

# Vergleich zwischen makro- und mikroskopischen Verhalten des Random Walk im Kontext von Size-Exclusion

Aaron Pumm

Universität Wien

12.01.2023

Betreuer: *Michael Fischer* (Universität Wien)



# Inhalt

Motivation

Modelle und Skalen

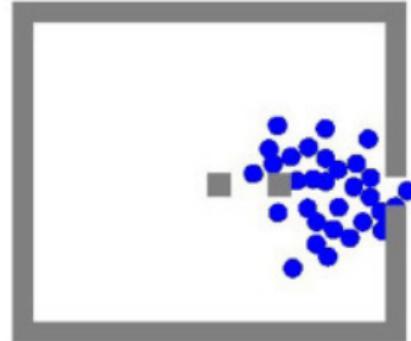
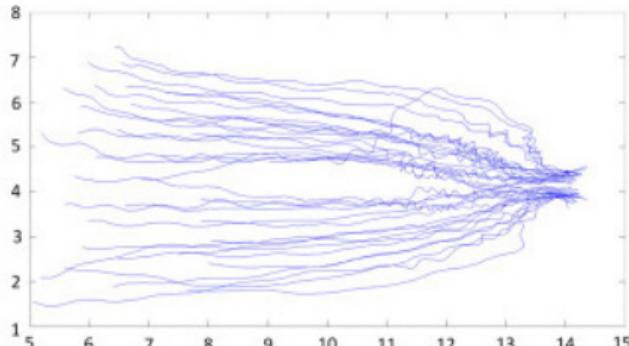
Random Walk

Numerische Simulationen

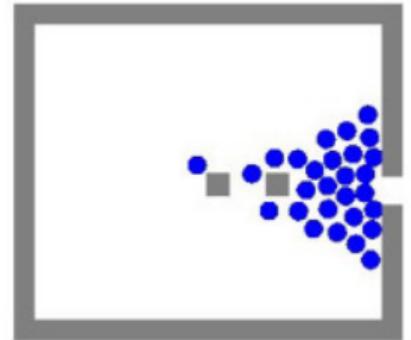
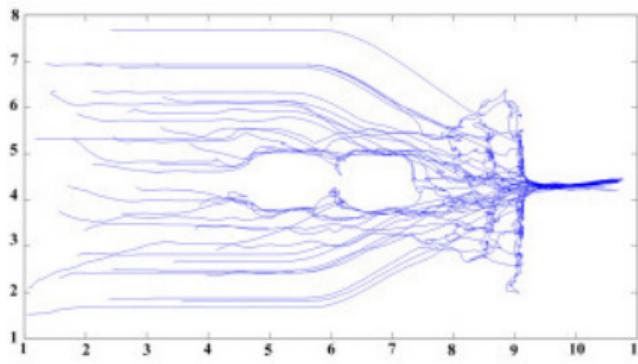
Interpretation der Resultate

# Motivation

- ▶ Messe
- ▶ Fahrstuhl
- ▶ Stadion
- ▶ Rolltreppen



(a) Real-life model. Similar behaviors are observed compared with **Figure 10**.



# Inhalt

Motivation

Modelle und Skalen

Random Walk

Numerische Simulationen

Interpretation der Resultate

# Mikroskopisches modellieren

## Definition

Ein Modell auf mikroskopischer Ebene simuliert das detaillierte Verhalten des zu betrachtenden Systems und es lassen sich genaue Wechselwirkungen zwischen den untersuchten Objekten feststellen.

# Mikroskopisches modellieren

## Definition

Ein Modell auf mikroskopischer Ebene simuliert das detaillierte Verhalten des zu betrachtenden Systems und es lassen sich genaue Wechselwirkungen zwischen den untersuchten Objekten feststellen.

Beispiele für solche Größen wären:

- ▶ Trajektorien von einzelnen Agenten oder Partikeln  $x_i$

# Mikroskopisches modellieren

## Definition

Ein Modell auf mikroskopischer Ebene simuliert das detaillierte Verhalten des zu betrachtenden Systems und es lassen sich genaue Wechselwirkungen zwischen den untersuchten Objekten feststellen.

Beispiele für solche Größen wären:

- ▶ Trajektorien von einzelnen Agenten oder Partikeln  $x_i$
- ▶ Geschwindigkeit  $v_i$

# Mikroskopisches modellieren

## Definition

Ein Modell auf mikroskopischer Ebene simuliert das detaillierte Verhalten des zu betrachtenden Systems und es lassen sich genaue Wechselwirkungen zwischen den untersuchten Objekten feststellen.

Beispiele für solche Größen wären:

- ▶ Trajektorien von einzelnen Agenten oder Partikeln  $x_i$
- ▶ Geschwindigkeit  $v_i$
- ▶ ODEs, SDEs, zellulare Automaten

# Makroskopisches modellieren

## Definition

Ein Modell auf makroskopischer Ebene beschreibt lediglich das Verhalten des gesamten Systems und einzelne Effekte, die nicht sichtbar zum Verhalten des Systems beitragen werden häufig vernachlässigt oder lassen sich nicht extrahieren.

# Makroskopisches modellieren

## Definition

Ein Modell auf makroskopischer Ebene beschreibt lediglich das Verhalten des gesamten Systems und einzelne Effekte, die nicht sichtbar zum Verhalten des Systems beitragen werden häufig vernachlässigt oder lassen sich nicht extrahieren.

Beispiele für solche Größen wären:

- ▶ Dichte  $\rho(t)$  einer Menschenmenge

# Makroskopisches modellieren

## Definition

Ein Modell auf makroskopischer Ebene beschreibt lediglich das Verhalten des gesamten Systems und einzelne Effekte, die nicht sichtbar zum Verhalten des Systems beitragen werden häufig vernachlässigt oder lassen sich nicht extrahieren.

Beispiele für solche Größen wären:

- ▶ Dichte  $\rho(t)$  einer Menschenmenge
- ▶ Potentiale oder Kurven

# Makroskopisches modellieren

## Definition

Ein Modell auf makroskopischer Ebene beschreibt lediglich das Verhalten des gesamten Systems und einzelne Effekte, die nicht sichtbar zum Verhalten des Systems beitragen werden häufig vernachlässigt oder lassen sich nicht extrahieren.

Beispiele für solche Größen wären:

- ▶ Dichte  $\rho(t)$  einer Menschenmenge
- ▶ Potentiale oder Kurven
- ▶ Anteil eines Stoffes im Blut

# Inhalt

Motivation

Modelle und Skalen

Random Walk

Numerische Simulationen

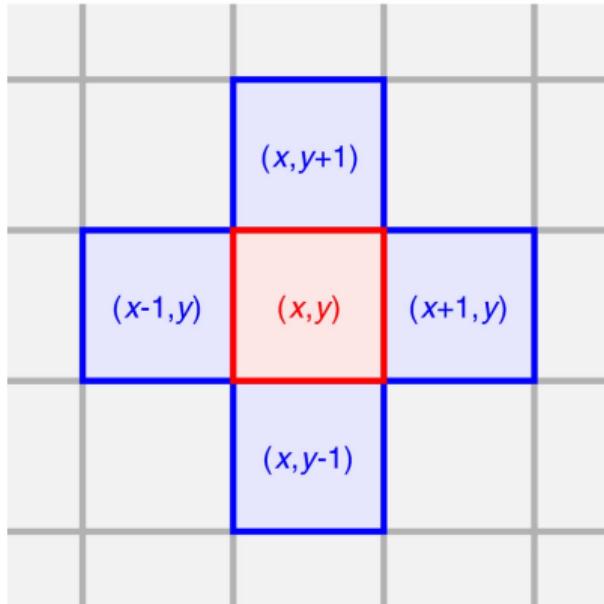
Interpretation der Resultate

## Definition

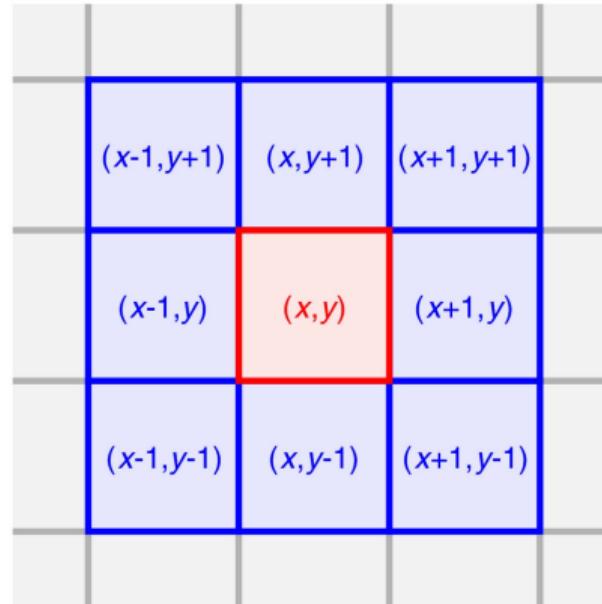
Der Random Walk ist ein stochastischer Prozess der die Trajektorie  $x_i(t)$  eines Agenten  $i$  durch die Abfolge von zufälligen Schritten, die innerhalb einer vorgegebenen Umgebung liegen, beschreibt.

# Random Walk Umgebungen

von Neumann



Moore



# Mastergleichung

## Zellulärer Automat als mathematische Gleichung

$$\begin{aligned}\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t) = & -\rho(x, t)\mathcal{T}^+(x, t) - \rho(x, t)\mathcal{T}^-(x, t) \\ & + \rho(x + \Delta x, t)\mathcal{T}^-(x + \Delta x, t) + \rho(x - \Delta x, t)\mathcal{T}^+(x - \Delta x, t)\end{aligned}\tag{1}$$

mit  $\rho \in \{0, 1\}$  die Dichte in Zeit  $t$  und Position  $x$

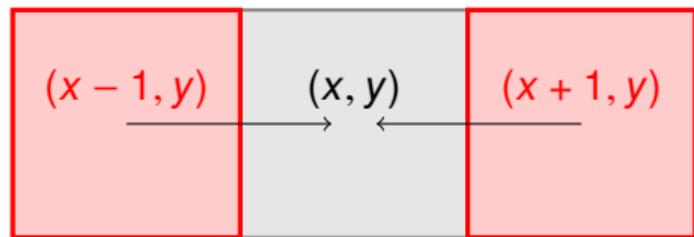
- ▶ Übergangsrate  $\mathcal{T}$  konstant führt zu Random Walk
- ▶ kann auch komplexer gewählt werden für umfangreichere Dynamiken  
(z.B. Size Exclusion)

# Size Exclusion

Size Exclusion als zusätzliche Vorschrift für Verhalten von Random Walk Agenten

zwei Agenten nicht in das selbe Feld zur selben Zeit

kann im Sinne der Mastergleichung durch einen Term  $(1 - \rho(x, t))$  in  $\mathcal{T}$  modelliert werden



# Inhalt

Motivation

Modelle und Skalen

Random Walk

Numerische Simulationen

Interpretation der Resultate

# Random Walk

Reihenfolge für das updaten der Agenten ist relevant

# Random Walk

Reihenfolge für das updaten der Agenten ist relevant

- ▶ sequentielles updaten

# Random Walk

Reihenfolge für das updaten der Agenten ist relevant

- ▶ sequentielles updaten
- ▶ Reihenfolge der Agenten mischen

# Random Walk

Reihenfolge für das updaten der Agenten ist relevant

- ▶ sequentielles updaten
- ▶ Reihenfolge der Agenten mischen
- ▶ paralleles updaten (Konflikt Lösung)

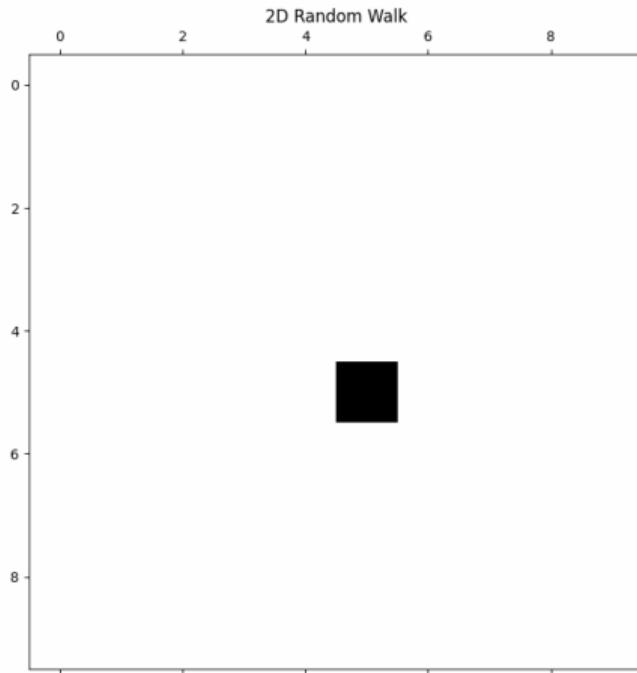
# Random Walk

Reihenfolge für das updaten der Agenten ist relevant

- ▶ sequentielles updaten
- ▶ Reihenfolge der Agenten mischen
- ▶ paralleles updaten (Konflikt Lösung)

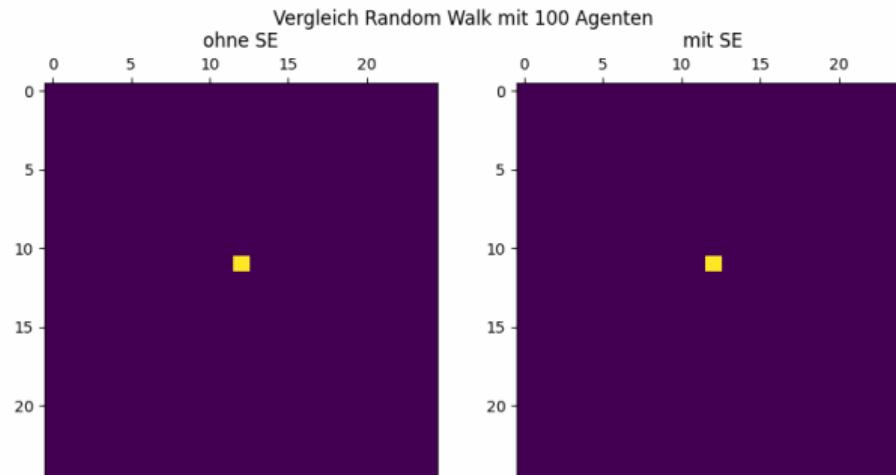
Für die Simulationen werden periodische Randbedingungen verwendet.

# Random Walk



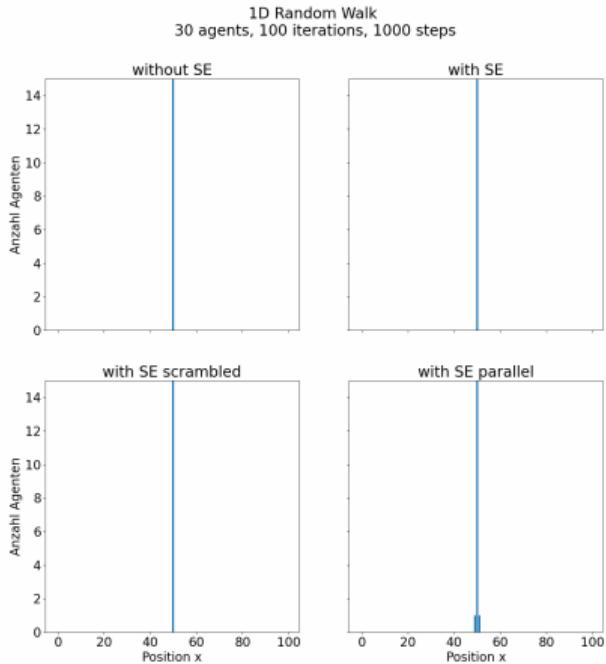
# Random Walk

# Random Walk mit mehreren Agenten



# Random Walk mit mehreren Agenten

# Monte Carlo Simulationen in 1D



## Monte Carlo Simulationen in 1D

## Herleitung der PDE

[t] Wir wollen aus der Mastergleichung eine PDE herleiten für das makroskopische Verhalten. Wählen wir  $\mathcal{T}$  konstant  $\frac{1}{3}$  resultiert die Mastergleichung in dem Random Walk.

$$\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t) = \frac{1}{3}(\rho(x + \Delta x, t) - 2\rho(x, t) + \rho(x - \Delta x, t)) \quad (2)$$

Nimmt man genügend Regularität an  $\rho$  an kann man es durch seine Taylorreihenentwicklung ersetzen

## Herleitung der PDE

[t] Wir wollen aus der Mastergleichung eine PDE herleiten für das makroskopische Verhalten. Wählen wir  $\mathcal{T}$  konstant  $\frac{1}{3}$  resultiert die Mastergleichung in dem Random Walk.

$$\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t) = \frac{1}{3}(\rho(x + \Delta x, t) - 2\rho(x, t) + \rho(x - \Delta x, t)) \quad (2)$$

Nimmt man genügend Regularität an  $\rho$  an kann man es durch seine Taylorreihenentwicklung ersetzen

$$\rho(x, t + \Delta t) = \rho(x, t) + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + O(\Delta t)^2 \quad (3)$$

$$\rho(x + \Delta x, t) = \rho(x, t) + \Delta x \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) + O(\Delta t)^3 \quad (4)$$

## Herleitung der PDE

Ersetzt man diese Terme in der Mastergleichung und setzt  $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$  konstant erhält man für  $\Delta t \rightarrow 0$ :

$$\partial_t \rho(x, t) = \frac{1}{3} \partial_{xx} \rho(x, t) \quad (5)$$

Was der Wärmleitgleichung entspricht welche eine explizite Lösung besitzt

## Diskretisierung der Heat Equation

Wir approximieren die Zeitableitung mit der Vorwärtsdifferenz:

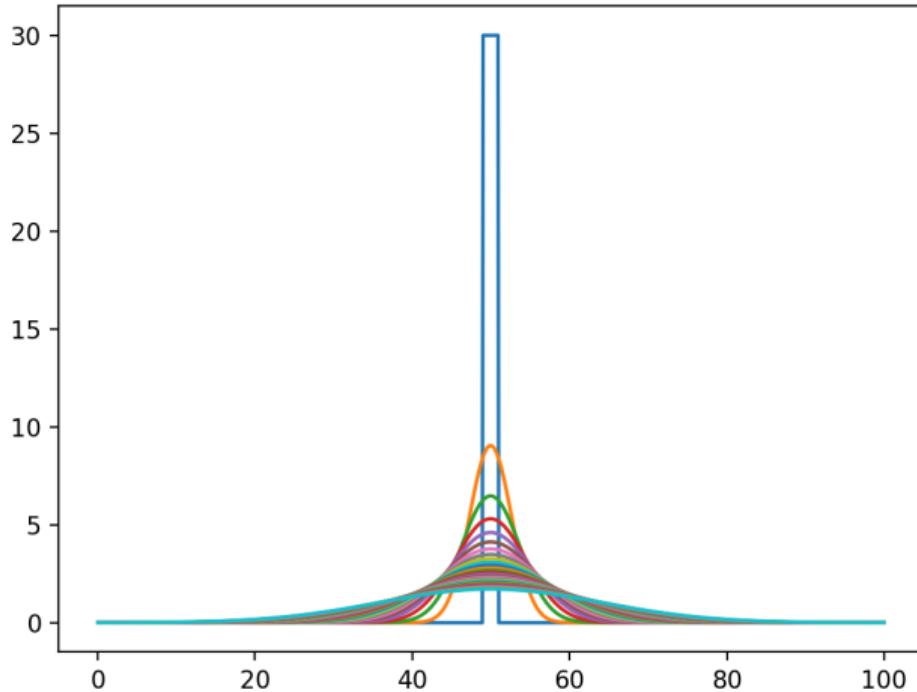
$$\partial_t \rho(x_j, t_n) \approx \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} \quad (6)$$

Wir approximieren die Ortsableitung mit der Zentraldifferenz zweiter Ordnung:

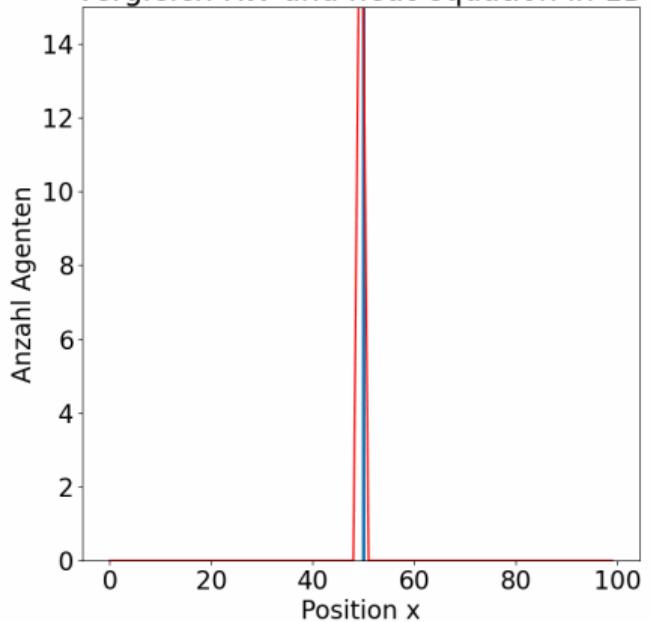
$$\partial_{xx} \rho(x_j, t_n) \approx \frac{U_{j-1}^n - 2U_j^n + U_{j+1}^n}{\Delta x^2} \quad (7)$$

Eingesetzt in die Differentialgleichung und umgeformt nach  $U^{n+1}$  erhält man genau die vorher gezeigte Mastergleichung mit Konstante  $\mathcal{T} \sim \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$

# Numerische Lösung der Wärmeleitgleichung

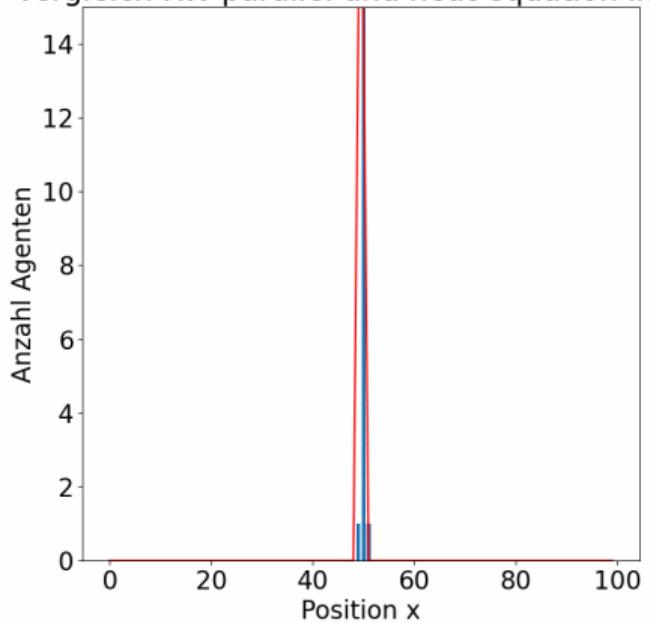


Vergleich RW und heat equation in 1D





Vergleich RW parallel und heat equation in 1D





# Inhalt

Motivation

Modelle und Skalen

Random Walk

Numerische Simulationen

Interpretation der Resultate

- ▶ alle mikroskopischen Modelle verhalten sich unterschiedlich
- ▶ die hergeleitete PDE verfehlt makroskopisches Verhalten des Random Walks mit Size Exclusion
- ▶ Vermutung: Masterequation hat keine Konfliktlösung eine andere PDE ist die richtige:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = \frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{1}{18} f(x, t) (-\mu f(x, t)^2 + \mu f(x, t) + 6) \quad (8)$$

## Quellen

-  Michael Fischer. "Applications of interacting particle systems in life- and social-sciences across scales". PhD thesis. Universität Wien, 2022.
-  Michael Fischer, Gaspard Jankowiak, and Marie-Therese Wolfram. "Micro-and macroscopic modeling of crowding and pushing in corridors". In: *arXiv preprint arXiv:1911.10404* (2019).
-  Julia Glock. "Infektionsraten über eindimensionale zelluläre Automaten". MA thesis. Universität Wien, 2021.
-  Bärbel Angelika Schlake. "Mathematical models for particle transport: Crowded motion". PhD thesis. Citeseer, 2011.
-  Xiao Song et al. "A data-driven neural network approach to simulate pedestrian movement". In: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 509 (2018), pp. 827–844.