



## Projektarbeit zur Vorlesung Computergestütztes Wissenschaftliches Rechnen

Abgabedatum: 27.08.2021

Betreuung: Tristan Großkopf

### Projekt 28: Random Walk mit Nachwuchs

#### Einleitung

Auf einem eindimensionalen Gitter (Gitterplätze  $0, 1, \dots, L - 1$ ) mit  $L$  Plätzen und periodischen Randbedingungen startet ein random Walker bei 0. In jedem Zeitschritt macht ein Walker folgendes:

- 1) Mit Wahrscheinlichkeit  $p$  verschwindet er.
- 2) Mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p - q > 0$  ersetzt er sich (selbst am Platz  $x$ ) durch 2 neue Walker, einen bei  $x - d$  und einen bei  $x + d$ , mit  $d$  einer ganzen Zahl. Sollte einer dieser Plätze schon besetzt sein, so bleibt von den beiden aufeinander treffenden Walkern nur einer übrig, d.h. der Platz bleibt (einfach) besetzt.
- 3) Mit Wahrscheinlichkeit  $q$  bewegt er sich um eine Gitterkonstante, und zwar mit  $q/2$  nach links und mit  $q/2$  nach rechts. Sollte der Zielplatz besetzt sein, bleibt wieder nur 1 Walker übrig.

Sind mehrere Walker vorhanden, so wird in jedem Zeitschritt ein Walker zufällig ausgewählt, der sich zwischen den obigen Möglichkeiten entscheidet. Setzen Sie  $q = 0.5$ , d.h. die möglichen  $p$ -Werte liegen in  $[0, 0.5]$ .

#### Aufgaben

1. **(50 P)** Schreiben Sie ein Programm, das diese Walks für drei verschiedene  $d$  simuliert und untersuchen Sie, wie sich die mittlere Dichte, d.h. die Anzahl der von Walkern besetzten Plätze dividiert durch  $L$  für große Zeiten als Funktion von  $p$  verhält. Starten Sie dazu für jedes  $p$   $N = 500$  Walker bei  $x = 0$  und bilden Sie den Mittelwert. Geben Sie auch die Standardabweichung an.
2. **(30 P)** Untersuchen Sie jetzt die Konvergenz der mittleren Dichte über  $N$ . Plotten Sie die Entwicklung des Mittelwerts mit wachsendem  $N$ . Plotten Sie außerdem die Entwicklung der Standardabweichung mit  $N$  doppellogarithmisch. Entspricht die Abhängigkeit der Standardabweichung Ihrer Erwartung?

## Hinweise zur Programmierung

- Eine Konfiguration des Systems können Sie in einem Feld der Länge  $L$  abspeichern, das die Besetzungszahlen enthält (1=besetzt, 0=frei, Mehrfachbesetzungen kommen nicht vor).

Würfeln Sie in jedem Zeitschritt zunächst einen Walker, d.h. einen besetzten Platz. Sie können dann mit einer weiteren gewürfelten Zufallszahl  $r \in [0, 1]$  entscheiden was passiert.

- 1.) Ist  $r < p$ , so verschwindet der Walker.
- 2.) Ist  $p < r < 1 - q$ , so verdoppelt sich der Walker.
- 3.) Ist  $1 - q < r < 1 - (q/2)$ , so springt er nach rechts.
- 4.) Ist  $1 - (q/2) < r < 1$ , so springt er nach links.

## Allgemeine Hinweise zur Abgabe

### • Code

- Der C-Code, den Sie abgeben, muss zuverlässig die (ebenfalls abzugebenden) Daten generieren. Insbesondere muss er auf dem im CIP-Pool der Physik installierten Linux-System kompilierbar sein und ohne Laufzeitfehler durchlaufen. Die Kompilation des C-Programms muss durch ein Makefile automatisiert sein.
- Auch die im Bericht gezeigten Plots müssen mit ebenfalls abzugebendem Python-Code reproduzierbar sein. Auch dieser muss im CIP-Pool lauffähig sein. Die eigentliche Berechnung/Simulation soll im C-Code stattfinden, der Python-Code soll also wirklich nur zum Plotten und ggf. zur vorbereitenden Strukturierung der Daten verwendet werden.
- Der abgegebene Code muss gut lesbar und sinnvoll strukturiert sein. Kompliziertere Code-Blöcke sollen dabei mit Code-Kommentaren erläutert werden.

### • Bericht

Der Umfang des abgegebenen Berichts darf *höchstens* 10 Seiten betragen. Stellen Sie den im Folgenden dargestellten Inhalt darin knapp auf deutsch oder englisch dar. Beachten Sie, dass ein Bericht ein zusammenhängender Text ist; eine Sammlung von Stichworten ist kein Bericht. Der Bericht ist außerdem ein wissenschaftlicher Text, d.h. im Prinzip muss es möglich sein, die beschriebene Simulation anhand des Berichts nachzuprogrammieren und auf dieselben Ergebnisse zu kommen. Das heißt insbesondere, dass Sie *eigene* Parameterwahlen dokumentieren müssen. (Sie dürfen aber davon ausgehen, dass dem/der Leser/in das Aufgabenblatt vorliegt, Sie müssen also nicht unbedingt alle darin gegebenen Parameterwahlen, physikalische Größen usw. wiederholen, es kann jedoch für die Lesbarkeit vorteilhaft sein)

1. **Einleitung:** Kurze Einführung in das Thema bzw. das zu simulierende Modellsystem, sowie Nennung der untersuchten Fragestellung(en) und der verwendeten Methodik.
2. **Theorie:** Ggf. in der Aufgabenstellung geforderte analytische Rechnungen und Herleitungen, Diskretisieren von Differenzialgleichungen usw.
3. **Methodik:** Kurze Darstellung der verwendeten Algorithmen und wofür sie im Projekt eingesetzt wurden (jeweils 1–2 Absätze).

4. **Implementation:** Kurze Beschreibung des C-Programms (Struktur und Programmflow, Verwendung von Bibliotheken, Besonderheiten). Falls die typische Laufzeit Ihres Programms länger als etwa eine Minute dauert, sollten Sie dies hier ebenfalls erwähnen.
5. **Ergebnisse und Diskussion:** Der wichtigste Teil sind natürlich die Darstellung der in der Aufgabenstellung geforderten Ergebnisse, Plots und Diskussionen bzw. Antworten auf die gestellten Fragen. Plots müssen korrekte Achsenbeschriftungen tragen und alle darin dargestellten Datensätze müssen z.B. durch eine Legende und/oder in der Bildunterschrift eindeutig identifizierbar sein. Alle Plots müssen im Haupttext eingeführt und die darin dargestellten Ergebnisse diskutiert werden.

- **Bewertung**

Die maximale Punktzahl ist **100**, die Projektarbeit gilt als bestanden, wenn mindestens **50 Punkte** erreicht werden. 80 Punkte entfallen auf die projektspezifischen Aufgabenstellungen. Jeweils 10 Punkte werden für Lesbarkeit des Programmcodes und für die allgemeine Qualität der Darstellung von Daten in Plots vergeben.

- **Abgabe**

Abzugeben sind der Programmcode mit Makefile, der Bericht als PDF, generierte Datensätze und der Plotting-Code. (Plots müssen nicht einzeln abgegeben werden, sondern sind Teil des Berichts; eventuelle  $\text{\TeX}$ -Quelldateien müssen auch nicht mit abgegeben werden.) Laden Sie alle abzugebenden Dateien in Ihren jeweiligen Gruppen-Dateiordner auf Stud.IP hoch. Das Abgabedatum finden Sie am Anfang dieses Dokuments.