

Notas de Aula da Disciplina Física Computacional

Alexandre Souto Martinez
Universidade de São Paulo - USP
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - FFCLRP
Departamento de Física - DF

tel.: 0xy16 3315-3720
email: asmartinez@ffclrp.usp.br

11 de Maio de 2018

Resumo

bla

Palavras-Chave:

Conteúdo

1	Integração de Monte Carlo	2
1.1	Integração Numérica	2
1.1.1	Sistema Unidimensional	2
1.1.2	Sistema Multidimensional	3
1.2	Método de Monte Carlo	4
1.2.1	Amostragem por Importância	4
1.3	Método do Acerto e Erro (“Hit or Miss”)	5
1.4	Exercícios	5
1.5	Hipercubos e Hiperesferas	7
1.5.1	Hipercubos	8
1.5.2	Hiperesferas	8
1.6	Cálculo dos Coeficientes C_D e A_D	11
1.6.1	Função Gama e Cálculo de Integrais Gaussianas	12

Capítulo 1

Integração de Monte Carlo

A única e verdadeira prova do conhecimento é a capacidade de ensinar.

Socrates

1.1 Integração Numérica

Uma das principais aplicações dos geradores de números aleatórios é a estimação do valor de integrais múltiplas (método de Monte Carlo). Enquanto essas técnicas são fracas quando em comparação com métodos analíticos para resolução de integrais simples ou duplas, a partir do grau 6 ou 7 a estimação por Monte Carlo é a única saída computacionalmente viável.

1.1.1 Sistema Unidimensional

Considere um sistema unidimensional. O objetivo é resolver a integral

$$I = \int_a^b dx f(x) \approx \sum_{i=0}^{n-1} \Delta x f(x_i) = (b - a) \langle f \rangle \quad (1.1)$$

onde, sem perda de generalidade, assume-se que $b > a$.

A primeira estimativa de I é dada por:

$$I_0 = \sum_{i=0}^{n-1} \Delta x f(x_i) = (b - a) \langle f \rangle_0, \quad (1.2)$$

onde

$$\Delta x = \frac{b-a}{n} \quad (1.3)$$

$$\langle f \rangle_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i). \quad (1.4)$$

Observe que aqui a média é calculada usando o valor $f(x_i)$ à esquerda do intervalo Δx .

É possível melhorar o cálculo da integral F usando outros procedimentos como a regra do trapézio. Isto corresponde em fazer uma interpolação linear entre os pontos (x_i, f_i) consecutivos. A área do i -ésimo trapézio é $\Delta x(f_i + f_{i+1})/2$. Somando todas estas áreas leva a

$$I_1 = \Delta x \left[\sum_{i=0}^{n-1} f_i - \frac{f_0 + f_n}{2} \right] \quad (1.5)$$

$$\approx (b-a) \left[\langle f \rangle_1 - \frac{f_0 + f_n}{2n} \right] \quad (1.6)$$

onde

$$\langle f \rangle_1 = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i). \quad (1.7)$$

É possível melhorar ainda estas estimativas de I , por exemplo usando o método de Simpson. Nesta caso, o erro da estimativa é da ordem de $(\Delta x)^4$. A medida que n aumenta, o erro diminui da forma $n^{-1/4}$. O tempo de execução é da ordem de n .

1.1.2 Sistema Multidimensional

Considere um sistema de dimensão d . O objetivo é resolver a integral

$$\begin{aligned} F &= \int_{a_1}^{b_1} dx_1 \int_{a_2}^{b_2} dx_2 \cdots \int_{a_d}^{b_d} dx_d f(x_1, x_2, \dots, x_d) \\ &= \int_{\vec{a}}^{\vec{b}} d\vec{x} f(\vec{x}). \end{aligned}$$

Como para cada dimensão, o tempo de cálculo é proporcional a n , em uma integral de dimensão d o tempo é proporcional a n^d . Se o cálculo for feito utilizando a regra de Simpson, o erro cai com $n^{-d/4}$.

1.2 Método de Monte Carlo

O objetivo é calcular a integral da Eq. 1.1 estimando o valor da média do integrando (Eq. 1.4). Vamos inicialmente considerar valores de x_i distribuídos aleatoriamente (de modo uniforme) no intervalo $x_i \in [a, b]$. Como a distribuição de x_i é uniforme, tem-se que:

$$\langle f \rangle_{real} = \langle f \rangle \pm t_{\gamma, \nu} \frac{s}{\sqrt{n}}, \quad (1.8)$$

onde γ é o coeficiente de confiança, $\nu = n - 1$ é o número de graus de liberdade do problema e s o desvio padrão. Vemos então que no Método de Monte Carlo o erro cai com $1/\sqrt{n}$.

Como este erro de amostragem não depende da dimensionalidade do sistema, o método de Monte Carlo é vantajoso de ser utilizado em integrais de alta dimensionalidade.

1.2.1 Amostragem por Importância

Na seção anterior, nós mostramos que o erro associado ao método de Monte Carlo é proporcional ao desvio padrão σ do integrando e inversamente proporcional à raiz quadrada do número da amostra. Assim, há somente dois modos de reduzir o erro de Monte Carlo: aumentado o número da amostra ou reduzindo a variância. É evidente que a última opção é desejável porque não requer muito mais tempo do computador. Neste seção, introduziremos a técnica de amostragem por importância que reduz a variância s^2 e melhora a eficiência de cada amostra.

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b dx f(x) \\ &= \int_a^b dx p(x) \frac{p(x)}{f(x)} \\ &= \left\langle \frac{p(x)}{f(x)} \right\rangle \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\int_a^b dx p(x) = 1. \quad (1.10)$$

Podemos então gerar números aleatórios x seguindo a função densidade de probabilidade $p(x)$ e escrever:

$$I \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{p(x_i)}. \quad (1.11)$$

Este método de integração é conhecido por amostragem por importância.

1.3 Método do Acerto e Erro (“Hit or Miss”)

Uma outra maneira de obter o valor das integrais de Monte Carlo consiste em encontrar o valor de máximo da função $f(x)$, digamos que em um problema unidimensional esse valor seja h e desejamos calcular a área no intervalo $x \in [a, b]$. A área formada pelo valor máximo da função e domínio da variável é $A = (b-a)h$. Escolhendo as coordenadas x aleatoriamente e uniformemente no domínio $[a, b]$ e y também aleatoriamente no domínio $[0, h]$, tiramos ao acaso N pontos e contamos o número de pontos abaixo da curva $f(x)$ n . A integral é estimada pela proporção $\hat{p} = n/N$:

$$\int_a^b f(x) dx = A\hat{p} = (b-a)h \frac{n}{N}. \quad (1.12)$$

A verdadeira proporção de pontos dentro da função é estimada por:

$$p = \hat{p} \pm \frac{z_\gamma}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (1.13)$$

de modo que o erro na estimativa da integral varia com o inverso da raiz de N .

1.4 Exercícios

1. **Problema de Buffon: determinação do número π com palitos de dente.** Ver <http://www.angelfire.com/wa/hurben/buff.html>.
2. **Volume de uma hipersfera.** Uma hipersfera de raio R com centro na origem é o conjunto de todos os pontos que estão a uma distância R (equidistam de R) da origem. Em uma dimensão tem-se as extremidades de um segmento de reta de tamanho $2R$, em duas dimensões uma circunferência de raio R e em três dimensões um esfera propriamente dita de raio R . O volume de uma hipersfera de raio R centrada na origem no espaço de d dimensões é dado por:

$$V_d(R) = \int_{-R}^R \prod_{i=1}^d dx_i \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2} \quad (1.14)$$

$$= \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2 + 1)} R^d, \quad (1.15)$$

onde $\Gamma(z + 1) = z\Gamma(z)$ é a função gama que generaliza os fatoriais (z pode ser complexo) com $\Gamma(1) = 1$ e $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

- Vocês saberiam resolver a integral para chegar no resultado analítico? Ver Sec. 1.5.
- Obtenha os volumes para $d = 1$, $d = 2$, $d = 3$ e $d = 4$. Vocês conseguem visualizar geometricamente estes valores?
- Usando uma rotina de integração numérica do Scilab, para $R = 1$ e uma dada precisão ϵ , integre a Eq. 1.14 fazendo um gráfico do tempo necessário em função da dimensionalidade d do espaço.
- Repita o procedimento anterior utilizando o método de Monte Carlo.

```
clear;
r = 2;
ni = 0;
d = 5; //dimensao
function [Y]=fd(x)
    Y=sqrt(sum(x.*x));
endfunction
rand("uniform");
for N = 1:10000 \ \ # de realizacoes
    for m=1:N
        x=(2*rand(1:d)-1)*r;
        if (fd(x) < r) then
            ni= ni + 1;
        end;
    end
    vol(N) = (ni*((2*r)^d))/N;
    volt(N) = (%pi^(d/2)*r^d)/gamma(1+(d/2));
end
plot(N,vol,N,volt)
```

- Comente o código em Scilab em que o laço em N não é necessário.

```
clear;
r=2;
ni=0;
N=10000; // # de pontos
d=5; //dimens\~ao
```

```

function [Y]=fd(x)
Y=sqrt(sum(x.*x));
endfunction
rand("uniform");
for m=1:N
    x=(2*rand(1:d)-1)*r;
    if (fd(x) < r )then
        ni= ni + 1;
    end;
end
vol= (ni*((2*r)^d))/N
volt=(%pi^(d/2)*r^d)/gamma(1+(d/2))

```

1.5 Hipercubos e Hiperesferas

Em Física Estatística de equilíbrio, o cálculo da entropia mesmo as situações mais simples de partículas não-interagentes em modelos da Física Clássica, como por exemplo: N partículas livres em um caixa cúbica de aresta L , ou N osciladores harmônicos unidimensionais e independentes, envolve o cálculo de hipervolumes no espaço de fase. No exemplos mencionados acima, deve-se calcular integrais nas coordenadas espaciais do tipo:

$$V_D = \int_{-L/2}^{L/2} dx_1 dx_2 \dots dx_D = L^D \quad (1.16)$$

que é o volume de um hipercubo de aresta L no espaço de D dimensões. Deve-se também calcular integrais nas coordenadas de momento do tipo:

$$\Omega(E, \delta E) = \int dx_1 dx_2 \dots dx_D$$

com a restrição

$$E^2 \leq x_1^2 + \dots + x_D^2 \leq (E + dE)^2$$

que é o volume de uma hipercasca esférica de espessura dE e raio E no espaço de D dimensões. Observe que aqui $x = p/(2m)$, onde m é a massa de uma partícula.

Estudantes, com uma boa formação em matemática e com ótima capacidade de abstração, percebem rapidamente que o volume da casca esférica é a diferença dos volumes de duas esferas de raio E e $E + dE$ no espaço de D dimensões. Neste caso é suficiente demonstrar a fórmula do volume de uma esfera de raio E em D dimensões. Em primeira ordem em dE , o volume da

casca esférica é dada pela superfície da esfera de raio E multiplicada pela espessura dE . Este procedimento é adotado na maioria dos livros textos de Física Estatística, e em geral pois esta disciplina é ministrada quando os estudantes já se sentem a vontade com a função gama, integrais gaussianas e estão testando a capacidade de abstração com os postulados da Mecânica Quântica. O presente texto é voltado aos estudantes que não se sentem a vontade com as funções mencionadas ou apresentam certa dificuldade de abstração.

Vivemos em um mundo onde conseguimos visualizar formas geométricas em até três dimensões. Estes objetos recebem nomes especiais em cada uma das dimensões. Antes de falar de uma forma geométrica específica define-se primeiramente uma *superfície* como sendo um conjunto de pontos que separam o espaço em duas regiões. Uma superfície pode ser *fechada*, se o volume engendrado pela superfície for finito ou *aberta* caso contrário.

1.5.1 Hipercubos

Antes de prosseguir com hiperesferas, vamos considerar hipercubos. No espaço unidimensional $D = 1$, um hipercubo é um segmento de reta e o seu “hipervolume” é seu comprimento $V_1 = L^1$ e a hipersuperfícies são os dois pontos da extremidade $S_1 = 2 \cot 1L^0$. No espaço bidimensional $D = 2$, um hipercubo é um quadrado e o hipervolume é a área $V_2 = L^2$ e a hipersuperfície é o perímetro $S_2 = 2 \cdot 2L^1$. No espaço tridimensional $D = 3$, um hipercubo é um cubo e o hipervolume é o seu volume $V_3 = L^3$ e a sua superfície é a área das seis faces: $S_3 = 2 \cdot 3L^2$. Generalizando este resultado para D dimensões, o hipervolume e a hipersuperfície de um hipercubo de aresta L são dados por:

$$V_D = L^D \quad (1.17)$$

$$S_D = 2DL^{D-1}. \quad (1.18)$$

1.5.2 Hiperesferas

Iniciamos o processo definindo o que é uma superfície, em seguida consideramos uma superfície esférica que escrevemos em baixas dimensionalidades induzindo o resultado para uma dimensionalidade arbitrária. Em seguida, calculamos os volumes engendrados por estas superfícies primeiramente em baixa dimensionalidade onde enfatizamos o uso das restrições assim como o uso de coordenadas esféricas. Neste procedimento, o volume da casca esférica aparece naturalmente. Por indução mostramos que o volume de uma esfera de raio R é proporcional a R^D e o volume de uma casca esférica de raio R

e espessura dR é proporcional a $R^{D-1}dR$, onde D é a dimensionalidade do espaço. Estes coeficiente de proporcionalidade estão relacionados, e obtivemos os seus valores utilizando integrais gaussianas, as quais são calculadas usando a função gama.

Um exemplo de superfície fechada é a superfície esférica de raio R no espaço de D dimensões, que chamaremos de hipersfera. A superfície esférica é formada pelo conjunto de pontos que equidistam de R de um ponto considerado. Este ponto pode ser, por exemplo, a origem de um sistema de coordenadas.

Conforme ilustrado na Tabela 1.1 vemos que em uma dimensão ($D = 1$) existem dois pontos que equidistam de R da origem. Estes pontos são as soluções da equação : $x_1^2 = R^2$. Em duas dimensões ($D = 2$) são os pontos que formam uma curva, a *circunferência*, que distam de R da origem. Estes pontos satisfazem a equação: $x_1^2 + x_2^2 = R^2$. Em três dimensões, os pontos que equidistam da origem formam a superfície esférica cuja equação é: $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = R^2$. Para D dimensões, a equação dessa superfície esférica de raio R é:

$$\sum_{i=1}^D x_i^2 = R^2, \quad (1.19)$$

onde x_i formam os eixos cartesianos.

O objetivo é calcular o volume engendrado pela superfície esférica de raio R , em D dimensões. Para realizar este cálculo, vamos primeiramente considerar sistemas de baixa dimensionalidade antes de realizar a generalização do resultado.

No caso unidimensional $D = 1$, o volume da hipersfera é o volume engendrado pelos pontos $-R$ e R , ou seja, o volume é simplesmente o *comprimento do segmento de reta* entre os pontos $-R$ e R , de modo que: $V_1 = 2R$. Observe que enquanto dois pontos formam uma superfície em uma dimensão, o volume é uma curva (reta). Este resultado pode ser reobtido com um raciocínio diferente que se prestará a uma generalização.

$$\begin{aligned} V_1 &= \int_{-R}^R dx_1 = \int_{x_1^2 \leq R^2} dx_1 = \int_0^R dr \, 2 \\ &= 2R. \end{aligned} \quad (1.20)$$

A segunda igualdade na Eq. 1.20 é uma forma alternativa de escrever os limites de integração. Pode-se pensar que o integrando varia livremente, desde que a restrição $x_1^2 \leq R^2$ seja satisfeita. Na terceira igualdade utilizamos a simetria de rotação de π em torno da origem, ou seja, trocando x por $-x$ não altera a superfície (neste caso, a simetria de rotação de π confunde

com a simetria de reflexão). Chamamos este sistema de coordenadas de coordenadas esféricas em uma dimensão.

No caso bidimensional $D = 2$, o volume da hipersfera é *área* engendrada pela circunferência de raio R , ou seja, $V_2 = \pi R^2$, que é a área do *círculo*. Este resultado pode ser obtido analiticamente da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} V_2 &= \int_{x_1^2 + x_2^2 \leq R^2} dx_1 dx_2 \\ &= \int_0^R dr r \int_0^{2\pi} d\phi = \int_0^R dr 2\pi r \\ &= \pi R^2 . \end{aligned} \tag{1.21}$$

A primeira igualdade na Eq. 1.21, o integrando pode variar livremente desde que a restrição $x_1^2 + x_2^2 \leq R^2$ seja satisfeita. Na segunda igualdade, o fato da simetria ser circular (não existe dependência angular) pode ser explorado com o uso de coordenadas polares (ou coordenadas esféricas em duas dimensões). Observe que $2\pi r$ é o perímetro da circunferência (hipersuperfície em duas dimensões).

A exploração da simetria circular nos permite integrar somente na variável radial r , tanto em $D = 1$, quanto em $D = 2$. A integração nos ângulos de rotação multiplicado por r^{D-1} nos fornece as superfícies esféricas de raio r que multiplicado pela espessura dr nos fornece o volume da casca esférica. Para $D = 1$, o volume desta casca de raio r vale: $d\Omega_1(r) = 2dr$. Para $D = 2$, o volume da casca (coroa) de raio r vale: $d\Omega_2(r) = 2\pi r dr$. Estamos utilizando o termo casca pois imaginamos que $dr \ll R$, assim podemos desprezar termos de ordens superiores a dr . A área exata desta coroa vale: $\pi[(r + dr)^2 - r^2] = \pi[2rdr + (dr)^2]$.

Considere agora o caso tridimensional $D = 3$. Para obter o volume da esfera fazemos:

$$\begin{aligned} V_3 &= \int_{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq R^2} dx_1 dx_2 dx_3 \\ &= \int_0^R dr r^2 \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{2\pi} \underbrace{\int_0^\pi d\theta \sin \theta}_{\int_{-1}^1 d \cos \theta = 2} \\ &= \int_0^R dr 4\pi r^2 \\ &= \frac{4\pi}{3} R^3 . \end{aligned} \tag{1.22}$$

Na primeira igualdade da Eq. 1.22, o integrando pode variar livremente desde que a restrição $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq R^2$ seja satisfeita. Na segunda igualdade,

utilizamos o fato da simetria ser esféricas e usamos o sistema de coordenadas esféricas. O volume exato da casca esférica vale: $4\pi[(r + dr)^3 - r^3]/3 = 4\pi[r^2 dr + r(dr)^2 + (dr)^3/3]$. Aqui também imaginamos que $dr \ll R$ assim as parcelas referentes a $(dr)^2$, e a $(dr)^3$, podem ser desprezadas e o volume da casca esférica de raio r vale: $d\Omega_3(r) = 4\pi r^2 dr$.

Generalizando estas idéias é possível escrever que o volume de uma hipersfera de raio R em D dimensões vale:

$$\begin{aligned} V_D &= \int_{\sum_{i=1}^D x_i^2 \leq R^2} dx_1 dx_2 \dots dx_D \\ &= \int_0^R dr C_D r^{D-1} \\ &= A_D R^D, \end{aligned} \tag{1.23}$$

$$A_D = \frac{C_D}{D}. \tag{1.24}$$

Na primeira igualdade da Eq. 1.23, o integrando pode variar livremente, desde que a restrição $x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_D^2 \leq R^2$ seja satisfeita. Na segunda igualdade, utilizamos o fato da simetria ser esférica e usamos o sistema de coordenadas esféricas generalizadas, onde a integração angular é facilmente realizada. Aqui A_D e C_D são coeficientes que dependem da dimensionalidade D do sistema, mas não do raio R . Assim:

$$A_1 = 2 \quad C_1 = 2 \tag{1.25}$$

$$A_2 = \pi \quad C_2 = 2\pi \tag{1.26}$$

$$A_3 = 4\pi \quad C_3 = \frac{4\pi}{3}. \tag{1.27}$$

O volume da hipercasca esférica de raio R em D dimensões vale:

$$\begin{aligned} d\Omega_D(R) &= \int_{R^2 \leq \sum_{i=1}^D x_i^2 \leq (R + dR)^2} dx_1 \dots dx_D \\ &= C_D R^{D-1} dR, \end{aligned} \tag{1.28}$$

1.6 Cálculo dos Coeficientes C_D e A_D

Agora o nosso objetivo passa a ser o cálculo do coeficiente C_D e consequentemente A_D . Para isto vamos utilizar o seguinte resultado da Eq. 1.38 de

modo que:

$$\begin{aligned} [I_0(a)]^D &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} \right]^D = \left(\frac{\pi}{a} \right)^{D/2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_D e^{-a(x_1^2 + \dots + x_D^2)}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Chamando $x_1^2 + \dots + x_D^2 = R^2$, temos a equação da superfície de uma hipersfera de raio R em D dimensões, que só depende de R , de modo que podemos explorar a simetria esférica usando as coordenadas hipersféricas e a integração da hipercasca esférica se faz pela Eq. 1.28 de modo que:

$$[I_0(a)]^D = C_D I_{D-1}(a). \quad (1.30)$$

onde $I_n(a)$ é a integral gaussiana de ordem n (ver Sec. 1.6.1). É possível agora escrever:

$$[I_0(a)]^D = C_D \frac{\Gamma(D/2)}{2a^{D/2}}. \quad (1.31)$$

Comparando as Eqs. 1.29 e 1.31 obtém-se os coeficientes:

$$C_D = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} \quad (1.32)$$

$$A_D = \frac{C_D}{D} = \frac{\pi^{D/2}}{(D/2)\Gamma(D/2)} = \frac{\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2 + 1)}, \quad (1.33)$$

onde usamos a propriedade Eq. 1.37.

Assim no espaço em D dimensões, o volume de uma hipersfera de raio R vale:

$$V_D(R) = \frac{\pi^{D/2}}{(D/2)\Gamma(D/2)} R^D, \quad (1.34)$$

e o volume de uma hipercasca esférica de raio R vale:

$$d\Omega_D(R) = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} R^{D-1} dR. \quad (1.35)$$

1.6.1 Função Gama e Cálculo de Integrais Gaussianas

Função Gama

A função gama é definida por

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dx x^{z-1} e^{-x} \quad (1.36)$$

e segue a recorrência:

$$\Gamma(z + 1) = z\Gamma(z) = z! = z(z - 1)!, \quad (1.37)$$

que pode ser inicializada por:

$$\begin{aligned} \Gamma(1) &= 1 = 0! \\ \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) &= \sqrt{\pi} = \left(-\frac{1}{2}\right)! \end{aligned}$$

Assim:

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \left(\frac{1}{2}\right)!.$$

Integrais Gaussianas

Ordem Zero. Considere $a > 0$ e

$$I_0(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2}.$$

Para calcular esta integral o truque consiste eleva-la ao quadrado:

$$\begin{aligned} [I_0(a)]^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-a(x^2+y^2)} \\ &= \int_0^{\infty} dr r e^{-ar^2} \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} dr r e^{-ar^2} \\ &= \frac{\pi}{a} \int_0^{\infty} d(ar^2) e^{-ar^2} \\ &= \frac{\pi}{a}. \end{aligned}$$

Extraindo a raiz quadrada chega-se ao resultado:

$$I_0(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (1.38)$$

Ordem Arbitrária. A integral gaussiana de ordem n é definida por:

$$I_n(a) = \int_0^{\infty} dR R^n e^{-aR^2}. \quad (1.39)$$

Com o objetivo de mudar para a variável $y = aR^2$, faz-se as seguintes manipulações:

$$\begin{aligned} I_n(a) &= \frac{1}{2a} \int_0^\infty d(aR^2) R^{n-1} e^{-aR^2} \\ &= \frac{1}{2a^{n+1}/2} \int_0^\infty d(aR^2) (aR^2)^{(n-1)/2} e^{-aR^2} \\ &= \frac{1}{2a^{n+1}/2} \int_0^\infty dy y^{(n-1)/2} e^{-y} , \end{aligned}$$

Usando a definição da função gama (Eq. 1.36), obtém-se que:

$$I_n(a) = \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{2a^{(n+1)/2}} . \quad (1.40)$$

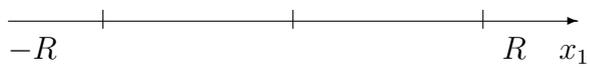
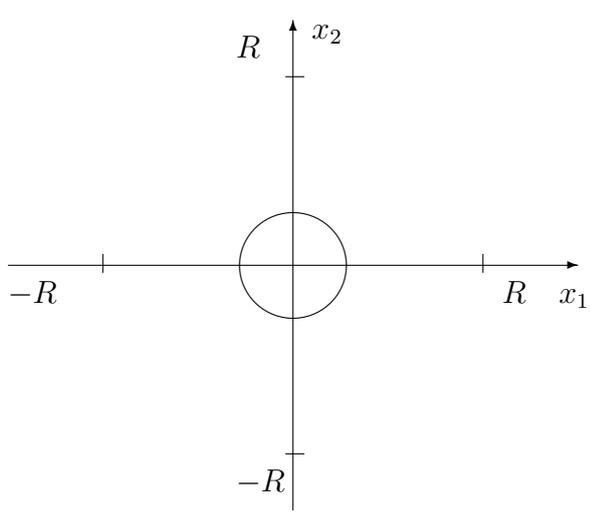
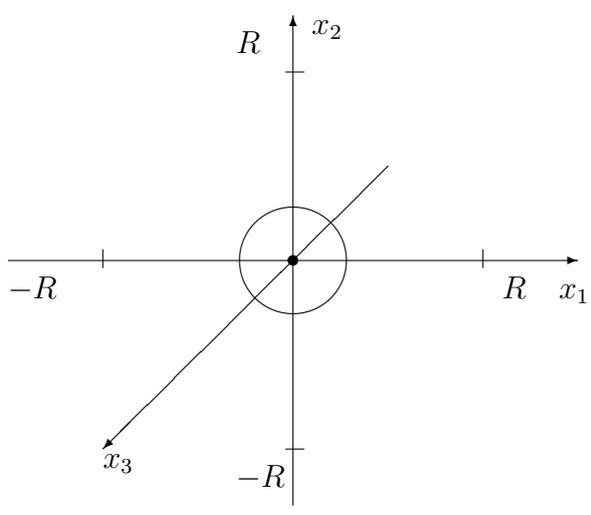
Dimensionalidade	Geometria	Álgebra
$d = 1$		$x_1^2 = R^2$
$d = 2$		$x_1^2 + x_2^2 = R^2$
$d = 3$		$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = R^2$
$d = D$	\vdots	$x_1^2 + \dots + x_D^2 = R^2$

Tabela 1.1: Equação das superfícies esféricas em função da dimensionalidade do sistema. Para sistemas em uma dimensão, esta superfície esférica são os *pontos* situados em $x_1 = \pm R$. Em duas dimensões a superfície esférica é a *circunferência* de raio R . Em três dimensões a superfície esférica é a *área* cujos pontos distam de R da origem. Observe que para dimensionalidades maiores, apesar de não ser possível desenhar ou visualizar, é possível escrever a equação da superfície esférica.

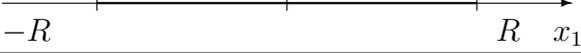
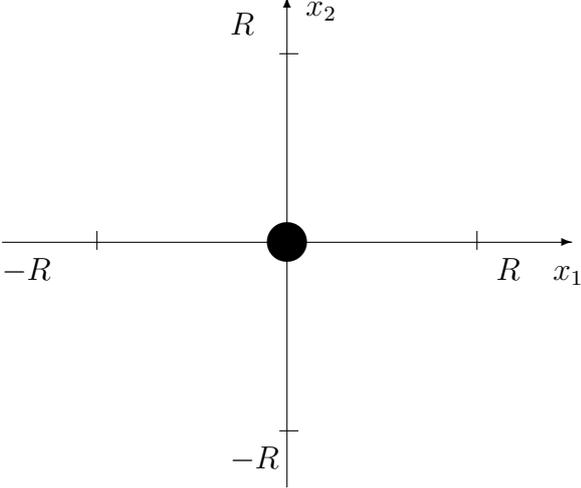
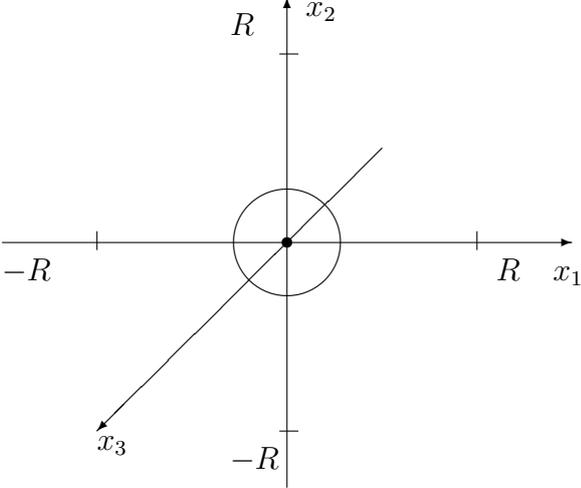
Dimensionalidade	Geometria	Álgebra
$d = 1$		$V_1 = 2R$
$d = 2$		$V_2 = \pi R^2$
$d = 3$		$V_3 = \frac{4\pi}{3} R^3$
$d = D$	\vdots	$V_D(R) = \frac{\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2+1)} R^D$

Tabela 1.2: Equação das superfícies esféricas em função da dimensionalidade do sistema. Para sistemas em uma dimensão, esta superfície esférica são os *pontos* situados em $x_1 = \pm R$. Em duas dimensões a superfície esférica é a *curva* que dista de R da origem. Esta curva é chamada de *circunferência* de raio R . Em três dimensões a superfície esférica é a *área* cujos pontos distam de R da origem. Observe que para dimensionalidades maiores, apesar de não ser possível desenhar, ou visualizar, é possível escrever analiticamente a equação da superfície esférica.