

Determinarea energiei potențiale gravitaționale a unui sistem format din 3 corpuri cu ajutorul simulării Monte Carlo

Teodor Lepădatu, Roxana Asavei

Decembrie 2024

1 Introducere

Prezenta lucrare a fost realizată pentru cursul de Probabilități și Statistică, susținut în anul II la domeniul Informatică, în cadrul Facultății de Matematică și Informatică a Universității din București.

Lucrarea își propune să exploreze modul în care, cu ajutorul simulării Monte Carlo, se poate determina energia potențială gravitațională medie a unui sistem de 3 corpuri celeste asupra cărora acționează doar forța de gravitație.

Cunoașterea energiei potențiale gravitaționale este crucială, întrucât ne oferă informații relevante despre stabilitatea unui sistem, cât este de compact și modul în care acesta ar putea evolua în viitor. De exemplu, când vine vorba de sistemul solar, cunoscând energia potențială gravitațională putem determina energia mecanică totală a sistemului, aflând astfel dacă sistemul este legat (i.e. ne așteptăm să existe interacțiune și în viitor între corpuri) sau nu.

2 Simularea Monte Carlo

Simularea Monte Carlo este o tehnică folosită în diverse domenii pentru a aproxima rezultatele unor probleme complexe, care nu se pot rezolva analitic. Fie că vorbim despre aplicațiile simulării în matematică - pentru determinarea unor volume sau arii complexe, în astrofizică - pentru a afla informații relevante despre interacțiunea dintre corpuri sau în economie - pentru a face analiza unui portofoliu de investiții, simularea Monte Carlo presupune 4 pași de bază:

1. Definirea modelului și identificarea variabilelor din componența sa.
2. Determinarea distribuțiilor pentru variabile.
3. Simulări. Simulări. Simulări.
4. Agregarea rezultatelor obținute.

3 Formularea problemei

Se dau coordonatele a 3 volume sub formă de cuburi, iar în cadrul fiecărui volum se află un corp. Determinați energia potențială gravitațională medie a sistemului, știind că asupra lui nu interacționează forțe din exterior, iar corpurile se pot afla oriunde în volumul asociat, cu o distribuție uniformă.

3.0.1 Problema redusă rezolvată de noi

Fie trei puncte materiale de mase m_1 , m_2 și m_3 . Corpul de masă m_1 se poate afla în cubul $V_1 = [0, 1]^3$, cel de masă m_2 în $V_2 = [2, 3] \times [0, 1]^2$, iar cel de masă m_3 în $V_3 = [4, 5] \times [0, 1]^2$, unde:

$$m_1 = 30 \times 10^5 \text{ kg}, \quad m_2 = 10^3 \text{ kg}, \quad m_3 = 10^5 \text{ kg}$$

Funcțiile de densitate ale pozițiilor corpurilor sunt uniforme, astfel încât:

$$\rho_1(x, y, z) = \rho_2(x, y, z) = \rho_3(x, y, z) = 1.$$

Se cere să se calculeze energia potențială gravitațională medie a acestui sistem.

4 Metode de rezolvare

Pentru a afla energia potențială gravitațională medie a sistemului se vor folosi 2 metode: una empirică, cu simulări repetate ale pozițiilor corpurilor și o metodă teoretică, ce se reduce la calculul unei integrale.

4.1 Metoda empirică

4.1.1 Considerații teoretice

- **Forța gravitațională**

Fiind date două corpuri de mase m_1 , respectiv m_2 , aflate la o distanță r unul de celălalt, forța gravitațională dintre acestea este:

$$F = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

- **Energia potențială gravitațională**

Fiind date două corpuri de mase m_1 , respectiv m_2 , aflate la o distanță r unul de celălalt, energia potențială gravitațională dintre acestea este:

$$U = \int F dr = -G \frac{m_1 m_2}{r}$$

- **Energia potențială gravitațională a 3 corpuri**

Energia potențială gravitațională a 3 corpuri este suma energiilor potențiale gravitaționale a corpurilor luate 2 câte 2:

$$\begin{aligned} U_{\text{total}} &= U_{12} + U_{13} + U_{23} \\ &= -G \left(\frac{m_1 m_2}{r_{12}} + \frac{m_1 m_3}{r_{13}} + \frac{m_2 m_3}{r_{23}} \right) \end{aligned}$$

- **Distanțele dintre corpuri**

Fie (x_1, y_1, z_1) , (x_2, y_2, z_2) , și (x_3, y_3, z_3) pozițiile celor trei corpuri în spațiu. Distanțele dintre corpuri sunt date de:

$$\begin{aligned} r_{12} &= \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}, \\ r_{13} &= \sqrt{(x_1 - x_3)^2 + (y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2}, \\ r_{23} &= \sqrt{(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2}. \end{aligned}$$

4.1.2 Descrierea soluției

Soluția are la bază o serie de simulări repetate: la fiecare pas generăm uniform poziția fiecărui corp în cadrul volumului corespunzător și calculăm energia potențială gravitațională în cazul de față. La final, calculăm energia potențială gravitațională ca fiind media aritmetică a tuturor valorilor intermediare obținute.

Pentru a ajunge la rezultatul final, se utilizează următoarele funcții:

- **generate_body(xmin, xmax, ymin, ymax, zmin, zmax)**: generează uniform coordonatele unui punct $P(x, y, z)$ aflat în volumul delimitat de (xmin, xmax), (ymin, ymax), (zmin, zmax);
- **calc_distance(x1, y1, z1, x2, y2, z2)**: returnează distanța dintre 2 puncte $P(x1, y1, z1)$ și $Q(x2, y2, z2)$;
- **calc_energy(m1, m2, x1, y1, z1, x2, y2, z2)**: calculează energia potențială gravitațională dintre 2 corpuri de mase $m1$, respectiv $m2$, situate la pozițiile $(x1, y1, z1)$, respectiv $(x2, y2, z2)$;
- **calc_total_energy(m1, m2, m3, x1, y1, z1, x2, y2, z2, x3, y3, z3)**: calculează energia potențială gravitațională a sistemului format din 3 corpuri de mase $m1, m2, m3$, situate la pozițiile $(x1, y1, z1)$, $(x2, y2, z2)$, $(x3, y3, z3)$;
- **simulate(m1, m2, m3, error = 0.01, trust = 0.95)**: afișează valoarea medie finală obținută în urma simulărilor, astfel încât marja de eroare să fie 0.01, iar nivelul de încredere 95%;
- **draw_graph_simulation(intermediate_values, mean_value_emp, mean_value_int)**: realizează graficul asociat;

4.2 Metoda teoretică

Pozițiile celor trei corpuri în volumele lor specifice reprezintă trei variabile aleatoare, fiecare cu funcția sa de densitate: ρ_1, ρ_2, ρ_3 .

În contextul acestei probleme, pozițiile sunt independente, astfel încât energia potențială gravitațională a sistemului într-o anumită configurație reprezintă o variabilă aleatoare cu funcția de densitate $\rho_1 \cdot \rho_2 \cdot \rho_3$.

Prin urmare, energia potențială gravitațională medie a sistemului este dată de:

$$\mathbb{E}[U_{\text{total}}] = \int_{V_1} \int_{V_2} \int_{V_3} \rho_1(x_1, y_1, z_1) \cdot \rho_2(x_2, y_2, z_2) \cdot \rho_3(x_3, y_3, z_3) \cdot U_{\text{total}} dV_1 dV_2 dV_3,$$

unde:

- V_1, V_2, V_3 sunt volumele asociate celor trei corpuri;
- $\rho_1(x_1, y_1, z_1), \rho_2(x_2, y_2, z_2), \rho_3(x_3, y_3, z_3)$ sunt funcțiile de densitate pentru pozițiile corpurilor în volumele respective;
- U_{total} este energia potențială gravitațională totală pentru o anumită configurație a pozițiilor celor trei corpuri.

Această formulare reflectă faptul că energia potențială gravitațională medie a sistemului este o integrală pe domeniul $V_1 \times V_2 \times V_3$, ponderată de produsul funcțiilor de densitate ale pozițiilor.

4.2.1 Rezultatul teoretic

Având de calculat o integrală pe 9 dimensiuni, nu aveam la dispoziție o putere computațională destul de avansată pentru a face acest lucru. În schimb putem prelucra integrala inițială în acest fel:

$$\begin{aligned} & \iiint_{V_1 \times V_2 \times V_3} \left[-G \left(\frac{m_1 m_2}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}} \right) \right. \\ & \quad \left. + \frac{m_1 m_3}{\sqrt{(x_1 - x_3)^2 + (y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2}} + \frac{m_2 m_3}{\sqrt{(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2}} \right] dV_1 dV_2 dV_3 \\ & = -G m_1 m_2 \iint_{V_1 \times V_2} \frac{1}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}} dV_1 dV_2 \\ & \quad - G m_1 m_3 \iint_{V_1 \times V_3} \frac{1}{\sqrt{(x_1 - x_3)^2 + (y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2}} dV_1 dV_3 \\ & \quad - G m_2 m_3 \iint_{V_2 \times V_3} \frac{1}{\sqrt{(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2}} dV_2 dV_3. \end{aligned}$$

Astfel, funcția `result()` calculează această sumă folosind paralelizarea dată de GPU într-un timp rezonabil.

5 Determinarea numărului de simulări necesare

Din punct de vedere teoretic, integrala necesară pentru a calcula energia este o integrală pe 9 dimensiuni, greu de calculat analitic. Prin urmare, vom recurge la metoda Monte Carlo. Vom genera în mod aleator pozițiile punctelor materiale și vom calcula de fiecare dată U_{total} , după care vom face media valorilor obținute.

Pentru a determina numărul necesar de simulări, aplicăm inegalitatea Chernoff-Hoeffding:

Fie x_1, x_2, \dots, x_n variabile aleatoare independente și identic distribuite, mărginite de $a \leq x_i \leq b$, pentru orice i între 1 și n . Atunci, pentru orice eroare $\epsilon > 0$, avem:

$$P(|\overline{S}_n - \mu| \geq \epsilon) \leq 2e^{-\frac{2n\epsilon^2}{(b-a)^2}}.$$

Dacă introducem un nivel de încredere α , obținem:

$$P(|\overline{S}_n - \mu| < \epsilon) \geq 1 - \alpha,$$

ceea ce implică:

$$1 - \alpha \leq 2e^{-\frac{2n\epsilon^2}{(b-a)^2}}.$$

Rearanjând pentru a determina n , avem:

$$\frac{1 - \alpha}{2} \geq e^{-\frac{2n\epsilon^2}{(b-a)^2}} \implies -\ln\left(\frac{1 - \alpha}{2}\right) \leq \frac{2n\epsilon^2}{(b-a)^2}.$$

Astfel, numărul de simulări necesar este:

$$n \geq \frac{(b-a)^2}{2\epsilon^2} \ln\left(\frac{2}{1 - \alpha}\right).$$

În practică, luăm:

$$n = \left\lceil \frac{(b-a)^2}{2\epsilon^2} \ln\left(\frac{2}{1 - \alpha}\right) \right\rceil + 1.$$

Acum trebuie să determinăm marginile energiei potențiale gravitaționale a și b.

Reamintim că formula pentru energie este:

$$U = -G \left(\frac{m_1 m_2}{r_{12}} + \frac{m_1 m_3}{r_{13}} + \frac{m_2 m_3}{r_{23}} \right)$$

Observăm că, pentru a minimiza valoarea lui U , trebuie să minimizăm suma valorilor r_{12} , r_{13} și r_{23} , iar pentru a maximiza valoarea lui U , trebuie maximizată această sumă.

Din inegalitatea triunghiulară, deducem că suma minimă apare când punctele sunt coliniare și apropiate. Așadar, alegem $A(1, 0, 0)$, $B(2, 0, 0)$ și $C(4, 0, 0)$, cu $AB = 1$, $BC = 2$ și $AC = 3$. Deci:

$$a = -G \left(\frac{m_1 m_2}{1} + \frac{m_1 m_3}{2} + \frac{m_2 m_3}{3} \right)$$

Pentru a maximiza, este evident că vom alege $A(0, 0, 0)$ și $C(5, 1, 1)$, fiind punctele situate la cea mai mare distanță unul de celălalt. Acum trebuie să alegem punctul B în cel de-al doilea cub, astfel încât perimetrul triunghiului ABC să fie maxim.

Așadar, suma măsurilor unghiurilor $\angle BAC$ și $\angle BCA$ trebuie să fie cât mai mare. Fie O centrul celui de-al doilea cub, $X(2, 1, 1)$ și $X'(3, 0, 0)$. Avem că $AX' \parallel XC$ și $AX' = XC$, deci $AX'CX$ este paralelogram, de unde O este mijlocul lui AC , dar și al lui XX' . Deci, pentru a maximiza $AB + AC$, trebuie să alegem un vârf din al doilea cub.

Trebuie să calculăm doar pentru fața de sus a cubului, calculele pentru cea de jos fiind făcute în mod analog și cu aceleași rezultate. Fie $Y(3, 1, 1)$, $Z(2, 1, 0)$ și $T(3, 1, 0)$.

Calculăm:

$$\begin{aligned} AX + XC &= 3 + \sqrt{6}, \\ AY + YC &= 2 + \sqrt{11}, \\ AZ + ZC &= \sqrt{5} + \sqrt{10}, \\ AT + TC &= \sqrt{10} + \sqrt{5}. \end{aligned}$$

Comparăm aceste valori:

- $AX + XC = 3 + \sqrt{6} \approx 5.45$,
- $AY + YC = 2 + \sqrt{11} \approx 5.32$,
- $AZ + ZC = \sqrt{5} + \sqrt{10} \approx 5.24$,
- $AT + TC = \sqrt{10} + \sqrt{5} \approx 5.24$.

Se observă că cea mai mare valoare este $AX + XC$. Așadar, vom alege $B = X$ pentru a maximiza perimetrul triunghiului ABC .

Deci, calculând $AB = \sqrt{6}$, $BC = 3$ și $AC = 3\sqrt{3}$ obținem

$$b = -G \left(\frac{m_1 m_2}{\sqrt{6}} + \frac{m_1 m_3}{3} + \frac{m_2 m_3}{3\sqrt{3}} \right)$$

În cazul de față, pentru a avea un nivel de încredere $\alpha = 95\%$ și o marjă de eroare $\epsilon = 0.01$, avem nevoie de un număr de simulări:

$$n = 418432$$

6 Compararea rezultatelor obținute

Conform graficului de mai jos, se observă că, în timp, rezultatele intermediare obținute cu ajutorul metodei Monte Carlo converg către rezultatul teoretic, ca, în final, diferența dintre media simulărilor și rezultatul dat de integrală să fie doar de 0.0057 :

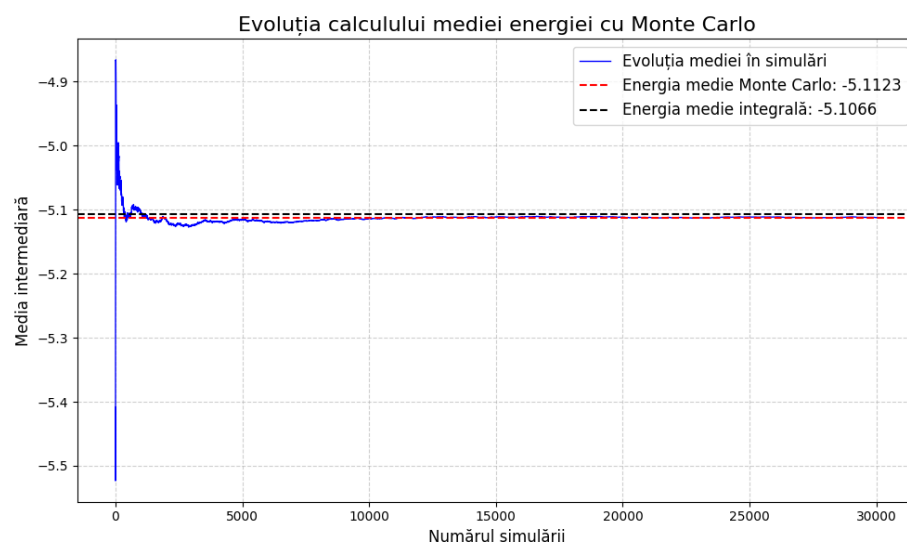


Figure 1: Convergența rezultatelor obținute cu simularea Monte Carlo