

Rozwiązywanie równań całkowych metodą Monte Carlo

Plan wykładu

- metoda MC dla algebraicznego operatora liniowego – idea: rozwiązanie układu równań
- ogólna metoda MC dla operatora całkowego (szereg von Neumanna)
- przykład 1: rozwiązanie równania całkowego w 1D (numeryczny)
- przykład 2: propagacja fali świetlnej w ośrodku rozpraszającym (analiza problemu)
- przykład 3: propagacja sygnału elektrycznego w linii transmisyjnej (równanie telegrafistów)

Literatura:

- W. Dunn, J. Shultis, „**Exploring MC methods**”, Elsevier
- M. Born, E. Wolf, „**Principles of optics**”, Cambridge University Press
- A. Devaney, „**Mathematical foundations of imaging, tomography and wavefield inversion**”, Cambridge University Press
- M.Kraszewski, J. Pluciński, „**Convergence of MC algorithm for solving integral equations in light scattering simulations**”, Optica Applicata, vol. L, No.1, 2020
- R. Farnoosh, M. Ebrahimi, „**MC method for solving Fredholm integral equations of the second kind**”, Applied Mathematics and Computation, 195(2008), 309-315
- J. Acebron, M. Ribeiro, „**MC method for solving the one-dimensional telegraph equations with boundary conditions**”, Journal of Computational Physics 305, (2016) 29-43

Idea rozwiązania układu równań liniowych metodą MC

Układy równań liniowych rozwiązujemy numerycznie przy użyciu metod bazujących na rozkładzie LU (macierze gęste i rzadkie) lub korzystając z metod iteracyjnych (macierze rzadkie).

Metody MC do tego celu się nie wykorzystuje, ale przeanalizujemy taką możliwość ponieważ jej uogólnienie na przypadek ciągły pozwoli nam rozwiązywać **równania całkowe**.

$$A\vec{x} = \vec{b}$$

- postać macierzowa układu równań liniowych

$$(A + I - I)\vec{x} = \vec{b}$$

$$I\vec{x} = (I - A)\vec{x} + \vec{b}$$

$$I - A = C$$

$$\vec{x} = C\vec{x} + \vec{b}$$

Ta postać jest użyteczna dla metod iteracyjnych (metoda Jacobiego), k – numer iteracji

$$\vec{x}^{(k+1)} = C\vec{x}^{(k)} + \vec{b}$$

Aby rozwiązać problem należy zaproponować wektor startowy $\mathbf{x}^{(0)}$ a następnie iteracyjnie go poprawiać

$$\vec{x}^{(0)} \rightarrow \vec{x}^{(1)} \rightarrow \vec{x}^{(2)} \rightarrow \dots \rightarrow \vec{x}^{(k)} \rightarrow \vec{x}^{(k+1)}$$

Ciąg jest zbieżny jeśli promień spektralny C nie przekracza 1

$$\max\{|\lambda_1|, |\lambda_2|, \dots, |\lambda_n|\} < 1 \quad \implies$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)}$$

λ – wartości własne macierzy C

- skoro wektor startowy może być dowolny więc możemy zaproponować w postaci

$$\vec{x}^{(0)} = \vec{b}$$

- następnie rozwińmy relację rekurencyjną

$$\begin{aligned}\vec{x}^{(k+1)} &= \vec{b} + C\vec{x}^{(k)} \\ &= \vec{b} + C(\vec{b} + C\vec{x}^{(k-1)}) \\ &= \vec{b} + C\vec{b} + C^2(\vec{b} + C\vec{x}^{(k-2)}) \\ &= (I + C + C^2 + C^3 + \dots + C^k)\vec{b}\end{aligned}$$

- elementy szeregu wyznaczamy sumując elementy macierzy, wyznaczmy i-ty element wektora $\mathbf{x}^{(k+1)}$

$$\begin{aligned}x_i^{(k+1)} &= b_i + \sum_{j_1} c_{i,j_1} b_{j_1} + \sum_{j_1, j_2} c_{i,j_1} c_{j_1, j_2} b_{j_2} + \dots + \sum_{j_1, j_2, \dots, j_k} c_{i,j_1} c_{j_1, j_2} \dots c_{j_{k-1}, j_k} b_{j_k} \\ &= \sum_{m=0}^k \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n \dots \sum_{j_m=1}^n c_{i,j_1} c_{j_1, j_2} \dots c_{j_{m-1}, j_m} b_{j_m}\end{aligned}$$

iloczyn macierzy: sumujemy po indeksie kolumnowym 1 macierzy, który odpowiada indeksowi wierszowemu 2 macierzy (to iloczyn skalarny dwóch wektorów: wierszowego i kolumnowego)

Procedura MC rozwiązania układu równań polega na wygenerowaniu wielu łańcuchów Markowa, przy czym każdy łańcuch będzie próbował (przybliżał) któryś wyraz w rozwinięciu. Pojedynczy łańcuch daje wkład związany z wartościami elementów macierzowych, które „odwiedził”

- definiujemy **macierz przejścia**, która pozwoli w sposób losowy poruszać się po elementach macierzy

$$\sum_{j=1}^n P_{i,j} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

- warunek normalizacji

$$p_{ij} = \begin{cases} p_{ij} > 0 & \iff c_{ij} \neq 0 \\ p_{ij} = 0 & \iff c_{ij} = 0 \end{cases}$$

Rozwiązywanie równań całkowych metodą MC

- każdy łańcuch startujemy od indeksu $i=j_0$ (prawdopodobieństwo wylosowania indeksu i określa π_i)
- kolejne indeksy losujemy z korzystając wierszy macierzy przejścia \mathbf{P}

$$i = j_0 \xrightarrow{p_{j_0,j_1}} j_1 \xrightarrow{p_{j_1,j_2}} j_2 \xrightarrow{p_{j_2,j_3}} j_3 \rightarrow \dots \rightarrow j_{k-1} \xrightarrow{p_{j_{k-1},j_k}} j_k$$

ciąg indeksów wykorzystujemy do próbkowania sumy

$$x_i^{(k+1)} = \sum_{m=0}^k \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n \dots \sum_{j_m=1}^n c_{i,j_1} c_{j_1,j_2} \dots c_{j_{m-1},j_m} b_{j_m}$$

jeden łańcuch daje iloczyn k elementów macierzowych – ale iloczyn musimy zmodyfikować uwzględniając prawdopodobieństwa

$$U_m = \frac{c_{j_0,j_1}}{p_{j_0,j_1}} \cdot \frac{c_{j_1,j_2}}{p_{j_1,j_2}} \cdot \frac{c_{j_2,j_3}}{p_{j_2,j_3}} \cdot \dots \cdot \frac{c_{j_{m-1},j_m}}{p_{j_{m-1},j_m}} = U_{m-1} \cdot \frac{c_{j_{m-1},j_m}}{p_{j_{m-1},j_m}}$$

Elementy powstałego ciągu

$$(U_0 = 1), U_1, U_2, \dots, U_m$$

dają wkłady do kolejnych wyrazów rozwinięcia w pojedynczym (s -tym) łańcuchu Markowa

$$k = \text{const}, s = 1, 2, \dots, N \quad \Longrightarrow \quad X_i^s = \sum_{m=0}^k U_m^s b_{j_m}, \quad j_0 = i$$

i uśredniamy wynik po wszystkich łańcuchach

$$\bar{x}_i = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N X_i^{(s)}$$

Dlaczego licząc U_m w mianowniku wstawiamy prawdopodobieństwa p_{ij} ?

Wynika to bezpośrednio ze sposobu liczenia wartości oczekiwanej w przypadku rozkładu dyskretnego.

$$(k = \text{const}) \quad \langle x_i \rangle = \sum_{j_0=1}^n \sum_{j_1=1}^n \cdots \sum_{j_k=1}^n X_i p_{j_0, j_1} p_{j_1, j_2} \cdots p_{j_{k-1}, j_k}$$

$$\langle x_i \rangle = \sum_{j_0=1}^n \sum_{j_1=1}^n \cdots \sum_{j_k=1}^n \left(\sum_{m=0}^k \frac{c_{j_0, j_1} c_{j_1, j_2} \cdots c_{j_{m-1}, j_m}}{p_{j_0, j_1} p_{j_1, j_2} \cdots p_{j_{m-1}, j_m}} b_{i_m} \right) \underbrace{p_{j_0, j_1} p_{j_1, j_2} \cdots p_{j_{m-1}, j_m} \cdots p_{j_{k-1}, j_k}}_{\text{mianownik}}$$

widzimy, że część prawdopodobieństw się nie kasuje, ale możemy skorzystać z warunku normalizacji

$$\sum_{j=1}^n p_{ij} = 1 \qquad \sum_{j_{m+1}=1}^n \sum_{j_{m+2}=1}^n \cdots \sum_{j_k=1}^n p_{j_m, j_{m+1}} p_{j_{m+1}, j_{m+2}} \cdots p_{j_{k-1}, j_k} = 1$$

po dalszej redukcji otrzymujemy $(k+1)$ przybliżenie elementu wektora

$$\langle x_i^{(k+1)} \rangle = \sum_{m=0}^k \left(\sum_{j_0=1}^n \sum_{j_1=1}^n \cdots \sum_{j_m=1}^n c_{j_0, j_1} c_{j_1, j_2} \cdots c_{j_{m-1}, j_m} b_{j_m} \right)$$

- otrzymaliśmy wzór iteracyjny, który był punktem wyjścia
- zatem sposób liczenia elementów U_m jest poprawny

Rozwiązanie liniowego równania całkowego metodą MC

Rozważania ograniczymy do **równania całkowego Fredholma drugiego rodzaju** w jednym wymiarze

$$y(x) = f(x) + \int_V k(x, x')y(x')dx', \quad V \subset R$$

$k(x, x')$ – jądro całkujące

Równanie jest niejawne, aby wyznaczyć $y(x)$ musimy znać jej postać bo występuje pod całką.

Wstawmy pod całkę wyrażenie definiujące $y(x)$

$$\begin{aligned} y(x) &= f(x) + \int k(x, x')y(x')dx' \\ &= f(x) + \int k(x, x')f(x')dx' + \iint k(x, x')k(x', x'')y(x'')dx''dx' \\ &= f(x) + \int k(x, x')f(x')dx' + \iint k(x, x')k(x', x'')f(x'')dx''dx' \\ &\quad + \iiint k(x, x')k(x', x'')k(x'', x''')f(x''')dx'''dx''dx' + \dots \end{aligned}$$

Dla uproszczenia zapisu użyjemy oznaczeń

$$Ky(x) = \int k(x, t_1)y(t_1)dt_1$$

$$K^2y(x) = \iint k(x, t_2)k(t_2, t_1)y(t_1)dt_1dt_2$$

$$K^n y(x) = \int k(x, t_n) K^{n-1}y(t_n)dt_n$$

- równanie Fredholma zapiszmy w zwartej postaci

$$y = f + Ky$$

i sukcesywnie w miejsce y wstawiamy jego reprezentację całkową

$$\begin{aligned} y &= f + Ky \\ &= f + Kf + K^2y \\ &= f + Kf + K^2f + K^3y \\ &= f + Kf + K^2f + K^3f + \dots + K^n f + K^{n+1}y \end{aligned}$$

- szereg będzie zbieżny w przypadku gdy jądro całkujące $K(x,x')$ będzie spełniać warunek

$$|K| = \sup \int_V |k(x,t)| dt < 1 \quad \implies \quad |K| > |K|^2 > |K|^3 > \dots > |K|^n$$

- jeśli y jest skończone ($y < \infty$) to kolejne wyrazy będą wnosić coraz mniejsze wkłady do wyniku (sumy), szereg możemy więc uciąć po n -tym wyrazie, co oczywiście generuje pewien błąd (**jak duży?**)
- przez analogię do rozwiązania układu równań algebraicznych zapiszmy rozwiązanie w postaci iteracyjnej

$$y^{(n+1)} = Ky^{(n)} + f$$

$$y^{(n+1)} = f + Kf + K^2f + K^3f + \dots + K^n f = \sum_{m=0}^n K^m f$$

- **szereg von Neumanna**

- podobnie jak dla układu równań liniowych oczekujemy

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y^{(n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{m=0}^n K^m f = y$$

- aby rozwiązać równanie iteracyjne metodą MC postąpimy podobnie jak dla układu równań, z tą różnicą, że rozkłady dyskretne P i π zastąpimy rozkładami ciągłymi

$$P = P(x, t), \quad x, t \in V$$

$$\int_V P(x, t) dt = 1$$

- warunek normalizacji

$P(x, t)$ określa prawdopodobieństwo warunkowe:

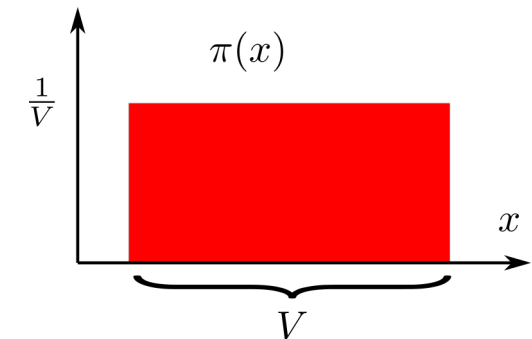
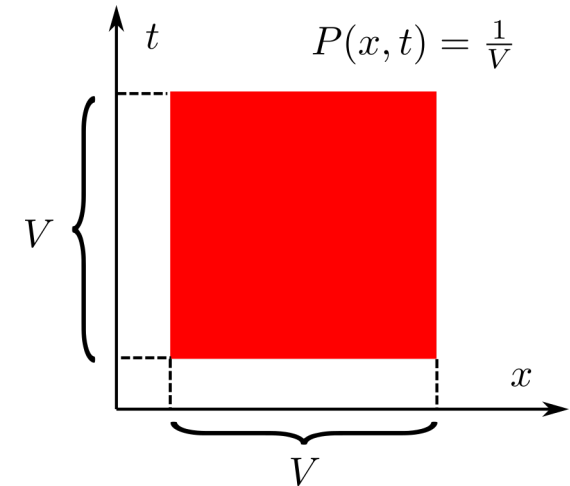
jakie jest prawdopodobieństwo wylosowania zmiennej t dla określonej wartości x ?

$$\pi = \pi(x), \quad x \in V$$

$$\int_V \pi(x) dx = 1$$

- warunek normalizacji

- najprostszy rozkład jaki możemy użyć to rozkład jednorodny**



- wybieramy punkt startowy x_0 – odpowiada mu prawdopodobieństwo wylosowania z rozkładu π

$$x_0 \longrightarrow \pi(x_0)$$

Uwaga: jako punkty startowe x_0 wybieramy te położenia w V , które nas interesują.

- z rozkładu $P(x_j, x_{j+1})$ generujemy kolejne elementy łańcucha Markowa

$$x_0 \xrightarrow{P(x_0, x_1)} x_1 \xrightarrow{P(x_1, x_2)} x_2 \xrightarrow{P(x_2, x_3)} x_3 \rightarrow \dots \rightarrow x_{k-1} \xrightarrow{P(x_{k-1}, x_k)} x_k$$

które posłużą do wyznaczenia wartości jądra całkującego w kolejnych krokach

- tak jak poprzednio generujemy wkłady do szeregu próbując funkcję podcałkową (dwuargumentową)

$$W_m = \underbrace{\frac{k(x_{j_0}, x_{j_1})}{P(x_{j_0}, x_{j_1})} \cdot \frac{k(x_{j_1}, x_{j_2})}{P(x_{j_1}, x_{j_2})} \cdot \dots \cdot \frac{k(x_{j_{m-1}}, x_{j_m})}{P(x_{j_{m-1}}, x_{j_m})}}_{W_{m-1}} \quad y(x) = f(x) + \int_V k(x, t)y(t)dt$$

$$W_m = W_{m-1} \frac{k(x_{j_{m-1}}, x_{j_m})}{P(x_{j_{m-1}}, x_{j_m})}, \quad (W_0 = 1)$$

- teraz możemy zapisać rozwiązanie dla pojedynczego łańcucha w punkcie x_0

$$y^{(n)}(x_0) = \frac{1}{\pi(x_0)} \sum_{m=0}^n W_m f(x_m)$$

- jeden łańcuch to za mało aby rozwiązanie było poprawne, więc generujemy N takich łańcuchów (o długości k - każdy)

$$y_s(x_0) = \frac{1}{\pi(x_0)} \sum_{m=0}^n W_m^{(s)} f(x_m), \quad s = 1, 2, \dots, N$$

$$\langle y(x_0) \rangle \approx \overline{y(x_0)} = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N y_s(x_0)$$

Algorytm wyznaczania wartości $y(x_0)$ metodą MC

```

inicjalizacja:   $x_0, k, N, P(x, t), \pi(x)$ 
   $y=0$ 
  for (s=1; s <= N; s++){
     $W_m = 1$ 
     $y_s = f(x_0)$ 
    for (j=1; j <= k; j++){
       $x_j \sim P(x_{j-1}, x)$ 
       $W_m \leftarrow W_m \cdot \frac{k(x_{j-1}, x_j)}{P(x_{j-1}, x_j)}$ 
       $y_s \leftarrow y_s + W_m \cdot f(x_j)$ 
    }
     $y \leftarrow y + \frac{y_s}{N} \frac{1}{\pi(x_0)}$ 
  }
  
```

Uwaga:

- aby ułatwić sobie generowanie nowego położenia x_j z rozkładu $P(x_{j-1}, x_j)$ możemy założyć, że rozkład względem pierwszej zmiennej jest jednorodny (czyli niezależny od poprzedniego położenia x_{j-1})

$$P(x_{j-1}, x_j) = P(\cdot, x)$$

$$P(\cdot, x) = P(x)$$

$$x_j \sim P(x)$$

Przykład – rozwiązanie równania całkowego metodą MC

$$y(x) = f(x) + \int_0^1 k(x,t)y(t)dt$$

- rozwiązanie dokładne

$$y(x) = x^2$$

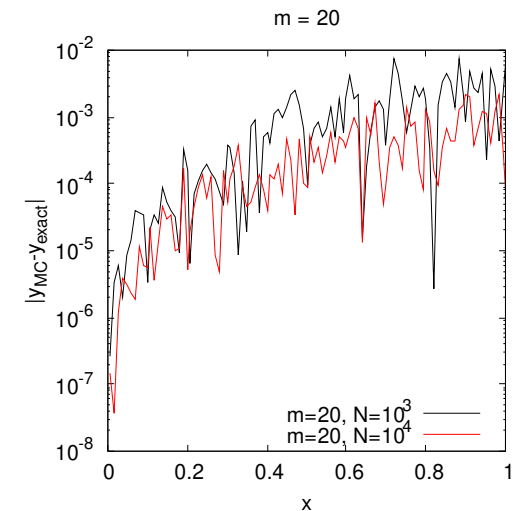
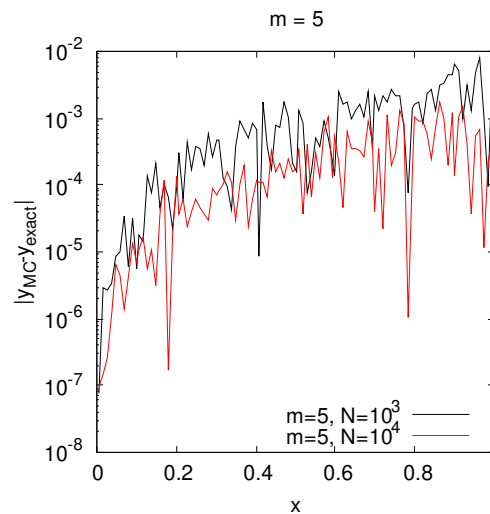
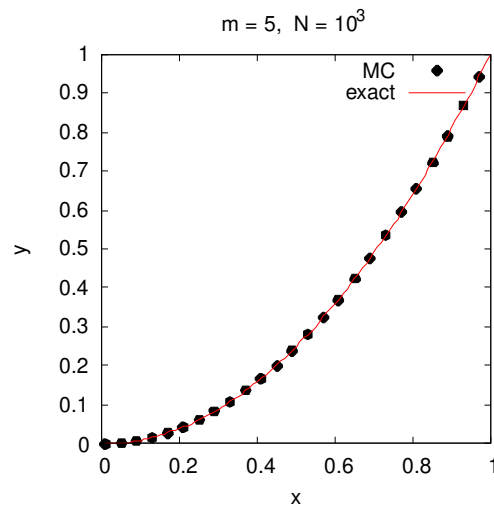
- wyberamy jednorodne rozkłady gęstości prawdopodobieństwa

$$\pi(x) = U(0, 1)$$

$$P(x, t) = U(0, 1) \times U(0, 1) = U^2(0, 1)$$

$$P(x, t) = P(x) = U(0, 1)$$

- tej postaci użyjemy ze względów praktycznych (zgodnie z sugestią z poprzedniego slajdu)



Przykład 2: symulacja MC rozpraszania fali elektromagnetycznej w ośrodku

Płaska monochromatyczna fala elektromagnetyczna pada na obiekt o objętości V , gdzie dochodzi do jej rozproszenia. Materiał to izotropowy dielektryk liniowy. Zajmiemy się symulacją MC natężenia wektora pola elektrycznego w materiale.

- wektor natężenia fali padającej (płaska fala monochromatyczna)

$$\vec{E}_{inc} = \vec{E}_0 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

\vec{E}_0 - amplituda i kierunek polaryzacji

\vec{k} - wektor falowy

$k = \frac{\omega}{c}$ - relacja dyspersji w próżni

- korzystamy z równania Maxwella w postaci różniczkowej (przekształcimy je do postaci całkowej użytecznej dla MC)

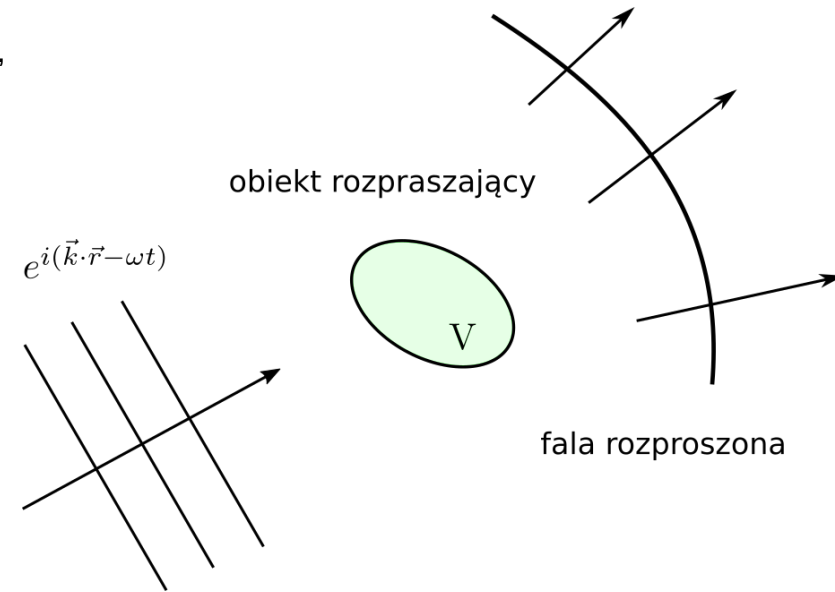
$$\nabla^2 \vec{E}(\vec{r}) + k^2 \varepsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}) + \nabla \left(\vec{E}(\vec{r}) \cdot \nabla \ln(\varepsilon(\vec{r})) \right) = 0$$

Jeśli ε zmienia się w niewielkim stopniu na drodze porównywalnej z długością fali, wówczas ostatni wyraz jest zaniedbywalny

$$\Delta r \approx \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi c}{\omega} \quad \rightarrow \quad \varepsilon(r) \approx \varepsilon(r + \Delta r) = n^2(\vec{r})$$

$$\nabla^2 \vec{E}(\vec{r}) + k^2 n^2(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}) = 0$$

$n(\vec{r})$ - współczynnik załamania ośrodka



uwaga, używamy zapisu skróconego pomijając zależność od częstości ω

$$\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, \omega)$$

$$\varepsilon = \varepsilon(\vec{r}, \omega)$$

$$n = n(\vec{r}, \omega)$$

Rozwiązywanie równań całkowych metodą MC

- do dalszych rozważań użyjemy tylko dla **jednej zmiennej (przybliżenie skalarne)**

$$\nabla^2 E_a(\vec{r}) + k^2 n^2(\vec{r}) E_a(\vec{r}) = 0, \quad (a = x, y, z)$$

- w teorii rozpraszania definiuje się tzw. potencjał rozpraszający (pełni podobną rolę jak w mechanice kwantowej)

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} k^2 [n^2(\vec{r}) - 1]$$

wstawiamy je do równania na składową E_a

$$\nabla^2 E_a + k^2 E_a = -4\pi U E_a$$

- Dla potencjałów EM obowiązuje zasada superpozycji, więc do wypadkowego E_a wkład dają:
 - fala padająca
 - fala rozproszona

$$E_a(\vec{r}) = E_a^i(\vec{r}) + E_a^s(\vec{r})$$

E_a^i - fala padająca

E_a^s - fala rozproszona

- fala płaska jest rozwiązaniem równania Helmholtza w próżni

$$(\nabla^2 + k^2) E_a^i = 0$$

co redukuje lewą stronę w równaniu wyjściowym

$$\underbrace{(\nabla^2 + k^2) E_a^i}_{=0} + (\nabla^2 + k^2) E_a^s = -4\pi U E_a$$

- prawa strona nadal zawiera oba wkłady

równanie różniczkowe zamienimy na całkowe wykorzystując funkcję Greena

Rozwiązywanie równań całkowych metodą MC

- funkcja Greena stanowi rozwiązanie równania Helmholtza ze źródłem w postaci delty Diraca

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Równanie na E przemnażamy przez G i odwrotnie

$$E_a^s \cdot / \quad (\nabla^2 + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

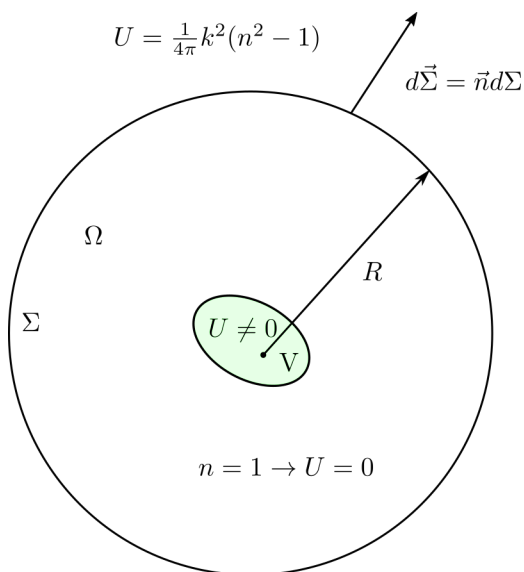
$$G(\vec{r}, \vec{r}') \cdot / \quad (\nabla^2 + k^2)E_a^s = -4\pi U E_a$$

odejmujemy je od siebie (kasują się wyrazy: $E_a^s * k^2 * G$) i całkujemy

$$\underbrace{\int d^3r E_a^s(\vec{r}) \nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}')}_{C_1} - \underbrace{\int d^3r G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla^2 E_a^s(\vec{r})}_{C_2} = \underbrace{\int d^3r 4\pi U(\vec{r}) E_a^s(\vec{r}) G(\vec{r}, \vec{r}')}_{C_3} - \underbrace{\int d^3r 4\pi E_a^s(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}')}_{C_4}$$

$$C_1 - C_2 = C_3 - C_4$$

W jakim obszarze całkujemy?



- obszar rozpraszający V zawarty jest w objętości Ω
- potencjał rozpraszający jest niezerowy tylko w V
- mała kolizja oznaczeń:
 $n = n(\vec{r}, \omega)$ - współczynnik załamania ośrodka
 \vec{n} - wektor normalny do powierzchni Σ

Dokonyjemy przekształcenia całki C_1 – całkowanie przez części + tw. Gaussa-Ostrogradskiego

$$\int d^3r \nabla \vec{W} = \int_{\Sigma} \vec{W} \cdot d\vec{\Sigma}$$

$$\begin{aligned} C_1 &= \int d^3r E_a^s \nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}') = \int d^3r \{ \nabla [E_a^s(\vec{r}) \nabla G(\vec{r}, \vec{r}')] - \nabla E_a^s(\vec{r}) \cdot \nabla G(\vec{r}, \vec{r}') \} \\ &= \int_{\Sigma} E_a^s(\vec{r}) \nabla G(\vec{r}, \vec{r}') \cdot d\vec{\Sigma} - \int d^3r \{ \nabla [\nabla E_a^s G(\vec{r}, \vec{r}')] - (\nabla^2 E_a^s) G(\vec{r}, \vec{r}') \} \\ &= \int_{\Sigma} E_a^s(\vec{r}) \nabla G(\vec{r}, \vec{r}') \cdot d\vec{\Sigma} - \int_{\Sigma} G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla E_a^s(\vec{r}) \cdot d\vec{\Sigma} + \underbrace{\int d^3r G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla^2 E_a^s}_{C_2} \\ &= \int_{\Sigma} \left\{ E_a^s(\vec{r}) \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{n}} - G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial E_a^s(\vec{r}')}{\partial \vec{n}} \right\} d\Sigma + C_2 \end{aligned}$$

$$E_a^s(\vec{r}') = \underbrace{\int_V G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}) E_a^s(\vec{r}) d^3r}_{U \neq 0} + \int_{\Sigma} \left\{ E_a^s(\vec{r}') \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{n}} - G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial E_a^s(\vec{r}')}{\partial \vec{n}} \right\} d\Sigma$$

Zamieńmy jeszcze oznaczenia: współrzędne primowane na nieprimowane i odwrotnie

$$E_a^s(\vec{r}) = \int_V G(\vec{r}', \vec{r}) U(\vec{r}') E_a(\vec{r}') d^3 r' + \int_{\Sigma} \left\{ E_a^s(\vec{r}') \frac{\partial G(\vec{r}', \vec{r})}{\partial \vec{n}'} - G(\vec{r}', \vec{r}) \frac{\partial E_a^s(\vec{r}')}{\partial \vec{n}'} \right\} d\Sigma$$

- funkcja Greena (postać częstotliwościowa) dla równania Helmholtza ma postać

$$G(\vec{r} - \vec{r}', \omega) = \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Ponieważ E_a^s zależy od G więc oczekujemy że w dużej odległości od obszaru V też będzie miała postać fali kulistej. Zatem całka powierzchniowa znika

$$\lim_{r' \rightarrow \infty} \int_{\Sigma} \left\{ E_a^s(\vec{r}') \frac{\partial G(\vec{r}', \vec{r})}{\partial \vec{n}'} - G(\vec{r}', \vec{r}) \frac{\partial E_a^s(\vec{r}')}{\partial \vec{n}'} \right\} d\Sigma = 0$$

amplituda fali rozproszonej $E_a^s(\vec{r}) = \int_V G(\vec{r}', \vec{r}) U(\vec{r}') E_a(\vec{r}') d^3 r'$

Dodajmy amplitudę fali padającej – dostaniemy amplitudę wypadkową

$$E_a(\vec{r}) = E_a^i(\vec{r}) + E_a^s(\vec{r}) = E_a^i(\vec{r}) + \int_V G(\vec{r}', \vec{r}) U(\vec{r}') E_a(\vec{r}') d^3 r'$$

$$E_a(\vec{r}) = E_a^i(\vec{r}) + \int_V G(\vec{r}', \vec{r}) U(\vec{r}') E_a(\vec{r}') d^3 r'$$

- otrzymaliśmy równanie całkowe Fredholma

$$E_a(\vec{r}) = E_a^i(\vec{r}) + \int_V G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') E_a(\vec{r}') d^3 r'$$

jądro całkujące

$$k(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}')$$

Wstawmy je do E_a pod całką

$$\begin{aligned} E_a(\vec{r}) &= E_a^i(\vec{r}) + \int_V G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') E_a^i(\vec{r}') d^3 r' \\ &+ \iint_V G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') G(\vec{r}', \vec{r}'') U(\vec{r}'') E_a^i(\vec{r}'') d^3 r' d^3 r'' \\ &+ \iiint_V G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') G(\vec{r}', \vec{r}'') U(\vec{r}'') G(\vec{r}'', \vec{r}''') U(\vec{r}''') E_a^i(\vec{r}''') d^3 r' d^3 r'' d^3 r''' \\ &+ \dots \end{aligned}$$

Dostaliśmy **szereg von Neumanna** który łatwiej będzie zapisać w postaci operatorowej

$$\hat{K} E_a^i(\vec{r}) = \int_V d^3 r' G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') E_a^i(\vec{r}')$$

$$E_a(\vec{r}) = \sum_{m=0}^{\infty} \hat{K}^m E_a^i(\vec{r})$$

- rozwiązania w postaci szeregu w przybliżeniu skalarnym
- równanie całkowe w tej postaci już znamy

Rozwiązywanie równań całkowych metodą MC

- ogólne rozwiązanie w przypadku trójwymiarowym – rozpraszanie oznacza zmianę kierunku, pełny obraz musi uwzględniać jednoczesny opis trzech składowych

Możemy zachować poprzednią strukturę równania Fredholma

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^i(\vec{r}) + \int_V \overleftarrow{G}(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d^3 r'$$

jeśli zmienimy postać funkcji Greena

$$\overleftarrow{G}(\vec{r}, \vec{r}') = \overleftarrow{G}(\vec{R}), \quad \vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'$$

$$\overleftarrow{G}(\vec{R}) = \frac{\exp(ikR)}{4\pi R} \left[\left(\overleftarrow{I} - \frac{\vec{R} \otimes \vec{R}}{R^2} \right) - \frac{1 - ikR}{k^2 R^2} \left(\overleftarrow{I} - \frac{3\vec{R} \otimes \vec{R}}{R^2} \right) \right]$$

$$\vec{R} \otimes \vec{R} = \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} \otimes [X, Y, Z] = \begin{bmatrix} XX & XY & XZ \\ YX & YY & YZ \\ ZX & ZY & ZZ \end{bmatrix} \quad \overleftarrow{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

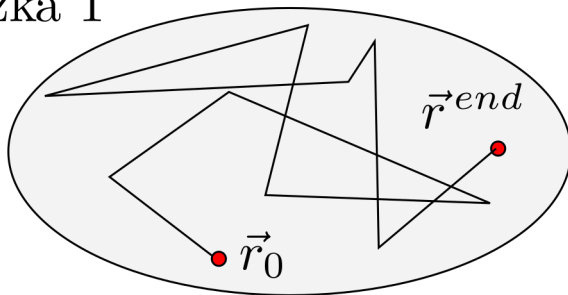
$$\overleftarrow{G}(\vec{R}) = \begin{bmatrix} G_{xx}(\vec{R}) & G_{xy}(\vec{R}) & G_{xz}(\vec{R}) \\ G_{yx}(\vec{R}) & G_{yy}(\vec{R}) & G_{yz}(\vec{R}) \\ G_{zx}(\vec{R}) & G_{zy}(\vec{R}) & G_{zz}(\vec{R}) \end{bmatrix}$$

- funkcja Greena w postaci operatora macierzowego

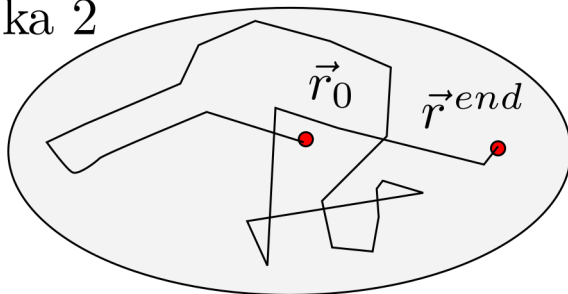
- przykładowe ścieżki (łańcuchy Markowa) dające wkład do całki

$$E_a(\vec{r}) = \sum_{m=0}^{\infty} \hat{K}^m E_a^i(\vec{r}) = E_a^i + \hat{K}^1 E_a^i + \hat{K}^2 E_a^i + \hat{K}^3 E_a^i + \dots$$

ścieżka 1



ścieżka 2



- każda ścieżka próbkuje obszar w sposób różny od pozostałych
- ścieżki będą miały różne długości i różne ilości węzłów (końce odcinków) - to będą liczby losowe
- liczba węzłów w ścieżce decyduje o tym do którego wyrazu w rozwinięciu daje ona wkład
- jeśli założymy, że dalsze wyrazy w rozwinięciu dają coraz mniejsze wkłady, wówczas możemy ograniczyć długość ścieżki do arbitralnie ustalonej wartości L_{max} , błąd jaki popełnimy możemy poprawić badając zbieżność szeregu w funkcji L_{max}
- zbieżność zależy od długości L_{max} oraz liczby ścieżek
- losowanie węzłów w obszarze V prowadzimy przy użyciu generatora o rozkładzie jednorodnym w V oraz jednorodnym dla $L=[0, L_{max}]$

Pseudokod wyznaczania wartości wektora E w wybranym punkcie

```

inicjalizacja:  $\vec{k}$ ,  $V$ ,  $L_{max}$ ,  $N$ ,  $\vec{r}^{end}$ 
 $\vec{E}(\vec{r}^{end}) = 0$ 
for (n=1; n <= N; n++){
   $\vec{r}_0 \sim U^d(V)$  (d-dimensions)
   $\vec{w} = \vec{E}^{inc}(\vec{r}_0)$ 
   $L \sim U(0, L_{max})$ 
   $l = 0$ 
   $m = 0$  (nodes)
  while ( $l < L$ ) {
     $m++$ 
     $\vec{r}_m \sim U^d(V)$ 
     $l = l + |\vec{r}_m - \vec{r}_{m-1}|$ 
    if ( $l < L$ ) {
       $\vec{w} \leftarrow V \overleftrightarrow{G}(\vec{r}_m, \vec{r}_{m-1}) U(\vec{r}_{m-1}) \vec{w}$ 
    }
  }
   $\vec{E}(\vec{r}^{end}) \leftarrow \vec{E}(\vec{r}^{end}) + \frac{L_{max}}{N} \overleftrightarrow{G}(\vec{r}^{end}, \vec{r}_m) U(\vec{r}_m) \vec{w}$ 
}

```

- N -liczba ścieżek

- skalowanie V wynika z zastosowania generatora o rozkładzie jednorodnym w V
- w ostatnim kroku przechodzimy z r_m do r^{end}
- skalowanie L_{max} wynika z zastosowania generatora o rozkładzie jednorodnym $[0, L_{max}]$

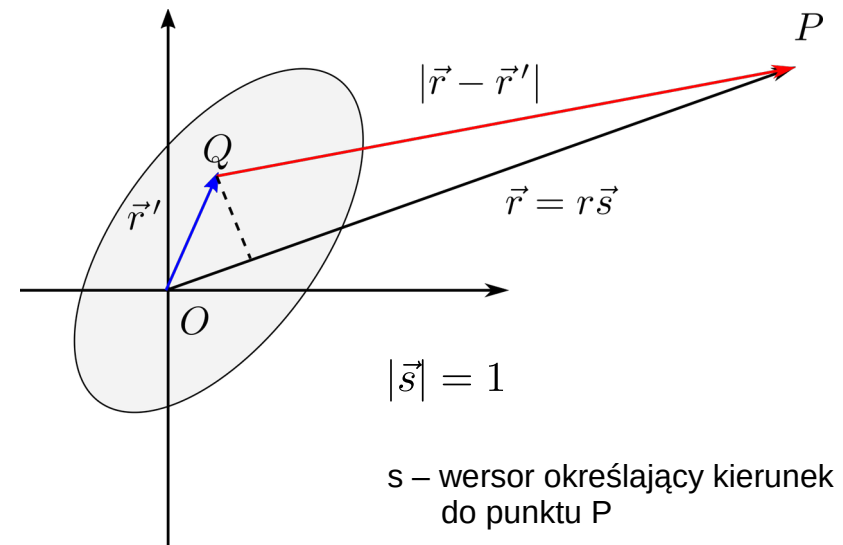
Rozkład pola w dużej odległości od obiektu rozpraszającego („far-field zone”)

Jeśli punkt P leży w dużej odległości od obiektu, wówczas możemy zastosować przybliżenie

$$|\vec{r}| \gg |\vec{r}'| \quad \Rightarrow \quad |\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - \vec{s} \cdot \vec{r}'$$

Wówczas funkcję Greena przybliżamy wyrażeniem

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\vec{s} \cdot \vec{r}'}$$



W dużej odległości od obiektu rozpraszającego czynnik e^{ikr} zmienia tylko fazę globalną rozwiązania – wszystkie ścieżki go zawierają, więc możemy go pominąć w całkowaniu.

W algorytmie MC ostatni krok wykonujemy ze zmodyfikowaną funkcją Greena

$$\vec{r}^{end} = r^{end} \vec{s}$$

$$\overleftrightarrow{G}(\vec{r}^{end}, \vec{r}_m) \approx \overleftrightarrow{G}(\vec{s}, \vec{r}_m) = \frac{1}{4\pi r^{end}} e^{-ik\vec{s} \cdot \vec{r}_m} \left(\overleftrightarrow{I} - \vec{s} \otimes \vec{s} \right)$$

- uwaga: drugi wyraz w nawiasie (w tensorowej definicji G) staje się bardzo mały więc go pomijamy

Przykład 3 – propagacja sygnału elektrycznego w linii transmisyjnej

- rozważania rozpoczynamy od najprostszego przypadku – linii nieskończonej, brak brzegu, istotny tylko warunek początkowy, układ jednowymiarowy.

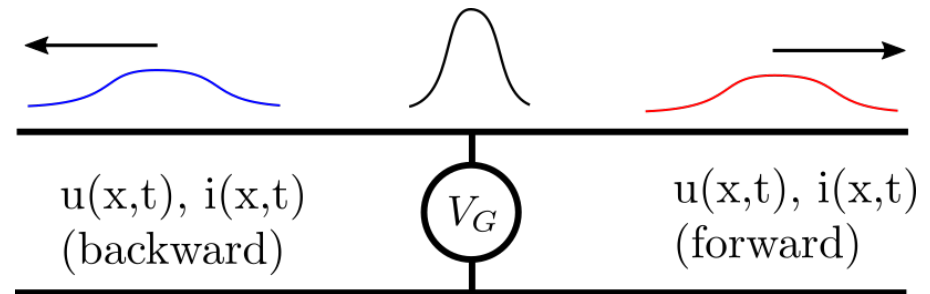
- interesują nas dwie wielkości dynamiczne:

- napięcie $u(\mathbf{x},t)$
- natężenie $i(\mathbf{x},t)$

związek między nimi opisują równania telegrafistów

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} &= -L \frac{\partial i}{\partial t} - R i \\ \frac{\partial i}{\partial x} &= -C \frac{\partial u}{\partial t} - G u\end{aligned}$$

R, G, L, C – opór elektryczny, konduktancja, indukcyjność, pojemność linii na jednostkę długości



układ RRCz rozwiążemy jedynie gdy wyspecyfikujemy **warunki początkowe**

$$\begin{aligned}u(x, 0) &= u_0(x) \\ i(x, 0) &= i_0(x)\end{aligned}$$

- wprowadzmy nowe funkcje pomocnicze, operatory różniczkowe będą działać tylko na jedną z funkcji

$$\begin{aligned} f(x, t) &= \frac{u + R_0 i}{2} \\ b(x, t) &= \frac{u - R_0 i}{2} \end{aligned} \quad \left(R_0 = \sqrt{L/C}, \quad c = \frac{1}{\sqrt{LC}}, \quad \mu = \frac{G}{C}, \quad \lambda = \frac{\frac{R}{L} - \frac{G}{C}}{2} \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= -c \frac{\partial f}{\partial x} + \lambda b - (\lambda + \mu) f \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= c \frac{\partial b}{\partial x} + \lambda f - (\lambda + \mu) b \end{aligned}$$

- stosując metodę charakterystyk dla RRCz hiperbolicznych przekształcamy je do **układu równań całkowych** („Partial differential equations: modelling, analysis, computations”, Siam, 2005)

$$\begin{aligned} f(x, t) &= f_0(x - ct) e^{-(\lambda + \mu)t} + \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \int_0^t (\lambda + \mu) e^{-(\lambda + \mu)t} b(x - cs, t - s) ds \\ b(x, t) &= b_0(x + ct) e^{-(\lambda + \mu)t} + \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \int_0^t (\lambda + \mu) e^{-(\lambda + \mu)t} f(x + cs, t - s) ds \end{aligned}$$

$$[f_0(x) = f(x, 0), \quad b_0(x) = b(x, 0)]$$

- w obu całkach występuje identyczny czynnik – funkcja eksponencjalna, możemy ją potraktować jako funkcję gęstości prawdopodobieństwa i określić dystrybuantę

$$g(s) = (\lambda + \mu)e^{-(\lambda+\mu)s}$$

$$F(t) = \int_0^t g(s)ds = 1 - e^{-(\lambda+\mu)t}$$

$$P(S \leq t) = 1 - e^{-(\lambda+\mu)t}$$

$$P(S > t) = e^{-(\lambda+\mu)t}$$

$S \sim G(t; \lambda, \mu)$ - rozkład eksponencjalny

równaniom całkowym możemy nadać interpretację statystyczną

$$f(x, t) = f_0(x - ct)P(S > t) + \rho \langle b(x - cS, t - S)\mathbf{1}_{S \leq t} \rangle$$

$$b(x, t) = b_0(x + ct)P(S > t) + \rho \langle f(x + cS, t - S)\mathbf{1}_{S \leq t} \rangle$$

$$\mathbf{1}_{S \leq t} = \begin{cases} 1 & \iff S \leq t \\ 0 & \iff S > t \end{cases}$$

$$\left(\rho = \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \right)$$

średnia ważona wartości funkcji i wartości oczekiwanej <>

Mamy do wyboru 2 sposoby rozwiązania numerycznego problemu:

- rozwiązując układ RRCz stosując ilorazy różnicowe, ale pojawia się problem
 - **dyskretyzacja generuje olbrzymią siatkę** → mała wydajność
 - dotatkowo należy zadbać o stabilność schematu
 - kryterium Couranta-Friedrichsa-Leviego

$$c \frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$$

- rozwiązując układ równań całkowych metodą MC
 - **brak dyskretyzacji (siatki), a błędy zminimalizujemy wykonując więcej losowań**
- Całkowanie w MC wykonujemy tworząc łańcuch Markowa, np. dla funkcji $f(x,t)$

$$S_0 \sim G(t, \lambda, \mu) : \quad f(x, t) \leftarrow f_0(x - ct)P(S_0 > t) + \rho b(\underbrace{x - cS_0}_{x_1}, \underbrace{t - S_0}_{t_1})$$

$$S_1 \sim G(t, \lambda, \mu) : \quad b(x_1, t_1) \leftarrow b_0(x_1 + ct_1)P(S_1 > t_1) + \rho f(\underbrace{x_1 + cS_1}_{x_2}, \underbrace{t_1 - S_1}_{t_2})$$

$$S_2 \sim G(t, \lambda, \mu) : \quad f(x_2, t_2) \leftarrow f_0(x_2 - ct_2)P(S_2 > t_2) + \rho b(\underbrace{x_2 - cS_2}_{x_3}, \underbrace{t_2 - S_2}_{t_3})$$

ciąg rekurencyjny zakończy się **automatycznie**, gdy spełniony będzie warunek (nieznana jest liczba kroków pośrednich)

$$S_n > t_n \quad \iff \quad \underbrace{t - S_0 - S_1 - S_2 - \dots - S_{n-1}}_{t_n} - S_n < 0$$

- sprawdźmy jakie będą wkłady do rozwiązania, gdy cofamy się w czasie

$$\begin{aligned}
 f(x, t) = & f_0(x - ct)P(S_0 > t) \\
 & + \rho \langle b_0(x - cS_0 + c(t - S_0)) \mathbf{1}_{S_0 \leq t} \mathbf{1}_{S_1 > t_1} \rangle \\
 & + \rho^2 \langle f_0(x - cS_0 + cS_1 - c(t - S_0 - S_1)) \mathbf{1}_{S_0 \leq t} \mathbf{1}_{S_1 \leq t_1} \mathbf{1}_{S_2 > t_2} \rangle \\
 & + \rho^3 \langle b_0(\dots) \dots \mathbf{1}_{S_3 > t_3} \rangle \\
 & + \rho^4 \langle f_0(\dots) \dots \mathbf{1}_{S_4 > t_4} \rangle \\
 & + \dots \\
 & + \rho^{n-1} \langle f_0(\dots) \dots \mathbf{1}_{S_{n-1} > t_{n-1}} \rangle
 \end{aligned}$$

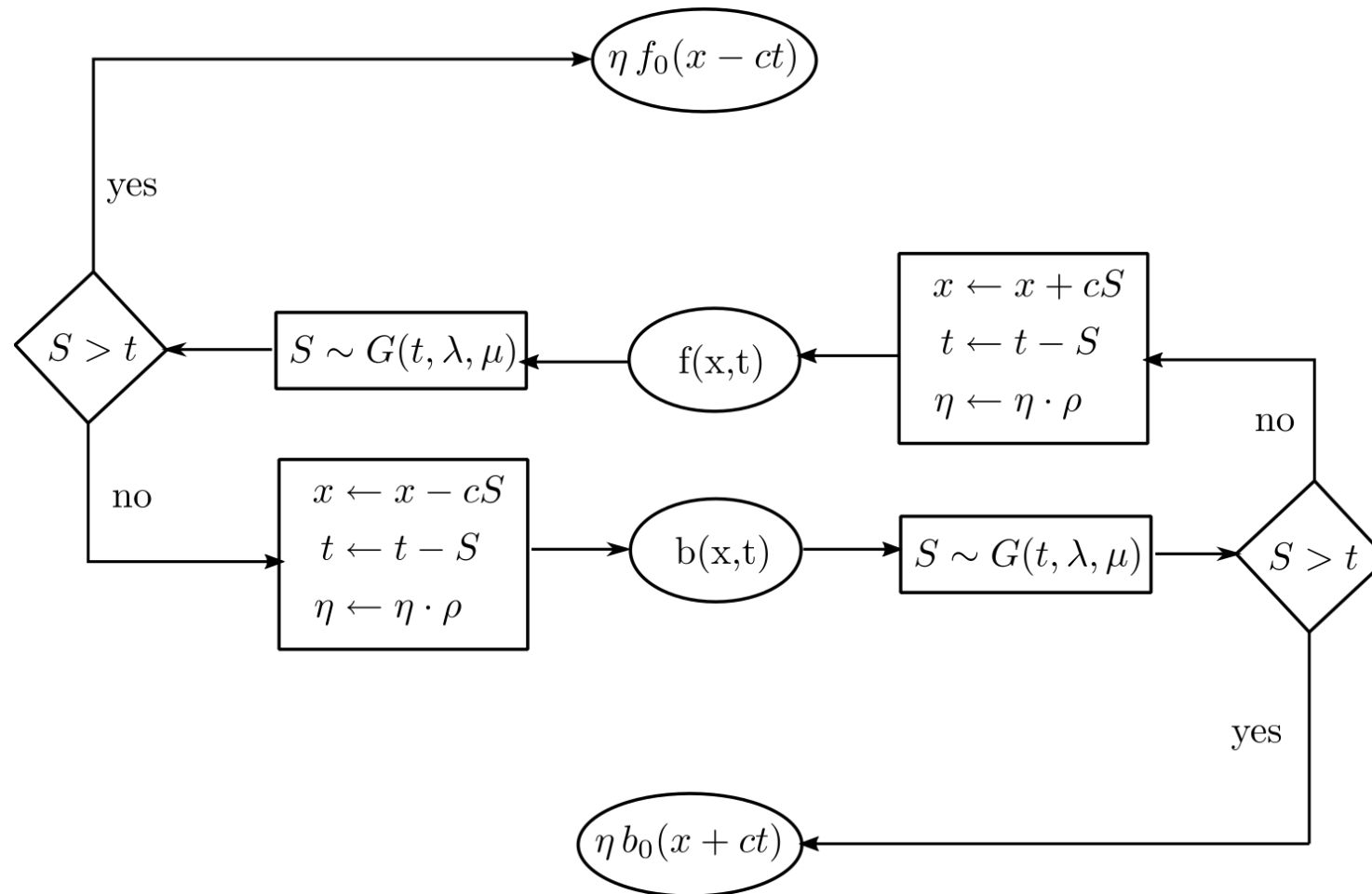
wkład od ostatniego wyrazu:

$$\eta = \rho^{n-1}$$

$$\rho = \frac{\lambda}{\lambda + \mu} < 1 \quad \iff \quad \rho > \rho^2 > \rho^3 > \dots$$

- wnioski:
 - wydłużenie pojedynczego łańcucha powoduje, że jego wkład do wartości średniej maleje, aby zmniejszyć błędy rozwiązania należy wygenerować wiele łańcuchów
 - ponieważ zakończenie łańcucha zachodzi w losowej chwili czasu, więc funkcje $f_0(x - ct_{n-1})$ i $b_0(x - ct_{n-1})$ będą próbkowane w różnych punktach przestrzeni, ważne jest to dla funkcji silnie zlokalizowanych przestrzennie – mogą nie dawać wkładu jeśli omiemy miejsce ich lokalizacji → duże fluktuacje statystyczne
 - analiza rozwiązania dla funkcji $b(x, t)$ przebiega identycznie

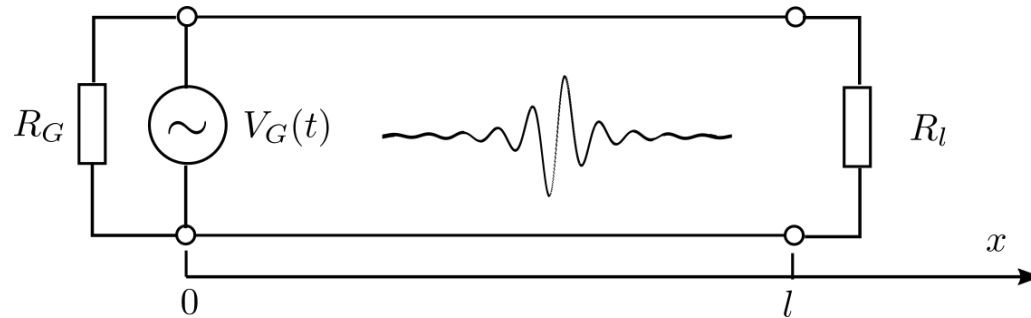
Wartości $f(x,t)$ i $b(x,t)$ obliczamy rekurencyjnie



- wydajność/koszt obliczeniowy algorytmu
(N – liczba łańcuchów Markowa)

$$C \approx N \frac{t}{\langle s \rangle}, \quad \langle s \rangle = \frac{1}{\lambda + \mu}$$

Linia transmisyjna o skończonej długości – warunki brzegowe



R_G – opór źródła napięcia na wejściu

$V_g(t)$ - sygnał źródła

R_l – opór na wyjściu układu $x=l$

l - długość linii

Skończona długość linii wymaga zdefiniowania warunków brzegowych na wejściu/wyjściu

- na wejściu, opór źródła powoduje spadek potencjału

$$u(0, t) = V_g(t) - i(0, t)R_g$$

- rodzaj oporu na wyjściu wpływa na wartość prądu

$$i(l, t) = \int_{-\infty}^{\infty} u(l, \tau) h(t - \tau) d\tau$$

$$h(t - \tau) = \frac{1}{R_l} \delta(t - \tau)$$

- odpowiedź układu na skok napięcia w postaci delty Diraca → brak pamięci układu
(indukcyjność/pojemność może taką pamięć wprowadzić)

- na lewym brzegu generowany jest sygnał propagujący się w prawo, jest złożeniem sygnału źródłowego i rozwiązania $b(x,t)$ poruszającego się w lewo (odbicie)

$$f(0, t) = \zeta V_g(t) + \Gamma_g b(0, t)$$

$$\zeta = \frac{R_0}{R_0 + R_g}$$

- strata sygnału źródłowego

$$\Gamma_g = \frac{R_g - R_0}{R_g + R_0}$$

- współczynnik odbicia (wejście)

- na prawym brzegu generowany jest sygnał, który przemieszcza się w lewo, jego źródłem jest docierający tu sygnał poruszający się w prawo $f(x,t)$ (odbicie)

$$b(l, t) = \Gamma_l f(l, t)$$

$$\Gamma_l = \frac{R_l - R_0}{R_l + R_0}$$

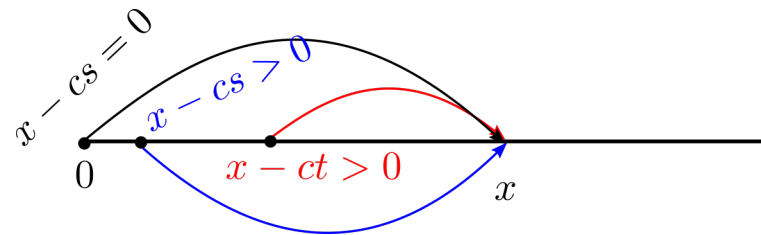
- współczynnik odbicia (wyjście)

Modyfikujemy układ równań całkowych – dodajemy warunki brzegowe

$$f(x, t) = f_0(x - ct)e^{-(\lambda+\mu)t}\mathbf{1}_{x>ct} \leftarrow \text{warunek początkowy } f_0$$

$$+ \rho \int_0^t g(s, \lambda, \mu) b(x - cs, t - s)\mathbf{1}_{x \geq cs} ds \leftarrow \text{rozproszenie w punkcie na lewo jako źródło propagacji do przodu}$$

$$+ \frac{\rho}{\lambda} \int_0^t g(s, \lambda, \mu) \delta(cs - x) f(0, t - s)\mathbf{1}_{x \leq ct} \leftarrow \text{odbicie od lewego brzegu jako przyczynęk do propagacji w prawo (do przodu)}$$



$$b(x, t) = b_0(x + ct)e^{-(\lambda+\mu)t}\mathbf{1}_{l-x>ct} \leftarrow \text{warunek początkowy } b_0$$

$$+ \rho \int_0^t g(s, \lambda, \mu) f(x + cs, t - s)\mathbf{1}_{l-x \geq cs} ds \leftarrow \text{rozproszenie w punktach na prawo od } x \text{ stanowią źródła fali poruszającej się w lewo}$$

$$+ \frac{\rho}{\lambda} \int_0^t g(s, \lambda, \mu) \delta(cs + x - l) b(l, t - s)\mathbf{1}_{l-x \leq ct} \leftarrow \text{wcześniejsze odbicie od prawego brzegu generuje falę powracającą}$$

Rozwiązywanie równań całkowych metodą MC

inicjalizacja: $npaths$ – liczba generowanych ciek
 $x_{start}, t_{start}, c, \lambda, \mu$

```

for (i=1;i<=2;i++){
  suma=0
  for (n=0;n<npaths;n++){
     $x = x_{start}, t = t_{start}, \eta = 1, sign = (-1)^i$ 

    while (t>0){
       $s = -\frac{\ln U_1}{\lambda + \mu}, U_1 \sim U(0, 1)$ 

      if (sign==-1)then
        if (( $x - cs$ ) > 0) then
           $\eta = \eta \frac{\lambda}{\lambda + \mu}$ 
        else
           $s = \frac{x}{c}, suma = suma + \eta \zeta V_g(t - s), \eta = \eta \Gamma_g$ 
        end if
         $x = x - cs, t = t - s$ 
      else if (sign==1)then
        if (( $x + cs$ ) < l) then
           $\eta = \eta \frac{\lambda}{\lambda + \mu}$ 
        else
           $s = \frac{l-x}{c}, \eta = \eta \Gamma_l$ 
        end if
         $x = x + cs, t = t - s$ 
      end if
       $sign = -sign$ 
    }
  }
  if (i==1) fxt=sum/npaths
  else if (i==2) bxt=sum/npaths
}

```

Wyniki propagacji sygnału wzdłuż linii transmisyjnej

- sygnał źródła

$$V_g(t) = \sin(2\pi\nu t) \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

- parametry układu

$$t_0 = 7.5 \text{ ns}$$

$$\sigma = 0.75 \text{ ns}$$

$$\nu = 1 \text{ GHz}$$

$$L = 0.25 \mu\text{H}$$

$$C = 100 \text{ pF}$$

$$R = 12.5 \Omega$$

$$G = 0.5 \text{ mS}$$

$$l = 2 \text{ m}$$

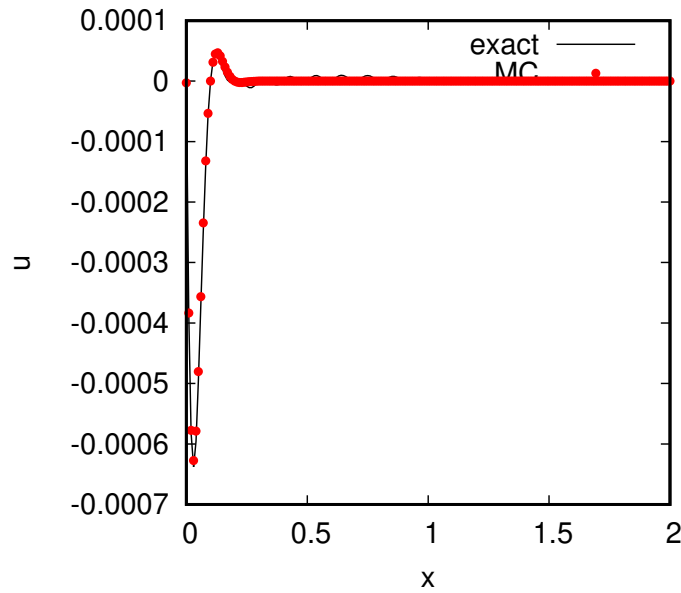
$$R_l = 12.5 \Omega$$

$$R_g = 75 \Omega$$

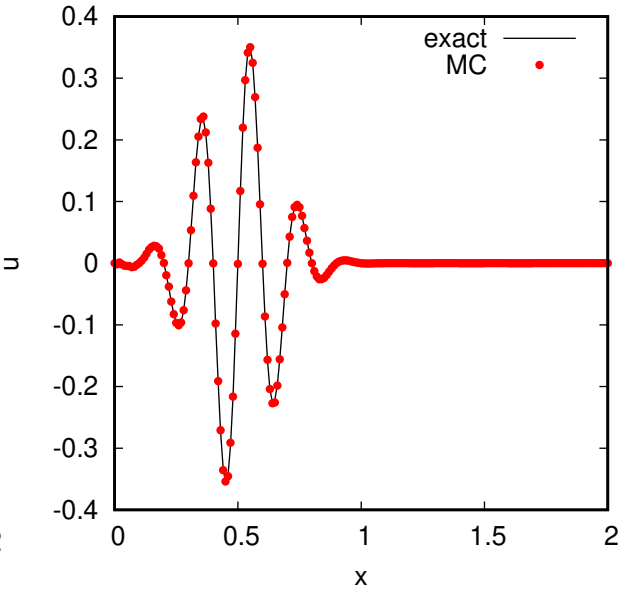
- liczba łańcuchów Markowa $N = 1000$

Rozwiązanie równań całkowych metodą MC

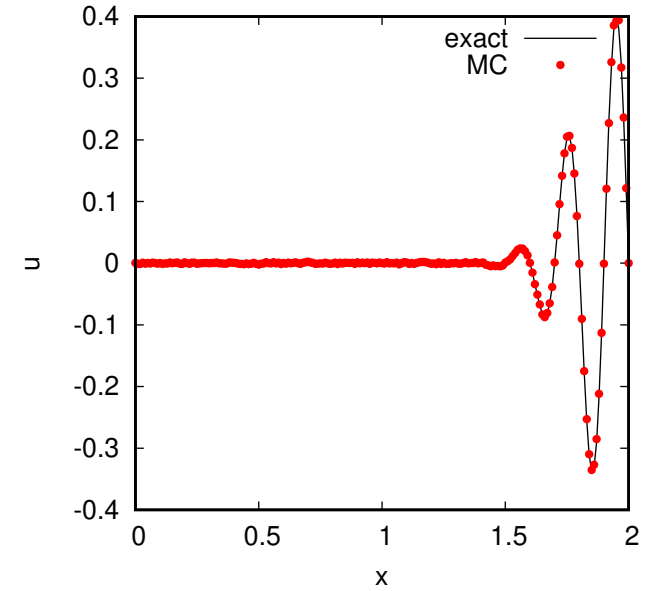
$t = 5 \text{ ns}, n_{\text{paths}} = 10^3$



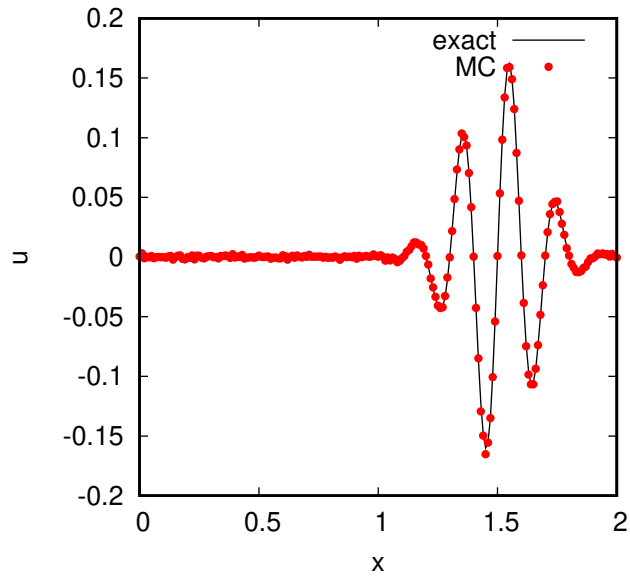
$t = 10 \text{ ns}, n_{\text{paths}} = 10^3$



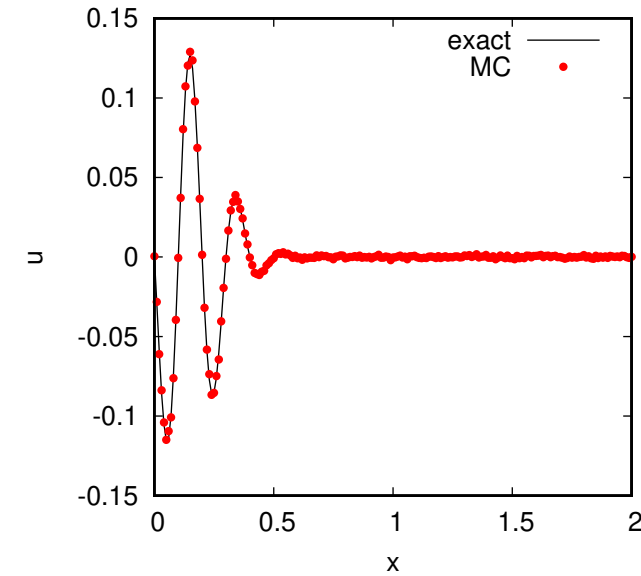
$t = 17 \text{ ns}, n_{\text{paths}} = 10^3$



$t = 20 \text{ ns}, n_{\text{paths}} = 10^3$



$t = 27 \text{ ns}, n_{\text{paths}} = 10^3$



$t = 30 \text{ ns}, n_{\text{paths}} = 10^3$

