Projeto 2: Decaimento radioativo e números aleatórios

Pedro de Carvalho Braga Ilídio Silva - 9762595

Abril de 2017

1 Introdução

O presente projeto visa o estudo da implementação de números pseudo-aleatórios na linguagem de programação Fortran90. Serão criados e analisados geradores congruentes lineares. Em um segundo momento, será estudada uma aplicação típica: o processo de decaimento radioativo para uma determinada quantidade de amostras de núcleos instáveis. Gráficos do decaimento serão elaborados e sua natureza, discutida.

2 Desenvolvimento

2.1 Números aleatórios

Criou-se um gerador congruente linear de números aleatórios sob a forma de uma subrotina, chamada GENRDM (de "generate random number"). Seu funcionamento consistia em modificar uma variável inteira R, cujo valor inicial se nomeia "semente" ou "seed", para um novo valor randômico a cada chamada, segundo a seguinte expressão:

$$R = MOD(aR + c, m)$$

Em que MOD é a função nativa para a operação de módulo no FORTRAN e a, c e m são parâmetros inteiros.

Para medir o período do gerador, armazenou-se a semente também em outra variável A1, e executou-se um laço DO WHILE (R /= A1), que chamava GENRDM em R e incrementava uma variável contadora a cada ciclo.

É importante notar que fez-se necessário chamar a subrotina uma única vez antes do laço, para impedir que o condicional R /= A1 fosse violado já na primeira execução do loop e este, portanto, nem iniciasse. Disso resulta que a contadora deve iniciar em 1.

O programa descrito, incrementado de impressões auxiliares, foi rodado a partir de cinco valores sementes distintos, com os parâmetros $a = 7$,$c = 4$ e $m = 15$, culminando no seguinte output:

SEED:	1		
R	1 :		11
R	2 :		6
O PERIODO VALE		3	
SEED:	5		
R	1 :		9
R	2 :		7
R	3 :		8
R	4 :		0
R	5 :		4
R	6 :		2
R	7 :		3
R	8 :		10
R	9 :		14
R	10 :		12
R	11 :		13
O PERIODO VALE		12	
SEED:	10		
R	1 :		14
R	2 :		12
R	3 :		13
R	4 :		5
R	5 :		9
R	6 :		7
R	7 :		8
R	8 :		0
R	9 :		4
R	10 :		2
R	11 :		3
O PERIODO VALE		12	

SEED:	9		
R	1	:	7
R	2	:	8
R	3	:	0
R	4	:	4
R	5	:	2
R	6	:	3
R	7	:	10
R	8	:	14
R	9	:	12
R	10	:	13
R	11	:	5
O PERIODO VALE		12	

SEED:	12		
R	1	:	13
R	2	:	5
R	3	:	9
R	4	:	7
R	5	:	8
R	6	:	0
R	7	:	4
R	8	:	2
R	9	:	3
R	10	:	10
R	11	:	14
O PERIODO VALE		12	

Percebe-se que, com exceção da seed 1, o período manteve-se o mesmo para qualquer valor inicial de R, só dependendo da escolha dos parâmetros.

Repetindo o processo para $m = 17$, chega-se em:

SEED:	1		
R	1	:	11
R	2	:	13
R	3	:	10
R	4	:	6
R	5	:	12

R	6	:	3
R	7	:	8
R	8	:	9
R	9	:	16
R	10	:	14
R	11	:	0
R	12	:	4
R	13	:	15
R	14	:	7
R	15	:	2

O PERIODO VALE 16

SEED: 5

O PERIODO VALE 1

SEED: 10

R	1	:	6
R	2	:	12
R	3	:	3
R	4	:	8
R	5	:	9
R	6	:	16
R	7	:	14
R	8	:	0
R	9	:	4
R	10	:	15
R	11	:	7
R	12	:	2
R	13	:	1
R	14	:	11
R	15	:	13

O PERIODO VALE 16

SEED: 9

R	1	:	16
R	2	:	14
R	3	:	0
R	4	:	4
R	5	:	15
R	6	:	7

R	7	:	2
R	8	:	1
R	9	:	11
R	10	:	13
R	11	:	10
R	12	:	6
R	13	:	12
R	14	:	3
R	15	:	8

O PERIODO VALE 16

SEED: 12

R	1	:	3
R	2	:	8
R	3	:	9
R	4	:	16
R	5	:	14
R	6	:	0
R	7	:	4
R	8	:	15
R	9	:	7
R	10	:	2
R	11	:	1
R	12	:	11
R	13	:	13
R	14	:	10
R	15	:	6

O PERIODO VALE 16

Dessa vez, o caso da semente 5 mostrou-se sui generis. É perceptível que o laço não foi executado sequer uma vez, ou seja, R continua igual a A1 mesmo após GENRDM ser chamada, e a subrotina então forma uma sequência constante.

Em seguida, foi implementado o gerador ”Padrão Mínimo” de Park e Miller adotando-se os parâmetros $a = 7^5 = 16807$, $c = 0$ e $m = 2^{31} - 1 = 2147483647$. Para evitar overflow de inteiros e o surgimento de números negativos inesperados, usou-se inteiros do tipo 2, que ocupam 8 bytes de memória. Para limitar os números gerados ao intervalo de 0 a 1, dividiu-se o resultado por m (somente ao imprimir, não modificando o valor de R).

Foram criadas cinco séries aleatórias de 100 termos, cada uma com uma seed diferente, e suas médias e desvio padrão foram determinados com um dos programas criados no último projeto:

```
SEED = 1

DESVIO PADRAO  0.293284121375065786568896829921955881
MED ARIT.      0.51842469338379260000000000000000180
MED GEOM.      0.348651828239896703535890463674271277

SEED = 54321

DESVIO PADRAO  0.283287161024228344284956382709503882
MED ARIT.      0.48387192119749999999999999999999892
MED GEOM.      0.363824768098287321453565857356002073

SEED = 12345

DESVIO PADRAO  0.292136756417067757435692622683129028
MED ARIT.      0.52185707704422999999999999999999742
MED GEOM.      0.368687452583532120042038121305474769

SEED = 99999

DESVIO PADRAO  0.256387595514920214994502526906606715
MED ARIT.      0.49692472399229999999999999999999900
MED GEOM.      0.379035744713097804485614577801251787

SEED = 42

DESVIO PADRAO  0.282532207080993034192227575690754296
MED ARIT.      0.46151626165969999999999999999999965
MED GEOM.      0.315404544483989380376142297185411374
```

Todos os resultados distam por menos que 0.06 dos valores de convergência para conjuntos de dados estocásticos: 0.5 para a média aritmética, $\frac{1}{2\sqrt{3}} = 0.288675...$ para o desvio padrão e $\frac{1}{e} = 0.367879...$ para a média geométrica.

Precisou-se fazer uso de reais de 16 bytes para permitir o cálculo da média geométrica em séries de até por volta de 800 termos, pois a operação de produto gerava números demasiadamente elevados para serem comportados nos tipos padrão, de 4 bytes.

As sequências geradas foram então plotadas em gráficos de dispersão:

Grafico 1

Sequencia aleatoria gerada com seed = 1

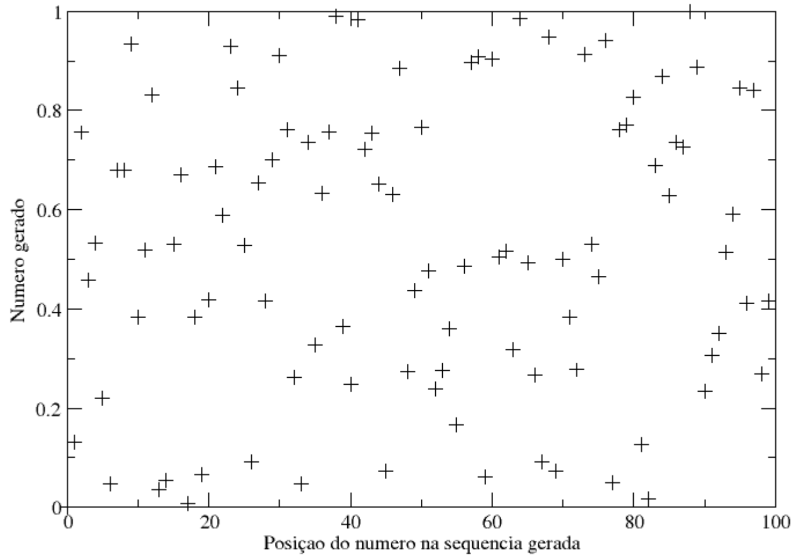
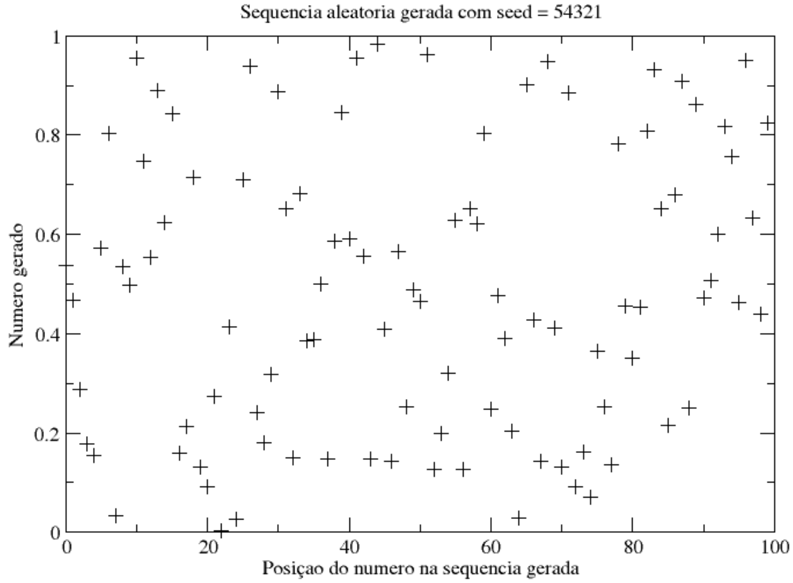


Grafico 2

Sequencia aleatoria gerada com seed = 54321



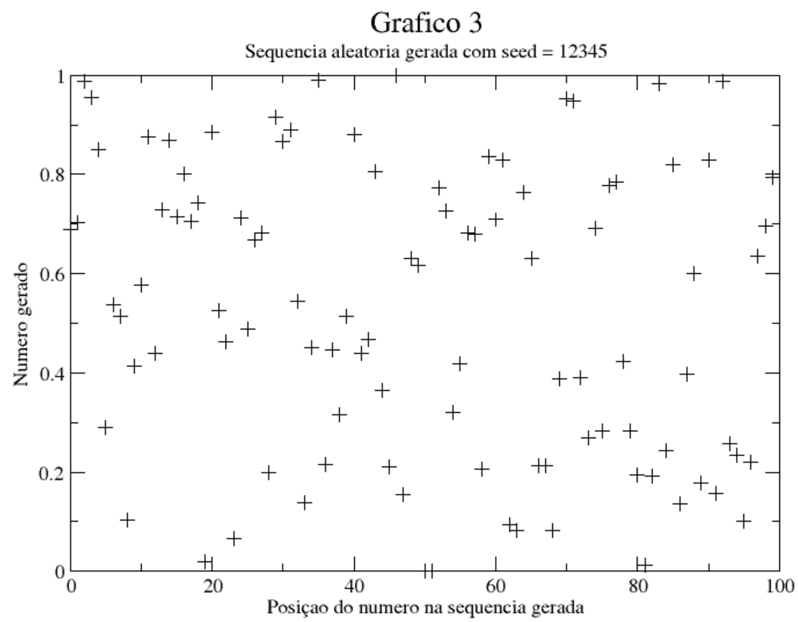


Grafico 3
Sequencia aleatoria gerada com seed = 12345
Numero gerado
Posiçao do numero na sequencia gerada
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
0
20
40
60
80
100

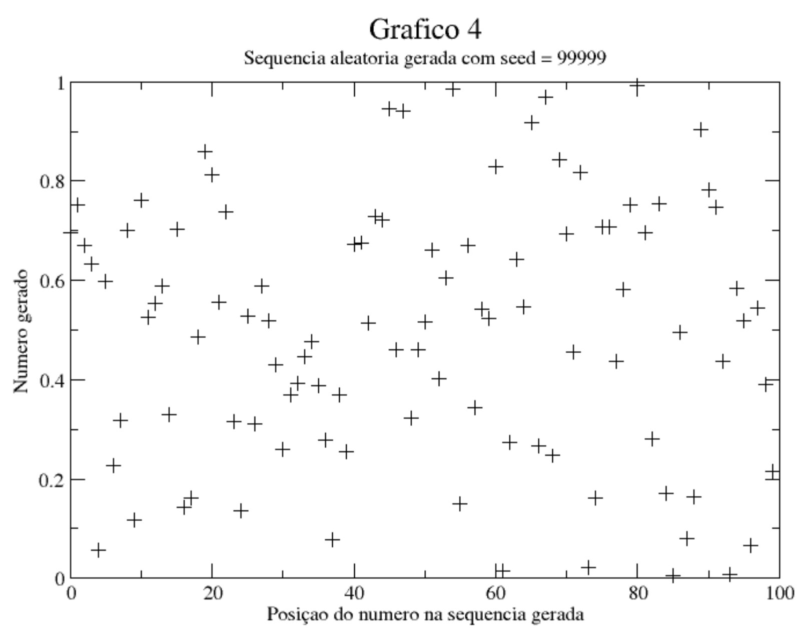
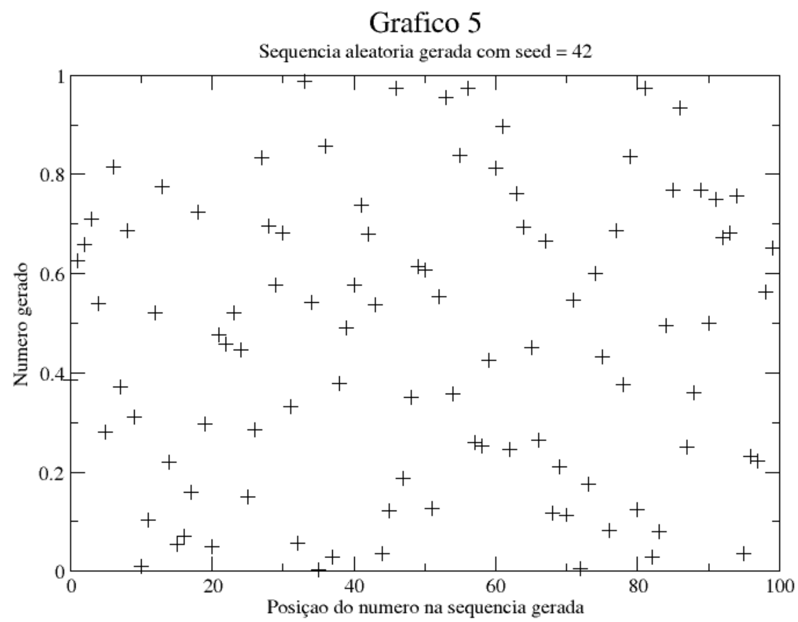


Grafico 4
Sequencia aleatoria gerada com seed = 99999
Numero gerado
Posiçao do numero na sequencia gerada
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
0
20
40
60
80
100



Como esperado, a análise visual não revela nenhum padrão consistente nas representações gráficas. Tal desordem mostra-se útil em aplicações simples, menos formais, nas quais o rigor na aleatoriedade não se faz necessária.

2.2 Decaimento radioativo

O objetivo do vigente procedimento foi simular um processo de decaimento radioativo, por meio da produção de números pseudo-aleatórios.

Para esse programa, utilizou-se a função ran2, que gera números pseudo-aleatórios entre 0 e 1 com sementes diferentes a cada vez. Pode-se encontrá-la no site do Model, Analysis, and Prediction Program, da NASA (¡https://map.nasa.gov/GEOSgcm$_f 90toHTML/ht$
$6abr$2017).

A probabilidade P de que um átomo decaia em um intervalo de tempo dt se relaciona com o tempo de meia vida τ da seguinte forma:

$$dP = -\frac{1}{\tau}dt \tag{1}$$

Definiu-se o tempo de meia vida como 1, de forma que a propabilidade de dcaimento euivale ao intervalo de tempo considerado, que, por sua vez, foi definido como 0.1. A quantidade inicial de átomos foi estabelecida como 1000, e o tempo máximo de simulação tmax, em quanto tempo esta chegará ao fim, será tomado como 8 (decidido a partir da observação dos resultados).

Elaborou-se laço que vai de t=1 até t=tmax/dt, e que gera R números aleatórios com a função ran2 e testa se foi obtido valor menor que P, incrementando em uma unidade uma variável de contagem caso a condicional se aplique. Tal processo corresponde à contar quantos àtomos decaíram em um intervalo de tempo.

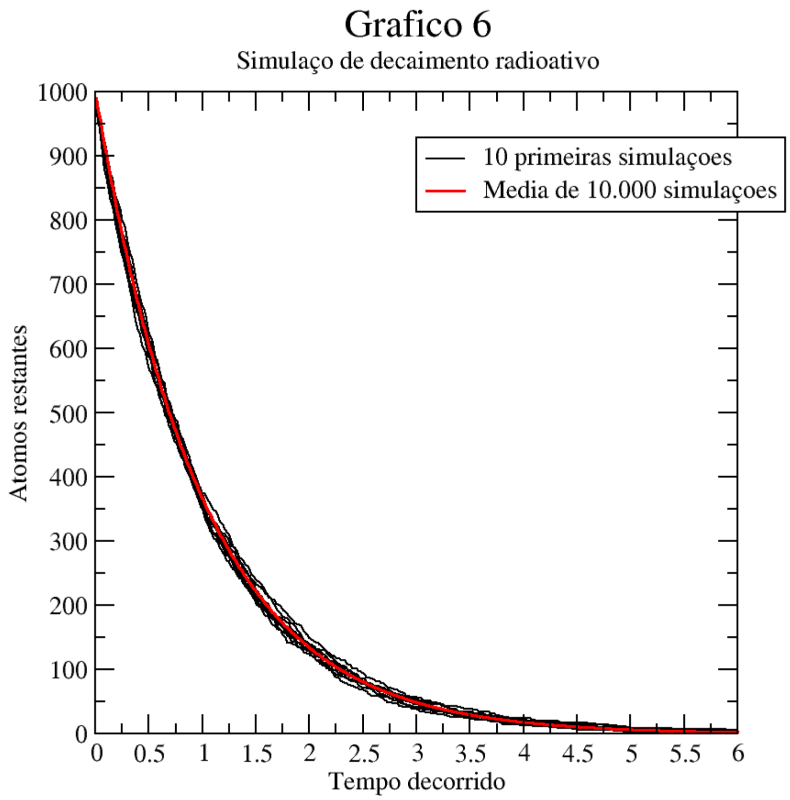
Na fase seguinte, o número de átomos decaídos era subtraído da quantidade inicial de átomos, a variável de contagem era zerada, e o loop rodava novamente, para contar os que decairiam no intervalo de tempo seguinte. Observou-se que, na maioria das vezes, não restavam mais do que dois átomos em t=8, motivando a escolha tmax=8.

O procedimento foi repetido R = 10^4 vezes (tratam-se, portanto, de dois laços DO encadeados), e foram calculadas a média ($\overline{x}$), desvio padrão:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{R}\sum_{i=1}^{R}(x_i - \overline{x})^2}$$

e variância normalizada pela média, para cada intervalo de tempo. A variância normalizada é definida como o quadrado do desvio padrão sobre a média dos valores.

As 10 primeiras simulações e as médias de cada intervalo são compiladas no gráfico 6.



A natureza exponencial do decaimento se torna clara pela visualização do gráfico 6, o que se explica pela relação mostrada pela equação 1. Aproximando-se dP para o número dN de átomos decaídos no intervalo dt sobre a quantidade total N de átomos restantes e integrando-se a igualdade obtém-se:

$$dP = -\frac{1}{\tau} dt$$

$$\frac{dN}{N} = -\frac{1}{\tau} dt$$

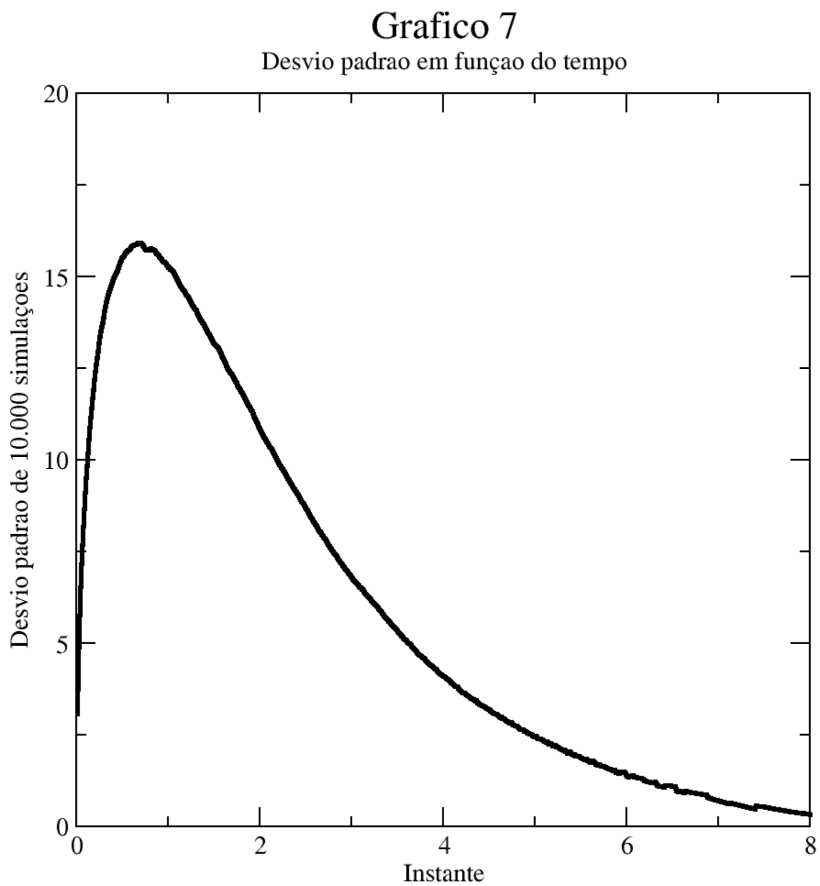
$$\ln N = -\frac{t}{\tau} + t_0$$

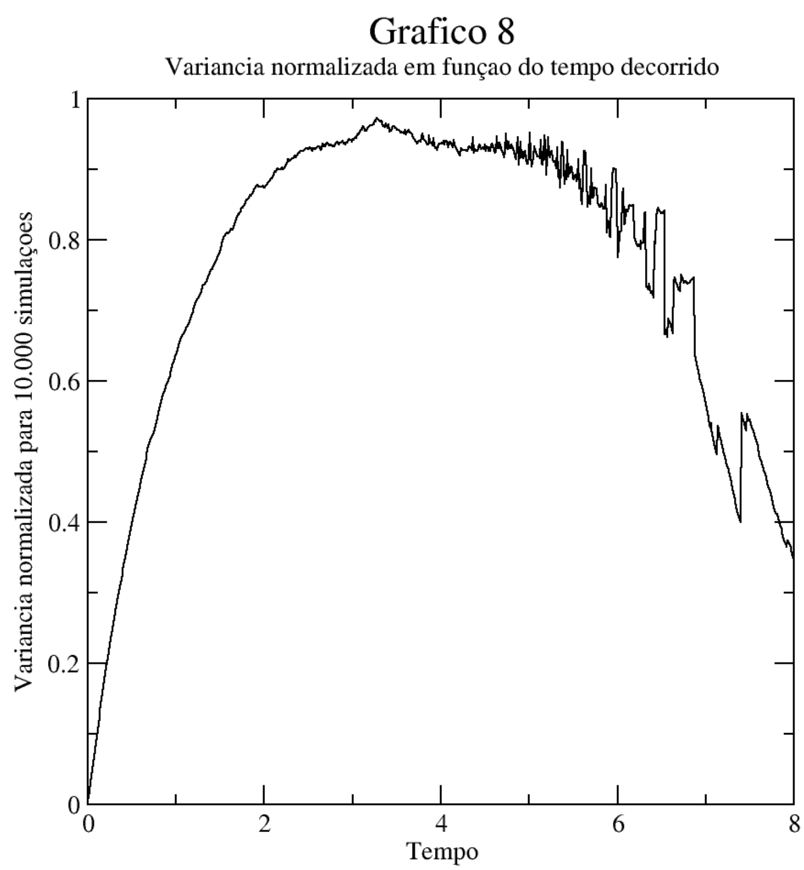
Em que t_0 é o tempo inicial, que culmina, se definido como nulo, em

$$N = e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Resultado condizente com o comportamento do gráfico 6.

O desvio padrão e a variância normalizada para cada intervalo de tempo nos 10^4 processos simulados são apresentados, respectivamente, pelos gráficos 7 e 8.





Ambos tem valores iniciais nulos, visto que no primeiro instante, N era igual em todas as simulações. Em um primeiro momento, observa-se rápido crescimento nos dois gráficos visto que a quantidade de átomos decaídos em um intervalo depende da mesma quantidade no interalo anterior, e trantando-se de um processo aleatório, o desvio padrão dos valores tende a aumentar com o tempo.

Contudo como a quantidade de átomos decaídos tende a ser (dada as características estocásticas do conjunto) proporcional a N, ela tende a valores cada vez menores com o passar do tempo, já que N diminui. Isto é, a quantidade restante de átomos varia cada vez menos, levando o desvio padrão de N a convergir novamente, visto que o desvio padrão também depende de N.

A normalização com relação á média procura eliminar essa dependência de N na divergência dos valores, de forma que esperaríamos ver uma assíntota horizontal no gráfico 8.

Tanto o gráfico 7 como o 8 apresentam ruído, oscilações imprevisíveis dos valores, à medida que t aumenta. Isto se deve à perda de acuidade do desvio padrão conforme a razão entre a diferença entre os valores e os próprios valores aumenta ($\frac{dN}{N}$), ou seja, quando dN torna-se significativa com relação a N, perde sua natureza diferencial. A normalização, originadora dos valores plotados em 8, amplifica esse fenômeno, fazendo com que o ruído ofusque completamente o caráter assintótico previsto para gráfico 8.

É possível relacional intuitivamente o espaçamento vertical entre as séries do gráfico 6 ao comportamento do desvio padrão mostrado no gráfico 7: ambos tem variação qualitativamente sincronizada.