Equações diferenciais e aproximantes de Padé

Maria Cecília Kawazoe Aguilera-Navarro
Departamento de Matemática - UNICENTRO
85015-990 Guarapuava, PR
aguilera@unicentro.br

Valdir C. Aguilera-Navarro
Departamento de Química e Física - UNICENTRO
85015-990 Guarapuava, PR
aguilera@unicentro.br

(*Recebido: 5 de fevereiro de 2002*)

Resumo: *Utilizam-se os aproximantes de Padé para melhorar as soluções de equações diferenciais obtidas pelo método de Frobenius.*

Palavras-chave: *Equações diferenciais, método de Frobenius, aproximantes de Padé*

Abstract: *Padé approximants are used in the improvement of the solutions of differential equations obtained through the Frobenius method.*

Key words: *Differential equations, Frobenius method, Padé approximants*

1 Introdução

Um dos métodos para a resolução de uma equação diferencial é o de Frobenius. A solução obtida por esse método é representada por uma série: a série de Frobenius. Muitas vezes, entretanto, a série apresenta dois problemas que, se não invalidam a solução, tornam-na desinteressante do ponto de vista computacional. O problema mais sério surge quando a série não converge, ou simplesmente converge em regiões que não interessam ao problema que deu origem à equação diferencial. Nesse caso, a solução pode perder todo o seu interesse e faz-se necessário procurar métodos alternativos ou complementares.

Se esses problemas não se apresentam, pode, ainda, ocorrer que a convergência da série obtida seja demasiadamente lenta, tornando a solução desinteressante do ponto de vista computacional.

O objetivo deste trabalho é mostrar que é possível enfrentar os problemas acima levantados, quando se apresentarem, e mostrar como tratá-los com proveito e eficiência. Em poucas palavras, o procedimento consiste em usar aproximantes de Padé nas soluções das equações diferenciais.

Primeiramente, na próxima seção, apresentamos um resumo do método de Frobenius, mostrando sua estrutura e características principais. Os leitores interessados em se aprofundar no estudo desse poderoso método podem consultar a bibliografia sugerida no final do trabalho.

Na terceira seção, ilustramos a aplicação do método de Frobenius na solução da equação diferencial hipergeométrica confluente. A importância dessa equação reside no fato de que sua solução está associada a inúmeras funções de interesse de físicos, matemáticos, químicos e estatísticos. Uma dessas funções, a função erro, serve de modelo para ilustrar nossa proposta de usar aproximantes de Padé na solução de equações diferenciais. Esse estudo é desenvolvido na seção 4.

As conclusões e comentários finais são apresentados na última seção.

2 O método de Frobenius

Nesta seção, com o objetivo de dar a este trabalho uma relativa independência de outros textos, vamos fazer um resumo do método de Frobenius [FROBENIUS, 1873], muito útil na solução de equações diferenciais lineares.

Historicamente, o primeiro a propor o método foi Euler, mas foi Frobenius quem demonstrou a validade dos resultados.

Embora o método se aplique a equações diferenciais de ordem superior, vamos considerar apenas as equações lineares de segunda ordem por serem as mais comuns em diversos problemas. Estudos mais completos e aprofundados podem ser encontrados nas obras citadas na bibliografia.

Consideremos uma equação diferencial linear e homogênea de segunda ordem

$$y'' + f(x)y' + g(x)y = 0 \tag{1}$$

na qual $y' = dy/dx$ e $y'' = d^2y/dx^2$. Para equações não homogêneas, um comentário será feito no final desta seção.

Se os coeficientes $f(x)$ e $g(x)$ são funções analíticas em um ponto $x = x_0$, isto é, $f(x)$ e $g(x)$ admitem uma representação em série de Taylor em potências de $(x - x_0)$ em uma dada vizinhança de x_0, sabe-se que a equação (1) tem uma solução que é também analítica em $x = x_0$ [SNEDDON, 1961; TENENBAUN *et al.*].

Se $f(x)$ ou $g(x)$ não for analítica em $x = x_0$, dizemos que x_0 é um ponto *singular* da equação diferencial (1). Entretanto, se a singularidade apresentada for *regular* [SNEDDON, 1961; TENENBAUN *et al.*], isto é, se multiplicarmos $f(x)$ por $(x - x_0)$ e

$g(x)$ por $(x - x_0)^2$ resultarem em funções analíticas, o método de Frobenius ainda se aplica, como veremos a seguir.

Multiplicando a Eq. (1) por $(x - x_0)^2$ obtemos

$$(x - x_0)^2\, y'' + (x - x_0)\, F(x)\, y' + G(x)\, y = 0 \tag{2}$$

na qual $F(x) = (x - x_0) f(x)$ e $G(x) = (x - x_0)^2 g(x)$. Se $F(x)$ e $G(x)$ são analíticas no ponto $x = x_0$, dizemos que x_0 é um *ponto singular regular* da equação diferencial (2).

O método que descrevemos a seguir, conhecido como o método de Frobenius, consiste em encontrar uma solução em série válida em uma vizinhança de x_0.

Se $x = x_0$ é um ponto de singularidade regular da equação diferencial (1), o teorema de Frobenius garante que existe pelo menos uma solução da forma [SNEDDON, 1961; TENENBAUN *et al.*]

$$y = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (x - x_0)^{m+i}, \quad \text{com} \quad a_0 \neq 0 \tag{3}$$

válida em uma vizinhança do ponto $x = x_0$. Em outras palavras, se as expansões de Taylor de $F(x)$ e $G(x)$ são válidas em $|x - x_0| < R$, a solução (3) existe no mesmo domínio. Notemos que, para $m = 0$, a expansão (3) é a série de Taylor de y em torno do ponto $x = x_0$.

Fazendo uma mudança de variável, podemos sempre substituir, sem perda de generalidade, uma expansão em potências de $(x - x_0)$ por uma outra em potências de x. Tomamos $x_0 = 0$ e reescrevemos a Eq. (2) como

$$x^2 y'' + x\, F(x)\, y' + G(x)\, y = 0 \tag{4}$$

e a expansão (3) como

$$y = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^{m+i}, \quad \text{com} \quad a_0 \neq 0 \tag{5}$$

na qual m ainda precisa ser determinado. Esta expansão é conhecida como série de Frobenius para a equação diferencial (4).

Supondo, então, que as funções $F(x)$ e $G(x)$ são analíticas em $x = 0$, cada uma delas admite uma expansão em potências de x válida em uma vizinhança de $x = 0$.

Sejam

$$\begin{aligned} F(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \\ G(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \end{aligned} \tag{6}$$

as expansões de $F(x)$ e $G(x)$ em potências de x.

Substituindo a expansão (5), suas duas primeiras derivadas e as expressões (6) na Eq. (4), obteremos

$$\sum_{i=0}^{\infty} a_i(m+i)(m+i-1)x^{m+i} + \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \sum_{i=0}^{\infty} a_i(m+i)x^{m+i} + \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^{m+i} = 0 \tag{7}$$

Usando a unicidade de representação em série de Frobenius, obtemos a relação

$$m^2 + (b_0 - 1)m + c_0 = 0, \quad (\text{já que } a_0 \neq 0) \tag{8}$$

Esta equação é conhecida como *equação indicial* e nos permite determinar m da Eq. (5). Similarmente, igualando a zero os coeficientes de x^{m+i}, obteremos as seguintes relações de recorrência para os coeficientes a_i da expansão (5), em termos dos coeficientes conhecidos b_n e c_n, determinados pela Eq. (6)

$$a_i(m+i)(m+i-1) + \sum_{n=0}^{i} [b_n(m+i-n) + c_i]a_{i-n} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \ldots \tag{9}$$

da qual, isolando o termo $n = 0$ da soma, obtemos

$$a_i[(m+i)(m+i-1) + b_0(m+i) + c_0] + \sum_{n=1}^{i} [b_n(m+i-n) + c_i]a_{i-n} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \ldots \tag{10}$$

Sejam m_1 e m_2 as soluções da equação indicial (8). Tomando-se uma das soluções, digamos m_1, e substituindo-a nas relações de recorrência (10), obteremos os coeficientes a_i, $i = 1, 2, 3, \ldots$, e, portanto, determinamos a solução

$$y_1 = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^{i+m_1} \tag{11}$$

Analogamente, a raiz m_2 da equação indicial nos dá a solução

$$y_2 = \sum_{i=0}^{\infty} a_i^{*} x^{i+m_2} \tag{12}$$

Para concluir este resumo, precisamos considerar os três casos que surgem, definidos pela natureza das raízes da equação indicial (8) [TENENBAUN, *et al.*].

- Caso 1: $m_1 \neq m_2$ e sua diferença não é um inteiro.

Neste caso, pode-se mostrar que as soluções y_1 e y_2 são linearmente independentes e a solução geral da equação (4) é da forma:

$$y = A \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^{i+m_1} + B \sum_{i=0}^{\infty} a_i^{*} x^{i+m_2} \tag{13}$$

na qual A e B são constantes que dependem das condições iniciais.

• Caso 2: $m_1 = m_2$.

Se as raízes da equação indicial são iguais, podemos obter somente uma solução em série de Frobenius.

• Caso 3: $m_1 = m_2 + n$, em que n é um número inteiro e positivo.

Neste caso, todos os coeficientes em uma das soluções são infinitos ou indeterminados a partir de um certo ponto. Pode-se mostrar que as soluções linearmente independentes são da forma [CODDINGTON *et al.*, 1955; BRADBURY, 1984]:

$$\begin{aligned} y_1 &= x^{m_1} \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i, \\ y_2 &= \gamma_n y_1 \ln x + x^{m_1} \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i \end{aligned} \tag{14}$$

em que γ_n é o coeficiente de x^n na expansão de

$$\frac{x^{n+1}}{[y_1(x)]^2} \exp\left(-\int_0^x tF(t)dt \right) \tag{15}$$

Pode acontecer que $\gamma_n = 0$ quando y_2 não contenha um termo logarítmico.

Para os propósitos deste trabalho, vamos considerar apenas o caso 1, isto é, as raízes da equação indicial são diferentes e a sua diferença não é um inteiro.

O método de Frobenius também se aplica nos casos de equações diferenciais lineares não homogêneas, isto é, para equações do tipo

$$(x - x_0)^2 y'' + (x - x_0)F(x)y' + G(x)y = H(x) \tag{16}$$

se o termo não homogêneo, $H(x)$, puder ser expresso como uma série de Frobenius. Nesse caso, desenvolve-se também $H(x)$ em série de potências de $(x - x_0)$ e aplica-se o algoritmo desenvolvido acima [TENENBAUN *et al.*].

3 Equação hipergeométrica confluente

Como uma aplicação do método de Frobenius e para preparar material para a próxima seção, vamos considerar a equação diferencial ordinária de segunda ordem, conhecida como *equação hipergeométrica confluente*

$$xy'' + (\gamma - x)y' - \alpha y = 0 \tag{17}$$

na qual γ e α são constantes. Esta equação é muito importante, pois aparece freqüentemente em problemas de física matemática. Não nos alongaremos neste estudo, já que a equação hipergeométrica confluente foi alvo de análises matemáticas exaustivas e as propriedades de suas soluções já foram amplamente exploradas na literatura especializada.

Além de considerar a equação hipergeométrica confluente para ilustrar o método de Frobenius, vamos usar uma de suas soluções para completar o estudo que programamos desenvolver neste trabalho.

Multiplicando a Eq. (17) por x temos

$$x^2 y'' + x(\gamma - x) y' - \alpha x y = 0 \tag{18}$$

A Eq. (18) tem um ponto de singularidade regular em $x = 0$. Assim, comparando a Eq. (18) com a Eq. (4), na vizinhança de $x = 0$, temos

$$F(x) = \gamma - x \quad \text{e} \quad G(x) = -\alpha x \tag{19}$$

que são obviamente analíticas na vizinhança de $x = 0$. Procuramos uma solução em série de Frobenius da forma:

$$y = x^m \left(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots \right), \quad a_0 \neq 0 \tag{20}$$

As funções $F(x)$ e $G(x)$ já estão em série do tipo (6), tomando $b_0 = \gamma$, $b_1 = -1$, $c_0 = 0$ e $c_1 = -\alpha$, e todos os demais coeficientes $b's$ e $c's$ nulos. Substituindo estes valores na equação indicial (8), obtemos

$$m(m - 1 + \gamma) = 0 \tag{21}$$

cujas raízes são $m_1 = 0$ e $m_2 = 1 - \gamma$.

Considerando a raiz $m_1 = 0$, temos a solução

$$y_1 = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \tag{22}$$

Substituindo esta série e suas duas primeiras derivadas na Eq. (18), obtemos a relação

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n n[(n - 1) + \gamma] x^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n + \alpha) x^n = 0 \tag{23}$$

que é equivalente a

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left\{ a_{n+1} [(n+1)(n+\gamma)] - a_n (n+\alpha) \right\} x^n = 0 \tag{24}$$

De (24), encontramos a seguinte relação de recorrência para os coeficientes a_n

$$a_{n+1} = \frac{(n+\alpha)}{(n+1)(n+\gamma)} a_n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \quad \text{e} \quad \gamma \neq 0, -1, -2, -3, \ldots \tag{25}$$

ou, de um modo geral,

$$a_n = \frac{(\alpha)_n}{(\gamma)_n n!} a_0, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{26}$$

onde introduzimos o símbolo de Pochhammer [ABRAMOWITZ *et al.*, 1980]

$$(p)_n = p(p+1)(p+2)(p+3) \cdots (p+n-1), \quad (p)_0 = 1 \tag{27}$$

Tomando $a_0 = 1$, temos a solução conhecida como função hipergeométrica confluente, ou função de Kummer $M(\alpha, \gamma, x)$ [ABRAMOWITZ *et al.*, 1980; SNEDDON, 1961]

$$\begin{aligned} y_1 &= M(\alpha, \gamma, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n}{(\gamma)_n n!} x^n \\ &= 1 + \frac{\alpha}{\gamma}\frac{x}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+n-1)}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)}\frac{x^n}{n!} + \cdots, \\ \gamma &\neq 0, -1, -2, -3, \ldots \end{aligned} \tag{28}$$

A série (28) é conhecida como série hipergeométrica confluente. Se α é nulo ou um inteiro negativo, a série hipergeométrica se reduz a um polinômio.

A outra raiz, $m_2 = 1 - \gamma$, da equação indicial (21), produz a seguinte solução

$$y_2 = x^{1-\gamma} M(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, x) \tag{29}$$

e a solução geral da Eq. (18) é

$$y = Ay_1 + By_2 = A\, M(\alpha, \gamma, x) + B\, x^{1-\gamma} M(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, x) \tag{30}$$

desde que $1 - \gamma$ seja não nulo ou um inteiro. Sabe-se que esta solução converge se $|x| < 1$ [SNEDDON, 1961]. Na expressão Eq. (30), A e B são constantes "arbitrárias" que dependem das condições de contorno.

4 Padeização da solução de uma equação diferencial

Vimos como resolver uma equação diferencial ordinária, de segunda ordem, pelo método de Frobenius. Esse método nos dá a solução em termos de uma representação em série de potências. Muitas vezes, o raio de convergência dessa série é muito pequeno, não englobando valores de interesse particular da variável independente. Além disso, mesmo limitando-nos à região de convergência, essa pode ser extrema e desalentadoramente lenta, comprometendo o interesse pela solução. Vamos ver, entretanto, que é possível contornar esse problema.

4.1 A função erro

Uma função de interesse em estatística e em vários problemas de física é a função erro, relacionada com uma função hipergeométrica confluente (28) da seguinte forma [ABRAMOWITZ *et al.*, 1980]:

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2x}{\sqrt{\pi}} M\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -x^2\right) \tag{31}$$

na qual $M(\alpha, \beta, x)$ é solução da equação diferencial (17), com $\alpha = 1/2$ e $\beta = 3/2$.

A função erro pode, então, ser representada pela expressão

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{x^2}{3} + \frac{x^4}{10} - \frac{x^6}{42} + \frac{x^8}{216} - \cdots \right) \tag{32}$$

na qual a série entre parênteses foi obtida a partir da Eq. (28), com $\alpha = 1/2$ e $\beta = 3/2$, e x substituído por $-x^2$.

Para ilustrar as idéias abordadas, a figura 1 mostra o gráfico dessa função quando truncamos a série no termo x^{40}, tomando, assim, 41 coeficientes, ou peças de informação da série. Na mesma figura, mostramos o gráfico da representação exata de erf(x), obtida, por exemplo, a partir da integração numérica dessa sua outra representação [SNEDDON, 1961]

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \tag{33}$$

Notemos que

$$\lim_{x \to \infty} \mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-t^2} dt = 1 \tag{34}$$

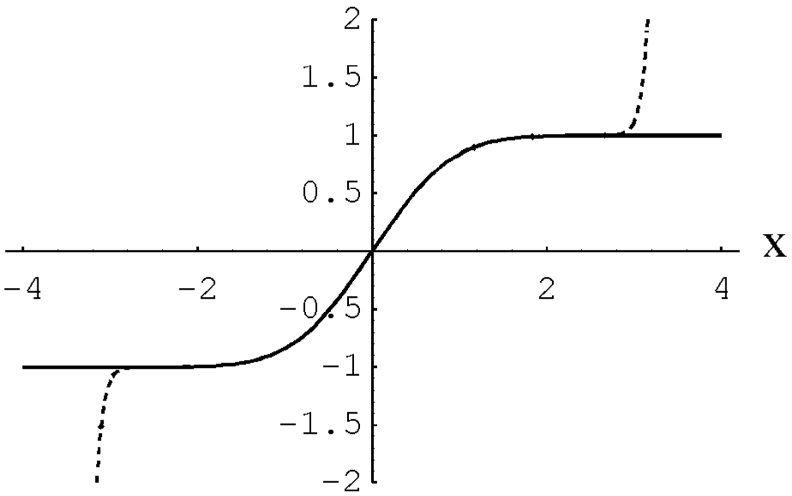

Figura 1. Função erf(x). Linha contínua: exata; linha tracejada: série de Frobenius truncada em x^{40}. Note-se a divergência da série a partir de $|x| \approx 3$.

Essa figura mostra, claramente, a inutilidade da série truncada de Frobenius a partir de $|x| \geq 3$, apesar de termos considerado 41 peças de informação! Por outro lado, como vimos, o método de Frobenius é bastante geral e fácil de ser aplicado, sendo, assim, muito útil na solução de equações diferenciais ordinárias. Porém, o que fazer quando encontramos situações de divergência como a ilustrada na figura 1? Devemos desanimar e abandonar a solução?

Uma possibilidade a ser explorada para "salvar" a solução obtida é padeizar a série de Frobenius, isto é, representá-la por funções racionais, pelo método definido e desenvolvido por Padé [BAKER, 1975; AGUILERA-NAVARRO *et al.,* 1999]. É o que vamos fazer em seguida. Antes, porém, para facilitar o leitor, vamos apresentar a essência das idéias de Padé.

Seja a série de potências

$$f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + f_3 x^3 + \cdots \tag{35}$$

A esta série podemos associar uma função racional (quociente de dois polinômios) que indicamos por $[L/M]$, e definida por

$$[L/M] = \frac{p_L(x)}{q_M(x)} = \frac{p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + \cdots + p_L x^L}{1 + q_1 x + q_2 x^2 + \cdots + q_M x^M} \tag{36}$$

Os coeficientes p's e q's são determinados pela condição [BAKER, 1975; AGUILERA-NAVARRO *et al.,* 1999]

$$f(x) - \frac{p_L(x)}{q_M(x)} = O\left(x^{L+M+1}\right) \tag{37}$$

na qual $O\left(x^{L+M+1}\right)$ se refere a uma expresão de termos de ordem maior ou igual a $L + M + 1$.

A função racional (36), com a condição estabelecida em (37), se diz o aproximante de Padé $[L/M]$ ou, simplesmente, padé $[L/M]$ associado à expansão (35). Remetemos ao leitor interessado em se aprofundar sobre esse tema às referências citadas.

Ao truncarmos no termo x^{40} a série que está entre parênteses na (32), teremos à nossa disposição 41 peças de informação. Com elas, podemos construir todos os padés, tais que [BAKER, 1975; AGUILERA-NAVARRO *et al.,* 1999]

$$L + M + 1 \leq 40 \tag{38}$$

Na figura 2, mostramos o padé [5/5] associado com a função erro, Eq. (31), e o comparamos com a representação exata dessa mesma função. Na escala da figura, notamos completa concordância do padé [5/5] com a representação exata. É notável, também, que o padé dá a indicação correta do limite (34).

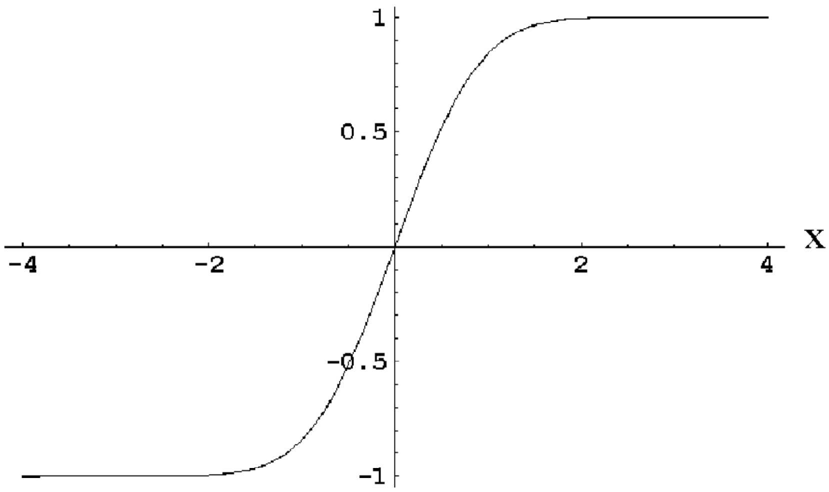

Figura 2. Função erf(x). Linha contínua: exata; linha tracejada: padé [5/5]. Na escala da figura, as duas curvas coincidem.

Podemos avaliar a eficiência do método que acabamos de apresentar notando que a representação truncada, inevitável em cálculos numéricos, divergiu drasticamente a partir de $|x| \geq 3$, apesar de termos usado 41 peças de informação. Por outro lado, o padé [5/5] representou magnificamente bem a função exata usando apenas, e tão apenas, 11 peças de informação, conforme condição (38)!

5 Conclusão

O método de Frobenius é bastante importante na solução de equações diferenciais ordinárias sem pontos de singularidade ou que apresentem singularidades regulares. Esse método conduz a uma solução representada por uma série multiplicada por uma potência finita da variável independente, a série de Frobenius. Nas aplicações numéricas, invariavelmente, temos de truncar a série em algum ponto, reduzindo-a a um polinômio. Ao fazer essa redução, o resultado pode não convergir, obrigando-nos a considerar mais termos da série aumentando o grau do polinômio.

Além disso, muitas vezes, a representação de uma solução por séries pode apresentar algumas dificuldades, tais como: convergência extremamente lenta, ou então, o seu raio de convergência não engloba regiões de interesse particular do problema em estudo. Não é raro, na Física, encontrar tais expansões que convergem em regiões sem nenhum interesse físico.

O uso de aproximantes de Padé no tratamento da série de Frobenius mostra que os problemas assinalados muitas vezes podem ser eliminados ou, pelo menos, minimizados.

Referências e bibliografia

ABRAMOWITZ, M. e STEGUN, I. A., *Handbook of Mathematical Functions.* New York: Dover, 1980.

AGUILERA-NAVARRO, M. C. K., AGUILERA-NAVARRO, V. C., FERREIRA, R. C. e TERAMON, N., Os aproximantes de Padé, *Rev. Matemática Universitária* (*Soc. Bras. de Matemática*), v. 26/27, p. 49-66, 1999.

BAKER Jr., G., *Essentials of Padé Approximants.* New York: Academic Press, 1975.

BRADBURY, T. C., *Mathematical Methods with Applications to Problems in the Physical Sciences.* New York: Wiley, 1984.

CODDINGTON, E. A. e LEVINSON, N., *Theory of Ordinary Differential Equations.* New York: McGraw-Hill, 1955.

FROBENIUS, G., *J. für Math.*, v. 76, p. 214-235, 1873 (*apud* CODDINGTON *et al.*, 1955).

SNEDDON, I. N., *Special Functions of Mathematical Physics and Chemistry.* New York: Interscience, 1961.

TENENBAUN, M. e POLLARD, H. , *Ordinary Differential Equations*, Harper: New York, (s.d.).