Os Aproximantes de Padé

Maria Cecília K. Aguilera-Navarro Valdir C. Aguilera-Navarro Ricardo C. Ferreira e Neuza Teramon

1 Introdução

Há uma classe de aproximantes que têm notáveis propriedades analíticas e numéricas, e, apesar disso, são pouco conhecidos. Em 1892, o matemático francês Henri Padé (pronuncia-se padê) publicou uma tese na revista parisiense Ann. Sci. École Normale Supérieure [1], onde discute representações aproximadas de uma função por funções racionais. Hoje, esse trabalho se reveste da maior importância em várias áreas de pesquisa, teórica e aplicada. Citamos, como exemplo, o desenvolvimento de métodos computacionais para representar funções por meio de algoritmos que convirjam rapidamente. As representações de Padé são hoje conhecidas como aproximantes de Padé, e essa matéria constitui o objeto central deste trabalho.

Como mais uma motivação ao estudo que vamos desenvolver, citamos o interesse que a modelagem de problemas sempre despertou em quase todas as áreas da Ciência. Essas modelagens, via de regra, conduzem a equações matemáticas que não são fáceis de se manipular. Conseqüentemente, determinar uma solução para tais equações torna-se uma tarefa árdua, muitas vezes impossível de ser realizada. Procura-se, então, utilizar outras ferramentas matemáticas para tratar o problema e que produzam uma boa aproximação para a solução procurada.

Uma dessas ferramentas — por exemplo, teoria de pertubações — nos leva a uma série de potências. Através de truncamentos sucessivos

dessa série, obtemos uma família de funções polinomiais que são fáceis de serem manipuladas uma vez que as operações envolvidas se resumem a produtos e somas. A essas funções polinomiais chamaremos de aproximantes de Taylor, embora nem sempre — como no exemplo citado — tenham origem no truncamento de uma série de Taylor.

Por outro lado, o estudo de uma série de Taylor pode apresentar algumas dificuldades inerentes a tais séries. Muitas vezes a convergência da série é extremamente lenta, ou então, o seu raio de convergência não engloba regiões de interesse particular do problema que está sendo estudado. Não é raro, na Física, encontrar expansões de Taylor que convergem apenas em regiões sem interesse ou mesmo sem sentido físico. Nesses casos, a série de Taylor não tem serventia alguma.

Entre outras vantagens, o método de Padé permite-nos partir de uma série de potências (por exemplo, aquela obtida de uma modelagem de um problema) e obter muito mais informações do que a própria série pode nos fornecer diretamente. Podemos afirmar que o método de Padé (seus aproximantes) é, em muitos sentidos, superior ao método clássico baseado nos desenvolvimentos de Taylor. Sendo uma função racional, os aproximantes de Padé são mais ricos analiticamente do que as funções polinomiais resultantes de truncamentos sucessivos das séries de Taylor. Além de tudo isso, como veremos, os aproximantes de Taylor são casos particulares dos aproximantes de Padé.

Para finalizar nossa pequena apologia, a prática vem demonstrando que os aproximantes de Padé não somente convergem mais rapidamente do que a série de Taylor como, também, se estendem a regiões muito além da definida pelo raio de convergência da série de Taylor. O mais fantástico, porém, é que os aproximantes de Padé têm como base apenas os coeficientes da série de Taylor da função que queremos representar. Em outras palavras, esses aproximantes são capazes de obter muito mais informações dos coeficientes de Taylor do que a própria série! Uma das razões para esse notável desempenho dos aproximantes de Padé, como veremos, é que eles consideram formas multilineares dos coeficientes de Taylor.

1.1 Um exemplo didático

Consideremos a expansão [2]

$$f(x) = 1 - \frac{1}{2}x + \frac{7}{8}x^2 - \frac{25}{16}x^3 + \frac{363}{128}x^4 - \dots$$
 (1.1)

Seu raio de convergência é 1/2 (V. abaixo). No entanto, há uma família infinita de aproximantes de Padé associados a (1.1) que convergem em toda a reta real positiva. Mais ainda, uma classe de membros dessa família de aproximantes produz uma sucessão de funções que convergem para $\sqrt{1/2}$ quando $x \to \infty$.

Podemos encontrar o raio de convergência da série (1.1) por inspeção, pois, ela é a série de Maclaurin da função

$$f(x) = \sqrt{\frac{1+x}{1+2x}}$$
 (1.2)

Vemos que a função (1.2) está certamente definida para todo $x \ge 0$ e tem o valor $\sqrt{1/2}$ no infinito. Esse limite, impossível de ser obtido a partir da série (1.1), é "adivinhado" pelos aproximantes de Padé, numa demonstração bastante clara de que esses aproximantes são capazes de extrair mais informações dos coeficientes da série do que a própria série. Voltaremos a considerar a série (1.1) e a função (1.2) na próxima seção.

Isto posto à guisa de aperitivo, passemos ao propósito principal deste trabalho que é discutir as idéias básicas envolvidas na teoria dos aproximantes de Padé. Na Seção 2, definimos e mostramos como construir aproximantes de Padé. Estes podem ser colocados numa tabela como mostrado na Seção 3. O problema da existência e unicidade é abordado na Seção 4. Uma aplicação é dada na Seção 5.

2 Definição dos aproximantes de Padé

Consideremos uma expansão do tipo

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N} f_n x^n$$
 (2.1)

onde N não é necessariamente finito. Tais expansões surgem quando desenvolvemos uma função em série de Taylor, por exemplo. Outra

situação em que surgem expansões como (2.1) é encontrada em cálculos perturbativos, comuns, por exemplo, no tratamento de equações diferenciais. Nesse tipo de cálculo, os coeficientes f_n são encontrados individualmente através de processos, geralmente bastante elaborados. Em geral, os coeficientes f_n são chamados peças de informação. Há o maior interesse em se extrair desses coeficientes informações que descrevam f(x) com confiança.

Os aproximantes de Padé associados com a expansão (2.1) são funções racionais, ou seja, quocientes de dois polinômios, que representam a expansão. Esses aproximantes são caracterizados por dois inteiros positivos L e M, graus do numerador e denominador, respectivamente, da função racional, e são representados pela notação $[L/M]_{f(x)}$. Freqüentemente, em benefício da notação, o índice f(x) é omitido quando o contexto é bem definido, eliminando qualquer possibilidade de confusão. Explicitamente, o aproximante de Padé [L/M] é definido por

$$[L/M] = \frac{P_L(x)}{Q_M(x)}, \qquad L, M \ge 0$$
 (2.2)

com

$$P_L(x) = p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + \dots + p_L x^L$$
 (2.3)

е

$$Q_M(x) = q_0 + q_1 x + q_2 x^2 + \dots + q_M x^M$$

Sem perda de generalidade, podemos tomar $q_0=1$, de modo que o polinômio $Q_M(x)$ se expressa como

$$Q_M(x) = 1 + q_1 x + q_2 x^2 + \dots + q_M x^M$$
 (2.4)

Os coeficientes p_i e q_j , das expressões (2.3) e (2.4), respectivamente, são determinados a partir das peças de informações f_n contidas na expansão (2.1) através da condição

$$f(x) - \frac{P_L(x)}{Q_M(x)} = O(x^{L+M+1})$$
 (2.5)

Esta condição nos garante que f(x) e o aproximante de Padé $P_L(x)/Q_M(x)$ diferem apenas por termos da ordem de x^{L+M+1} .

A condição (2.5) nos proporciona um sistema de equações lineares algébricas para os coeficientes p_i e q_j em termos dos coeficientes f_n , como

veremos mais adiante. Se o sistema assim obtido admitir solução única, o aproximante de Padé existe e é único, como será provado na Seção 4. Por enquanto, porém, vamos mostrar como se constrói o sistema de equações para os coeficientes p_i e q_j e apresentar alguns exemplos ilustrativos.

A partir da condição (2.5), podemos escrever

$$P_L(x) = f(x) Q_M(x) + O(x^{L+M+1})$$
(2.6)

ou, de forma mais explícita,

$$p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + \dots + p_L x^L = (f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + \dots)(1 + q_1 x + q_2 x^2 + \dots + q_M x^M) + O(x^{L+M+1})$$

Desenvolvendo o membro direito desta expressão, até termos da ordem de x^{L+M} inclusive, e comparando termos de mesma potência de x encontramos o seguinte sistema de L+M+1 equações algébricas

$$p_{0} = f_{0}$$

$$p_{1} = f_{1} + f_{0}q_{1}$$

$$p_{2} = f_{2} + f_{1}q_{1} + f_{0}q_{2}$$

$$\vdots$$

$$p_{L} = f_{L} + f_{L-1}q_{1} + \dots + f_{0}q_{L}$$

$$0 = f_{L+1} + f_{L}q_{1} + \dots + f_{L-M+1}q_{M}$$

$$0 = f_{L+2} + f_{L+1}q_{1} + \dots + f_{L-M+2}q_{M}$$

$$\vdots$$

$$0 = f_{L+M} + f_{L+M-1}q_{1} + \dots + f_{L}q_{M}$$

com

$$f_n \equiv 0$$
 se $n < 0$, e $q_j \equiv 0$ se $j > M$

O sistema (2.7) de L + M + 1 equações, em princípio, determina os coeficientes dos polinômios $P_L(x)$ e $Q_M(x)$ em termos dos coeficientes f_n da expansão original (2.1). Evidentemente, deve haver pelo menos L + M + 1 peças de informações disponíveis, isto é, na expansão básica (2.1), devemos ter

$$L + M + 1 \le N \tag{2.8}$$

Esta condição limita as possibilidades para os graus dos polinômios $P_L(x)$ e $Q_M(x)$, e, consequentemente, o número de membros da família de aproximantes de Padé. Porém, essa limitação é apenas de ordem prática, pois, N não é necessariamente limitado e, consequentemente, a família de aproximantes de Padé pode ter infinitos membros.

É oportuna a seguinte observação. Examinando a estrutura do sistema (2.7), constatamos que para resolvê-lo podemos considerar primeiramente as últimas M equações, aquelas que envolvem apenas os coeficientes q_i . Uma vez determinados, esses coeficientes podem ser simplesmente inseridos nas primeiras L+1 equações que nos darão imediatamente os coeficientes p_i . Não temos, portanto, necessidade de resolver o sistema completo de equações (2.7), bastando resolver o subsistema que envolve apenas os coeficientes q_i .

Além da condição (2.8), não há nenhuma outra restrição sobre os valores de L e M (mas são inteiros não negativos, por sua própria natureza). Se L = M, o aproximante de Padé correspondente se diz diagonal.

É fácil constatar, a partir de (2.4) e (2.6), que os aproximantes [L/M]com M=0 coincidem com a expansão original (2.1) até o termo $f_L x^L$. As somas parciais da série original (Taylor, por exemplo) são, assim, casos particulares de aproximantes de Padé.

Doravante, vamos simplificar nossa linguagem designando um aproximante de Padé simplesmente por padé.

Exemplo 2.1

Consideremos a expansão (1.1) e examinemos alguns padés. Por definição, o padé [0/1] tem a forma

$$[0/1] = \frac{p_0}{1 + q_1 x} \tag{2.9}$$

O sistema de equações (2.7) associado com (2.9) nos dá $p_0 = 1$ e $q_1 =$ 1/2. Portanto,

$$[0/1] = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}x} = \frac{2}{2 + x} \tag{2.10}$$

Os padés [1/2] e [2/2] são dados por

$$[1/2] = \frac{1 + \frac{13}{10}x}{1 + \frac{9}{5}x + \frac{1}{40}x^2} = \frac{40 + 52x}{40 + 72x + x^2}$$
(2.11)

$$[2/2] = \frac{16 + 44x + 29x^2}{16 + 52x + 41x^2} \tag{2.12}$$

e

Deixamos a cargo do leitor os cálculos pertinentes. Reconhecendo que a série (1.1) é a expansão de Taylor da função (1.2), percebemos que os padés mais interessantes são os diagonais, pois estes têm o mesmo comportamento assintótico da função (1.2). A Tabela 1 nos dá uma idéia quantitativa do desempenho dos padés neste caso.

x	Taylor	f(x)	[2/2]
0,1	0,957471	0,957427	0,957427
0,2	0,927037	0,925820	0,925820
0,5	0,950684	0,866025	0,866029
1,0	2,64844	0,816497	0,816514
2,0	36,3750	0,774597	0,774648
100,0	$2,82 \times 10^{8}$	0,708864	0,709067

Tabela 1. Expansão de Taylor (1.1) e aproximante de Padé [2/2] (2.12) para a função f(x) definida em (1.2). Foram utilizados apenas os cinco primeiros termos da série (1.1).

Na coluna Taylor da Tabela 1, temos os valores da expansão (1.1), que começa claramente a divergir a partir de x=0,5, como esperado (o raio de convergência é 0,5). Na coluna f(x), temos os valores exatos da função (1.2) que converge ao valor $\sqrt{0.5} \simeq 0,707107$, quando $x \to \infty$. Na coluna [2/2], temos os valores fornecidos pelo padé [2/2] dado em (2.12). Vemos, nessa coluna, que este padé foi capaz de ir muito mais longe, sem explodir, do que a série de Taylor (1.1) que lhe serviu de base. Ainda mais, no limite $x \to \infty$, $[2/2] \to 29/41 = 0,707317$ que é uma aproximação bastante razoável do valor exato $\sqrt{0,5} \simeq 0,707107$. Notemos, finalmente, que para fornecer esse valor no infinito, o padé [2/2] utilizou apenas os primeiros cinco termos da expansão (1.1) da função (1.2) em série de Taylor. Esses coeficientes contêm, portanto, muito mais informações do que a expansão básica consegue extrair. Enquanto esta toma os coeficientes linearmente, os padés consideram combinações mais ricas (multilineares), como será ilustrado no exemplo da Seção 5.

As figuras 1 e 2 mostram o comportamento da série (1.1), do padé (2.12) e da função exata (1.2). A série diverge para x>0,5 e não é

mostrada na figura 2. Em ambas as figuras, vemos que o gráfico do padé praticamente coincide com o gráfico da função exata, mesmo para valores grandes de x.

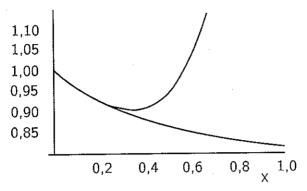


Figura 1. Cinco primeiros termos da expansão de Taylor (1.1) curva que diverge, padé (2.12), função exata (1.2). Os gráficos destas últimas funções coincidem, na escala da figura.

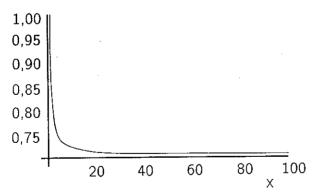


Figura 2. A função (1.2) e o padé (2.12). Mesmo para valores bastante grandes de x, os gráficos dessas funções coincidem, na escala da figura

3 Tabela de Padé

Os aproximantes de Padé podem ser organizados na forma de uma matriz, chamada tabela de Padé, com a seguinte estrutura

Conforme já foi observado antes, a primeira coluna dessa tabela representa as somas parciais da série básica. Na busca de convergência, podemos percorrer vários caminhos através dessa tabela. Esses caminhos são sugeridos por propriedades analíticas conhecidas ou esperadas da função representada. Por exemplo, o comportamento assintótico da expansão (1.1) nos levou a considerar os padés situados na diagonal da tabela. Não vamos nos estender nessa discussão. Mencionamos, apenas, que muitas propriedades interessantes dos padés podem ser extraídas de tais tabelas. O leitor interessado pode consultar a referência [2].

4 Existência e unicidade

Vamos considerar, agora, alguns aspectos mais formais da teoria dos aproximantes de Padé. Comecemos com a questão da existência e unicidade. Precisaremos, apenas, de conceitos básicos de Álgebra Linear. O problema da convergência, um pouco mais complicado, exige conhecimentos sobre as séries de Stieltjes e não será abordado neste pequeno trabalho. O leitor interessado pode recorrer às referências [2,3].

4.1 Existência

A existência do aproximante de Padé $\lfloor L/M \rfloor$ para uma série de potências

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n \tag{4.1}$$

depende da existência de solução do sistema (2.7), mais especificamente das M últimas equações, que escreveremos na forma

$$f_{L}q_{1} + \dots + f_{L-M+1}q_{M} = -f_{L+1}$$

$$f_{L+1}q_{1} + \dots + f_{L-M+2}q_{M} = -f_{L+2}$$

$$\vdots$$

$$f_{L+M-1}q_{1} + \dots + f_{L}q_{M} = -f_{L+M}$$

$$(4.2)$$

ou, em forma matricial,

$$AX = B \tag{4.3}$$

onde A é a matriz dos coeficientes, X é a matriz coluna das incógnitas q_i , e B é a matriz coluna dos termos independentes.

O sistema (4.2) terá solução única se as M equações forem linearmente independentes. Neste caso, o aproximante de Padé [L/M] será único.

O sistema terá infinitas soluções quando o posto r, da matriz dos coeficientes e da matriz ampliada do sistema definido em (4.3), for menor do que M. Neste caso, podemos escolher M-r incógnitas e as outras r incógnitas q_j , assim como os coeficientes p_i , i=0,1,2,...,L, serão dados em função daquelas. Este fato pode levar-nos a pensar que teremos infinitos padés uma vez que podemos atribuir quaisquer valores às M-r variáveis livres. Examinemos, porém, o seguinte exemplo, que nos abre caminho para interessantes conjecturas, convite certo para posterior pesquisa (como indicaremos logo abaixo).

Consideremos a série geométrica

$$f(x) = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \cdots$$
, $|x| < 1$ (4.4)

e procuremos determinar o padé

$$[2/2] = \frac{p_0 + p_1 x + p_2 x^2}{1 + q_1 x + q_2 x^2} \tag{4.5}$$

associado. Da definição (2.6) segue a relação

$$p_0 + p_1 x + p_2 x^2 = (1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \dots)(1 + q_1 x + q_2 x^2) + O(x^5)$$

de onde obtemos

$$p_0 + p_1 x + p_2 x^2 = 1 + (1 + q_1)x + (1 + q_1 + q_2)x^2 + (1 + q_1 + q_2)x^3 + (1 + q_1 + q_2)x^4$$

Seguindo o procedimento discutido neste trabalho, isto é, comparando termos de mesma potência de x nos dois membros desta igualdade, obtemos as seguintes equações:

$$x^{0}$$
: $p_{0} = 1$
 x^{1} : $p_{1} = 1 + q_{1}$
 x^{2} : $p_{2} = 1 + q_{1} + q_{2}$
 x^{3} : $0 = 1 + q_{1} + q_{2}$
 x^{4} : $0 = 1 + q_{1} + q_{2}$ (4.6)

Das duas últimas equações resulta que

$$q_1 = -1 - q_2$$

Desta forma, q_1 , assim como p_1 e p_2 , dependem da quantidade q_2 , isto é,

$$p_1 = -q_2$$
$$p_2 = 0$$

Substituindo estes valores em (4.5) obtemos

$$[2/2] = \frac{1 - q_2 x}{1 + (-1 - q_2)x + q_2 x^2} \tag{4.7}$$

Entretanto, o denominador da fração acima pode ser reescrito como

$$1 + (-1 - q_2)x + q_2x^2 = (1 - x)(1 - q_2x)$$

de maneira que (4.7) toma a forma final

$$[2/2] = \frac{1}{1-x} \tag{4.8}$$

Neste exemplo, verificamos que quando o sistema (2.7) possui infinitas soluções, os polinômios do numerador e denominador do padé não são primos entre si, as variáveis livres são canceladas e o padé se torna único. Notemos que o padé (4.8) é justamente a soma dos infinitos termos da série geométrica (4.4). Qualquer outro padé reproduzirá esse mesmo resultado.

A conclusão a que se chegou da discussão do parágrafo precedente nos leva à seguinte questão. Uma vez que a série original converge a uma expressão bem definida — no caso da série (4.4), 1/(1-x) quando x < 1 — e os padés "descobriram" isso — isto é, não adianta procurar padés "superiores" ao padé [0/1] — não seria o caso de se usar os padés para "somar séries"? Deixamos a cargo do leitor meditar sobre este tema.

4.2 Unicidade

Enunciemos, agora, o seguinte

Teorema (unicidade) Se existir, o aproximante de Padé [L/M] a uma série formal é único.

Prova: Suponhamos que existam dois aproximantes de Padé $X_L(x)/Y_M(x)$ e $U_L(x)/V_M(x)$, associados a uma mesma série de potências $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n$

Temos, então, que

$$X_L(x)/Y_M(x) - U_L(x)/V_M(x) = O(x^{L+M+1})$$
 (4.9)

pois ambos aproximam a mesma série [ver (2.5)]. Multiplicando a equação (4.9) por $Y_M(x)V_M(x)$ obtemos

$$X_L(x)V_M(x) - U_L(x)Y_M(x) = O(x^{L+M+1})$$
(4.10)

O membro esquerdo de (4.10) é um polinômio de grau L+M, e, portanto, identicamente nulo. Como $Y_M(x)$ e $V_M(x)$ não podem ser nulos, devemos ter

$$X_L/Y_M = U_L/V_M \tag{4.11}$$

ou seja, os dois supostamente diferentes aproximantes de Padé coincidem. \Box

5 Aplicação

Como uma aplicação interessante dos aproximantes de Padé, vamos apresentar um método para determinar os zeros de uma série infinita [4].

Usualmente, para a determinação dos zeros de uma série infinita, trunca-se sucessivamente a série obtendo-se uma família de polinômios. Espera-se que as raízes de tais polinômios formem uma sucessão convergente. Se a convergência não for conseguida, toma-se um polinômio de grau maior acrescentando mais um termo da série.

Seja

$$f(z) = 1 + a_1 z + a_2 z^2 + \cdots {(5.1)}$$

a série em cujos zeros estamos interessados.

O aproximante de Padé [L/M] associado é

$$[L/M] = \frac{p_{0M} + p_{1M}z + \dots + p_{LM}z^L}{1 + q_{1M}z + \dots + q_{MM}z^M} = f(z) + O(z^{L+M+1})$$
 (5.2)

Nesta seção, a nova notação para os coeficientes p's e q's é devida ao fato de que vamos fixar L e variar M. Na verdade, o leitor atento já deve ter percebido que os coeficientes p's e q's dependem de L e de M. Essa dependência não é, geralmente, explicitada para economia de notação.

Examinando (5.2), vemos que podemos obter aproximações para os zeros de f(z) por meio das raízes do polinômio do numerador. Esperamos que à medida que aumentamos os graus dos polinômios do numerador e do denominador, ou seja, da soma L+M, vamos melhorar a nossa aproximação. Para definir uma sistemática de trabalho, fixamos o grau L do polinômio do numerador — o que equivale a fixar o número de raízes de f(z) — e variamos o valor de M. Desta forma, à medida que M cresce, mais e mais coeficientes da série (5.1) irão contribuir para a determinação dos coeficientes q's. Estes, por sua vez, transferirão cada vez mais informações da série para os coeficientes p's e, conseqüentemente, para as raízes procuradas.

Obviamente, não podemos, com este método, encontrar todos os zeros da série original, pois, isso implicaria num tratamento exato do problema. Entretanto, podemos encontrar aproximações cada vez melhores para um número finito de zeros.

Fixando L=1, podemos construir um algoritmo recursivo para obter um zero de f(z) com a precisão desejada. De (5.2), temos que

$$[1/M] = (1 + p_{1M}z) / (1 + q_{1M}z + q_{2M}z^2 + \dots + q_{MM}z^M)$$
 (5.3)

donde vemos, imediatamente, que o zero do numerador é dado por

$$z_0^{(M)} = -\frac{1}{p_{1M}} \tag{5.4}$$

bastando, portanto, determinar p_{1M} . Chamaremos este resultado de aproximação de ordem M.

Da expressão (5.2), obtemos a relação

$$1 + p_{1M}z = (1 + a_1z + a_2z^2 + \cdots) (1 + q_{1M}z + \cdots + q_{MM}z^M) + O(z^{M+2})$$

que nos permite determinar p_{1M} , a saber,

$$p_{1M} = a_1 + q_{1M} (5.5)$$

Assim, para determinar p_{1M} precisamos conhecer apenas q_{1M} , ou seja, não necessitamos achar todos os coeficientes q's, embora, de acordo com o sistema (2.7), todos eles estejam influindo implicitamente no valor de q_{1M} e, portanto, de p_{1M} .

Vamos obter as três primeiras aproximações $z_0^{(1)}$, $z_0^{(2)}$ e $z_0^{(3)}$ para um zero da série (5.1). A estrutura dessas aproximações nos mostrará o caminho para encontrar o algoritmo que nos permitirá obter um zero com precisão arbitrária.

Na aproximação de ordem 1, isto é, M=1, e de (5.5) temos

$$\begin{array}{rcl}
1 & = p_0 \\
a_1 + q_1 & = p_1 \\
a_2 + a_1 q_1 & = 0
\end{array} (5.6)$$

onde eliminamos o segundo índice dos coeficientes p's e q's para simplificar a notação.

Resolvendo o sistema (5.6) obtemos $q_1 = -a_2/a_1$ e, usando (5.4)

$$z_0^{(1)} = -\frac{1}{p_1} = -\frac{1}{a_1 + q_1} = -\frac{1}{a_1 - \frac{a_2}{a_1}} = \frac{a_1}{a_2 - a_1^2}$$
 (5.7)

Para M=2 temos a aproximação de ordem 2 e as equações correspondentes

$$\begin{array}{rcl}
a_1 + q_1 & = p_1 \\
a_2 + a_1 q_1 + q_2 & = 0 \\
a_3 + a_2 q_1 + a_1 q_2 & = 0
\end{array} (5.8)$$

Resolvendo o sistema (5.8) temos

$$q_1 = \frac{a_3 - a_1 a_2}{a_1^2 - a_2} \tag{5.9}$$

Usando (5.4) e (5.5), obtemos

$$z_0^{(2)} = -\frac{1}{a_1 + \frac{a_3 - a_1 a_2}{a_1^2 - a_2}} = \frac{a_2 - a_1^2}{a_1^3 - 2a_1 a_2 + a_3}$$
 (5.10)

Analogamente, na aproximação de terceira ordem obtemos

$$z_0^{(3)} = \frac{a_1^3 - 2a_1a_2 + a_3}{a_4 - 2a_3a_1 - a_2^2 + 3a_1^2a_2 - a_1^4}$$
 (5.11)

Observando as expressões para $z_0^{(1)}, z_0^{(2)}$ e $z_0^{(3)}$ dadas em (5.7), (5.10) e (5.11), respectivamente, notamos que o denominador de $z_0^{(i)}$ coincide com o numerador de $z_0^{(i+1)}, i=0,1,2$. Em outras palavras, o denominador da aproximação de dada ordem coincide com o numerador da aproximação de ordem imediatamente superior. A partir desta constatação, vamos inferir uma expressão para $z_0^{(n)}$ que nos dá a aproximação de ordem n. Antes, porém, abramos parênteses para chamar a atenção do leitor para as equações (5.7), (5.10) e (5.11). Elas ilustram o fato mencionado em seções anteriores de que os padés envolvem combinações multilineares dos coeficientes da expansão básica. Fechemos parênteses.

Definamos as quantidades

$$A_n = -\sum_{m=1}^n a_m A_{n-m} , n = 1, 2, 3, \dots,$$
 (5.12)

onde $A_0 = -1$ e a_m são os coeficientes da série (5.1).

Em termos dessas quantidades temos

$$z_0^{(n)} = \frac{A_n}{A_{n+1}}, \quad n = 1, 2, \dots$$
 (5.13)

Os resultados (5.7), (5.10) e (5.11) seguem de (5.13) e (5.12).

Assim, para obter a aproximação de ordem n, necessitamos de (n+1) coeficientes da série original e a relação de recorrência (5.12). As equações (5.12) e (5.13) definem o algoritmo que estávamos procurando.

Examinando a seqüência $\left\{z_0^{(1)}, z_0^{(2)}, z_0^{(3)}, \ldots, z_0^{(n)}\right\}$ teremos informações sobre a convergência do método, se é rápida ou lenta. Se a precisão desejada não for alcançada, basta calcular A_{n+2} — uma vez que A_{n+1} já será conhecida — e efetuar o cálculo A_{n+1}/A_{n+2} .

Um procedimento recursivo alternativo pode ser usado. Da relação (5.13) temos

$$z_0^{(n-1)} = \frac{A_{n-1}}{A_n}$$
 donde $A_n = \frac{A_{n-1}}{z_0^{(n-1)}}$ (5.14)

Substituindo (5.14) em (5.13) temos

$$z_0^{(n)} = \frac{A_{n-1}}{A_{n+1}} \frac{1}{z_0^{(n-1)}} = \frac{A_{n-2}}{A_{n+1}} \frac{1}{z_0^{(n-1)} z_0^{(n-2)}}$$
(5.15)

Continuando com esta sistemática, chegamos ao resultado

$$z_0^{(n)} = \frac{A_1}{A_{n+1}} \frac{1}{\prod_{m=1}^{n-1} z_0^{(m)}} = \frac{a_1}{A_{n+1}} \frac{1}{\prod_{m=1}^{n-1} z_0^{(m)}}$$
(5.16)

onde $A_1 = a_1$ e A_{n+1} são dadas pela relação (5.12).

Notemos que o algoritmo definido por (5.16) nos fornece o zero em termos do produto dos zeros obtidos nas aproximações anteriores.

Em qualquer dos dois procedimentos apresentados, se a precisão préestabelecida não tiver sido alcançada, calculamos A_{n+2} , que depende apenas dos coeficientes da série, e usamos (5.13) ou (5.15). Notemos a grande vantagem de não ser necessário encontrar as raízes do polinômio de grau maior. O método tampouco requer "chutar" um valor inicial para z_0 .

5.1 Exemplos

Aplicando o método para alguns casos específicos e pedindo uma precisão de sete algarismos significativos, obtêm-se os resultados mostrados na Tabela 2, onde j_0 e j_1 são as funções esféricas de Bessel, M a função hipergeométrica confluente e Ai a função de Airy [5].

f(z)	$z_0^{(n)}$	n
$\cos(z)$	1.570796	6
$j_0(z)$	3.141593	12
$j_1(z)$	4.493409	14
M(-0.1;1;z)	3.387796	16
Ai(z)	-2.338107	25

Tabela 2. Raízes de f(z) usando o algoritmo descrito nesta seção. A última coluna indica a ordem da raiz, isto é, o número de recorrências necessárias para se obter a precisão indicada, que é de sete algarismos.

Outra aplicação notável dos padés consiste no cálculo aproximado (com o grau de precisão desejada) de números irracionais ou transcendentais [6].

6 Conclusão

Com este modesto trabalho, esperamos ter pelo menos excitado a curiosidade do leitor. Apenas tocamos na superfície de um tema que é bastante vasto e rico. Os padés associados com expansões em torno de um ponto — que são os que discutimos — são chamados, também, padés de um ponto. Podemos construir padés associados a expansões em torno de dois (ou mais) pontos. São os padés de dois pontos, que nos permitem estudar, por exemplo, continuações analíticas. Muitas vezes (especialmente em Física) conhecemos uma função apenas pela sua representação em torno da origem e da sua expansão assintótica. Os padés de dois pontos são ótimas ferramentas para "ligar" essas expansões.

O difícil problema da convergência dos padés se constitui num incentivo excelente para o estudo das séries de Stieltjes. Para os interessados, citamos as referências [2, 3].

Referências

- [1] 1. Henri Padé, Sur la représentation approchée d'une fonction par des fractions rationelles, Ann. Sci. École Norm. Sup. Suppl. 9 (1892) 1-93.
- [2] 2. G. A. Baker, Jr., Essentials of Padé Approximants (Academic Press, New York: 1975).
- [3] 3. M. C. K. Aguilera-Navarro, V. C. Aguilera-Navarro, R. C. Ferreira e N. Teramon, Aproximantes de Padé, Departamento de Matemática, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR: 1997.
- [4] 4. V. C. Aguilera-Navarro e M. C. K. Aguilera-Navarro, On the zeroes of infinite series, Journal of Computational Physics 53 (1984) 193-196.

- [5] 5. M. Abramowitz e I. Stegun, Handbook of Mathematical Functions (Dover, New York: 1965).
- [6] 6. M. C. K. Aguilera-Navarro, V. C. Aguilera-Navarro, R. C. Ferreira e N. Teramon, Representations of the number π . Submetido para publicação no American Mathematical Monthly, 1998.

Maria Cecília K. Aguilera-Navarro e Valdir C. Aguilera-Navarro Universidade Estadual do Centro-Oeste - UNICENTRO 85015-270 Guarapuava, PR

Valdir C. Aguilera-Navarro Instituto de Física Téorica - UNESP UNESP 01405-900 São Paulo, SP

Ricardo C. Ferreira e Neuza Teramon Departamento de Matemática - CCE / UEL 86051-990 Londrina, PR