

Monilohkosysteemin simulointi Markovin ketjuna Monte Carlo- menetelmällä

LS-TUPER Workshop 2.2.2012

Antti Lempinen

Ludus Mundi

MCMC

- Markov Chain Monte Carlo Method
 - Systemi kuvataan Markovin ketjuna Markovin transitiomatriiseilla: jokaiselle tilalle määritellään todennäköisyydet siirtyä muihin tiloihin
 - Systemiä simuloidaan satunnaiskävelyillä: jokainen askel valitaan Markovin matriisin mukaisella jakaumalla satunnaisesti
 - Simulointi toistetaan *monta* kertaa ja lasketaan yhteensä

Kulkeutumismallin MCMC

- Jaetaan tila lohkoihin
- Lohkoissa voi olla useita "faaseja"
- Määritellään partikkelin siirtymistodennäköisyydet
 - Lohkossa faasista toiseen
 - Lohkosta toiseen
- Tehdään iso joukko satunnaiskävelyjä

Yksinkertainen toteutus

- Scilab-ohjelmalla määriteltyinä rutiineina
- Syöttö-data:
 - Lohkojen kuvaus: kustakin faasin määrä ja kytkennät muihin faaseihin
 - Siirtymätodennäköisyydet: faasista toiseen tai muihin lohkoihin
 - Ehdolliset siirtymätodennäköisyydet kytkettyihin lohkoihin

Yksinkertainen toteutus

- Laskennan rakenne:
 - Syöttö-datan perusteella määrittelee Markovin matriisin
 - Laskee annetulla määrällä aika-askeleita annetun määrän toistoja satunnaiskävelyllä
 - Laskee halutuille ajan hetkille toistoista jakauman



Esimerkki

- 99 lohkoa
 - Yksi lähde, kaksi nielua ("kallio" ja "pintavesi") ja 97 tunnelilohkoa
 - Tunnelilohkoissa kaksi faasia: liikkuva neste ja "adsorboitunut tila"
 - Lähteen ja tunnelin välissä "puskuri", jossa myös kaksi faasia
 - Puskuri, tunnelilohkot ja "pintavesi" kytketty peräkkäin, kaikki kytketty kallioon

Esimerkki

- Tilanmuutostodennäköisyydet:
PitrList(:, :, 1)=[0 0 1;0 0 0];//source
PitrList(:, :, 2)=[1 0 0;0 0 0];//rock
PitrList(:, :, 3)=[0.10 0.89 0.01;
0.25 0.75 0];//buffer
PitrList(:, :, 4)=[1 0 0;0 0 0];//surface
PitrList(:, :, 5)=[0.10 0.8 0.1;
0.05 0.95 0];//tunnel

Esimerkki

- Siirtymistodennäköisyydet (1. faasi)

```
PmovList(:, :, 1)=[1 0 0]; //source
```

```
PmovList(:, :, 2)=[0 0 0]; //rock
```

```
PmovList(:, :, 3)=[0.05 0.95 0]; //buffer
```

```
for i=4:98;
```

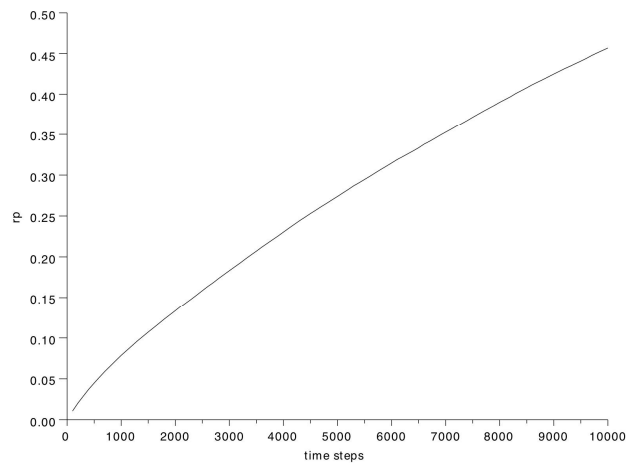
```
    PmovList(:, :, i)=[0.01 0.01 0.98]; //tunnel
```

```
end
```

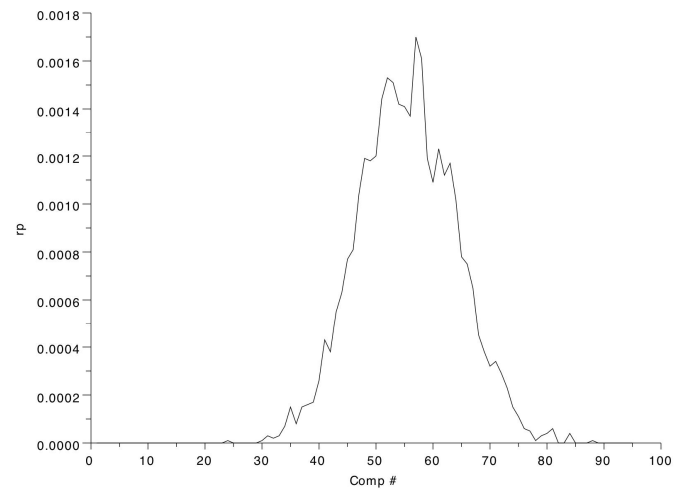
```
PmovList(:, :, 99)=[0 0 0]; //surface
```


Esimerkki

- 10 000 aika-askelta, 100 000 toistoa: ~4 min
Apple 2.16 GHz Intel Core Duo

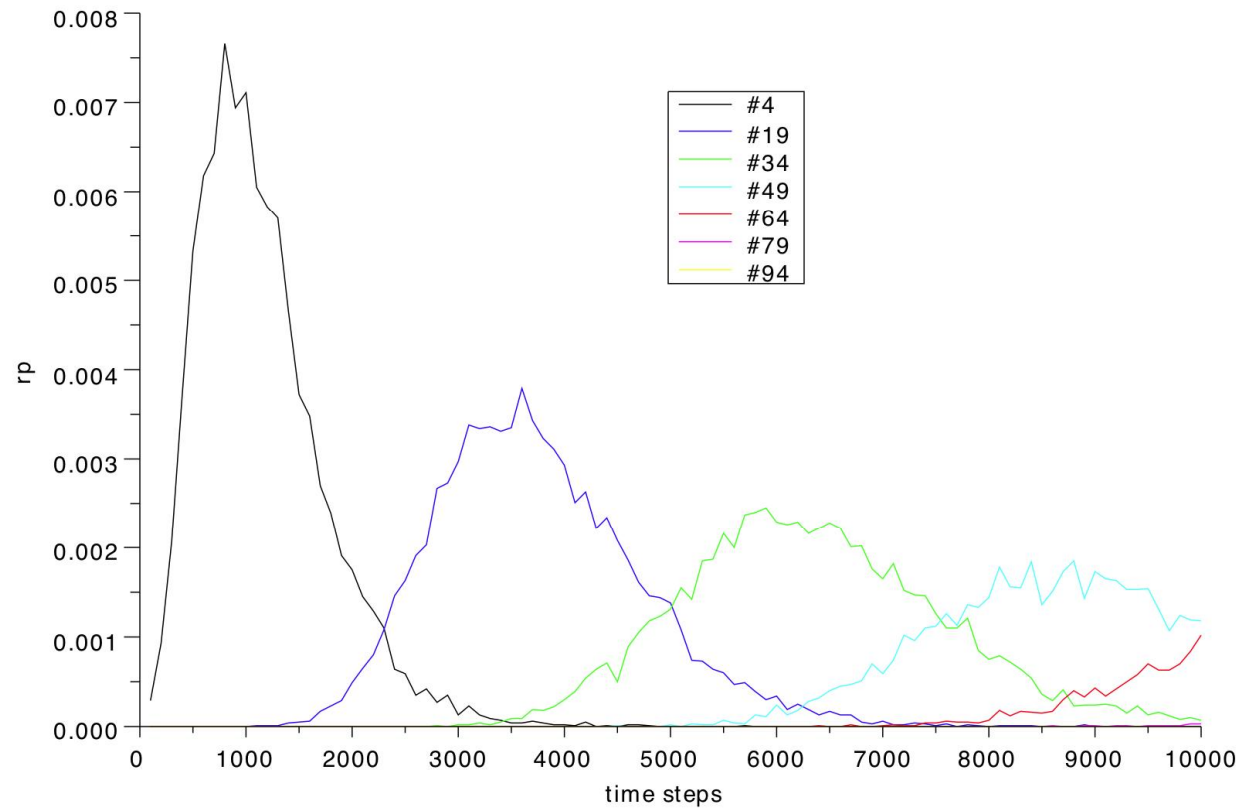


Hiukkasia kalliossa



Jakauma lopussa

Esimerkki



Jatkotyö

- Siirtymätodennäköisyyksien määrittäminen
- Muuttuvat Markovin matriisit
- Kytkenät
- Nuklidiketjut