Μεταπτυχιακό Υπολογιστικής Φυσικής

Υπολογιστική Κβαντομηχανική

**Κωνσταντίνος Τσαχαλίνας**, Α.Μ. 4363

**Προσομοίωση αυθόρμητης διάσπασης με μέθοδο Monte-Carlo, στην Python**

***'Spontaneous decay: Applying a Monte-Carlo method in Python'***

Το εν λόγω πρόγραμμα αποτελεί Monte-Carlo προσομοίωση του μηχανισμού της αυθόρμητης ραδιενεργού διάσπασης. Καθώς ο φυσικός μηχανισμός της αυθόρμητης διάσπασης είναι στην καρδιά του πιθανοκρατικός, η ιδία στοχαστική φύση της Monte-Carlo μεθόδου, αποτελεί - κατά γενικότερη παραδοχή – την ρεαλιστικότερη μέθοδο προσομοίωσης του συγκεκριμένου φαινομένου, καθώς, συν τοις άλλοις, εφαρμόζεται πιθανοκρατικά επί διακριτού αριθμού ατόμων κάθε φορά, σε αντίθεση με την ντετερμινιστική και απειροστική προσέγγιση μέσω της αντίστοιχης διαφορικής εξίσωσης.

Το σχετικό πρόγραμμα python (**spont_decay_v2.py)** αποτελεί τροποποιημένη και εμπλουτισμένη με νέα προγραμματιστικά στοιχεία, γραφήματα και υπολογιστικά αποτελέσματα μορφή του αυθεντικού προγράμματος (decay.py) του βιβλίου.

Ο φυσικός μηχανισμός, ο οποίος προσομοιώνεται, είναι ο εξής: Κατά τη χρονική στιγμή ***t=0***, κανένα άτομο από όλο τον πληθυσμό των ***N*** διαθέσιμων ατόμων δεν έχει υποστεί διάσπαση ($N=N_o$, *αρχική συνθήκη*). Στο εξής όμως, σε κάθε χρονικό βήμα, η πιθανότητα αυθόρμητης διάσπασης καθενός ατόμου του πληθυσμού θα είναι ***p***. Η ποσότητα **p**, υπό άλλη οπτική γωνία, αποτελεί και τη *σταθερά ρυθμού διάσπασης* ***λ*** ***(****decay rate constant,* διαστάσεις: $sec^{-1}$), που υπεισέρχεται στην εξίσώση πεπερασμένων διαφορών:

$$[\Delta N(t)/N(t)]\ /\ \Delta t = -\lambda, \quad \text{ή} \quad \Delta N(t)/\Delta t = -\lambda\ N(t)$$

Λαμβάνοντας το όριο στο συνεχές, προκύπτει η αντίστοιχη ΔΕ:

$$dN(t)/dt = -\lambda\ N(t)$$

η οποία έχει λύση την:

$$N(t) = N(0)\ e^{-\lambda t}$$

Κατά συνέπεια, σε κάθε χρονική στιγμή ο απομένων πληθυσμός μη διασπασμένων ατόμων θα ελαττώνεται, εκτελώντας εκθετική μείωση (είτε γραμμική, *κλίσης* ***-λ***, υπό semi-log προβολή) μέχρις ότου αυτός εκμηδενιστεί οριστικά.

Βάση του προγράμματος αποτελεί το σύστημα διπλού βρόχου (*nested loops*), το οποίο λειτουργεί ως εξής:

- Ο εξωτερικός βρόχος προσομοιώνει το μηχανισμό χρονικής εξέλιξης του φαινομένου, διατρέχοντας ένα δημιουργηθέν χρονο-διάνυσμα που παρέχει διαδοχικά monte-carlo χρονικά βήματα μέσα σε ένα μήκος προκαθορισμένου μεγέθους.

- Ο εσωτερικός βρόχος (σε κάθε χρονικό βήμα) σαρώνει τον αριθμό των διαθέσιμων μη-διασπασμένων (non-decayed) ατόμων, εφαρμόζοντας για το καθένα από αυτά τον monte-carlo μηχανισμό: Συγκεκριμένα, από τη γεννήτρια ψευδο-τυχαίων αριθμών της python αντλείται ψευδο-τυχαίος ***rnd***, ***uniform-κατανομής*** στο διάστημα *[0,1)*, και αποθηκεύεται σε διάνυσμα (για περαιτέρω γραφική απεικόνιση). Αν ο εν λόγω rnd είναι μικρότερος της πιθανότητας διάσπασης ***p*** (ή, ισοδύναμα, σταθεράς ρυθμού διάσπασης ***λ***), θεωρούμε ότι το άτομο υφίσταται αυθόρμητη διάσπαση, οπότε ο συνολικός αριθμός ***N*** των μη-διασπασμένων ατόμων αναθεωρείται ισόποσα, κ.ο.κ.

Όταν (στο συγκεκριμένο χρονικό βήμα ***t=κ***) έχει διερευνηθεί όλος ο υφιστάμενος πληθυσμός $N_{non\text{-}decayed}(t_{\kappa-1})$, κρατείται σε διάνυσμα η εν λόγω ποσότητα $N_{non\text{-}decayed}(t_{\kappa})$ αυτού του βήματος και προχωράμε επαναληπτικά στο επόμενο χρονικό βήμα εξέλιξης.

Η παραπάνω μεθοδολογία ακολουθείται μέχρις ότου εξαντληθεί ο αριθμός των διαθέσιμων μη-διασπασμένων ατόμων N.

**Ευθεία γραμμικής παλινδρόμησης** (*ελαχίστων τετραγώνων*)

Είναι γνωστό από τη σχετική θεωρία ότι τα δεδομένα του διανυσμάτος χρόνου ***tV*** ως προς τα αντίστοιχα του διανύσματος λογαρίθμου αριθμών μη-διασπασμένων ατόμων, ***log[N<sub>non-decayed</sub>(tV)]*** συνδέονται με γραμμική σχέση (απεικονίζονται σε ευθεία γραμμή). Νέο χαρακτηριστικό της συγκεκριμένης εκδοχής του προγράμματος αποτελεί ο (διανυσματικός) υπολογισμός της *ευθείας παλινδρόμησης* (*ελαχίστων τετραγώνων*), από την αρχή του χρόνου προσομοίωσης, μέχρις ενός επιλεγμένου μέγιστου χρονικού βήματος $t_{max}$, που αντιστοιχεί σε καλή γραμμικότητα μεταξύ των συσχετιζόμενων μεγεθών. Η *κλίση (slope)* ***a*** της ευθείας παλινδρόμησης παρέχει τη σταθερά ρυθμού διάσπασης (στη μορφή ***-λ***) του πιθανοκρατικού μηχανισμού και ιδανικά θα πρέπει (ως απόλυτη τιμή) να προσεγγίζει με καλή ακρίβεια την *default τιμή* ***lambda*** της monte-carlo προσομοίωσης

**Program print-out**

Το πρόγραμμα σε κάθε χρονικό βήμα, κατά πρώτον εκτυπώνει τον αριθμό των μη-διασπασμένων ατόμων, $\mathbf{N_{non\text{-}decayed}}$, τόσο ως απόλυτο αριθμό, όσο και ως ποσοστό (%) επί του αρχικού πληθυσμού $N_o$, καθώς και το συνολικό αριθμό monte-carlo πιθανοκρατικών συγκρίσεων ή – ισόποσα -των ψευδοτυχαίων στο [0,1) που χρησιμοποιήθηκαν, μέχρι την οριστική εξάντληση του πληθυσμού.

Επιπλέον, βάσει των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης, υπολογίζεται και εκτυπώνεται ο ***χρόνος ημίσειας ζωής*** του ραδιενεργού δοσμένης σταθεράς ρυθμού διάσπασης **λ**, η τιμή του **λ**, όπως υπολογίζεται από την **ευθεία παλινδρόμησης** (*κλίση a της ευθείας*) και το μεταξύ τους **σχετικό (%) σφάλμα**:

```
time = 0  | non-decayed population : 100000/ 100000 atoms ( 100 % )
time = 1  | non-decayed population : 99504 / 100000 atoms ( 99.5 % )  m.c. tries : 1.0000e+05
time = 2  | non-decayed population : 99009 / 100000 atoms ( 99.0 % )  m.c. tries : 1.9950e+05
time = 3  | non-decayed population : 98520 / 100000 atoms ( 98.5 % )  m.c. tries : 2.9851e+05
time = 4  | non-decayed population : 98012 / 100000 atoms ( 98.0 % )  m.c. tries : 3.9703e+05
………………
time = 2305  | non-decayed population : 1 / 100000 atoms ( 0.001 % )  m.c. tries : 2.0022e+07
time = 2306  | non-decayed population : 1 / 100000 atoms ( 0.001 % )  m.c. tries : 2.0022e+07
time = 2307  | non-decayed population : 1 / 100000 atoms ( 0.001 % )  m.c. tries : 2.0022e+07
time = 2308  | non-decayed population : 0 / 100000 atoms  ( 0.0 % )   m.c. tries : 2.0022e+07

total monte-carlo tries involved : 20021650

half-life time =  138 mc time-steps (directly from simulation)

regression line slope : -0.0050921861588
actual decay-rate constant : 0.005 (time-step^-1)
rel. error :  1.84372317609 %
```

**Γραφήματα παραγόμενα από το πρόγραμμα**

Το πρόγραμμα, στην παρούσα τροποποιημένη εκδοχή, παράγει άμεσα δύο τύπους διαγραμμάτων (συν έναν τρίτο, προαιρετικό):

**(α)** Αφ'ενός (ως ***Figure 1***) παρέχεται το **ημι-λογαριθμικό διάγραμμα** (x-logy) χρόνου **t** (mc steps) vs. αριθμού μη διασπασμένων ατόμων **N(t)**, όπως προέκυψαν από την προσομοίωση για δοσμένο θεωρητικό **λ** και δοσμένο αρχικό αριθμό ατόμων $\mathbf{N_o}$. Από το ημιλογαριθμικό διάγραμμα αναδύεται άμεσα η γραμμική εξάρτηση $\mathbf{log[N_{non\text{-}decayed}(t)}$ vs. **t.** Στο ίδιο διάγραμμα απεικονίζεται γραφικά και η αντίστοιχη ευθεία ελαχίστων τετραγώνων, αφού προηγουμένως τα δεδομένα της έχουν μετασχηματιστεί εκθετικά κατάλληλα, ώστε η ευθεία παλινδρόμησης να παρέχεται ως τέτοια στη semi-log απεικόνιση. Στον τίτλο του διαγράμματος τυπώνεται η υπολογισθείσα κλίση της ευθείας παλινδρόμησης, προς σύγκριση με τη θεωρητική τιμή του λ.
**(β)** Επιπλέον, έχοντας εκ των προτέρων κρατήσει σε διάνυσμα κάθε ψευδο-τυχαίο rnd που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα προσομοίωση, το σύνολό τους απεικονίζεται σε **ιστόγραμμα συχνοτήτων** κατάλληλης διαμέρισης (***Figure 2***), προς επίρρωση της ποιότητας της γεννήτριας ψευδο-τυχαίων **uniform κατανομής** της python.
**(γ)** Τέλος, προαιρετικά και (λόγω όγκου δεδομένων) μόνο για σχετικά μικρό αρχικό αριθμό ατόμων $N_o$ (ενδεικτικά, *$N_o$<1000)*, παρέχεται και το ***scatterplot*** όλων των παραπάνω τυχαίων αριθμών rnd vs. ενός δείκτη της κατά σειρά παραγωγής τους.

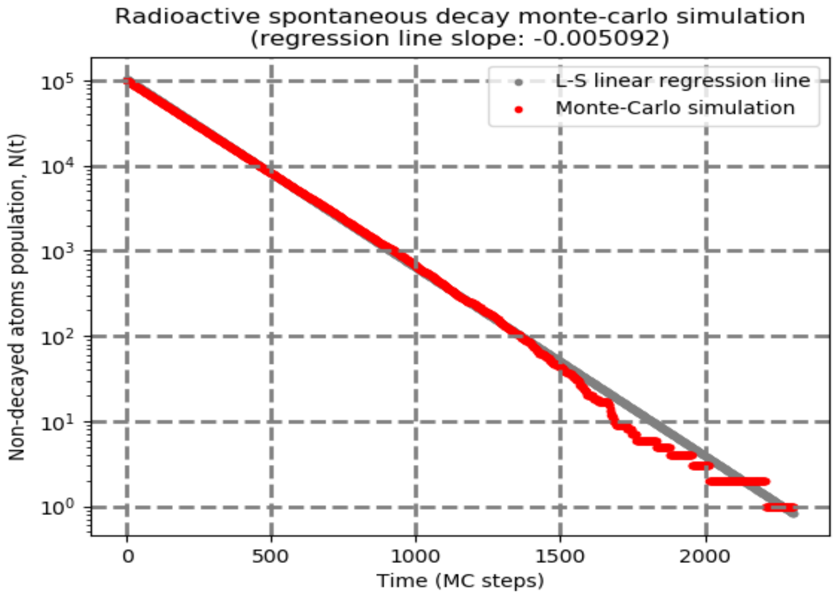


**Figure 1**

Ημι-λογαριθμική απεικόνιση αριθμού μη διασπασμένων ατόμων **N(t)** vs. χρόνου **t** (mc steps), όπως προέκυψαν από την monte-carlo προσομοίωση για δοσμένο θεωρ. **λ**. (εν προκειμένω, ***p = λ = 0.005***, ***$N_o$ = $10^5$ άτομα***). Η αντίστοιχη ευθεία παλινδρόμησης σχεδιάζεται στο background και η «εξαφάνισή» της στα χαμηλότερης χρον. τάξης δεδομένα υποδηλώνει καλή σύμπτωση θεωρητικής και υπολογιστικής συμπεριφοράς, ως προς την αναδυόμενη γραμμικότητα υπό semilog προβολή. Στα ανώτερης χρονικής τάξης δεδομένα (*t>1500 mc steps*), εξαιτίας του μικρού πια αριθμού αδιάσπαστων ατόμων, αναδεικνύεται η στοχαστική συμπεριφορά της αυθόρμητης διάσπασης (απόκλιση από τη γραμμικότητα)

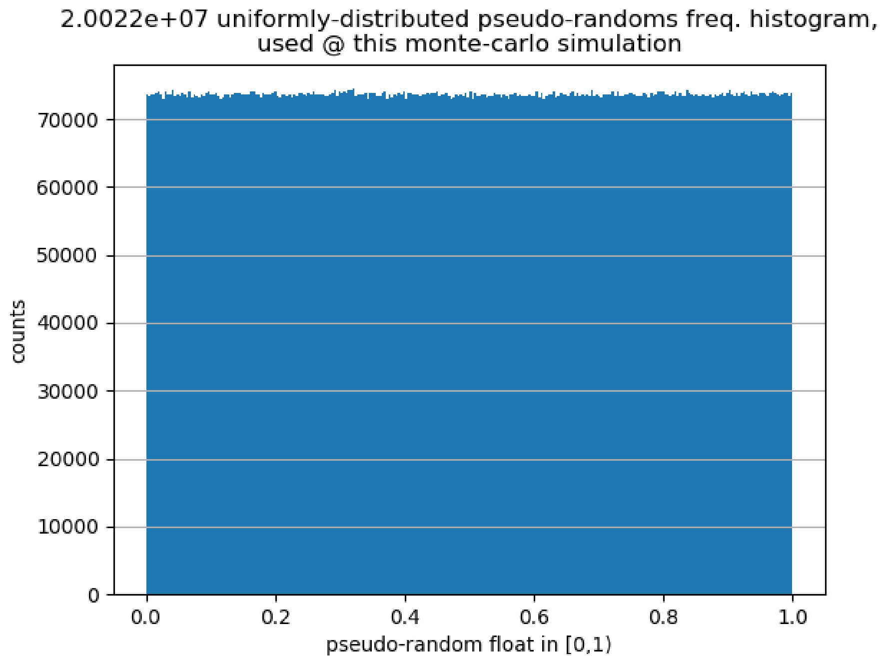


**Figure2**

Ιστόγραμμα συχνοτήτων όλων των ψευδο-τυχαίων αριθμών, ***uniform κατανομής*** στο [0,1), που αξιοποιήθηκαν στην παρούσα ***monte-carlo*** προσομοίωση. Παρατηρούμε το χαρακτηριστικό flat σχήμα της κατανομής στο εν λόγω διάστημα τιμών.