Monitoria - 19/11/2020

Alguns truques matemáticos valiosos: integrais Gaussianas, método do ponto de sela e a aproximação de Stirling

Na monitoria de hoje, como ainda não há muito conteúdo de Mecânica Estatística, falarei a respeito de alguns truques e resultados matemáticos que serão úteis no entendimento de física estatística. A matemática é, na física, simultaneamente uma ferramenta e uma linguagem. Para que se possa apreciar a beleza de um Shakespeare no original, é necessário ter um certo domínio da língua inglesa. Para se apreciar a grandiosidade de Dante Allighieri, é necessário conhecer bem o italiano. Do mesmo modo, é necessário compreender bem as ferramentas matemáticas utilizadas em uma determinada teoria para compreende-la. O objetivo é, no final das contas, entender a "física" por trás, não ficar travado em questões linguísticas. Deste modo, visarei nesta monitoria introduzir alguns resultados matemáticos, para que uma má compreensão do "what's going on" das contas não fique no caminho entre você e o entendimento da teoria. O objetivo principal, entretanto, é apresentar a expansão de Stirling, muito útil no contexto de física estatística.

Integrais gaussianas

Vamos começar com um tema mais elementar, integrais gaussianas. A versão mais simples, unidimensional, é da forma

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \tag{1}$$

O modo mais fácil de se resolver esta integral é multiplicando-a por ela mesma

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dxdy e^{-ax^2} e^{-ay^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dxdy e^{-a\left(x^2+y^2\right)} \tag{2}$$

Mudemos pra coordenadas polares, com $r^2 = (x^2 + y^2)$. Deste modo

$$I^2 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} r dr e^{-ar^2} \tag{3}$$

Chamando $u = ar^2$ e $du = 2ardr$, podemos resolver a integral sem grandes dificuldades, chegando a

$$I^2 = 2\pi \times \frac{1}{2a} = \frac{\pi}{a} \tag{4}$$

O que nos dá o resultado valioso

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{5}$$

Tal resultado é facilmente generalizável (completando quadrados no expoente) para integrais da forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} \tag{6}$$

Fica o desafio: **provar que, no caso vetorial, temos**

$$\int d\boldsymbol{v} e^{-\frac{1}{2}v^T A v} = (2\pi)^{n/2} \det A^{-1/2} \tag{7}$$

Onde v é um vetor coluna, v^T é seu transposto e A é uma matriz qualquer.

Vamos dar então o próximo passo: o método do ponto de sela.

O método do ponto de sela

O método de ponto de sela, também chamado de método de Laplace, é um método utilizado para calcular aproximadamente integrais do tipo

$$\int_a^b e^{Mf(x)} dx \tag{8}$$

onde M é grande. Se M é grande, a exponencial é muito concentrada ao redor de seu valor de máximo, x_0. Se eu expando $f(x)$ (que é máxima quando a exponencial é máxima) até segunda ordem, tenho (o termo de primeira ordem é zero porque estou calculando no ponto de máximo, x_0)

$$f(x) = f(x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \mathcal{O}(3) \tag{9}$$

Como x_0 é ponto de máximo, $f''(x_0) = -|f''(x_0)|$. Podemos então escrever a Eq. (8) como

$$\int_a^b e^{Mf(x)} dx \approx e^{Mf(x_0)} \int_a^b e^{-\frac{1}{2}Mf''(x_0)(x-x_0)^2} \tag{10}$$

Podemos aproximar isso pra uma integral gaussiana mudando os limites de integração, tendo em vista que a contribuição longe de x_0 é irrisória (e $\frac{1}{2}Mf''(x_0) = \text{cte}$), e nos dá

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{Mf(x)} = \sqrt{\frac{2\pi}{M|f''(x_0)|}} e^{Mf(x_0)} \tag{11}$$

Esse resultado será útil na derivação da expansão de Stirling

A expansão de Stirling

A expansão de Stirling nos dá uma aproximação de $n!$ pra n grande. Essa aproximação se dá em termos de funções elementares, muito mais fáceis de se lidar do que a função fatorial. Para encontrar tal expressão, basta lembrar da função Gamma, que coincide com o fatorial nos números naturais, e que serve de generalização para a função fatorial em n real (desde que n não seja um inteiro negativo)

$$n! = \int_0^{\infty} e^{-x} x^n dx \tag{12}$$

Podemos escrever

$$x^n = e^{n \log x} \tag{13}$$

e, tomando $x = ny$, o termo x^n se torna

$$e^{n \log(x)} \to e^{n \log(ny)} = n^n y^n = e^{n \log n} e^{n \log y} \tag{14}$$

Deste modo, ficamos com

$$n! = ne^{n\log n}\int e^{n(\log y - y)}dy \tag{15}$$

Agora podemos usar o método do ponto de sela, pois n é grande e a integral está dá forma desejada

$$n! \approx \sqrt{\frac{2\pi}{n\left|f''\left(y_0\right)\right|}}e^{n(\log y_0 - y_0)} \tag{16}$$

Precisamos, então, achar y_0. $f\left(x\right) = \left(\log y - y\right)$. Para encontrar y_0, precisamos maximizar isto, o que implica derivar e igualar a zero

$$n\left(\frac{1}{y_0} - 1\right) = 0 \iff y_0 = 1 \tag{17}$$

e $f''(1) = -(\frac{1}{y^2}) = -1$. Deste modo, chegamos finalmente à expressão de Stirling

$$n! \approx \sqrt{\frac{2\pi}{n}}e^{n\log n - n} \tag{18}$$

E tomando o log (aqui, log=logarítimo natural), chegamos à forma mais útil

$$\log n! = n\log n - n + \mathcal{O}\left(\log n\right) \tag{19}$$

Concluindo nossa derivação. Por métodos como flutuação gaussiana, podemos escrever $\log n!$ em ordens superiores.