

2. Aufgabenblatt zum Wahlpflichtfach: Computersimulationen von Vielteilchensystemen

Aufgabe

Ein unverzichtbarer Bestandteil von Monte-Carlo-Simulationen ist ein Zufallszahlengenerator. Eigentlich handelt es sich wegen des rechnerseitigen Determinismus immer nur um Pseudozufallszahlen, diese Begriffsunterscheidung vernachlässigen wir aber im Folgenden.

Zufallszahlen sollen schnell und effizient vom Rechner zur Verfügung gestellt werden. Normalerweise werden Gleitkommazahlen zwischen 0 und 1 benötigt. Ein schlechter Zufallszahlengenerator kann zu systematischen Fehlern in den Simulationsergebnissen führen.

Lineare Kongruenzgeneratoren stellen eine einfache und weit verbreitete Art dar, zufällig aussehende Zahlenfolgen zu erzeugen. Dabei wird ein konstanter Faktor c zusammen mit einem Seed (Zahl, mit der die Iterationsvorschrift gestartet wird) gewählt. Die Zahlenfolge berechnet man mit

$$\chi_n = (c\chi_{n-1} + a_0) \pmod{N_{max}} \quad (1)$$

wobei \pmod die Modulo-Operation bezeichnet. χ_n ist dann eine ganze Zahl zwischen 0 und $(N_{max} - 1)$.

- a) Implementieren Sie einen linearen Kongruenzgenerator mit den Werten $c = 1277$ und $N_{max} = 2^{17}$. Wir wählen $a_0 = 0$, so dass es sich in diesem Fall um einen multiplikativen Kongruenzgenerator handelt. Sorgen Sie dafür, dass die Ausgabewerte Ihres Zufallszahlengenerators aus dem Intervall $[0, 1]$ sind.
Den Seed χ_0 können Sie frei wählen. Achten Sie allerdings darauf, dass bei der ersten Multiplikation $c\chi_0$ mit $c = 1277$ nicht der maximal zulässige Wert von $2^{31} - 1$ für eine `integer`-Variable auf unserem System überschritten wird. Was passiert, wenn dies doch geschieht?
- b) Schreiben Sie dann in eine Datei `ausgabe.dat` 10^4 Zeilen mit jeweils zwei Spalten an Zufallszahlen Ihres Generators.
- c) Ein einfacher Test für die Güte Ihrer Zufallszahlen ist der sogenannte „Parking Lot Test“. Tragen Sie dafür z.B. mit `gnuplot` die 10^4 Zufallszahlenpaare aus Ihrer Datei `ausgabe.dat` in der Ebene auf (`gnuplot> plot 'ausgabe.dat' u 1:2 w p pt 6`). Was stellen Sie fest?
- d) Verwenden Sie nun $N_{max} = 2^{17} - 1$ und wiederholen Sie Dateiausgabe und Parking-Lot-Test. Welche Veränderungen zu (c) fallen Ihnen auf? Welcher Satz an Startparametern ist offensichtlich die günstigere Wahl?