

Algoritmus Metropolis a dopravní termodynamický model

Bc. Martina Šůsová¹

Abstrakt

Po zavedení termodynamického dopravního modelu se ukáže analytické odvození pravděpodobnostního rozdělení čistých vzdáleností mezi vozidly, které odpovídá naměřeným datům. Algoritmus Metropolis patří k metodám Monte Carlo, který minimalizuje potenciální energii systému. Ukáže se, že po ustálení potenciální energie generuje algoritmus stejné pravděpodobnostní rozdělení čistých vzdáleností jako je analyticky odvozené. V práci se srovnávají výsledky pro vyvážený a slabě mocninný potenciál a hledá se modifikace algoritmu za účelem optimalizace.

1 Úvod

Modelováním dopravy na jednoproudé komunikaci se zabývalo již mnoho lidí a existují relativně dobré modely fungující v praxi na bázi celulárních automatů. V tomto článku bude představen dopravní model založený na termodynamické teorii, pomocí které se analyticky odvodí hustota pravděpodobnosti pro rychlosti nehmotných bodů a pravděpodobnostní rozdělení vzdáleností nehmotných bodů. Tyto rozdělení jsou prakticky totožná s rozděleními, která generuje reálná doprava.

Algoritmus Metropolis byl vyvinut pro simulaci transportu nehmotných bodů a jeho podstatou je minimalizace potenciální energie systému náhodným posunem náhodného bodu. Po ustálení této potenciální energie odpovídá hustota pravděpodobnosti vzdáleností mezi body analyticky odvozenému pravděpodobnostnímu rozdělení.

Zde budou porovnávány dva tvary závislosti potenciální energie na vzdálenosti, a to vyvážený a slabě mocninný vztah. Pomocí algoritmu Metropolis se vyhodnotí potenciál lépe odpovídající reálné dopravě a ukáží se modifikace algoritmu, které vznikly za účelem optimalizace, tj. snížení iteračních kroků potřebných k ustálení potenciální energie.

2 Termodynamický model

Termodynamická teplota T představuje v dopravním kontextu psychické vypětí řidiče. Při vysoké teplotě se molekuly pohybují rychle, což značí nízké vypětí při nízké hustotě dopravy. Naopak při nízké termodynamické teplotě se molekuly pohybují pomalu,

¹Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, email: Valjemar@fjfi.cvut.cz

což znamená velkou hustotu dopravy. Ponořením systému nehmotných bodů do teplotní lázně o termodynamické teplotě T lze matematicky zanést psychiku řidičů do systému. Běžně se ovšem používá jiná dopravní veličina, která se nazývá inverzní teplota, a je definována pomocí termodynamické teploty jako $\beta = (kT)^{-1}$, kde k označuje Boltzmannovu konstantu.

Tento systém nehmotných bodů v teplotní lázni se omezí pro jednoduchost na jednorozměrný termodynamický dopravní plyn s krátkodosahovou repulzí, což znamená, že body se smí pohybovat pouze po přímce a nějakou silou F působí pouze na své dva nejbližší sousedy. Z Hamiltoniánu

$$H(\vec{v}, \vec{r}) = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N (v_i - w_i)^2 + \sum_{i=1}^N U(r_i) \quad (1)$$

se pak odvodí pomocí teorie statistické fyziky vztah pro sdruženou hustotu pravděpodobnosti

$$f(\vec{v}, \vec{r}) = \frac{1}{Z_N} \exp \left(-\frac{\beta m}{2} \sum_{i=1}^N (v_i - w_i)^2 - \beta \sum_{i=1}^N U_i \right), \quad (2)$$

kde r_i vzdálenost od předchůdce, v_i rychlost, w_i optimální rychlost pro i -tý bod a Z_N je partiční suma. Stejná hmotnost m pro všechny body se ve vztahu vyskytuje kvůli teorii. Hustota pravděpodobnosti pro rychlost se získá integrací sdružené pravděpodobnosti přes ostatní proměnné

$$q(v_i) = K e^{-\frac{\beta m}{2} (v_i - w_i)^2}, \quad (3)$$

což je normální rozdělení se střední hodnotou $\mu = w_i$ a rozptylem $\sigma^2 = (\beta m)^{-1}$, tzn. $K = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \beta m$. O něco složitějším způsobem [3] lze získat i vztah pro pravděpodobnostní rozdělení vzdáleností

$$\wp(r_i) \approx \vartheta(r_i) A e^{-B r_i} e^{-\beta U(r_i)}, \quad (4)$$

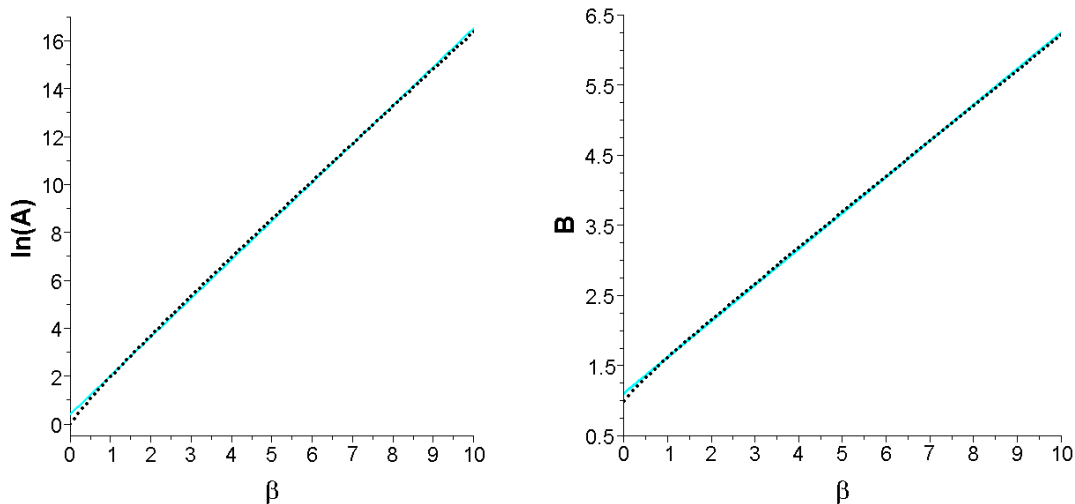
kde $\vartheta(r_i)$ je Heavisideova funkce. Normalizační konstanty A, B lze vypočítat ze soustavy rovnic

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \wp(r) dr &= 1, \\ \int_0^\infty r \wp(r) dr &= \langle r \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

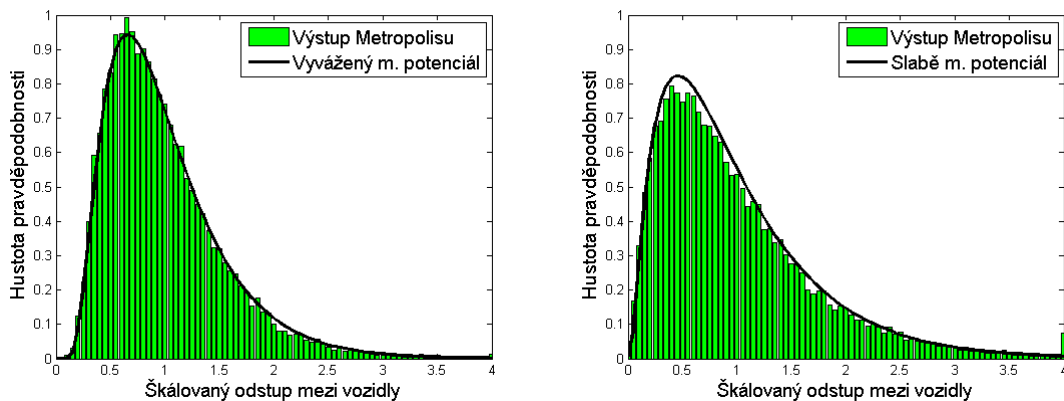
Ve vztahu (4) zbývá určit závislost potenciální energie na vzdálenosti. Jedoucí vozidla se nepřibližují na malé vzdálenosti, lze tedy předpokládat mezi nimi odpudivou sílu tvaru $F(r) = \frac{\alpha}{r^\gamma}$, $\gamma \in (0, \infty)$. Za platnosti $F(r) = -\text{grad}U(r)$ je pak $U(r) = \alpha \ln(r)$ pro $\gamma = 1$ a $U(r) = \frac{\alpha}{1-\gamma} r^{1-\gamma}$ pro $\gamma \neq 1$. Odtud

$\gamma \in (0, 1)$	polynomiální potenciál
$\gamma = 1$	logaritmický potenciál
$\gamma \in (1, 2)$	slabý mocninný potenciál
$\gamma = 2$	vyvážený mocninný potenciál
$\gamma > 2$	silný mocninný potenciál

Pro vyvážený mocninný potenciál $U(r) = (r)^{-1}$ existuje analytické odvození normalizačních konstant v pravděpodobnostním rozdělení vzdáleností [4]. Pro slabě mocninný potenciál $U(r) = (r)^{-\frac{1}{2}}$ se podařilo zatím najít pouze numerický odhad, a to $\ln A \approx 1,612\beta + 0,414$ a $B \approx 0,514\beta + 1,107$ (Obr. 1).



Obrázek 1: Grafy závislosti normalizačních konstant $\ln(A)$ a B na inverzní teplotě β . Černé body znázorňují numericky vypočítané hodnoty z (5) a tyrkysová přímka jejich lineární aproximaci.



Obrázek 2: Porovnání odvozených pravděpodobnostních rozdělení vzdáleností s rozdělením generovaným algoritmem Metropolis pro vyvážený a slabě mocninný potenciál.

3 Algoritmus Metropolis pro dopravní model

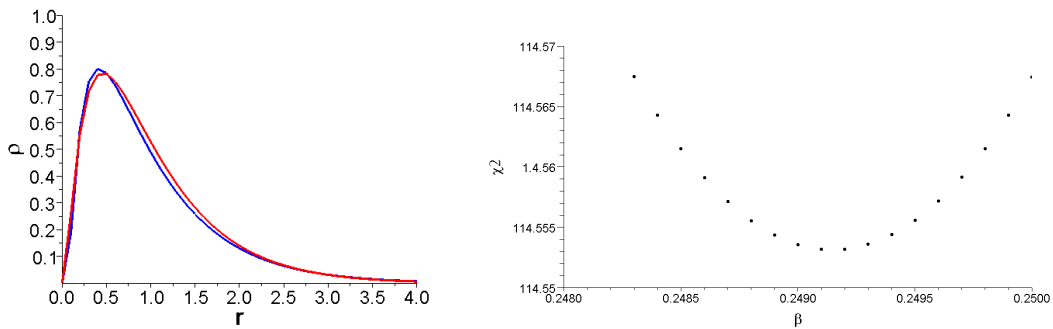
Nechť N nehmotných bodů se smí pohybovat po kružnici pouze jedním směrem. Nechť dále součet jejich vzdáleností od předchůdců R_i , $i \in \{1, \dots, N\}$ je roven jedné a poten-

ciální energie se počítá podle vztahu

$$U = \sum_{i=1}^N \frac{1}{R_i} \quad , \text{ resp. } \quad U = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{R_i}}. \quad (6)$$

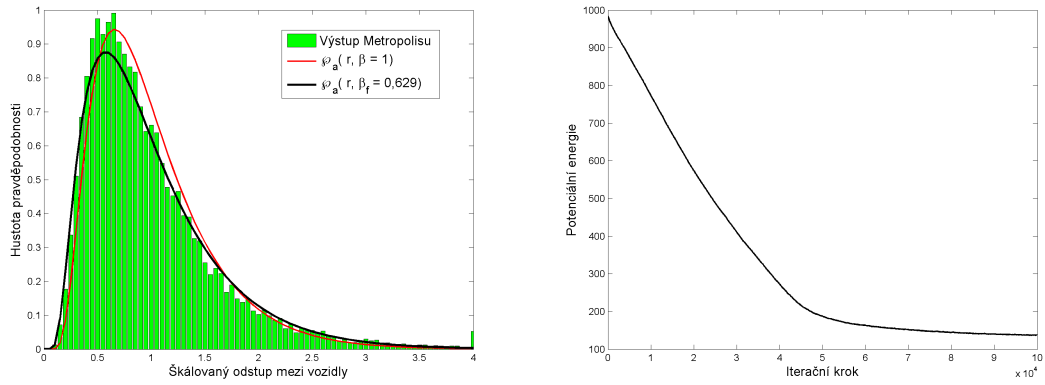
Pak iterační krok algoritmu Metropolis vypadá následovně:

- 1) Výpočet potenciální energie U_0 pro $\{R_1, R_2, \dots, R_N\}$.
- 2) Náhodný výběr indexu vozidla $j \in \{1, 2, \dots, N\}$.
- 3) Náhodný výběr $\delta \in (0, 1)$.
- 4) Je-li $\delta \geq R_j$, systém zůstane v původní konfiguraci. Jinak $R'_{j-1} = R_{j-1} + \delta$ a $R'_j = R_j - \delta$.
- 5) Pro novou konfiguraci $\{R_1, \dots, R_{j-2}, R'_{j-1}, R'_j, R_{j+1}, \dots, R_N\}$ výpočet potenciální energie U' .
- 6) Je-li $U' \leq U_0$, nahradíme vzdálenosti R_{j-1}, R_j vzdálenostmi R'_{j-1}, R'_j . Jinak vypočítáme Boltzmannův faktor $w = \exp[-\beta(U' - U_0)]$.
- 7) Náhodně vybereme $q \in (0, 1)$.
- 8) Je-li $w > q$, nahradíme vzdálenosti R_{j-1}, R_j vzdálenostmi R'_{j-1}, R'_j . Jinak systém zůstane v původní konfiguraci.

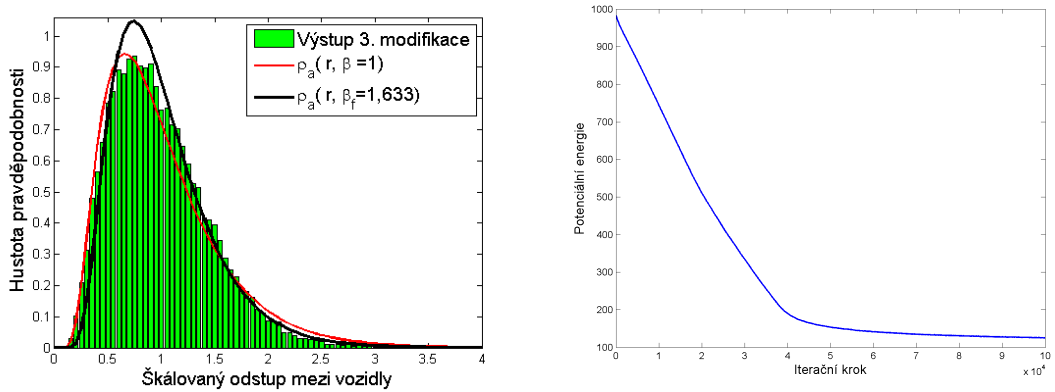


Obrázek 3: Hustoty pravděpodobností vzdáleností pro slabě mocninový potenciál (červená křivka, $\beta = 1$) a pro vyvážený mocninový potenciál (modrá křivka, $\beta = 0,2491$) při nejbližší shodě.

Potenciální energie je ustálená pro $N = 100$ a $\beta = 1$ v obou případech po 5 000 iteracích při počáteční konfiguraci rovnoměrného rozmístění bodů po dráze, tj. $R_i = 1, i \in \{1, \dots, N\}$. Obr. 2 naznačuje, že volba vyváženého mocninného potenciálu je vhodnější, protože pravé okolí nuly v reálné dopravě více odpovídá právě tomuto grafu. Tuto skutečnost potvrzuje i χ^2 test dobré shody, který zamítá hypotézu o shodě těchto dvou rozdělení i po minimalizaci statistiky přes inverzní teplotu v hustotě pravděpodobnosti vzdáleností pro slabě mocninný potenciál (Obr. 3)



Obrázek 4: Grafické srovnání výstupu klasického Metropolisu ($N = 100$, $\beta = 1$) s analyticky odvozenou křivkou pro hustotu pravděpodobnosti odstupů mezi vozidly a průměrné hodnoty potenciální energie v iteračních krocích při počáteční konfiguraci nahuštěných bodů.



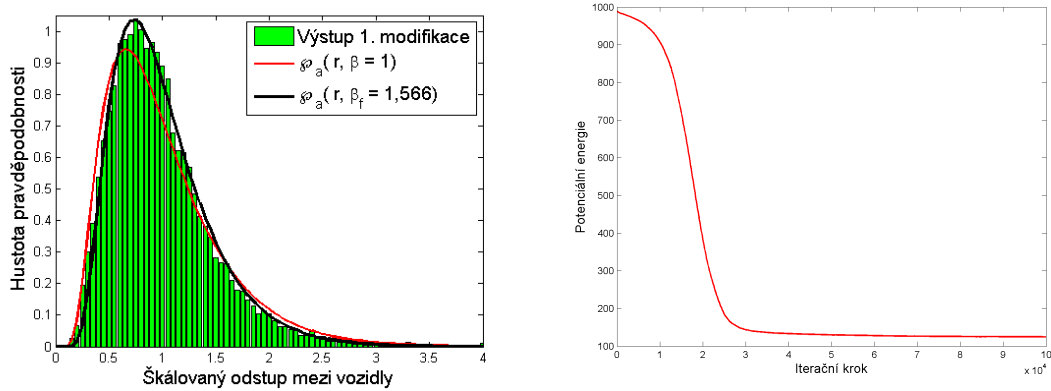
Obrázek 5: Grafické srovnání výstupu Metropolisu pro 1. modifikaci ($N = 100$, $\beta = 1$) s analyticky odvozenou křivkou pro hustotu pravděpodobnosti odstupů mezi vozidly a průměrné hodnoty potenciální energie v iteračních krocích při počáteční konfiguraci nahuštěných bodů.

4 Modifikace Metropolisu

V této sekci se modifikuje algoritmus pro počáteční konfiguraci nahuštěných bodů, konkrétně $R_i = 0, 1 \text{ pro } i \in \{1, \dots, N-1\}$. Opět $N = 100$ a $\beta = 1$. Generovaná pravděpodobnostní rozdělení budou porovnávána s analytickým odvozením hustoty pravděpodobnosti vzdáleností pro vyvážený mocinný potenciál $\varphi_a(r, \beta)$. Dále se označí β_f taková inverzní teplota, pro kterou bude Kolmogorova-Smirnova statistika minimální při testování hypotézy, že generovaná data pochází z analyticky odvozeného rozdělení.

Pro počáteční konfiguraci nahuštěných bodů je potenciální energie ustálena při použití klasické verze Metropolisu až po 100 000 iteracích (Obr. 4). Odstraní-li se v algoritmu náhodnost výběru posouvajícího bodu a budou-li se volit postupně za sebou, ustálí se potenciální energie při této 1. modifikaci po 100 000 iteracích (Obr. 5). Již z grafu je

ovšem zřejmé, že tato modifikace se nepřibližuje analyticky odvozené křivce.



Obrázek 6: Grafické srovnání výstupu Metropolisu pro 2. modifikaci ($N = 100$, $\beta = 1$) s analyticky odvozenou křivkou pro hustotu pravděpodobnosti odstupů mezi vozidly a průměrné hodnoty potenciální energie v iteračních krocích při počáteční konfiguraci nahuštěných bodů.

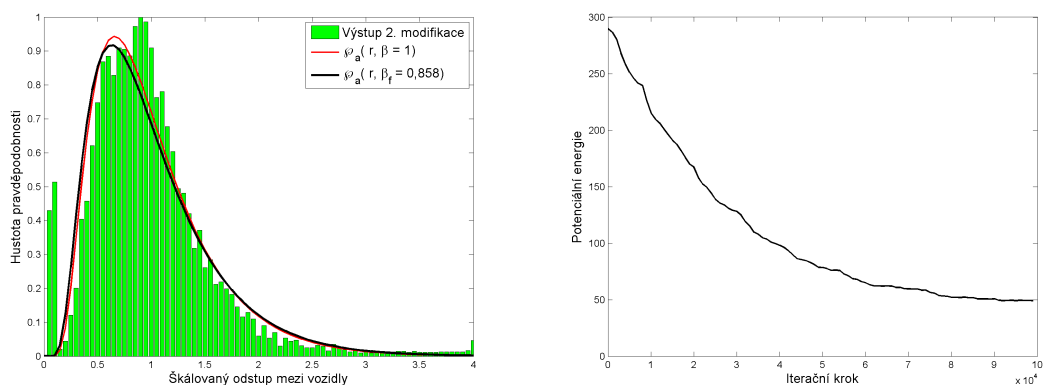
V klasické verzi algoritmu se pohybují body po jednom. V případě paralelního pohybu jsou dvě možnosti, je-li náhodný posun pro nějaký bod neuskutečnitelný. Buď se neposune (2. modifikace), nebo se bude vybírat náhodný posun tak dlouho, dokud nebude pohyb možný. Teprve po nalezení všech R'_i se zkoumá potenciální energie. V případě 2. modifikace nebyl problém a potenciální energie se ustálila při 50 000 iteracích (Obr. 6). Ale v případě 3. modifikace bylo nutné snížit počet bodů na $N = 30$, aby se zvýšila pravděpodobnost skoku v potenciální energii. Ovšem ani při 100 000 iteracích není potenciální energie ustálená (Obr. 7). Pro toto tvrzení je důkazem velký počet bodů se vzdáleností menší než 0,1. Tuto modifikaci nemá smysl studovat dále, protože k časové optimalizaci nevede.

Pro úplnost je nutné dodat výsledky Kolmogorova-Smirnova testu pro jednotlivé modifikace (Kritická hodnota pro zamítnutí je $KS^* = 0,95$.):

Modifikace	$KS(\beta)$	$KS(\beta_f)$	β_f
Klasický Metropolis s počátečními $R_i = 1$	0,4432	1,34e-08	1,120
Klasický Metropolis s počátečními $R_i = 0,1$	0,9987	0,9906	0,629
1. modifikace Metropolisu	≈ 1	0,1236	1,566
2. modifikace Metropolisu	≈ 1	0,9999	0,858
3. modifikace Metropolisu	≈ 1	0,9885	1,633

5 Závěr

V tomto článku se ukázalo, že termodynamický model se slabě mocninným potenciálem neaproximuje reálnou dopravu lépe než termodynamický model s vyváženým mocninným potenciálem. Dále se prokázalo, že 1. a 3. modifikace algoritmu Metropolis je nepoužitelná pro simulaci transportu nehmotných bodů. Naopak v případě počáteční konfigurace



Obrázek 7: Grafické srovnání výstupu Metropolisu pro 3. modifikaci ($N = 30$, $\beta = 1$) s analyticky odvozenou křivkou pro hustotu pravděpodobnosti odstupů mezi vozidly a průměrné hodnoty potenciální energie v iteračních krocích při počáteční konfiguraci nahuštěných bodů.

nahuštěných bodů je vhodnější použít 2. modifikaci algoritmu Metropolis než jeho klasickou verzi z důvodu časové náročnosti. Není-li ovšem počáteční konfigurace podstatná, časově nejoptimálnější je volit klasickou verzi algoritmu Metropolis s počáteční konfigurací rovnoměrně rozmístěných bodů po dráze, tj. $R_i = 1, i \in \{1, \dots, N\}$.

Poděkování

Práce vznikla za podpory SGS12/197/OHK4/3T/14 a z výzkumného programu MŠMT ČR (MSM 6840770039).

Reference

- [1] D. Helbing, *Traffic and related self-driven many-particle systems*, Reviews of Modern Physics **73** (2001), 1067, (<http://www.arxiv.org/abs/cond-mat/0012229>)
- [2] M. Krbálek, D. Helbing *Determination of interaction potentials in freeway traffic from steady-state statistics*, Physica A **333** (2004), 370
- [3] M. Krbálek, *Equilibrium distributions in a thermodynamical traffic gas*, J. Phys. A: Math. Theor. **40** (2007), 5813
- [4] M. Krbálek, *Socio-fyzikální modelování dynamiky transportních systémů*, habilitační práce, FJFI ČVUT Praha (2010)
- [5] R. Scharf, F. M. Izrailev, *Dyson's Coulomb gas on a circle and intermediate eigenvalue statistics*, J. Phys. A: Math. Gen. **23** (1990), 963
- [6] M. Šušová, *Analýza ustáleného stavu termodynamického dopravního plynu se slabou krátkodosahovou repulzí*, bakalářská práce, FJFI ČVUT (2011)