

CARLOS ALBERTO FERRARI

APLICAÇÕES DOS APROXIMANTES DE PADE A EQUAÇÃO
DE FASE

SBI-IFUSP



305M810T2993

Dissertação de Mestrado apre-
sentada ao Instituto de Físi-
ca da Universidade de São Pau-
lo, em dezembro de 1970.

São Paulo

1970



AGRADECIMENTOS

Ao Prof. A.H.Zimmerman pela sugestão do tema, orientação e estímulo constante e ainda pelo muito que aprendi durante minha permanência no I.F.T.

Ao Prof. J.P.Ader por discussões.

Aos Profs. Diógenes de Oliveira e Valdir Aguilera Navarro por discussões sobre os programas de computação.

Ao Prof. Hélio Fagundes pela discussão da redação do texto.

Ao Prof. Paulo Leal Ferreira, Diretor Científico, e a todo pessoal do I.F.T. pelos meios que ali encontrei para a realização do presente trabalho e para minha formação científica.

A Fundação de Amparo a Pesquisa (FAPESP) pelo apoio financeiro durante o programa de Pós-Graduação.

Ao Conselho Nacional de Pesquisa (CNPq) pelo apoio financeiro para o Programa de Mestrado.

A todos aqueles que direta ou indiretamente deram seu apoio e incentivo.

A Elizabeth pela datilografia.

INTRODUÇÃO

I. PRELIMINARES MATEMÁTICOS

I.1. FRAÇÕES CONTÍNUAS

I.2. APROXIMANTES DE PADE

I.3. FUNÇÕES DE STIELTJES

II. TEORIA DO " PHASE SHIFT " VARIÁVEL

II.1. ALCANCE EFETIVO E " PHASE SHIFT " VARIÁVEL

II.2. EQUAÇÃO DE FASE E FUNÇÃO COMPRIMENTO DE DIFUSÃO

II.3. SOLUÇÃO PERTURBATIVA DA EQ. DE FASE

III. APLICAÇÕES DO MÉTODO DE APROXIMANTES DE PADE

III.1. POTENCIAL DELTIFORME

III.2. POTENCIAL DE ARBUZOV, FILIPPOV E KHRUSTALOV

III.3. POÇO DE POTENCIAL QUADRADO

IV. CONCLUSÕES

INTRODUÇÃO

Recentemente tem havido um interesse bastante grande na aplicação dos Aproximantes de Padé, especialmente na física das Interações Fortes (para um apanhado dêste problema ver curso de Pusterla ^[10]).

A finalidade desta tese é introduzir a aplicabilidade dêstes aproximantes para o problema da Equação de Fase.

Primeiramente faremos um resumo sôbre Frações Contínuas, Aproximantes de Padé e Funções de Stieltjes. Mencionaremos as principais propriedades e daremos demonstrações para algumas delas (as mais simples).

Em seguida introduziremos a Equação de Fase, e consideraremos algumas aplicações para o caso de ondas S .

Se o potencial fôr deltiforme a seqüência de Padé $[M,0]$ já dá o resultado exato.

Consideraremos também o potencial de Arbuzov, Filippov e Khrustalov ^[15] no caso de energia zero ($l=0$). Este potencial é da forma $(A/r^2 - \lambda k_0^2/r^2) E(1-r)$

Mostraremos que o " scattering length ", para o caso em que $A=0$, é uma Função de Stieltjes na variável λ , quando $k_0 \geq 1$

Em seguida compararemos o valor exato do " scattering length " com os diferentes Aproximantes de Padé.

O caso do poço quadrado para energia zero ($l=0$), também é considerado.

Gostaríamos de observar que para o potencial de Arbuzov et .

al., Calogero e Cassandro^[16] demonstraram que a série perturbativa para a função do "scattering length" diverge.

Estudos de outros tipos de potenciais, assim como considerações de energias diferentes de zero para a Equação de Fase serão objetos de trabalho ulterior.

I. PRELIMINARES MATEMÁTICOS

Nesta seção desenvolveremos os conceitos matemáticos utilizados no trabalho. Estes compreendem a teoria dos Aproximantes de Padé, e conceitos correlatos.

I.1.- FRAÇÕES CONTÍNUAS

Na Teoria das Funções de Variável Complexa, uma função $F(z)$, analítica no interior de um certo domínio $D(z)$, pode ser representada pela série de Taylor,

$$F(z) = F(z_0) + F'(z_0)(z-z_0) + \frac{F''(z_0)(z-z_0)^2}{2!} + \dots + \frac{F^{(n)}(z_0)(z-z_0)^n}{n!} + \dots$$

com z no interior do círculo de convergência da série com centro em z_0 contido em D .

Dentro deste círculo de convergência o conhecimento de $F(z)$ ou do conjunto $\{F^{(n)}(z_0)\}$ são equivalentes.

Uma outra maneira de se representar uma função analítica é por intermédio de uma expansão em Fração Contínua ^{2'}. Passaremos a discuti-la brevemente.

As Frações Contínuas são expressões da forma

$$F = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \frac{a_3}{b_3 + \frac{a_4}{b_4 + \dots}}}} \quad (1)$$

onde os conjuntos $\{a_n\}$ e $\{b_n\}$ são números, e as operações são entendidas como sendo efetuadas até $n = \infty$.

A expansão de uma função $F(z)$ em Fração Contínua é da forma

$$F(z) = b_0 + \frac{a_1 z}{b_1 + \frac{a_2 z}{b_2 + \frac{a_3 z}{b_3 + \frac{a_4 z}{b_4 + \dots}}}} \quad (2)$$

A Fração Contínua truncada numa certa ordem N , dá uma Fração Racional em z que representa uma aproximação para $F(z)$, da mesma maneira que o polinômio obtido pelo corte de uma Série de Taylor para $F(z)$ em uma certa ordem apresenta uma aproximação para $F(z)$.

Veremos abaixo (seção I) que a tóda expansão de uma função em Série de Taylor corresponde uma expansão da mesma função em Fração Contínua.

As vezes é mais vantajoso trabalhar com a expansão em Fração Contínua que com a Série de Taylor devido a dois fatos:

1º) A Fração Contínua converge num domínio maior que o círculo de convergência da Série de Taylor correspondente.

2º) No círculo de convergência da Série de Taylor, a Fração Contínua converge mais rapidamente que a Série de Taylor.

Um exemplo simples de uma expansão em Fração Contínua é dado pela função

$$F(z) = \sqrt{1+z}$$

Partindo da identidade,

$$(\sqrt{1+z} + 1)(\sqrt{1+z} - 1) = z,$$

podemos escrever,

$$\sqrt{1+z} = 1 + \frac{z}{1 + \sqrt{1+z}}$$

Por iteração obtemos ,

$$\sqrt{1+z} = 1 + \frac{z}{2 + \frac{z}{2 + \frac{z}{2 + \frac{z}{\dots}}}} \quad (3)$$

CONVERGÊNCIA

As propriedades de convergência podem ser provadas com um certo número de teoremas [1]. Vamos mencionar um deles.

Numerosos exemplos podem ser vistos em Wall [1].

Teorema

A Fração Contínua

$$F' = 1 + \frac{a}{1 + \frac{a}{1 + \frac{a}{\dots}}} \quad (4)$$

converge para todos os valores de a , exceto para $a = -1/4 - C$ onde C é um número real qualquer positivo.

A equação (4) surge de (1) pondo todos $b_n = 1$ e todos $a_n = a$.

Aplicando o teorema acima à expansão (3) de $\sqrt{1+z}$, que pode ser escrita na forma

$$\sqrt{1+z} = 1 + \frac{z/2}{1 + \frac{z/4}{1 + \frac{z/4}{1 + \frac{z/4}{\dots}}}} \quad (5)$$

notamos que esta Fração Contínua convergirá para todos os valores de \bar{z} fora do intervalo real $-\infty < \bar{z} < -1$. É interessante ainda, notar dois fatos relativos a êste resultado,

- i) êste intervalo corresponde ao corte de $\sqrt{1+\bar{z}}$,
- ii) enquanto a expansão em Série de Taylor para $\sqrt{1+\bar{z}}$ converge somente no círculo $|z| < 1$, a expansão (5) converge em todo plano complexo com exceção do intervalo $-\infty < \bar{z} < -1$.

Pondo $\bar{z} = 1$ em (5), obtemos as diferentes ordens de aproximação a \sqrt{z} ,

$$n = 1 \quad \frac{3}{2} = 1.5$$

$$n = 2 \quad \frac{7}{5} = 1.4$$

$$n = 3 \quad \frac{17}{12} = 1.4166\dots$$

$$n = 4 \quad \frac{41}{29} = 1.413793\dots$$

$$n = 5 \quad \frac{99}{70} = 1.4142857\dots$$

$$n = 10 \quad \frac{8119}{5741} = 1.414213551\dots$$

sendo que,

$$\sqrt{2} = 1.414213562\dots$$

Com exceção da ordem $n = 1$, notemos que a cada passo se obtém uma aproximação cada vez melhor, e para $n = 10$ já temos uma precisão melhor que 10^{-9} . Isto é notável quando comparado com o resultado da Série de Taylor, cuja precisão, para a aproximação de décima ordem, é da ordem de 10^{-2} .

Através do teorema acima podemos provar ainda que a Fração Contínua

$$\text{Log}(1+Z) = \frac{Z}{1+1^2 Z} \cfrac{2+1^2 Z}{3+2^2 Z} \cfrac{4+2^2 Z}{5+3^2 Z} \dots \quad (6)$$

converge em toda parte exceto no corte $(-1, -\infty)$, e que na Fração Contínua,

$$\text{arctan}_9(Z) = \frac{Z}{1+1Z^2} \cfrac{3+4Z^2}{5+9Z^2} \cfrac{7+16Z^2}{9+\dots} \quad (7)$$

a convergência ocorre exterior ao corte ao longo do eixo imaginário nos intervalos $(i, i\infty)$ e $(-i^*, -i\infty)$.

É notável que estas expansões convergem em todo plano complexo, exceto sobre singularidades e cortes, e não simplesmente no interior de círculos de raio igual a 1, como no caso da Série de Taylor correspondente.

I.2- APROXIMANTES DE PADÉ

Da Fração Contínua ⁽²⁾ cortada numa certa ordem, obtemos uma certa aproximação para $F(z)$ que é um quociente de 2 polinômios. De maneira geral esta aproximação para $F(z)$ pode ser escrita como

$$\frac{P_n(z)}{Q_n(z)} \quad , \quad (8)$$

onde $P_n(z)$ é um polinômio de grau M e $Q_n(z)$ um polinômio de grau N . Os graus destes polinômios guardam entre si a relação

$$M = N \quad \text{ou} \quad M = N + 1$$

Um fato importante ^[2] é que as primeiras $(M + N)$ derivadas da razão (8) coincidem com as primeiras $(M + N)$ derivadas de $F(z)$ para $Z = 0$. Isto significa que $F(z)$ e o quociente (8) possuem expansão de Taylor em torno de $Z = 0$ que coincidem até ordem $M + N$, i.e., os primeiros $M + N + 1$

têrmos da expansão de Taylor de $F(z)$ e de (8) são idênticos.

Esta relação entre a expansão de $F(z)$ em Fração Contínua e sua expansão em Série de Taylor é que inspirou Padé [3] a generalizar a noção de aproximantes por frações racionais para $F(z)$. Considerando a série formal

$$F(z) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j z^j \quad (9)$$

que inclusive pode ter raio de convergência zero, êle definiu o quociente de dois polinômios,

$$\frac{P_m(z)}{Q_n(z)} \quad (10)$$

onde $Q_n(0)=1$, m e n são inteiros quaisquer que dão a ordem dos polinômios $P_m(z)$ e $Q_n(z)$ respectivamente, tal que

$$\frac{P_m(z)}{Q_n(z)} - F(z) = O(z^{m+n+1}) \quad (11)$$

Devenos considerar também que $P_m(z)$ e $Q_n(z)$ não devem ter nenhum zero comum. A função $P_m(z)/Q_n(z)$ chamaremos Aproximantes de Padé de ordem $(m+n)$. Usaremos a seguinte notação $F^{[n,m]}(z)$ ou $[n,m] = P_m(z)/Q_n(z)$.

Mostraremos agora, que esta maneira de representar a função $F(z)$ é a única, i.e., não existe nenhum outro aproximante $R_m(z)/S_n(z)$ além de $P_m(z)/Q_n(z)$ que satisfaça (11)

Suponhamos que exista $R_m(z)/S_n(z)$ tal que

$$\frac{R_m(z)}{S_n(z)} - F(z) = O(z^{m+n+1})$$

Então segue que

$$P_m(z) S_n(z) - Q_n(z) R_m(z) = O(z^{m+n+1}),$$

cujo primeiro membro é um polinômio de grau $(m+n)$.

Para que esta equação seja consistente é preciso que ele se anule, donde

$$\frac{P_m(z)}{Q_n(z)} = \frac{R_m(z)}{S_n(z)}$$

Vamos ilustrar o método com exemplo. Por conveniência sempre consideraremos $F(0) = 1$ de modo que a expansão de $F(z)$ em Série de Taylor será escrita como

$$F(z) = 1 + a_1 z + a_2 z^2 + a_3 z^3 + a_4 z^4 + \dots \quad (12)$$

Segue que, para os diferentes Aproximantes de Padé, obteremos,

$$[0,0] = 1,$$

$$[0,1] = (1 + a_1 z),$$

$$[1,0] = (1 - a_1 \bar{z})^{-1},$$

$$[1,1] = [1 + (a_1 - a_2/a_1)z] [1 - (a_2/a_1)\bar{z}]^{-1},$$

$$[0,2] = 1 + a_1 z + a_2 \bar{z}^2,$$

$$[2,0] = [1 - a_1 z + (a_1^2 - a_2)\bar{z}^2]^{-1},$$

$$[1,2] = [1 + (a_1 - a_3/a_2)z^2 + (a_2 - a_1 a_3/a_2)\bar{z}] \cdot (1 - a_3/a_2 \bar{z})^{-1},$$

$$[2,1] = [1 + (a_1 + (a_2 a_1 - a_3)(a_2 - a_1^2)^{-1})z] \cdot$$

$$[1 + (a_2 a_1 - a_3)(a_2 - a_1^2)^{-1}z + (a_1 a_3 - a_2^2)(a_2 - a_1^2)^{-1}\bar{z}^2]^{-1},$$

$$[2,2] = [D_1 + (a_1 D_1 + N_1)\bar{z} + (a_2 D_1 + a_1 N_1 + N_2)\bar{z}^2] \cdot$$

$$[D_1 + N_1 \bar{z} + N_2 \bar{z}^2]^{-1},$$

$$N_1 = a_1 a_4 - a_2 a_3$$

$$N_2 = a_3^2 - a_2 a_4$$

$$D_1 = a_2^2 - a_1 a_3$$

$$[0,3] = 1 + a_1 z + a_2 z^2 + a_3 z^3,$$

$$[2,0] = [1 - a_1 z + (a_1^2 - a_2) z^2 + (2a_1 a_2 - a_1^3 - a_2^2) z^3]^{-1}$$

$$[1,3] = [a_2 + (a_1 a_3 - a_4) z + (a_2 a_3 - a_1 a_4) z^2 + (a_3^2 + a_2 a_4) z^3]^{-1} [a_3 - a_4 z]^{-1}$$

$$[3,1] = [a_1 D_2 + (a_1^2 D_2 - a_2 D_2 - N_2) z + (a_1 D_2 - (a_2 D_2 + N_2) z + a_1 N_2 z^2 - (a_1 a_3 D_2 - a_2^2 D_2 - a_2 N_2 + a_1^2 N_2) z^3)]^{-1}$$

$$N_2 = a_1 (a_1 a_3 - a_4) - a_2 (a_1 a_2 - a_3)$$

$$D_2 = 2a_1 a_2 - a_3 - a_1^2$$

$$[2,2] = 1 + [a_1 a_3 D_2 z + (a_2 a_3 D_2 - a_1 (a_4 D_2 + a_2 N_2)) z^2 +$$

$$+ (a_3^2 D_2 - a_2 (a_4 D_2 + a_2 N_2) + a_1 a_3 N_2) z^3]$$

$$[a_3 D_2 - (a_4 D_2 + a_2 N_2) z + a_3 N_2 z^2]^{-1}$$

$$N_2 = a_4^2 - a_3 a_5$$

$$D_2 = a_3^2 - a_2 a_4$$

$$[3,2] = [(1 + a_1 + B_1) z + (a_2 - a_1 B_1 + B_2) z^2]^{-1} [(1 + B_1 z + (B_2 + B_3 z) z)]^{-1}$$

$$B_1 = [a_1 a_3 - a_2 a_4 - B_2 (a_2^2 - a_1 a_3)] [a_2 a_3 - a_1 a_4]^{-1}$$

$$B_2 = [a_2(a_1 a_5 - a_2 a_4) - a_3(a_5 - a_2 a_2) + a_4(a_4 - a_1 a_2)] / [a_2(a_2^2 - a_1 a_3) - a_3(a_1 a_2 - a_3) + a_4(a_4^2 - a_1^2)]$$

$$B_3 = -a_3 - a_2 B_1 - a_1 B_2$$

Observemos que a Série de Taylor truncada em i poderá fornecer $(i + 1)$ diferentes valores para u e v (tomados de 0 a i) nos Aproximantes de Padé.

Padé agrupou^[3] os aproximantes numa tabela, conhecida como Tabela de Padé, da seguinte forma

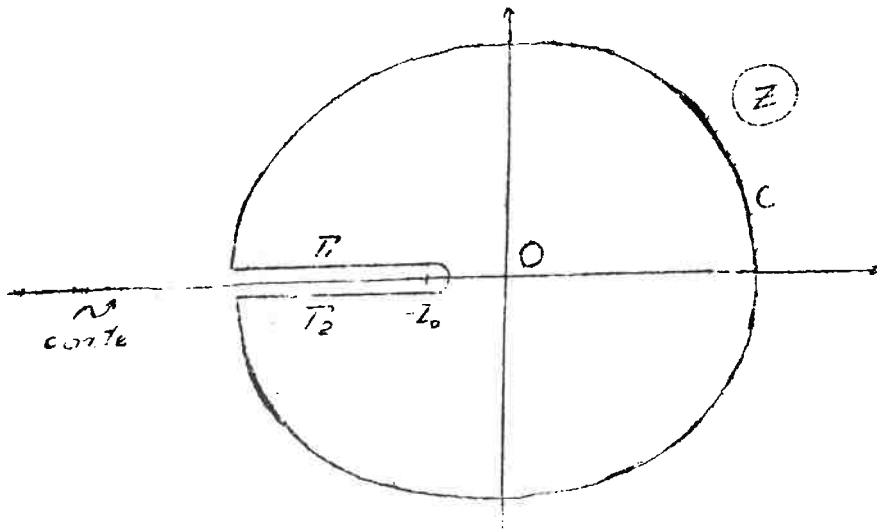
$[0,0]$	$[0,1]$	$[0,2]$	$[0,3]$...
$[1,0]$	$[1,1]$	$[1,2]$	$[1,3]$...
$[2,0]$	$[2,1]$	$[2,2]$	$[2,3]$...

Os Aproximantes de Padé da tabela, que se localizam na 1ª linha representam as aproximações à função através da Série de Taylor. Os aproximantes que pertencem à diagonal principal e à primeira paralela acima, ou seja, da forma $[N, N]$ ou $[N, N+1]$, representam as aproximações a função através da Função Contínua.

A tabela de Padé assim, contém tôdas as aproximações da função por Frações Racionais satisfazendo a condição (11), incluindo, como casos particulares, as aproximações da expansão em Série de Taylor e Fração Contínua truncadas numa certa ordem.

I.3. FUNÇÕES DE STIELTJES

Tais classes de funções são analíticas em todo plano complexo com exceção de um corte sobre o eixo real negativo, e apresentam ainda descontinuidade de sinal definido, que tomaremos negativa.



Pelo teorema de Cauchy temos:

$$F(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{T_1, T_2} \frac{F(\zeta)}{\zeta - z} = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{F(\zeta^+) - F(\zeta^-)}{\zeta - z},$$

onde assumimos que $F(\zeta) \rightarrow 0$ sobre o contorno C, e que ζ^+ e ζ^- são pontos correspondentes em T_1 e T_2 .

Mas $(F(\zeta^+) - F(\zeta^-))/2i = \Delta F(\zeta)$ é a descontinuidade da função sobre o corte e portanto

$$F(z) = \int_{-\infty}^{-z_0} dz' \frac{Q(z')}{z' - z} \quad (13)$$

com $Q(z) = \Delta F(z)/\pi < 0$ para $-\infty < z \leq -z_0$.

A classe das funções de Stieltjes satisfaz, portanto, uma expressão do tipo (13).

A expressão (13) pode ser posta na forma,

$$F(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \frac{Q(z')}{z'(1 - z/z')}$$

que na expansão

$$\frac{1}{1 - z} = 1 + z + z^2 + z^3 + \dots,$$

obtemos

$$F(z) = \int_{-\infty}^{-z_0} dz' \frac{Q(z')}{z'} \left(1 + \frac{z}{z'} + \frac{z^2}{z'^2} + \frac{z^3}{z'^3} + \dots \right).$$

Fazendo a mudança variável $1/z' = -1/z$, a expressão acima fica,

$$F(z) = \int_0^{1/z_0} du \left(\frac{\alpha(-1/u)}{-u} \right) (1 - uz + u^2 z^2 - u^3 z^3 + \dots).$$

Como $\alpha(u) = \alpha(-1/u)/-u \geq 0$, podemos escrever,

$$F(z) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j (-z)^j, \quad (14)$$

com

$$f_j = \int_0^{1/z_0} du u^j \alpha(u) \geq 0. \quad (15)$$

Vemos então que as funções de Stieltjes admitem um desenvolvimento do tipo (14) com a condição (15) sobre os coeficientes f_j . Uma definição de Funções de Stieltjes desta maneira é encontrada em Backer^[4].

Os f_j são momentos de $F(z)$ com peso $\alpha(u)$.

Surge agora a questão: como reconhecer se uma função $F(z)$ é de Stieltjes ou não? Para isto temos o seguinte resultado,

Teorema:

Sejam os determinantes

$$D(m, n) = \begin{vmatrix} f_m & f_{m+1} & \dots & f_{m+n} \\ f_{m+1} & f_{m+2} & \dots & f_{m+n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_{m+n} & f_{m+n+1} & \dots & f_{m+2n} \end{vmatrix} \quad (16)$$

onde os f_j são os coeficientes do desenvolvimento (14).

Para que $F(z)$ seja uma Função de Stieltjes, os $\det D(m, n)$ devem ser positivos

Para a prova deste resultado, consideremos a equação de autovalôres,

$$\tilde{D}(m, n) \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

Multiplicando ambos os membros por $(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n)$, obtemos,

$$(x_0 x_0 f_m + x_0 x_1 f_{m+1} + \dots + x_0 x_n f_{m+n} +$$

$$+ x_1 x_0 f_{m+1} + x_1 x_1 f_{m+2} + \dots + x_1 x_n f_{m+n+1} +$$

$$+ x_n x_0 f_{m+n} + x_n x_1 f_{m+n+1} + \dots + x_n x_n f_{m+2n}) =$$

$$= \sum_{p, q=0}^n f_{p+q+m} x_p x_q = \sum_{p, q=0}^n \int_0^{1/2} dU U^{p+q+m} x_p x_q \alpha(U) =$$

$$= \int_0^{1/2} dU U^m (x_0 + x_1 U + \dots + x_n U^n)^2 \alpha(U) > 0.$$

Como esta quantidade é igual a $\lambda (X_0^2 + \dots + X_n^2)$, ti
ramos que

$$\lambda > 0$$

Diagonalizando a matriz $\tilde{D}(n, n)$, vemos que, como
todos os seus auto-valôres são positivos, o determinante $|X(n, n)|$
é positivo.

Pode-se mostrar [4], que é suficiente que $D(0, 1)$, $D(1, 1)$
sejam positivos para que a função $F(z)$ seja de Stieltjes,
i.e., satisfaça (14) e (15).

Para ilustrar o resultado consideremos a expansão:

$$F(z) = 2 \frac{\sqrt{1+z} - 1}{z} = 1 - \frac{1}{4} z + \frac{1}{8} z^2 - \frac{5}{64} z^3 + \dots,$$

cuja função tem corte sôbre o eixo real negativo que inicia em
 $z = -1$, e descontinuidade $-2/\sqrt{|z|}$ que é portanto de
sinal constante. Os determinantes,

$$D(0, 1) = \begin{vmatrix} 1 & 1/4 \\ 1/4 & 1/8 \end{vmatrix} = \frac{1}{8} - \frac{1}{16} = \frac{1}{16}$$

e

$$D(1, 1) = \begin{vmatrix} 1/4 & 1/8 \\ 1/8 & 5/64 \end{vmatrix} = \frac{5}{256} - \frac{1}{64} = \frac{1}{4}$$

são positivos. De acôrdo com o resultado anterior a $F(z)$
acima é uma Função de Stieltjes.

Embora a Função $\sqrt{1+z}$ seja analítica no plano compleo
xo z com corte sôbre o eixo real negativo e descontinuidade
constante, há dificuldades em $|z| \rightarrow \infty$, quando tentamos

escrevê-la na forma (13) ou equivalentemente nas formas (14) e (15). Por isso devemos dividi-la por \bar{z} e considerar $\sqrt{1+\bar{z}}/\bar{z}$. Para eliminarmos o polo $z=0$ subtraímos $1/\bar{z}$. O fator 2 aparece porque queremos $f_0 = 1$.

PROPRIDADE DE ORTOGONALIDADE

Consideremos $F(z)$ pertencente a classe das funções que são holomorfas perto da origem, com o seu Aproximante de Padé diagonal $F_N(z)/Q_N(z)$,

$$Q_N(z) F(z) = F_N(z) + z^{2N+1} R_N(z) \tag{17}$$

onde $R_N(z)$ possui as mesmas propriedades de analiticidade de $F(z)$.

Consideremos a seguinte integral

$$I_{NN'} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{dz}{z^{N+N'+2}} P_N(z) Q_{N'}(z) F(z) \tag{18}$$

com a curva C contendo a origem mas não singularidades de $F(z)$.

Para $N > N'$, usando (17) segue que

$$I_{NN'} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{dz}{z^{N+N'+2}} \frac{P_N(z) Q_{N'}(z)}{z^{N+N'+2}} + \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{dz}{z^{N+N'+2}} R_N(z) Q_{N'}(z) z^{N-N'+1} \tag{19}$$

Devido ao fato de $P_N(z)Q_{N'}(z)/z^{N+N'+2}$ não possuir singularidades fora da origem podemos deformar o contorno C da primeira integral de (19) até o infinito, onde o termo dominante de $P_N(z)Q_{N'}(z)$ será $z^{N+N'}$, e então ela se anulará.

Como $N-N'-1$ é não negativo segue que $P_N(z)Q_{N'}(z)z^{N-N'-1}$ é também analítica em C e portanto a segunda integral de (19) é também zero.

Agora, no caso de $N=N'$ a primeira integral de (19) continua zero e da segunda, pela Teoria dos Resíduos, obtemos $P_N(0)Q_N(0)$ que chamaremos α_N .

Em vista destas considerações, segue que

$$I_{NN'} = \delta_{NN'} \alpha_N \quad (20)$$

Caso a função $F(z)$ seja de Stieltjes, o contorno C pode ser deformado de tal maneira que a integração poderá ser efetuada ao longo do corte. Indicando a descontinuidade por $2\pi i \rho(z)$ com $F(z) \sim N$, a equação (18) fica,

$$\int_{-\infty}^{-z_0} dz \rho(z) \frac{Q_N(z)Q_{N'}(z)}{z^{N+N'+2}} = \delta_{NN'} \alpha_N$$

Com a mudança de variável, $u = -1/z$, obtemos

$$\int_0^{1/z_0} du \alpha(u) \tilde{Q}_N(u) \tilde{Q}_{N'}(u) du = \delta_{NN'} \alpha_N, \quad (21)$$

onde pusemos $z^N Q_N(1/z) = \tilde{Q}_N(u)$.

Vemos assim que os polinômios $\tilde{Q}_N(u) = (-1)^N u^N Q_N(-1/u)$ de grau N em relação a variável u são ortogonais no corte $0 \rightarrow z^{-1}$ com medida positiva $\alpha(u)$ [5].

Veremos, alguns teoremas que servirão para se obter resultados relacionados com a convergência dos Aproximantes de Padé.

Teorema:

Os zeros dos polinômios ortogonais $\tilde{Q}_N(u)$ associados com o peso $\alpha(u)$ no intervalo $[0, 1/z_0]$ são reais e distintos e estão todos localizados no intervalo $[0, 1/z_0]$ [6].

Para a prova deste teorema, tomemos $N' = 0$, e $N \neq 0$ em (21),

$$\int_0^{1/z_0} du \alpha(u) \tilde{Q}_N(u) = 0$$

Como $\alpha(u) du \geq 0$, $\tilde{Q}_N(u)$ deve mudar de sinal pelo menos uma vez no intervalo $[0, 1/z_0]$. Chamando u_1, u_2, \dots, u_e , os zeros de $\tilde{Q}_N(u)$ neste intervalo, podemos escrever;

$$\tilde{Q}_N(u) = (u-u_1)(u-u_2)\dots(u-u_e)f(u),$$

onde suporemos que $f(u)$ não mais se anule em $[0, 1/z_0]$, e que seja positiva.

Segue então que

$$\tilde{Q}_N(u)(u-u_1)(u-u_2)\dots(u-u_e) = (u-u_1)^2(u-u_2)^2\dots(u-u_e)^2 f(u) > 0,$$

e portanto

$$\int_0^{1/z_0} du \tilde{Q}_N(u) (u-u_1)(u-u_2)\dots(u-u_k) \alpha(u) > 0 \quad (22)$$

Se $k < N$, $(u-u_1)(u-u_2)\dots(u-u_k)$ é uma combinação de polinômios $\tilde{Q}_0, \tilde{Q}_1, \dots, \tilde{Q}_k$ e portanto de acordo com (21), a expressão (22) deve ser igual a zero. Mas este tipo de contradição não existirá se $k = N$, i.e., se todos os zeros de $\tilde{Q}_N(u)$ estiverem no intervalo $[0, 1/z_0]$.

Lembrando que $\tilde{Q}_N(u) = 1/z^N Q_N(z)$, vemos que os zeros de $Q_N(z)$ estão sobre o corte da Função de Stieltjes $F(z)$. (Observemos que $z = -\infty$ ou $u = 0$ não é zero de $\tilde{Q}_N(u)$ pois o coeficiente a_N da expansão $Q_N(z) = \sum_{n=0}^N a_n z^n$ é diferente de zero)

Teorema [7]

Entre dois zeros consecutivos de $Q_N(u)$ existe exatamente uma raiz de $Q_{N+1}(u)$.

Este teorema pode ser demonstrado à partir de (21)

Teorema [8]

Os zeros de $F_N(z)$ são reais e se alternam com os zeros de $Q_N(z)$.

Com ajuda destes resultados podemos provar que se a função for de Stieltjes os Aproximantes de Padé diagonais convergem

uniformemente fora de seu corte. Podemos ainda mostrar de acordo com Markoff^[9] que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{P_N(z)}{Q_N(z)} = F(z)$$

em todo plano complexo com o corte $(-\infty, -z_0)$.

Em Baker^[4] há teoremas com resultados mais gerais para Aproximantes de Padé, incluindo os não diagonais. Demonstra-se, por exemplo, que se $F(z)$ for uma Função de Stieltjes então tanto os polos como os zeros dos Aproximantes de Padé $[N, N+j]$ com $j \geq -1$ estão sobre o eixo real negativo.

Ainda para as funções de Stieltjes os Aproximantes de Padé obedecem^[4] as seguintes desigualdades, onde z é real e não negativo:

$$(-1)^{1+j} \{ [N+1, N+1+j] - [N+1, N+j] \} \geq 0 \quad (23a)$$

$$(-1)^{1+j} \{ [N, N+j] - [N-1, N+j+1] \} \geq 0 \quad (23b)$$

$$[N, N] \geq F(z) \geq [N, N-1] \quad (23c)$$

$$[N, N]' \geq F'(z) \geq [N, N-1]' \quad (23d)$$

com $j \geq -1$. As duas primeiras valem também para as derivadas (a primeira com $j \geq 0$)^[10].

II. TEORIA DO "FASE SHIFT" VARIÁVEL

II.1. ALCANCE EFETIVO E "PHASE SHIFT" VARIÁVEL

Para espalhamento a baixas energias, tal que somente ondas S são espalhadas, a amplitude de difusão e seção de choque são dadas por.

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} (e^{i\delta_0} - 1),$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0.$$

onde $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ e δ_0 é o "phase Shift" da onda S . Como é bem conhecido, o espalhamento a baixas energias pode também ser descrito por duas grandezas que caracterizam o Efeito do Potencial $V(r)$. Tais grandezas são, o alcance efetivo (effective range) r_0 , um conceito já evidente no trabalho de Breit et al [11] e introduzido explicitamente por Schwinger [12], e Blatt e Jackson [13], e o comprimento de difusão (scattering length) a introduzido por Fermi [14]. Ambas as quantidades foram introduzidas em relação ao espalhamento Nucleon-Nucleon.

A relação de r_0 e a com δ_0 e k , obtida através da Equação de Schroedinger, é

$$k \cot \delta = -\frac{1}{a} + \frac{\pi_0}{2} k^2 + O(k^4) \quad (1)$$

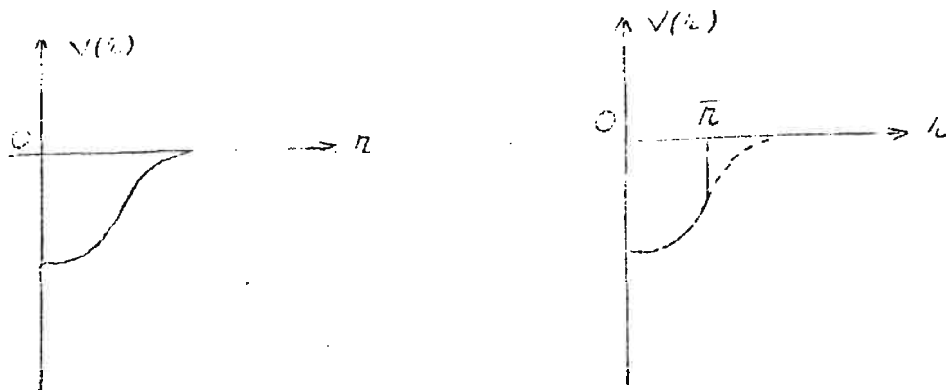
derivada por diferentes métodos por Landau-Smorodinsky (1944), Schwinger (1947) e Bethe (1949).

Outro conceito que nos será útil mais tarde é o de "phase Shift" variável. Consideremos o potencial esféricamente simétrico $V(r)$, do qual derivamos a família de potenciais.

$$V_{\tilde{r}}(r) = V(r) \Theta(\tilde{r}-r),$$

onde $\Theta(r)$ é a função de Heavisidade.

Gràficamente teríamos



Devemos entender por $\delta(\tilde{r})$ o "phase Shift" produzido pelo potencial $V_{\tilde{r}}(r)$, em outras palavras o "phase Shift" δ produzido por $V(r)$ é

$$\delta = \lim_{k \rightarrow \infty} \delta(\tilde{r})$$

Certamente vamos poder definir comprimento de difusão variá-

vel $C_l(\tilde{r})$, corresponde a $\delta(\tilde{r})$.

Mudando a notação $\tilde{r} \rightarrow r$ daremos agora uma dedução da chamada Equação de Fase, que é a equação diferencial satisfetida por $\psi(r)$.

II.2. EQUAÇÃO DE FASE E FUNÇÃO COMPRIMENTO DE DIFUSÃO

Para obtermos a equação de fase, vamos partir da Equação Radial de Schroedinger,

$$\psi''(r) + [k^2 - U(r)] \psi(r) = 0 \quad (2)$$

com

$$U(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \quad (3)$$

Sabemos que o comportamento assintótico da função de onda radial $\psi(r)$ é dado por

$$\psi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \sin(kr + \delta_{cl}) \quad (4)$$

onde $\delta_{cl} = \delta_l - l\pi/2$ é a defasagem do problema. O termo $-l\pi/2$ é convencional. A razão para inseri-lo é que com esta

definição, tôdas as defasagens do espalhamento desaparecem quando o potencial se anula.

Do comportamento assintótico de $\frac{\psi}{r}(r)$, eq. (4), segue que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \tan \delta(k) = \lim_{k \rightarrow \infty} k \frac{\psi(r)}{\psi'(r)} \quad (5)$$

Esta relação sugere a introdução de uma nova função, $\delta_p(r)$, que chamaremos função defasagem (defasagem variável). Seguimos o tratamento de Franchetti, N.C. VI-60 57. Então,

$$\tan \delta_p(k, r) = k \frac{\psi(r)}{\psi'(r)}, \quad (6a)$$

válida para qualquer r . Evidentemente

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \delta_p(k, r) = \delta_p - \frac{r}{k}$$

Da derivada de (6a) em relação a k obtemos,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\cos^2(kr + \delta_p(r))} (kr + \delta_p'(r)) &= k \left[1 - \frac{r(r) \psi''(r)}{\psi'^2(r)} \right] \\ &= k \left[1 + (k^2 - U(r)) \frac{\psi(r)}{\psi'^2(r)} \right] \\ &= k \cdot \left[k^2 - U(r) \right] \frac{1}{k} \tan^2(kr + \delta_p(r)) \\ &= \frac{k^2 \cos^2(kr + \delta_p(r)) + k^2 \sin^2(kr + \delta_p(r)) - U(r) \sin^2(kr + \delta_p(r))}{k \cos^2(kr + \delta_p(r))} \end{aligned}$$

de onde segue que

$$\delta_e'(\tau) = -\frac{U(\tau)}{k} \operatorname{sen}^2(k\tau + \delta_e(\tau)) \quad (6b)$$

Esta é a equação de fase. Da condição de contorno $\psi(0) = 0$ segue que

$$\delta_e(0) = 0 \quad (7)$$

Do limite de $k \rightarrow 0$ em (6b),

$$\delta_e'(\tau) = -\frac{U(\tau)}{k} \operatorname{sen}^2 k \left[\tau + \frac{\delta_e}{k} \right]$$

Supondo que neste limite $\delta(\tau)/k$ é finito, podemos definir $S(l=0)$,

$$Q(\tau) = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta(\tau)}{k} \quad (8)$$

A $Q(\tau)$ é conhecida como função comprimento de difusão. Segue então de (6b), que para ondas S ,

$$Q'(\tau) = \lambda V(\tau) [\tau - Q(\tau)]^2 \quad (9)$$

e de (6a),

$$Q(\tau) = \tau - \frac{\psi(\tau)}{\psi'(\tau)} \quad (10)$$

II.3. SOLUÇÃO PERTURBATIVA DE EQUAÇÃO DE FASE

Primeiramente consideremos a eq.(9). Notemos que ao derivá-la, a partir da eq.(6b), assumimos $\epsilon \rightarrow 0$.

Consideremos ainda o desenvolvimento em Série de Taylor de $Q(\tau)$ em relação ao parâmetro λ ,

$$Q(\tau) = Q_0(\tau) + Q_1(\tau)\lambda + Q_2(\tau)\lambda^2 + \dots \quad (11)$$

Introduzindo esta expansão em (9), obtemos,

$$Q'_0(\tau) + Q'_1(\tau)\lambda + Q'_2(\tau)\lambda^2 + \dots = \lambda V(\tau) [\tau - Q_0(\tau) - Q_1(\tau)\lambda + \dots]^2 \quad (12)$$

Da condição de contorno, $Q(\tau=0) = 0$, segue que $Q_0(\tau) = 0$. Então a eq. (12) fica:

$$Q'_1(\tau)\lambda + Q'_2(\tau)\lambda^2 + \dots = \lambda V(\tau) [\tau - Q_1(\tau)\lambda - Q_2(\tau)\lambda^2 + \dots]^2 \quad (13)$$

Desenvolvendo o termo quadrático no segundo membro e comparando os coeficientes das mesmas potências de cada membro, até ordem λ^ϵ :

$$a_1'(\tau) = V(\tau) [\tau^2] , \quad (14a)$$

$$a_2'(\tau) = V(\tau) [-2\tau a_1(\tau)] , \quad (14b)$$

$$a_3'(\tau) = V(\tau) [a_1^2(\tau) - 2\tau a_2(\tau)] , \quad (14c)$$

$$a_4'(\tau) = V(\tau) [-2\tau a_3(\tau) + 2a_1(\tau)a_2(\tau)] , \quad (14d)$$

$$a_5'(\tau) = V(\tau) [a_2^2(\tau) - 2\tau a_4(\tau) + 2a_1(\tau)a_3(\tau)] , \quad (14e)$$

$$a_6'(\tau) = V(\tau) [-2\tau a_5(\tau) + 2a_1(\tau)a_4(\tau) + 2a_2(\tau)a_3(\tau)] . \quad (14f)$$

Agora, no caso de $k \neq 0$, a eq. (6b) pode ser escrita, para ondas S , como,

$$a'(k, \tau) = \frac{\lambda V(\tau)}{k^2} \operatorname{sen}^2 k [\tau - Q(\tau)] , \quad (15)$$

onde usamos a definição (8). Vale para (15) a condição de contorno,

$$Q(\tau=0, k) = 0.$$

Em $Q'(k, \tau)$ acima, substituíamos $\text{sen}^2 k[\tau - Q(\tau)]$ por

$$\text{sen}^2 k[\tau - Q(\tau)] = \frac{1}{2} [1 - \cos 2k(\tau - Q(\tau))],$$

e fazemos a expansão da função cosseno em Série de Taylor. Feito isto obtemos

$$Q'(k, \tau) = \frac{\lambda V(\tau)}{2k^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[2k(\tau - Q(k, \tau))]^{2n}}{(2n)!} (-)^{n+1}$$

Usando o processo análogo ao caso , obtemos

$$Q'_1(k, \tau) = \frac{V(\tau)}{2k^2} [1 - \cos(2k\tau)] \quad (16a)$$

$$Q'_2(k, \tau) = -\frac{V(\tau)}{k} \text{sen}(2k\tau) Q_1(k, \tau) \quad (16b)$$

$$Q'_3(k, \tau) = -\frac{V(\tau)}{k} [\frac{1}{2} \text{sen}(2k\tau) Q_2(k, \tau) - \cos(2k\tau) Q_1^2(k, \tau)] \quad (16c)$$

$$Q'_4(k, \tau) = V(\tau) \left[-\frac{Q_3(k, \tau)}{k} \text{sen}(2k\tau) + 2Q_1(k, \tau) Q_2(k, \tau) \cos(2k\tau) + \frac{2}{3} k Q_1^3(k, \tau) \text{sen}(2k\tau) \right] \quad (16d)$$

Uma maneira de testar ôstes resultados, é tomar o limite nas eqs. (16) e ver se obtemos as eqs. (14)

$$\begin{aligned}
 Q'_5(k,r) = V(r) & \left[-\frac{1}{k} \operatorname{sen}(2kr) Q_4(k,r) + \cos(2kr) (Q_2^2(k,r) + \right. \\
 & + 2Q_1(k,r) Q_2(k,r)) + 2k \operatorname{sen}(2kr) Q_1^2(k,r) Q_2(k,r) + \\
 & \left. - \frac{k^2}{3} \cos(2kr) Q_1^4(k,r) \right]. \quad (16e)
 \end{aligned}$$

III. APLICAÇÃO DO MÉTODO DE APROXIMANTES DE PADÉ

Nossa pesquisa consta essencialmente do cálculo de comprimento de difusão Q , para alguns potenciais, pelo Método dos Aproximantes de Padé.

III.1. POTENCIAL DELEIFORME

De agora em diante consideraremos somente ondas $S(\ell=0)$.

É sabido que a equação integral para a função radial $\psi(r)$ é a seguinte

$$\psi(r) = \sin kr - \frac{\lambda}{k} \int_0^r \sin k(r-s) V(s) ds \quad (1)$$

É simples a verificação de que é realmente uma solução da equação radial de Schroedinger, eq. (II.2) para $l=0$.

Suponhamos $\lambda V(r) = \lambda \delta(r-1)$, no caso de $r > 1$, obtemos de (1),

$$\psi(r) = \sin kr - \frac{\lambda}{k} \sin k(r-1)$$

Da expressão (6a) segue que

$$\tan \delta(kr + \delta(r)) = \frac{k \sin kr - \lambda \sin k(r-1)}{k \cos kr - \lambda \cos k(r-1)}$$

O primeiro membro desta equação, pode ser escrito como

$$\frac{\sin kr + \cos kr \tan \delta}{\cos kr - \sin kr \tan \delta}$$

donde concluímos que para $r > 1$,

$$\tan \delta = \frac{\lambda \sin k}{k - \lambda \cos k} \quad (2)$$

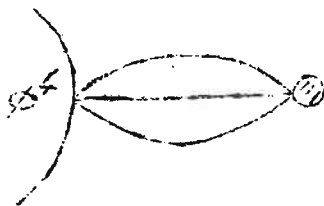
Então se considerarmos os Aproximantes de Padé para $k \operatorname{tang} \varepsilon / \lambda \operatorname{sen} \pi k$, todos do tipo $[m, 0]$ darão o resultado exato (2) e portanto êste caso é trivial.

III.2. POTENCIAL DE ARBUZOV, FILIPPOV E KHRUSTALOV

Arbuzov, Filippov e Khrustalov [15] consideraram a seguinte equação de Schroedinger ($k=0$)

$$\psi''(r) - \frac{\rho^2 - 1/2}{r^2} \psi(r) + g \frac{\log r}{r^2} \psi(r) = 0.$$

Êste tipo de potencial aparece quando calculamos o potencial de interação entre partículas escalares



Tomando a parte mais singular obtemos para potencial

$$\frac{A}{r^2} + B \frac{\log r}{r^2}$$

Em seguida, em 1964, Calogero e Cassandro [16] consideraram o caso mais simples

$$\frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} = \lambda V(r) \psi(r) \quad (3)$$

com potencial.

$$V(r) = \begin{cases} -\log_3 r / r^2 & p/ r < 1 \\ 0 & p/ r > 1 \end{cases} \quad (4)$$

Êles demonstraram que a expansão perturbativa para $Q(r)$ tem raio de convergência zero

Introduzindo

$$\psi(r) = r^{1/2} \left(\frac{1}{4} - \lambda \log_3 r \right)^{1/2} \bar{\Phi}$$

e a variável

$$z = \frac{2}{3\lambda} \left(\frac{1}{4} - \lambda \log_3 r \right)^{3/2},$$

obtemos, após algumas manipulações algébricas,

$$\frac{d^2 \bar{\Phi}}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d\bar{\Phi}}{dz} - \left(1 + \frac{1}{9z^2} \right) \bar{\Phi} = 0$$

Temos assim, uma equação de Bessel de ordem $1/3$ com variável imaginária $i\tilde{z}$ (função de Bessel modificada). A solução que se anula para $r \rightarrow 0$, i.e., para $\tilde{z} \rightarrow \infty$ é,

$$K_{1/3}(\tilde{z})$$

Portanto nossa solução $\psi(r)$ que se anula na origem é dada por

$$\psi(r) = r^{1/2} \left(\frac{1}{4} - \lambda \log_3 r \right)^{1/2} K_{1/3} \left[\frac{2}{3\lambda} \left(\frac{1}{4} - \lambda \log_3 r \right)^{3/2} \right] \quad (5)$$

Introduzindo (5) em (I,10) obtemos para $r=1$,

$$Q = 1 - \frac{1}{\frac{1}{2} - 2\lambda - \frac{1}{2} \frac{K'_{1/3}(1/12\lambda)}{K_{1/3}(1/12\lambda)}} \quad (6)$$

Observemos que a função $K_\nu(z)$ é uma função regular em todo plano complexo z com exceção de um corte ao longo do eixo real negativo.

Então como o denominador de (6) é uma função monódroma em todo plano complexo com exceção do corte negativo, segue que Q é uma função monódroma em todo plano complexo com exceção do corte ao longo do eixo real negativo. De modo que não temos cortes e nem pontos de ramificação isolados fora do eixo real negativo.

Vamos mostrar agora que Q não possui polos fora do eixo real negativo. Para tal consideremos a eq. de Schroedinger

$$\frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} = \lambda V(r) \psi(r) \quad (7)$$

Multipliquemos ambos os membros por $\psi^*(r)$. Usando a relação:

$$\psi^*(r) \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} = \frac{d}{dr} \left(\psi^*(r) \frac{d\psi(r)}{dr} \right) - \left| \frac{d\psi(r)}{dr} \right|^2,$$

e integrando de 0 a r , obtemos

$$\psi^*(r) \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} \Big|_r - \psi^*(r) \frac{d\psi(r)}{dr} \Big|_{r=0} = \lambda \int_0^r V(s) |\psi^*(s)|^2 ds + \int_0^r \left| \frac{d\psi}{ds} \right|^2 ds$$

Vemos que para $r=0$, a eq. (4) dá $\psi(0) = 0$. Então

$$\psi^*(r) \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} \Big|_r - \lambda \int_0^r V(s) |\psi^*(s)|^2 ds = \int_0^r \left| \frac{d\psi(r)}{dr} \right|^2 dr \quad (8)$$

O segundo membro de (7) é positivo. Para $\psi'(r) = 0$ temos

$$-\lambda \int_0^r V(s) |\psi(r)|^2 ds > 0 \quad (9)$$

Como $V(s)$ é uma quantidade positiva (potencial repulsivo) a desigualdade (9) só é possível se $\text{Im} \lambda = 0$ e $\text{Re} \lambda < 0$. De modo que os únicos polos de (6) podem estar no eixo real negativo do plano complexo λ .

Mostraremos que eles realmente não existem. De fato, se o denominador de (6) é zero, então:

$$(1-4\lambda) K_{1/3}\left(\frac{1}{12\lambda}\right) = K'_{1/3}\left(\frac{1}{12\lambda}\right), \quad (10)$$

e usando a relação [17]

$$K_\nu(z e^{\pm i\pi}) = e^{\mp \nu \pi i} K_\nu(z) \mp i\pi I_\nu(z), \quad (11)$$

segue, depois de introduzida em (10) e tomado a parte real (com $\lambda = -1/\lambda$), que

$$(1+4/|\lambda|) K_{1/3}\left(\frac{1}{12|\lambda|}\right) = K'_{1/3}\left(\frac{1}{12|\lambda|}\right) \quad (12)$$

Da expressão integral de $K_\nu(z)$ [17],

$$K_\nu(z) = \int_0^\infty e^{-z \cosh t} \cosh \nu t \, dt, \quad \text{para } \operatorname{Re} z > 0$$

segue que $K_\nu(z)$ é uma função positiva e decrescente em relação a variável z . Então $K'_\nu(z) < 0$.

Agora o primeiro membro de (12) é definido positivo, de modo que obtemos uma contradição.

Então Q não possui polos.

Calcularemos a descontinuidade de Q ao longo do eixo real negativo. De (6) segue:

$$Q^* - Q = \frac{-2(\lambda^* - \lambda) + \frac{K'_{1/3}\left(\frac{1}{12\lambda^*}\right) K_{1/3}\left(\frac{1}{12\lambda}\right) - K_{1/3}\left(\frac{1}{12\lambda^*}\right) K'_{1/3}\left(\frac{1}{12\lambda}\right)}{1 K_{1/3}\left(\frac{1}{12\lambda}\right)^2}}{\left| \frac{1}{2} - 2\lambda - \frac{1}{2} \frac{K'_{1/3}\left(\frac{1}{12\lambda}\right)}{K_{1/3}\left(\frac{1}{12\lambda}\right)} \right|^2}$$

$$= \frac{K'_{1/2}(\frac{1}{12\lambda^*}) K_{1/3}(\frac{1}{12\lambda}) - K_{1/3}(\frac{1}{12\lambda^*}) K'_{1/3}(\frac{1}{12\lambda})}{\left| (\frac{1}{2} - 2\lambda) K_{1/3}(\frac{1}{12\lambda}) - \frac{1}{2} K'_{1/3}(\frac{1}{12\lambda}) \right|^2}, \quad (13)$$

pois $\lambda^* - \lambda = i\varepsilon \rightarrow 0$.

Então de (10) obtemos para o numerador,

$$\begin{aligned} & K'_\nu(\bar{z} e^{i\pi}) K_\nu(\bar{z} e^{-i\pi}) - K'_\nu(\bar{z} e^{-i\pi}) K_\nu(\bar{z} e^{i\pi}) = \\ & [e^{-i\nu\pi} K'_\nu(z) - i\pi I'_\nu(z)] [e^{i\nu\pi} K_\nu(z) + i\pi I_\nu(z)] + \\ & - [e^{i\nu\pi} K'_\nu(z) + i\pi I'_\nu(z)] [e^{-i\nu\pi} K_\nu(z) - i\pi I_\nu(z)] \\ & = i\pi \cos \nu\pi [K'_\nu(z) I_\nu(z) - I'_\nu(z) K_\nu(z)] = -\frac{2\pi \cos \nu\pi}{z}, \end{aligned}$$

onde usamos que o wronskiano $w(K_\nu, I_\nu) = -1/z$ para todo ν e $z \neq 0$.

Portanto obtemos para a descontinuidade (12)/2i a expressão

$$\frac{a^* - a}{2i} = \frac{-\pi \cos \pi/3 \frac{1}{12|\lambda|}}{2 \left| (\frac{1}{2} - 2\lambda) K_{1/3}(\frac{1}{12\lambda}) - \frac{1}{2} K'_{1/3}(\frac{1}{12\lambda}) \right|^2}$$

que tem evidentemente um sinal constante.

Como $\langle 12 \rangle$

$$K_{1/3} \left(\frac{2x\sqrt{x}}{3\sqrt{3}} \right) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{x} ,$$

(Whittaker, p. 190), segue que

$$K_{1/3} \left(\frac{1}{12\lambda} \right) \underset{\lambda \rightarrow \infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\lambda^{1/3}} ,$$

e portanto

$$\frac{K'_{1/3} \left(\frac{1}{12\lambda} \right)}{K_{1/3} \left(\frac{1}{12\lambda} \right)} \underset{\lambda \rightarrow \infty}{\longrightarrow} 0 .$$

Então para $\lambda \rightarrow \infty$, $Q \rightarrow 1$ ~~rapidamente~~ .

Agora para que a integral sôbre o corte

$$\int d\lambda \operatorname{Im} Q(\lambda) / (\lambda - \lambda)$$

convirja é preciso que $Q \rightarrow 0$ ~~mais rapidamente que~~ $1/\lambda$ ^{para $\lambda \rightarrow \infty$} .

Isto evidentemente acontece com Q/λ .

Em resumo, Q/λ tem tôdas as características de uma função de Stieltjes para o potencial (3).

Vamos calcular os Apróximantes de Padé para a função Q/λ .

Nas fórmulas (II,14), substituindo o potencial (3), obtemos,

$$Q_1(\tau) = \tau (1 - \log_3 \tau)$$

$$Q_2(\tau) = -6 Q_1(\tau) - 2\tau \log_3^2 \tau$$

$$Q_3(\pi) = 71\pi - 71\pi \log_3 \pi + 29\pi \log_3^2 \pi - 5\pi \log_3^3 \pi$$

$$Q_4(\pi) = 2\pi(-633 + 633 \log_3 \pi - 278 \log_3^2 \pi + 65 \log_3^3 \pi - 7 \log_3^4 \pi)$$

$$Q_5(\pi) = \pi(30206 - 30206 \log_3 \pi + 13748 \log_3^2 \pi + \\ - 3620 \log_3^3 \pi + 562 \log_3^4 \pi - 42 \log_3^5 \pi)$$

$$Q_6(\pi) = 2\pi(-451398 + 451398 \log_3 \pi - 209750 \log_3^2 \pi + \\ + 58720 \log_3^3 \pi - 10602 \log_3^4 \pi + 1190 \log_3^5 \pi - 66 \log_3^6 \pi).$$

Calculados os coeficientes $Q_i(\pi)$ podemos então dispor da expansão do comprimento de difusão $Q(\pi)$, eq.(II,11), em Série de Taylor para o potencial considerado.

No caso de $\pi = 1$, segue:

$$Q_1 = 1$$

$$Q_4 = -1266$$

$$Q_2 = -6$$

$$Q_5 = 30206$$

$$Q_3 = 71$$

$$Q_6 = -902796$$

e a expansão (II,11) fica,

$$Q(\lambda) = 1 - 6\lambda + 71\lambda^2 - 1266\lambda^3 + 30206\lambda^4 - 902796\lambda^5 + \dots$$

Os diferentes Aproximantes de Padé são então dados por,

$$[0,0] = 1$$

$$[0,1] = 1 - 6\lambda$$

$$[1,0] = (1 + 6\lambda)^{-1}$$

$$[1,1] = (1 + 5,833\lambda)(1 + 11,833\lambda)^{-1}$$

$$[0,2] = 1 - 6\lambda + 71\lambda^2$$

$$[2,0] = (1 - \lambda + 7\lambda^2)^{-1}$$

$$[1,2] = (1 + 11,830\lambda - 35,980\lambda^2)(1 + 17,830\lambda)^{-1}$$

$$[2,1] = (1 + 18\lambda)(1 + 24\lambda + 73\lambda^2)^{-1}$$

$$[2,2] = (1 + 29,753\lambda + 68,564\lambda^2)(1 + 35,753\lambda + 212,082\lambda^2)^{-1}$$

$$[0,3] = 1 - 6\lambda + 71\lambda^2 - 1266\lambda^3$$

$$[3,0] = (1 + 6\lambda - 35\lambda^2 + 630\lambda^3)$$

$$[1,3] = (1 + 17,859\lambda - 72,154\lambda^2 + 427,989\lambda^3)(1 + 23,859\lambda)^{-1}$$

$$[3,1] = (1 + 25,944\lambda)(1 + 31,944\lambda + 12,666\lambda^2 - 278,028\lambda^3)^{-1}$$

$$[2,3] = (1 + 41,719\lambda + 210,134\lambda^2 - 430,639\lambda^3)(1 + 47,719\lambda + 425,448\lambda^2)^{-1}$$

$$[3,2] = (1 + 48\lambda + 397\lambda^2)(1 + 54\lambda + 650\lambda^2 + 332\lambda^3)^{-1}$$

Oe resultados obtidos para diferentes λ , são exibidos na Tabela I. Mostramos também o valor exato de Q/λ , calculado de (III.5), para os respectivos λ dos Padés.

III. POÇO DE POTENCIAL

Da eq. (II.6a), para ondas S, segue imediatamente que

$$\tan \delta(\pi) (\psi' \cos k\pi + k \psi \sin k\pi) = k \psi \cos k\pi - \psi' \sin k\pi \quad (13)$$

Para o poço de potencial

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & \text{para } 0 \leq r \leq \bar{r} \\ 0 & \text{para } r > \bar{r} \end{cases} \quad (14)$$

a função $\psi(r)$ que satisfaz a eq. Radial de Schroedinger

$$\frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} = -(k^2 - V_0) \psi(r), \text{ onde } p^2 = k^2 - V_0,$$

é do tipo

$$\psi(r) = A \sin pr + B \cos pr.$$

Como queremos que $\psi(r=0) = 0$, segue que

logo,

$$\psi(r) = A \sin pr$$

Para este comportamento de $\psi(r)$ a eq. (13) acima fica,

$$\tan \delta(\pi) = \frac{k \sin p\pi \cos k\pi - p \cos p\pi \sin k\pi}{p \cos p\pi \cos k\pi - k \sin p\pi \sin k\pi}$$

Explicitando a distância, teremos para $r \leq \bar{r}$

$$\delta(\pi) = \tan^{-1} \left\{ \frac{k \cos k\pi \operatorname{sen} p\pi - p \operatorname{sen} k\pi \cos p\pi}{k \operatorname{sen} k\pi \operatorname{sen} p\pi + p \cos k\pi \cos p\pi} \right\}, \quad (15a)$$

e para $\pi \geq \bar{\pi}$

$$\delta(\pi) = \tan^{-1} \left\{ \frac{k \cos k\bar{\pi} \operatorname{sen} p\bar{\pi} - p \operatorname{sen} k\bar{\pi} \cos p\bar{\pi}}{k \operatorname{sen} k\bar{\pi} \operatorname{sen} p\bar{\pi} + p \cos k\bar{\pi} \cos p\bar{\pi}} \right\} \quad (15b)$$

Como estamos interessados no limite $k \rightarrow 0$, teremos que $p = \sqrt{\lambda}$, onde $\lambda > 0$ (potencial atrativo), e para (15a) e (15b) obteremos,

$$Q(\pi, \lambda) = \pi - \frac{\tanh \sqrt{\lambda} \pi}{\sqrt{\lambda}} \quad \pi \leq \bar{\pi}, \quad (16a)$$

$$Q(\pi, \lambda) = 1 - \frac{\tanh \sqrt{\lambda} \bar{\pi}}{\sqrt{\lambda}} \quad \pi \geq \bar{\pi} = 1 \quad (16b)$$

Por método já explicitado no caso dos potenciais anteriores (seção III,1 e III,2), podemos calcular a expansão em Série de Taylor do comprimento de difusão para o potencial (14). Então as fórmulas (II.14) ficariam

$$Q_1(\pi) = \frac{1}{3} \pi^3,$$

$$Q_2(\pi) = -\frac{2}{15} \pi^5,$$

$$a_3(\pi) = \frac{17}{315} \pi^7,$$

$$a_4(\pi) = -\frac{62}{2835} \pi^9$$

$$a_5(\pi) = \frac{12438}{1403325} \pi^{11}$$

$$a_6(\pi) = \frac{21067817148}{451153550925 \times 13} \pi^{13}$$

Como exigimos que o primeiro termo da expansão seja 1, i.e.,

$F'(0) = 1$ na expansão em Série de Taylor de $F'(z)$, devemos tomar $a_i(\pi) \cdot 3/\pi^3$, assim

$$a_0(\pi) = 1$$

$$a_1(\pi) = -\frac{2}{5} \pi^2$$

$$a_2(\pi) = \frac{17}{105} \pi^4$$

$$a_3(\pi) = -\frac{62}{945} \pi^6$$

$$a_4(\pi) = \frac{12438}{467775} \pi^8$$

$$a_5(\pi) = -\frac{21067817148}{1954998720675} \pi^{10}$$

As eqs.(16) deverão ser tomadas como

$$\frac{3a(\pi)}{\lambda \pi^3}$$

Os resultados obtidos para diferentes λ e π (≤ 1) são exibidos na Tabela II. Mostramos também o valor exato $3a/\lambda \pi^3$ (sendo a dado por III.16), para os correspondentes λ e π dos Padés.

Examindo a Tabela II, vemos que os resultados exibidos não satisfazem a relação de desigualdade, Eq. (I,23). Isto entretanto é esperado, pois as funções (16a) e (16b), ou mais precisamente $3Q(\tau)/\lambda\pi^3$ (como foi usada nos calculos), não são Funções de Stieltjes.

~~Notamos ainda que vários aproximantes apresentam resultados bons, principalmente as diagonais como prevê a teoria.~~

T A B E L A / *

$\lambda = 0,8333$

EXATO= 0,2906	P20 = -0,0546	P10 = 0,1667	P00 = 1,000
P30 = 0,0029	P21 = 0,2232	P11 = 0,5396	P01 = -4,000
P31 = -0,4570	P22 = 0,4122	P12 = -0,8910	P02 = 45,30
P32 = 0,1443	P23 = -0,2008	P13 = 10,22	P03 = -687,3

$\lambda = 0,0833$

EXATO= 0,7209	P20 = 0,7956	P10 = 0,6667	P00 = 1,000
P30 = 0,6167	P21 = 0,7129	P11 = 0,7482	P01 = 0,5000
P31 = 0,7287	P22 = 0,7255	P12 = 0,6983	P02 = 0,9930
P32 = 0,6477	P23 = 0,7170	P13 = 0,7479	P03 = 0,2604

$\lambda = 0,0333$

EXATO= 0,8516	P20 = 0,8612	P10 = 0,8333	P00 = 1,000
P30 = 0,8443	P21 = 0,8506	P11 = 0,8566	P01 = 0,8000
P31 = 0,8521	P22 = 0,8519	P12 = 0,8495	P02 = 0,8789
P32 = 0,8367	P23 = 0,8514	P13 = 0,8528	P03 = 0,8320

$\lambda = 0,0222$

EXATO= 0,8924	P20 = 0,8960	P10 = 0,8823	P00 = 1,000
P30 = 0,8905	P21 = 0,8921	P11 = 0,8944	P01 = 0,8667
P31 = 0,8925	P22 = 0,8925	P12 = 0,8918	P02 = 0,9017
P32 = 0,8875	P23 = 0,8924	P13 = 0,8926	P03 = 0,8878

$\lambda = 0,0167$

EXATO= 0,9154	P20 = 0,9172	P10 = 0,9091	P00 = 1,000
P30 = 0,9147	P21 = 0,9153	P11 = 0,9165	P01 = 0,9000
P31 = 0,9155	P22 = 0,9155	P12 = 0,9152	P02 = 0,9197
P32 = 0,9135	P23 = 0,9154	P13 = 0,9155	P03 = 0,9139

$\lambda = 0,0111$

EXATO= 0,9407	P20 = 0,9413	P10 = 0,9375	P00 = 1,000
P30 = 0,9405	P21 = 0,9407	P11 = 0,9410	P01 = 0,9333
P31 = 0,9407	P22 = 0,9407	P12 = 0,9406	P02 = 0,9421
P32 = 0,9402	P23 = 0,9407	P13 = 0,9407	P03 = 0,9404

Notação PNM = /N,M/

$$\lambda = 0,0104$$

EXATO= 0,9440	P20 = 0,9445	P10 = 0,9412	P00 = 1,000
P30 = 0,9439	P21 = 0,9440	P11 = 0,9443	P01 = 0,9375
P31 = 0,9440	P22 = 0,9440	P12 = 0,9440	P02 = 0,9452
P32 = 0,9437	P23 = 0,9440	P13 = 0,9440	P03 = 0,9438

$$\lambda = 0,0098$$

EXATO= 0,9470	P20 = 0,9474	P10 = 0,9444	P00 = 1,000
P30 = 0,9469	P21 = 0,9470	P11 = 0,9473	P01 = 0,9418
P31 = 0,9470	P22 = 0,9470	P12 = 0,9470	P02 = 0,9480
P32 = 0,9467	P23 = 0,9470	P13 = 0,9470	P03 = 0,9468

$$\lambda = 0,0092$$

EXATO= 0,9498	P20 = 0,9501	P10 = 0,9474	P00 = 1,000
P30 = 0,9496	P21 = 0,9497	P11 = 0,9499	P01 = 0,9444
P31 = 0,9497	P22 = 0,9497	P12 = 0,9497	P02 = 0,9505
P32 = 0,9494	P23 = 0,9497	P13 = 0,9497	P03 = 0,9495

$$\lambda = 0,0088$$

EXATO= 0,9521	P20 = 0,9524	P10 = 0,9500	P00 = 1,000
P30 = 0,9520	P21 = 0,9521	P11 = 0,9523	P01 = 0,9474
P31 = 0,9521	P22 = 0,9521	P12 = 0,9521	P02 = 0,9528
P32 = 0,9519	P23 = 0,9521	P13 = 0,9521	P03 = 0,9520

$$\lambda = 0,0083$$

EXATO= 0,9543	P20 = 0,9546	P10 = 0,9524	P00 = 1,000
P30 = 0,9542	P21 = 0,9543	P11 = 0,9545	P01 = 0,9500
P31 = 0,9543	P22 = 0,9543	P12 = 0,9543	P02 = 0,9549
P32 = 0,9541	P23 = 0,9543	P13 = 0,9543	P03 = 0,9542

Como $Q(\lambda)/\lambda$ é uma Função de Stieltjes é de se esperar que os Aproximantes de Padé e o valor exato satisfaçam exatamente as propriedades de desigualdade Eq.(I.23). Ocorre, entretanto, que para o valor de $\lambda = 0,9252 \times 10^{-2}$ o valor exato está acima do Padé [2,2]. Isto é atribuído à imprecisão do cálculo do valor exato* (EXATO)

* As Tabelas de Funções de Bessel disponíveis só nos permitem calculos (valores) com precisão entre 0,1% e 0,01%.



T A B E L A II

$\lambda = 1,0 \quad r = 0,1$

EXATO= 0,9962	P20 = 0,9961	P10 = 0,9960	P00 = 1,000
P30 = 0,9960	P21 = 0,9960	P11 = 0,9960	P01 = 0,9960
P31 = 0,9960	P22 = 0,9960	P12 = 0,9960	P02 = 0,9960
P32 = 0,9960	P23 = 0,9960	P13 = 0,9960	P03 = 0,9960

$\lambda = 1,0 \quad r = 0,5$

EXATO= 0,9092	P20 = 0,9092	P10 = 0,9091	P00 = 1,000
P30 = 0,9092	P21 = 0,9000	P11 = 0,9092	P01 = 0,9000
P31 = 0,9092	P22 = 0,9101	P12 = 0,9092	P02 = 0,9101
P32 = 0,9092	P23 = 0,9092	P13 = 0,9092	P03 = 0,9091

$\lambda = 1,0 \quad r = 0,9$

EXATO= 0,7560	P20 = 0,7560	P10 = 0,7553	P00 = 1,000
P30 = 0,7560	P21 = 0,6760	P11 = 0,7560	P01 = 0,6760
P31 = 0,7560	P22 = 0,7822	P12 = 0,7560	P02 = 0,7822
P32 = 0,7559	P23 = 0,7560	P13 = 0,7560	P03 = 0,7473

$\lambda = 1,0 \quad r = 1,0$

EXATO= 0,715	P20 = 0,715	P10 = 0,714	P00 = 1,000
P30 = 0,715	P21 = 0,600	P11 = 0,715	P01 = 0,600
P31 = 0,715	P22 = 0,762	P12 = 0,715	P02 = 0,762
P32 = 0,715	P23 = 0,715	P13 = 0,715	P03 = 0,696

$\lambda = 2,0 \quad r = 0,1$

EXATO= 0,9921	P20 = 0,9921	P10 = 0,9921	P00 = 1,000
P30 = 0,9921	P21 = 0,9920	P11 = 0,9921	P01 = 0,9920
P31 = 0,9921	P22 = 0,9921	P12 = 0,9921	P02 = 0,9921
P32 = 0,9921	P23 = 0,9921	P13 = 0,9921	P03 = 0,9921

$\lambda = 2,0 \quad r = 0,5$

EXATO= 0,8336	P20 = 0,8337	P10 = 0,8333	P00 = 1,000
P30 = 0,8336	P21 = 0,8000	P11 = 0,8337	P01 = 0,8000
P31 = 0,8336	P22 = 0,8405	P12 = 0,8336	P02 = 0,8405
P32 = 0,8336	P23 = 0,8337	P13 = 0,8336	P03 = 0,8823

$\lambda = 2,0 \quad r = 0,9$

EXATO= 0,6085	P20 = 0,6086	P10 = 0,6068	P00 = 1,000
P30 = 0,6085	P21 = 0,3520	P11 = 0,6086	P01 = 0,3520
P31 = 0,6085	P22 = 0,7769	P12 = 0,6085	P02 = 0,7769
P32 = 0,6075	P23 = 0,6084	P13 = 0,6085	P03 = 0,4980

CONCLUSÃO

Os A.P. se apresentam como um método muito importante na aceleração da convergência das séries convergentes, bem como na convergência à função na região onde a expansão em Série de Taylor não converge.

O objetivo central deste trabalho foi testar este fato através de algumas aplicações algébricas.

Vimos que considerando funções pertencentes a classe das Funções de Stieltjes se obtém boas aproximações por qualquer subsequência de Aproximantes de Padé (aplicação 1). Quando a função a se expandir não pertence a tal classe de funções devemos esperar bons resultados apenas como sub-sequências de Aproximantes de Padé diagonais (aplicação 2).

Tôdas aplicações consideradas consistiam em obter uma aproximação, pelo método dos Aproximantes de Padé , para a Função "Scattering length" para alguns potenciais através da Equação de Fase. Esta função foi conveniente para nosso objetivo de testar os Aproximantes de Padé, pois seus valores exatos são bem conhecidos.

Numa possibilidade importante de aplicação destes aproximantes é na soma da série pertencente a matriz S , é o que está sendo testado por Pusterla et.al.

REFERÊNCIAS

- [1] H.S.Wall- Analitic Theory of Continued Fractions -
Van Nostrand- Princeton, New Jersey - 1948.
- [2] J.L.Basdevant- Curso ministrado em Harcegnovi - 1969.
- [3] H.Padé, "Sur la Representation approché d'une fonction par
des Fractions Rationnelles", Thesis, Ann del'Éc.Nor.,
(3) vol.9 (1892), pp. 1-93, supplement.
- [4] G.A.Baker- Advances in Theoretical Physics (1965).
- [5] G.Szegő- Orthogonal Polynomials - American Mathematical
Society - 1939.
- [6] Veja ref. 5 pg.43 .
- [7] Veja ref. 5 pg.45 .
- [8] Veja ref. 5 pg.56 .
- [9] Veja ref. 5 pg.56 .
- [10] M.Pusterla- Aplicações de Relações de Dispersão e Aproximan
tes de Padé -Curso ministrado no I.F.T. - 1969.
- [11] Breit at.al., Phys.Rev.50, 825 (1936) .
- [12] lectures at Harvard,1947. Schwinger usou o método variacio-
nal.
- [13] Blatt, Jackson- Phys.Rev.76, 18 (1949).
- [14] Fermi,E.,Ricerca Scient. VII-11,13 (1936).
- [15] Arbuzov et.al.,Phys.Let. vol. 8-205 (1964).
- [16] F.Calogero e M.Cassando- N.C.,34-II, 1712-1964.
- [17] G.N.Watson- Theory of Bessel Functions (Cambridge-1958)
- [18] Tabelas usadas
Dwight- Tables of Integrals and other Mathematical Data.
W.Gröbner, N.Hofreiter- Integraltafel.
Tables of Bessel Functions of Fractional Order.
L.J.Comprie- Mathematical Tables.
Jahnke, Emde, Lösch- Tables of Higher Functions. (6ª edição)