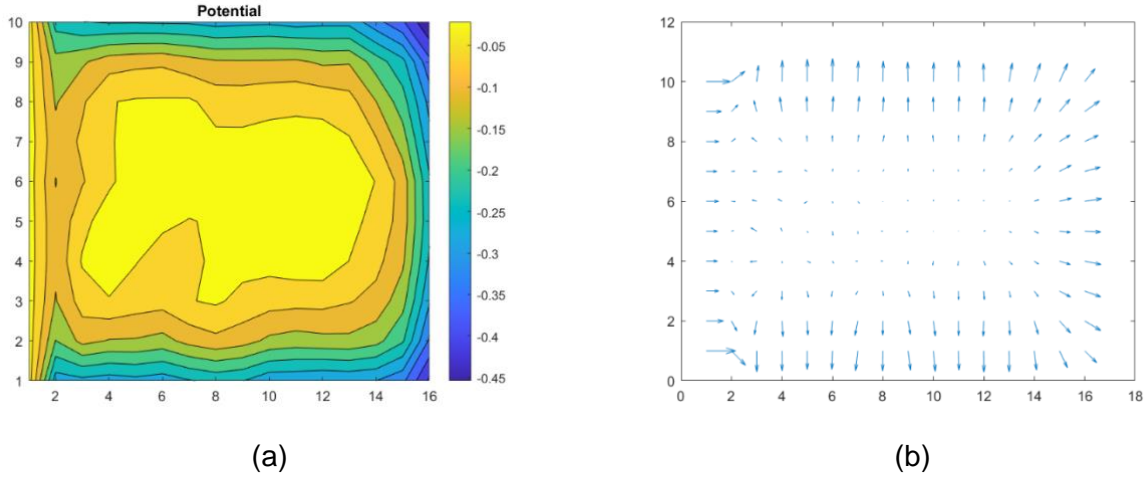
Şekil 2: Hesaplama bölgesi ve sınır koşulları

Hesaplama verimliliğini arttırmak için eksi yüklü elektronlar parçacık yerine akışkan olarak kabul edilmiştir. Bu kabulün yapılması ile oluşan Poisson denklemleri aşağıda verilmiştir (1).

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} \left[n_i - n_0 \exp\left(\frac{\phi - \phi_0}{kT_e}\right) \right] \quad (1)$$

Bu denklemde ϕ , $x - y$, e , ϵ_0 , n_i , n_0 , k , T_e sırası ile potansiyeli, konumu, birim yükü, elektriksel geçirgenliği, değişken artı ve sabit yük yoğunluklarını, Boltzmann sabitini ve elektron sıcaklığını göstermektedir.

Örnek problemin MATLAB üzerinde tarafımızdan geliştirilen Hücrede-Parçacık çözücüsü ile elde edilen potansiyel ve elektrik alanı vektör değerleri (16×10) çözüm ağı üzerinde Şekil 3'te gösterilmiştir.



Şekil 3: (a) Potansiyel değerler (b) Elektrik vektör değerleri

Farklı Çözüm Yöntemleri

Poisson denkleminin çözümünde Gauss-Seidel, Çoklu ağ ve Monte Carlo yöntemleri gibi farklı yöntemler denenmiş ve bu yöntemlerin çözüm hızları ve yakınsama doğrulukları araştırılmıştır. Bu amaçla yapılan çalışmada tam çözüm sonuçları bilinen bir fonksiyon (2) seçilmiş ve ardından Poisson denklemi oluşturulmuştur (3).

$$f(x, y) = \sin(x) \cos(y) \quad (2)$$

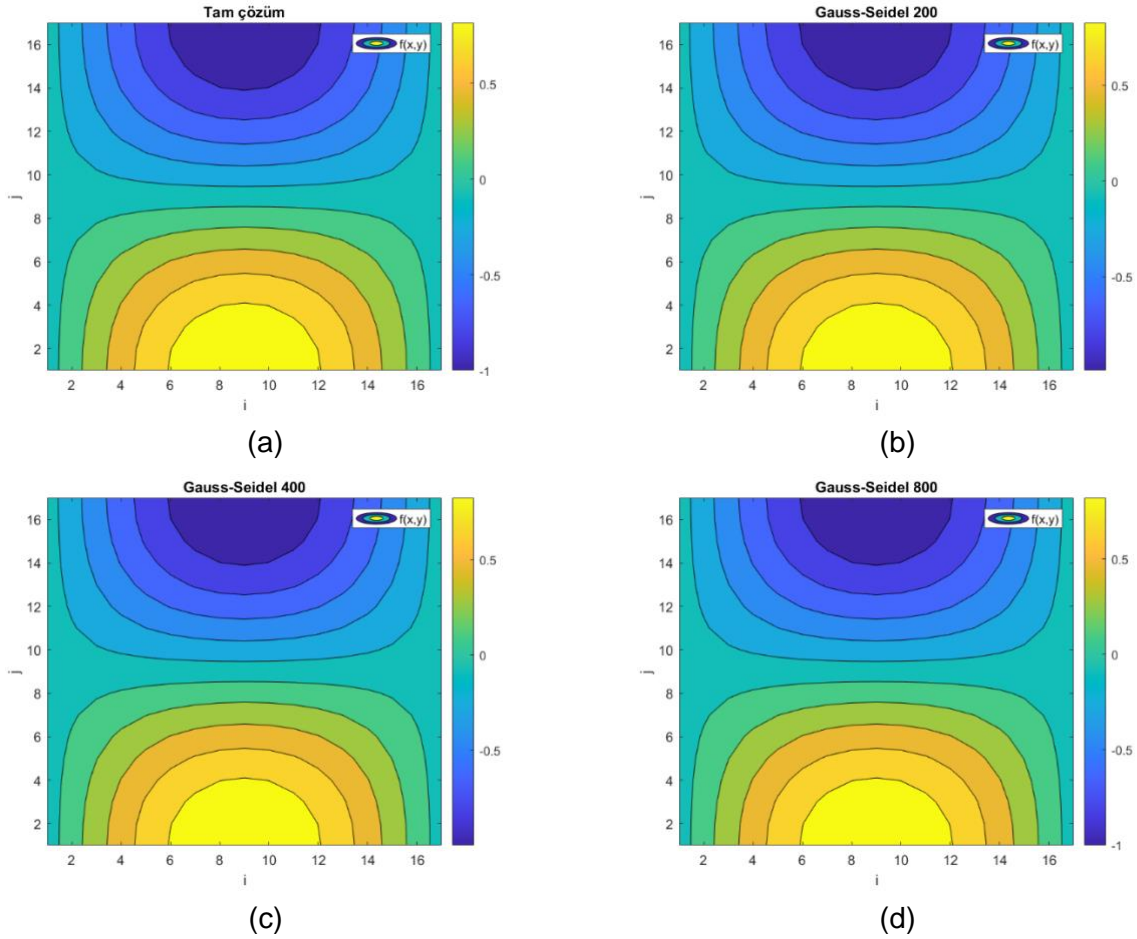
$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = g(x, y) = -2 \sin(x) \cos(y) \quad (3)$$

Takiben Poisson denklemi sayısal çözüm için sonlu farklar yöntemi kullanılarak ayrıştırılmıştır (4).

$$f(i, j) = 0.25 [(f(i-1, j) + f(i+1, j) + f(i, j-1) + f(i, j+1)) - dx^2 g(x, y)] \quad (4)$$

Çözüm ağı hassasiyeti her iki eksen boyunca Hücrede-Parçacık çözümüne yakın olması için (17×17) olarak belirlenmiştir. Her iki yönde de ayrıklaştırma mesafesi eşit alınmıştır ($h = dx = dy$).

Testlerde Windows 11 işletim sistemi kurulu 8 GB RAM, Intel(R) Core (TM) i5-8250U CPU @ 1.80GHz özellikli Intel Surface Laptop 2 kullanılmıştır. Denenen çözüm yöntemleri 64 bit MATLAB R2021b geliştirme ortamında kendimiz tarafından yazılmıştır. Hazır/ticari çözümler kullanılmamıştır. Çalışmanın ilk aşamasında Hücrede-Parçacık benzetiminde kullandığımız Gauss-Seidel [Sauer, 2006] yöntemi farklı yinleme sayılarında çözüm süresi ve yakınsama doğruluğu açısından incelenmiştir.



Şekil 4: (a) Tam çözüm (17 × 17) (b) Gauss-Seidel 200 (c) Gauss-Seidel 400 (d) Gauss-Seidel 800

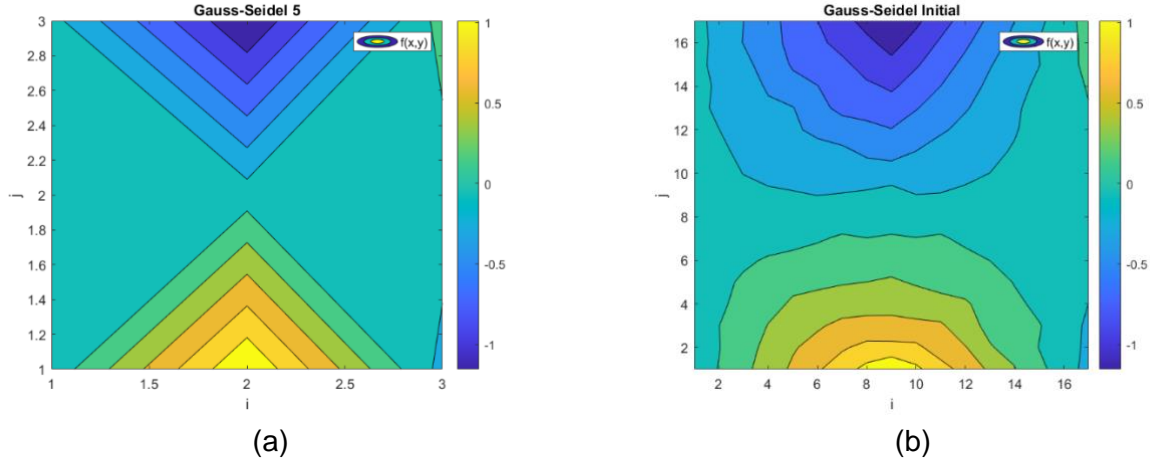
Poisson denkleminin çözümünde oluşan hata miktarını hesaplamakta kullanılan denklem aşağıda sunulmuştur.

$$e = \sum_{i=1}^{i_{max}} \sum_{j=1}^{j_{max}} \|f_{exact}(i,j) - f(i,j)\| \quad (5)$$

Bu denklem kullanılarak farklı yineleme sayıları için hesaplanan hata değerleri ve ortalama çözüm süreleri Tablo-1'de sunulmuştur.

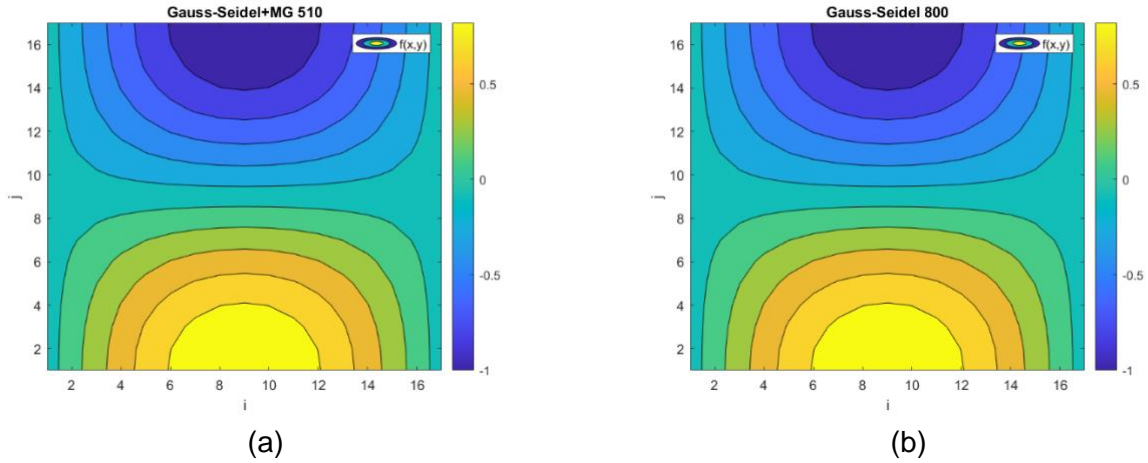
Tablo-1: Gauss-Seidel çözüm süreleri ve hata değerleri					
Yineleme sayısı	100	200	400	800	1600
Ortalama çözüm süresi (s)	0.018428	0.022785	0.027157	0.039322	0.060266
Toplam hata	8.7	2.2206	0.8683	0.3399	0.3159

Bir diğer çözüm yöntemi ise Çoklu Ağ yöntemidir [Briggs, Henson ve McCormick, 2000]. Bu yöntemde Poisson denklemini önce yine Gauss-Seidel yöntemi kullanılarak az sayıda çözüm noktası (3x3) ve az sayıda yineleme kullanılarak çözülür. Takiben elde edilen çözüm değerleri sırası ile (5x5), (9x9) ve (17x17) sayıda noktadan oluşan çözüm ağına ara değeri tekniği kullanılarak taşınır. Böylelikle Gauss-Seidel yönteminde ilk başlangıç değerleri gerçeğe yakın olarak tahmin edilmiş olur.



Şekil 5: (a) Poisson denkleminin (3x3) ağda 5 yineleme ile çözümü (b) Çözümün (17x17) çözüm ağına taşınmış hali

Bu noktada Poisson denklemini (17x17) çözüm ağına yine Gauss-Seidel yöntemi kullanılarak yineleme ile çözülür. Çoklu çözüm ağından elde edilen başlangıç değerleri kullanıldığında 800 yineleme yerine sadece 510 yineleme yapılması yeterli olmaktadır (Şekil 6).



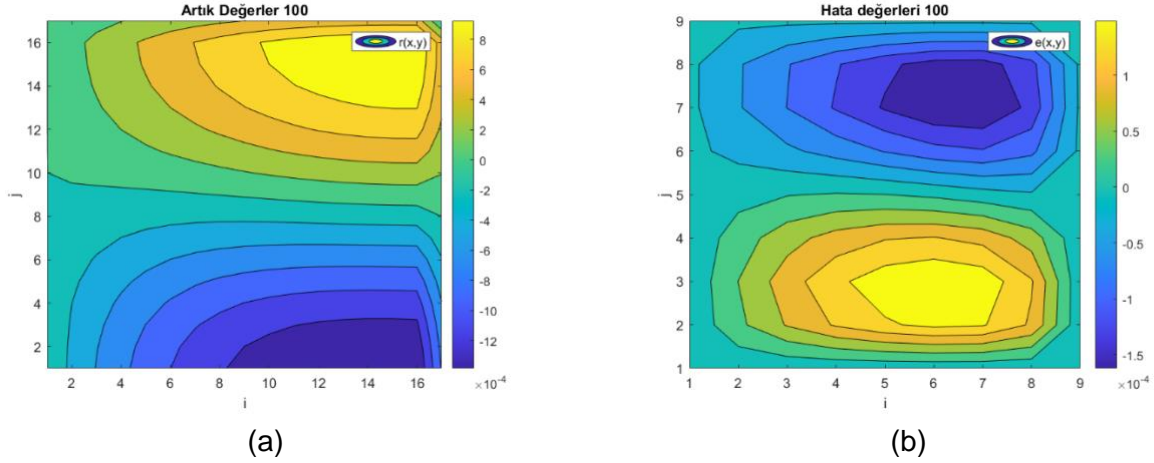
Şekil 6: (a) Gauss-Seidel yönteminde tahmini başlangıç değerleri kullanıldığında (b) Gauss-Seidel yönteminde başlangıç değerleri olarak 0 kullanıldığında

Çoklu ağ yönteminde yüksek sayılı çözüm noktalarında yapılan yinelemeler sonucunda yüksek frekanslı hatalar giderilebilmektedir. Ama bu yöntemin diğer yöntemlere nazaran üstün yanı, az sayıda çözüm noktası olan ağlarda oluşan düşük frekanslı hatalarında kullanılarak daha az sayıda yineleme sayısı ile tam çözüme yaklaşılabilmesidir. Bu amaçla Poisson denkleminin en yüksek sayıda ağ noktası (Ω^h) ile elde edilen yaklaşık çözüm değerleri (f) kullanılarak önce artık değerler (r) (6) ve takiben bir alt kademe çözüm ağına (Ω^{2h}) hata değerleri (e) hesaplanır (7).

$$r = g - [A] f \quad (6)$$

$$[A]e = r \quad (7)$$

Yukarıda belirtilen işlemlere ait değerler Şekil 7'de sunulmuştur.

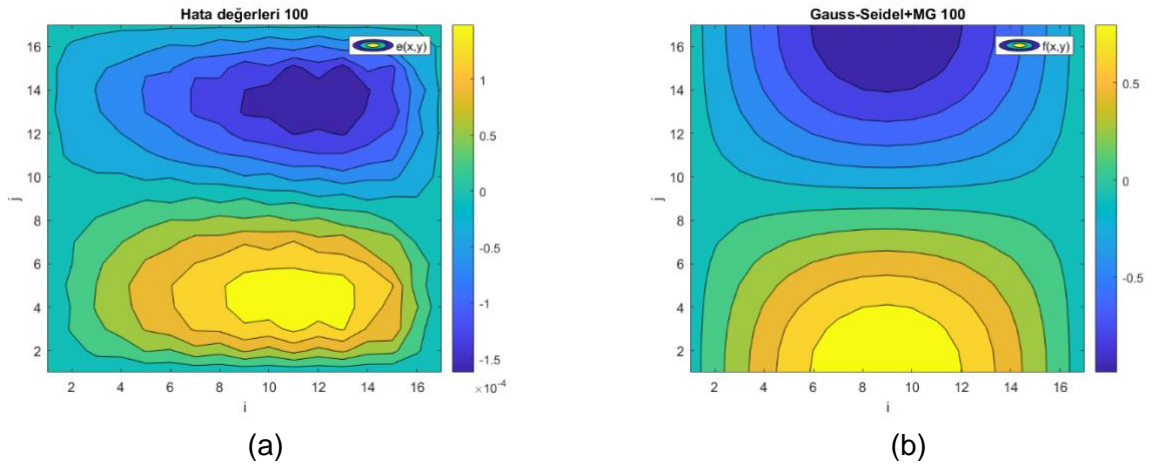


Şekil 7: 100 yineleme için (a) üst seviyede (17 x 17) artık değer (b) alt seviyede (9 x 9) hata değerleri

Hesaplanan hata ara değeri tekniği kullanılarak tekrar bir üst seviye çözüm ağına taşınır ve yaklaşık çözümden çıkarılır (8). Böylece hatasız çözüme erişilmeye çalışılır.

$$f^h \leftarrow f^h + e \quad (8)$$

Yukarıda belirtilen işlemlere ait değerler Şekil 8'de sunulmuştur.

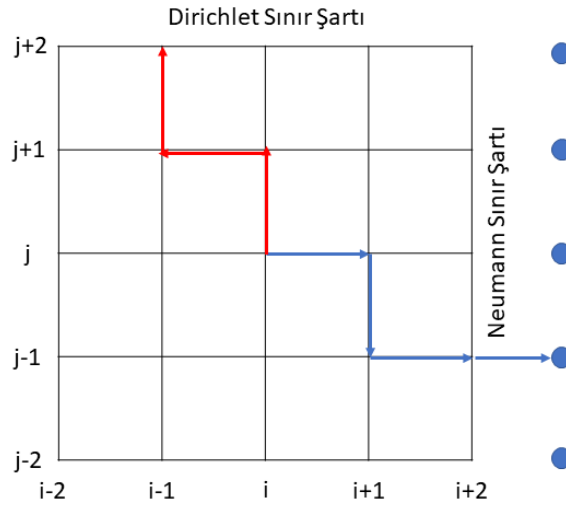


Şekil 8: (a) Üst seviyeye taşınmış hata değerleri (b) Hatadan arındırılmış üst seviye ağ değerleri

Çoklu ağ yönteminde farklı çözüm ağlarında farklı yineleme sayıları için hesaplanan hata değerleri ve ortalama çözüm süreleri Tablo-2'de sunulmuştur.

Yineleme sayısı (3x3)	5	5	5	5
Yineleme sayısı (17x17)	100	200	400	800
Yineleme sayısı (9x9)	20	20	20	20
Ortalama çözüm süresi (s)	0.106928	0.109573	0.115511	0.139013
Toplam hata	3.2321	0.6186	0.3739	0.3199

Poisson denkleminin çözümü için en son olarak Monte Carlo yöntemi kullanılmıştır [Delaurentis, Romero, 1990]. Bu yöntemde her bir çözüm ağı noktasından başlanarak ağ üzerinde en yakın komşu noktaya ilerlenir. Gidilecek komşu nokta rastgele olarak seçilir. İlerlenecek yollar çözülecek denklem temel alınarak belirlenir. Bu çalışmada Poisson denklemi için sonlu farklar yöntemi (4) temel alınmıştır (Şekil 9).



Şekil 9: Monte Carlo yönteminde sınırlara ilerleme yöntemi

Her bir çözüm ağı noktası için çok sayıda yineleme sayısına ihtiyaç vardır. Çünkü Monte Carlo yönteminde hata yineleme sayısının (N) kare kökü ile ters orantılıdır (9) [Bird, 1976].

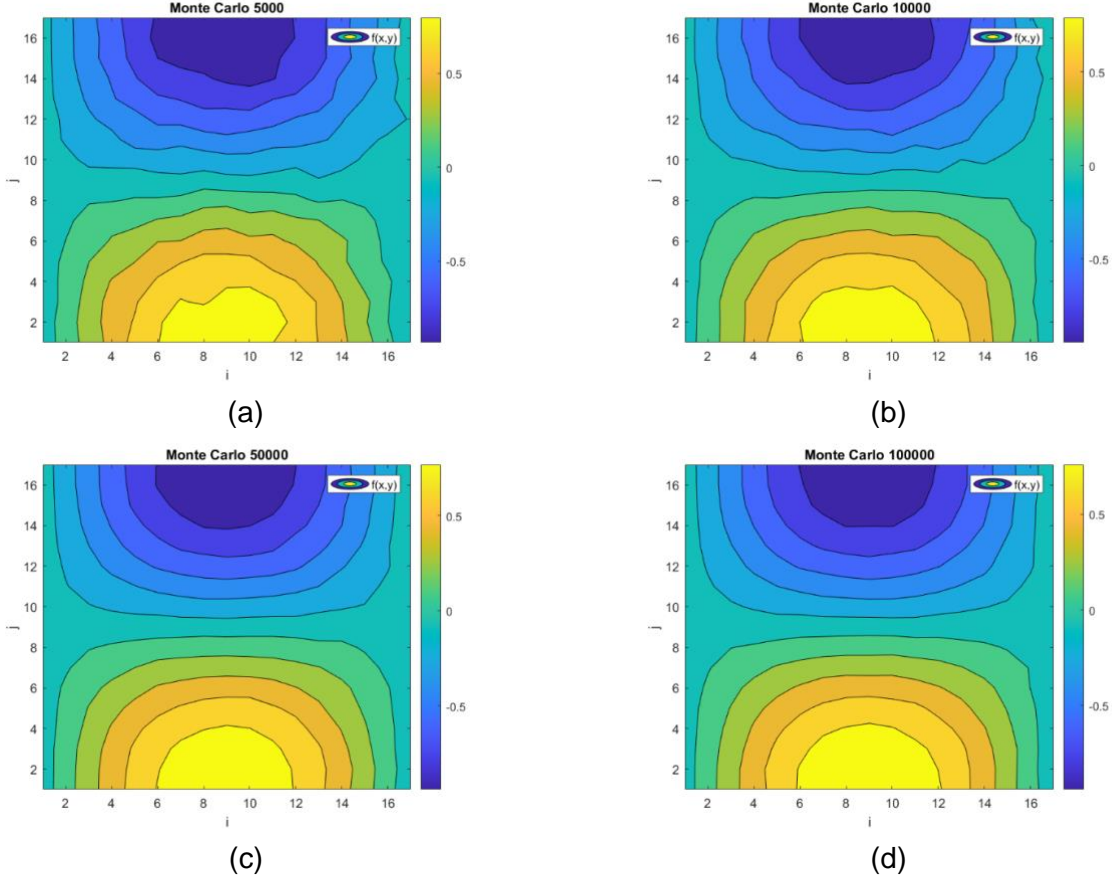
$$e \cong \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (9)$$

Çözüm ağı üzerinde yer alan her bir noktadan başlayarak rastgele adımlar ile ilerlenir ve Dirichlet sınır koşuluna (D) geldiğinde döngü sona erer. Bu arada ilerlenen her bir noktada Poisson denkleminin sağ tarafında yer alan fonksiyon hesaplanarak toplanır (10). Neumann sınır koşulunda ise sınır dışında yer alan noktaya gelen adım, ters yönde 2 adım geriye yansıtılır. Toplam değer yineleme sayısına (N) bölünerek, her bir nokta için çözüm değeri bulunur.

$$u(i, j) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \left(D + \sum 0.25 h^2 g(x, y) \right) \quad (10)$$

Monte Carlo yöntemi kullanılarak hesaplanan hata ve çözüm süresi değerleri Tablo-3'te, çözüm değerleri ise Şekil-10'da sunulmuştur.

Tablo-3: Monte Carlo yöntemi çözüm süreleri ve hata değerleri				
Yineleme	5000	10000	50000	100000
Hata	9.0560	8.4505	7.91	7.9086
Çözüm süresi (s)	51.57	103.37	516.04	1061.79



Şekil 10: Monte Carlo yöntemi çözüm neticeleri (a) 5000 yineleme (b) 10000 yineleme (c) 50000 yineleme (d) 100000 yineleme

SONUÇ

Bu çalışmada sadece artı yüklü iyonlar ve eksi yüklü elektronlardan oluşan bir plazma demetinin akışı Hücrede-Parçacık yöntemi ile incelenmiştir. MATLAB ortamında geliştirilen Hücrede-Parçacık yöntemi ile çözülen örnek plazma problemine ait daimî yük yoğunluğu, potansiyeli ve elektrik alanı değerleri de sunulmuştur. İlaveten Poisson denkleminde kullanılan Gauss-Seidel, Çoklu ağ ve Monte Carlo gibi farklı yöntemlerin, yine farklı yineleme koşulları altında çözüm süreleri ve çözüm hataları hesaplanarak karşılaştırılmıştır. Gauss-Seidel yöntemi çözüm yöntemi açısından en hızlı yöntem olarak belirlenmiştir. Başlangıç değerleri Çoklu ağ yöntemi kullanılarak hesaplandığında Gauss-Seidel yönteminin sonuçları 36% daha hızlı yakınsadığı görülmüştür. Çoklu ağ yöntemi tek başına kullanıldığında Gauss-Seidel yöntemine nazaran 2,31 kat daha yavaş yakınsamaktadır. Monte Carlo yönteminin ise bu yöntemler arasında sonuçları en geç yakınsayan yöntem olduğu görülmektedir. Monte Carlo yönteminin en önemli avantajı ise paralelleştirildiğinde verimliliğinin çok yüksek olmasıdır. Bu çalışmada çözüm ağlarında nokta sayısı oldukça kısıtlı tutulmuştur. En yüksek değer 17x17 nokta olarak tutulmuştur. Poisson denkleminin çok daha fazla sayıda çözüm noktası üzerinde çözülmesi gerektiğinde çalışılan yöntemlerin tekrar incelenmesinin gerekli olacağı değerlendirilmektedir.

Kaynaklar

- Almojel, I. A., 2000, *The implementation and performance evaluation of N-body gravitational simulation algorithm on high-performance computers*, Computers & Electrical Engineering, 26 (3-4), s. 297-316.
- Bird, G.A., 1976, *Molecular Gas Dynamics*, Clarendon, Oxford.
- Brieda, L., 2021, *Plasma Simulations by Example*, CRC Press.
- Briggs, W.L., Henson, V.E., ve McCormick, S.F., 2000, *A Multigrid Tutorial (2nd ed.)*, SIAM.
- Chu, P.K. ve Lu, X.P., 2013, *Low Temperature Plasma Technology: Methods and Applications*. CRC Press.
- Dawson, J.M. 1983, *Particle simulation of plasmas*, Reviews of Modern Physics, 55 (2): s. 403–447.
- Delaurentis, J.M. ve Romero, L.A., 1990, *A Monte Carlo method for Poisson's equation*, Journal of Computational Physics, 90 (1), s. 123-140.
- Fitzpatrick, R., 2015, *Computational Physics*, CreateSpace Independent Publishing Platform.
- Sauer, T., 2006, *Numerical Analysis (2nd ed.)*, Pearson Education.