



**Universidade de Évora**

---

**Aplicação de Wavelets:**

**Resolução Numérica de Equações Integrais  
de Sistemas de Dois Núcleões**

---

Sob orientação do Prof. Doutor Alfred Stadler

Maria João Mendonça Ramalho Félix

Outubro de 2007

Dissertação submetida à  
Universidade de Évora  
para obtenção do grau de  
Mestre em Física para o Ensino

**Aplicação de Wavelets:  
Resolução Numérica de Equações Integrais  
de Sistemas de Dois Nucleões**

Sob orientação do Prof. Doutor Alfred Stadler  
Professor Auxiliar do Departamento de Física  
da Universidade de Évora



165 829

Maria João Mendonça Ramalho Félix  
Universidade de Évora  
Outubro de 2007

*“The most exciting phrase to hear in science, the one that heralds new discoveries, is not 'Eureka!' – but 'That's funny...'”*

*– Isaac Asimov –*

# Resumo

A equação integral não-relativista de Lippmann-Schwinger foi resolvida para calcular a energia de ligação e a função de onda do deutério. Na resolução numérica aplicaram-se técnicas com *wavelets*.

As *wavelets* são funções especiais que permitem aproximar com uma resolução adaptável uma grande classe de funções com muita eficácia. Uma equação integral representada numa base de *wavelets* transforma-se num sistema de equações lineares em que, na representação matricial, a matriz dos coeficientes é esparsa (ou seja, possui muitos zeros). Isso tem vantagens importantes para a resolução numérica do sistema.

Existem inúmeros tipos de *wavelets*, mas as utilizadas neste trabalho foram as de Daubechies de ordem dois e três por possuírem propriedades importantes como ortogonalidade e suporte compacto.

Nos cálculos foi utilizado o potencial de ensaio Malfiet-Tjon V e o potencial Paris, mais realista. Com apenas cerca de cinco por cento de elementos de matriz não nulos obtiveram-se energias com desvios percentuais da ordem das décimas de milésima, em relação às energias exactas.

**An Application of Wavelets:  
Numerical Solution of Integral Equations  
for Two – Nucleon Systems**

## Abstract

The nonrelativistic Lippmann-Schwinger integral equation was solved to calculate the binding energy and the wave function of the deuteron. For its numerical solution, wavelet techniques were applied.

Wavelets are special functions that allow to approximate a large class of functions with variable resolution and great efficiency. An integral equation represented in a wavelet basis is transformed into a linear system of equations in which, its matrix representation, the matrix of coefficients is sparse (*i.e.*, it has many zeros). That has important advantages for the numerical solution.

There are innumerable kinds of wavelets, but the ones used in this work are the wavelets by Daubechies of order two and three, because they have important properties like orthogonality and compact support.

In the practical calculations, the test potential Malfliet-Tjon  $V$  and the more realistic Paris potential were used. With just about five percent of non-zero matrix elements, energies with differences of the order of one tenth of a thousandth percent compared to the exact energies were obtained.

# Agradecimentos

Há momentos de reflexão que nos levam a concluir a importância de não estarmos sós. Este *não estar só* diferente de um *estar acompanhado*, mas equivalente a um *estar amparado*. Apenas me foi possível desenvolver este trabalho porque não estive só – estive amparada! E é a todas as pessoas que contribuíram para esse amparo que quero aqui deixar o meu sincero e sentido agradecimento.

Ao Professor Alfred Stadler pela oportunidade, a confiança, o ensinamento e a paciência. Muito obrigado!

A Wayne Polyzou pelo contributo na dissipação de algumas dúvidas sobre *wavelets*, pela disponibilidade que mostrou para esclarecer novas questões que pudessem eventualmente surgir e pelo interesse mostrado em acompanhar a evolução deste trabalho.

Ao Professor Pereira dos Santos pela ajuda em questões burocráticas, mas também pelas conversas menos formais. Suas palavras serviram de encorajamento.

Ao José Saias pelo apoio ao nível do sistema operativo linux. Sempre se prontificou a ajudar quando necessitei. Agradeço também a paciência.

A meus pais por todo o apoio que me deram. E ao João Maria pelo filho adorável que é e pela compreensão que sempre manifestou nas horas que deveriam ser de atenção a ele e foram dedicadas ao trabalho.

À Inês Pisa, à Sílvia Mendes e à Helga Balixa pela amizade e pela força que me transmitiram.

Ao Ricardo Rita pelas suas sugestões.

À D.Teresa, ao Paulo e ao Sérgio, os técnicos de laboratório, por sempre se mostrarem prestáveis.

À Professora Mariana pelo espaço que providenciou para os mestrandos, o qual me foi de grande utilidade.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Motivação . . . . .	2
1.2	Objectivos . . . . .	4
1.3	Organização da dissertação . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Uma perspectiva sobre a teoria <i>wavelet</i></b>	<b>9</b>
2.1	Um ponto de partida . . . . .	10
2.1.1	Análise de Fourier . . . . .	11
2.1.2	Análise de Fourier com “janela” móvel . . . . .	13
2.2	Análise <i>wavelet</i> . . . . .	18
2.2.1	Transformada <i>wavelet</i> contínua . . . . .	18
2.2.2	Transformada <i>wavelet</i> discreta . . . . .	22
2.2.3	Análise em multiresolução . . . . .	26
2.2.4	Momentos das <i>wavelets</i> e regra de quadratura de um ponto . . . . .	48
2.2.5	Implementação da DWT a uma dimensão . . . . .	54
2.2.6	<i>Wavelets</i> a duas dimensões . . . . .	66
<b>3</b>	<b>Descrição não-relativista de sistemas de dois nucleões</b>	<b>71</b>



3.1	Algumas considerações sobre os sistemas de dois nucleões . . .	72
3.2	Dedução da equação integral para o deuterão . . . . .	76
3.2.1	Potencial Malfliet-Tjon $V$ . . . . .	82
3.2.2	Potencial Paris . . . . .	84
<b>4</b>	<b>Wavelets e a equação integral do deuterão</b>	<b>87</b>
4.1	Método Gauss-Legendre . . . . .	88
4.2	Método <i>wavelet</i> . . . . .	89
4.2.1	Construção da função de onda . . . . .	95
<b>5</b>	<b>Resolução numérica da equação integral do deuterão</b>	<b>97</b>
5.1	Método Gauss-Legendre . . . . .	99
5.2	Método <i>wavelet</i> . . . . .	101
5.2.1	Base <i>scaling</i> e base de multiresolução . . . . .	106
5.2.2	Base de multiresolução com eliminação de elementos de matriz . . . . .	120
5.3	Método <i>wavelet</i> simplificado . . . . .	134
5.3.1	Discretização Gauss-Legendre e base de multiresolução	136
5.3.2	Base de multiresolução com eliminação de elementos de matriz . . . . .	137
5.4	Funções de onda normalizadas . . . . .	142
<b>6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>155</b>
<b>A</b>	<b>Cálculo dos momentos parciais da função <i>scaling</i> de DAUB4</b>	<b>I</b>
<b>B</b>	<b>Cálculo dos integrais <math>N_{mn}</math></b>	<b>III</b>

**C Função de onda do deutério e as três novas funções XVII**



# Lista de Tabelas

2.1	Ilustração da representação de uma função $f(x)$ em diferentes escalas . . . . .	28
2.2	Relação entre subespaços $V_j$ em diferentes escalas $j$ . . . . .	33
2.3	Coeficientes <i>scaling</i> para as <i>wavelets</i> de Haar, DAUB4 e DAUB6	42
2.4	Momentos totais e parciais de ordem zero e um para as funções <i>scaling</i> DAUB4 e DAUB6 . . . . .	52
2.5	Momentos de ordem zero e um das funções <i>scaling</i> transladas num intervalo de integração entre $a$ e $b$ . . . . .	53
3.1	Combinações de momentos angulares L e S com S=1 para obter J=1 . . . . .	74
4.1	Valores de $N_{mn}$ para DAUB4 e DAUB6 . . . . .	94
5.1	Energia do deutério obtida, com a discretização Gauss-Legendre, para diferente número de pontos de quadratura, com Malfiet-Tjon V e Paris . . . . .	100
5.2	Energia do deutério: base <i>scaling</i> vs base de multiresolução, com Malfiet-Tjon V e DAUB4. . . . .	107
5.3	Energia do deutério: base <i>scaling</i> vs base de multiresolução, com Malfiet-Tjon V e DAUB4 para $\Psi(p)$ . . . . .	110

5.4	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Malfiet-Tjon V e DAUB4 para $\gamma(p)$ . . . . .	111
5.5	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Malfiet-Tjon V e DAUB4 para $\Gamma(p)$ . . . . .	111
5.6	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Malfiet-Tjon V e DAUB6 para $\Psi(p)$ . . . . .	112
5.7	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Malfiet-Tjon V e DAUB6 para $\gamma(p)$ . . . . .	112
5.8	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Malfiet-Tjon V e DAUB6 para $\Gamma(p)$ . . . . .	113
5.9	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Paris e DAUB4 para $\Psi(p)$ . . . . .	116
5.10	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Paris e DAUB4 para $\gamma(p)$ . . . . .	116
5.11	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Paris e DAUB4 para $\Gamma(p)$ . . . . .	117
5.12	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Paris e DAUB6 para $\Psi(p)$ . . . . .	117
5.13	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Paris e DAUB6 para $\gamma(p)$ . . . . .	118
5.14	Energia do deutério: base <i>scaling vs</i> base de multiresolução, com Paris e DAUB6 para $\Gamma(p)$ . . . . .	118
5.15	Energia do deutério como função de $\varepsilon$ na base de multiresolução, com Malfiet-Tjon V, DAUB4 e $\Psi(p)$ . . . . .	121
5.16	Energia do deutério como função de $\varepsilon$ na base de multiresolução, com Malfiet-Tjon V, DAUB6 e $\Psi(p)$ . . . . .	121

5.17	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V, DAUB4 e $\gamma(p)$ . . . . .	122
5.18	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V, DAUB6 e $\gamma(p)$ . . . . .	122
5.19	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V, DAUB4 e $\Gamma(p)$ . . . . .	123
5.20	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V, DAUB6 e $\Gamma(p)$ . . . . .	123
5.21	Percentagens de elementos de matriz nao nulos para obter a energia $E = -0.3494938$ MeV. . . . .	125
5.22	Percentagens de elementos de matriz nao nulos para obter energias em $E = -0.34949 \pm 0.000005$ MeV. . . . .	126
5.23	Percentagens de elementos de matriz nao nulos para obter energias em $E = -0.3495 \pm 0.00005$ MeV. . . . .	127
5.24	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Paris usando $\Psi(p)$ , para DAUB4 e DAUB6 . . . .	129
5.25	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Paris usando $\gamma(p)$ , para DAUB4 e DAUB6 . . . .	130
5.26	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Paris usando $\Gamma(p)$ , para DAUB4 e DAUB6 . . . .	131
5.27	Percentagens de elementos de matriz nao nulos para obter energias em $E = -2.224251 \pm 0.000001$ MeV. . . . .	132
5.28	Percentagens de elementos de matriz nao nulos para obter energias em $E = -2.22425 \pm 0.000005$ MeV. . . . .	133
5.29	Percentagens de elementos de matriz nao nulos para obter energias em $E = -2.2242 \pm 0.0001$ MeV. . . . .	133

5.30	Energia do deuteron: discretizacao Gauss-Legendre <i>vs</i> base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V e DAUB4, para $\gamma(p)$ e $\Gamma(p)$ . . . . .	136
5.31	Energia do deuteron: discretizacao Gauss-Legendre <i>vs</i> base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V e DAUB6, para $\gamma(p)$ e $\Gamma(p)$ . . . . .	137
5.32	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V, DAUB4 e $\gamma(p)$ . . . . .	138
5.33	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V, DAUB6 e $\gamma(p)$ . . . . .	139
5.34	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V, DAUB4 e $\Gamma(p)$ . . . . .	139
5.35	Energia do deuteron como funcao de $\varepsilon$ na base de multiresolucao, com Malfiet-Tjon V, DAUB6 e $\Gamma(p)$ . . . . .	140
5.36	Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter a energia $E = -0.3494937$ MeV. . . . .	140
5.37	Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter energias em $E = -0.34949 \pm 0.000005$ MeV. . . . .	141
5.38	Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter energias em $E = -0.3495 \pm 0.00005$ MeV. . . . .	141
B.1	Valores de $N_{mn}$ perto dos limites inferior e superior de integracao . . . . .	XIII
C.1	Comparacao dos <i>kernel</i> e das funcoes de onda do deuteron para $\psi(p)$ , $\Psi(p)$ , $\gamma(p)$ e $\Gamma(p)$ na base <i>scaling</i> usando o potencial Malfiet-Tjon V . . . . .	XVII

# Lista de Figuras

2.1	Ilustração da localização de uma função usando uma “função janela” . . . . .	14
2.2	Representação da “área de actuação” de $g_{\tau,v}$ no plano tempo-frequência . . . . .	17
2.3	Exemplos de <i>wavelets</i> com suporte infinito . . . . .	21
2.4	<i>Mother wavelet</i> de Haar . . . . .	24
2.5	<i>Mother wavelet</i> de DAUB4 . . . . .	25
2.6	<i>Mother wavelet</i> de DAUB6 . . . . .	25
2.7	Ilustração da aproximação de uma função numa determinada escala . . . . .	27
2.8	Função <i>scaling</i> de Haar . . . . .	31
2.9	Função <i>scaling</i> de DAUB4 . . . . .	32
2.10	Função <i>scaling</i> de DAUB6 . . . . .	32
2.11	Ilustração da sobreposição do suporte de funções <i>scaling</i> num ponto arbitrário de um polinómio de grau um . . . . .	45
2.12	Representação local de polinómios em termos de funções <i>scaling</i> de DAUB4 . . . . .	46
2.13	Ilustração de como são transformados os elementos de uma matriz pela aplicação da DWT . . . . .	68



5.1	Função de onda do deutério: comparação entre Gauss-Legendre e base <i>scaling</i> , com Malfliet-Tjon V . . . . .	144
5.2	Função de onda do deutério: efeito da aplicação da DWT, com o potencial Malfliet-Tjon V . . . . .	145
5.3	Função de onda do deutério: comparação entre DAUB4 e DAUB6, com Malfliet-Tjon V . . . . .	146
5.4	Função de onda do deutério: comparação entre o uso de $\Psi(p)$ , $\gamma(p)$ e $\Gamma(p)$ , com Malfliet-Tjon V . . . . .	147
5.5	Função de onda do deutério: efeito da eliminação de elementos de matriz na base de multiresolução, com Malfliet-Tjon V . . . . .	148
5.6	Onda S do deutério: comparação entre Gauss-Legendre e <i>wavelets</i> , com Paris . . . . .	150
5.7	Onda D do deutério: comparação entre Gauss-Legendre e <i>wavelets</i> , com Paris . . . . .	150
5.8	Onda S do deutério obtida após eliminação de elementos de matriz, com Paris . . . . .	151
5.9	Onda D do deutério obtida após eliminação de elementos de matriz, com Paris) . . . . .	151
5.10	Função de onda do deutério: comparação entre a obtida com Gauss-Legendre/ <i>wavelet</i> e a obtida com <i>scaling/wavelet</i> , com Malfliet-Tjon V . . . . .	153
5.11	Função de onda do deutério: efeito da eliminação de elementos de matriz na base de multiresolução (após o uso de Gauss-Legendre), com Malfliet-Tjon V . . . . .	153
B.1	Intervalo correspondente à variação dos índices, $m$ e $n$ , da translação das funções <i>scaling</i> de Daubechies de ordem 2 e 3 .	IV

B.2	Sobreposição dos suportes de duas funções <i>scaling</i> , em que apenas um deles sobrepõe o limite inferior de integração . . .	V
B.3	Sobreposição dos suportes de duas funções <i>scaling</i> , em que ambos os suportes sobrepõem o limite inferior de integração .	VI
B.4	Sobreposição dos suportes de duas funções <i>scaling</i> , em que um sobrepõe o limite inferior de integração e o outro está fora do limite de integração . . . . .	VI
B.5	Ilustração do valor mínimo do limite superior de integração, $b$	VII
B.6	Sobreposição de uma função <i>scaling</i> de Daubechies de ordem 2 no limite inferior de integração . . . . .	XII
B.7	Sobreposição de uma função <i>scaling</i> de Daubechies de ordem 2 no limite superior de integração . . . . .	XII



# Capítulo 1

## Introdução

Neste trabalho, é estudado o uso de *wavelets* na resolução numérica de uma equação integral homogénea, da Mecânica Quântica, que descreve o estado ligado de um próton e um neutrão, isto é, o deutério. A equação a ser resolvida é a equação de Lippmann-Schwinger, uma equação equivalente à equação de Schrödinger.

As *wavelets* são funções com características especiais que permitem construir bases de grande eficiência na representação de muitas outras funções. As bases *wavelets* são construídas a partir de uma função denominada *mother wavelet*. São translações e ampliações ou reduções da função *mother wavelet* que permitem obter todas as funções da base *wavelet*. A *mother wavelet* pode ter diferentes formas e tem características que se adaptam ao tipo de função que se pretende analisar, nomeadamente, ter suporte compacto.

Para introduzir as *wavelets* é frequente fazer-se comparação com a análise de Fourier. A análise com *wavelets* tem vantagens face à análise de Fourier quando se pretende estudar funções não periódicas, particularmente com variações abruptas nos seus valores ou que possuam singularidades. Por exemplo nestes casos, como consequência do suporte compacto das *wavelets* são necessárias muito menos funções de base que na análise de Fourier.

## 1.1 Motivação

As *wavelets* que aplicamos na resolução numérica da equação integral do deuterão são as *wavelets* desenvolvidas por Ingrid Daubechies de ordem dois e três [1]. Os critérios tidos em conta na escolha do tipo de *wavelet* foram: a ortogonalidade, o suporte compacto e a boa representação de polinómios de baixo grau [2].

A abordagem teórica sobre *wavelets* incide, sobretudo, nas *wavelets* de Daubechies, embora seja dado algum destaque às *wavelets* de Haar. A razão para isso é as *wavelets* de Haar apresentarem uma forma explicita simples e, conseqüentemente, levarem a um fácil entendimento das ideias fundamentais da análise *wavelet*.

Uma base construída a partir de funções *wavelets* pode ser denominada base de multiresolução porque fornece informação a diferentes escalas em simultâneo. Em muitos casos, uma parte considerável das funções de base reproduzem pormenores irrelevantes a escalas pequenas que podem ser omitidos sem alterar significativamente a função representada.

Associada à base de multiresolução das *wavelets* de Daubechies está uma outra base cujas funções actuam a uma escala fixa. Essas funções são denominadas funções *scaling* e a base é, portanto, base *scaling*. A base de multiresolução não consiste, porém, exclusivamente de *wavelets* a escalas diferentes, mas também de funções *scaling* para a escala de menor resolução.

Representações de uma mesma função nessas duas bases são equivalentes e as bases relacionam-se através de uma transformação ortogonal. Na prática, é mais útil partir da base *scaling* e fazer uma transformação para a base de multiresolução.

As funções *wavelet* e *scaling* de Daubechies satisfazem uma condição de normalização e são soluções de equações que podem ser resolvidas recursivamente. Nessas equações existem coeficientes que não só definem as funções

*wavelet* e *scaling*, como também é a partir deles que é construída a transformação que relaciona a base *scaling* com a base de multiresolução.

A equação de Lippmann-Schwinger do deutério escrita na base *scaling* origina um sistema de equações lineares homogêneo. O sistema de equações é transformado para a base de multiresolução e é resolvido aquando da eliminação de coeficientes de expansão na base correspondentes a detalhes menos importantes. A este procedimento atribuímos o nome de método *wavelet*.

O sistema de equações lineares homogêneo pode ser escrito em forma matricial como o produto de uma matriz de coeficientes por um vector cujo resultado é zero. Praticamente todos os métodos numéricos da resolução da equação de Lippmann-Schwinger no espaço dos momentos resultam em matrizes densas, isto é, matrizes nas quais todos ou uma grande parte de elementos são diferentes de zero.

Quando sistemas mais complicados são considerados, por exemplo, de três nucleões em vez de dois, ou quando as exigências à precisão do resultado são mais elevadas, a dimensão da matriz correspondente cresce rapidamente. Em termos práticos, isso implica que é ocupado muito mais espaço no disco dum computador para guardar a matriz e, por outro lado, que cálculos com ela demoram muito mais tempo.

O que torna o método *wavelet* tão interessante é que a eliminação de pequenos elementos de matriz na representação da base de multiresolução torna a matriz esparsa, isto é, numa matriz em que grande parte dos elementos é zero.

O espaço que estas matrizes ocupam é muito reduzido porque apenas os elementos diferentes de zero têm de ser guardados. O tempo da multiplicação de uma matriz esparsa com um vector também é reduzido porque multiplicações com elementos de matriz iguais a zero podem ser dispensadas.

Existem métodos numéricos especializados para problemas com matrizes esparsas que exploram estas propriedades.

Numa série de trabalhos dos últimos anos, W. N. Polyzou e colaboradores investigaram a aplicação de *wavelets* a problemas de dispersão de dois [3] e três [4] nucleões, ou seja, respectivamente, à resolução das equações de Lippmann-Schwinger e de Faddeev da dispersão, que são equações singulares. Eles chegaram à conclusão que o método *wavelet* leva a resultados de grande precisão e a uma redução impressionante do espaço ocupado pelas matrizes esparsas.

## 1.2 Objectivos

O desenvolvimento deste trabalho esteve focado essencialmente no cumprimento dos seguintes objectivos:

- Aprender o método *wavelet* e aplicá-lo a um problema simples da Física Nuclear, nomeadamente, ao estado ligado de dois nucleões – um problema sem singularidades;
- Investigar se o método funciona tão bem no estado ligado como no, já estudado, caso da dispersão. Em particular, apurar a relação entre a taxa de “poupança” de espaço que a matriz esparsa ocupa e a perda de precisão face ao resultado exacto;
- Encontrar e estudar eventuais possibilidades de melhoria ou simplificação do método.

## 1.3 Organização da dissertação

A dissertação está dividida em seis capítulos. Os capítulos 2 e 3 comportam o enquadramento teórico. No capítulo seguinte é feita a aplicação do

método em estudo ao problema de resolução da equação integral do deutério. Os dois últimos capítulos correspondem, respectivamente, à apresentação dos resultados provenientes da resolução numérica da equação integral e às conclusões.

O enquadramento teórico é dividido em: um capítulo respeitante à teoria relacionada com o método *wavelet* e outro onde é feita a descrição quântica não-relativista do sistema de dois nucleões. O primeiro desses, o capítulo 2, intitula-se *Uma perspectiva sobre a teoria wavelet*; o outro, o capítulo 3, *Descrição não-relativista de sistemas de dois nucleões*. O capítulo 2 inicia com uma exposição sucinta dos métodos “pré-wavelets” cujas limitações, nalgumas aplicações, serviram de ímpeto ao aparecimento das funções *wavelets*. São eles a análise de Fourier e a análise de Fourier com janela móvel.

O percurso até às *wavelets* de Daubechies começa com a explicação do que são as *wavelets* contínuas e de como implementar a transformação *wavelet* contínua. São dados exemplos e indicadas algumas das suas limitações. Em seguida, tomam lugar conceitos como transformada *wavelet* discreta, análise em multiresolução, ou equações e funções *scaling* e *wavelet*. Por último, todo o tratamento é estendido a duas dimensões porque, neste trabalho, as *wavelets* são aplicadas também a funções com duas variáveis.

Em suma, os conceitos fundamentais que servem de suporte à utilização de *wavelets* na resolução numérica de equações integrais sem singularidades são, no capítulo 2, detalhados. Entretanto, para determinar, de uma maneira simples e precisa, os coeficientes da representação da equação integral na base *scaling* é discutida uma regra de quadratura de um ponto construída a partir dos momentos<sup>1</sup> das funções *scaling*.

<sup>1</sup>O *n*-ésimo momento de uma função real de variável real,  $f(x)$ , é definido como

$$\langle x^n \rangle_f = \int x^n f(x) dx.$$

Mais sobre momentos de funções pode ser visto em [5], pp. 224 -226.



No capítulo 3 é feita a dedução da equação integral não-relativista do deuterão. A dedução da equação consiste em representar a equação de Lippmann-Schwinger numa base de estados usando um potencial que descreve a interacção nucleão-nucleão.

Inicialmente, para ter uma ideia de que grandezas físicas do sistema nucleão-nucleão depende o potencial, são apresentadas algumas breves considerações sobre propriedades gerais da interacção nucleão-nucleão.

Do estudo efectuado acerca da forma do potencial resulta o conhecimento de que contém uma componente tensorial. A presença dessa componente, juntamente com o princípio de Pauli, exige que a função de onda do deuterão seja uma sobreposição de uma onda S e uma onda D.

Pela razão de simplificar a aplicação inicial das *wavelets* à resolução da equação integral, começa por usar-se um potencial de ensaio que não tem em conta a componente tensorial – o potencial de Malfliet-Tjon V – donde resulta uma função de onda apenas com componente S. Posteriormente, considera-se um potencial mais realista, no sentido de já ter em conta a sobreposição da onda S com a onda D, nomeadamente o potencial Paris.

Segue-se a construção da base de estados na qual é representada a equação integral do deuterão. A base de estados pertence ao espaço vectorial em que é descrito o deuterão, ou seja, um espaço que resulta do produto tensorial dos espaços vectoriais associados aos graus de liberdade "externos" e "internos" do deuterão. São eles o espaço dos momentos, o espaço dos spins e o espaço dos isospins.

O quarto capítulo – *Wavelets e a equação integral do deuterão* – começa por apresentar a discretização da equação integral obtida, no capítulo anterior, para o potencial Malfliet-Tjon V, recorrendo à regra de quadratura de Gauss-Legendre. Os resultados computacionais obtidos da sua resolução são usados como referência para o *método wavelet*. A aplicação de *wavelets* é

explicada, neste capítulo, também para o caso do potencial de Malfliet-Tjon V. Para o potencial Paris apenas se apresenta a expressão da equação a resolver numericamente, a qual se obtém por analogia com o que é feito para o potencial Malfliet-Tjon V. Em todos os casos o que é necessário resolver são sistemas de equações lineares homogéneos.

No capítulo 5 são apresentados os resultados dos sistemas de equações lineares homogéneos deduzidos no capítulo anterior. Da resolução numérica dos sistemas de equações obtém-se a energia de ligação do deuterão e a sua função de onda. O sistema expandido na base de multiresolução apresentou, no entanto, uma instabilidade numérica que só foi possível de ser contornada por transformações apropriadas das equações para outros sistemas equivalentes. Em vez de resolver o sistema original directamente para obter a função de onda, reformulou-se o sistema de maneira que a sua solução fosse uma nova função igual ao produto entre a função de onda e outra função por nós escolhida. Foram testadas três novas funções: uma onde se multiplicou a função de onda do deuterão pelo momento linear; outra que consistiu em dividir a função de onda pelo propagador; e a última que se obteve multiplicando a anterior pelo momento linear. Assim, os cálculos foram efectuados, não só, usando *wavelets* de Daubechies de ordem dois e três, como também, para cada uma das novas funções, com ambos os potenciais mencionados.

O capítulo 5 está dividido em quatro secções. Na primeira secção são apresentados os resultados obtidos com o método de referência para o potencial de Malfliet-Tjon V e para o potencial Paris.

A segunda secção corresponde ao método *wavelet*. Os cálculos foram realizados para ambos os potenciais: na base de multiresolução sem e com eliminação de coeficientes de expansão na base correspondentes a detalhes; e também na base *scaling*. Da comparação dos resultados entre ambas as bases pode confirmar-se a ortogonalidade da transformação que as relaciona. Na base de multiresolução, da comparação dos resultados sem e com

eliminação de coeficientes correspondentes a detalhes pode ver-se o efeito que a eliminação tem no valor da energia de ligação e na forma da função de onda.

Na terceira secção é feita uma tentativa de simplificação do método *wavelet*. Nomeadamente, em vez de escrever a equação integral na base *scaling* discretizou-se a equação pela regra de quadratura de Gauss-Legendre. Resultou um sistema de equações lineares homogéneo ao qual se aplicou a transformação *wavelet* para obter uma representação da equação na base de multiresolução e aí proceder como anteriormente. Os cálculos foram realizados na base de multiresolução sem e com eliminação de coeficientes correspondentes a detalhes apenas para o potencial Malfliet-Tjon V.

Na última secção são esboçadas algumas das funções de onda correspondentes às secções anteriores. São comparadas as funções de onda obtidas usando *wavelets* com as obtidas pelo método de referência. É feita a comparação entre as funções de onda obtidas com cada uma das novas funções. Comparam-se as funções obtidas usando as *wavelets* de ordem dois com as de ordem três. E ainda se comparam funções de onda obtidas com diferente quantidade de coeficientes de expansão na base de multiresolução, correspondentes a detalhes, eliminados.

## Capítulo 2

# Uma perspectiva sobre a teoria *wavelet*

O conceito de *wavelet* surge com Jean Morlet, geofísico francês, em 1982, na sequência de estudos de prospecção geológica [6]. Ondas sonoras provocadas no solo podem levar à descoberta da existência de petróleo através do estudo das suas trajectórias. Como a propagação do som depende de propriedades do meio material, a alteração da constituição do subsolo leva a desvios na sua trajectória. As mudanças de trajectória são, por vezes, muito acentuadas, de tal modo que métodos de análise de sinais como a análise de Fourier se tornam pouco eficientes no seu estudo. É neste contexto que Morlet propõe um novo método de análise, baseado na transformada *wavelet* contínua, que se adapta às características do sinal: estuda com igual detalhe mudanças pouco acentuadas e alterações repentinas do sinal.

No âmbito das aplicações práticas da teoria *wavelet*, destacam-se importantes contribuições que incluem os trabalhos de Alexandre Grossman, Yves Meyer, Ingrid Daubechies e Stephane Mallat [7].

Associado à teoria *wavelet* está ainda o nome de Alfred Haar, embora os seus trabalhos tenham sido desenvolvidos no início do século XX, muito antes

de ter surgido o conceito de *wavelet*. Posteriormente a Morlet, as funções que aparecem nos trabalhos de Haar foram identificadas como um tipo de *wavelet* – as *wavelets* de Haar [8]. Estas, devido à sua simplicidade vieram a tornar-se de grande utilidade na ilustração do mecanismo de funcionamento da análise *wavelet*.

O tipo de *wavelet* que Ingrid Daubechies desenvolveu é implementado através de uma transformação *wavelet* discreta cuja implementação computacional está associada a algoritmos rápidos. Por isso, as *wavelets* de Daubechies são uma ferramenta com elevado potencial.

Antes da exposição de uma perspectiva detalhada sobre a teoria *wavelet* e, em particular, da dissertação sobre como aplicar *wavelets* para resolver a equação integral do deutério, será feita uma breve incursão aos métodos que estiveram na base do surgimento da teoria *wavelet*.

## 2.1 Um ponto de partida

Fenómenos naturais, entendidos como sinais, isto é, como variações de grandezas físicas no tempo, no espaço, ou no tempo e no espaço, podem ser representados por modelos matemáticos que permitem uma análise computacional.

Um exemplo, familiar, de um sinal que frequentemente suscita interesse de análise é o som. Um som resulta da variação da densidade do ar (grandeza física) ao longo do tempo. Considerando um elemento de volume unitário, essa variação pode ser representada matematicamente por uma função unidimensional tão complexa quanto a forma como varia a densidade do ar. Se pretendermos analisar o conteúdo frequencial dessa função, ou seja, conhecer o seu espectro, podemos recorrer à análise de Fourier.

### 2.1.1 Análise de Fourier

A análise de Fourier pode ser vista como um problema de decomposição e de reconstrução de uma função,  $f(t)$ , a partir de sobreposições de funções sinusoidais de diferentes frequências. Então, se temos  $f(t)$  e queremos decompô-la recorremos a

$$\hat{f}(\nu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-2\pi i \nu t} f(t) dt, \quad (2.1)$$

onde  $\hat{f}(\nu)$  se designa por transformada de Fourier de  $f(t)$  e pode ser entendida como uma medida da “quantidade” de oscilações com frequência  $\nu$  presentes em  $f(t)$  [9]. Dizemos que  $\hat{f}(\nu)$  é uma representação de  $f(t)$  no espaço de Fourier.

Uma vez decomposta a função podemos reconstruí-la através da transformada inversa de Fourier

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{2\pi i \nu t} \hat{f}(\nu) d\nu. \quad (2.2)$$

Este procedimento de análise e síntese de um sinal permite não só conhecer o espectro de uma função como também, através de eliminação de parte do conteúdo espectral criteriosamente escolhida, obter uma representação mais simplificada do sinal. Representação essa que, por sua vez, pode levar à compressão do sinal uma vez armazenada a informação nela contida.

Se estamos perante um sinal periódico, com período  $T_0$ , a sua representação via Fourier é feita recorrendo às séries de Fourier. Um sinal periódico contém todas as frequências múltiplas da sua frequência fundamental e, por isso, pode ser representado por

$$f(t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} f_k e^{i2\pi k \nu_0 t}, \quad (2.3)$$

onde  $\nu_0 = \frac{1}{T_0}$  é a frequência fundamental do sinal.

Na prática, quando se faz uma amostragem de um sinal unidimensional contínuo, o que se obtém são valores discretos que em termos computacionais

serão tratados recorrendo a uma transformada de Fourier discreta<sup>1</sup> dada por

$$\hat{f}(\nu_m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} f(t_n) e^{-i2\pi\nu_m t_n}, \quad (2.4)$$

onde:  $N$  é o número de medidas efectuadas em intervalos de tempo iguais,  $\Delta t$ , durante um intervalo de tempo  $T = N\Delta t$ ;  $t_n = n\Delta t$  é o instante de tempo em que foi efectuada a medição número  $n$ ; e  $f(t_n)$  são os elementos da amostragem. No que respeita à frequência, são tidos em conta apenas valores discretos, por isso aparece rotulada com um índice:  $\nu_m$ . Em que  $\nu_m = \frac{m}{T}$ , com  $m = 0, \dots, N-1$ .

O sinal pode ser reconstruído recorrendo à transformada discreta inversa de Fourier

$$f(t_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} \hat{f}(\nu_m) e^{i2\pi\nu_m t_n}. \quad (2.5)$$

O cálculo directo da transformada de Fourier é feito por  $N^2$  operações. Contudo, foi desenvolvido um algoritmo significativamente mais rápido que reduz o número de operações para  $N \log_2(N)$ , que se designa de transformada rápida de Fourier [11].

As funções sinusoidais apresentam uma característica de globalidade por se estenderem por todo o domínio ao qual pertencem. Isto significa que são necessários muitos coeficientes de Fourier para representar fielmente uma função não periódica. Por outro lado, a informação extraída da análise de Fourier corresponde ao espectro de frequências da função como um todo, não especificando localmente os valores das frequências. Assim, se o que nos interessa é conhecer localmente que variações ocorrem no sinal, usar a análise de Fourier torna-se inapropriado.

Com o intuito de criar uma ferramenta análoga à análise de Fourier, mas que fosse mais bem sucedida na análise localizada, surge uma nova versão apelidada de análise de Fourier com “janela” móvel (do inglês: Windowed

---

<sup>1</sup>A dedução das expressões (2.4) e (2.5) pode ser encontrada em [10], pp.411 – 414.

Fourier Transform – WFT).

### 2.1.2 Análise de Fourier com “janela” móvel

A análise de Fourier com “janela” móvel consiste numa análise que recorre à transformada de Fourier de pequenas fatias do sinal a analisar.

Se queremos analisar um sinal representado por  $f(t)$  recorremos a uma “função janela” (função que toma valores próximos de zero ou zero fora de um pequeno intervalo) e calculamos o produto<sup>2</sup> entre ambas. Do produto entre as funções resulta, como se pode ver na figura 2.1, uma função localizada que abrange a parte da função original à qual aplicamos uma transformação de Fourier. A WFT é definida como

$$(T^{win} f)(\tau, \nu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i2\pi\nu t} g^*(t - \tau) f(t), \quad (2.6)$$

onde:  $g^*(t - \tau)$  é o complexo conjugado da “função janela” e pertence ao espaço,  $L^2(\mathbb{R})$ , de funções de quadrado sumável<sup>3</sup> em  $\mathbb{R}$ ;  $f(t)$  é a função a analisar;  $(T^{win} f)(\tau, \nu)$  os coeficientes de Fourier, ou seja, a transformada de Fourier de  $g^*(t - \tau)f(t)$ ; e  $\nu$  corresponde ao valor médio de frequências extraídas da análise.

Os coeficientes de Fourier,  $(T^{win} f)(\tau, \nu)$ , fornecem-nos informação sobre a “quantidade” de oscilações com frequências da ordem de  $\nu$  existentes em  $g^*(t - \tau)f(t)$  junto ao instante  $\tau$ .

---

<sup>2</sup>Caso a “função janela” seja complexa, o que se multiplica é o seu complexo conjugado. Na descrição da WFT consideramos o caso geral que inclui funções complexas, embora, para ilustrar o papel da “função janela”, na fig. 2.1, nos tenhamos restringido a uma “função janela” real.

<sup>3</sup>As funções de quadrado sumável em  $\mathbb{R}$  são funções que satisfazem

$$\int |f(x)|^2 dx < \infty.$$



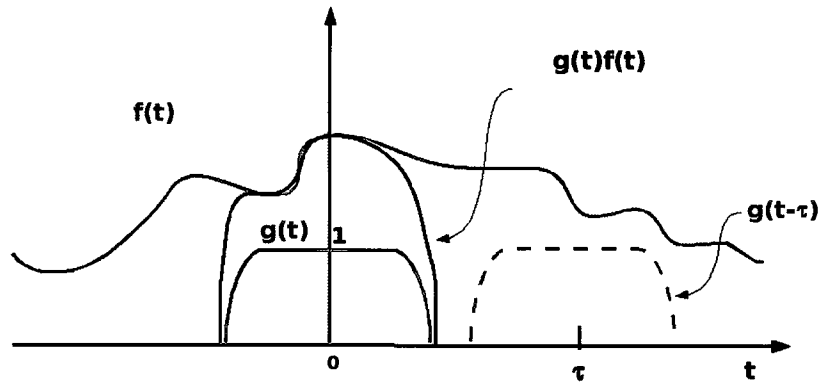


Figura 2.1: Ilustração da localização de uma função usando uma “função janela”: a função a analisar,  $f(t)$ , é multiplicada pela “função janela” localizada em  $\tau = 0$ ,  $g(t)$ , donde resulta o produto  $g(t)f(t)$  ao qual é aplicada uma transformação de Fourier.  $g(t-\tau)$  é uma versão deslocada de “função janela”, centrada em  $\tau$ .

A “função janela” pode ser transladada, multiplicada novamente à função em análise e por fim pode ser calculada a transformada de Fourier desse produto. Repetindo este processo sucessivamente, a análise pode ser estendida a toda a função  $f(t)$ . Aqui está subjacente uma limitação para este tipo de análise porque analisa com a mesma resolução altas e baixas frequências: uma vez definida a “função janela” a sua largura é fixa. As translações, no domínio do tempo, que a “função janela” sofre para cobrir todo o sinal não alteram a largura da “janela”. Pela mesma razão, mantém-se também inalterada a largura da “janela” correspondente no domínio da frequência.

---

Defina-se:

↪ o produto interno entre duas funções  $f, g \in L^2(\mathbb{R})$  como

$$\langle f, g \rangle := \int f^*(t)g(t)dt, \quad (2.7)$$

onde se generalizou  $f$  e  $g$  para funções complexas, portanto  $f^*$  é o complexo conjugado de  $f$ ;

↪ a norma de  $f$  como

$$\|f\| := \sqrt{\langle f, f \rangle}. \quad (2.8)$$


---

Se definirmos

$$g_{\tau, v}(t) := e^{i2\pi vt}g(t - \tau), \quad (2.9)$$

a WFT pode ser expressa como o produto interno entre  $g_{\tau, v}(t)$  e  $f(t)$ , ou seja,

$$(T^{win} f)(\tau, v) = \langle g_{\tau, v}, f \rangle. \quad (2.10)$$

onde  $g_{\tau, v}$  podem ser entendidas como oscilações de frequência  $v$ , dentro do envelope definido por  $g(t - \tau)$ , como uma função do tempo  $t$  [2].

Neste sentido, as funções  $g_{\tau, v}$  parametrizadas por todos os valores de frequência  $v$  e de tempo  $\tau$  formam algo análogo a uma base para  $L^2(\mathbb{R})$ . Isto porque, se  $g \in L^2(\mathbb{R})$ , então também  $g_{\tau, v} \in L^2(\mathbb{R})$  uma vez que  $\|g_{\tau, v}\| = \|g\|$ .

Se  $g_{\tau, v}$  é localizada no tempo e  $\hat{g}_{\tau, v}$  toma valores pequenos fora de uma estreita banda de frequências, então pela identidade de Parseval [2], que estabelece a igualdade

$$\langle f, g \rangle = \frac{1}{2\pi} \langle \hat{f}, \hat{g} \rangle,$$

onde  $\hat{f}$  e  $\hat{g}$  são as transformadas de Fourier de  $f$  e  $g$  respectivamente, podemos afirmar que a WFT efectua uma análise tempo-frequência localizada.

A função  $f(t)$  pode ser reconstruída a partir dos coeficientes da WFT. A síntese do sinal a partir dos coeficientes não pode, contudo, simplesmente ser feita aplicando a transformação inversa de Fourier. Vejamos porquê: da aplicação da transformação inversa de Fourier a  $(T^{win} f)(\tau, \nu)$ , com respeito à variável  $\nu$ , resulta o produto

$$g^*(t - \tau)f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\nu e^{i2\pi\nu t} (T^{win} f)(\tau, \nu) \quad (2.11)$$

e dividi-lo por  $g^*(t - \tau)$  não é adequado porque essa função pode assumir o valor zero. A maneira de contornar este problema é multiplicar (2.11) por  $g(t - \tau)$  e integrar em  $\tau$  obtendo-se

$$\int d\tau |g(t - \tau)|^2 f(t) = \frac{1}{2\pi} \int \int d\tau d\nu e^{i2\pi\nu t} g(t - \tau) (T^{win} f)(\tau, \nu). \quad (2.12)$$

Porque  $\int d\tau |g(t - \tau)|^2 = \|g\|^2$ , o sinal já pode ser obtido a partir dos coeficientes da análise tempo-frequência:

$$f(t) = (2\pi\|g\|^2)^{-1} \int \int d\tau d\nu g_{\tau,\nu} (T^{win} f)(\tau, \nu). \quad (2.13)$$

A síntese do sinal a partir dos coeficientes de Fourier é dada por (2.13) desde que a “função janela” pertença a  $L^2(\mathbb{R})$ , ou seja,  $0 < \|g\| < \infty$ .

Em todas as aplicações, é suposto que  $g$  seja bem concentrada no tempo e na frequência [1]. No entanto, se recordarmos a relação de incerteza de Heisenberg

$$\Delta\nu\Delta t \gtrsim \frac{1}{2\pi}$$

essa concentração no tempo e na frequência não pode ser indiscriminadamente maior em simultâneo em ambos os domínios.

Anteriormente foi referido como uma limitação para este tipo de análise que uma vez escolhida uma “função janela” a sua resolução no domínio do

tempo e da frequência mantém-se inalterada. Vê-se, agora, a limitação de que se escolhermos uma “função janela” com elevada resolução no domínio da frequência, há uma perda de qualidade na resolução no domínio do tempo.

A função  $g_{\tau, \nu}$ , que permite a análise de  $f(t)$  no plano tempo-frequência, vista como uma “janela” que “deixa passar” sinal junto ao instante  $\tau$  com frequência próxima de  $\nu$ , tem associada uma “área de actuação”, definida no plano tempo-frequência, representada na figura 2.2.

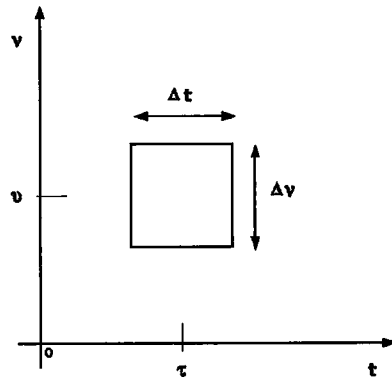


Figura 2.2: Representação da “área de actuação” de  $g_{\tau, \nu}$  no plano tempo-frequência. No domínio do tempo o centro da “janela” é  $\tau$  e a sua largura é  $\Delta t$  que corresponde ao intervalo  $[\tau - \frac{\Delta t}{2}, \tau + \frac{\Delta t}{2}]$ . No domínio da frequência o centro da “janela” é  $\nu$  e a banda de frequências que considera tem a largura  $\Delta \nu$  que corresponde ao intervalo  $[\nu - \frac{\Delta \nu}{2}, \nu + \frac{\Delta \nu}{2}]$ .

A área da “janela”, de acordo com a relação de incerteza de Heisenberg, não pode ser inferior a  $\frac{1}{2\pi}$ . Isto significa que se tentarmos analisar a função para um intervalo de tempo inferior a  $\Delta t$  a banda de frequências alarga para valores superiores a  $[2\pi(\nu - \frac{\Delta \nu}{2}), 2\pi(\nu + \frac{\Delta \nu}{2})]$ , ou seja, perde-se resolução no domínio das frequências. Por outro lado, se quisermos estreitar a banda de frequências abaixo de  $\Delta \nu$  isso só é possível para um intervalo de tempo maior que  $2\pi\Delta t$ , perdendo-se assim resolução no domínio do tempo.

Para sinais que apresentam pouca variação numa zona e grande variação noutra, a constância da resolução implica uma redução na eficácia da análise.

As *wavelets* são funções que fornecem um método de análise que ajusta a resolução às características do sinal: encurta o intervalo de tempo de análise para frequências altas e alarga-o para baixas frequências. Para tal, o conceito de frequência dá lugar ao conceito de escala.

## 2.2 Análise wavelet

A análise *wavelet*, tal como a análise de Fourier, pode ser feita recorrendo a uma transformada contínua ou a uma transformada discreta. Agora, porém, no lugar de exponenciais complexas, aparece uma família de funções *wavelet*. O pioneiro neste novo método de análise, Jean Morlet, começou por implementar a transformada *wavelet* contínua. Esta apresenta uma redundância que vem a ser eliminada pela transformada *wavelet* discreta.

Pela ausência de redundância, a transformada *wavelet* discreta é usada em algoritmos rápidos de processamento (reconstrução e síntese) de sinais, enquanto a transformada *wavelet* contínua é principalmente usada na caracterização (análise) de sinais [12].

### 2.2.1 Transformada wavelet contínua

Para construir uma transformada *wavelet* contínua começemos por assumir que temos uma função contínua,  $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$  que satisfaz a condição de admissibilidade

$$C_\psi = 2\pi \int d\xi \frac{|\hat{\psi}(\xi)|^2}{|\xi|} < \infty, \quad (2.14)$$

onde  $\hat{\psi}(\xi)$  é a transformada de Fourier de  $\psi(x)$ ,

$$\hat{\psi}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-2\pi i \xi x} \psi(x) dx. \quad (2.15)$$

De (2.14) e porque  $\psi$  é contínua [2], resulta necessariamente que

$$|\hat{\psi}(\xi)|^2|_{\xi=0} = 0. \quad (2.16)$$

A condição (2.16) em conjunto com (2.15) leva a que

$$\int \psi(x)dx = 0. \quad (2.17)$$

Em seguida, é criada uma família de funções *wavelet*, a partir de translações e mudanças de escala da função  $\psi(x)$ , definida como

$$\psi_{a,b}(x) = |a|^{-\frac{1}{2}} \psi\left(\frac{x-b}{a}\right) \quad (2.18)$$

onde  $a$  é um parâmetro de escala, que permite ampliar ou reduzir a função  $\psi$  e  $b$  é um parâmetro de translação de  $\psi$ . Sendo  $a, b \in \mathbb{R}$  e  $a \neq 0$ , de modo que qualquer uma das funções *wavelet* tenha norma igual a 1 [1], ou seja,  $\|\psi_{a,b}\| = \|\psi\| = 1$  para qualquer  $a, b$  permitidos. Pela propriedade de a família de funções *wavelet* ser criada a partir de uma função  $\psi$  (a qual deve satisfazer (2.14) e conseqüentemente (2.17)), esta função é usualmente denominada *mother wavelet*.

A transformada *wavelet* contínua resulta, então, do produto interno entre o sinal a analisar e a família de funções *wavelet* (2.18):

$$(T^{wav} f)(a, b) = |a|^{-\frac{1}{2}} \int \psi^*\left(\frac{x-b}{a}\right) f(x)dx = \langle \psi_{a,b}, f \rangle \quad (2.19)$$

onde  $(T^{wav} f)(a, b)$  é a transformada *wavelet* contínua de  $f$  e, como vai ser demonstrado mais à frente, dá-nos informação sobre os detalhes que o sinal, representado por  $f$ , contém à escala  $a$  [2].

O sinal pode ser reconstruído a partir de  $(T^{wav} f)(a, b)$ , recorrendo à

resolução de identidade de Calderón<sup>4</sup> [1], através de

$$f(x) = \frac{1}{C_\psi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dbda}{a^2} (T^{wav} f)(a, b) \psi_{a,b}(x), \quad (2.20)$$

desde que  $C_\psi < \infty$ , ou seja, desde que se verifique a condição de admissibilidade (2.14).

Uma característica das *wavelets* em geral é que devem decair rapidamente para valores próximos de zero (tal como as “funções janela” referidas na WFT). As *wavelets* podem, mesmo assim, ser divididas em funções com suporte infinito e em funções de suporte compacto.

Uma função,  $f(x)$ , diz-se de suporte compacto se para  $x < a$  ou  $x > b$ , com  $-\infty < a < b < +\infty$ ,  $f(x) = 0$  [1]. O domínio das funções de suporte compacto é  $[a, b]$ , enquanto para as de suporte infinito o domínio é  $\mathbb{R}$ .

O nosso propósito é chegar às *wavelets* de suporte compacto, as quais serão tratadas mais adiante. Entretanto, são ilustrados dois exemplos de *wavelets* usadas para implementar a transformada *wavelet* contínua. Por contraposição às *wavelets* de suporte compacto, escolhemos, para já, exemplos de suporte infinito.

---

<sup>4</sup>A resolução de identidade de Calderón é definida como:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dad b}{a^2} (T^{wav} f)^*(a, b) (T^{wav} g)(a, b) = C_\psi \langle f, g \rangle$$

onde  $(T^{wav} f)^*(a, b)$  é o complexo conjugado da transformada *wavelet* contínua de  $f$ .

Através do cálculo do produto interno entre  $f$  e uma qualquer função  $g \in L^2(\mathbb{R})$ , no qual introduzimos a expressão (2.20) de reconstrução de  $f$  a partir de  $(T^{wav} f)(a, b)$ , chegamos à resolução de identidade de Calderón. Esta é válida desde que  $C_\psi < \infty$ , por isso a fórmula de reconstrução de  $f$  também é válida sob a mesma condição. Pode ver-se mais sobre este assunto em [2] e [1].

### Exemplos de *wavelets* com suporte infinito

Em ambos os exemplos as *mother wavelets* têm uma expressão matemática explícita<sup>5</sup>, por isso, são apresentadas as funções *mother wavelet* sendo a sua forma ilustrada na figura 2.3. Também são escritas as fórmulas de construção da família *wavelet* correspondente.

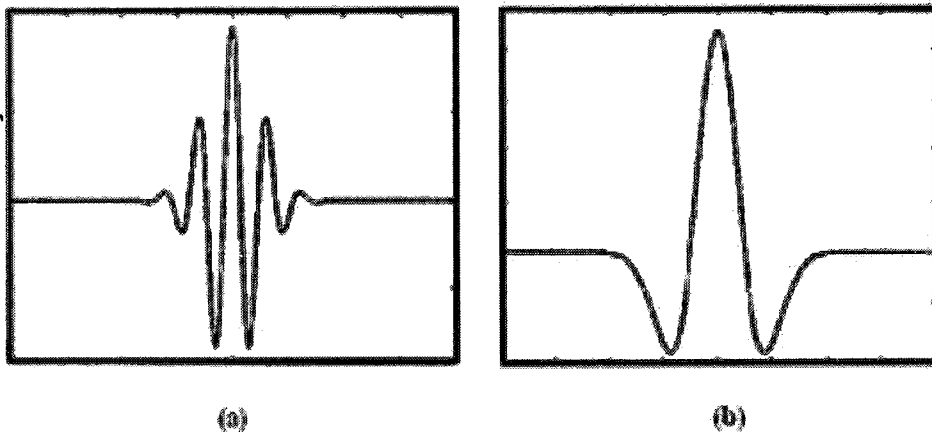


Figura 2.3: Exemplos de *wavelets* com suporte infinito: (a) *wavelet* de Morlet; (b) *wavelet chapéu mexicano*.

#### 1º Exemplo: Wavelet de Morlet

$$\psi(x) = e^{i\xi_0 x} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_0^2}} \quad (2.21)$$

que representa uma onda modulada por um envelope gaussiano e onde  $\xi$  e  $\sigma$  são constantes arbitrárias. A família de *wavelets* construída a partir desta *mother wavelet* escreve-se, por isso, como

$$\psi_{a,b} = |a|^{-\frac{1}{2}} e^{i\xi_0 \left(\frac{x-b}{a}\right)} e^{-\frac{1}{2\sigma_0^2} \left(\frac{x-b}{a}\right)^2} \quad (2.22)$$

<sup>5</sup>Nem todos os tipos de *wavelets* têm expressões matemáticas explícitas. Um exemplo disso são as *wavelets* de Daubechies – o tipo usado neste trabalho.



2º Exemplo: Wavelet chapéu mexicano

$$\psi(x) = (1 - x^2)e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (2.23)$$

que é a segunda derivada da função gaussiana. E a família de *wavelets* que lhe está associada apresenta a forma

$$\psi_{a,b} = |a|^{-\frac{1}{2}} \left[ 1 - \left( \frac{x-b}{a} \right)^2 \right] e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x-b}{a} \right)^2} \quad (2.24)$$

**2.2.2 Transformada *wavelet* discreta**

A versão discreta da transformada *wavelet* pode ser obtida discretizando os parâmetros,  $a$  (de escala) e  $b$  (de translação), que permitem construir a família de *wavelets* no caso contínuo. Assim,  $a$  e  $b$  passam a tomar apenas valores inteiros. Define-se, portanto,

$$a = a_0^j, \quad a_0 > 1, \quad j \in \mathbb{Z}$$

e a discretização de  $b$  deve depender de  $j$  tal que *wavelets* reduzidas (associadas às altas frequências) sejam deslocadas por passos pequenos e *wavelets* ampliadas (associadas às baixas frequências) sejam deslocadas por passos maiores. Conseqüentemente, é natural escolher  $b = kb_0 a_0^j$ , com  $b_0 > 0$  fixo e  $j, k \in \mathbb{Z}$ .

A família discreta de *wavelets* é construída a partir de

$$\psi_{j,k}(x) = a_0^{-\frac{j}{2}} \psi(a_0^{-j} x - kb_0); \quad j, k \in \mathbb{Z}. \quad (2.25)$$

Interessa-nos que a família de *wavelets* constitua uma base ortonormal. Isto, porque a ortogonalidade permite tornar mais fácil o cálculo dos coeficientes de expansão [13] quando se representa uma função nessa base. Para garantir a ortonormalidade devemos impor alguma restrição para os valores

### Exemplos de wavelets com suporte compacto

O primeiro exemplo é um tipo de *wavelet* que, pela sua simplicidade, permite visualizar mais facilmente como actuam as *wavelets*. Os outros dois são ilustrados porque se tratam dos tipos de *wavelets* que usamos. Na figura 2.4 está representada a *mother wavelet* de Haar, cujo suporte está no intervalo  $[0, 1)$ .

#### 1º Exemplo: Wavelet de Haar

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } 0 \leq x < \frac{1}{2}, \\ -1 & \text{se } \frac{1}{2} \leq x < 1, \\ 0 & \text{se } x < 0 \vee x \geq 1. \end{cases} \quad (2.29)$$

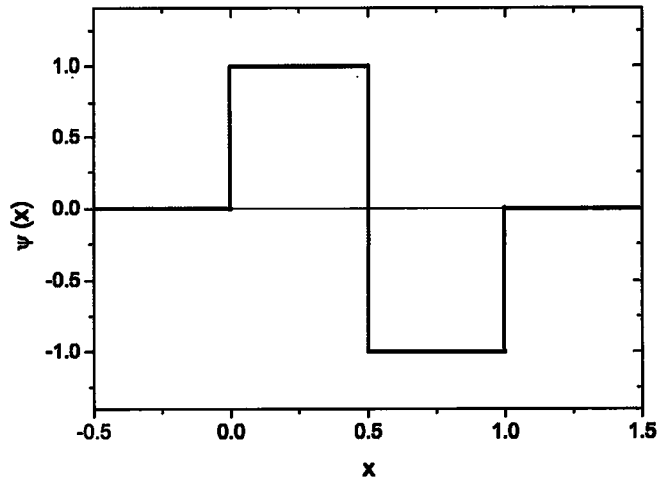


Figura 2.4: Exemplo de uma *mother wavelet* com suporte compacto: *wavelet* de Haar. Tem suporte no intervalo  $[0, 1)$ .

As figuras 2.5 e 2.6 ilustram dois tipos de *mother wavelet* de Daubechies de ordens diferentes, respectivamente 2 e 3. A *wavelet* de Haar é também vista como uma *wavelet* de Daubechies de ordem 1.

inteiros que  $a$  e  $b$  podem tomar. Uma escolha adequada<sup>6</sup> para satisfazer a ortonormalidade é que  $a_0$  seja 2 e  $b_0$  seja 1 [1]. A família discreta de *wavelets* torna-se uma família de *wavelets* diádicas<sup>7</sup>. Nesse caso, a família discreta de funções *wavelets* escreve-se como

$$\psi_{j,k}(x) = 2^{-\frac{j}{2}}\psi(2^{-j}x - k); \quad j, k \in \mathbb{Z}. \quad (2.26)$$

A transformada *wavelet* discreta de uma função  $f \in L^2(\mathbb{R})$  é obtida pelo produto interno entre a função a analisar e a família de *wavelets* diádicas,

$$D_{j,k}^{wav} = \langle f, \psi_{j,k} \rangle, \quad (2.27)$$

onde  $D_{j,k}^{wav}$  é a transformada *wavelet* discreta de  $f$ . E esta função pode ser reconstruída a partir de

$$f = \sum_{j,k \in \mathbb{Z}} d_{j,k} \psi_{j,k}, \quad (2.28)$$

onde se fez  $d_{j,k} \equiv D_{j,k}^{wav}$ .

As famílias de *wavelets* diádicas constituem uma base ortonormal<sup>8</sup> de  $L^2(\mathbb{R})$  [9], as quais permitem representar funções extraindo detalhes à escala  $j$ .

Apresentamos em seguida três exemplos de *wavelets* com suporte compacto utilizados na implementação da transformada *wavelet* discreta.

---

<sup>6</sup>A condição  $a_0 > 1$  é suficiente para construir uma família discreta de *wavelets*, mas para que as *wavelets* satisfaçam a ortogonalidade é necessário também que  $a_0$  seja racional. A escolha de  $a_0 = 2$  foi feita por uma questão de simplicidade [1].

<sup>7</sup>Funções diádicas são funções com um parâmetro de escala que é uma potência de base 2 [14].

<sup>8</sup>A demonstração de que (2.26) constitui uma base ortonormal pode ser encontrada em [9].

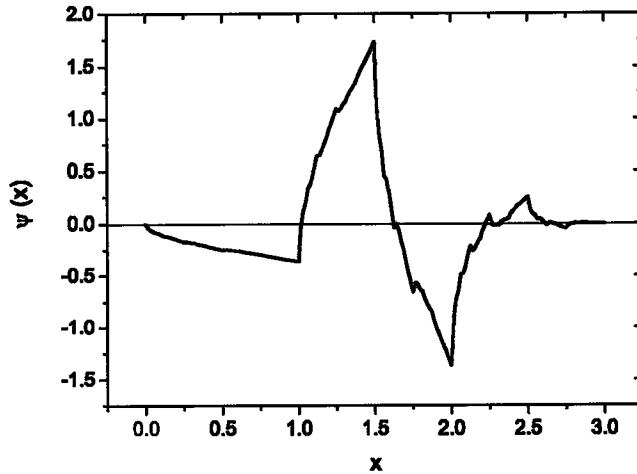
**2º Exemplo: Wavelet de Daubechies de ordem 2**

Figura 2.5: Exemplo de uma *mother wavelet* com suporte compacto: wavelet de Daubechies de ordem 2. Tem suporte no intervalo  $[0, 3]$ .

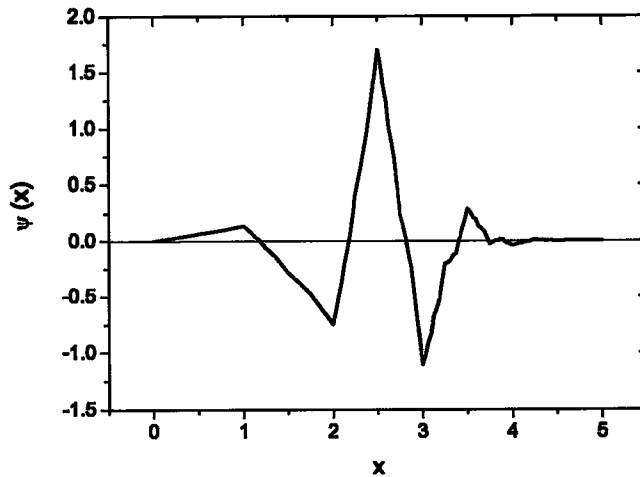
**3º Exemplo: Wavelet de Daubechies de ordem 3**

Figura 2.6: Exemplo de uma *mother wavelet* com suporte compacto: wavelet de Daubechies de ordem 3. Tem suporte no intervalo  $[0, 5]$ .

Nas figuras 2.4, 2.5 e 2.6 pode ver-se que o suporte das *wavelets* tem o tamanho 1, 3 e 5, respectivamente para as *wavelets* de Daubechies de ordem 1, 2 e 3. Vemos que o suporte aumenta com a ordem de Daubechies.

O suporte das *mother wavelets* ( $Sup \psi$ ) apresentadas nas figuras 2.4, 2.5 e 2.6 está no intervalo  $[0, 2K - 1]$ , onde  $K$  é a ordem da *wavelet* [15]. O mesmo é dizer que o tamanho do suporte é  $2K - 1$  (veremos adiante o que isto significa).

Dos exemplos apresentados, apenas a *wavelet* de Haar possui uma expressão matemática explícita. As *wavelets* de Daubechies são soluções de uma equação *wavelet* que, como veremos adiante, emerge do conceito de análise em multiresolução.

Em meados da década de 1980, Joseph Mallat, ao trabalhar em análise de imagens, fez uma inovação na utilização de *wavelets* para analisar sinais: considerou as *wavelets* como funções que permitem conhecer o incremento de informação necessário para passar a um nível de resolução maior na análise de uma imagem e a partir desta interpretação criou o conceito de análise em multiresolução. Isto, porque naquela época era popular estudar imagens simultaneamente a diferentes escalas e comparar os resultados [1].

Por se considerar fornecer uma clara compreensão das bases *wavelets*, uma vez divulgada a análise em multiresolução, um crescente número de bases *wavelets* ortonormais surgiu. Um exemplo é as já mencionadas *wavelets* de Daubechies.

### 2.2.3 Análise em multiresolução

Suponhamos que medimos a intensidade de um sinal (por exemplo, o som) ao longo de um certo comprimento no espaço. O que resulta da medição são valores discretos distribuídos ao longo do comprimento como se mostra na figura 2.7 (a). Essa amostragem de valores pode ser representada por uma

função  $f(x)$ , tal como se ilustra na figura 2.7 (b). A análise da função pode passar por aproximá-la usando uma “função caixa”. Este tipo de função é constante num intervalo e zero fora dele, por exemplo, a função  $\phi(x)$  unitária no intervalo  $[0, 1)$ .

Para aproximar  $f(x)$  usando a função  $\phi(x)$  podemos partir dos valores da amostragem e traçar em cada ponto uma linha unitária para a direita, como se vê na figura 2.7 (c). Obtemos uma aproximação da função  $f(x)$ , que é uma combinação linear da “função caixa”,  $\phi(x)$ , e de versões transladadas dela. A aproximação pode ser melhorada se reduzirmos, por exemplo, para metade o comprimento de  $\phi(x)$ . A nova aproximação de  $f(x)$  resulta de uma combinação linear de diferentes translações da versão reduzida da função  $\phi(x)$ .

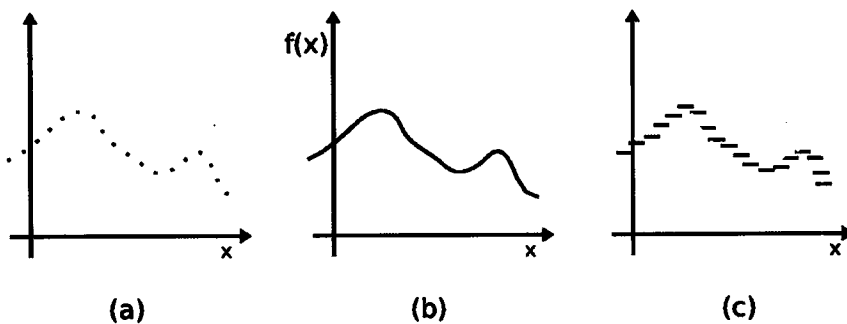


Figura 2.7: Ilustração da aproximação de uma função numa determinada escala: (a) Amostragem de pontos (por exemplo, distribuição das intensidades de um som no espaço); (b) Representação de uma função,  $f(x)$ , relativa à amostragem de pontos; (c) Aproximação da função  $f(x)$  a partir dos pontos de amostragem, usando uma “função caixa” unitária, nomeadamente  $\phi(x)$ , tal que  $\phi(x) = 1$  se  $x \in [0, 1)$  e  $\phi(x) = 0$  se  $x \in \mathbb{R} \setminus [0, 1)$ .

Relativamente a essas duas representações, dizemos que temos duas aproximações de  $f(x)$  a escalas diferentes. Isto é, se para a representação de  $f(x)$ , que usa funções,  $\phi(x)$ , de comprimento unitário, considerarmos que estamos a uma escala, de partida,  $j = 0$ , então podemos convencionar que a representação de  $f(x)$ , feita com versões de  $\phi(x)$  de comprimento reduzido para metade, é feita a uma escala,  $j - 1 = -1$ , mais reduzida, ou seja, de maior

resolução.

Posto isto, da representação de uma função  $f(x)$  em escalas diferentes resultam aproximações diferentes para a mesma função. Chamemos  $f_j(x)$  à aproximação que se faz de  $f(x)$  numa escala  $j$ ,  $f_{j-1}(x)$  na escala  $j - 1$  e assim sucessivamente.

Se a escala  $j - 1$  apresentar uma maior resolução que em  $j$ , então, nessa, serão postos em evidência detalhes que à escala  $j$  estavam ocultados. Esses detalhes serão representados por  $d_j(x)$ , com  $d_j(x) = f_{j-1}(x) - f_j(x)$ , onde o  $j$  é a escala da qual os detalhes são extraídos. Se voltarmos a aumentar o nível de resolução da escala, serão extraídos os detalhes,  $d_{j-1}(x)$ , que na escala anterior,  $j - 1$ , estavam ocultados. Deste modo, se aumentarmos cada vez mais a resolução da escala, a representação de  $f(x)$  contém os detalhes extraídos de todas as escalas até ao maior nível de resolução considerado. Esta é uma análise em multiresolução. Na tabela 2.1 é ilustrada esta ideia através da representação de  $f(x)$  a diferentes níveis de resolução.

Escala	Representação de $f(x)$
$j$	$\simeq f_j(x)$
$j - 1$	$\simeq f_{j-1}(x) = f_j(x) + d_j(x)$
$j - 2$	$\simeq f_{j-2}(x) = f_{j-1}(x) + d_{j-1}(x) = f_j(x) + d_j(x) + d_{j-1}(x)$
$j - m$	$\simeq f_{j-m}(x) = \dots = f_j(x) + d_j(x) + d_{j-1}(x) + \dots + d_{j-m+1}(x)$
$\vdots$	$\vdots$
$j \rightarrow -\infty$	$= f_j(x) + \sum_{k=-\infty}^j d_k(x)$

Tabela 2.1: Ilustração da representação de uma função  $f(x)$  em diferentes escalas. O nível de resolução das escalas aumenta de  $j$  para  $j - 1$ .

O conceito de análise em multiresolução pode ser formalmente definido a partir de uma sequência crescente de subespaços fechados  $V_j \subset L^2(\mathbb{R})$ , com  $j \in \mathbb{Z}$ , onde  $V_j$  é conhecido como subespaço aproximação à escala  $j$ ,

tal que:

$$\{\phi_{0,k}(x) = \phi(x - k)\}_{k \in \mathbb{Z}} \text{ é uma base ortonormal de } V_0; \quad (2.30)$$

$$\dots \subset V_1 \subset V_0 \subset V_{-1} \subset \dots \subset L^2(\mathbb{R}); \quad (2.31)$$

$$V_j \equiv D^j V_0, \quad (2.32)$$

onde  $D^j$  é o operador de transformação discreta de escala definido por  $(D^j f)(x) := 2^{-j/2} f(2^{-j}x), \forall f(x) \in L^2(\mathbb{R})$ .

A sequência de subespaços forma uma análise em multiresolução se, além de se verificarem (2.30) – (2.32), se tiver

$$\overline{\bigcup_{j \in \mathbb{Z}} V_j} = L^2(\mathbb{R}); \quad (2.33)$$

$$\bigcap_{j \in \mathbb{Z}} V_j = \{0\}. \quad (2.34)$$

Se denotarmos por  $P_j f$  o operador projecção em  $V_j$ , então (2.33) assegura que, para qualquer função  $f \in L^2(\mathbb{R})$

$$\lim_{j \rightarrow -\infty} P_j f = f, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}).$$

Que corresponde precisamente à última linha da tabela 2.1.

Uma vez que  $V_0$  é gerado por  $\phi(x) \equiv \phi_{00}(x)$  e que, por (2.32), todos os subespaços  $V_j$  são versões escalonadas do subespaço central  $V_0$ , então uma base para  $V_j$  é também gerada a partir da função  $\phi(x)$ , a qual é designada função *scaling*. E as funções de base para  $V_j$  são

$$\phi_{j,k}(x) := 2^{-\frac{j}{2}} \phi(2^{-j}x - k), \quad j, k \in \mathbb{Z}. \quad (2.35)$$

Entretanto, como  $V_0 \subset V_{-1}$ , qualquer função em  $V_0$  pode ser expandida em termos das funções de base  $V_{-1}$ . Em particular, a função *scaling*  $\phi(x) \in V_0$  pode ser expandida em termos de  $\phi_{-1,k}(x)$ :

$$\phi(x) = \sum_k h_k \phi_{-1,k}(x),$$



que, por (2.32), também se pode escrever como

$$\phi(x) = \sqrt{2} \sum_k h_k \phi(2x - k), \quad (2.36)$$

onde  $h_k$  são chamados coeficientes *scaling* e (2.36) é a equação *scaling*. Esta relaciona a função *scaling* em duas escalas sucessivas.

Uma solução [16] para (2.36) é uma função *scaling* com a normalização

$$\int \phi(x) dx = 1. \quad (2.37)$$

Para obter uma solução que esteja em concordância com (2.37) é necessário que os coeficientes *scaling* satisfaçam a condição

$$\sum_k h_k = \sqrt{2}. \quad (2.38)$$

Chega-se a este resultado integrando a equação (2.36) em  $x$  e considerando a condição de normalização (2.37).

A partir da equação *scaling* pode deduzir-se outra propriedade dos coeficientes *scaling*. Se multiplicarmos ambos os lados de (2.36) por  $\phi(x - l)$  e integrarmos, obtemos

$$\int \phi(x) \phi(x - l) dx = \sum_k \sum_{k'} 2h_k h_{k'} \int \phi(2x - k') \phi(2x - 2l - k) dx.$$

A condição (2.30) exige a ortogonalidade das funções *scaling*, então apenas para  $k' = k + 2l$  as parcelas do sumatório assumem valores diferentes de zero, ou seja

$$\sum_k h_k h_{k+2l} = \delta_{0l}. \quad (2.39)$$

Veremos adiante que as *wavelets* podem ser construídas a partir das funções *scaling*. Entretanto, serão apresentados três exemplos de funções *scaling*, a partir dos quais se obtêm respectivamente as *wavelets* de Haar, de Daubechies de ordem 2 e de ordem 3.

**Funções *scaling* correspondentes às *mother wavelets*  
de suporte compacto**

Nas figuras 2.8, 2.9 e 2.10 são mostradas as funções *scaling* de Haar<sup>9</sup>, de Daubechies de ordem 2 e 3, respectivamente. Tal como acontecia para as *wavelets*, também as funções *scaling* de Daubechies não têm expressão matemática explícita.

**1º Exemplo: Função *scaling* de Haar**

$$\phi(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } 0 \leq x < 1, \\ 0 & \text{se } x < 0 \vee x \geq 1. \end{cases} \quad (2.40)$$

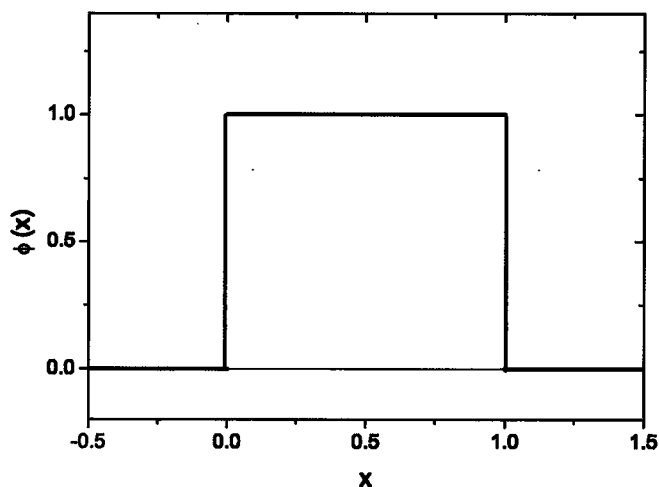


Figura 2.8: Função *scaling* de Haar. Tem suporte no intervalo  $[0, 1)$ .

<sup>9</sup>A função *scaling* de Haar é precisamente a “função caixa” com que começamos a discussão sobre a análise em multiresolução, a propósito da aproximação de funções em diferentes escalas.

2º Exemplo: **Função *scaling* de Daubechies de ordem 2**

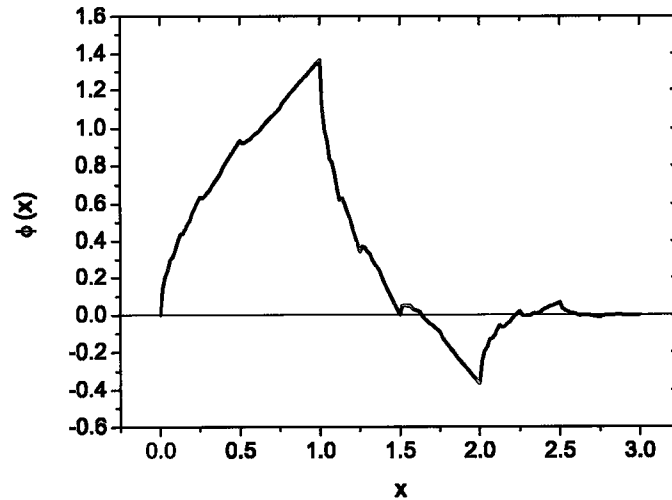


Figura 2.9: Função *scaling* de Daubechies de ordem 2. Tem suporte no intervalo  $[0, 3]$ .

3º Exemplo: **Função *scaling* de Daubechies de ordem 3**

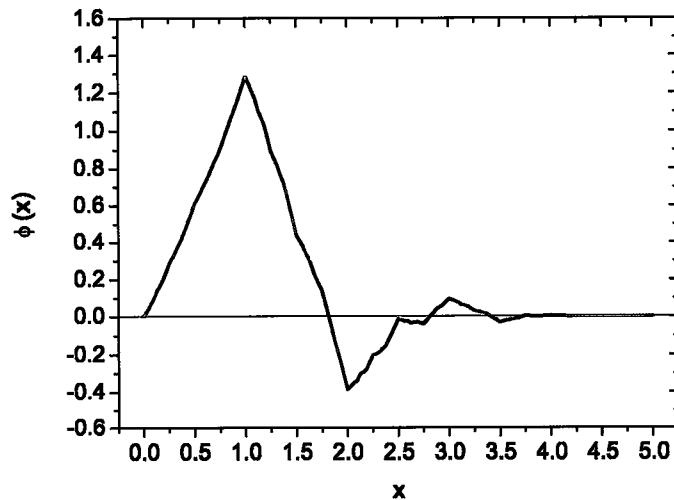


Figura 2.10: Função *scaling* de Daubechies de ordem 3. Tem suporte no intervalo  $[0, 5]$

Voltemos, agora, à tabela 2.1 onde está representada uma função em escalas diferentes. Seja  $f_j(x)$  uma função do subespaço  $V_j$ , definamos, para os detalhes  $d_k(x)$ , o subespaço dos detalhes  $W_k$ . A representação da tabela 2.1 pode ser substituída por uma representação em termos dos subespaços  $V_j$  e  $W_k$  como se pode ver na tabela 2.2. O subespaço dos detalhes,  $W_j$ ,

Escala	Relação entre subespaços
$j$	$V_j$
$j - 1$	$V_{j-1} = V_j \oplus W_j$
$j - 2$	$V_{j-2} = V_{j-1} \oplus W_{j-1} = V_j \oplus W_j \oplus W_{j-1}$
$j - m$	$V_{j-m} = \dots = V_j \oplus W_j \oplus W_{j-1} \oplus \dots \oplus W_{j-m+1}$
$\vdots$	$\vdots$
$j \rightarrow -\infty$	$V_{j \rightarrow -\infty} = V_j \oplus \bigoplus_{k=-\infty}^j W_k$

Tabela 2.2: Relação entre subespaços  $V_j$  em diferentes escalas. O nível de resolução das escalas aumenta quando  $j$  diminui.

corresponde ao nível de resolução  $j$  e é ortogonal a  $V_j$ . Isto significa que o produto interno entre qualquer elemento de  $W_j$  e qualquer elemento de  $V_j$  é zero. Uma vez que  $W_j$  é ortogonal a  $V_j$  deve ser também ortogonal a qualquer subespaço de  $V_j$ . Então,  $W_j$  é ortogonal a qualquer subespaço  $V_{j'}$  com  $j' > j$ . O que quer dizer que o subespaço dos detalhes é ortogonal ao subespaço aproximação só quando o subespaço dos detalhes tem maior resolução. Além disso, quaisquer dois subespaços de detalhes a diferentes níveis de resolução são ortogonais.

O subespaço dos detalhes  $W_j$  tem uma base ortonormal  $\{\psi_{j,k}(x)\}_{j,k}$ , onde

$$\psi_{j,k} := 2^{-\frac{j}{2}} \psi(2^{-j}x - k).$$

Por outro lado, as bases de  $W_j$  são bases para  $L^2(\mathbb{R})$  uma vez que o espaço de funções de quadrado sumável pode ser decomposto em subespaços de

detalhes, cada um contendo informação sobre os detalhes a uma determinada resolução. Isto é,

$$L^2(\mathbb{R}) = \bigoplus_{k=-\infty}^{+\infty} W_k.$$

Então, dizemos que  $L^2(\mathbb{R})$  tem uma base ortonormal  $\{\psi_{j,k}(x)\}_{j,k}$  chamada base *wavelet*.

Como vimos, antes da análise em multiresolução, a base *wavelet* é construída a partir de translações,  $k$ , e mudanças de escala,  $j$ , da função *mother wavelet*.

Desde que  $\{\psi_{0,k}(x)\}_k$  estejam em  $W_0$  e  $W_0 \subset V_{-1}$ ,  $\psi(x)$  pode ser escrita como uma sobreposição das funções de base para  $V_{-1}$ ,  $\{\phi_{-1,k}(x)\}_k$ . Por isso, tem-se

$$\psi(x) = \sum_k g_k \phi_{-1,k}(x)$$

que, tendo em conta (2.35), também podemos escrever como

$$\psi(x) = \sqrt{2} \sum_k g_k \phi(2x - k), \quad (2.41)$$

onde  $g_k$  são os coeficientes *wavelet* e (2.41) é a equação wavelet. Esta relaciona a *mother wavelet* com a função *scaling* na próxima escala mais fina.

Vamos centrar-nos numa solução,  $\psi(x)$ , para a equação (2.41), que satisfaz a condição

$$\int \psi(x) dx = 0. \quad (2.42)$$

A qual é a mesma imposição que emerge da condição de admissibilidade referida para o caso da transformada *wavelet* continua.

Aplicando a condição (2.42) à equação *wavelet* (2.41) resulta que

$$\sum_k g_k = 0, \quad (2.43)$$

ou seja, a igualdade (2.43) deve verificar-se para que a equação (2.41) tenha uma solução que satisfaça (2.42). Os coeficientes  $g_k$  determinam-se a partir

dos coeficientes  $h_k$ . Para ver como se relacionam recorreremos ao espaço de Fourier.

---

### Obtenção de $g_k$ a partir de $h_k$

Da ortogonalidade entre  $W_j$  e  $V_j$  resulta a condição de ortogonalidade entre as funções *wavelet*,  $\{\psi(2^{-j}x - k)\}$ , e *scaling*,  $\{\phi(2^{-j}x - k')\}$ ,

$$\int \psi^*(2^{-j}x - k)\phi(2^{-j}x - k')dx = 0. \quad (2.44)$$

Derivar a condição de ortogonalidade (2.44), no espaço de Fourier, permite-nos conhecer a relação entre os  $g_k$  e os  $h_k$ .

Começemos por introduzir a transformada de Fourier da função *scaling*,

$$\hat{\phi}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \phi(x)e^{-i\xi x} dx. \quad (2.45)$$

Multiplicando a equação *scaling* (2.36) por  $\frac{e^{-i\xi x}}{\sqrt{2\pi}}$  e integrando em  $x$ , vem

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \phi(x)e^{-i\xi x} dx = \sum_k \sqrt{2}h_k \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \phi(2x-k)e^{-i\xi x} dx \\ &= \left( \sum_k \frac{h_k}{\sqrt{2}} e^{-ik\frac{\xi}{2}} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \phi(2x-k)e^{-i(2x-k)\frac{\xi}{2}} d(2x) \\ &= \left( \sum_k \frac{h_k}{\sqrt{2}} e^{-ik\frac{\xi}{2}} \right) \hat{\phi}\left(\frac{\xi}{2}\right). \end{aligned}$$

Definindo

$$H(\xi) := \sum_k \frac{h_k}{\sqrt{2}} e^{-ik\xi}, \quad (2.46)$$

a equação *scaling*, no espaço de Fourier, assume a forma

$$\hat{\phi}(\xi) = H\left(\frac{\xi}{2}\right) \hat{\phi}\left(\frac{\xi}{2}\right). \quad (2.47)$$

Analogamente para a equação *wavelet*, define-se  $G(\xi)$  como

$$G(\xi) := \sum_k \frac{g_k}{\sqrt{2}} e^{-ik\xi} \quad (2.48)$$

e a equação *wavelet*, no espaço de Fourier, assume a forma

$$\hat{\psi}(\xi) = G\left(\frac{\xi}{2}\right) \hat{\phi}\left(\frac{\xi}{2}\right). \quad (2.49)$$

Em seguida, derivemos a condição de ortogonalidade entre  $\{\psi(2^{-j}x - k)\}_{j,k}$  e  $\{\phi(2^{-j}x - k')\}_{j,k}$  no espaço de Fourier. Consideremos a escala  $j = 0$  com  $k' = 0$ . A transformada de Fourier de  $\phi(x)$  é dada por (2.45) e de  $\psi(x - k)$  é

$$\hat{\psi}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x - k) e^{-i\xi(x-k)} dx. \quad (2.50)$$

Partindo da condição (2.44) e tendo em conta (2.45) e (2.50), tem-se

$$\begin{aligned} 0 &= \int \psi^*(x - k) \phi(x) dx \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx \left[ \int d\xi e^{i\xi(x-k)} \hat{\psi}(\xi) \right]^* \left[ \int d\varepsilon e^{i\varepsilon x} \hat{\phi}(\varepsilon) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx \int d\xi \int d\varepsilon e^{i\xi k} e^{i\varepsilon(x-\xi)} \hat{\psi}^*(\xi) \hat{\phi}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (2.51)$$

Recorrendo à representação da função delta de Dirac

$$\delta(\varepsilon - \xi) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ix(\varepsilon-\xi)} dx,$$

a equação (2.51) fica

$$\begin{aligned} 0 &= \int d\xi \int d\varepsilon e^{i\xi k} \delta(\varepsilon - \xi) \hat{\psi}^*(\xi) \hat{\phi}(\varepsilon) \\ &= \int d\xi e^{i\xi k} \hat{\psi}^*(\xi) \hat{\phi}(\xi). \end{aligned}$$

Isto também se pode escrever como

$$0 = \int_0^{2\pi} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}^*(\xi + 2\pi l) \hat{\phi}(\xi + 2\pi l) e^{i\xi k} d\xi, \quad (2.52)$$

onde apenas o intervalo de integração entre  $-\infty$  e  $+\infty$  foi dividido em subintervalos de largura  $2\pi$  tomando em conta a periodicidade do factor  $e^{i\xi k}$ .

O lado direito de (2.52) corresponde aos coeficientes de Fourier,  $a_k$ , de uma determinada função periódica,  $A(\xi)$ , com período  $2\pi$ , definida por

$$A(\xi) := \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}^*(\xi + 2\pi l) \hat{\phi}(\xi + 2\pi l), \quad (2.53)$$

cuja expansão de Fourier é

$$A(\xi) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} a_k e^{-i\xi k} \quad (2.54)$$

e os coeficientes de Fourier,  $a_k$ , determinam-se através de

$$a_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\xi A(\xi) e^{i\xi k}. \quad (2.55)$$

A partir de (2.52), tem-se  $a_k = 0$ . Assim, sendo os coeficientes de Fourier nulos, por (2.54),  $A(\xi) = 0$ . Logo, por (2.53) tem-se a condição de ortogonalidade entre as funções *scaling* e *wavelet* no espaço de Fourier

$$\sum_{l=-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}^*(\xi + 2\pi l) \hat{\phi}(\xi + 2\pi l) = 0. \quad (2.56)$$

Usando a equação *scaling* (2.47) e a equação *wavelet* (2.49), podemos reescrever a condição de ortogonalidade (2.56) como uma condição para  $H(\xi)$  e para  $G(\xi)$ :

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{l=-\infty}^{+\infty} G^*\left(\frac{\xi + 2\pi l}{2}\right) \hat{\psi}^*\left(\frac{\xi + 2\pi l}{2}\right) H\left(\frac{\xi + 2\pi l}{2}\right) \hat{\phi}\left(\frac{\xi + 2\pi l}{2}\right) \\ &= \sum_{l=-\infty}^{+\infty} G^*(\xi' + \pi l) \hat{\psi}^*(\xi' + \pi l) H(\xi' + \pi l) \hat{\phi}(\xi' + \pi l). \end{aligned} \quad (2.57)$$

A equação (2.57) é válida para qualquer  $\xi' = \frac{\xi}{2}$ , então podemos substituí-lo por  $\xi$ . Separando a soma em termos pares



( $l = 2k$ ) e ímpares ( $l = 2k + 1$ ), tem-se

$$0 = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} G^*(\xi + 2\pi k) \hat{\psi}^*(\xi + 2\pi k) H(\xi + 2\pi k) \hat{\phi}(\xi + 2\pi k) + \sum_{k=-\infty}^{+\infty} G^*(\xi + (2k + 1)\pi) \hat{\psi}^*(\xi + (2k + 1)\pi) \times H(\xi + (2k + 1)\pi) \hat{\phi}(\xi + (2k + 1)\pi).$$

Pelas definições (2.46) e (2.48),  $H(\xi)$  e  $G(\xi)$  são funções periódicas de período  $2\pi$ . Então, a equação anterior pode ser escrita como

$$G^*(\xi)H(\xi) \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}^*(\xi + 2\pi k)\hat{\phi}(\xi + 2\pi k) + G^*(\xi + \pi)H(\xi + \pi) \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}^*((\xi + \pi) + 2k\pi)\hat{\phi}((\xi + \pi) + 2k\pi) = 0.$$

Por (2.56), os sumatórios da equação anterior anulam-se, então os produtos  $G^*(\xi)H(\xi)$  e  $G^*(\xi + \pi)H(\xi + \pi)$  podem tomar quaisquer valores. Façamos a escolha

$$G^*(\xi)H(\xi) = -G^*(\xi + \pi)H(\xi + \pi).$$

A igualdade anterior é satisfeita se escolhermos  $G(\xi) = \lambda(\xi) \times H^*(\xi + \pi)$ , com  $|\lambda(\xi)|^2 = 1$  e  $\lambda(\xi) = -\lambda(\xi + \pi)$ .

Fazendo  $\lambda(\xi) = -e^{-il\xi}$ , com  $l$  ímpar, então  $G(\xi) = -e^{-il\xi} \times H(\xi + \pi)$  e substituindo a expressão explícita de  $H(\xi)$ , (2.46), fica

$$G(\xi) = -e^{-il\xi} \sum_k \frac{h_k}{\sqrt{2}} e^{i(\xi+\pi)k} = - \sum_k \frac{h_k}{\sqrt{2}} e^{-i(l-k)\xi} e^{i\pi k}.$$

Tomando em conta a igualdade  $e^{i\pi k} = (-1)^{-k}$ , tem-se

$$G(\xi) = \sum_k \frac{h_k}{\sqrt{2}} (-1)^{l-k} e^{-i(l-k)\xi}$$

desde que  $l$  seja ímpar. Fazendo  $l - k = n$ , tem-se

$$G(\xi) = \sum_n \frac{(-1)^n h_{l-n}}{\sqrt{2}} e^{-in\xi}.$$

Finalmente, da comparação com (2.48) conclui-se que

$$g_n = (-1)^n h_{l-n}, \quad (2.58)$$

com  $l$  ímpar.

Antes de introduzirmos a análise em multiresolução, começámos por considerar *wavelets* de suporte compacto. Como vemos, as *wavelets* podem ser construídas a partir das funções *scaling* que resultam da análise em multiresolução. Também o suporte das funções *wavelets* é determinado pelo suporte das funções *scaling*. Anteriormente referimos que o suporte das *mother wavelets* está contido no intervalo  $[0, 2K - 1]$ . Assim, o suporte das funções *scaling* que dão origem às *mother wavelets* deve estar no mesmo intervalo. Tal pode ver-se nas figuras 2.8, 2.9 e 2.10. As funções  $\phi_{j,k}(x)$  e  $\psi_{j,k}(x)$  têm suporte em  $[2^j k, 2^j(k + 2K - 1)]$ .

Ainda uma consequência do suporte compacto é que os coeficientes *scaling*,  $h_k$ , e *wavelet*,  $g_k$ , [15] devem satisfazer a condição

$$h_k = g_k = 0, \quad \text{para } k \in \mathbb{Z} \setminus \{0, 1, \dots, 2K - 1\}. \quad (2.59)$$

O que significa que o tamanho do suporte determina o número de coeficientes que têm de existir, isto é, para um suporte de tamanho  $2K - 1$  existem  $2K$  coeficientes *scaling* e igual número de coeficientes *wavelet*. Portanto, para as *wavelets* de Daubechies de ordem  $K = 2$  existem quatro coeficientes *scaling* e quatro coeficientes *wavelet*, sendo por vezes denominadas de DAUB4. Enquanto as de ordem  $K = 3$ , têm seis coeficientes e denominam-se DAUB6. São estas a designações que usaremos no capítulo 5.

O princípio básico da análise em multiresolução é que desde que uma colecção de subespaços fechados satisfaça (2.30) – (2.34), então existe uma base ortonormal  $\{\psi_{j,k}(x), j, k \in \mathbb{Z}\}$  de  $L^2(\mathbb{R})$ , construída a partir de (2.26), tal que, para todo  $f \in L^2(\mathbb{R})$ ,

$$P_{j-1}f = P_j f + \sum_{k \in \mathbb{Z}} \langle \psi_{j,k}, f \rangle \psi_{j,k},$$

onde  $P_j$  é o operador projecção em  $V_j$ .

Em síntese, da análise em multiresolução resultam as equações *scaling* e *wavelet*, cujas soluções são respectivamente as funções *scaling* ( $\phi$ ) e *wavelet* ( $\psi$ ) com suporte em  $[0, 2K - 1]$  e respectivas famílias com suporte em  $[2^j k, 2^j(k + 2K - 1)]$ .

No caso das *wavelets* de Daubechies de ordem  $K$  é imposta mais uma condição [15] para as definir, que é a condição de momentos nulos das *wavelets*

$$\int x^l \psi(x) dx = 0 \quad \text{para } l = 0, \dots, K - 1. \quad (2.60)$$

Daqui resulta novo constrangimento para os coeficientes *scaling* e *wavelet* [15]. Para o obter basta aplicar a equação *wavelet* (2.41) a (2.60). Vejamos:

$$\int x^l \psi(x) dx = \int x^l \sqrt{2} \sum_{k=0}^{2K-1} g_k \phi(2x - k) = 0,$$

fazendo  $y = 2x - k$

$$\int \left( \frac{y+k}{2} \right)^l \sqrt{2} \sum_{k=0}^{2K-1} g_k \phi(y) \frac{dy}{2} = 0$$

$$\sum_{k=0}^{2K-1} g_k \int dx (x+k)^l \phi(x) = 0.$$

No caso  $l = 0$ ,

$$\sum_{k=0}^{2K-1} g_k \int dx \phi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{k=0}^{2K-1} g_k = 0,$$

que corresponde à condição (2.43). Para chegar a este resultado teve-se em conta a condição de normalização (2.37).

Para  $l = 1$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{2K-1} g_k \int dx (x+k) \phi(x) &= 0 \\ \int dx x \phi(x) \sum_{k=0}^{2K-1} g_k + \int dx \phi(x) \sum_{k=0}^{2K-1} g_k k &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{k=0}^{2K-1} g_k k &= 0, \end{aligned}$$

onde se aplicou a condição para  $l = 0$  à primeira parcela e a condição de normalização (2.37) à segunda parcela.

Para  $l = 2$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{2K-1} g_k \int dx (x+k)^2 \phi(x) &= 0 \\ \int dx x^2 \phi(x) \sum_{k=0}^{2K-1} g_k + 2 \int dx x \phi(x) \sum_{k=0}^{2K-1} g_k k + \int dx \phi(x) \sum_{k=0}^{2K-1} g_k k^2 &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{k=0}^{2K-1} g_k k^2 &= 0, \end{aligned}$$

onde se aplicou a condição para  $l = 0$  à primeira parcela, a condição para  $l = 1$  à segunda parcela e a condição de normalização (2.37) à terceira parcela.

⋮

Para  $l = K - 1$ ,

$$\sum_{k=0}^{2K-1} g_k k^{K-1} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{k=0}^{2K-1} (-1)^k h_{n-k} k^{K-1} = 0, \quad (2.61)$$

com  $n$  ímpar.

A condição (2.61) apresenta uma dependência de  $K$ . Isto significa que cada vez que a ordem das *wavelets* aumenta, uma unidade, uma nova condição de ortogonalidade surge.

Juntando a condição (2.61) às condições (2.38), (2.39) e (2.59) podem calcular-se os coeficientes *scaling* e conseqüentemente os coeficientes *wavelet*. Para os exemplos (Haar e Daubechies) apresentados, os coeficientes *scaling* resultantes das condições referidas estão na tabela 2.3.

Coeficientes <i>scaling</i>			
$h_k$	Haar	Daubechies	
	K=1	K=2	K=3
$h_0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$(1 + \sqrt{3})/4\sqrt{2}$	$(1 + \sqrt{10} + \sqrt{5 + 2\sqrt{10}})/16\sqrt{2}$
$h_1$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$(3 + \sqrt{3})/4\sqrt{2}$	$(5 + \sqrt{10} + 3\sqrt{5 + 2\sqrt{10}})/16\sqrt{2}$
$h_2$	0	$(3 - \sqrt{3})/4\sqrt{2}$	$(10 - 2\sqrt{10} + 2\sqrt{5 + 2\sqrt{10}})/16\sqrt{2}$
$h_3$	0	$(1 - \sqrt{3})/4\sqrt{2}$	$(10 - 2\sqrt{10} - 2\sqrt{5 + 2\sqrt{10}})/16\sqrt{2}$
$h_4$	0	0	$(5 + \sqrt{10} - 3\sqrt{5 + 2\sqrt{10}})/16\sqrt{2}$
$h_5$	0	0	$(1 + \sqrt{10} - \sqrt{5 + 2\sqrt{10}})/16\sqrt{2}$

Tabela 2.3: Coeficientes *scaling* para as *wavelets* de Haar, de Daubechies de ordem 2 e de ordem 3.

A condição (2.60) pode ser generalizada para as famílias de *wavelets*<sup>10</sup> [15], [3] construídas a partir da *mother wavelet*

$$\int x^l \psi_{j,k}(x) dx = 0, \quad 0 \leq l < K. \quad (2.62)$$

Esta é uma característica muito importante das *wavelets* porque leva a uma representação local exacta de polinómios. Vejamos em que medida esta característica apresenta significativa importância. Para tal, relembremos uma consequência da análise em multiresolução retirada da tabela 2.2:

$$V_j = W_{j+1} \oplus W_{j+2} \oplus \cdots \oplus W_{j+m} \oplus V_{j+m}, \quad (2.63)$$

onde  $V_j$  é o subespaço de maior resolução e  $V_{j+m}$  de menor resolução.

De (2.63) resulta que temos duas bases para o subespaço  $V_j$ : à esquerda uma base (*scaling*) constituída pelas funções de base  $\phi_{j,k}(x)$  à escala de maior resolução; à direita uma base (de multiresolução) constituída pelas funções de base  $\psi_{n,k}(x)$  para todos os níveis de resolução desde o menor ( $j+m$ ) até ao nível ( $j+1$ ) de maior resolução e pelas funções de base  $\phi_{j+m,k}(x)$  para a escala de menor resolução ( $j+m$ ).

Qualquer função,  $f(x) \in L^2(\mathbb{R})$ , pode ser representada aproximadamente nessas bases como se segue

$$f(x) = \sum_k c_k \phi_{j,k}(x) = \sum_k d_k \phi_{j+m,k}(x) + \sum_{n=j+1}^{j+m} \sum_k d_{n,k} \psi_{n,k}(x), \quad (2.64)$$

onde os coeficientes de expansão são

$$c_k := \langle \phi_{j,k}, f \rangle \quad d_k := \langle \phi_{j+m,k}, f \rangle \quad d_{n,k} := \langle \psi_{n,k}, f \rangle. \quad (2.65)$$

No limite quando  $j \rightarrow -\infty$ , a representação de  $f(x)$  torna-se exacta em ambas as bases.

---

<sup>10</sup>A demonstração de que a condição de momentos nulos pode ser generalizada, para quaisquer versões transladadas e escalonadas da *mother wavelet*, pode ser vista em [15], p.27.

Consideremos o caso particular em que  $f(x)$  é um polinómio  $p_l(x)$ , de grau  $l$ . A representação exacta na base de multiresolução é

$$p_l(x) = \sum_k d_k \phi_{j,k}(x) + \sum_{n=-\infty}^j \sum_k d_{n,k} \psi_{n,k}(x). \quad (2.66)$$

Embora um polinómio não seja uma função de quadrado sumável, podemos torná-lo numa bastando para isso multiplicá-lo por uma “função caixa”. Assim, o polinómio fica apenas diferente de zero num intervalo finito.

No caso do grau do polinómio ser  $l < K$ , por (2.62) e (2.65),  $d_{n,k} = 0$ , então (2.66) fica

$$p_l(x) = \sum_k d_k \phi_{j,k}(x). \quad (2.67)$$

Da condição de momentos nulos, (2.62), obtemos (2.67) – uma representação exacta de polinómios com grau até  $K - 1$  em termos de funções *scaling* à escala de menor resolução. Uma vez que podemos escolher arbitrariamente a escala  $j$ , essa representação é válida para qualquer escala. Como o suporte das funções *scaling* é compacto, para representar o polinómio na vizinhança de qualquer ponto  $x$  um número finito de coeficientes é suficiente.

Suponhamos que as funções *scaling* são de Daubechies de ordem 2. À escala  $j = 0$  o seu suporte tem tamanho 3. Se quisermos representar o polinómio, por exemplo, na vizinhança do ponto  $x = 2.5$ , como se pode ver na figura 2.11, apenas o suporte de três funções *scaling* sobrepõe o ponto considerado. Para este caso, são só necessários três coeficientes de expansão para representar localmente o polinómio.

Se considerarmos funções *scaling* de Daubechies de maior ordem, o tamanho do seu suporte aumenta, mas o número de funções que contribui na soma (2.67) para aproximar o polinómio é ainda finita. Por isso, a base *scaling* permite uma representação local exacta de polinómios de grau  $l < K$ .

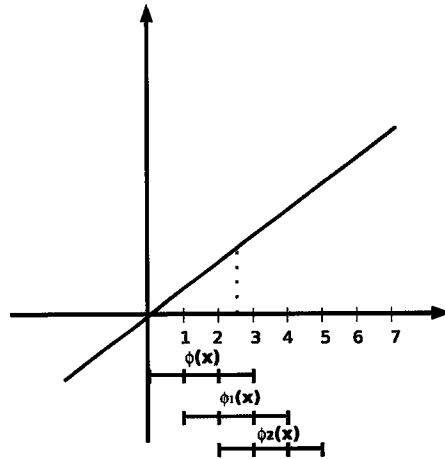


Figura 2.11: Ilustração da sobreposição do suporte de funções *scaling* de Daubechies de ordem 2 no ponto  $x = 2.5$  de um polinómio de grau um. Apenas o suporte das funções  $\phi(x)$ ,  $\phi_1(x)$  e  $\phi_2(x)$  sobrepõe o ponto considerado.

Nas figuras 2.12 (a) e (b) pode ver-se também a representação local, no intervalo<sup>11</sup> entre 0 e 3, em termos de funções *scaling* de Daubechies de ordem 2, respectivamente para um polinómio de grau zero e um polinómio de grau um.

Entretanto, se uma função,  $f(x) \in L^2(\mathbb{R})$ , pode ser bem aproximada por um polinómio de grau  $K - 1$ , no suporte das *wavelets*, os coeficientes  $d_{n,k} := \langle \psi_{n,k}, f \rangle \approx 0$ . Esta é a razão que torna a base de multiresolução tão eficiente: qualquer função que apresente alguma regularidade pode, em intervalos suficientemente pequenos, ser aproximada por um polinómio de baixo grau. Uma vez representada na base de multiresolução, a maior parte dos coeficientes de expansão são muito pequenos e podem não ser considerados, resumindo-se a representação a um pequeno conjunto de coeficientes de expansão.

Representar uma função directamente na base de multiresolução não é,

<sup>11</sup>A escolha do intervalo 0 a 3 é arbitrária, bem como a escolha do ponto  $x = 2.5$  na figura 2.11.



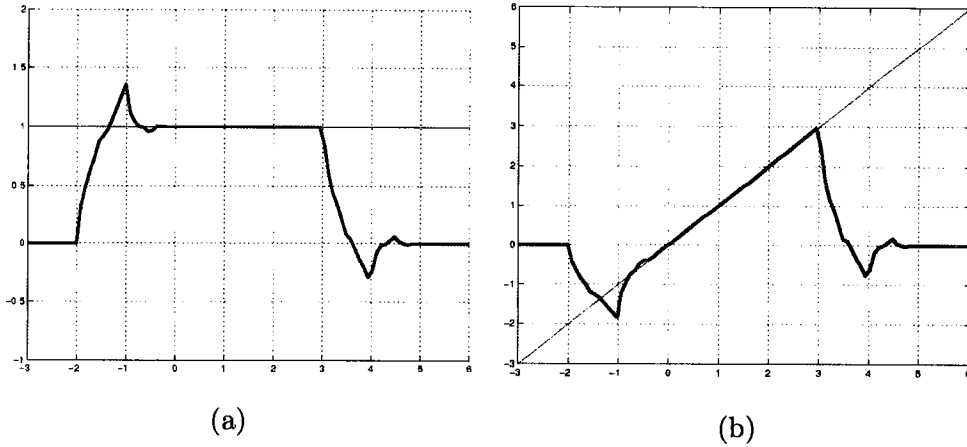


Figura 2.12: Representação local, no intervalo entre 0 e 3, de uma função (a) constante, (b) linear, em termos de funções *scaling* de Daubechies de ordem 2.

no entanto, muito prático porque exige o conhecimento dos  $d_k$  e dos  $d_{n,k}$ . O mesmo é dizer que é necessário avaliar os integrais

$$d_k := \int \phi_{j+m,k}(x)f(x)dx \quad \text{e} \quad d_{n,k} := \int \psi_{n,k}(x)f(x)dx.$$

A igualdade entre as representações nas bases *scaling* e de multiresolução, em (2.64), sugere que se relacionam através de uma transformação linear. Isto é, se representarmos uma função,  $f(x) \in L^2(\mathbb{R})$ , na base *scaling*, podemos, por meio de uma transformação ortogonal, obter a representação da função na base de multiresolução. Assim, para calcular os coeficientes basta avaliar os integrais

$$c_k := \int \phi_{j,k}(x)f(x)dx. \tag{2.68}$$

A base *scaling* não é tão eficiente como a base de multiresolução porque não se pode, à partida, saber se há coeficientes que têm uma contribuição pequena ao ponto de os podermos desprezar. Enquanto na base de multiresolução, os coeficientes correspondem a muitas escalas diferentes, uns coeficientes têm uma contribuição mais significativa e outros, porque têm uma contribuição pouco expressiva, podem até ser eliminados. Reduzir a

quantidade de coeficientes, necessários para representar uma função numa base, torna a representação mais eficiente.

Para calcular integrais numericamente, usam-se, frequentemente, regras de quadratura<sup>12</sup> da forma

$$\int_a^b v(x)f(x)dx \approx \sum_{i=1}^N w_i f(x_i), \quad (2.69)$$

onde  $v(x)$  é uma função de peso,  $x_i$  são os  $N$  pontos em que a função deve ser calculada e  $w_i$  são os pesos da regra de quadratura. Os pontos e os pesos podem ser calculados de diferentes maneiras, em função de que regra de quadratura se usa.

Um exemplo é a regra de quadratura de Gauss-Legendre. No entanto, em aplicações práticas, quando as funções integrandas são da forma  $\phi_{j,k}(x)f(x)$ , esse tipo de regra, mesmo em forma adaptativa com um certo controlo sobre a precisão do resultado, não atinge uma precisão suficiente. A razão dessa limitação deve-se ao carácter fractal da função *scaling*,  $\phi_{j,k}(x)$ .

Contudo, é possível deduzir regras de quadratura muito simples e eficazes para funções integrandas que são produtos de uma função *scaling* e de outra função. A função *scaling*, neste caso, detém o papel de função peso e as regras de quadratura usam os momentos dessa função. Veremos que, esses momentos podem ser calculados exactamente: são soluções de sistemas de equações lineares.

A partir dos momentos da função *scaling*, podemos construir uma regra de quadratura, de apenas um ponto, exacta se  $f(x)$  for um polinómio com grau até  $2K - 2$ .

---

<sup>12</sup>Regra de quadratura é o nome dado à aproximação de um integral pelo sumatório dos valores da função integranda em pontos discretos multiplicada por um factor peso.

### 2.2.4 Momentos das *wavelets* e regra de quadratura de um ponto

Fixemos, nesta subsecção, a escala em  $j = 0$  e, por razões de simplicidade, escrevemos  $\phi_k(x)$ , para a função *scaling* transladada nessa escala, em vez de  $\phi_{0,k}(x)$ .

Os momentos de ordem  $m$  da função  $\phi_k(x)$  no intervalo de integração  $[a, b]$ , com  $a, b \in \mathbb{Z}$ , são definidos por

$$\tau_k^{(m)} = \int_a^b x^m \phi_k(x) dx. \quad (2.70)$$

Obviamente, para obtermos momentos diferentes de zero, o suporte da função *scaling* deve sobrepor-se pelo menos parcialmente com o intervalo de integração.

Começemos com o caso, mais simples, em que o suporte está totalmente contido no intervalo da integração, isto é, quando  $a \leq k \leq b - 2K + 2$ . Para este caso, temos  $T_k^{(m)}$  que designamos por momentos totais das funções *scaling* transladadas e, como veremos, podem ser relacionados com os momentos totais da função  $\phi(x)$ ,

$$T^{(m)} = \int_0^{2K-1} x^m \phi(x) dx. \quad (2.71)$$

Os momentos totais das funções transladadas,  $\phi_k(x)$ , obtêm-se a partir dos momentos totais da função  $\phi(x)$  através de

$$T_k^{(m)} = \int_a^b x^m \phi(x - k) dx = \int_{a-k}^{b-k} (y + k)^m \phi(y) dy \quad (2.72)$$

$$\Rightarrow T_k^{(m)} = \int_{a-k}^{b-k} (x + k)^m \phi(x) dx. \quad (2.73)$$

Após desenvolver o binómio, obtêm-se  $T_k^{(m)}$  como combinação linear de todos os momentos totais  $T^{(n)}$ , com  $0 \leq n < m$ .

O momento de ordem zero de  $\phi(x)$  é dado simplesmente pela condição

de normalização da função *scaling*,

$$T^{(0)} = \int_0^{2K-1} x^0 \phi(x) dx = \int_0^{2K-1} \phi(x) dx = 1. \quad (2.74)$$

Os momentos de ordem superior calculam-se a partir da aplicação da equação *scaling* (2.36) a (2.71). Daí deduz-se a relação de recorrência, que se segue, para os momentos totais:

$$T^{(m)} = \frac{1}{2^m - 1} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{m!}{k!(m-k)!} \sum_{l=0}^{2K-1} h_l t^{m-k} T^{(k)}. \quad (2.75)$$

A dedução de (2.75) pode ser encontrada em [15].

Agora, veremos como o conhecimento dos momentos serve para deduzir uma regra de quadratura de um ponto.

Para começar, consideremos uma função linear  $f(x) = p_0 + p_1 x$ , onde  $p_i$  com  $i = 0$  ou  $1$  são constantes. O integral do produto entre  $f(x)$  e a função *scaling* no intervalo  $[a, b]$ , supondo, para já, que  $[0, 2K - 1] \subset [a, b]$ , pode ser escrito como

$$\int_a^b f(x) \phi(x) dx = p_0 \int_a^b \phi(x) dx + p_1 \int_a^b x \phi(x) dx = p_0 T^{(0)} + p_1 T^{(1)}. \quad (2.76)$$

Dado que  $T^{(0)} = 1$ , o resultado (2.76) pode também ser escrito como

$$\int_a^b f(x) \phi(x) dx = f(T^{(1)}). \quad (2.77)$$

A igualdade (2.77) tem exactamente a estrutura de uma regra de quadratura do tipo de (2.69), com  $N = 1$ ,  $w_1 = 1$  e  $x_1 = T^{(1)}$ , ou seja, de uma regra de quadratura de um ponto, com peso 1 e o único ponto de quadratura é o momento total de primeira ordem da função *scaling*. Esta regra de um ponto é *exacta* para funções lineares.

Em geral, é possível mostrar que regras de quadratura do tipo Gauss-Legendre com  $N$  pontos são exactas para polinómios até ao grau  $2N - 1$ . Portanto, uma regra de Gauss-Legendre de um ponto é *exacta* para funções

lineares. Surpreendentemente, a regra (2.77) é ainda mais precisa porque é exacta também para funções quadráticas. Vejamos porquê.

Como é mostrado em [15], para os momentos totais de segunda ordem é válida a relação  $T^{(2)} = (T^{(1)})^2$ . Com ela, o integral em que  $f(x)$  é uma função quadrática,  $f(x) = p_0 + p_1x + p_2x^2$ , pode se calculado como

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\phi(x)dx &= p_0 \int_a^b \phi(x)dx + p_1 \int_a^b x\phi(x)dx + p_2 \int_a^b x^2\phi(x)dx \\ &= p_0T^{(0)} + p_1T^{(1)} + p_2T^{(2)} \\ &= p_0 + p_1T^{(1)} + p_2(T^{(1)})^2, \end{aligned} \quad (2.78)$$

o que, novamente, pode ser escrito na forma (2.77),

$$\int_a^b f(x)\phi(x)dx = f(T^{(1)}).$$

E assim, tem-se que a regra de quadratura de um ponto é exacta para polinómios até ao grau 2.

Usando a relação (2.73) podemos verificar que a regra (2.77) pode ser generalizada para o caso de funções  $\phi_k(x)$  no lugar de  $\phi(x)$ . Por um lado, desde que  $[0, 2K - 1] \subset [a, b]$ , tem-se

$$\int_a^b (p_0 + p_1x + p_2x^2)\phi_k(x)dx = p_0T_k^{(0)} + p_1T_k^{(1)} + p_2T_k^{(2)}. \quad (2.79)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\phi_k(x)dx &= \int_a^b (p_0 + p_1x + p_2x^2)\phi_k(x)dx \\ &= \int_a^b (p_0 + p_1x + p_2x^2)\phi(x - k)dx \\ &= \int_{a-k}^{b-k} [p_0 + p_1(x + k) + p_2(x + k)^2] \phi(x)dx \\ &= p_0T^{(0)} + p_1(kT^{(0)} + T^{(1)}) + p_2(k^2 + 2T^{(1)} + T^{(2)}). \end{aligned} \quad (2.80)$$

Comparando (2.79) e (2.80), tomando em conta que  $T^{(0)} = 1$  e  $T^{(2)} = (T^{(1)})^2$ , obtém-se

$$T_k^{(0)} = 1, \quad T_k^{(1)} = k + T^{(1)}, \quad T_k^{(2)} = (T_k^{(1)})^2. \quad (2.81)$$

Ao substituir estes resultados em (2.79) chegamos a

$$\int_a^b (p_0 + p_1x + p_2x^2)\phi_k(x)dx = p_0 + p_1T_k^{(1)} + p_2(T_k^{(1)})^2. \quad (2.82)$$

Podemos interpretar (2.82) como a regra de quadratura de um ponto generalizada para todas as funções  $\phi_k(x)$  cujo suporte está contido na sua totalidade em  $[a, b]$ , ou seja,

$$\int_a^b f(x)\phi_k(x)dx = f(T_k^{(1)}). \quad (2.83)$$

A regra (2.83) é exacta quando  $f(x)$  é um polinómio até ao segundo grau. Para outras funções essa regra é apenas aproximada. A qualidade da aproximação depende se  $f(x)$  pode ser bem aproximada por um polinómio de segundo grau no suporte de  $\phi_k(x)$ , ou não. Caso a aproximação não seja suficiente, uma maneira para melhorá-la pode ser através da escolha de uma escala mais reduzida.

Com a regra (2.83) temos um método simples e eficaz para calcular os coeficientes  $c_k$  a partir de (2.68).

Infelizmente, a situação é mais complicada quando um dos limites da integração cai dentro do suporte da função *scaling*  $\phi_k(x)$ . Nestes casos calculam-se momentos parciais em vez de totais. Introduzindo uma notação mais explícita, momentos parciais relevantes são

$$\mu_n^{(m)} := \langle x^m \rangle_{\phi_{[0;n]}} := \int_0^n x^m \phi(x) dx. \quad (2.84)$$

De facto, é suficiente determinar estes momentos parciais  $\mu_n^{(m)}$  para  $0 < n < 2K - 1$  (com  $n$  inteiro). Os outros momentos parciais podem ser calculados a partir deles, por exemplo

$$\langle x^m \rangle_{\phi_{[n;2K-1]}} = \langle x^m \rangle_{\phi_{[0;2K-1]}} - \langle x^m \rangle_{\phi_{[0;n]}}, \quad (2.85)$$

onde  $\langle x^m \rangle_{\phi_{[0;2K-1]}} = T^{(m)}$  é o momento total de ordem  $m$  já conhecido.

Momentos	K=2	K=3
Totais	$T^{(1)} = 0.633974596216$	$T^{(1)} = 0.817401178$
Parciais	$\mu_1^{(0)} = 0.849679368559$ $\mu_2^{(0)} = 1.016346035226$ $\mu_1^{(1)} = 0.518055482124$ $\mu_2^{(1)} = 0.664957219768$	$\mu_1^{(0)} = 0.600741569831$ $\mu_2^{(0)} = 1.096711447148$ $\mu_3^{(0)} = 0.985486726202$ $\mu_4^{(0)} = 0.999659089007$ $\mu_1^{(1)} = 0.406628881280$ $\mu_2^{(1)} = 1.013860381673$ $\mu_3^{(1)} = 0.773636517219$ $\mu_4^{(1)} = 0.816034805838$

Tabela 2.4: Momentos totais e parciais de ordem zero e um para as funções *scaling* de Daubechies de ordem 2 e 3. Os momentos totais de ordem zero, para ambas as ordens de *wavelets*, são:  $T^{(0)} = 1$ .

Usando, mais uma vez, a equação *scaling* (2.36) é possível construir sistemas de equações lineares para determinar os momentos parciais  $\mu_n^{(m)}$  com diferentes  $n$ . Este método é ilustrado no apêndice A para o caso dos momentos parciais das funções *scaling* de Daubechies de ordem 2.

Os momentos totais e parciais de ordem 0 e 1 obtidos, para as funções *scaling* de Daubechies de ordem 2 e 3, são apresentados na tabela 2.4.

A tabela 2.5 apresenta como calcular os momentos das funções *scaling* transladadas de ordem 0 e 1, respectivamente  $\tau_k^{(0)}$  e  $\tau_k^{(1)}$ , a partir dos momentos totais e dos momentos parciais dependendo do índice da translação  $k$  para um determinado intervalo da integração  $[a, b]$ . O essencial da tabela é mostrar para que valores de  $k$  os momentos são exclusivamente totais e em quais se devem também considerar momentos parciais. Para outros valores de  $k$  não incluídos na tabela os momentos são zero.

Convém ainda referir que o cálculo dos momentos é efectuado apenas

$k$	Momentos de $\phi_k(x)$	
	$\tau_k^{(0)}$	$\tau_k^{(1)}$
$a - 2K + 2 \leq k < a$	$T^{(0)} - \mu_{-k}^{(0)}$	$kT^{(0)} + T^{(1)} - k\mu_{-k}^{(0)} - \mu_{-k}^{(1)}$
$a \leq k < b - 2K + 2$	$T^{(0)}$	$kT^{(0)} + T^{(1)}$
$b - 2K + 2 < k \leq b - 1$	$\mu_{b-k}^{(0)}$	$-k\mu_{b-k}^{(0)} - \mu_{b-k}^{(1)}$

Tabela 2.5: Momentos de ordem zero e um das funções *scaling* trasladadas,  $\phi_k(x)$ , num intervalo de integração  $[a, b]$ .

armazenados para futuras aplicações, seja a construção de regras de quadratura ou outras.

No caso de os momentos serem parciais, a igualdade  $\tau_k^{(2)} = (\tau_k^{(1)})^2$  já não é válida. Consequentemente, a regra de quadratura (2.83) não é exacta para polinómios de segundo grau, e porque  $\tau_k^{(0)} \neq 1$  parece que nem vale para funções lineares. No entanto, com uma pequena modificação podemos estabelecer uma regra de um ponto que funciona para funções lineares mesmo no caso de momentos parciais.

Consideremos novamente o integral (2.68). Esse integral, quando a função integranda é do tipo  $f(x) = p_0 + p_1x$ , fica

$$\int_a^b (p_0 + p_1x)\phi_k(x)dx = p_0\tau_k^{(0)} + p_1\tau_k^{(1)} = \tau_k^{(0)} \left( p_0 + p_1 \frac{\tau_k^{(1)}}{\tau_k^{(0)}} \right), \quad (2.86)$$

que tem a desejada forma duma regra de quadratura de um ponto,

$$\int_a^b f(x)\phi_k(x)dx = w_k f(x_k), \quad (2.87)$$

onde, para um determinado valor de  $k$ , o peso é  $w_k = \tau_k^{(0)}$ , e o ponto é  $x_k = \frac{\tau_k^{(1)}}{\tau_k^{(0)}}$ . Repare-se que (2.87) tem uma forma geral válida também para os casos de momentos totais.

Embora a precisão da regra de quadratura de um ponto seja menor



quando é usada para determinar os coeficientes  $c_k$  perto dos limites do intervalo da integração, na prática isso não gera necessariamente problemas: com a passagem para escalas mais reduzidas, o suporte das funções *scaling* diminui e, dado que qualquer função analítica se aproxima cada vez mais a uma linha recta sobre intervalos cada vez mais pequenos, a precisão da integração também melhora.

Conhecida a maneira de determinar os coeficientes de expansão  $c_k$ , resta-nos saber como implementar a transformação ortogonal (obviamente, baseada em *wavelets*) para obter os coeficientes de expansão da eficiente base de multiresolução. A transformação ortogonal é denominada transformação *wavelet* discreta e abreviamo-la por DWT (do inglês Discrete Wavelet Transform).

### 2.2.5 Implementação da DWT a uma dimensão

As *wavelets* apresentam um carácter fractal que poderia ser um obstáculo à sua utilização, contudo, possuem outra característica que o contorna: podem ser definidas por um conjunto de coeficientes. Portanto, um algoritmo para a DWT utiliza esses coeficientes e não as funções *wavelets*. Os coeficientes são os  $h_k$  e  $g_k$ , que aparecem, respectivamente, nas equações *scaling*, (2.36), e *wavelet*, (2.41).

Vejamos como é definida a DWT pelos coeficientes  $h_k$  e  $g_k$ .

Recordemos a equação *scaling* (2.36)

$$\phi(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{2K-1} h_k \phi(2x - k). \quad (2.88)$$

Fazendo  $x = y - m$ , tem-se

$$\phi(y - m) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{2K-1} h_k \phi(2y - 2m - k). \quad (2.89)$$

Em (2.88),  $\phi(x) \in V_0$  e  $\phi(2x - k) \in V_{-1}$ , porque  $V_0 \subset V_{-1}$ . Generali-

zando,  $V_j \subset V_{j-1}$ , por isso, se  $\phi_j(x) \in V_j$  então  $\phi_j(2x - k) \in V_{j-1}$ . E a equação (2.89) por ser escrita como

$$\phi_j(y - m) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{2K-1} h_k \phi_j(2y - 2m - k), \quad (2.90)$$

ou

$$\phi_{j,m}(y) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{2K-1} h_k \phi_{j-1,2m+k}(y), \quad (2.91)$$

que, trocando  $y$  por  $x$  e  $j$  por  $j + 1$ , é o mesmo que

$$\phi_{j+1,m}(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{2K-1} h_k \phi_{j,2m+k}(x). \quad (2.92)$$

Analogamente para a equação *wavelet*, partindo de (2.41) obtém-se

$$\psi_{j+1,m}(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{2K-1} g_k \phi_{j,2m+k}(x). \quad (2.93)$$

O que se pretende em seguida é fazer uma representação de uma função na base *scaling* e outra na base de multiresolução e depois relacionar as duas representações usando as equações *scaling* e *wavelet*, respectivamente na forma (2.92) e (2.93), de modo a eliminar as funções *scaling* e *wavelet* que aparecem nas representações, preservando apenas uma relação entre os coeficientes de expansão em ambas as bases.

O número de funções de base para fazer uma representação na base *scaling* tem como critério de escolha a maximização da eficiência do algoritmo de implementação da DWT. Como o algoritmo usa dois tipos de coeficientes, os  $h_k$  e os  $g_k$ , os coeficientes de expansão na base *scaling* são transformados em dois tipos de coeficientes de expansão, uns pertencentes ao espaço das aproximações e outros ao espaço dos detalhes. A eficiência do algoritmo é maximizada se o número de coeficientes de expansão na base *scaling* for um número diádico, por conseguinte, o número de funções de base de partida deverá ser um número diádico.

Fixando o número de funções de base num número diádico  $N = 2^J$ , a representação de  $f(x) \in L^2(\mathbb{R})$  na base *scaling*, à escala  $j$ , é

$$f_j(x) = \sum_{n=0}^{2^j-1} c_{j,n} \phi_{j,n}(x). \quad (2.94)$$

Pela tabela 2.1 pode deduzir-se que  $f_j(x) = f_{j+1}(x) + d_{j+1}(x)$ . A função  $f_{j+1}(x)$  pode ser escrita como combinação linear de funções *scaling* à escala  $j+1$  e a função  $d_{j+1}(x)$  pode ser escrita como combinação linear de funções *wavelets* à mesma escala.

Se são necessárias  $2^j$  funções de base para representar  $f(x)$  na base *scaling* à escala  $j$ , então para a representar à escala  $j+1$  será necessário metade do número de funções de base, isto é,  $2^{j-1}$ . E tem-se

$$f_{j+1}(x) = \sum_{m=0}^{2^{j-1}-1} c_{j+1,m} \phi_{j+1,m}(x). \quad (2.95)$$

É necessário igual número de funções de base para representar  $d_{j+1}(x)$  na base *wavelet*, então

$$d_{j+1}(x) = \sum_{m=0}^{2^{j-1}-1} d_{j+1,m} \psi_{j+1,m}(x). \quad (2.96)$$

Assim, a representação de  $f(x)$  à escala  $j$  pode relacionar-se com a sua representação à escala  $j+1$  como

$$f_j(x) = \sum_{m=0}^{2^{j-1}-1} c_{j+1,m} \phi_{j+1,m}(x) + \sum_{m=0}^{2^{j-1}-1} d_{j+1,m} \psi_{j+1,m}(x). \quad (2.97)$$

Para conhecer o aspecto da transformação ortogonal entre as duas bases é necessário relacionar  $\phi_{j,n}(x)$  com  $\phi_{j+1,m}(x)$  e  $\psi_{j+1,m}(x)$ . Tendo em conta que  $V_j = V_{j+1} \oplus W_{j+1}$ ,  $\phi_{j,n}(x)$  pode ser escrita como

$$\phi_{j,n}(x) = \sum_m a_m \phi_{j+1,m}(x) + \sum_m b_m \psi_{j+1,m}(x), \quad (2.98)$$

onde

$$a_m := \int \phi_{j+1,m}(x)\phi_{j,n}(x)dx$$

por (2.92),

$$\begin{aligned} &= \sum_k h_k \int \phi_{j,2m+k}(x)\phi_{j,n}(x)dx \\ &= \sum_k h_k \delta_{2m+k,n} \\ &= h_{n-2m} \end{aligned}$$

e

$$b_m := \int \psi_{j+1,m}(x)\phi_{j,n}(x)dx$$

por (2.93),

$$\begin{aligned} &= \sum_k g_k \int \phi_{j,2m+k}(x)\phi_{j,n}(x)dx \\ &= \sum_k g_k \delta_{2m+k,n} \\ &= g_{n-2m}. \end{aligned}$$

Então,

$$\phi_{j,n}(x) = \sum_m h_{n-2m}\phi_{j+1,m}(x) + \sum_m g_{n-2m}\psi_{j+1,m}(x). \quad (2.99)$$

Substituindo  $\phi_{j,n}(x)$  em (2.94) pela igualdade (2.99), vem

$$f_j(x) = \sum_{n=0}^{2^J-1} c_{j,n} \sum_m h_{n-2m}\phi_{j+1,m}(x) + \sum_{n=0}^{2^J-1} c_{j,n} \sum_m g_{n-2m}\psi_{j+1,m}(x). \quad (2.100)$$

Comparando (2.100) com (2.97), obtém-se

$$c_{j+1,m} = \sum_{n=0}^{2^J-1} h_{n-2m}c_{j,n} \quad (2.101)$$

e

$$d_{j+1,m} = \sum_{n=0}^{2^J-1} g_{n-2m}c_{j,n}. \quad (2.102)$$

Por (2.59), as equações (2.101) e (2.102) ficam

$$c_{j+1,m} = \sum_{n=2m}^{2m+2K-1} h_{n-2m} c_{j,n} \quad (2.103)$$

e

$$d_{j+1,m} = \sum_{n=2m}^{2m+2K-1} g_{n-2m} c_{j,n}, \quad (2.104)$$

onde  $K$  é a ordem das *wavelets*. Os  $c_{j,n}$  são os coeficientes de expansão na base de partida e da aplicação de uma DWT resultam os coeficientes  $c_{j+1,m}$  e  $d_{j+1,m}$ .

Os  $c_{j,n}$  e o conjunto dos  $c_{j+1,m}$  e dos  $d_{j+1,m}$  podem também ser entendidos como elementos de vectores de comprimento  $2^J$ . Neste sentido, os  $h_{m-2n}$  e os  $g_{m-2n}$  são elementos de uma matriz de transformação.

Como a sequência inicial dos  $c_{j,n}$  tem um comprimento finito (determinado pelo número de funções de base que se escolhe usar), é necessário saber como tratar os pontos fronteiros. Uma escolha possível e frequentemente adoptada é considerar a extensão periódica do vector, isto é

$$c_{j,k+2^J} = c_{j,k}, \quad \forall k \in \mathbb{Z}. \quad (2.105)$$

As expressões (2.103) e (2.104) podem ser escritas em notação matricial. Consideremos, por exemplo,  $J = 3$  e as *wavelets* de Daubechies de ordem  $K = 2$ . Para este exemplo temos  $N = 2^3 = 8$  funções de base, ou igual número de coeficientes  $c_{j,n}$  e metade de coeficientes  $c_{j+1,m}$ . Portanto,  $0 \leq n \leq 7$  e  $0 \leq m \leq 3$  e aplicam-se três sucessivas transformações *wavelets* até ficar apenas um coeficiente,  $c_{j+3,0}$ , pertencente ao espaço das aproximações e todos os outros pertencentes ao espaço dos detalhes. Cada vez que se aplica um passo da transformação *wavelet* está a efectuar-se uma mudança de escala. Assim, para este exemplo, temos três mudanças de escala, tal que

a primeira pode ser representada por:

$$\begin{pmatrix} c_{j+1,0} \\ c_{j+1,1} \\ c_{j+1,2} \\ c_{j+1,3} \\ d_{j+1,0} \\ d_{j+1,1} \\ d_{j+1,2} \\ d_{j+1,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 \\ h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 \\ g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 \\ g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{j,0} \\ c_{j,1} \\ c_{j,2} \\ c_{j,3} \\ c_{j,4} \\ c_{j,5} \\ c_{j,6} \\ c_{j,7} \end{pmatrix}. \quad (2.106)$$

A segunda mudança de escala é

$$\begin{pmatrix} c_{j+2,0} \\ c_{j+2,1} \\ d_{j+2,0} \\ d_{j+2,1} \\ d_{j+1,0} \\ d_{j+1,1} \\ d_{j+1,2} \\ d_{j+1,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 \\ g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{j+1,0} \\ c_{j+1,1} \\ c_{j+1,2} \\ c_{j+1,3} \\ d_{j+1,0} \\ d_{j+1,1} \\ d_{j+1,2} \\ d_{j+1,3} \end{pmatrix}. \quad (2.107)$$

Sucintamente, os coeficientes de expansão na base *scaling* são transformados, após as três sucessivas mudanças de escala provocadas pela aplicação

de transformações *wavelet*, como se segue:

$$\begin{pmatrix} c_{j,0} \\ c_{j,1} \\ c_{j,2} \\ c_{j,3} \\ c_{j,4} \\ c_{j,5} \\ c_{j,6} \\ c_{j,7} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} c_{j+1,0} \\ c_{j+1,1} \\ c_{j+1,2} \\ c_{j+1,3} \\ d_{j+1,0} \\ d_{j+1,1} \\ d_{j+1,2} \\ d_{j+1,3} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} c_{j+2,0} \\ c_{j+2,1} \\ d_{j+2,0} \\ d_{j+2,1} \\ d_{j+1,0} \\ d_{j+1,1} \\ d_{j+1,2} \\ d_{j+1,3} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} c_{j+3,0} \\ d_{j+3,0} \\ d_{j+2,0} \\ d_{j+2,1} \\ d_{j+1,0} \\ d_{j+1,1} \\ d_{j+1,2} \\ d_{j+1,3} \end{pmatrix}. \quad (2.108)$$

É importante mencionar que em aplicações práticas, a matriz de transformação *wavelet*,  $W$ , correspondente à DWT, tem uma organização diferente das matrizes anteriores embora equivalente. Isso implica que o algoritmo é ligeiramente diferente, no sentido em que, em cada passo, os elementos do vector têm de ser reordenados de modo a separar os coeficientes  $c_{j,k}$  dos  $d_{j,k}$ . Por exemplo, para as *wavelets* de Daubechies de ordem 2 terá o seguinte aspecto:

$$W = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 \\ h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & h_0 & h_1 \\ g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & g_0 & g_1 \end{pmatrix}. \quad (2.109)$$

A razão desta forma alternativa provém da implementação da transformação *wavelet* como banco de filtros [11].

Com a matriz (2.109), os coeficientes de expansão na base *scaling* são

transformados alternadamente em coeficientes do espaço das aproximações e coeficientes do espaço dos detalhes. O algoritmo que usa essa matriz agrupará, em seguida, os coeficientes do espaço das aproximações de modo que fiquem consecutivos para serem, novamente, alvo da aplicação transformação *wavelet*.

A cada mudança de escala a parte do vector sujeito à próxima transformação *wavelet* é reduzida para metade, visto a transformação apenas recair sobre os coeficientes do espaço das aproximações. Além do vector, também a matriz de transformação passa a ter a sua dimensão reduzida para metade. Por isso aparecem elementos “1” na matriz, em (2.107).

Na linguagem matricial, a transformação *wavelet* englobando todas as mudanças de escala será representada pelo produto de todas as matrizes *wavelets* utilizadas em cada transformação. No capítulo 5, quando se fala de “transformação *wavelet*” já se estão a considerar todas as mudanças de escala, mas apesar disso usar-se-á  $W$  representar a matriz *wavelet* “global”.

Para uma análise deste tipo ser útil, deve ser possível reconstruir o vector original. Uma reconstrução perfeita é possível porque a transformação é ortogonal, o que significa que a transposta é igual à sua inversa, ou seja,

$$W^{-1} = W^T = \begin{pmatrix} h_0 & g_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & h_2 & g_2 \\ h_1 & g_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & h_3 & g_3 \\ h_2 & g_2 & h_0 & g_0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_3 & g_3 & h_1 & g_1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & h_2 & g_2 & h_0 & g_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & h_3 & g_3 & h_1 & g_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & h_2 & g_2 & h_0 & g_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & h_3 & g_3 & h_1 & g_1 \end{pmatrix}. \quad (2.110)$$



Por isso tem-se,

$$W^T W = \mathbf{1}. \quad (2.111)$$

Pela sua estrutura, ou seja, porque a transformação *wavelet* é sucessivamente aplicada apenas ao conjunto de coeficientes do espaço das aproximações, é por vezes designado de algoritmo piramidal rápido e é fácil ver, por (2.108), porque resta apenas um coeficiente  $c_{j+3,0}$ , que a eficiência da sua implementação é maximizada se o comprimento do vector de partida for um número diádico.

Façamos, entretanto, uma pequena incursão pelas *wavelets* de Haar para ilustrar todo o mecanismo de implementação da transformação *wavelet* e interpretar o significado dos coeficientes de expansão nas bases *scaling* e de multiresolução.

#### EXEMPLO DE TRANSFORMAÇÃO WAVELET DE HAAR

Voltemos ao exemplo, referente à figura 2.7, usado para introduzir a análise em multiresolução. Como já vimos, a “função caixa“, desse exemplo, é a função *scaling* de Haar definida por (2.40).

Suponhamos que a grandeza física medida, nesse exemplo, é a intensidade do som e que os valores de intensidade obtidos correspondem ao vector:

$$\mathbf{s} = (3, 1, 0, 4, 8, 6, 9, 9). \quad (2.112)$$

Uma função  $f(x)$  que se ajusta a esses valores pode ser representada por funções *scaling* a partir dos pontos da amostra. Para isso, usam-se tantas funções *scaling* quantos os valores da amostra, tal como é ilustrado na figura 2.7 (c). A representação de  $f(x)$ , a uma escala de partida  $j = -3$ , em termos

de funções *scaling* de Haar fica:

$$\begin{aligned} f(x) = & 3\phi_{-3,0}(x) + 1\phi_{-3,1}(x) + 0\phi_{-3,2}(x) + 4\phi_{-3,3}(x) + \\ & 8\phi_{-3,4}(x) + 6\phi_{-3,5}(x) + 9\phi_{-3,6}(x) + 9\phi_{-3,7}(x). \end{aligned} \quad (2.113)$$

Vemos claramente que os valores da amostra correspondem aos coeficientes de expansão na base *scaling* e são esses os valores aos quais é aplicada a transformação *wavelet* para obter os coeficientes de expansão na base de multiresolução.

A função *wavelet* de Haar dada por (2.29), que representamos aqui por  $\psi_{0,0}(x)$ , pode ser definida em termos de funções *scaling* como

$$\psi_{0,0}(x) := \phi_{-1,0}(x) - \phi_{-1,1}(x). \quad (2.114)$$

Vejam os caso geral de uma função  $\tilde{f}$  representada por duas funções *scaling*:

$$\tilde{f}(x) = c_0\phi_{-1,0}(x) + c_1\phi_{-1,1}(x). \quad (2.115)$$

As funções  $\phi_{-1,0}(x)$  e  $\phi_{-1,1}(x)$  podem ser substituídas por combinações lineares das funções  $\phi_{0,0}(x)$  e  $\psi_{0,0}(x)$ , onde a função *wavelet* é definida por (2.114). A representação (2.115) de  $\tilde{f}$  fica

$$\begin{aligned} \tilde{f} &= \frac{c_0}{2}(\phi_{0,0}(x) + \psi_{0,0}(x)) + \frac{c_1}{2}(\phi_{0,0}(x) - \psi_{0,0}(x)) \\ &= \frac{c_0 + c_1}{2}\phi_{0,0}(x) + \frac{c_0 - c_1}{2}\psi_{0,0}(x) \\ &= c'\phi_{0,0}(x) + d'\psi_{0,0}(x). \end{aligned} \quad (2.116)$$

O que acabamos de fazer é a transformação *wavelet* de Haar. Podemos concluir que esta transformação fornece informação sobre a média,  $c'$ , e a diferença,  $d'$ , de cada dois coeficientes, consecutivos, de projecção na base *scaling* de partida, neste caso os coeficientes  $c_0$  e  $c_1$ . A média é dada pelo coeficiente correspondente à função *scaling* após a transformação; a diferença é dada pelo coeficiente correspondente à função *wavelet*. Por isso, o espaço

ao qual pertencem as funções *scaling* é chamado espaço das aproximações e o espaço ao qual pertencem as funções *wavelet* espaço dos detalhes.

No caso concreto do vector de dados (2.112), como tem oito elementos a transformação *wavelet* é aplicada três vezes, tal como em (2.108), até restar apenas um coeficiente de projecção correspondente ao espaço das aproximações. Analisemos cada um desses passos em pormenor e para facilitar o entendimento, usaremos uma notação que especifica o número de vezes que a transformação *wavelet* é aplicada e qual o passo que está a ser analisado. Assim, tem-se

$$\mathbf{s}^{(3)} \equiv \mathbf{s} = (3, 1, 0, 4, 8, 6, 9, 9), \quad (2.117)$$

onde o 3 em  $\mathbf{s}^{(3)}$  representa o número de vezes que a transformação *wavelet* é aplicada.

#### 1º Passo

$$\begin{aligned} \mathbf{s}^{(3-1)} &= \left( \frac{3+1}{2}, \frac{3-1}{2}, \frac{0+4}{2}, \frac{0-4}{2}, \frac{8+6}{2}, \frac{8-6}{2}, \frac{9+9}{2}, \frac{9-9}{2} \right) \\ &= (\mathbf{2}, 1, \mathbf{2}, -2, \mathbf{7}, 1, \mathbf{9}, 0) \end{aligned} \quad (2.118)$$

onde 3-1 em  $\mathbf{s}^{(3-1)}$  representa a primeira das três aplicações da transformação *wavelet* e os elementos do vector a negrito correspondem aos coeficientes do espaço das aproximações aos quais é aplicada novamente a transformação *wavelet*.

O vector  $\mathbf{s}^{(3-1)}$  pode ser armazenado como

$$\mathbf{s}^{(3-1)} = (\mathbf{c}^{(3-1)}; \mathbf{d}^{(3-1)}) = (\mathbf{2}, \mathbf{2}, \mathbf{7}, \mathbf{9}; 1, -2, 1, 0), \quad (2.119)$$

onde  $\mathbf{c}^{(3-1)}$  e  $\mathbf{d}^{(3-1)}$  correspondem, respectivamente, aos vectores do espaço das aproximações e do espaço dos detalhes após uma aplicação da transformação *wavelet*.

2º Passo

$$\begin{aligned}
\mathbf{s}^{(3-2)} &= \left( \frac{2+2}{2}, \frac{2-2}{2}, \frac{7+9}{2}, \frac{7-9}{2}; 1, -2, 1, 0 \right) \\
&= (2, 0, 8, -1; 1, -2, 1, 0) \\
&= (2, 8; 0, -1; 1, -2, 1, 0) \\
&= (\mathbf{c}^{(3-2)}; \mathbf{d}^{(3-2)}; \mathbf{d}^{(3-1)}),
\end{aligned}$$

onde  $\mathbf{c}^{(3-2)}$  e  $\mathbf{d}^{(3-2)}$  correspondem, respectivamente, aos vectores do espaço das aproximações e do espaço dos detalhes após a segunda aplicação da transformação *wavelet*.

Por fim, a transformação *wavelet* é aplicada a  $\mathbf{c}^{(3-2)}$ .

3º Passo

$$\begin{aligned}
\mathbf{s}^{(3-3)} &= \left( \frac{2+8}{2}, \frac{2-8}{2}; 0, -1; 1, -2, 1, 0 \right) \\
&= (5; -3; 0, -1; 1, -2, 1, 0) \\
&= (\mathbf{c}^{(3-3)}; \mathbf{d}^{(3-3)}; \mathbf{d}^{(3-2)}; \mathbf{d}^{(3-1)}),
\end{aligned}$$

onde  $\mathbf{c}^{(3-3)}$  e  $\mathbf{d}^{(3-3)}$  correspondem, respectivamente, aos vectores do espaço das aproximações e do espaço dos detalhes após a terceira aplicação da transformação *wavelet*.

Com este último exemplo, vemos que qualquer vector de dados pode ser visto como um conjunto de coeficientes de expansão numa base *scaling* de partida, que podem ser transformados em coeficientes de expansão numa base de multiresolução após a aplicação sucessivas de transformações *wavelets*. Se em vez de termos um vector tivermos uma matriz de dados, por exemplo, correspondente a uma imagem onde os elementos da matriz podem representar as intensidades de cor cinzenta num plano, a aplicação da transformação *wavelet* é aplicada de forma ligeiramente diferente. Para ver em que difere, focar-nos-emos nas *wavelets* a duas dimensões.

### 2.2.6 Wavelets a duas dimensões

A análise de uma função com duas variáveis pressupõe o uso de *wavelets* a duas dimensões e não as unidimensionais tratadas até então. Para estender a aplicação a mais do que uma dimensão constrói-se a função *scaling*, associada a uma função *wavelet* a duas dimensões, como o produto de duas funções *scaling* unidimensionais associadas a cada uma das variáveis. Com isso, a transformação *wavelet* a duas dimensões pode ser implementada sem grandes dificuldades. Entretanto, as equações *scaling* e *wavelet* a duas dimensões, bem como a transformação *wavelet* a duas dimensões são obtidas a partir das funções *scaling* e *wavelet* a uma dimensão e das respectivas equações.

Partindo de

$$\phi(x, y) = \phi(x)\phi(y), \quad (2.120)$$

onde se escolheu, por simplicidade, o mesmo símbolo  $\phi$  para as funções *scaling* a uma e a duas dimensões, e recorrendo à equação *scaling* unidimensional, pode obter-se a equação *scaling* a duas dimensões como se segue

$$\begin{aligned} \phi(x, y) &= (\sqrt{2} \sum_k h_k \phi(2x - k)) \cdot (\sqrt{2} \sum_l h_l \phi(2y - l)) \\ &= 2 [h_0 \phi(2x) + h_1 \phi(2x - 1) + \dots + h_{2K-1} \phi(2x - 2K + 1)] \\ &\quad [h_0 \phi(2y) + h_1 \phi(2y - 1) + \dots + h_{2K-1} \phi(2y - 2K + 1)] \\ &= 2 [h_0^2 \phi(2x) \phi(2y) + h_0 h_1 \phi(2x) \phi(2y - 1) + \dots + \\ &\quad h_0 h_{2K-1} \phi(2x) \phi(2y - 2K + 1) + h_1 h_0 \phi(2x - 1) \phi(2y) + \\ &\quad h_1^2 \phi(2x - 1) \phi(2y - 1) + \dots + \\ &\quad h_1 h_{2K-1} \phi(2x - 1) \phi(2y - 2K + 1) + \dots + \\ &\quad h_{2K-1} h_0 \phi(2x - 2K + 1) \phi(2y) + \\ &\quad h_{2K-1} h_1 \phi(2x - 2K + 1) \phi(2y - 1) + \dots + \\ &\quad h_{2K-1}^2 \phi(2x - 2K + 1) \phi(2y - 2K + 1)] = \end{aligned}$$

recorrendo à relação (2.120), tem-se

$$\begin{aligned}\phi(x, y) &= 2 [h_0^2 \phi(2x, 2y) + h_0 h_1 \phi(2x, 2y - 1) + \cdots + \\ &\quad h_{2K-1}^2 \phi(2x - 2K + 1, 2y - 2K + 1)] \\ &= 2 \sum_k \sum_l h_k h_l \phi(2x - k, 2y - l).\end{aligned}$$

Portanto, a equação *scaling* a duas dimensões é

$$\phi(x, y) = 2 \sum_{k,l} h_{kl} \phi(2x - k, 2y - l), \quad (2.121)$$

onde,  $h_{kl} = h_k h_l$ . Para obter a equação *wavelet* a duas dimensões o procedimento é análogo, contudo, não basta considerar a função *wavelet* a duas dimensões como o produto de duas *wavelets* unidimensionais correspondentes a cada uma das variáveis. É necessário juntar também os casos em que a cada uma das variáveis está associada uma função *scaling*. Deste modo, temos três equações *wavelet* correspondentes às funções *wavelet* definidas como

$$\psi^{(I)}(x, y) = \phi(x)\psi(y) \quad (2.122)$$

$$\psi^{(II)}(x, y) = \psi(x)\phi(y) \quad (2.123)$$

$$\psi^{(III)}(x, y) = \psi(x)\psi(y). \quad (2.124)$$

E as respectivas equações *wavelet* são:

$$\psi^{(I)}(x, y) = 2 \sum_{k,l} g_{kl}^{[I]} \phi(2x - k, 2y - l) \quad (2.125)$$

$$\psi^{(II)}(x, y) = 2 \sum_{k,l} g_{kl}^{[II]} \phi(2x - k, 2y - l) \quad (2.126)$$

$$\psi^{(III)}(x, y) = 2 \sum_{k,l} g_{kl}^{[III]} \phi(2x - k, 2y - l), \quad (2.127)$$

onde  $g_{kl}^{[I]} = h_k g_l$ ,  $g_{kl}^{[II]} = g_k h_l$  e  $g_{kl}^{[III]} = g_k g_l$ .

Na prática a transformação *wavelet* a duas dimensões corresponde a aplicar uma transformação *wavelet* "unidimensional" às linhas da matriz de dados e uma segunda transformação *wavelet* "unidimensional" às colunas da

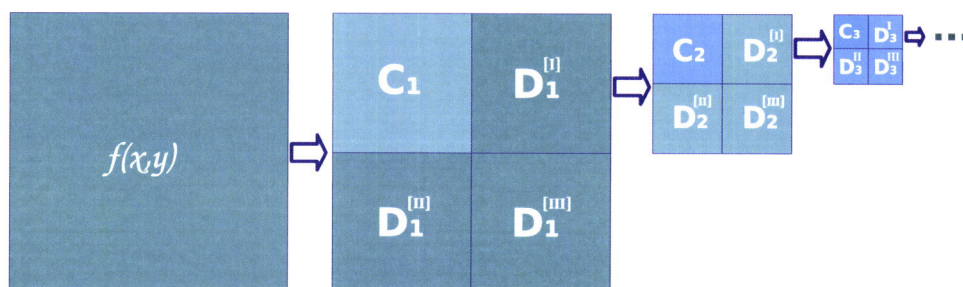


Figura 2.13: Ilustração de como são transformados os elementos de uma matriz pela aplicação da DWT.

matriz que resulta da primeira aplicação. O conjunto destas duas aplicações correspondem a uma mudança de escala. Representar uma função  $f(x, y)$ , que se ajusta aos valores de uma matriz de dados, na base de multiresolução significa aplicar sucessivas transformação *wavelet* “bidimensional” aos coeficientes de expansão na base *scaling* de partida, ou seja, aos elementos da matriz.

Cada passo do algoritmo que aplica *wavelets* a matrizes engloba duas etapas. O que resulta do primeiro passo é uma matriz dividida em quatro partes. No primeiro quadrante estão os coeficientes do espaço das aproximações aos quais será aplicada a transformação *wavelet* “bidimensional” no segundo passo. Os restantes elementos de matriz correspondem a detalhes. As sucessivas mudanças de escala que os coeficientes de expansão sofrem estão representadas na figura 2.13 à semelhança do que foi feito para vectores na sequência (2.108).

No caso das *wavelets* de Haar, a interpretação da transformação *wavelet* “bidimensional” é a que se segue.

No quadrante superior esquerdo são armazenados os valores correspondentes às médias de cada dois elementos adjacentes das colunas obtidas a partir das médias efectuadas sobre cada dois elementos das linhas da matriz

original.

O quadrante inferior direito armazena as diferenças entre cada dois valores adjacentes das colunas obtidas a partir das diferenças de cada dois elementos adjacentes das linhas da matriz original.

No quadrante superior direito encontram-se os elementos correspondentes às médias dos detalhes. Enquanto o quadrante que resta engloba os detalhes das médias.

À semelhança do que foi feito para uma dimensão, o segundo passo do algoritmo é repetir o procedimento apenas à parte que contém as médias, ou seja, ao quadrante superior esquerdo. A matriz fica assim com as suas dimensões reduzidas a metade após a primeira aplicação da transformação *wavelet* “bidimensional”.





## Capítulo 3

# Descrição não-relativista de sistemas de dois nucleões

As *wavelets* são, no âmbito deste trabalho, aplicadas na resolução de uma equação integral cuja solução é a energia e a função de onda do deuterão. Usa-se a equação obtida de uma descrição não-relativista, por isso considera-se que a interacção entre as partículas que constituem o deuterão se estabelece por um potencial de interacção. É, portanto, fundamental para a resolução do problema saber de que propriedades físicas do sistema depende o potencial.

Numa primeira análise, uma aproximação grosseira da forma do potencial pode ser suficiente para testar o uso de *wavelets* na resolução de equações integrais de sistemas nucleares. O termo mais simples que é necessário incluir num potencial de ensaio é um termo central de curto alcance independente do spin dos nucleões. É isso o que se faz inicialmente neste trabalho recorrendo ao potencial de Malfliet-Tjon V, embora se use depois um potencial mais realista, o potencial Paris. Para perceber o que é um potencial realista que descreve o deuterão é útil fazer algumas considerações gerais

sobre as propriedades de sistemas de dois nucleões, seja o estado ligado ou a dispersão.

### 3.1 Algumas considerações sobre os sistemas de dois nucleões

Hoje ainda não se conhece a forma do potencial de interacção nucleão-nucleão em todos os pormenores. O que tem vindo a ser desenvolvido são aproximações que sucessivamente melhor se ajustam às observações efectuadas.

De observações do deuterão e da dispersão nucleão-nucleão pode extrair-se informação sobre de que propriedades físicas do sistema depende o potencial. O comportamento de sistemas nucleares é bem descrito pela mecânica quântica não relativista a energias da ordem dos 10 ou 20 MeV [17]. Neste contexto, quando se fala em energias relativamente baixas refere-se essencialmente a este domínio de energias.

A partir de observações do deuterão conclui-se que o potencial deve ter uma componente central independente do spin, mas também uma componente tensorial. Já se se analisar a dispersão neutrão-protão, a energias relativamente baixas, conclui-se que se deve incluir ainda uma componente central que dependa do spin [18]. Esta constatação provém também do facto de não ser observado nenhum estado ligado de singuleto, isto é com spin total  $S=0$ , do sistema neutrão-protão [19]. Entretanto, da dispersão protão-protão a energias mais elevadas e da dispersão de nucleões polarizados resulta que termos de interacção spin-órbita devem também ser adicionados [18]. Para além disso, o potencial deve tornar-se repulsivo para distâncias pequenas ( $\lesssim 0.5$  fm [19]) de modo a garantir que o sistema nucleão-nucleão não colapse. Por outro lado, da grande semelhança entre a dispersão neutrão-protão e protão-protão pode concluir-se que o potencial nuclear é aproximadamente

independente da carga eléctrica.

Algumas das propriedades observadas do deuterão são:

- Massa:  $m=2.01410222(7)$  u;
- Energia do estado ligado:  $E=-2.22464(4)$  MeV;
- Spin total:  $S=1$ ;
- Momento angular total:  $J=1$ ;
- Momento quadrupolar:  $Q_D = 2.86 \times 10^{-27}$  cm<sup>2</sup>;
- Momento magnético:  $\mu = 0.8574376 \mu_N$ ,

onde  $\mu_N$  é o magnetão nuclear.

O spin do deuterão igual a 1 significa que se encontra num estado de tripleto. Como os spins do próton e do neutrão são iguais a  $\frac{1}{2}$ , da sua combinação para formar o estado ligado neutrão-próton pode resultar  $S=1$  ou  $S=0$ . No entanto, não se observa nenhum estado ligado com spin 0. O estado  $S=1$  chama-se tripleto porque são possíveis as três projecções  $M_S = -1, 0$  e  $1$ .

O momento angular total,  $J$ , e o spin total,  $S$ , obtidos das observações experimentais levam aos valores possíveis para o momento angular orbital,  $L$ . Conhecendo  $S$  e  $L$ , os valores possíveis para  $J$  são os que satisfazem a relação  $|L - S| \leq J \leq L + S$ . Usando essa relação, também é possível determinar os valores de  $L$  permitidos quando  $S=1$  e  $J=1$ . As combinações permitidas estão apresentadas na tabela 3.1. Como se pode ver na referida tabela,  $L=0, 1$  ou  $2$  combinados com  $S=1$  podem originar um estado com  $J=1$ . Da álgebra dos momentos angulares e sem tomar em conta outras observações, resulta que o estado em que se encontra o deuterão podia ser uma combinação linear dos estados<sup>1</sup>  $^3S_1$ ,  $^3P_1$  e  $^3D_1$ . Espera-se que seja

<sup>1</sup>A notação "espectroscópica" é igual à usada na Física Atómica:  $^{2S+1}L_J$ .

Valores possíveis para J: $ L - S  \leq J \leq L + S$		
S	L	J
1	0	1
	1	0, 1 e 2
	2	1, 2 e 3
	3	2, 3 e 4

Tabela 3.1: Combinações de momentos angulares L e S com S=1 para obter J=1. Para L=3 não existe nenhuma combinação com S=1 que resulte J=1.

predominantemente um estado S porque este não possui barreira centrífuga e assim é minimizado o valor de energia do estado ligado.

A paridade é uma grandeza preservada pela interacção nuclear. Quando aplicada a operação de paridade à função de onda do deuterão, esta é multiplicada por um factor  $(-1)^L$ . Então L=0 só pode ser combinado com L=2, porque o estado  $L = 1$  tem paridade diferente.

Em termos experimentais é possível determinar se o sistema apresenta simetria esférica ou não. O que permite saber se a simetria é esférica ou se há desvios a essa forma é o momento quadrupolar. Desde que se meça um momento quadrupolar diferente de zero, o sistema não apresenta exactamente uma simetria esférica.

O deuterão tem um momento quadrupolar de  $2.86 \times 10^{-27} \text{ cm}^2$ . Este valor por si só indica que o estado do deuterão não apresenta uma simetria esférica exacta. Quando comparado o momento quadrupolar do deuterão com a área da superfície esférica<sup>2</sup> que o deuterão ocuparia se fosse esfericamente simétrico e cujo valor é cerca de  $600 \times 10^{-27} \text{ cm}^2$ , verifica-se que é muito inferior. Isto significa que o desvio à simetria esférica é muito pe-

<sup>2</sup>A área da superfície esférica é calculada a partir de um raio médio de 4.3 fm, para o deuterão, obtido experimentalmente [20].

queno, mas leva a que se procure a razão desse desvio. Conclui-se que o estado do deutério seja uma mistura dos estados  ${}^3S_1$  e  ${}^3D_1$ , onde o segundo estado que se considera terá uma contribuição muito pequena.

Para obter uma ideia quantitativa acerca do peso do estado  ${}^3D_1$  relativamente ao estado  ${}^3S_1$  comparamos o momento magnético observado,  $\mu_{obs} = 0.8574376 \mu_N$ , com o momento magnético correspondente à soma dos momentos magnéticos do próton e do neutrão. Sendo o deutério um estado de tripleto relativamente ao spin, o momento magnético é calculado para o caso em que a componente  $M_J$  é máxima, ou seja, quando os spins do próton e do neutrão são "paralelos".

Para  $L=0$ , o momento magnético é determinado a partir de

$$\mu_{(L=0)} = \frac{1}{2} \mu_N (g_{sn} + g_{sp}) = 0.879804 \mu_N$$

com  $g_{sn} = -3.826084$  e  $g_{sp} = 5.585691$ , onde  $g_{sn}$  e  $g_{sp}$  são, respectivamente, a razão giromagnética do neutrão e do próton.

Portanto, se admitirmos que não há contribuição orbital para o momento magnético, verificamos que os valores observado e calculado são próximos, mas com uma discrepância que leva a crer que exista uma contribuição adicional.

Quando se considera uma sobreposição de estados  $L=0$  e  $L=2$ , chega-se ao valor observado para o momento magnético se se considerarem respectivamente os pesos aproximados de 96% e 4% para cada estado. Isto é feito considerando o momento magnético anteriormente calculado para  $L=0$  e calculando o momento magnético para  $L=2$  como

$$\mu_{(L=2)} = \frac{1}{4} \mu_N (3 - g_{sn} - g_{sp}) = 0.31009825 \mu_N.$$

Introduzindo os valores de  $\mu_{obs}$ ,  $\mu_{(L=0)}$  e de  $\mu_{(L=2)}$  em

$$\mu_{obs} = P_S \mu_{(L=0)} + P_D \mu_{(L=2)},$$

obtêm-se as probabilidades aproximadas  $P_S$  e  $P_D$  referidas anteriormente.

A função de onda total  $\psi_T$  do deuterão consiste, então, na soma de uma onda S e uma onda D.

### 3.2 Dedução da equação integral para o deuterão

A equação de Lippmann-Schwinger para o estado ligado  $|\psi\rangle$  é

$$|\psi\rangle = G_0(E)V|\psi\rangle, \quad (3.1)$$

onde  $V$  é o potencial,  $G_0(E) = \frac{1}{E-H_0}$  é o propagador e  $H_0$  é o hamiltoniano livre.

A equação (3.1) deve ser representada numa base de estados para poder ser resolvida. A base é formada pelos estados próprios de um conjunto completo de operadores. Um conjunto de operadores é completo quando inclui todos os operadores comutáveis associados aos graus de liberdade do sistema em questão.

O espaço total em que o deuterão é descrito tem de incluir o espaço “externo”, que aqui vamos considerar ser o espaço dos momentos, e o espaço associado aos graus de liberdade internos: ao spin e ao isospin. Portanto, o espaço total,  $\xi_T$ , é o produto tensorial do espaço dos momentos,  $\xi_p$ , do espaço do spin,  $\xi_s$ , e do espaço do isospin,  $\xi_\tau$ , ou seja

$$\xi_T = \xi_p \otimes \xi_s \otimes \xi_\tau. \quad (3.2)$$

Operadores de espaços diferentes comutam, então começamos por considerar os operadores comutáveis para cada um dos três espaços em separado e em seguida acoplamos as bases formadas pelos seus estados próprios.

No espaço dos momentos, um sistema de dois nucleões, no referencial de laboratório, tem a energia cinética

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2}, \quad (3.3)$$

onde os índices 1 e 2 se referem ao próton e ao neutrão,  $p_i$  e  $m_i$ , com  $i=1,2$ , são respectivamente o momento linear e a massa de cada uma das partículas.

Este problema de dois corpos pode ser transformado num sistema efetivo de um corpo sujeito a um potencial. Para isso, escreve-se  $H_0$  em termos do momento do centro de massa e do momento relativo

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{p_{cm}^2}{2M}, \quad (3.4)$$

onde,  $p_r = \frac{m_2 p_1 - m_1 p_2}{m_1 + m_2}$  é o módulo do momento relativo,  $p_{cm} = p_1 + p_2$  o módulo do momento do centro de massa,  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  a massa reduzida e  $M = m_1 + m_2$  a massa total.

O hamiltoniano livre,  $H_0$ , assume a sua forma mais simples no referencial do centro de massa, onde  $p_{cm} = 0$ , ou seja,

$$H_0 = \frac{p_r^2}{2\mu}. \quad (3.5)$$

E a equação de Lippmann-Schwinger, para o referencial do centro de massa, fica

$$|\psi\rangle = \frac{V}{E - \frac{p^2}{2\mu}} |\psi\rangle, \quad (3.6)$$

onde  $p \equiv p_r$  é o módulo do momento relativo do sistema.

Vejamos agora quais os kets de base no espaço dos momentos, no espaço dos spins e no espaço dos isospins.

No espaço dos momentos, o ket de base, em coordenadas esféricas, é

$$|\mathbf{p}\rangle = |p\theta\phi\rangle,$$

e tem a condição de normalização

$$\int d\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = 1, \quad (3.7)$$

onde,  $d\mathbf{p} = p^2 dp \sin\theta d\theta d\phi$ .



O ket  $|\mathbf{p}\rangle$  pode ser decomposto em ondas parciais, como

$$|p\theta\phi\rangle = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M_L=-L}^L |pL M_L\rangle \langle pL M_L|p\theta\phi\rangle, \quad (3.8)$$

onde  $\langle pL M_L|p\theta\phi\rangle \equiv Y_{LM_L}(\theta,\phi)$  são os harmônicos esféricos. Os estados próprios de  $p$ ,  $\mathbf{L}^2$  e  $L_z$ , os kets  $|pL M_L\rangle$ , formam um conjunto completo, que se manifesta na resolução de identidade

$$\int dp p^2 \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M_L=-L}^L |pL M_L\rangle \langle pL M_L| = 1. \quad (3.9)$$

No espaço dos spins, um conjunto completo é obtido a partir do produto tensorial dos kets de base associados ao grau de liberdade interno de spin de cada partícula,  $|S_1 M_{S1}\rangle$  e  $|S_2 M_{S2}\rangle$ , que são os estados próprios de  $\mathbf{S}_i^2$  e  $S_{zi}$ , com  $i=1,2$ , respectivamente para a partícula 1 e 2. Ou seja,

$$|S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle = |S_1 M_{S1}\rangle |S_2 M_{S2}\rangle. \quad (3.10)$$

O ket  $|S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle$  é estado próprio dos operadores  $\mathbf{S}_1^2$ ,  $S_{z1}$ ,  $\mathbf{S}_2^2$  e  $S_{z2}$ , ou seja,

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_1^2 |S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle &= \hbar^2 S_1(S_1 + 1) |S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle \\ S_{1z} |S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle &= \hbar M_{S1} |S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle \\ \mathbf{S}_2^2 |S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle &= \hbar^2 S_2(S_2 + 1) |S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle \\ S_{2z} |S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle &= \hbar M_{S2} |S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle. \end{aligned}$$

No entanto,  $|S_1 M_{S1} S_2 M_{S2}\rangle$  constitui uma base não acoplada, o que não é muito útil para o deuterão porque os operadores  $S_{1z}$  e  $S_{2z}$  não comutam com o hamiltoniano  $H = H_0 + V$ . É mais útil considerar uma base acoplada cujos kets são estados próprios do operador spin total,  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ . Mais concretamente, o ket de base  $|S M_S S_1 S_2\rangle$  que é estado próprio de  $\mathbf{S}^2$ ,  $S_z$ ,

$\mathbf{S}_1^2$  e  $\mathbf{S}_2^2$ , ou seja

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 |S M_S S_1 S_2\rangle &= \hbar^2 S(S+1) |S M_S S_1 S_2\rangle \\ S_z |S M_S S_1 S_2\rangle &= \hbar M_S |S M_S S_1 S_2\rangle \\ \mathbf{S}_1^2 |S M_S S_1 S_2\rangle &= \hbar^2 S_1(S_1+1) |S M_S S_1 S_2\rangle \\ \mathbf{S}_2^2 |S M_S S_1 S_2\rangle &= \hbar^2 S_2(S_2+1) |S M_S S_1 S_2\rangle. \end{aligned}$$

Como ambas as bases  $|S_1 M_{S_1} S_2 M_{S_2}\rangle$  e  $|S M_S S_1 S_2\rangle$  pertencem ao mesmo espaço vectorial, uma pode ser expressa como combinação linear da outra e os vectores da base acoplada podem ser obtidos a partir da base não acoplada. Assim tem-se,

$$|S M_S S_1 S_2\rangle = \sum_{M_{S_1} M_{S_2}} |S_1 M_{S_1} S_2 M_{S_2}\rangle \langle S_1 M_{S_1} S_2 M_{S_2} | S M_S S_1 S_2\rangle \quad (3.11)$$

onde  $\langle S_1 M_{S_1} S_2 M_{S_2} | S M_S S_1 S_2\rangle$  são os coeficientes de Clebsch-Gordon. A soma é apenas sobre  $M_{S_1}$  e  $M_{S_2}$  já que  $S_1$  e  $S_2$  são fixos porque ambas as bases consistem de estados próprios de  $\mathbf{S}_1^2$  e  $\mathbf{S}_2^2$ .

O isospin,  $T$ , é uma grandeza física associada ao estado de carga eléctrica das partículas nucleares. O conceito de isospin foi criado por analogia formal com o conceito de spin [18]. No espaço de isospin o protão e o neutrão correspondem a estados diferentes da mesma partícula, o nucleão. Este possui isospin  $T = \frac{1}{2}$  e a sua projecção  $T_z$  é  $+\frac{1}{2}$  para o protão e  $-\frac{1}{2}$  para o neutrão.

A álgebra do isospin é análoga àquela considerada para o spin, sendo, no entanto, o espaço dos isospins um espaço abstracto. Podemos construir uma base acoplada,  $|T M_T T_1 T_2\rangle$ , a partir de uma outra não acoplada,  $|T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle$ , que por sua vez é resultado do produto tensorial  $|T_1 M_{T_1}\rangle |T_2 M_{T_2}\rangle$ , onde  $|T_i M_{T_i}\rangle$  com  $i=1,2$  são os estados próprios conhecidos de  $\mathbf{T}_i^2$ ,  $T_{zi}$  de cada uma das partículas.

A base não acoplada corresponde aos kets próprios de  $\mathbf{T}_1^2$ ,  $T_{z1}$ ,  $\mathbf{T}_2^2$ ,  $T_{z2}$ ,

ou seja,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{T}_1^2 |T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle &= T_1(T_1 + 1) |T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle \\
 T_{1z} |T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle &= M_{T_1} |T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle \\
 \mathbf{T}_2^2 |T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle &= T_2(T_2 + 1) |T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle \\
 T_{2z} |T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle &= M_{T_2} |T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle.
 \end{aligned}$$

A base acoplada, por sua vez, corresponde aos kets próprios de  $\mathbf{T}^2$ ,  $T_z$ ,  $\mathbf{T}_1^2$  e  $\mathbf{T}_2^2$ , ou seja,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{T}^2 |T M_T T_1 T_2\rangle &= T(T + 1) |T M_T T_1 T_2\rangle \\
 T_z |T M_T T_1 T_2\rangle &= M_T |T M_T T_1 T_2\rangle \\
 \mathbf{T}_1^2 |T M_T T_1 T_2\rangle &= T_1(T_1 + 1) |T M_T T_1 T_2\rangle \\
 \mathbf{T}_2^2 |T M_T T_1 T_2\rangle &= T_2(T_2 + 1) |T M_T T_1 T_2\rangle.
 \end{aligned}$$

A base acoplada,  $|T M_T T_1 T_2\rangle$ , é obtida a partir da base não acoplada,  $|T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle$ , através da combinação linear

$$|T M_T T_1 T_2\rangle = \sum_{M_{T_1} M_{T_2}} |T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2}\rangle \langle T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2} | T M_T T_1 T_2 \rangle, \quad (3.12)$$

onde  $\langle T_1 M_{T_1} T_2 M_{T_2} | T M_T T_1 T_2 \rangle$  são os coeficientes de Clebsch-Gordon.

Posto isto, os kets de base para o espaço dos momentos, para o espaço dos spins e para o espaço dos isospins, são, respectivamente,  $|p L M_L\rangle$ ,  $|S M_S S_1 S_2\rangle$  e  $|T M_T T_1 T_2\rangle$ . Os operadores  $L_z$  e  $S_z$  não comutam com o hamiltoniano, como tal  $M_L$  e  $M_S$  não são bons números quânticos. Convém, portanto, acoplar o momento angular orbital e o spin para formar um momento angular total  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ , cuja projecção  $M_J$  é conservada. Isso é feito da mesma forma ao que foi antes apresentado, por exemplo, para o acoplamento dos spins individuais das partículas para obter o spin total do deutério.

Os kets da base não acoplada,  $|L M_L S M_S\rangle$ , são os estados próprios de  $\mathbf{L}^2$ ,  $L_z$ ,  $\mathbf{S}^2$  e  $S_z$ , ou seja,

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^2 |L M_L S M_S\rangle &= \hbar^2 L(L+1) |L M_L S M_S\rangle \\ \mathbf{S}^2 |L M_L S M_S\rangle &= \hbar^2 S(S+1) |L M_L S M_S\rangle \\ L_z |L M_L S M_S\rangle &= \hbar M_L |L M_L S M_S\rangle \\ S_z |L M_L S M_S\rangle &= \hbar M_S |L M_L S M_S\rangle.\end{aligned}$$

A base acoplada,  $|J M_J L S\rangle$ , é obtida a partir da combinação linear de kets da base não acoplada, ou seja,

$$|J M_J L S\rangle = \sum_{M_L M_S} |L M_L S M_S\rangle \langle L M_L S M_S | J M_J L S\rangle, \quad (3.13)$$

onde  $\langle L M_L S M_S | J M_J L S\rangle$  são os coeficientes de Clebsch-Gordon.

A base acoplada corresponde aos kets próprios de  $\mathbf{J}^2$ ,  $J_z$ ,  $\mathbf{L}^2$  e  $\mathbf{S}^2$ , ou seja,

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2 |J M_J L S\rangle &= \hbar^2 J(J+1) |J M_J L S\rangle \\ J_z |J M_J L S\rangle &= \hbar M_J |J M_J L S\rangle \\ \mathbf{L}^2 |J M_J L S\rangle &= \hbar^2 L(L+1) |J M_J L S\rangle \\ \mathbf{S}^2 |J M_J L S\rangle &= \hbar^2 S(S+1) |J M_J L S\rangle.\end{aligned}$$

Por fim, o produto tensorial de  $|J M_J L S\rangle$  com  $|T M_T T_1 T_2\rangle$  origina a base  $|J M_J L S T M_T\rangle$ . Os dois nucleões do deutério formam um sistema de férmions idênticos, cuja função de onda deve ser anti-simétrica sob a troca das duas partículas. Estados S e D, tal como tripletos do spin são simétricos, o que deixa para o isospin apenas uma combinação anti-simétrica permitida pelo princípio de Pauli.

O isospin total,  $T$ , de dois nucleões é 0 ou 1, mas só o singuleto,  $T = 0$ , é anti-simétrico. Portanto, o isospin do  $T = 0$ , com  $M_T = 0$ .

O ket de base para o espaço total em que é descrito o deuterão é  $|p J M_J L S T M_T\rangle$  e deve ser satisfeita a resolução de identidade

$$\int dp p^2 \sum_{\alpha} |p \alpha\rangle \langle p \alpha| = 1, \quad (3.14)$$

onde se introduziu a abreviação  $|p \alpha\rangle \equiv |p J M_J L S T M_T\rangle$ .

Para resolver a equação de Lippmann-Schwinger para o deuterão, a equação (3.1) é representada na base  $|p \alpha\rangle$ ,

$$\begin{aligned} \langle p \alpha | \psi \rangle &= \langle p \alpha | G_0 V | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{E - \frac{p^2}{m}} \langle p \alpha | V | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde se substitui  $2\mu$  pela massa,  $m$ , do nucleão que se considera a média das massas do próton e do neutrão. A razão dessa substituição deve-se a:  $m_p \simeq m_n \simeq m \simeq 2\mu$ , onde  $m_p$  e  $m_n$  são, respectivamente, as massas do próton e do neutrão.

Inserindo a resolução de identidade (3.14) em (3.15), tem-se uma representação da equação integral do deuterão

$$\langle p \alpha | \psi \rangle = \frac{1}{E - \frac{p^2}{m}} \int dp' p'^2 \sum_{\alpha'} \langle p \alpha | V | p' \alpha' \rangle \langle p' \alpha' | \psi \rangle. \quad (3.16)$$

A equação (3.16) assume aspectos diferentes para o potencial Malfliet-Tjon V e para o potencial Paris. Uma diferença entre eles é que o potencial Paris admite a sobreposição das ondas S e D, enquanto o Malfliet-Ton V é mais próximo de um potencial de ensaio, por não admitir a existência da onda D.

### 3.2.1 Potencial Malfliet-Tjon V

Nos finais da década de 1960, Malfliet e Tjon construíram uma série de potenciais, muito simplificados, para descrever a interacção nucleão-nucleão com o objectivo de facilitar cálculos de teste em sistemas de três nucleões

[21]. Os potenciais (um por cada onda parcial) eram constituídos por apenas dois termos do tipo Yukawa: um que descrevia a repulsão a distâncias pequenas e outro que descrevia a atracção a distâncias maiores. Com quatro parâmetros, era possível reproduzir aproximadamente propriedades grosseiras da dispersão nucleão-nucleão nas ondas parciais  $^1S_0$  e  $^3S_1$ , tais como o comprimento de dispersão e o alcance efectivo; e a energia do deutério na onda parcial  $^3S_1$  (sendo o acoplamento da onda  $^3D_1$  desprezada).

O potencial de Malfliet-Tjon V corresponde a uma média dos potenciais Malfliet-Tjon I, para a onda parcial  $^1S_0$ , e Malfliet-Tjon III, para a onda parcial  $^3S_1$  [21]. Portanto, o potencial Malfliet-Tjon V pode ser considerado como uma aproximação tanto do potencial em  $^1S_0$  como do potencial em  $^3S_1$ , o que simplifica, em muito, cálculos de três nucleões. Contudo, não reproduz tão bem como os potenciais individuais, as propriedades da dispersão, nem a energia do deutério, que fica -0.35 MeV em vez de -2.22 MeV. Hoje em dia, esse potencial é apenas usado para fazer cálculos de ensaio e comparar técnicas diferentes.

A escolha do potencial Malfliet-Tjon V como potencial de ensaio, neste trabalho, deveu-se ao facto de ter sido também usado na anterior aplicação de *wavelets* à dispersão nucleão-nucleão, por Polyzou e colaboradores, e dessa forma podermos ter uma referência para a aplicação de *wavelets* ao estado ligado.

O potencial de Malfliet-Tjon V resulta, portanto, da soma de duas componentes do tipo Yukawa,

$$V(p, p') = \sum_{i=1}^2 \frac{\lambda_i}{2\pi p p'} \ln \left( \frac{\mu_i^2 + p^2 + p'^2 + 2pp'}{\mu_i^2 + p^2 + p'^2 - 2pp'} \right), \quad (3.17)$$

cujos parâmetros são apresentados no quadro que se segue.

Parâmetros para o potencial Malfliet-Tjon V	
$1/m$	$41.47 MeV fm^2$
$\lambda_1$	$-570.316 MeV fm$
$\lambda_2$	$1438.4812 MeV fm$
$\mu_1$	$1.55 fm^{-1}$
$\mu_2$	$3.11 fm^{-1}$

Para este potencial, os elementos de matriz para os números quânticos do deuterão são da forma

$$\langle p \alpha | V | p' \alpha' \rangle = \delta_{\alpha \alpha'} V(p, p'),$$

com  $J=1$ ,  $L=0$ ,  $S=1$  e  $T=0$ , porque só admite uma onda S sem acoplamento da onda D.

Então, a equação integral do deuterão resume-se a

$$\psi(p) = \int_0^\infty dp' p'^2 \frac{V(p, p')}{E - \frac{p'^2}{m}} \psi(p'). \quad (3.18)$$

### 3.2.2 Potencial Paris

O potencial Paris foi publicado em 1973 e representa uma tentativa para construir um modelo realista da interação entre dois nucleões baseado na troca de mesões. No potencial, são considerados os mecanismos da troca de um pião, de dois píões (correlacionados e não correlacionados) e de um mesão ômega. O potencial, para cada estado do isospin total, era constituído por cinco componentes: central, spin-spin, tensorial, spin-órbita e spin-órbita quadrática [22].

Com estas características o potencial Paris descrevia, bastante bem, observáveis experimentais da dispersão nucleão-nucleão e do deuterão. No entanto, o potencial tinha ainda propriedades que dificultavam a sua aplicação em cálculos para sistemas com mais que dois nucleões. Para resolver este

problema, o potencial foi reformulado, nos finais dos anos de 1970, através de uma parameterização analítica simples regularizada por termos de Yukawa [22]. Nesta reformulação foi feito um tratamento fenomenológico para distâncias menores que 0.8 fm [22]. O alcance da interação pela troca de mesões depende inversamente da massa da partícula trocada. Então, para distâncias inferiores a 0.8 fm deveriam ser tomados em conta mesões mais pesados e graus de liberdade de quarks e gluões, o que tornava o problema praticamente intratável. Esse argumento está na base do tratamento fenomenológico efectuado na reformulação do potencial Paris.

O potencial Paris utilizado neste trabalho corresponde à referida versão reformulada. Para este potencial,

$$\langle p \alpha | V | p' \alpha' \rangle = \delta_{J J'} \delta_{M_J M_{J'}} \delta_{S S'} \delta_{T T'} V_{L, L'}(p, p')$$

com  $J=1$ ,  $S=1$ ,  $T=0$  e  $L=0$  ou  $2$  porque admite o estado  ${}^3S_1$  e o estado  ${}^3D_1$ .

Então, a equação integral do deuterão é

$$\psi_L(p) = \sum_{L'=0,2} \int_0^\infty dp' p'^2 \frac{V_{L, L'}(p, p')}{E - \frac{p'^2}{m}} \psi_{L'}(p'). \quad (3.19)$$

Embora, hoje em dia, o potencial Paris já esteja ultrapassado, em relação à qualidade com que descreve muitos dos dados experimentais disponíveis, é incomparavelmente mais realista do que o potencial Malfiet-Tjon V. Foi, por nós, escolhido por estar disponível um programa de computador que calcula os seus elementos de matriz. No entanto, a razão principal para fazer cálculos com um outro potencial para além do Malfiet-Tjon V não era para melhor reproduzir a energia do deuterão (o que é irrelevante neste contexto), mas porque achámos importante verificar o funcionamento do método *wavelet* para um caso com ondas parciais acopladas.

No capítulo que se segue é descrita a aplicação de *wavelets* para resolver as equações integrais (3.18) e (3.19) do deuterão, respectivamente, usando o potencial de Malfiet-Tjon V e o potencial Paris. Antes, no entanto, de



descrever a aplicação de *wavelets* é explicado sucintamente o método de integração numérica que servirá de referência. O método de referência é o método de quadratura de Gauss-Legendre.

## Capítulo 4

# *Wavelets* e a equação integral do deuterão

Neste trabalho, o estudo da utilização de *wavelets* na resolução da equação integral do deuterão tem por base a análise em multiresolução: a equação é escrita na base *scaling* e daí resulta um sistema de equações lineares homogéneo que é transformado para a base de multiresolução através de uma transformação *wavelet*. Uma vez nessa base, e tendo em conta o carácter de multiresolução da mesma, são eliminados coeficientes de expansão correspondentes a detalhes e o sistema de equações é resolvido. A este procedimento chamamos método *wavelet*, o qual é usado na resolução das equações integrais (3.18) e (3.19), respectivamente, para os potenciais Malfliet-Tjon V e Paris.

Como referência foi escolhido um método de integração numérica que usa a regra de quadratura de Gauss-Legendre. O método consiste na discretização da variável de integração, a qual toma como valores os pontos (discretos) de quadratura, tornando a equação integral também num sistema de equações lineares homogéneo. A este chamamos método Gauss-Legendre.

Em seguida, procedemos à descrição mais pormenorizada de como imple-

mentar os métodos de referência e *wavelet* na resolução da equação integral (3.18) do deutério, que usa o potencial Malfiet-Tjon V.

## 4.1 Método Gauss-Legendre

A regra de quadratura de Gauss-Legendre<sup>1</sup> consiste em aproximar um integral de uma função a um somatório como:

$$\int_{-1}^1 f(u)du \approx \sum_{i=1}^{N_{gl}} w_i f(u_i) \quad (4.1)$$

onde:  $u_i$  são os chamados pontos de quadratura que, neste caso, correspondem às raízes dos polinômios de Legendre de  $i$ -ésimo grau  $P_i(u)$ ;  $w_i$  são os pesos da quadratura calculados a partir do pontos  $u_i$ ; e  $N_{gl}$  é o número de pontos Gauss-Legendre.

O intervalo de integração de (3.18) é  $[0, +\infty)$ , então para aplicar a regra de quadratura (4.1) faz-se a mudança de variável

$$u \equiv u(p) := \frac{p - p_0}{p + p_0} \quad \rightarrow \quad du = \frac{2p_0}{(p + p_0)^2} dp, \quad (4.2)$$

onde  $p_0$  é uma constante que pode ser arbitrariamente escolhida.

A regra de quadratura (4.1) fica

$$\int_0^\infty \tilde{f}(p) \frac{2p_0}{(p + p_0)^2} dp \approx \sum_{i=1}^{N_{gl}} \tilde{w}_i \tilde{f}(p_i), \quad (4.3)$$

onde os pontos e os pesos de quadratura sofrem a transformação

$$u_i \quad \rightarrow \quad p_i = p_0 \frac{1 + u_i}{1 - u_i} \quad (4.4)$$

$$w_i \quad \rightarrow \quad \tilde{w}_i = w_i \frac{2p_0}{(p_i + p_0)^2}. \quad (4.5)$$

A escolha de  $p_0$  permite influenciar a distribuição dos pontos  $p_i$ , uma vez que metade dos pontos  $p_i$  são inferiores a  $p_0$  e a outra metade são superiores.

---

<sup>1</sup>Mais sobre a regra de quadratura de Gauss-Legendre pode ver-se, por exemplo, em [23], pp. 390 – 391.

A equação integral (3.18) discretizada pela regra de quadratura (4.3) toma a forma

$$\psi_i = \sum_{j=1}^{N_{gt}} \tilde{w}_j p_j^2 \frac{V_{ij}}{E - \frac{p_i^2}{m}} \psi_j \quad (4.6)$$

onde se fez  $\psi_i \equiv \psi(p_i)$  e  $V_{ij} \equiv V(p_i, p_j)$ . Daqui resulta o sistema de equações lineares homogêneo para o método de referência usando o potencial Malfliet-Tjon V:

$$\sum_{j=1}^{N_{gt}} \left( \tilde{w}_j p_j^2 \frac{V_{ij}}{E - \frac{p_i^2}{m}} - \delta_{ij} \right) \psi_j = 0. \quad (4.7)$$

A resolução do sistema (4.7) é discutida no capítulo 5. De (4.7) extrai-se não só a energia de ligação,  $E$ , do deuteron, como também se obtém directamente a função de onda  $\psi(p)$  nos pontos  $p = p_i$ .

Utilizando o potencial Paris, o sistema de equações lineares, que se obtém aplicando a regra de quadratura de Gauss-Legendre à equação integral (3.19), toma a forma

$$\sum_{L'=0,2}^{N_{gt}} \sum_{j=1}^{N_{gt}} \left( \tilde{w}_j p_j^2 \frac{V_{ij}^{LL'}}{E - \frac{p_i^2}{m}} - \delta_{ij} \delta_{LL'} \right) \psi_j^{L'} = 0, \quad (4.8)$$

onde  $V_{ij}^{LL'} \equiv V_{LL'}(p_i, p_j)$ .

## 4.2 Método *wavelet*

Antes de escrever a equação integral (3.18) na base *scaling* torna-se finito o intervalo de integração, de  $[0, \infty)$  para  $[0, b]$ , usando a mudança de variável

$$u \equiv u(p) := b \frac{p}{1+p} \longrightarrow p \equiv p(u) := \frac{u}{b-u}, \quad dp = \frac{b}{b-u} du, \quad (4.9)$$

onde  $b$  corresponde ao limite superior do intervalo de integração. Considerando

$$\psi(p) \longrightarrow \tilde{\psi}(u) = \psi(p(u))$$

e

$$V(p, p') \longrightarrow \tilde{V}(u, v) = V(p(u), p(v)),$$

a equação integral (3.18) fica

$$\tilde{\psi}(u) = \int_0^b dv \frac{bv^2}{(b-v)^4} \frac{\tilde{V}(u,v)}{E - \frac{u^2}{m(b-u)^2}} \tilde{\psi}(v). \quad (4.10)$$

Em seguida, escreve-se a equação integral (4.10) na base *scaling*. Tendo em conta que o tamanho do suporte das funções de base, para a escala  $j = 0$ , é  $2K - 1$ , onde  $K$  é a ordem das *wavelets* de Daubechies, apenas as funções  $\phi_{0,n}(u)$  com  $-(2K - 2) \leq n \leq b - 1$  contribuem para representar a função de onda entre 0 e  $b$ . Então, a representação de  $\tilde{\psi}(u)$  na base *scaling* pode escrever-se como

$$\tilde{\psi}(u) \simeq \sum_{n=-2K+2}^{b-1} \tilde{f}_n \phi_n(u), \quad (4.11)$$

onde são necessárias  $b + 2K - 2$  funções de base e considera-se  $\phi_{0,n}(u) \equiv \phi_n(u)$ , omitindo-se o índice  $j = 0$ , por se estar a uma escala fixa.

Substituindo (4.11) em (4.10), tem-se

$$\sum_{n=-2K+2}^{b-1} \tilde{f}_n \phi_n(u) = \sum_{n=-2K+2}^{b-1} \int_0^b dv \frac{bv^2}{(b-v)^4} \frac{\tilde{V}(u,v)}{E - \frac{u^2}{m(b-u)^2}} \tilde{f}_n \phi_n(v). \quad (4.12)$$

Entretanto, com base na ortogonalidade da funções *scaling*, multiplica-se (4.12) por  $\phi_m(u)$  e integra-se entre 0 e  $b$ :

$$\begin{aligned} \sum_{n=-2K+2}^{b-1} \tilde{f}_n \int_0^b \phi_m(u) \phi_n(u) du = \\ \sum_{n=-2K+2}^{b-1} \int_0^b du \int_0^b dv \phi_m(u) \tilde{k}(u,v) \phi_n(v) \tilde{f}_n, \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde se fez

$$\tilde{k}(u,v) \equiv \frac{bv^2}{(b-v)^4} \frac{\tilde{V}(u,v)}{E - \frac{u^2}{m(b-u)^2}}. \quad (4.14)$$

Definindo

$$N_{mn} := \int_0^b \phi_m(u) \phi_n(u) du, \quad (4.15)$$

onde se vê que  $N_{mn} = N_{nm}$ , a equação (4.13) fica

$$\sum_{n=-2K+2}^{b-1} \left( N_{mn} - \int_0^b du \int_0^b dv \phi_m(u) \tilde{k}(u,v) \phi_n(v) \right) \tilde{f}_n = 0. \quad (4.16)$$

Os integrais da equação (4.16) são avaliados usando a regra de quadratura de um ponto (2.87) agora com uma função integranda a duas dimensões,

$$\int_0^b du \int_0^b dv \phi_m(u) \tilde{k}(u, v) \phi_n(v) = w_m \tilde{k}(u_m, v_n) w_n, \quad (4.17)$$

onde  $u_m$  e  $v_n$  são os pontos de quadratura e  $w_m$  e  $w_n$  são os respectivos pesos, em que os índices  $m$  e  $n$  correspondem a translações da função scaling.

Desse modo, tem-se o sistema de equações lineares homogêneo obtido pelo método *wavelet* usando o potencial Malfiet-Tjon V:

$$\sum_{n=-2K+2}^{b-1} (N_{mn} - w_m \tilde{k}_{mn} w_n) \tilde{f}_n = 0, \quad (4.18)$$

onde  $\tilde{k}_{mn} \equiv \tilde{k}(u_m, v_n)$ .

Pela ortogonalidade das funções *scaling*, temos  $N_{mn} = \delta_{mn}$  desde que  $Sup \phi_m(u) \subset [0, b]$  e  $Sup \phi_n(u) \subset [0, b]$ . Quando  $Sup \phi_m(u)$  e/ou  $Sup \phi_n(u)$  sobrepõe(m) um dos limites de integração (0 ou  $b$ ), ou seja, quando

$$-2K+2 \leq k < 0 \quad \text{ou} \quad b-2K+2 \leq k < b, \quad \text{com} \quad k = m \text{ e/ou } n, \quad (4.19)$$

os  $N_{mn}$  são calculados resolvendo sistemas de equações lineares resultantes da aplicação da equação *scaling* (2.36) a (4.15). Isto é,

$$\begin{aligned} N_{mn} &:= \int_0^b \phi(u-m)\phi(u-n)du \\ &= \sum_{l=0}^{2K-1} \sum_{l'=0}^{2K-1} h_l h_{l'} 2 \int_0^b \phi(2u-2m-l)\phi(2u-2n-l')du \\ &= \sum_{l=0}^{2K-1} \sum_{l'=0}^{2K-1} h_l h_{l'} \int_0^{2b} \phi(u-2m-l)\phi(u-2n-l')du, \quad (4.20) \end{aligned}$$

onde se aplicou a mudança de variável  $y = 2u$  e se redefiniu  $y \rightarrow u$ .

De (4.20) obtém-se a equação

$$N_{mn}^{0,b} = \sum_{l=0}^{2K-1} \sum_{l'=0}^{2K-1} h_l h_{l'} N_{2m+l, 2n+l'}^{0,2b}, \quad (4.21)$$

onde os índices superiores se referem ao intervalo de integração.

A equação (4.21) permite calcular directamente os  $N_{mn}$  quando as funções *scaling* sobrepõem o limite inferior de integração, mas, por condições de simetria, também permitem calcular os  $N_{mn}$  quando as funções *scaling* sobrepõem o limite superior. Pode ver-se no apêndice B como isso se faz.

Para já, consideremos que as funções *scaling* sobrepõem o limite inferior de integração (e apenas só este!). Para garantir que a sobreposição ocorre apenas no limite inferior, considera-se o limite superior,  $b$ , suficientemente grande. Quando há sobreposição do suporte da função *scaling*, o tamanho máximo da parte do suporte que está dentro do intervalo de integração é  $2K - 2$ . O valor de  $b$  deve ser no mínimo igual ao dobro de  $2K - 2$ .

Sendo  $b \geq 2(2K - 2)$  e o suporte das funções *scaling*  $2K - 1$ , integrar o produto de duas funções *scaling* em  $[0, b]$ , quando se está a considerar a sua sobreposição com o ponto zero, dá o mesmo resultado que integrar em  $[0, 2b]$ . A equação (4.21) é, portanto, o sistema de equações lineares

$$N_{mn} = \sum_{l=0}^{2K-1} \sum_{l'=0}^{2K-1} h_l h_{l'} N_{2m+l, 2n+l'}, \quad (4.22)$$

onde se omitem os índices superiores por poderem ser considerados 0 e  $b$  em ambos os lados.

Para a resolução do sistema de equações (4.22), os índices de translação,  $m$  e  $n$ , da função *scaling* só podem tomar certos valores de forma a satisfazer simultaneamente as três condições seguintes:

- o suporte de pelo menos uma das funções *scaling* deve sobrepor o ponto zero;
- o suporte de ambas as funções *scaling* deve sobrepor-se;
- a sobreposição do suporte de ambas as funções deve estar pelo menos parcialmente contida no intervalo de integração.

As combinações de  $m$  e  $n$  que satisfazem as condições anteriores, para as funções *scaling* de Daubechies de ordem 2 e 3, são:

$K = 2$

$m$	-2	-2	-2	-1	-1	-1
$n$	-2	-1	0	-1	0	1

$K = 3$

$m$	-4	-4	-4	-4	-4	-3	-3	-3	-3	-2	-2	-2	-1	-1
$n$	-4	-3	-2	-1	0	-3	-2	-1	0	-2	-1	0	-1	0

Os  $N_{mn}$  obtidos para as combinações de  $m$  e  $n$  apresentadas nos quadros acima estão na tabela 4.1.

Em suma, os  $N_{mn}$  são  $\delta_{mn}$  para os casos em que  $Sup \phi_m(u) \subset [0, b]$  e  $Sup \phi_n(u) \subset [0, b]$ , e são os apresentados na tabela 4.1 para as combinações de  $m$  e  $n$  que levam a que pelo menos uma das funções *scaling* sobreponha o limite inferior de integração, onde se deve ter em conta a igualdade  $N_{mn} = N_{nm}$ . Para os restantes casos os  $N_{mn}$  são nulos.

No caso de haver sobreposição do suporte da função *scaling* no limite superior, os  $N_{mn}$  são calculados com base na relação

$$N_{mn} + N_{b+m, b+n} = \delta_{mn}, \quad (4.23)$$

onde  $N_{b+m, b+n}$  correspondem aos valores obtidos quando se considera o limite superior de integração,  $b$ . Este resultado foi obtido através da comparação entre os valores de  $N_{mn}$  obtidos perto do limite inferior do integral e perto do limite superior. A forma como são calculados os  $N_{mn}$  perto dos limites inferior e superior de integração é tratada em mais pormenor no apêndice B.

Conhecendo os  $N_{mn}$  e sabendo que avaliamos os integrais do sistema de equações lineares (4.16) usando a regra de quadratura de um ponto, o sistema (4.18) já pode ser resolvido através de técnicas convencionais.



$N_{mn}$	
$K = 2$	$K = 3$
$N_{-2,-2} = 0.00427361653411$	$N_{-4,-4} = 0.00000216035839$
$N_{-2,-1} = -0.02061965392490$	$N_{-4,-3} = -0.00000680242491$
$N_{-1,-1} = 0.17094028798236$	$N_{-4,-2} = 0.00007249390649$
	$N_{-4,-1} = 0.00055148111790$
	$N_{-3,-3} = 0.00169526464364$
	$N_{-3,-2} = 0.00657735220968$
	$N_{-3,-1} = 0.01810044826376$
	$N_{-2,-2} = 0.04390883406382$
	$N_{-2,-1} = -0.11828115035221$
	$N_{-1,-1} = 0.51476683575241$

Tabela 4.1: Valores de  $N_{mn}$  para  $K = 2$  e  $K = 3$  quando pelo menos uma das funções *scaling* sobrepõe o limite inferior de integração. É de salientar que  $N_{mn} = N_{nm}$ .

Para o potencial Paris, o sistema de equações lineares, que se obtém após escrever a equação integral (3.19) na base *scaling* como descrito anteriormente para o potencial Malfiet-Tjon  $V$ , é

$$\sum_{L'=0,2} \sum_{n=-2K+2}^{b-1} \left( N_{mn} \delta_{LL'} - w_m \tilde{k}_{mn}^{LL'} w_n \right) \tilde{f}_n^{L'} = 0, \quad (4.24)$$

onde  $\tilde{k}_{mn}^{LL'} \equiv \tilde{k}_{LL'}(u_m, v_n)$ .

A diferença entre os sistemas de equações lineares para ambos os potenciais resulta de o potencial Paris apresentar uma dependência do momento angular orbital.

Pelo método de referência, a resolução do sistema de equações lineares (4.7) fornece directamente a função de onda. Por outro lado, o que se obtém da resolução do sistema de equações lineares (4.18) são os coeficientes de expansão da função de onda na base *scaling*. Assim, conhecendo a função

*scaling* pode obter-se a função de onda do deutério. No entanto, calcular a função *scaling* é difícil e isso não foi feito neste trabalho. Então, é necessário ver como construir a função de onda do deutério a partir do método *wavelet* sem recorrer às funções *scaling* propriamente ditas.

#### 4.2.1 Construção da função de onda

A função de onda constrói-se a partir da equação (3.18), que pode ser escrita como

$$\psi(p) = \int_0^\infty dp' k(p, p') \psi(p'), \quad (4.25)$$

com  $k(p, p') = p'^2 \frac{V(p, p')}{E - \frac{p'^2}{m}}$ .

Começa por se escrever  $\psi(p')$  na base *scaling* com os coeficientes  $f_n$  já conhecidos,

$$\psi(p') = \sum_n f_n \phi_n(p') \quad (4.26)$$

e substitui-se (4.26) na equação integral (4.25). Então tem-se

$$\psi(p) = \sum_n f_n \int_0^\infty dp' k(p, p') \phi_n(p'). \quad (4.27)$$

O integral que aparece em (4.27) é avaliado usando outra vez a regra de quadratura de um ponto

$$\int_0^\infty k(p, p') \phi_n(p') dp' = k(p, p'_n) w_n. \quad (4.28)$$

Então a equação (4.27) fica

$$\psi(p) = \sum_n f_n k(p, p'_n) w_n, \quad (4.29)$$

onde os coeficientes  $f_n$  são os obtidos da resolução do sistema de equações lineares (4.18),  $w_n = \tau_n^{(0)}$  e uma vez que para chegar a (4.18) se fez a mudança de variável (4.9), em (4.29) também se tem em conta a mesma mudança de variável, de tal modo que  $-2K + 2 \leq n \leq b - 1$ ,  $p'_n := \frac{u_n}{b - u_n}$  e os  $\tau_n^{(0)}$  são calculados conforme a tabela 2.5.

A função de onda construída a partir da base *scaling* por (4.29) ainda não está normalizada. Para a normalizar calcula-se

$$\int_0^{\infty} p^2 |\psi(p)|^2 dp = A. \quad (4.30)$$

A função de onda normalizada é então

$$\psi_{norm}(p) = \frac{1}{\sqrt{A}} \psi(p). \quad (4.31)$$

Já que (4.29) permite calcular a função de onda para qualquer argumento  $p$ , a maneira mais simples para calcular o integral (4.30) é através de uma regra de quadratura de Gauss-Legendre,

$$\int_0^{\infty} p^2 |\psi(p)|^2 dp = \sum_{i=1}^{N_{gl}} p_i^2 |\psi(p_i)|^2 \tilde{w}_i. \quad (4.32)$$

Daqui para a frente chama-se simplesmente  $\psi(p)$  à função de onda normalizada. E sempre que se fala de função de onda pressupõe-se que já está normalizada.

## Capítulo 5

# Resolução numérica da equação integral do deutério

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados provenientes da resolução numérica da equação integral de Lippmann-Schwinger para o deutério por dois métodos diferentes. No primeiro método, a variável contínua da integração é discretizada através da aplicação da regra de quadratura de Gauss-Legendre. No segundo método, a função de onda e o *kernel* da equação integral são expandidos numa base *scaling* e transformados para uma base de multiresolução pela aplicação da transformação *wavelet*.

O primeiro método é o método de Gauss-Legendre e o outro o método *wavelet*. Em ambos os casos, a equação integral transforma-se num sistema de equações lineares homogêneo que pode ser resolvido pelos métodos numéricos convencionais. A condição para a existência de uma solução não trivial do sistema também determina a energia do estado ligado.

No método Gauss-Legendre, as soluções do sistema de equações lineares são os valores da função de onda para valores particulares do argumento, enquanto no método *wavelet* as soluções são coeficientes de expansão que permitem calcular a função de onda para qualquer argumento desejado.

O que se pretende é comparar a energia do estado ligado do deutério e a respectiva função de onda obtidas usando o método *wavelet* com as obtidas usando o método Gauss-Legendre.

Sistemas de equações lineares podem ser expressos, mais sucintamente, na forma matricial como o produto de uma matriz por um vector. Seja  $M$  uma matriz e  $\mathbf{X}$  um vector, um sistema de equações lineares homogêneo pode ser escrito como

$$M\mathbf{X} = \mathbf{0}. \quad (5.1)$$

O método *wavelet* consiste em transformar sistemas do tipo de (5.1), obtidos após representação da equação de Lippmann-Schwinger na base *scaling*, para a base de multiresolução, por meio de uma transformação ortogonal que usa *wavelets*, e tornar nulos elementos da nova matriz que sejam menores, em valor absoluto, que um limiar. Neste sentido, a matriz na base de multiresolução é tornada esparsa, isto é, numa matriz com muitos elementos zero. A posterior resolução do sistema de equações nessa base devolve um resultado aproximado. Pretende-se analisar quão próximo esse resultado é do obtido com o método de referência de discretização de Gauss-Legendre.

Embora represente um ligeiro abuso de linguagem, falaremos daqui para a frente em 'eliminar elementos de matriz' em vez de 'tornar nulos elementos de matriz'.

Numa primeira instância, são apresentadas, na secção 5.1, as energias obtidas da resolução dos sistemas de equações (4.7) e (4.8), respectivamente, para os potenciais Malfliet-Tjon V e Paris, usando o método Gauss-Legendre. Na secção 5.2, estão as energias provenientes da resolução dos sistemas (4.18) e (4.24), respectivamente, para os potenciais Malfliet-Tjon V e Paris, usando o método *wavelet*.

Adicionalmente, na secção 5.3, são apresentadas as energias obtidas da resolução do sistema de equações (4.7), para o potencial Malfliet-Tjon V,

usando uma simplificação do método *wavelet*. No método *wavelet* simplificado discretiza-se a equação integral pela regra de quadratura de Gauss-Legendre (para evitar, e veremos porquê, formulá-la na base *scaling*) e aplica-se uma transformação *wavelet* directamente ao sistema de equações que resulta da discretização.

Por fim, na secção 5.4, são comparadas as funções de onda do deutério obtidas pelos três métodos discutidos.

## 5.1 Método Gauss-Legendre

Para obter uma solução não trivial dos sistemas (4.7) e (4.8) escritos na forma matricial como (5.1), o determinante da matriz deve ser zero. Em todos os casos a resolver, a matriz  $M$  é uma função da energia. Escrevamo-la como  $M(E)$ . Portanto, temos de encontrar (todos) os valores de energia,  $E$ , para os quais o determinante de  $M(E)$  é zero, mais explicitamente  $\det(M(E)) = 0$ , isto é, procuramos as raízes da função  $\det(M(E))$ .

Tal como já mencionado no capítulo 3, o deutério não tem estados excitados, por isso, procuramos apenas um único valor de energia.

Nos cálculos práticos usámos um método de aproximação sucessiva. Foi calculado o  $\det(M(E))$  para dois valores,  $E_1$  e  $E_2$ , na vizinhança da região da energia onde se suspeitava a energia do estado ligado.

Se o determinante de  $M$  em  $E_1$  tiver um sinal diferente do determinante em  $E_2$ , então passa por zero algures entre  $E_1$  e  $E_2$ . Tendo sido isso que aconteceu, escolheu-se um valor  $E_3$  entre  $E_1$  e  $E_2$  e calculou-se  $\det(M(E_3))$ . Assim foi possível saber se a raiz se situava entre  $E_1$  e  $E_3$ , ou entre  $E_1$  e  $E_2$ . Este procedimento foi repetido e o intervalo que continha a raiz foi sucessivamente subdividido até a precisão desejada ser atingida.

Os valores dos determinantes calculados nos passos intermédios foram

P. Malfliet-Tjon V	
$N_{gl}$	E (MeV)
16	-0.35326
24	-0.35012
32	-0.34966
40	-0.34955
48	-0.34952
56	-0.34951
64	-0.34950
72	-0.34950
80	-0.34950
90	-0.34950
100	-0.34949
110	-0.34949
128	-0.34949
256	-0.34949
512	-0.34949

(a)

Potencial Paris	
$N_{gl}$	E (MeV)
16	-2.42130
24	-2.18819
32	-2.21480
40	-2.21847
48	-2.22075
56	-2.22159
64	-2.22234
72	-2.22284
80	-2.22317
90	-2.22347
100	-2.22368
110	-2.22383
128	-2.22403
256	-2.22443
512	-2.22460

(b)

Tabela 5.1: Dependência da energia, E, com o número de pontos Gauss-Legendre,  $N_{gl}$ .

usados para acelerar a localização da raiz através de técnicas de interpolação.

O método Gauss-Legendre foi implementado com diferente número de pontos de quadratura,  $N_{gl}$ , desde 16 até 512. Para cada valor do número de pontos  $N_{gl}$  procurou-se o valor de energia para o qual o determinante da matriz é zero. Aumentando o número de pontos de quadratura é de esperar resultados cada vez mais precisos, por isso aumentou-se o número de pontos  $N_{gl}$  até encontrar uma convergência no valor de energia.

Nas tabelas 5.1 (a) e (b) são apresentadas as energias obtidas pelo método de referência para ambos os potenciais.

Usando o potencial Malfiet-Tjon V, o valor de convergência de cinco casas decimais foi  $-0.34949$  MeV a partir de 100 pontos. Com o potencial Paris consideramos que não houve uma convergência tão nítida porque os valores das cinco casas decimais não chegaram a estabilizar, ficando-se apenas pela estabilização de duas casas decimais logo ao fim de 32 pontos. No entanto, ao fim dos 100 pontos já se tinha o valor aproximado de  $-2.224$  MeV tal como era esperado.

Os valores  $-0.34949$  MeV e  $-2.224$  MeV são considerados como referência para os cálculos com o método *wavelet* quando se usam, respectivamente, os potenciais Malfiet-Tjon V e Paris.

## 5.2 Método *wavelet*

A implementação do método *wavelet* não consistiu apenas em resolver os sistemas de equações na base de multiresolução após eliminação de pequenos elementos de matriz. Para poder avaliar a estabilidade e precisão numérica do método, os sistemas de equações foram resolvidos primeiro na base *scaling*, depois na base de multiresolução sem que fossem eliminados elementos de matriz e por fim nesta mesma base após serem eliminados elementos de matriz.

Esta secção divide-se em duas subsecções: na primeira são comparadas as energias obtidas nas bases *scaling* e de multiresolução sem eliminação de elementos de matriz; na segunda, são apresentadas as energias obtidas na base de multiresolução após a eliminação de pequenos elementos de matriz. Em cada uma das subsecções são apresentados os resultados obtidos primeiro com o potencial Malfiet-Tjon V e depois com o potencial Paris.

O critério de escolha dos elementos de matriz a eliminar é discutido na subsecção 5.2.2.





Entretanto, suponhamos que o sistema (5.1) corresponde ao sistema de equações escrito na base *scaling*. O lado esquerdo de (5.1) é um vector e a transformação *wavelet* aplicada ao sistema de equações é efectuada pela multiplicação entre esse vector e a matriz  $W$  como

$$W(M\mathbf{X}) = \mathbf{0}. \quad (5.2)$$

O lado direito permanece inalterado por ser zero.

A matriz  $W$  é ortogonal e isso torna a reconstrução do sistema de equações (5.1) a partir de (5.2) perfeita. Nesse caso, a matriz transposta,  $W^T$ , é igual à matriz inversa,  $W^{-1}$ , e podemos introduzir (2.111) em (5.2). Portanto, tem-se

$$WMW^T W\mathbf{X} = \mathbf{0}. \quad (5.3)$$

Redefinindo o sistema (5.3), tem-se, para o sistema na base de multiresolução,

$$\widetilde{M}\widetilde{\mathbf{X}} = \mathbf{0}, \quad (5.4)$$

com  $\widetilde{M} = WMW^T$  e  $\widetilde{\mathbf{X}} = W\mathbf{X}$ , onde  $\widetilde{M}$  e  $\widetilde{\mathbf{X}}$  correspondem, respectivamente, à matriz e ao vector na base de multiresolução.

De acordo com a notação matricial, primeiro resolveram-se os sistemas (5.1) e (5.4) e compararam-se as energias daí provenientes. Depois eliminaram-se elementos da matriz  $\widetilde{M}$  e resolveu-se novamente o sistema (5.4). A energia daí proveniente foi comparada ao resultado obtido antes de se eliminarem elementos de matriz.

Como as bases *scaling* e de multiresolução se relacionam por uma transformação ortogonal, os resultados obtidos na base de multiresolução sem eliminação de elementos de matriz devem ser iguais aos resultados obtidos na base *scaling*. Por outro lado, os resultados obtidos após eliminação dos elementos de matriz devem ser próximos aos obtidos sem eliminação desde que os valores dos elementos de matriz eliminados sejam pequenos.

Enquanto para o método de referência se fez variar o número de pontos de quadratura, no caso do método *wavelet*, para estimar a precisão dos resultados, fez-se variar o número de funções de base,  $N_{fb}$ , entre 16 e 512. Neste método, pela estrutura do algoritmo piramidal, apenas podem ser considerados números diádicos de funções de base, por isso apenas se efectuaram os cálculos com 16, 32, 64, 128, 256 e 512 funções de base.

Pudemos ver no capítulo 4 que o número de funções de base é determinado pelo valor do limite superior de integração,  $b$ , da equação integral. Vemos, da equação (4.11), que  $N_{fb} = b + 2K - 2$ . Ainda no capítulo 4, concluímos que  $b \geq 2(2K - 2)$ . Os cálculos foram efectuados usando as *wavelets* de Daubechies de ordem  $K = 2$  e  $K = 3$ , então para cada um destes casos, o número de funções de base é, respectivamente,  $N_{fb} \geq 6$  e  $N_{fb} \geq 12$ . Por outro lado, os números de funções de base devem ser números diádicos, então serão, respectivamente,  $N_{fb} \geq 8$  e  $N_{fb} \geq 16$ . Assim, escolhemos como número mínimo de funções de base, o correspondente ao menor número necessário para as *wavelets* de ordem maior, ou seja, 16.

Ao calcular o  $\det M(E)$  para o sistema de equações na base de multiresolução verificou-se uma instabilidade numérica que nos levou a suspeitar que estávamos perante um sistema mal condicionado.

Um sistema do tipo de (5.1) diz-se mal condicionado se pequenas alterações nos valores dos elementos de matriz podem originar resultados consideravelmente diferentes [24].

Uma maneira de medir o mal condicionamento de um sistema é através do cálculo do número de condição. Seja o número de condição,  $N_c$ , um número do tipo  $d \times 10^k$ , onde  $d$  é um número decimal entre 1 e 9, o mal condicionamento de um sistema é medido pelo valor do expoente  $k$  quando comparado com o número de casas decimais devolvido pelo software/computador utilizado nos cálculos [25]. A linguagem de programação usada para fazer

os cálculos foi o FORTRAN na opção de double precision. Para esta opção os resultados têm dezasseis casas decimais significativas, então um sistema cujo número de condição tem um expoente  $k > 16$  pode ser considerado mal condicionado [25].

O número de condição, neste contexto, fornece-nos indicação sobre se o resultado do sistema de equações lineares homogéneo é fraca ou fortemente influenciado por erros de arredondamento, ou outras alterações a que a matriz possa estar sujeita durante o processo de cálculo computacional.

Atendendo ao facto de que uma matriz cujo determinante é zero se diz singular, uma maneira de comprovar o mal condicionamento do sistema foi recorrer ao método de decomposição de uma matriz em valores singulares (*Singular value decomposition - SVD*). Este método permite encontrar o vector solução de um sistema de equações lineares homogéneo e calcular o número de condição.

O algoritmo *SVD* consiste em decompor uma matriz  $M$  [24] no produto de três matrizes

$$M = U S V^T, \quad (5.5)$$

onde  $U$  e  $V$  são ortogonais e  $S$  é uma matriz diagonal que contém os chamados “valores singulares” da matriz original por ordem decrescente de cima para baixo. As colunas de  $U$  são os vectores próprios de  $MM^T$  e as colunas de  $V$  são os vectores próprios de  $M^T M$ . Os valores singulares na diagonal de  $S$  são as raízes quadradas positivas dos valores próprios de  $MM^T$  (ou de  $M^T M$ ).

Resolver um sistema do tipo de (5.1) significa encontrar o “espaço nulo<sup>1</sup> de  $M^n$ ”. Se olharmos para a matriz  $M$  decomposta em valores singulares como

---

<sup>1</sup>O espaço nulo de uma matriz  $M$  é o conjunto de todos os vectores  $\mathbf{X}$  que satisfazem  $M\mathbf{X}=\mathbf{0}$  [24].

se segue

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{n1} & u_{n2} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} & v_{21} & \cdots & v_{n1} \\ v_{12} & v_{22} & \cdots & v_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{1n} & v_{2n} & \cdots & v_{nn} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

quando  $s_n \rightarrow 0$ ,  $\mathbf{X}$  tende para a solução não trivial do sistema homogéneo, então, o espaço nulo contém o vector

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} v_{1n} \\ v_{2n} \\ \vdots \\ v_{nn} \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

onde  $n$  corresponde ao número de funções de base,  $N_{fb}$ , usadas quando se representa a equação integral na base *scaling*.

O vector solução, devolvido pelo algoritmo *SVD*, é constituído pelos elementos da última linha de  $V^T$ , ou seja, a linha que corresponde ao menor valor singular de  $S$ . Como tal, em termos computacionais, faz-se variar a energia e o valor correspondente ao menor valor singular é a energia mais próxima à energia do estado ligado que procuramos.

O número de condição calculado a partir do algoritmo *SVD* é à razão entre o maior e o menor valor singular da matriz  $S$  [24]. O número de condição,  $N_c$ , obtido desta maneira é apresentado para todos os cálculos que se seguem na forma  $d \times 10^k$ .

Como referido no capítulo 2, as *wavelets* de Daubechies de ordem  $K = 2$

e  $K = 3$  são por vezes denominadas, respectivamente, DAUB4 e DAUB6. É assim que nos referiremos a elas daqui para a frente.

### 5.2.1 Base *scaling* e base de multiresolução

Nesta subsecção são comparadas as energias obtidas na base de multiresolução com as obtidas na base *scaling* para diferente número de funções de base,  $N_{fb}$ , utilizadas, primeiro com o potencial de ensaio e a seguir com o potencial mais realista. Para cada um dos potenciais, primeiro usaram-se as DAUB4 e depois as DAUB6. Os sistemas de equações foram resolvidos recorrendo ao *SVD*.

Todas as tabelas desta subsecção contêm: na primeira coluna, o número de funções de base  $N_{fb}$ ; na segunda, a energia,  $E$ , obtida da resolução do sistema de equações lineares; e na terceira, o número de condição,  $N_c$ , do respectivo sistema.

## A. Potencial Malfiet-Tjon V

A energia do estado ligado obtida para DAUB4 com o potencial de Malfiet-Tjon V nas bases *scaling* e de multiresolução é apresentada, respectivamente, nas tabelas 5.2 (a) e (b).

Na base *scaling*, atinge-se a convergência para o valor, -0.34949 MeV, obtido anteriormente pelo método de referência, com 256 funções de base.

O facto de o valor de convergência da energia ser igual ao obtido pelo método de referência indica que resolver a equação integral formulada na base *scaling* é igualmente válido comparativamente a resolvê-la após a sua discretização pela quadratura Gauss-Legendre. Apesar desta constatação, os valores de energia do estado ligado obtidos na base de multiresolução apresentam problemas quando se usam 128 ou mais funções de base. O aumento

Pot. M. Tjon V: $\psi(p)$ – DAUB4			Pot. M. Tjon V: $\psi(p)$ – DAUB4		
base <i>scaling</i>			base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$	$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.35524	3.0872129E+15	16	-0.35524	3.0832148E+15
32	-0.35001	6.7011622E+16	32	-0.35001	1.4322168E+17
64	-0.34954	1.6713749E+17	64	-0.34954	7.1314344E+17
128	-0.34950	1.2550019E+19	128	-0.34948*	2.3769701E+18
256	-0.34949	1.1539938E+19	256	-0.34940*	9.7473466E+16
512	-0.34949	1.0891677E+20	512	-0.3493 *	6.5845731E+16

(a)
(b)

Tabela 5.2: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB4.  $N_c$  é o número de condição e o \* indica que o último algarismo é incerto.

do tamanho da matriz faz com que se torne cada vez mais difícil obter energias precisas. Estes problemas podem ser entendidos pelos elevados números de condição. Pelo que, estamos perante sistemas mal condicionados.

Constatado o mal condicionamento dos sistemas referentes às tabelas 5.2 (a) e (b) e tendo em conta que sistemas mal condicionados não podem reproduzir resultados fiáveis [26], contornou-se o problema reformulando os sistemas a partir de três novas funções. Funções essas definidas pelo produto entre a função de onda,  $\psi(p)$ , e uma função por nós escolhida. Em concreto, as novas funções foram definidas como

$$\Psi(p) = \psi(p)p \quad (5.8)$$

$$\gamma(p) = G_0(E)^{-1}\psi(p) \quad (5.9)$$

$$\Gamma(p) = \gamma(p)p. \quad (5.10)$$

A escolha de multiplicar a função de onda pelo momento linear foi feita para chegar a condições de fronteira em que a função se anula para  $p = 0$ . A função de onda tende rapidamente para zero quando  $p \rightarrow \infty$  e mesmo

quando se multiplica por  $p$  a função de onda ainda se anula para esse limite. Quando se está perto do limite  $p \rightarrow \infty$ , a condição de periodicidade usada na transformação *wavelet* ao vector de dados, implica que informação é retirada do início do vector. Assim, se em ambos os lados a função de onda tender para zero, a condição periódica é melhor aplicada.

A segunda escolha é análoga à chamada função de vértice usada para definir a função de onda relativista do deuterão<sup>2</sup> [27], onde  $G_0(E)$  é o propagador. A última escolha tem o mesmo fundamento que a primeira, desta vez para a função vértice.

A equação integral (3.18) é reformulada em termos das novas funções e são deduzidos os sistemas de equações lineares para cada um dos casos. Em seguida, é deduzido o sistema de equações lineares correspondente à função  $\Psi(p)$  para o potencial Malfliet-Tjon  $V$ .

Multiplicando ambos os lados da equação (3.18) por  $p$ , tem-se

$$\Psi(p) = \int_0^\infty dp' \frac{pV(p,p')p'}{E - \frac{p'^2}{m}} \Psi(p'). \quad (5.11)$$

O intervalo de integração tranforma-se de  $[0, \infty)$  para  $[0, b]$  implementando a mudança de variável (4.9) e obtém-se

$$\tilde{\Psi}(u) = \int_0^b dv \frac{b}{(b-v)^2} \frac{u}{b-u} \frac{\tilde{V}(u,v)}{E - \frac{u^2}{m(b-u)^2}} \frac{v}{b-v} \tilde{\Psi}(v). \quad (5.12)$$

Escreve-se a equação (5.12) na base *scaling* recorrendo a (4.11) obtendo-se

$$\sum_{n=-2K+2}^{b-1} \tilde{f}_n \phi_{j,n}(u) = \sum_{n=-2K+2}^{b-1} \int_0^b dv \frac{u}{b-u} \frac{\tilde{V}(u,v)}{E - \frac{u^2}{m(b-u)^2}} \frac{vb}{(b-v)^3} \tilde{f}_n \phi_{j,n}(v). \quad (5.13)$$

Comparando (5.13) com (4.12) verificamos que as equações têm aspecto semelhante. Sendo o kernel do integral em (5.13) definido por

$$\tilde{K}(u,v) = \frac{bv}{(b-v)^3} \frac{u}{(b-u)} \frac{\tilde{V}(u,v)}{E - \frac{u^2}{m(b-u)^2}}, \quad (5.14)$$

---

<sup>2</sup>A equação integral relativista para o deuterão é discutida em [27], pp. 390-391.

o sistema de equações lineares para  $\Psi(p)$ , em comparação com (4.18), é

$$\sum_{n=-2K+2}^{b-1} \left( N_{nm} - w_n \tilde{K}_{nm} w_m \right) \tilde{f}_n = 0, \quad (5.15)$$

onde  $\tilde{K}_{nm} \equiv \tilde{K}(u_n, v_m)$ .

A dedução do sistema de equações lineares para  $\gamma(p)$  é feita substituindo

$$\psi(p) = G_{0,p}(E)\gamma(p) \quad (5.16)$$

na equação integral (3.18) escrita como

$$\psi(p) = G_{0,p}(E)V\psi(p'). \quad (5.17)$$

Substituindo a igualdade (5.16) em (5.17) tem-se

$$\begin{aligned} G_{0,p}(E)\gamma(p) &= G_{0,p}(E)V G_{0,p'}(E)\gamma(p') \\ \gamma(p) &= V G_{0,p'}(E)\gamma(p') \end{aligned}$$

$$\gamma(p) = \int_0^\infty p'^2 dp' \frac{V(p, p')}{E - \frac{(p')^2}{m}} \gamma(p'). \quad (5.18)$$

Isto significa que o propagador passou a ser incluído na função integranda, enquanto antes era independente da variável de integração. Escrevendo esta equação na base *scaling* à semelhança do que já foi feito para  $\psi(p)$  e  $\Psi(p)$ , novamente a alteração no sistema é denotada no kernel do integral que se apresenta para este caso como

$$\bar{k}(u, v) = \frac{bv^2}{(b-v)^4} \frac{\tilde{V}(u, v)}{E - \frac{v^2}{m(b-v)^2}}. \quad (5.19)$$

Para deduzir o sistema de equações lineares para  $\Gamma(p)$  multiplica-se a equação (5.18) por  $p$  e procede-se de modo análogo ao que foi feito para  $\Psi(p)$ . O kernel para este caso fica

$$\bar{K}(u, v) = \frac{bv}{(b-v)^3} \frac{u}{(b-u)} \frac{\tilde{V}(u, v)}{E - \frac{v^2}{m(b-v)^2}}. \quad (5.20)$$



No que respeita às funções de onda, a forma como são obtidas também sofre ligeiras alterações. O kernel da equação integral para cada função e a construção da função de onda para cada caso são resumidos na tabela do apêndice B.

As tabelas 5.3, 5.4 e 5.5 apresentam, respectivamente, a dependência de energia com o número de funções de base obtida para as funções  $\Psi(p)$ ,  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$  usando DAUB4, na base *scaling* (à esquerda) e na base de multiresolução sem eliminação de elementos de matriz (à direita). Enquanto as tabelas 5.6, 5.7 e 5.8 se referem ao uso de DAUB6, respectivamente, para as mesmas funções em ambas as bases.

Pot. M. Tjon V: $\Psi(p)$ – DAUB4			Pot. M. Tjon V: $\Psi(p)$ – DAUB4		
base <i>scaling</i>			base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$	$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3579873	6.18017E+12	16	-0.3579873	6.18028E+12
32	-0.3501792	2.24306E+13	32	-0.3501792	2.24296E+13
64	-0.3495621	1.08757E+13	64	-0.3495621	1.08758E+13
128	-0.3495016	1.15235E+13	128	-0.3495016	1.15234E+13
256	-0.3494946	1.63574E+13	256	-0.3494946	1.63721E+13
512	-0.3494938	5.67139E+15	512	-0.3494938	4.38449E+15

(a)
(b)

Tabela 5.3: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB4 e  $\Psi(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Pot. M. Tjon V: $\gamma(p)$ – DAUB4		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3579548	1.62474E+9
32	-0.3501415	1.25366E+9
64	-0.3495572	1.32510E+9
128	-0.3495010	1.98598E+9
256	-0.3494946	1.98090E+9
512	-0.3494938	5.71812E+9

(a)

Pot. M. Tjon V: $\gamma(p)$ – DAUB4		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3579548	1.62474E+9
32	-0.3501415	1.25366E+9
64	-0.3495572	1.32510E+9
128	-0.3495010	1.98598E+9
256	-0.3494946	1.98090E+9
512	-0.3494938	5.71813E+9

(b)

Tabela 5.4: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB4 e  $\gamma(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Pot. M. Tjon V: $\Gamma(p)$ – DAUB4		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3586188	1.46215E+9
32	-0.3502115	3.37499E+9
64	-0.3495654	7.02125E+8
128	-0.3495020	6.28570E+8
256	-0.3494947	5.07651E+9
512	-0.3494938	4.99084E+9

(a)

Pot. M. Tjon V: $\Gamma(p)$ – DAUB4		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3586188	1.46215E+9
32	-0.3502115	3.37499E+9
64	-0.3495654	7.02125E+8
128	-0.3495020	6.28570E+8
256	-0.3494947	5.07652E+9
512	-0.3494938	4.99085E+9

(b)

Tabela 5.5: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB4 e  $\Gamma(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Pot. M. Tjon V: $\Psi(p)$ – DAUB6		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3687760	2.51096E+12
32	-0.3507509	1.02316E+13
64	-0.3495758	4.17374E+13
128	-0.3495022	5.90418E+13
256	-0.3494947	5.09810E+13
512	-0.3494938	1.03465E+15

(a)

Pot. M. Tjon V: $\Psi(p)$ – DAUB6		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3687760	2.51111E+12
32	-0.3507509	1.02302E+13
64	-0.3495758	4.17218E+13
128	-0.3495022	5.89830E+13
256	-0.3494947	5.08601E+13
512	-0.3494938	1.33635E+15

(b)

Tabela 5.6: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB6 e  $\Psi(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Pot. M. Tjon V: $\gamma(p)$ – DAUB6		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3598377	2.57202E+10
32	-0.3504856	4.08132E+10
64	-0.3495630	2.49681E+10
128	-0.3495010	9.06182E+09
256	-0.3494946	4.28185E+09
512	-0.3494938	1.11398E+10

(a)

Pot. M. Tjon V: $\gamma(p)$ – DAUB6		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3598377	2.57202E+10
32	-0.3504856	4.08132E+10
64	-0.3495630	2.49681E+10
128	-0.3495010	9.06182E+09
256	-0.3494946	4.28185E+09
512	-0.3494938	1.11398E+10

(b)

Tabela 5.7: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB6 e  $\gamma(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Pot. M. Tjon V: $\Gamma(p)$ – DAUB6			Pot. M. Tjon V: $\Gamma(p)$ – DAUB6		
base <i>scaling</i>			base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$	$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3591953	4.24312E+9	16	-0.3591953	4.24312E+9
32	-0.3504691	4.98317E+9	32	-0.3504691	4.98317E+9
64	-0.3495627	1.12650E+9	64	-0.3495627	1.12650E+9
128	-0.3495010	9.32508E+8	128	-0.3495010	9.32508E+8
256	-0.3494946	6.64832E+8	256	-0.3494946	6.64832E+8
512	-0.3494938	2.33749E+9	512	-0.3494938	2.33749E+9

(a)

(b)

Tabela 5.8: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB6 e  $\Gamma(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Através das tabelas 5.3 a 5.8 comparamos, para cada uma das três funções em separado, os resultados obtidos na base *scaling* com os da base de multiresolução sem eliminação de elementos de matriz. Em seguida, comparamos, para cada função, os resultados obtidos usando DAUB4 e DAUB6. E por fim, são comparadas as três funções não só pelo valor obtido para a convergência da energia em cada caso, como também através da ordem de grandeza dos respectivos números de condição.

Vemos, nessas tabelas, que a convergência da energia para o valor, de -0.34949 MeV, obtido com o método de referência, ocorre, para o método *wavelet*, quando são usadas 256 funções de base em todos os casos.

O facto de se obter a mesma convergência no valor da energia em todas as tabelas leva-nos a concluir a equivalência entre a resolução dos sistemas de equações lineares para cada uma das três novas funções definidas a partir da função de onda  $\psi(p)$ .

Para a função  $\Psi(p)$  usando DAUB4 podemos ver, nas tabelas 5.3 (a) e

(b), que, para o mesmo número de funções de base, a energia obtida é igual em ambas as bases. O mesmo se observa quando se comparam entre si as tabelas 5.6 (a) e (b), para a mesma função usando DAUB6. Para as funções  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$  também se verifica, para igual número de funções de base, o mesmo valor da energia em ambas as bases quer usando DAUB4 quer usando DAUB6. Tal como era de esperar pela ortogonalidade da transformação pela qual se relacionam as bases, observa-se que a energia é a mesma em ambas as bases.

Comparando as tabelas 5.3 e 5.6 vê-se que os valores de energia, para  $\Psi(p)$ , usando DAUB4 e DAUB6 são praticamente coincidentes, convergindo inclusive para o mesmo valor quando são usadas 512 funções de base. O mesmo se pode concluir para  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$ .

No que respeita aos números de condição verifica-se um decréscimo significativo de quando se usa  $\psi(p)$  para quando se usa  $\Psi(p)$  e desta para quando se usa  $\gamma(p)$  ou  $\Gamma(p)$ . Se compararmos as tabelas 5.3 e 5.6, referentes à função  $\Psi(p)$ , com a tabela 5.2, referente à função  $\psi(p)$ , podemos observar um decréscimo de cerca de 5 ordens de grandeza nos números de condição. A primeira nova função leva já a obter sistemas muito menos mal condicionados. Apesar do decréscimo significativo, os números de condição para a função  $\Psi(p)$  ainda têm, em vários casos, uma ordem de grandeza próxima daquela que é considerada correspondente a sistemas mal condicionados, ou seja,  $10^{16}$ .

Comparando as tabelas 5.4 e 5.7, referentes à função  $\gamma(p)$  usando, respectivamente, DAUB4 e DAUB6, com as tabelas 5.3 e 5.6, referentes à função  $\Psi(p)$ , vemos que há um decréscimo, nos números de condição, de cerca de 4 ordens de grandeza. Se, por outro lado, compararmos as tabelas referentes às funções  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$  concluímos que os números de condição para  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$  têm aproximadamente a mesma ordem de grandeza, embora os da função  $\Gamma(p)$  sejam ligeiramente menores. E vemos que os sistemas de

equações correspondentes a  $\gamma(p)$  e a  $\Gamma(p)$  apresentam números de condição muito abaixo de  $10^{16}$ , pelo que se tratam de sistemas bem condicionados sendo os resultados deles provenientes considerados fiáveis.

Todo o procedimento até agora feito para o potencial Malfliet-Tjon V é repetido para o potencial Paris e em seguida são apresentados e discutidos os resultados obtidos com esse potencial.

## B. Potencial Paris

Nas tabelas 5.9 a 5.14 estão apresentados os resultados dos sistemas de equações reformulados a partir das funções  $\Psi(p)$ ,  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$  para o potencial Paris usando as *wavelets* DAUB4 e DAUB6. Os sistemas de equações lineares para cada uma das funções são deduzidos a partir da equação integral (3.19).

As tabelas 5.9, 5.10 e 5.11 referem-se aos sistemas reformulados, respectivamente, pelas funções  $\Psi(p)$ ,  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$  quando se usam *wavelets* DAUB4. As três tabelas seguintes referem-se, respectivamente, aos mesmos sistemas quando se usam *wavelets* DAUB6. Em cada uma dessas tabelas, à esquerda estão as energias obtidas da resolução dos sistemas na base *scaling* e à direita, quando os sistemas são resolvidos na base de multiresolução sem eliminação de elementos de matriz. Todas as tabelas apresentam os números de condição dos sistemas de equações lineares resolvidos. Foram resolvidos sistemas de equações correspondentes ao uso de 16, 32, 64, 128, 256 e 512 funções de base.

Potencial Paris: $\Psi(p)$ – DAUB4		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-1.9696298	2.00028E+14
32	-2.2127809	1.14511E+14
64	-2.2157519	1.73878E+14
128	-2.2219566	1.90260E+14
256	-2.2236831	5.24202E+14
512	-2.2242513	1.41134E+14

(a)

Potencial Paris: $\Psi(p)$ – DAUB4		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-1.9696298	1.99930E+14
32	-2.2127809	1.14493E+14
64	-2.2157519	1.73600E+14
128	-2.2219566	1.89833E+14
256	-2.2236831	5.30343E+14
512	-2.2242513	1.48898E+14

(b)

Tabela 5.9: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB4 e  $\Psi(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Potencial Paris: $\gamma(p)$ – DAUB4		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-1.9692650	3.21637E+11
32	-2.2127580	1.09872E+12
64	-2.2157484	3.16275E+13
128	-2.2219561	5.64619E+12
256	-2.2236831	4.97050E+12
512	-2.2242513	3.77712E+12

(a)

Potencial Paris: $\gamma(p)$ – DAUB4		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-1.9692650	3.21636E+11
32	-2.2127580	1.09875E+12
64	-2.2157484	3.16216E+13
128	-2.2219561	5.64702E+12
256	-2.2236831	4.97166E+12
512	-2.2242513	3.77669E+12

(b)

Tabela 5.10: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB4 e  $\gamma(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Potencial Paris: $\Gamma(p)$ – DAUB4		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-1.9695738	1.36842E+11
32	-2.2127930	5.86046E+11
64	-2.2157523	2.29800E+12
128	-2.2219566	2.89220E+12
256	-2.2236831	6.37196E+12
512	-2.2242513	2.27090E+12

(a)

Potencial Paris: $\Gamma(p)$ – DAUB4		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-1.9695738	1.36842E+11
32	-2.2127930	5.86044E+11
64	-2.2157523	2.29796E+12
128	-2.2219566	2.89250E+12
256	-2.2236831	6.37269E+12
512	-2.2242513	2.27128E+12

(b)

Tabela 5.11: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB4 e  $\Gamma(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Potencial Paris: $\Psi(p)$ – DAUB6		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-2.2967357	1.10089E+14
32	-2.2127580	1.09872E+12
64	-2.2147173	1.36279E+14
128	-2.2218507	6.77913E+14
256	-2.2236748	9.28335E+13
512	-2.2242502	1.73433E+14

(a)

Potencial Paris: $\Psi(p)$ – DAUB6		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-2.2967357	1.10050E+14
32	-2.2060086	3.35333E+14
64	-2.2147173	1.36226E+14
128	-2.2218507	6.74856E+14
256	-2.2236748	9.29468E+13
512	-2.2242502	1.74024E+14

(b)

Tabela 5.12: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB6 e  $\Psi(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.



Potencial Paris: $\gamma(p)$ – DAUB6		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-2.2824941	3.21998E+12
32	-2.2059154	8.37594E+13
64	-2.2147123	5.81038E+13
128	-2.2218505	8.61301E+12
256	-2.2236748	5.44824E+12
512	-2.2242502	9.03909E+12

(a)

Potencial Paris: $\gamma(p)$ – DAUB6		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-2.2824941	3.22000E+12
32	-2.2059154	8.37475E+13
64	-2.2147123	5.80246E+13
128	-2.2218505	8.61253E+12
256	-2.2236748	5.44870E+12
512	-2.2242502	9.03809E+12

(b)

Tabela 5.13: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$  usando DAUB6 e  $\gamma(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Potencial Paris: $\Gamma(p)$ – DAUB6		
base <i>scaling</i>		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-2.2811943	3.98887E+11
32	-2.2059034	5.52309E+11
64	-2.2147116	5.88730E+11
128	-2.2218505	2.56782E+12
256	-2.2236748	9.79988E+11
512	-2.2242502	2.20610E+12

(a)

Potencial Paris: $\Gamma(p)$ – DAUB6		
base de multiresolução		
$N_{fb}$	E (MeV)	$N_c$
16	-2.2811943	3.98887E+11
32	-2.2059034	5.52308E+11
64	-2.2147116	5.88731E+11
128	-2.2218505	2.56795E+12
256	-2.2236748	9.79986E+11
512	-2.2242502	2.20494E+12

(b)

Tabela 5.14: Dependência da energia, E, com o número de funções de base,  $N_{fb}$ , usando DAUB6 e  $\Gamma(p)$ .  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Vê-se nas tabelas anteriores que, para igual número de funções de base utilizadas, a energia obtida na base *scaling* é igual à obtida na base de multiresolução quando se comparam sistemas reformulados a partir da mesma nova função ( $\Psi(p)$ ,  $\gamma(p)$  ou  $\Gamma(p)$ ). Com o aumento do número de funções de base chega-se a -2.2242513 MeV, com  $N_{fb} = 512$ , quando se usam *wavelets* DAUB4 e a -2.2242502 MeV quando se usam *wavelets* DAUB6.

Tal como para o método de referência, o número de casas decimais que estabilizou, com o aumento do número de funções de base, foi reduzido. Apenas as duas primeiras casas decimais estabilizaram ao fim de se usarem 128 funções de base. No entanto, em todos os casos, ao fim de 256 funções de base tem-se o valor aproximado de -2.224 MeV, o mesmo valor que se obteve com o método de referência.

Os números de condição são da mesma ordem de grandeza que os obtidos para os sistemas equivalentes quando se usou o potencial Malfiet-Tjon V. Assim, sistemas reformulados a partir da função  $\Psi(p)$  são menos bem condicionados, apresentando números de condição da ordem de  $10^{16}$ . Os sistemas reformulados a partir de  $\gamma(p)$  e de  $\Gamma(p)$  apresentam números de condição da mesma ordem de grandeza, da ordem de  $10^{14}$  e podem ser considerados razoavelmente bem condicionados.

Quando se comparam os resultados obtidos usando *wavelets* de ordem  $K = 2$  com os obtidos usando *wavelets* de ordem  $K = 3$ , conclui-se que quer os valores de energia obtidos, quer os números de condição, são praticamente coincidentes. Isso pode ser visto comparando, entre si, as tabelas 5.9 e 5.12, as tabelas 5.10 e 5.13 e as tabelas 5.11 e 5.14.

Na subsecção seguinte vamos analisar como a eliminação de elementos de matriz na base de multiresolução altera o valor da energia do estado ligado. Novamente, primeiro serão apresentados os resultados obtidos com o potencial de ensaio e depois com o potencial mais realista.

### 5.2.2 Base de multiresolução com eliminação de elementos de matriz

Define-se um valor limiar, que serve de critério para eliminar elementos de matriz na base de multiresolução, como uma determinada fracção,  $\epsilon$ , do elemento com maior valor absoluto. São consideradas fracções cada vez maiores, e conseqüentemente eliminados mais elementos de matriz. Através da análise do desvio que a energia sofre em função de  $\epsilon$  pode saber-se em quanto é que se pode reduzir a quantidade de elementos de matriz não nulos sem que a energia se altere significativamente.

Nesta subsecção são apresentadas as dependências nos valores de energia com a eliminação de elementos de matriz na base de multiresolução, para as funções  $\Psi(p)$ ,  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$  usando DAUB4 e DAUB6 com 512 funções de base  $N_{fb}$ , primeiro usando o potencial Malfiet-Tjon V e depois o potencial Paris.

## A. Potencial Malfiet-Tjon V

As tabelas 5.15, 5.17 e 5.19 são referentes, respectivamente, às três funções usando DAUB4 e os resultados usando DAUB6 são apresentados, respectivamente, nas tabelas 5.16, 5.18 e 5.20. Todas contêm: na primeira coluna, as fracções,  $\epsilon$ , do elemento de matriz com maior valor absoluto; na segunda, o número de elementos de matriz,  $N_{elem}$ , tornados zero; na terceira, a percentagem de elementos de matriz não nulos que restam após a eliminação dos valores menores que o limiar; e nas duas últimas, respectivamente, a energia do estado ligado, E, e o número de condição do sistema,  $N_c$ .

Pot. Malfliet-Tjon V: $\Psi(p)$ – DAUB4				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-18}$	0	100	-0.3494938	4.38E+15
$10^{-12}$	96044	63.36	-0.3494938	6.45E+14
$10^{-10}$	182805	30.27	-0.3494936	1.09E+14
$10^{-9}$	212487	18.94	-0.3494949	6.21E+13
$10^{-8}$	231979	11.51	-0.3494832	5.31E+13
$10^{-7}$	243815	6.99	-0.3496692	3.16E+13
$10^{-6}$	252254	3.77	-0.3635466	1.61E+14

Tabela 5.15: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB4 e  $\Psi(p)$ . A 1ª coluna contém a fração,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{fb}=512$ .

Pot. Malfliet-Tjon V: $\Psi(p)$ – DAUB6				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-23}$	0	100	-0.3494938	1.34E+15
$10^{-10}$	224955	14.19	-0.3494938	6.44E+13
$10^{-9}$	236730	9.69	-0.3494879	4.79E+13
$10^{-8}$	246385	6.01	-0.3494897	8.07E+13
$10^{-7}$	252848	3.55	-0.3491575	1.50E+14

Tabela 5.16: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB6 e  $\Psi(p)$ . A 1ª coluna contém a fração,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{fb}=512$ .

Pot. Malfliet-Tjon V: $\gamma(p)$ - DAUB4				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-18}$	0	100	-0.3494938	5.72E+09
$10^{-7}$	240734	8.17	-0.3494938	2.52E+09
$10^{-6}$	251657	4.00	-0.3494937	9.98E+09
$10^{-5}$	257359	1.83	-0.3494929	1.29E+09
$10^{-4}$	259991	0.82	-0.3495185	1.44E+09
$10^{-3}$	261027	0.43	-0.3507731	2.28E+09
$10^{-2}$	261467	0.26	-0.2794752	2.35E+09

Tabela 5.17: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB4 e  $\gamma(p)$ . A 1ª coluna contém a fração,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{fb}=512$ .

Pot. Malfliet-Tjon V: $\gamma(p)$ - DAUB6				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-21}$	0	100	-0.3494938	1.11E+10
$10^{-7}$	250740	4.35	-0.3494938	4.68E+10
$10^{-6}$	255590	2.50	-0.3494937	5.03E+09
$10^{-5}$	258346	1.45	-0.3495054	3.62E+09
$10^{-4}$	259884	0.86	-0.3495292	5.80E+09
$10^{-3}$	260813	0.51	-0.3467386	1.33E+10
$10^{-2}$	261382	0.29	-0.3717996	1.11E+09

Tabela 5.18: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB6 e  $\gamma(p)$ . A 1ª coluna contém a fração,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{fb}=512$ .

<b>Pot. Malfiet-Tjon V: <math>\Gamma(p)</math> – DAUB4</b>				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-18}$	0	100	-0.3494938	4.99E+09
$10^{-7}$	235660	10.10	-0.3494938	2.21E+09
$10^{-6}$	249137	4.96	-0.3494939	6.23E+08
$10^{-5}$	256202	2.27	-0.3494995	9.75E+08
$10^{-4}$	259520	1.00	-0.3495267	5.51E+08
$10^{-3}$	260878	0.48	-0.3506149	9.58E+08
$10^{-2}$	261418	0.28	-0.5329159	2.66E+09

Tabela 5.19: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB4 e  $\Gamma(p)$ . A 1ª coluna contém a fração,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{fb}=512$ .

<b>Pot. Malfiet-Tjon V: <math>\Gamma(p)</math> – DAUB6</b>				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-21}$	0	100	-0.3494938	2.34E+09
$10^{-6}$	254552	2.90	-0.3494938	1.85E+09
$10^{-5}$	257823	1.65	-0.3494920	1.07E+09
$10^{-4}$	259613	0.97	-0.3496555	2.57E+06
$10^{-3}$	260691	0.55	-0.3469521	2.12E+09
$10^{-2}$	261348	0.30	-0.4034481	4.48E+09

Tabela 5.20: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB6 e  $\Gamma(p)$ . A 1ª coluna contém a fração,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{fb}=512$ .

Inicialmente foi escolhido um valor de  $\varepsilon$  suficientemente pequeno de modo a não haver elementos de matriz com valor absoluto inferior ao limiar. Resolveu-se, portanto, o sistema com 100% de elementos de matriz não nulos. A energia daí obtida,  $-0.3494938$  MeV, serve de referência para as energias obtidas quando se fazem diferentes eliminações de elementos de matriz.

Em todo o tratamento com *wavelets* os valores da energia foram obtidos com mais dois algarismos significativos do que no método de Gauss-Legendre. Assim, quando se fazem comparações com o método de referência considera-se apenas o número de algarismos significativos deste último.

A análise dos resultados apresentados nas tabelas 5.15 a 5.20 é feita comparando as percentagens de elementos de matriz não nulos que são necessárias para obter uma mesma energia.

Inicialmente considera-se a energia obtida sem qualquer eliminação de elementos de matriz, ou seja,  $-0.3494938$  MeV e tiram-se das tabelas 5.15 a 5.20 as percentagens de elementos não nulos necessárias para obter exatamente essa energia.

Na segunda linha de cada uma das tabelas 5.15 a 5.20 vemos que com cerca de 60 % ou menos dos elementos da matriz não nulos se obtém a mesma energia,  $-0.3494938$  MeV, que se obteve sem eliminação de elementos de matriz, ou seja, com 100% dos elementos de matriz diferentes de zero. As percentagens de elementos não nulos com que se obtém esse valor de energia para cada uma das três funções usando DAUB4 e DAUB6 estão reunidas na tabela 5.21.

Se pretendermos obter um valor de energia menos preciso veremos que com menores percentagens que as que são mostradas na tabela 5.21 podemos consegui-lo. Consideremos que a energia que devemos obter dos cálculos após eliminação de pequenos elementos de matriz tenha o valor aproximado

Pot. Malfliet-Tjon V: E=-0.3494938 MeV		
função	%	
	DAUB4	DAUB6
$\Psi(p)$	63.36	14.19
$\gamma(p)$	8.16	4.35
$\Gamma(p)$	10.10	2.89

Tabela 5.21: Percentagens de elementos de matriz não nulos com que se obtém a energia exacta (isto é, obtida sem eliminação de elementos de matriz) com uma precisão de sete casas decimais.

de  $E=-0.34949$  MeV. Portanto, arredonda-se a energia  $-0.3494938$  MeV para  $-0.34949$  MeV, a mesma que se obteve com o método Gauss-Legendre.

Considerando, então, uma energia menos precisa, procuram-se, nas tabelas 5.15 a 5.20, as percentagens de elementos não nulos necessárias para obter uma energia que esteja no intervalo  $-0.34949 \pm 0.000005$  MeV. Como agora a precisão no valor de energia é menor, espera-se uma redução significativa nas percentagens de elementos não nulos.

Na tabela 5.22 estão reunidas essas percentagens bem como o valor concreto de energia que se obteve, em cada caso, com as respectivas percentagens de elementos não nulos. As energias apresentadas nessa tabela são comparadas à energia  $-0.3494938$  MeV para se ver qual o desvio que sofreram pela redução do número de elementos de matriz não nulos.

Assim, na tabela 5.22 são também apresentados os desvios percentuais,  $\eta(\%)$ , que as energias,  $E_c$ , provenientes dos cálculos após eliminação de elementos de matriz, sofrem em relação à energia  $E_s=-0.3494938$  MeV, obtida sem qualquer eliminação<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>Os rótulos *s* e *c* em  $E_s$  e  $E_c$  significam, respectivamente, energia obtida sem e com eliminação de elementos de matriz.



Potencial Malfliet-Tjon V: E= -0.34949±0.000005 MeV						
função	%		E <sub>c</sub> (MeV)		η(×10 <sup>-4</sup> %)	
	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6
Ψ(p)	18.94	6.01	-0.3494949	-0.3494897	3.1	12
γ(p)	1.83	2.50	-0.3494929	-0.3494937	2.6	0.29
Γ(p)	4.96	1.65	-0.3494939	-0.3494920	0.29	5.2

Tabela 5.22: Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter energias em E=-0.34949±0.000005 MeV. E<sub>c</sub> são as energias que resultam dos cálculos com as diferentes percentagens de elementos não nulos.  $\eta(\%) = \frac{|E_c - E_s|}{E_s} 100\%$  é o desvio da energia, E<sub>c</sub>, obtida com eliminação de elementos de matriz em relação à energia, E<sub>s</sub> = -0.3494938 MeV, obtida sem eliminação.

Por fim, porque é suficiente considerar três algarismos significativos para comparar com valores extraídos de experiências, arredonda-se a energia obtida sem eliminação de elementos de matriz para -0.3495 MeV.

Para um valor de energia ainda menos preciso, as percentagens de elementos de matriz não nulos necessárias serão ainda menores. Isso pode ver-se na tabela 5.23. À semelhança do que foi feito anteriormente, retiram-se das tabelas 5.15 a 5.20 as energias, E<sub>c</sub>, no intervalo E=-0.3495 ± 0.00005 MeV e as percentagens de elementos não nulos que foram usadas para as obter. Essas energias são comparadas com o valor, E<sub>s</sub>=-0.3494938 MeV, obtido sem eliminação de elementos de matriz. Da comparação resulta o desvio percentual η(%) da energia quando pequenos elementos de matriz são feitos iguais a zero.

Nas tabelas 5.21, 5.22 e 5.23 comprova-se que os resultados referentes à função Ψ(p), cujos sistemas não são tão bem condicionados como os das funções γ(p) e Γ(p), são ligeiramente piores que os referentes às outras duas funções. Isto significa que para obter energias com igual precisão, não se podem eliminar tantos elementos de matriz para sistemas reformulados a

Potencial Malfliet-Tjon V: $E = -0.3495 \pm 0.00005$ MeV						
função	%		$E_c$ (MeV)		$\eta$ (%)	
	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6
$\Psi(p)$	11.51	3.55*	-0.3494832	-0.3491575*	0.003	0.096
$\gamma(p)$	0.82	0.96	-0.3495185	-0.3495292	0.007	$10^{-4}$
$\Gamma(p)$	1.00	0.97*	-0.3495267	-0.3496555*	0.009	0.046

Tabela 5.23: Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter energias em  $E = -0.3495 \pm 0.00005$  MeV.  $E_c$  são as energias que resultam dos cálculos com as diferentes percentagens de elementos não nulos.  $\eta(\%) = \frac{|E_c - E_s|}{E_s} 100\%$  é o desvio da energia,  $E_c$ , obtida com eliminação de elementos de matriz em relação à energia,  $E_s = -0.3494938$  MeV, obtida sem eliminação. Os valores com \* estão fora do intervalo de energia considerado, mas foram escolhidos por não haver valores no intervalo e esses serem os que mais se aproximavam.

partir da função  $\Psi(p)$ .

Na tabela 5.21, pode ver-se que com  $\sim 10\%$  de elementos de matriz não nulos, usando DAUB4 e  $\sim 4\%$ , usando DAUB6, quer a função  $\gamma(p)$  e quer a função  $\Gamma(p)$  permitem obter energias com sete casas decimais iguais à energia obtida sem eliminação de elementos de matriz. Por outro lado, a função  $\Psi(p)$  leva à mesma energia quando se usam matrizes com  $\sim 60\%$  de elementos de matriz não nulos para DAUB4 e  $\sim 14\%$  para DAUB6.

Quando se pretende obter energias com cinco casas decimais iguais à energia obtida sem eliminação de elementos de matriz, vê-se, na tabela 5.22, que, para as funções  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$ , são necessárias matrizes com menos de 5% de elementos não nulos. Para a função  $\Psi(p)$ , usando DAUB4, são necessárias matrizes com  $\sim 20\%$  de elementos não nulos e  $\sim 6\%$ , usando DAUB6. Nestes casos, os desvios percentuais, à energia  $-0.3494938$  MeV, são da ordem da décima de milésima.

Energias cujas três primeiras casas decimais são iguais às da energia ob-

tida sem eliminação de elementos de matriz conseguem-se quando se usam matrizes com apenas  $\sim 1\%$  de elementos não nulos para sistemas de equações correspondentes às funções  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$ . Esses resultados podem ser vistos na tabela 5.23. Para a função  $\Psi(p)$ , usando DAUB4, são necessárias matrizes com  $\sim 12\%$  de elementos não nulos e  $\sim 4\%$ , usando DAUB6. Para os resultados com uma precisão de três casas decimais, os desvios percentuais das energias face à energia obtida sem qualquer eliminação de elementos de matriz foram inferiores, em regra, a uma centésima.

Na tabela 5.23 são, porém, apresentados alguns valores de energia que estão fora do intervalo que garante que as três primeiras casas decimais são iguais às da energia obtida sem eliminação de elementos de matriz. Isso, porque não havia, entre os resultados, energias no intervalo considerado. No entanto, foram escolhidas por serem as que mais se aproximavam do intervalo de energias considerado.

Mais uma vez, todo o procedimento feito para o potencial Malfliet-Tjon V é repetido para o potencial Paris, sendo em seguida apresentados e discutidos os resultados daí provenientes.

## **B. Potencial Paris**

Nas tabelas 5.24 a 5.26 são apresentadas as dependências dos valores de energia com a eliminação de elementos de matriz na base de multiresolução, para as funções  $\Psi(p)$ ,  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$  usando DAUB4 e DAUB6. Cada uma dessas tabelas é constituída por: uma coluna correspondente às frações,  $\varepsilon$ , do elemento de matriz com maior valor absoluto, que serviram de critério para eliminar elementos de matriz; uma coluna com as percentagens de elementos de matriz não nulos que restaram após eliminação de elementos de matriz inferiores ao limiar; uma coluna com a energia, E, do estado ligado

Potencial Paris: $\Psi(p)$						
$\varepsilon$	DAUB4			DAUB6		
	%	E (MeV)	$N_c$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-20}$	100	-2.2242513	3.13E+14	100	-2.2242502	6.45E+14
$10^{-14}$	60.97	-2.2242513	1.93E+14	34.75	-2.2242502	5.67E+14
$10^{-12}$	29.13	-2.2242514	5.62E+14	15.67	-2.2242502	5.64E+14
$10^{-10}$	11.11	-2.2242556	1.84E+14	6.30	-2.2242490	7.74E+16
$10^{-9}$	6.49	-2.2242477	2.09E+14	3.94	-2.2242322	2.64E+14
$10^{-8}$	3.76	-2.2214431	2.68E+14	2.36	-2.2242798	6.67E+12
$10^{-7}$	2.26	-2.2233276	1.34E+13	1.37	-2.1916578	2.72E+14
$10^{-6}$	1.24	-2.5293427	5.72E+14	0.82	-2.0885406	2.57E+13
$10^{-5}$	0.64	-2.2119548	2.52E+07	0.54	-3.3265953	3.85E+07

(a) (b)

Tabela 5.24: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando  $\Psi(p)$  e as *wavelets* (a) DAUB4 e (b) DAUB6. A coluna  $\varepsilon$  corresponde às frações do elemento da matriz com maior valor absoluto. A coluna % contém a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{fb}=512$ .

obtida após eliminação de elementos de matriz; e uma coluna com o número de condição do sistema,  $N_c$ .

Como para o potencial de Malfiet-Tjon V, a análise dos resultados apresentados nas tabelas 5.24 a 5.26 é feita comparando as percentagens de elementos de matriz não nulos que são necessárias para obter uma mesma energia.

A energia obtida de sistemas com 100% de elementos de matriz não nulos foi diferente usando DAUB4 da obtida usando DAUB6, sendo, respectivamente, -2.224513 MeV e -2.224502 MeV. O primeiro desses valores serviu de referência para as energias obtidas, quando se fazem diferentes eliminações

Potencial Paris: $\gamma(p)$						
$\varepsilon$	DAUB4			DAUB6		
	%	E (MeV)	$N_c$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-20}$	100	-2.2242513	9.15E+12	100	-2.2242502	3.39E+13
$10^{-14}$	65.87	-2.2242514	2.01E+13	36.06	-2.2242503	7.53E+12
$10^{-12}$	29.82	-2.2242514	2.02E+13	15.60	-2.2242503	7.67E+12
$10^{-10}$	10.12	-2.2242515	2.95E+13	5.19	-2.2242522	6.30E+12
$10^{-9}$	5.42	-2.2242540	2.82E+13	3.03	-2.2242696	1.93E+13
$10^{-8}$	2.83	-2.2242896	5.76E+13	1.82	-2.2242002	1.43E+14
$10^{-7}$	1.46	-2.2247892	3.89E+13	1.07	-2.2252985	2.73E+14
$10^{-6}$	0.74	-2.2250994	1.73E+13	0.66	-2.2288257	1.06E+14
$10^{-5}$	0.39	-2.3881312	4.40E+13	0.46	-2.3649902	1.35E+12
$10^{-4}$	0.25	-3.4022057	8.48E+13	-	-	-

Tabela 5.25: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando  $\gamma(p)$  e as *wavelets* (a) DAUB4 e (b) DAUB6. A coluna  $\varepsilon$  corresponde às fracções do elemento da matriz com maior valor absoluto. A coluna % contém a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema. Para  $\varepsilon = 10^{-4}$  não foi possível efectuar o cálculo usando DAUB6.  $N_{fb}=512$ .

de elementos de matriz, usando DAUB4 e o segundo valor, usando DAUB6. Os desvios das energias obtidas após eliminação de elementos de matriz são calculados em relação a cada um desses valores.

No caso do potencial Malfiet-Tjon V, compararam-se inicialmente as percentagens necessárias para obter a energia exacta, ou seja, a energia resultante antes da eliminação, e a mesma tinha sete casas decimais. Para o potencial Paris, compararam-se as percentagens necessárias para obter a mesma energia que se obteve sem eliminação de elementos de matriz, mas

Potencial Paris: $\Gamma(p)$						
$\varepsilon$	DAUB4			DAUB6		
	%	E (MeV)	$N_c$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-20}$	100	-2.2242513	5.03E+12	100	-2.2242502	8.27E+12
$10^{-10}$	10.42	-2.2242514	3.44E+13	5.03	-2.2242502	4.40E+13
$10^{-9}$	5.53	-2.2242513	1.03E+13	2.96	-2.2242500	1.55E+13
$10^{-8}$	2.82	-2.2242533	8.83E+12	1.76	-2.2242399	5.40E+13
$10^{-7}$	1.42	-2.2243697	1.18E+13	1.01	-2.2242287	1.73E+15
$10^{-6}$	0.70	-2.2379463	7.96E+13	0.60	-2.2256782	7.42E+12
$10^{-5}$	0.37	-2.3752106	3.80E+13	0.43	-2.1817501	2.67E+13
$10^{-4}$	0.23	-2.4813981	6.50E+12	0.34	-2.1105247	5.97E+12

(a) (b)

Tabela 5.26: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando  $\Gamma(p)$  e as *wavelets* (a) DAUB4 e (b) DAUB6. A coluna  $\varepsilon$  corresponde às frações do elemento da matriz com maior valor absoluto. A coluna % contém a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{fb}=512$ .

desta vez com uma menor precisão, ou seja, em vez das anteriores sete casas decimais consideram-se cinco.

Após eliminação de elementos de matriz, nem todos os sistemas, para o potencial Paris, levaram à obtenção da energia que se obteve sem qualquer eliminação, com sete casas decimais. Por isso, apesar de se proceder como para o potencial Malfliet-Tjon V (onde se procuram percentagens necessárias para obter uma mesma energia), começou por se considerar uma energia com cinco casas decimais. Outra razão para esta redução no número de casas decimais, da energia que serve como referência de partida, deve-se ao seguinte facto: as energias obtidas sem eliminação quando se usa DAUB4 e quando se usa DAUB6 diferem na sexta casa decimal.

Posteriormente, reduziu-se a precisão dessa energia de referência para quatro e três casas decimais. As três situações analisadas estão reunidas, respectivamente nas tabelas 5.27, 5.28 e 5.29.

No primeiro caso em análise, retiram-se das tabelas 5.24 a 5.26 as percentagens de elementos de matriz não nulos necessárias para obter energias no intervalo  $E = -2.224251 \pm 0.000001$  MeV. As percentagens e respectivas energias estão reunidas na tabela 5.27. Ainda nessa tabela está o desvio sofrido pelas energias obtidas após eliminação em relação às energias obtidas sem eliminação de elementos de matriz, respectivamente, para DAUB4 e para DAUB6.

Potencial Paris: $E = -2.224251 \pm 0.000001$ MeV						
função	%		$E_c$ (MeV)		$\eta (\times 10^{-6} \%)$	
	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6
$\Psi(p)$	29.13	15.67	-2.2242514	-2.2242502	4.5	0
$\gamma(p)$	10.12	15.60	-2.2242515	-2.2242503	9.0	4.5
$\Gamma(p)$	5.53	2.96	-2.2242513	-2.2242500	0	9.0

Tabela 5.27: Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter energias em  $E = -2.224251 \pm 0.000001$  MeV.  $E_c$  são as energias que resultam dos cálculos com as diferentes percentagens de elementos não nulos.  $\eta(\%) = \frac{|E_c - E_s|}{E_s} 100\%$  é o desvio da energia,  $E_c$ , obtida com eliminação de elementos de matriz em relação à energia,  $E_s$  ( $= -2.2242513$  MeV para DAUB4 e  $= -2.2242502$  MeV para DAUB6), obtida sem eliminação.

No segundo caso em análise,  $E = -2.22425 \pm 0.000005$  MeV foi o intervalo de energia considerado. As percentagens de elementos de matriz não nulos e respectivas energias estão reunidas na tabela 5.28, bem como o desvio sofrido pelas energias obtidas após eliminação.

Por fim, para o último caso em análise as percentagens necessárias para obter energias no intervalo  $E = -2.2242 \pm 0.0001$  MeV estão reunidas na tabela 5.29. Essa tabela contém também as energias obtidas com as diferentes

Potencial Paris: $E = -2.22425 \pm 0.000005$ MeV						
função	%		$E_c$ (MeV)		$\eta (\times 10^{-4} \%)$	
	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6
$\Psi(p)$	6.49	6.30	-2.2242477	-2.2242490	1.6	0.54
$\gamma(p)$	5.42	5.19	-2.2242540	-2.2242522	1.2	0.9
$\Gamma(p)$	2.82	2.96	-2.2242533	-2.2242500	0.9	0.09

Tabela 5.28: Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter energias em  $E = -2.22425 \pm 0.000005$  MeV.  $E_c$  são as energias que resultam dos cálculos com as diferentes percentagens de elementos não nulos.  $\eta(\%) = \frac{|E_c - E_s|}{E_s} 100\%$  é o desvio da energia,  $E_c$ , obtida com eliminação de elementos de matriz em relação à energia,  $E_s$  ( $= -2.2242513$  MeV para DAUB4 e  $= -2.2242502$  MeV para DAUB6), obtida sem eliminação.

Potencial Paris: $E = -2.2242 \pm 0.0001$ MeV						
função	%		$E_c$ (MeV)		$\eta (\times 10^{-4} \%)$	
	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6
$\Psi(p)$	6.49	2.36	-2.2242477	-2.2242798	1.6	13
$\gamma(p)$	2.83	1.82	-2.2242896	-2.2242002	17	50
$\Gamma(p)$	2.82	1.01	-2.2242533	-2.2242287	0.9	9.7

Tabela 5.29: Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter energias em  $E = -2.2242 \pm 0.0001$  MeV.  $E_c$  são as energias que resultam dos cálculos com as diferentes percentagens de elementos não nulos.  $\eta(\%) = \frac{|E_c - E_s|}{E_s} 100\%$  é o desvio da energia,  $E_c$ , obtida com eliminação de elementos de matriz em relação à energia,  $E_s$  ( $= -2.2242513$  MeV para DAUB4 e  $= -2.2242502$  MeV para DAUB6), obtida sem eliminação.

percentagens de elementos de matriz não nulos e o desvio sofrido por essas energias.

Pode ver-se, pela tabela 5.27, que, para todos os sistemas, com menos de 30% de elementos de matriz diferentes de zero se consegue obter uma energia



com uma precisão de cinco casas decimais. Resultados com essa precisão levam a reduções, da quantidade de elementos de matriz, superiores a 70%, com desvios percentuais, nos valores da energia obtida após eliminação de elementos de matriz face às energias obtidas sem eliminação de elementos de matriz, da ordem das milionésimas.

Se se pretende obter uma energia com uma precisão de apenas quatro casas decimais, a percentagem de elementos de matriz não nulos decresce para valores inferiores a 6.5%, o que pode significar reduções, da quantidade de elementos de matriz, superiores a 93.5%. Isso pode ser visto na tabela 5.28, na qual consta também que energias obtidas com essas reduções sofrem desvios percentuais da ordem das décimas de milésima.

Da tabela 5.29 retira-se que, a redução na precisão para três casas decimais leva a um aumento na eliminação de elementos de matriz não nulos para valores que podem ir de 93.5 a 99% e com desvios percentuais, nos valores das energias obtidas, da ordem das centésimas.

Na secção que se segue é feita uma tentativa de simplificação do método *wavelet* e são apresentados e discutidos os resultados para os sistemas de equações lineares reformulados a partir das funções  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$ , usando o potencial de Malfliet-Tjon V.

### 5.3 Método *wavelet* simplificado

A razão que nos motivou a procurar simplificar o método *wavelet* foi a complexidade encontrada no processo de formulação da equação integral na base *scaling*. Nomeadamente, a necessidade de dedução de sistemas de equações lineares para calcular os  $N_{mn}$  e outros para calcular os momentos parciais das funções *scaling*. Se já é difícil para  $K = 2$  e 3, ainda será mais para outro  $K$  superior ou para outro tipo de *wavelets*. Poder implementar o método *wavelet* sem ter de calcular os  $N_{mn}$  e os momentos da função *scaling*

seria uma simplificação significativa do método.

No tratamento de imagens (por exemplo) a aplicação de *wavelets* consiste na implementação da transformação *wavelet* a matrizes de dados. Os elementos dessas matrizes podem ser entendidos como os coeficientes de expansão na base *scaling* que são transformados para a base de multiresolução. Nesta perspectiva, quaisquer conjuntos de dados podem ser entendidos como coeficientes de expansão numa base *scaling*, a uma escala de partida  $j$ , que podem ser transformados para outra base em que grande parte dos coeficientes de expansão têm valores tão pequenos, comparativamente com os restantes, que podem ser eliminados.

Com base nesta ideia, qualquer equação integral que se pretenda resolver, usando *wavelets*, não necessita ser explicitamente formulada na base *scaling*, bastando, no entanto, ser obtido um correspondente sistema de equações lineares com um qualquer método já conhecido, por exemplo através da expansão numa base ortogonal qualquer (métodos do tipo Garlekin) ou pela discretização da integração com uma regra de quadratura (*collocation method*). As matrizes de coeficientes daí resultantes serão densas. Para termos matrizes esparsas basta aplicar a transformação *wavelet* e proceder à eliminação de elementos inferiores a um limiar escolhido.

Como exemplo da aplicação deste método simplificado são apresentados e discutidos nesta secção os resultados da aplicação da DWT aos sistemas provenientes da discretização da equação integral pela regra de quadratura de Gauss-Legendre, usando o potencial Malfiet-Tjon V. Tal como a secção anterior, esta divide-se em duas subsecções: uma onde se apresentam primeiro as energias obtidas usando *wavelets* sem eliminação de elementos de matriz; e outra onde se avalia o efeito da eliminação de elementos de matriz nos valores de energia obtidos desses sistemas uma vez transformados para a base de multiresolução.

## A. Potencial Malfliet-Tjon V

### 5.3.1 Discretização Gauss-Legendre e base de multiresolução

Nesta subsecção procura-se a convergência da energia com o aumento do número de pontos de quadratura em vez do número de funções de base usado na secção 5.2.

Nas tabelas 5.30 e 5.31 estão apresentadas as convergências de energia com o número de pontos de quadratura quando se resolvem os sistemas reformulados a partir das funções  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$ , usando DAUB4 e DAUB6.

Os resultados usando igual número de pontos de quadratura são exatamente iguais para  $\gamma(p)$  e para  $\Gamma(p)$  usando DAUB4 e DAUB6. Isso pode ser comprovado nas tabelas 5.30 e 5.31. A energia converge para o valor  $-0.3494937$  MeV ao fim de 256 pontos de quadratura. Ao fim dos 128 obtém-se a energia,  $-0.34949$  MeV, de referência. Número esse (de pontos de quadratura) superior àquele a partir do qual se atingiu a convergência no

Pot. M. Tjon V: $\gamma(p)$ – DAUB4			Pot. M. Tjon V: $\Gamma(p)$ – DAUB4		
Gauss-Legendre/ <i>wavelet</i>			Gauss-Legendre/ <i>wavelet</i>		
$N_{gl}$	E (MeV)	$N_c$	$N_{gl}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3532596	1.0835489E+09	16	-0.3532596	5.7369089E+08
32	-0.3496582	2.3140292E+12	32	-0.3496582	1.2134330E+12
64	-0.3495004	2.2627257E+10	64	-0.3495004	1.1789833E+10
128	-0.3494941	3.8182005E+09	128	-0.3494941	1.9829410E+09
256	-0.3494937	3.6843684E+09	256	-0.3494937	1.9102909E+09
512	-0.3494937	2.8278871E+09	512	-0.3494937	1.4650162E+09

(a)

(b)

Tabela 5.30: Dependência da energia, E, com o número de pontos Gauss-Legendre,  $N_{gl}$ , usando DAUB4.  $N_c$  é o número de condição do sistema.

Pot. M. Tjon V: $\gamma(p)$ – DAUB6			Pot. M. Tjon V: $\Gamma(p)$ – DAUB6		
Gauss-Legendre/ <i>wavelet</i>			Gauss-Legendre/ <i>wavelet</i>		
$N_{gl}$	E (MeV)	$N_c$	$N_{gl}$	E (MeV)	$N_c$
16	-0.3532596	1.0835489E+09	16	-0.3532596	5.7369090E+08
32	-0.3496582	2.3140874E+12	32	-0.3496582	1.2132644E+12
64	-0.3495004	2.2627233E+10	64	-0.3495004	1.1789798E+10
128	-0.3494941	3.8182002E+09	128	-0.3494941	1.9829403E+09
256	-0.3494937	3.6843721E+09	256	-0.3494937	1.9102922E+09
512	-0.3494937	2.8278883E+09	512	-0.3494937	1.4650156E+09

(a)

(b)

Tabela 5.31: Dependência da energia, E, com o número de pontos Gauss-Legendre,  $N_{gl}$ , usando DAUB6.  $N_c$  é o número de condição do sistema.

método de referência. A razão para a diferença é devida ao constrangimento imposto pelo algoritmo piramidal de apenas permitir números diádicos.

Os resultados das tabelas 5.30 e 5.31 correspondem a ter a equação formulada na base de multiresolução. Uma vez nessa base são eliminados elementos de matriz inferiores ao limiar escolhido e procede-se à posterior resolução do sistema de equações. Os resultados daí obtidos são apresentados a seguir.

### 5.3.2 Base de multiresolução com eliminação de elementos de matriz

Nesta subsecção são usados 512 pontos de quadratura comparativamente às 512 funções de base consideradas anteriormente.

Nas tabelas 5.32 a 5.35 são apresentadas as energias obtidas após a

Pot. Malfiet-Tjon V: $\gamma(p)$ - DAUB4				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-20}$	0	100	-0.3494937	2.83E+09
$10^{-7}$	235245	10.26	-0.3494937	3.22E+09
$10^{-6}$	247866	5.45	-0.3494950	2.65E+09
$10^{-5}$	255679	2.47	-0.3494912	1.26E+09
$10^{-4}$	259658	0.95	-0.3495374	5.43E+09
$10^{-3}$	261121	0.39	-0.3515315	1.80E+09
$10^{-2}$	261520	0.24	-0.3404445	7.35E+02

Tabela 5.32: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB4 e  $\gamma(p)$ . A 1ª coluna contém a fração,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{qt}=512$ .

eliminação de diferentes quantidades de elementos de matriz. As tabelas também contêm: o número de elementos de matriz, inferiores ao limiar, tornados nulos; as percentagens de elementos de matriz diferentes de zero que restaram após a eliminação de elementos de matriz; e o número de condição do sistema.

A análise de resultados foi feita como anteriormente para o potencial Malfiet-Tjon V. Começou-se com uma energia de referência com sete casas decimais e depois reduziu-se a sua precisão para cinco e três casas decimais. Para cada um dos casos foram retiradas das tabelas 5.32 a 5.35 as percentagens de elementos não nulos necessárias para obter uma energia num intervalo centrado na energia de referência com a precisão considerada. As percentagens e respectivas energias estão reunidas, para cada um dos casos de diferente precisão, respectivamente nas tabelas 5.36, 5.37 e 5.38.

Pot. Malfliet-Tjon V: $\gamma(p)$ - DAUB6				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-21}$	0	100	-0.3494937	2.83E+09
$10^{-8}$	236559	9.76	-0.3494937	2.58E+09
$10^{-6}$	253441	3.32	-0.3494936	2.26E+09
$10^{-5}$	257632	1.72	-0.3494897	2.14E+10
$10^{-4}$	260090	0.78	-0.3494419	2.55E+09
$10^{-3}$	261195	0.36	-0.3517125	6.13E+08
$10^{-2}$	261515	0.24	-0.3744698	1.51E+09

Tabela 5.33: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB6 e  $\gamma(p)$ . A 1ª coluna contém a fração,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{gl}=512$ .

Pot. Malfliet-Tjon V: $\Gamma(p)$ - DAUB4				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-20}$	0	100	-0.3494937	1.47E+09
$10^{-6}$	243964	6.94	-0.3494937	2.30E+09
$10^{-5}$	253977	3.12	-0.3494948	1.39E+09
$10^{-4}$	259062	1.18	-0.3495661	1.23E+09
$10^{-3}$	261010	0.43	-0.3483876	1.97E+06
$10^{-2}$	261510	0.24	-0.3711038	7.32E+08

Tabela 5.34: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB4 e  $\Gamma(p)$ .  $N_c$  é A 1ª coluna contém a fração,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{gl}=512$ .

Pot. Malfliet-Tjon V: $\Gamma(p)$ – DAUB6				
$\varepsilon$	$N_{elem}$	%	E (MeV)	$N_c$
$10^{-22}$	0	100	-0.3494937	1.47E+09
$10^{-20}$	253134	3.44	-0.3494937	1.36E+09
$10^{-5}$	257500	1.77	-0.3494939	9.89E+08
$10^{-4}$	260069	0.79	-0.3494956	8.03E+10
$10^{-3}$	261211	0.36	-0.3502765	1.80E+10
$10^{-2}$	261543	0.23	-0.3600655	5.28E+09

Tabela 5.35: Dependência da energia, E, com a eliminação dos elementos de matriz usando DAUB6 e  $\Gamma(p)$ . A 1ª coluna contém a fracção,  $\varepsilon$ , do elemento da matriz com maior valor absoluto. A 2ª o número de elementos de matriz eliminados,  $N_{elem}$ . A 3ª a percentagem de elementos de matriz diferentes de zero.  $N_c$  é o número de condição do sistema.  $N_{gt}=512$ .

Como se pode ver pela tabela 5.36, consegue-se obter uma energia com sete casas decimais exactas quando se eliminam cerca de 90% dos elementos de matriz quando se usam sistemas reformulados a partir da função  $\gamma(p)$  e cerca de 95% para a função  $\Gamma(p)$ .

Pot. Malfliet-Tjon V: E=-0.3494937 MeV		
função	%	
	DAUB4	DAUB6
$\gamma(p)$	10.3	9.8
$\Gamma(p)$	6.9	3.4

Tabela 5.36: Percentagens de elementos de matriz não nulos com que se obtém a energia, -0.3494937 MeV, obtida sem eliminação de elementos de matriz.

Quando se reduz a precisão para cinco casas decimais a quantidade de elementos de matriz eliminados pode ser superior aos 98% quando se usam

*wavelets* de ordem  $K = 3$ , com um desvio, nos valores da energia da ordem das décimas de milésima. O que se pode comprovar pela tabela 5.37.

Potencial Malfliet-Tjon V: $E = -0.34949 \pm 0.000005$ MeV						
função	%		$E_c$ (MeV)		$\eta (\times 10^{-4}\%)$	
	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6
$\gamma(p)$	5.45	1.72	-0.3494950	-0.3494897	3.7	11
$\Gamma(p)$	3.12	1.77	-0.3494948	-0.3494939	1.1	0.6

Tabela 5.37: Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter energias em  $E = -0.34949 \pm 0.000005$  MeV.  $E_c$  são as energias que resultam dos cálculos com as diferentes percentagens de elementos não nulos.  $\eta(\%) = \frac{|E_c - E_s|}{E_s} 100\%$  é o desvio da energia,  $E_c$ , obtida com eliminação de elementos de matriz em relação à energia,  $E_s = -0.3494937$  MeV, obtida sem eliminação.

Por fim, na tabela 5.38, pode ver-se que com uma redução de cerca de 99% dos elementos de matriz ainda se conseguem obter energias com uma precisão de três casas decimais e com um desvio percentual da ordem das centésimas.

Potencial Malfliet-Tjon V: $E = -0.3495 \pm 0.00005$ MeV						
função	%		$E_c$ (MeV)		$\eta(\%)$	
	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6	DAUB4	DAUB6
$\gamma(p)$	0.95	0.78	-0.3495374	-0.3494419	0.012	0.015
$\Gamma(p)$	1.18*	0.79	-0.3495661*	-0.3494956	0.021	0.0005

Tabela 5.38: Percentagens de elementos de matriz não nulos para obter energias em  $E = -0.3495 \pm 0.00005$  MeV.  $E_c$  são as energias que resultam dos cálculos com as diferentes percentagens de elementos não nulos.  $\eta(\%) = \frac{|E_c - E_s|}{E_s} 100\%$  é o desvio da energia,  $E_c$ , obtida com eliminação de elementos de matriz em relação à energia,  $E_s = -0.3494937$  MeV, obtida sem eliminação. O valor com \* está fora do intervalo de energia considerado, mas foi escolhido por não haver nenhum valor no intervalo e esse ser o que mais se aproximava.



Pelos resultados obtidos nesta secção podemos concluir que foi bem sucedida a tentativa de simplificação do método *wavelet*. O ponto fulcral da simplificação consiste em não ser necessário toda aquela dedução dos sistemas de equações lineares na base *scaling* exposta no capítulo 4 e complementada com o apêndice B referente à dedução dos sistemas de equações lineares para determinar os  $N_{mn}$ .

Existem também técnicas com *wavelets* que permitem tratar as singularidades que surgem em problemas como a dispersão nucleão-nucleão. No entanto, com a simplificação aqui apresentada, as singularidades podem ser tratadas com os métodos convencionais seguidos por uma transformação *wavelet*.

Na secção que se segue são comparadas as funções de onda provenientes da resolução dos sistemas de equações discutidos nas secções 5.1, 5.2 e 5.3.

## 5.4 Funções de onda normalizadas

A comparação entre as funções de onda obtidas pelo método de referência e pelo método *wavelet* permite-nos visualizar melhor como os resultados se aproximam. Em particular, qual o desvio à forma original da função de onda provocado pela eliminação de elementos de matriz na base de multiresolução.

Na secção 5.2, foi considerado que os sistemas de equações formulados na base *scaling* podiam ser representados, na forma matricial, pelo sistema (5.1), enquanto que quando formulados na base de multiresolução seriam representados por (5.4). Assim, a partir do vector solução,  $\mathbf{X}$ , de (5.1) pode construir-se a função de onda do deutério na base *scaling* e a partir do vector solução,  $\tilde{\mathbf{X}}$ , de (5.4) pode construir-se a função de onda na base de multiresolução.

A função de onda do deutério, no entanto, não foi construída na base

de multiresolução. Como o sistema (5.1) pode ser obtido a partir de (5.4) através da transformação *wavelet* inversa, também o vector solução,  $\mathbf{X}$ , de (5.1) pode ser obtido a partir do vector solução,  $\tilde{\mathbf{X}}$ , de (5.4) como  $\mathbf{X} = W^T \tilde{\mathbf{X}}$ . Por isso, apesar de se resolverem os sistemas na base de multiresolução, os vectores solução daí provenientes foram transformados para a base *scaling*. As comparações entre funções de onda, provenientes do método *wavelet*, recaíram sempre em representações na base *scaling*.

Uma vez que o sistema de equações teve de ser reformulado por causa da instabilidade numérica na base de multiresolução, apenas interessa analisar os gráficos das funções de onda obtidas a partir dos sistemas reformulados. O gráfico 5.4 permite comprovar a sobreposição das funções de ondas obtidas a partir de cada uma das situações. As funções de onda apresentadas nesse gráfico são obtidas a partir da resolução das equações integrais formuladas na base *scaling*.

Nos gráficos 5.1 a 5.5 são feitas comparações entre as funções de onda obtidas pelo método *wavelet* usando o potencial Malfiet-Tjon V. Os gráficos 5.6 a 5.9 dizem respeito a funções de onda obtidas pelo método *wavelet* usando o potencial Paris. Por último, os gráficos 5.10 e 5.11 correspondem às funções de onda obtidas com método *wavelet* simplificado usando o potencial Malfiet-Tjon V.

O gráfico 5.1 compara a função de onda obtida pelo método *wavelet* quando o sistema de equações foi resolvido na base *scaling*, com a função de onda obtida pelo método de referência. O sistema de equações considerado para este caso, e também nos gráficos 5.2 e 5.3, é o que foi reformulado a partir da função  $\Psi(p)$ .

A partir do gráfico 5.1 comprova-se que discretizar a equação integral pelo método de quadratura de Gauss-Legendre leva ao mesmo resultado que escrevê-la na base *scaling*.

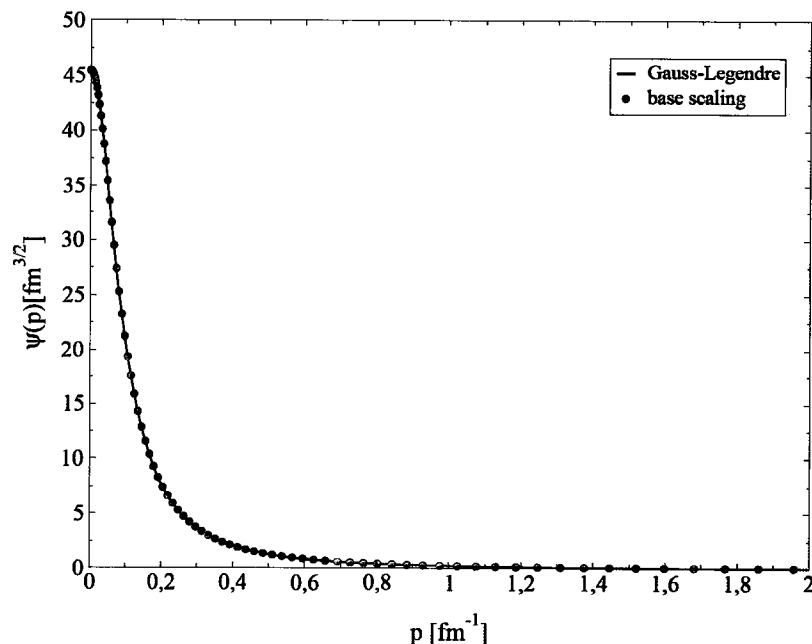


Figura 5.1: Comparação entre a função de onda do deutério obtida com a discretização Gauss-Legendre ( $\psi(p)$ ) e a obtida na base *scaling* ( $\Psi(p)$ ).

No gráfico 5.2 são comparadas as funções de onda provenientes da resolução da equação integral na base *scaling* e da resolução da equação integral na base de multiresolução sem eliminação de elementos de matriz. Isto é, compara-se a função de onda obtida a partir do vector solução,  $\mathbf{X}$ , de (5.1) com a função de onda obtida a partir do vector  $\mathbf{X} = W^T \tilde{\mathbf{X}}$ . Com esta comparação pretende-se verificar a ortogonalidade numérica da transformação wavelet discreta ( $W$ ). A segunda função de onda mencionada é rotulada, no gráfico 5.2, por 'base *scaling* com  $W$  e  $W^{-1}$ ', que significa que o vector que dá origem à função de onda está na base *scaling* após o sistema de equações ser transformado da base *scaling* para a base de multiresolução pela aplicação da  $W$ , ser resolvido nessa base e o vector solução,  $\tilde{\mathbf{X}}$ , daí proveniente ser transformado para a base *scaling* pela aplicação da  $W^{-1}$ .

Novamente as funções de onda sobrepõem-se completamente comprovando-se assim a ortogonalidade da transformação *wavelet* discreta. A partir daqui,

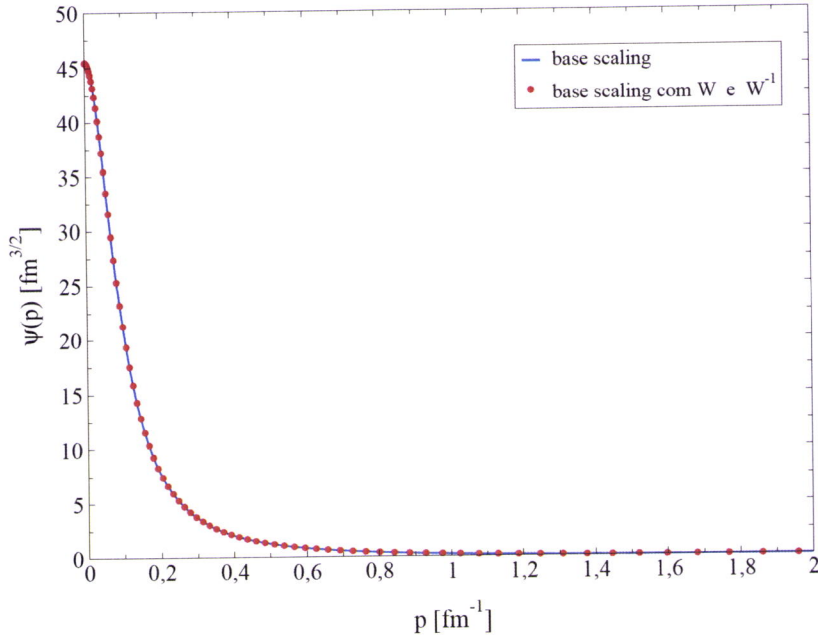


Figura 5.2: Função de onda do deutério: comparação entre as bases *scaling* e de multiresolução, usando  $\Psi(p)$ .

as funções de onda são todas obtidas pelo procedimento da função de onda rotulada por 'base *scaling* com  $W$  e  $W^{-1}$ ', no gráfico 5.2.

Até este ponto, foram usadas as *wavelets* de Daubechies de ordem dois para o cálculo das funções de onda. No gráfico 5.3 é comparada uma função de onda obtida quando se usa DAUB4 com uma função de onda obtida quando se usa DAUB6.

O gráfico 5.3 mostra que usar *wavelets* de Daubechies de ordem dois ou três levam ao mesmo resultado para a função de onda. Em todos os outros gráficos são usadas *wavelets* de ordem dois.

Como já mencionado, o gráfico 5.4 compara três funções de onda, cada uma proveniente da resolução do sistema de equações lineares reformulado a partir de cada uma das três novas funções:  $\Psi(p)$ ,  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$ . Pela total sobreposição das funções comprova-se que são equivalentes as reformulações do sistema de equações lineares. Visto nas seções anteriores termos compro-

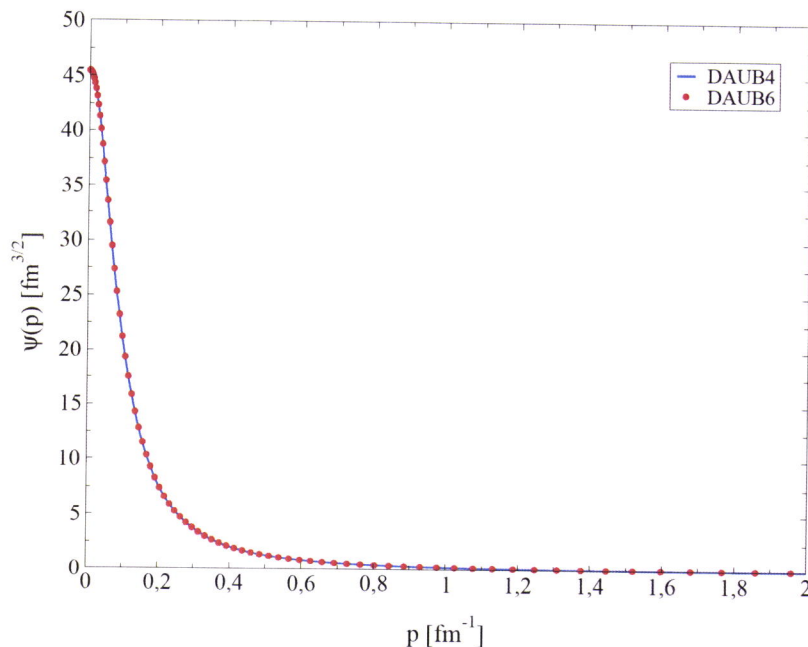


Figura 5.3: Função de onda do deuterão: comparação entre DAUB4 E DAUB6, usando  $\Psi(p)$ .

vado que as funções  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$  levam a resultados ligeiramente melhores que a função  $\Psi(p)$ , decidimos escolher utilizar, nos gráficos seguintes, os sistemas de equações reformulados a partir da função  $\Gamma(p)$ .

Entretanto, são apresentados, no gráfico 5.5, os desvios, à função de onda original, das funções de onda obtidas após serem eliminados elementos de matriz na base de multiresolução. Aqui, as funções de onda foram obtidas do seguinte modo: os sistemas de equações formulados na base *scaling* foram transformados para a base de multiresolução, resolvidos nessa base após terem sido eliminados elementos de matriz. Os vetores solução, para diferentes eliminações, foram novamente transformados para a base *scaling*. Os elementos destes vetores são os coeficientes de expansão da função de onda.

Diferentes eliminações de elementos de matriz correspondem a usar diferentes limiares,  $\varepsilon$ , em relação aos quais são comparados os valores dos

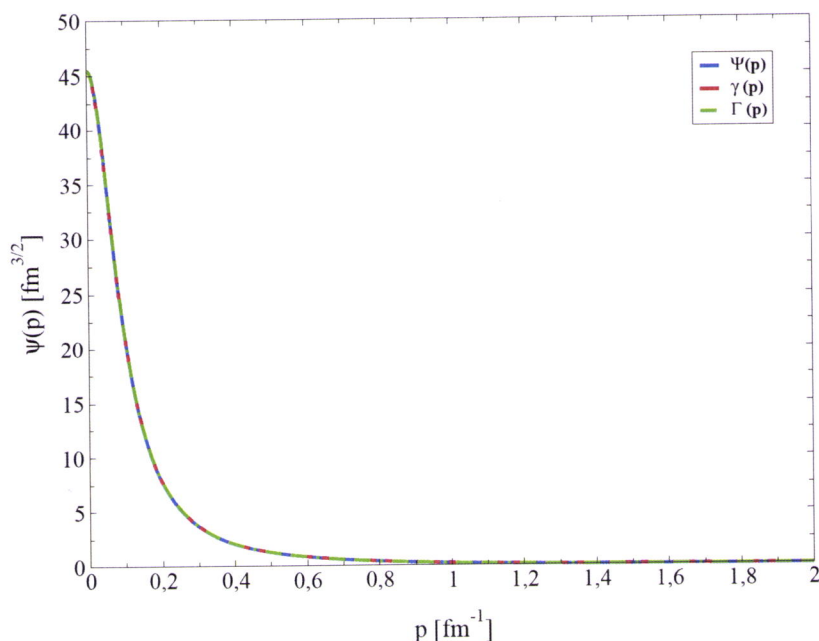


Figura 5.4: Comparação da função de onda do deutério, para o potencial Malfliet-Tjon V, obtida usando as redefinições  $\Psi(p)$ ,  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$ .

elementos de matriz a eliminar. No gráfico 5.5 são apresentadas as funções de onda do deutério usando cinco valores de  $\varepsilon$ , nomeadamente:  $10^{-18}$ ,  $10^{-5}$ ,  $10^{-4}$ ,  $10^{-3}$  e  $10^{-2}$ . Para o menor desses limiares não foram efectivamente eliminados elementos de matriz, o que corresponde a ter 100% de elementos de matriz não nulos. Para os restantes limiares os elementos de matriz não nulos que restaram foram respectivamente: 2.3%, 1.0%, 0.5% e 0.3%.

Os limiares apresentados, bem como as percentagens de elementos de matriz não nulos que restaram para cada caso foram retirados da tabela 5.19 porque as funções de onda aqui analisadas foram obtidas a partir dos sistemas de equações reformulados pela função  $\Gamma(p)$  usando DAUB4 e o potencial Malfliet-Tjon V.

Como se pode ver pelo gráfico 5.5 as funções de onda praticamente não sofrem alterações com a eliminação de elementos da matriz, a não ser quando se eliminaram  $\sim 99.7\%$ . Apenas nesse caso a função de onda se afasta das

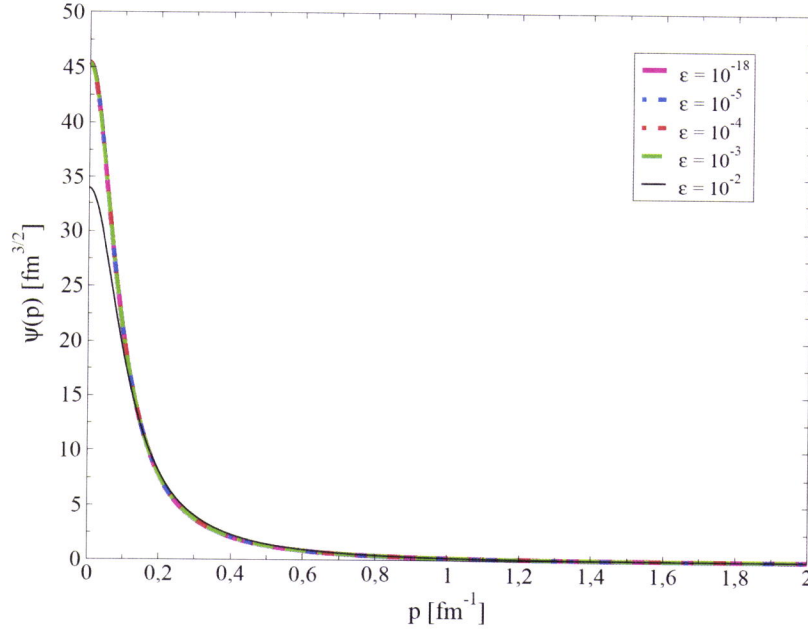


Figura 5.5: Efeito da eliminação de elementos de matriz (na base de multiresolução) na função de onda ( $\Gamma(p)$ ) para o potencial Malfliet-Tjon V. As percentagens de elementos não nulos do menor  $\varepsilon$  para o maior são: 100%, 2.3%, 1.0%, 0.5% e 0.3%.

restantes quando o momento linear tende para zero. Daqui conclui-se que se podem eliminar até  $\sim 99.5\%$  de elementos de matriz sem que a função de onda sofra qualquer alteração visível no gráfico.

Em seguida, compara-se, para o potencial Paris, a função de onda obtida a partir do vector solução do sistema de equações resolvido na base de multiresolução sem eliminação de elementos de matriz, com a função de onda obtida pelo método de referência. Para o potencial Paris, a função de onda contém uma componente S e uma componente D, então são comparadas, em gráficos distintos, as componentes S entre si e as componente D entre si, respectivamente, nos gráficos 5.6 e 5.7.

Os gráficos 5.6 e 5.7 permitem, antes de mais, visualizar o peso relativo que cada uma das componentes têm para a função de onda. A componente S tem claramente uma maior contribuição que a componente D.

A forma como são obtidas as componentes da função de onda usando *wavelets*, nos gráficos 5.6 e 5.7, é a mesma que é descrita relativamente ao gráfico 5.2 para o potencial Malfliet-Tjon V. Por conseguinte, está explicado antes o significado do rótulo 'base *scaling* com  $W$  e  $W^{-1}$ ' que se refere à função de onda obtida usando *wavelets* sem eliminação de elementos de matriz.

Tal como foi comprovado para o potencial Malfliet-Tjon V, também para o potencial Paris se verifica, pelos gráficos 5.6 e 5.7, a equivalência entre discretizar a equação integral usando uma regra de quadratura e escrevê-la numa base. Além disso, é verificada ainda a ortogonalidade da transformação *wavelet* discreta.

Nos gráficos 5.8 e 5.9 são apresentados os desvios, relativamente às componentes da função de onda original, das componentes obtidas após serem eliminados elementos de matriz na base de multiresolução. A forma como são obtidas as componentes S e D é como a descrita anteriormente para o potencial Malfliet-Tjon V, relativamente ao gráfico 5.5.

Nos gráficos 5.8 e 5.9, tal como anteriormente, são apresentadas as funções de onda para diferentes limiares, o que significa, com diferentes quantidades de elementos de matriz eliminados. Agora estamos a considerar funções de onda provenientes dos sistemas de equações reformulados a partir da função  $\Gamma(p)$  usando DAUB4 e o potencial Paris. Como tal, os valores limiares considerados, bem como as percentagens de elementos não nulos que restam, em cada caso, após eliminação de elementos de matriz, são retirados da tabela 5.26.



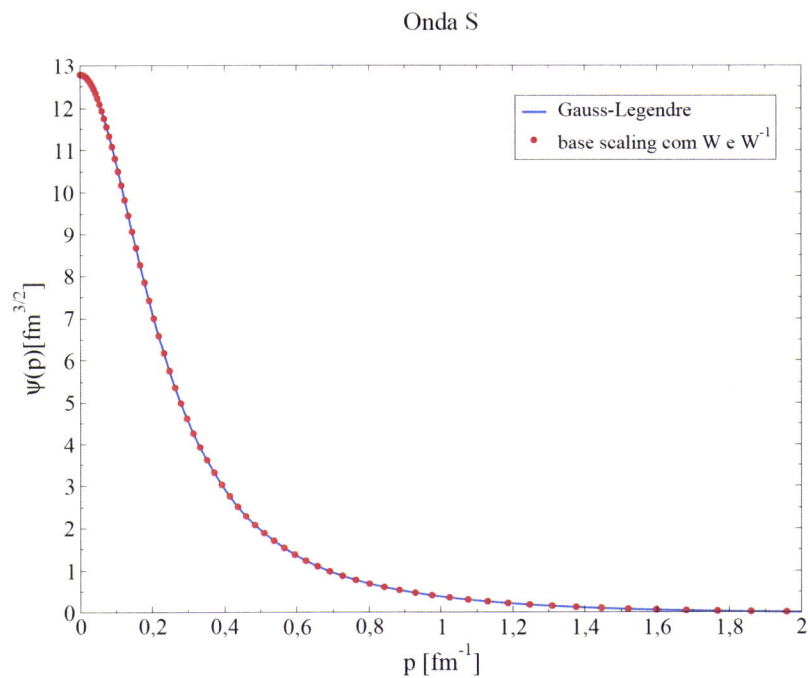


Figura 5.6: Comparação entre a onda S do deutério obtida com a discretização Gauss-Legendre e a obtida usando *wavelets*, com o potencial Paris.

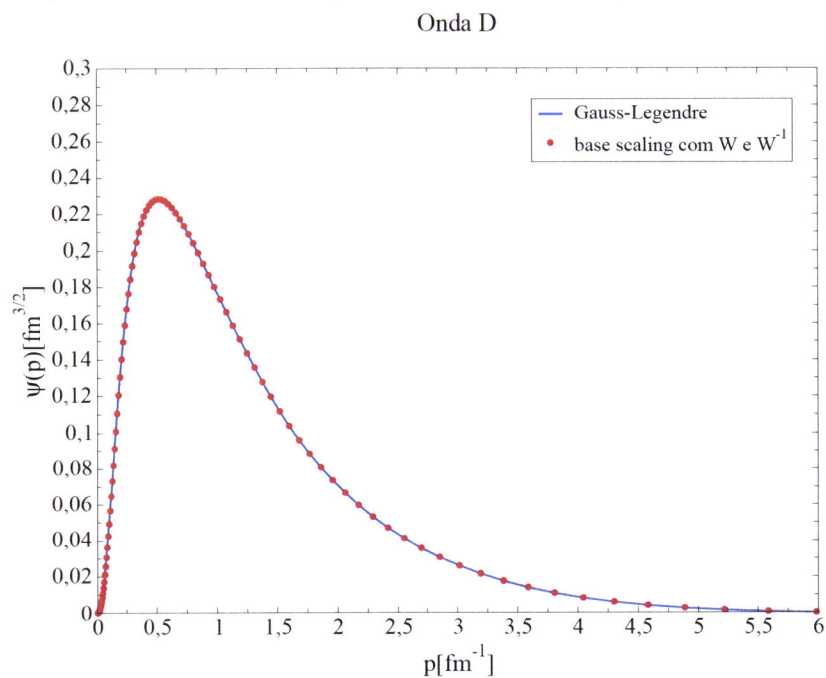


Figura 5.7: Comparação entre a onda D do deutério obtida com a discretização Gauss-Legendre e a obtida usando *wavelets*, com o potencial Paris.

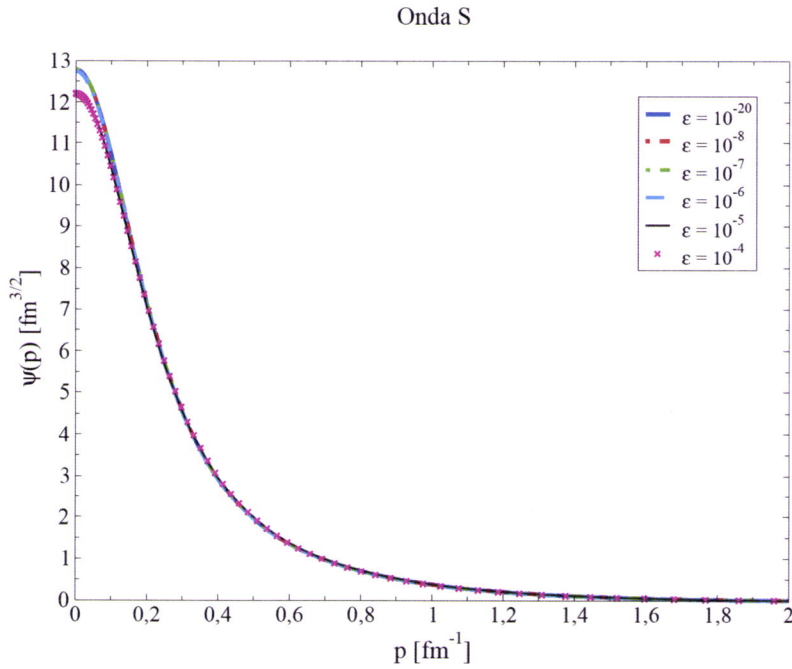


Figura 5.8: Onda S do deuteron obtida com eliminaçao de elementos de matriz usando o potencial Paris. As percentagens de elementos nã nulos do menor  $\varepsilon$  para o maior são: 100%, 2.8%, 1.4%, 0.7%, 0.4% e 0.2%.

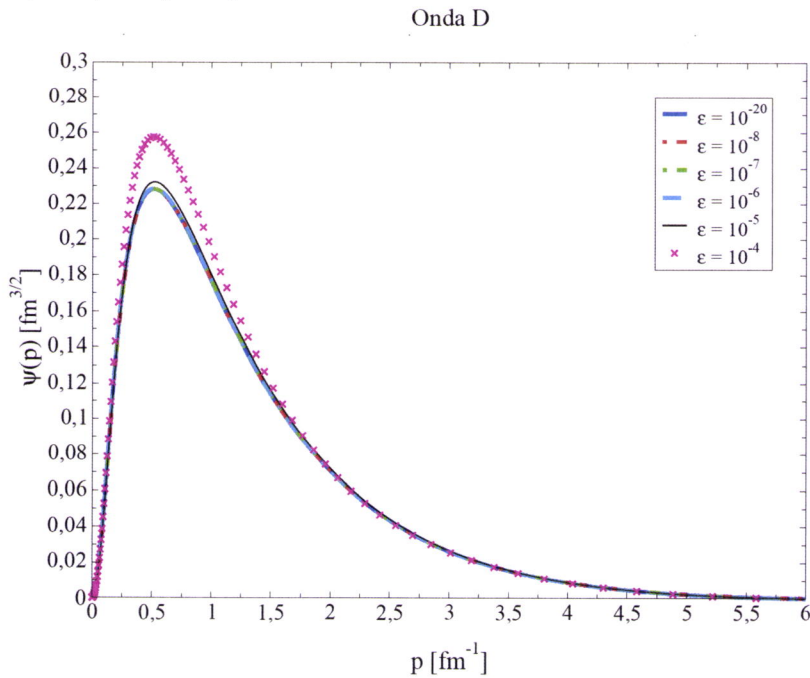


Figura 5.9: Onda D do deuteron obtida com eliminaçao de elementos de matriz usando o potencial Paris. As percentagens de elementos nã nulos do menor  $\varepsilon$  para o maior são: 100%, 2.8%, 1.4%, 0.7%, 0.4% e 0.2%.

As componentes das funções de onda do deutério apresentadas nos gráficos 5.8 e 5.9 são calculadas usando seis valores de  $\epsilon$ , nomeadamente:  $10^{-20}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-7}$ ,  $10^{-6}$ ,  $10^{-5}$  e  $10^{-4}$ . Para o menor desses limiares não foram efectivamente eliminados elementos de matriz, o que corresponde a ter 100% de elementos de matriz não nulos. Para os restantes limiares os elementos de matriz não nulos que restaram foram respectivamente: 2.8%, 1.4%, 0.7%, 0.4% e 0.2%.

Nos gráficos 5.8 e 5.9 vê-se que ambas as componentes da função de onda não sofrem desvios significativos, relativamente às componentes da função de onda original, até se eliminarem 99.3% de elementos de matriz. Apenas as componentes correspondentes à eliminação de 99.6% e 99.8% apresentam um desvio junto dos valores máximos das componentes S e D das funções de onda.

Por fim, é analisado o caso em que se aplicam *wavelets* à equação integral discretizada pela regra de quadratura de Gauss-Legendre para o potencial Malfliet-Tjon V. Neste caso, discretiza-se a equação integral correspondente à função  $\gamma(p)$ , transforma-se o sistema para a base de multiresolução pela aplicação da transformação *wavelet* discreta ( $W$ ), resolve-se o sistema nessa base e aplica-se a  $W^{-1}$  ao vector solução. A função de onda do deutério, neste caso, é esse vector solução nos pontos de discretização.

No gráfico 5.10 compara-se a função de onda obtida do sistema de equações que resulta da discretização da equação integral, com a função de onda correspondente à equação integral quando formulada na base *scaling* e obtida como descrito para o gráfico 5.2. Essas funções são rotuladas no gráfico 5.10, respectivamente, por 'Gauss-Legendre com  $W$  e  $W^{-1}$ ' e por 'base *scaling* com  $W$  e  $W^{-1}$ '. A razão da escolha destes rótulos é a explicada para o gráfico 5.2, embora para o primeiro rótulo apareça Gauss-Legendre em vez de base *scaling* para indicar que se partiu da discretização de equação integral pela regra de quadratura de Gauss-Legendre.

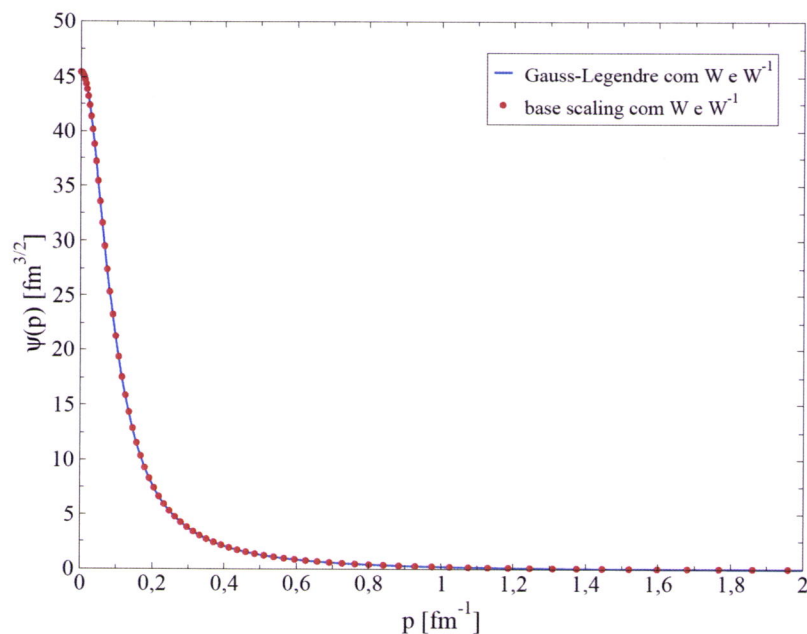


Figura 5.10: Comparação entre a função de onda do deuteron obtida para o potencial Malfliet-Tjon V com Gauss-Legendre/*wavelet* e *scaling/wavelet*.

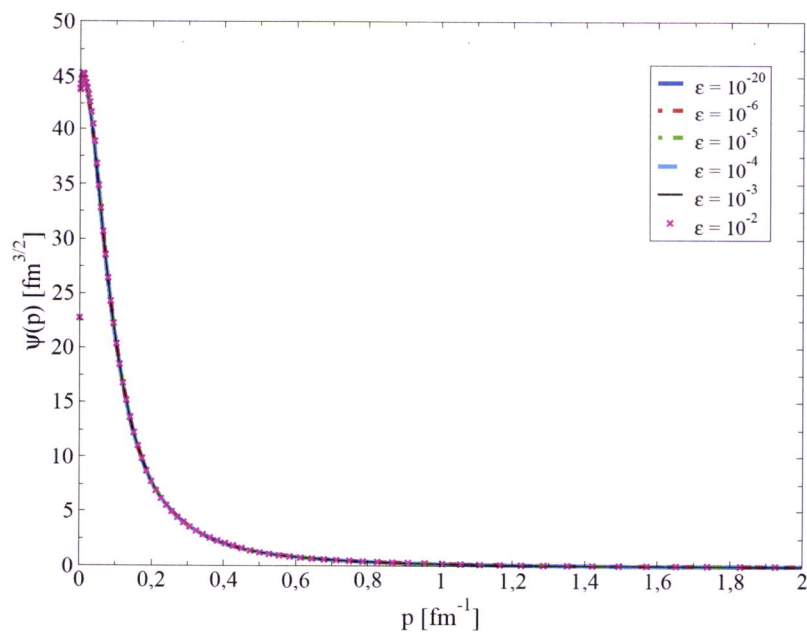


Figura 5.11: Efeito da eliminação de elementos de matriz (na base de multiresolução) na função de onda do deuteron (usando  $\gamma(p)$ ) para o potencial Malfliet-Tjon V. É usada a discretização Gauss-Legendre. As percentagens de elementos não nulos do menor  $\epsilon$  para o maior são: 100%, 5.4%, 2.5%, 0.9%, 0.4% e 0.2%.

Do gráfico 5.10 podemos concluir que é dispensável formular a equação primeiro na base *scaling*, uma vez que a função de onda obtida a partir da equação integral discretizada se sobrepõe perfeitamente à função de onda obtida a partir da equação integral formulada na base *scaling*.

O gráfico 5.11 diz respeito às funções de onda obtidas após serem eliminados elementos de matriz usando o método *wavelet* simplificado.

Neste caso, estamos a considerar funções de onda provenientes dos sistemas de equações reformulados a partir da função  $\gamma(p)$ , usando o potencial Malfliet-Tjon  $V$  e o método *wavelet* simplificado com *wavelets* DAUB4. Assim, os valores limiares considerados e as percentagens de elementos não nulos que restam, em cada caso, após eliminação de elementos de matriz, são retirados da tabela 5.32. São calculadas as funções de onda do deutério para os seguintes valores de  $\varepsilon$ :  $10^{-20}$ ,  $10^{-6}$ ,  $10^{-5}$ ,  $10^{-4}$ ,  $10^{-3}$  e  $10^{-2}$ . Para o menor desses limiares não foram eliminados elementos de matriz, o que corresponde a ter 100% de elementos de matriz não nulos. Para os restantes limiares os elementos de matriz não nulos que restaram foram respectivamente: 5.4%, 2.5%, 0.9%, 0.4% e 0.2%.

No gráfico 5.11 vê-se que a função de onda não sofre desvio significativo relativamente à função de onda original.

## Capítulo 6

# Conclusões

A realização deste trabalho permitiu não só aprender, em termos práticos, a implementar o algoritmo, sustentado por *wavelets*, que permite transformar sistemas de equações lineares densos em sistemas esparsos (entenda-se, aqui, que as matrizes de coeficientes são, respectivamente, densas e esparsas); como também, em termos teóricos, explorar as potencialidades das *wavelets*. Levando mesmo, este último aspecto, a tentar uma simplificação da sua aplicação a equações integrais.

A utilização de *wavelets* na resolução numérica de equações integrais homogêneas, que era o propósito deste trabalho, foi bem sucedida na medida em que não só foi possível resolver as equações integrais usando *wavelets* mas porque foram também encontradas vantagens significativas da sua utilização. Chegou-se a esta conclusão, por um lado, pela análise efectuada aos desvios que as energias, obtidas após eliminação de elementos de matriz, sofrem em relação à energia obtida antes da eliminação; por outro lado, pela comparação das respectivas funções de onda.

Da análise dos valores de energia obtidos, conclui-se que, para o potencial Malfliet-Tjon V, com eliminações de cerca de 99% dos elementos de matriz se obtêm energias com uma precisão de três casas decimais, cujo desvio

percentual, em relação à energia exacta, é da ordem das centésimas. E se se pretender obter uma energia com uma precisão maior, ainda se consegue uma eliminação substancial dos elementos de matriz. Podem-se eliminar mais de 95% e ainda assim se obtêm energias com uma precisão de cinco casas decimais e um desvio percentual da ordem das décimas de milésima. Esta conclusão é válida para os resultados obtidos, para o potencial Malfliet-Tjon V, não só quando, inicialmente, se escreve a equação integral na base *scaling* (secção 5.2), como também quando se parte de sistemas de equações que resultam da discretização da equação integral com a regra de quadratura de Gauss-Legendre (secção 5.3).

Por seu turno, para o potencial Paris, conclui-se que para obter energias com uma precisão de três ou quatro casas decimais se podem eliminar desde 93% até 97% ou 99% dos elementos de matriz, respectivamente. Para estas situações as energias obtidas apresentam desvios percentuais, respectivamente, da ordem das centésimas e das décimas de milésima.

Em relação às ordens (2 e 3) das *wavelets* de Daubechies que foram usadas, não se pode dar preferência a nenhuma das duas em detrimento da outra, pois os resultados obtidos com ambas aproximam-se significativamente. Observa-se que, numas situações os resultados são ligeiramente melhores quando se usa DAUB4 e noutras são ligeiramente melhores quando se usa DAUB6.

Pode dizer-se que a aplicação de *wavelets* ao estado ligado nucleão-nucleão é tão bem sucedida como a, anteriormente estudada, aplicação à dispersão nucleão-nucleão, cujos resultados podem ser vistos em [3]. Na dispersão, contudo, concluiu-se que com DAUB6 se obtiveram melhores resultados.

No caso particular do estado ligado, é de salientar que é preciso ter algum cuidado na implementação do método *wavelet* por poderem resultar sistemas

mal condicionados. Para contornar esse problema é necessária uma pequena manipulação matemática dos sistemas de equações antes de implementar o algoritmo. Em futuras aplicações do método *wavelet* a equações integrais, se, por ventura, ocorrer situação semelhante de mal condicionamento, a manipulação matemática feita neste trabalho pode servir de sugestão para contornar o problema.

A novidade encontrada neste trabalho, face à anterior aplicação de *wavelets* à dispersão nucleão-nucleão, é a simplificação proposta para a implementação do método *wavelet* na resolução de equações integrais. Isto é, a conclusão de que não é necessário começar pela formulação da equação na base *scaling*. Este é, sem dúvida, um aspecto de relevância porque pode reduzir consideravelmente os obstáculos à futura utilização de *wavelets* na resolução de equações integrais de sistemas mais complicados, nomeadamente, problemas de três ou mais corpos, e no domínio relativista. No caso de problemas com singularidades, estas podem ser tratadas pelos métodos convencionais e pode também, nestes casos, usar-se o método *wavelet* simplificado.





# Bibliografia

- [1] I. Daubechies. *Ten Lectures on Wavelets*. SIAM, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, 1992.
- [2] G Kaiser. *A Friendly Guide to Wavelets*. Birkhäuser, 1994.
- [3] B. M. Kessler *et al.* *Few-Body Syst.* **33**, 1 (2003).
- [4] Fatih Bulut and W. N. Polyzou. *Phys. Rev. C* **73**, 024003 (2006).
- [5] Fazlollah M. Reza. *An Introduction to Information Theory*. MacGraw-Hill, New York, 1961.
- [6] J. Morlet *et al.* *Geophysics* **47**, 203 (1982).
- [7] J. Benedetto and W. Frazier, editors. *Wavelets: Mathematics and Applications*. CRC Press, Inc., USA, 1994.
- [8] P. Lima. *Wavelet: Uma Introdução*. Departamento de Matemática - ICEX - UFMG, 2003.
- [9] M. A. Pinsky. *Introduction to Fourier Analysis and wavelets*. Brooks/Cole, 2002.
- [10] J. P. Santos e M. F. Laranjeira. *Métodos Matemáticos para Físicos e Engenheiros*. Fundação da Faculdade de Ciências e Tecnologias, Lisboa, 2004.

- [11] William H. Press *et al.* *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing (Fortran version)*. Cambridge University Press, New York, 1989.
- [12] M. Jansen. *Wavelet Thresholding and Noise Reduction*. PhD thesis, Katholieke Univeriteit Leuven, 2000.
- [13] G. Strang. *Bulletin of the American Mathematical Society (new series)* **48**, 288 (1993).
- [14] Y. Nievergelt. *Wavelets Made Easy*. Birkhäuser Boston, Inc., USA, 1999.
- [15] B. M. Kessler *et al.* *Wavelet Notes*. arXiv:nucl-th/0305025, Iowa University, 2003.
- [16] G. Strang. *SIAM Review* **31**, 613 (1989). Appendix 2.
- [17] David Feldman. *Phys. Rev.* **98**, 1456 (1955).
- [18] W.E. Burcham. *Elements of Nuclear Physics*. Longan Scientific and Technical, 1986.
- [19] T. Mayer-Kuckuk. *Física Nuclear*. Fundação Calouste Gulbenkian, 4<sup>a</sup> edição, Lisboa, 1993.
- [20] K. S. Krane. *Introductory Nuclear Physics*. John Wiley and Sons, Inc., 3rd edition, 1987.
- [21] R.A. Malfiet and J.A. Tjon. *Nucl. Phys. A* **127**, 161 (1969).
- [22] M. Lacombe *et al.* *Phys. Rev. C* **21**, 861 (1980).
- [23] F. B. Hildebrand. *Introduction to Numerical Analysis*. Dover Publications, Inc., New York, 2nd edition, 1986.
- [24] G. Strang. *Introduction to Linear Algebra*. Wellesley-Cambridge Press, Wellesley, 3rd edition, 1998.

- [25] C. Sarowski. *An Introduction to Numerical Analysis for Electrical Computer and Engineers*. John Wiley and Sons, Inc., Canada, 2004.
- [26] F. M. C. Santos. *Fundamentos de Análise Numérica*. Edições Sílabo, Lda., Lisboa, 2002.
- [27] Franz Gross. *Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory*. John Wiley and Sons, Inc., USA, 1993.



# **APÊNDICES**



# Apêndice A

## Cálculo dos momentos parciais da função *scaling* de DAUB4

Suponhamos que a função  $\phi_{j,k}(x)$  sobrepõe o limite inferior do intervalo  $[a, b]$  no qual queremos representar uma função,  $f(x) \in L^2(\mathbb{R})$ , na base *scaling*. Seja o suporte de  $\phi_k(x)$  igual a  $[k, k + 2K - 1]$  para a escala  $j = 0$ . Quando a função  $\phi_k(x)$  sobrepõe  $a$ , então  $k < a < k + 2K - 1$ , logo apenas a parte da função *scaling* em  $[a, k + 2K - 1]$  contribui para a representação. Então, devemos calcular o momento  $\langle x^m \rangle_{\phi[a;2K-1]}$ .

Para  $k = 0$  e  $K = 2$ , o momento  $\langle x^m \rangle_{\phi[a;2K-1]} = \langle x^m \rangle_{\phi[a;3]}$ , onde  $m = 0$  ou  $1$  e  $a = 1$  ou  $2$ . Portanto, tem-se

$$\int_a^3 \phi(x)x^m dx = \int_0^3 \phi(x)x^m dx - \int_0^a \phi(x)x^m dx. \quad (\text{A.1})$$

Os momentos totais são dados na tabela 2.4 e o integral entre 0 e  $a$  da equação (A.1) pode ser calculado multiplicando a equação *scaling* por  $x^m$  e integrando em  $[0, a]$ :

$$\begin{aligned} \int_0^a \phi(x)x^m dx &= \sum_l \sqrt{2} \int_0^a h_l \phi(2x - l)x^m dx \\ \mu_a^{(m)} &= \sum_l \frac{\sqrt{2}}{2} \int_{-l}^{2a-l} h_l \phi(y) \left( \frac{y+l}{2} \right)^m dy \end{aligned}$$



como  $0 \leq l \leq 2K - 1$ , o sub-intervalo de integração  $[-l, 0]$  não pertence ao suporte de  $\phi$  então podemos substituir  $-l$  por 0.

$$\mu_a^{(m)} = \sum_l \frac{h_l}{2} \int_0^{2a-l} \left( \frac{x+l}{2} \right)^m \phi(x) dx$$

Para os momentos de ordem zero, tem-se

$$\begin{aligned} \mu_1^{(0)} &= \int_0^1 \phi(x) dx = \sum_l \frac{h_l}{\sqrt{2}} \int_0^{2-l} \phi(x) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ h_0 \int_0^2 \phi(x) dx + h_1 \int_0^1 \phi(x) dx \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (h_0 \mu_2^{(0)} + h_1 \mu_1^{(0)}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu_2^{(0)} &= \int_0^2 \phi(x) dx = \sum_l \frac{h_l}{\sqrt{2}} \int_0^{4-l} \phi(x) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ h_0 \int_0^4 \phi(x) dx + h_1 \int_0^3 \phi(x) dx + h_2 \int_0^2 \phi(x) dx + h_3 \int_0^1 \phi(x) dx \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ (h_0 + h_1) T^{(0)} + h_2 \mu_2^{(0)} + h_3 \mu_1^{(0)} \right] \end{aligned}$$

onde  $T^{(0)} = 1$ . Daqui, tem-se

$$\begin{cases} \left(1 - \frac{h_1}{\sqrt{2}}\right) \mu_1^{(0)} - \frac{h_0}{\sqrt{2}} \mu_2^{(0)} = 0 \\ -\frac{h_3}{\sqrt{2}} \mu_1^{(0)} + \left(1 - \frac{h_2}{\sqrt{2}}\right) \mu_2^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (h_0 + h_1). \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Com os  $h_k$  da tabela 2.3 resolve-se o sistema de equações (A.2), donde resultam os momentos parciais de ordem zero,  $\mu_1^{(0)}$  e  $\mu_2^{(0)}$ .

Os momentos parciais de ordem um calculam-se de forma análoga, donde resulta o sistema de equações lineares

$$\begin{cases} \left(1 - \frac{h_1}{2\sqrt{2}}\right) \mu_1^{(1)} - \frac{h_0}{2\sqrt{2}} \mu_2^{(1)} = \frac{h_1}{2\sqrt{2}} \mu_1^{(0)} \\ -\frac{h_3}{2\sqrt{2}} \mu_1^{(1)} + \left(1 - \frac{h_2}{2\sqrt{2}}\right) \mu_2^{(1)} = \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[ h_3 \mu_1^{(0)} + h_2 \mu_2^{(0)} + h_1 T^{(0)} + (h_0 + h_1) T^{(1)} \right]. \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

# Apêndice B

## Cálculo dos integrais $N_{mn}$

Numa primeira análise, a aplicação de *wavelets* a equações integrais homogêneas começa por ser feita formulando as equações na base *scaling*. Para uma equação integral cujo limite de integração está compreendido entre 0 e  $b$ , a formulação da equação na base *scaling* leva à necessidade de avaliar integrais,  $N_{mn}$ , definidos como

$$N_{mn} := \int_0^b \phi_m(u)\phi_n(u)du. \quad (\text{B.1})$$

Neste caso, as funções *scaling*  $\phi_m(u)$  e  $\phi_n(u)$  correspondem, respectivamente, à translação  $m$  e  $n$  da função *scaling*  $\phi(u)$ . Isto, a uma escala arbitrária porque os  $N_{mn}$  não dependem da escala. A independência da escala, do integral (B.1), é devida a todas as funções *scaling*, da família de funções considerada neste trabalho, terem norma unitária.

Para melhor compreensão de como calcular os  $N_{mn}$ , serão apresentados alguns esquemas de casos concretos de sobreposições das funções *scaling* nos limites de integração. Apesar de os  $N_{mn}$  serem independentes da escala, devemos escolher uma escala fixa à qual se fazem os cálculos concretos.

Escolhamos a escala  $j = 0$ . Os índices  $m$  e  $n$  variam entre  $-2K + 2$  e  $b - 1$ , que são precisamente os limites para os quais as funções *scaling* contêm pelo menos parte do suporte dentro do intervalo de integração  $[0, b]$ ,

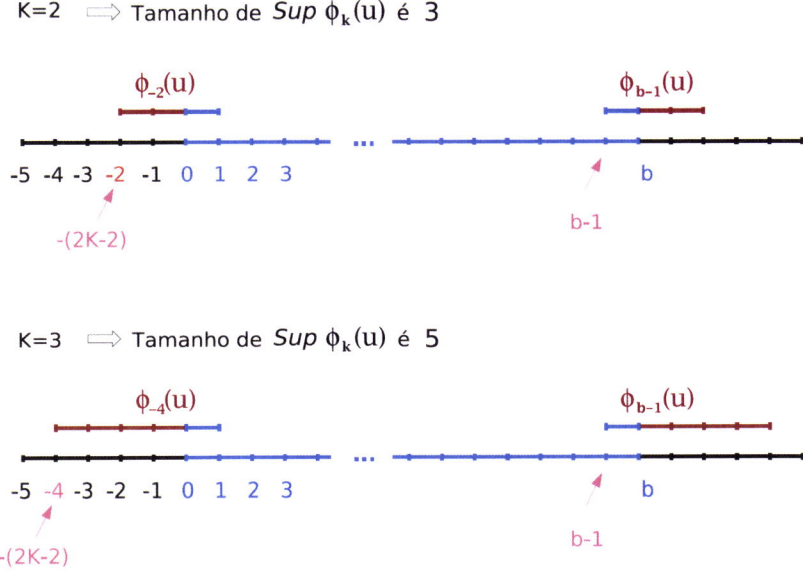


Figura B.1: Intervalo  $[-2K + 2, b - 1]$  correspondente à variação dos índices,  $m$  e  $n$ , da translação das funções *scaling* de Daubechies de ordem 2 e 3. As linhas horizontais abaixo das funções *scaling* indicam o tamanho do seu suporte.

isto é, ainda contribuem para o integral. Quando a ordem das *wavelets* é  $K = 2$  tem-se  $-2 \leq k \leq b - 1$  e quando é  $K = 3$  tem-se  $-4 \leq k \leq b - 1$ , onde  $k = m, n$ . Estes intervalos, da variação dos índices das translações das funções *scaling*, são ilustrados na figura B.1.

Quando tanto  $m$  como  $n$  tomam valores no intervalo  $0 \leq k \leq b - 2K + 1$ , com  $k = m, n$ , ou seja, quando ambas as funções *scaling* têm o suporte completamente contido no intervalo de integração, então, pela ortonormalidade das funções *scaling*,  $N_{mn} = \delta_{mn}$ . No entanto,  $m$  ou  $n$  podem assumir valores fora desse intervalo e aí é necessário calcular os valores de  $N_{mn}$ . Para isso, tal como é feito no capítulo 4, escreve-se a equação *scaling* (2.36) na igualdade (B.1) deste anexo e obtém-se a equação

$$N_{mn}^{0,b} = \sum_{l=0}^{2K-1} \sum_{l'=0}^{2K-1} h_l h_{l'} N_{2m+l, 2n+l'}^{0,2b}. \quad (\text{B.2})$$

Antes de proceder à sua resolução importa salientar qual o significado de

$K=2 \Rightarrow$  Tamanho de  $\text{Sup } \phi_k(u)$  é 3



Figura B.2: Sobreposição dos suportes de duas funções *scaling*, em que apenas um deles sobrepõe o limite inferior de integração.  $\phi_{-1}(u)$  sobrepõe o limite inferior de integração e  $\phi_0(u)$  não.

$m$  e  $n$  pertencerem (ambos os índices ou apenas um dos dois) ao intervalo  $[-2K + 2, 0)$  ou ao intervalo  $[b - 2K + 2, b)$ . Analisemos cada caso em separado: remetamos, para já, a nossa atenção para o intervalo  $[-2K + 2, 0)$ .

Se  $-2K + 2 \leq m < 0$  e  $0 \leq n < b - 2K + 2$ , por exemplo,  $m = -1$  e  $n = 0$ , então temos, respectivamente,  $\phi_{-1}(u)$  e  $\phi_0(u)$ . E o suporte de ambas as funções pode ser representado, para  $K = 2$ , como se mostra na figura B.2.

Como podemos ver nessa figura, o suporte de  $\phi_0(u)$  está completamente dentro de intervalo de integração, enquanto a função  $\phi_{-1}(u)$  sofreu um desvio de uma unidade para a esquerda, pelo que, o seu suporte está parcialmente contido. Desse modo, apenas a parte contida no intervalo de integração, sobreposta com o suporte de  $\phi_0(u)$ , contribui para o cálculo de  $N_{-1,0}$ . Isto é, o integral para  $N_{-1,0}$  compreende as partes dos suportes que delimitam a área sombreada da figura.

Vejamos agora, na figura B.3, o caso em que  $m = -1$  e  $n = -2$ . Neste caso os suportes de  $\phi_{-1}(u)$  e  $\phi_{-2}(u)$  interceptam-se entre -1 e 1, mas apenas a parte entre 0 e 1 contribui para o cálculo de  $N_{-1,-2}$  porque é a parte que está dentro do intervalo de integração.

$K=2 \Rightarrow$  Tamanho de  $\text{Sup } \phi_k(u)$  é 3



Figura B.3: Sobreposição dos suportes de duas funções *scaling*, em que ambos os suportes sobrepõem o limite inferior de integração. Quer  $\phi_{-1}(u)$ , quer  $\phi_{-2}(u)$  sobrepõem o limite inferior de integração.

Olhemos ainda para um terceiro caso, que nos mostra, na figura B.4, que o limite inferior para os valores de  $m$  e  $n$  é  $-2K + 2$ . Por exemplo  $m = -1$  e  $n = -3$ .

$K=2 \Rightarrow$  Tamanho de  $\text{Sup } \phi_k(u)$  é 3



Figura B.4: Sobreposição dos suportes de duas funções *scaling*, em que um sobrepõe o limite inferior de integração e o outro está fora do limite de integração.  $\phi_{-1}(u)$  sobrepõe o limite inferior de integração e  $\phi_{-3}(u)$  está fora do limite de integração.

Apesar de o suporte das funções se sobreporem, nada contribui para o cálculo de  $N_{-1,-3}$  por essa sobreposição estar fora do intervalo de integração. Assim,  $N_{-1,-3}$  será igual a zero.

Para calcular os  $N_{mn}$  no limite inferior de integração é importante que o limite oposto seja suficientemente grande. Isso, de modo a garantir, não só, que uma função *scaling*, que sobrepõe o limite inferior de integração, não sobreponha simultaneamente o limite superior, como também, que funções

$K=2 \Rightarrow$  Tamanho de  $Sup \phi_k(u)$  é 3

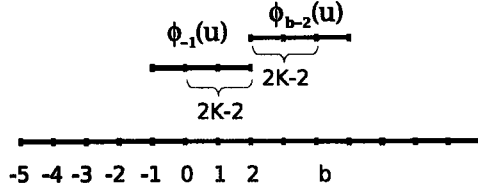


Figura B.5: Ilustração do valor mínimo do limite superior de integração,  $b$ . A condição para o valor mínimo de  $b$  é obtida quando se consideram funções *scaling* que sobrepõem os limites de integração, contendo a maior parte do suporte dentro do intervalo de integração não havendo, contudo, sobreposição de ambas. A função  $\phi_{-1}(u)$  sobrepõe o limite inferior, a função  $\phi_{b-2}(u)$  sobrepõe o limite superior e elas não se podem sobrepor. Nestas condições o valor de  $b$  corresponde, no mínimo à soma da parte dos suportes, de cada uma das funções *scaling*, que está dentro do intervalo de integração.

*scaling* que sobrepõem o limite superior não sobreponham as funções que sobrepõem o limite inferior. Como ilustrado na figura B.5 para as funções *scaling* de ordem  $K = 2$ , a simultaneidade de sobreposições é evitada se o limite superior de integração satisfizer a condição  $b \geq 2(2K - 2)$ .

Por outro lado, pode ver-se, pelas figuras B.2 e B.3, que, quando estamos a considerar a sobreposição da funções *scaling* no limite inferior, seja o limite superior  $b$ ,  $2b$ ,  $3b$  ou outro valor maior, o valor do integral mantém-se inalterado porque só depende do suporte das funções *scaling* que estão junto ao limite inferior de integração. Então, onde temos um intervalo de integração entre 0 e  $2b$ , podemos igualmente considerar entre 0 e  $b$ , e com isso a equação (B.1) fica

$$N_{mn} = \sum_{l=0}^{2K-1} \sum_{l'=0}^{2K-1} h_l h_{l'} N_{2m+l, 2n+l'}. \quad (B.3)$$

Isto é o sistema de equações lineares (4.22) do capítulo 4, no qual se omitem os índices superiores, que indicam o intervalo de integração, por poderem

ser considerados iguais.

A julgar pelas situações analisadas, o suporte de duas funções *scaling* tem de se sobrepor e essa sobreposição tem de estar pelo menos parcialmente dentro do intervalo de integração.

A condição que garante que haja sobreposição das funções *scaling* é

$$|m - n| < 2K - 1. \quad (\text{B.4})$$

Então, os  $N_{mn}$  são calculados para as situações em que pelo menos uma função *scaling* sobrepõe o limite de integração e é satisfeita a condição (B.4).

A condição (B.4) quando, por exemplo, a ordem das *wavelets* é  $K = 2$  fica

$$|m - n| < 3 \Rightarrow |m - n| = 0, 1 \text{ ou } 2$$

e, nesse caso, uma função *scaling* sobrepõe o limite inferior de integração se  $k = -2, -1$ , com  $k = m, n$ . Isto é,

→ para  $m = -2$ ,

$$|-2 - n| = 0, 1 \text{ ou } 2, \text{ então tem-se } n = -2, -1, 0.$$

→ E para  $m = -1$ ,

$$|-1 - n| = 0, 1 \text{ ou } 2, \text{ então tem-se } n = -2, -1, 0, 1.$$

A possibilidade para  $n = -2$  já está contabilizada quando se considera  $m = -2$ , porque  $N_{mn} = N_{nm}$ . Portanto, os valores de  $n$  e  $m$  possíveis, para *wavelets* de ordem  $K = 2$ , quando se considera a sobreposição do limite inferior de integração, são:

$m$	-2	-2	-2	-1	-1	-1
$n$	-2	-1	0	-1	0	1

Para *wavelets* de ordem  $K = 3$  procede-se de modo análogo e as combinações possíveis para os  $N_{mn}$  são as que estão referidas no capítulo 4.

O sistema de equações lineares (B.3) é resolvido tendo em conta as combinações possíveis para  $m$  e  $n$ . Para *wavelets* de ordem  $K = 2$ , comecemos por ilustrar a combinação  $m = -2$  e  $n = -2$ . Neste caso, tem-se

$$N_{-2,-2} = \sum_{l=0}^3 \sum_{l'=0}^3 h_l h_{l'} N_{-4+l, -4+l'}, \quad (\text{B.5})$$

ou seja,

$$\begin{aligned} N_{-2,-2} = & h_0 h_0 N_{-4,-4} + h_0 h_1 N_{-4,-3} + h_0 h_2 N_{-4,-2} + h_0 h_3 N_{-4,-1} + \\ & h_1 h_0 N_{-3,-4} + h_1 h_1 N_{-3,-3} + h_1 h_2 N_{-3,-2} + h_1 h_3 N_{-3,-1} + \\ & h_2 h_0 N_{-2,-4} + h_2 h_1 N_{-2,-3} + h_2 h_2 N_{-2,-2} + h_2 h_3 N_{-2,-1} + \\ & h_3 h_0 N_{-1,-4} + h_3 h_1 N_{-1,-3} + h_3 h_2 N_{-1,-2} + h_3 h_3 N_{-1,-1}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Daqui, podem eliminar-se muitas parcelas porque os  $N_{mn}$  correspondentes são nulos por terem pelo menos um dos índices inferior ao valor limite,  $-2K + 2$ , permitido. Nomeadamente,

$$N_{-4,-4} = N_{-4,-3} = N_{-4,-2} = N_{-4,-1} = N_{-3,-4} = N_{-3,-3} = N_{-3,-2} = N_{-3,-1} = N_{-2,-4} = N_{-2,-3} = N_{-1,-4} = N_{-1,-3} = 0.$$

Assim, resta  $N_{-2,-1}(= N_{-1,-2})$ ,  $N_{-2,-2}$  e  $N_{-1,-1}$ . Logo, (B.6) fica

$$(1 - h_2^2)N_{-2,-2} - 2h_2 h_3 N_{-2,-1} - h_3^2 N_{-1,-1} = 0.$$

Procede-se de modo análogo para as restantes combinações de  $m$  e  $n$  tendo em conta

$$N_{mn} = \begin{cases} \delta_{mn} & , \text{ se } 0 \leq m \leq b-3 \wedge 0 \leq n \leq b-3 \\ 0 & , \text{ se } m < -2 \vee n < -2 \vee |m-n| \geq 3 \\ \sum_{l,l'=0}^3 h_l h_{l'} N_{2m+l, 2n+l'}, & \text{ se } -2 \leq k < 0, k = m, n \wedge |m-n| < 3. \end{cases} \quad (\text{B.7})$$



E chega-se a um sistema de equações lineares que na forma matricial tem o seguinte aspecto

$$\begin{pmatrix} h_2^2 - 1 & 2h_2h_3 & 0 & h_3^2 & 0 \\ h_2h_0 & h_2h_1 + h_3h_0 - 1 & h_2^2 & h_3h_1 & h_3h_2 \\ 0 & 0 & h_2h_0 - 1 & 0 & h_3h_0 \\ h_2^2 & 2h_0h_1 & 2h_0h_2 & h_1^2 - 1 & 2h_1h_2 \\ 0 & 0 & h_0^2 & 0 & h_1h_0 - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_{-2,-2} \\ N_{-2,-1} \\ N_{-2,0} \\ N_{-1,-1} \\ N_{-1,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -h_2^2 - h_3^2 \\ -h_2h_0 - h_3h_1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.8})$$

Substituindo em (B.8) os valores de  $h_0$ ,  $h_1$ ,  $h_2$  e  $h_3$  da tabela 2.3, resolve-se o sistema de equações lineares e obtêm-se os valores de  $N_{mn}$  para as *wavelets* de ordem  $K = 2$ , apresentados na tabela 4.1.

Vejamos agora o caso em que há sobreposição dos suportes das funções *scaling* no limite superior de integração. Como existe a simetria  $N_{mn} = N_{nm}$  podemos sempre escolher  $m \leq n$ . Fazemos essa escolha.

Para funções *scaling* do tipo de Daubechies de ordem  $K$ , o suporte de  $\phi_m(x)$  é  $[m, m + 2K - 1]$ . Sabemos que  $\phi_m(x)$  e  $\phi_n(x)$  são ortogonais se a região de integração inclui completamente o suporte de ambas as funções. Isso acontece, por exemplo, se  $m \leq n$ , para qualquer região que inclua  $[m, n + 2K - 1]$ . Isto é,

$$N_{mn}^{m, n+2K-1} = \int_m^{n+2K-1} du \phi_m(u) \phi_n(u) = \delta_{mn}. \quad (\text{B.9})$$

O que também vale para qualquer limite  $a \leq m$  e  $b \geq n + 2K - 1$ .

Considerando, agora, o caso em que  $m < 0 < n + 2K - 1$ , podemos

dividir o integral (B.9) em

$$N_{mn}^{m,n+2K-1} = N_{mn}^{m,0} + N_{mn}^{0,n+2K-1}. \quad (\text{B.10})$$

Sendo que é válida a igualdade  $N_{mn}^{a,b} = N_{m+k,n+k}^{a+k,b+k}$  para qualquer  $k$  inteiro, o primeiro termo de (B.10) também é

$$N_{mn}^{m,0} = N_{m+b,n+b}^{m+b,b}. \quad (\text{B.11})$$

Uma vez que se considerou o  $b$  suficientemente grande, então  $b \gg |m|$  logo  $m + b > 0$ . Assim,

$$N_{m+b,n+b}^{m+b,b} = N_{m+b,n+b}^{0,b}. \quad (\text{B.12})$$

O segundo termo de (B.10), porque  $b \gg n + 2K - 1$ , pode ficar

$$N_{mn}^{0,n+2K-1} = N_{m+b,n+b}^{0,b}, \quad (\text{B.13})$$

onde o limite de integração é estendido de  $n + 2K - 1$  para  $b$ .

Por (B.12) e (B.13) podemos escrever (B.10) como

$$N_{mn}^{0,b} + N_{m+b,n+b}^{0,b} = \delta_{mn}. \quad (\text{B.14})$$

A igualdade (B.14) pode também ser entendida pela visualização dos gráficos das funções *scaling* que sobrepõem os limites de integração.

Nas figuras B.6 e B.7 está ilustrada a sobreposição das funções *scaling* de Daubechies de ordem  $K = 2$  nos limites inferior e superior de integração. Para esse exemplo, apenas  $\phi_{-1}(u)$  e  $\phi_{-2}(u)$  sobrepõem o limite inferior, 0, e apenas  $\phi_{b-1}(u)$  e  $\phi_{b-2}(u)$  sobrepõem o limite superior,  $b$ .

Pelas figuras B.6 (a) e B.7 (a), pode ver-se que a soma das áreas da função  $\phi_{-1}(u)$  e da função  $\phi_{b-1}(u)$  corresponde à área total de uma função *scaling* completamente contida no intervalo de integração. E pelas figuras B.6 (b) e B.7 (b) pode ver-se que a soma das áreas da função  $\phi_{-2}(u)$  e

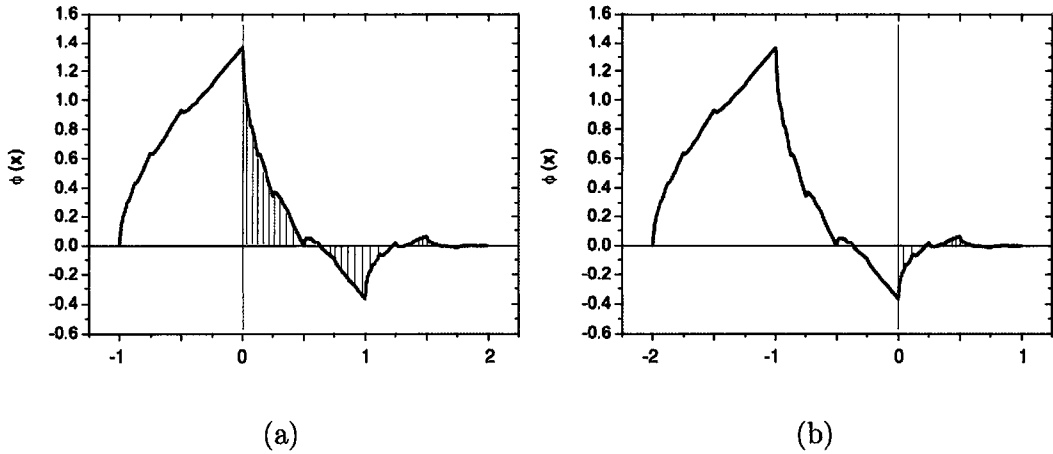


Figura B.6: Sobreposição de uma função *scaling* de Daubechies de ordem 2 no limite inferior de integração, 0: (a)  $\phi_{-1}(u)$ ; (b)  $\phi_{-2}(u)$ .

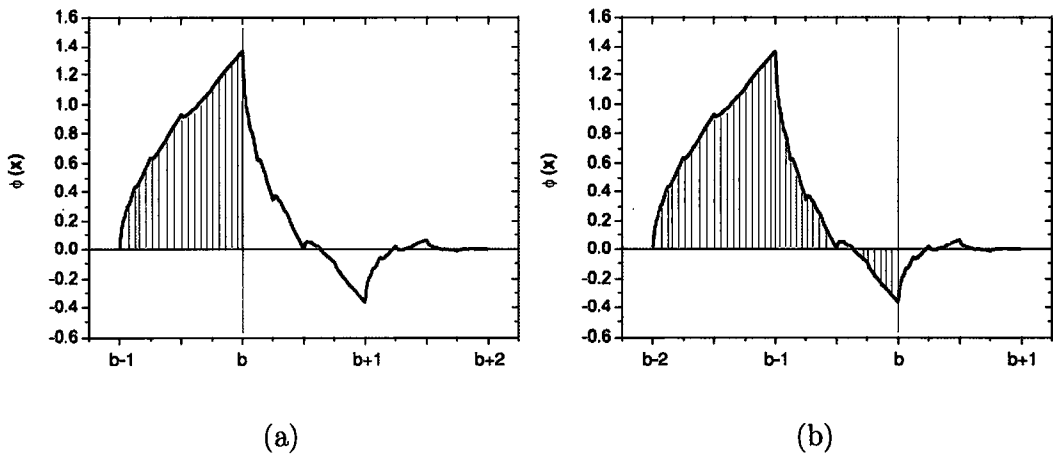


Figura B.7: Sobreposição de uma função *scaling* de Daubechies de ordem 2 no limite superior de integração, b: (a)  $\phi_{b-1}(u)$ ; (b)  $\phi_{b-2}(u)$ .

da função  $\phi_{b-2}(u)$  corresponde também à área total de uma função *scaling* completamente contida no intervalo de integração.

Por essas igualdades de áreas, é fácil chegar a (B.14), embora os gráficos não representem o produto das funções *scaling*, mas isso é irrelevante.

Portanto, conhecendo os  $N_{mn}$  referentes à sobreposição do limite inferior de integração podemos obter os  $N_{mn}$  referentes à sobreposição do limite superior de integração sem ter de resolver novo sistema de equações lineares.

$N_{mn}$	
Limite inferior	Limite superior
$N_{-2,-2} = 0.82905973$	$N_{b-2,b-2} = 0.17094029$
$N_{-2,-1} = 0.02061965$	$N_{b-2,b-1} = -0.02061965$
$N_{-2,0} = 0.0$	$N_{b-2,b} = 0.0$
$N_{-1,-1} = 0.99572637$	$N_{b-1,b-1} = 0.00427362$
$N_{-1,0} = 0.0$	$N_{b-1,b} = 0.0$

Tabela B.1: Valores de  $N_{mn}$  obtidos da resolução dos sistemas de equações lineares deduzidos quando há sobreposição de funções *scaling* de Daubechies de ordem 2 nos limites de integração.

Apesar desta constatação, na prática foi resolvido um sistema de equações lineares deduzido para o caso em que há sobreposição do limite superior de integração e comprovou-se o resultado (B.14).

Em termos práticos, foi feita a dedução do sistema de equações lineares para o limite superior começando por considerar  $N_{m+b,n+b}^{0,b} = N_{m,n}^{-b,0}$ . Então, foi tido em conta este novo intervalo de integração,  $[-b, 0]$ , e procedeu-se como se fez para a sobreposição do limite inferior, considerando, também aqui, a sobreposição no ponto 0. Isto é, avaliou-se quais as combinações de  $m$  e  $n$  possíveis e o sistema de equações lineares foi obtido tendo em conta (B.15).

$$N_{mn} = \begin{cases} \delta_{mn} & , \text{ se } -b \leq m \leq -3 \wedge -b \leq n \leq -3 \\ 0 & , \text{ se } m > 0 \vee n > 0 \vee |m - n| \geq 3 \\ \sum_{l,l'=0}^3 h_l h_{l'} N_{2m+l,2n+l'} & , \text{ se } -2 \leq k < 0, k = m, n \wedge |m - n| < 3. \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

Os  $N_{mn}$  resultantes dos sistemas de equações lineares para os limites inferior e superior, quando se usam funções *scaling* de Daubechies de ordem 2, estão reunidos na tabela B.1. Comparando os resultados, para a sobreposição do limite superior e do limite inferior, na tabela B.1 verifica-se a igualdade (B.14).

No fim, os  $N_{mn}$ , quando se usam funções *scaling* de Dabechies de ordem 2, levam à construção de uma matriz com o seguinte aspecto:

$$\begin{pmatrix} N_{-2,-2} & N_{-2,-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ N_{-2,-1} & N_{-1,-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 - N_{-1,-1} & -N_{-2,-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -N_{-2,-1} & 1 - N_{-2,-2} \end{pmatrix}$$

O cálculo para  $K = 3$  foi feito tendo em conta  $-4 \leq k \leq b - 1$ , com  $k = m, n$  e que o tamanho de  $Sup\phi_k(x)$  é 5. A matriz, para os  $N_{mn}$  usando funções *scaling* de Daubechies de ordem  $K = 3$ , fica então como se pode ver na página seguinte. Os elementos da matriz têm os valores apresentados na tabela 4.1.

A matriz para os  $N_{mn}$  correspondentes às funções *scaling* de Daubechies de ordem  $K = 3$  é:

$$\begin{pmatrix} N_{-3,-3} & N_{-3,-2} & N_{-3,-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ N_{-3,-2} & N_{-2,-2} & N_{-2,-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ N_{-3,-1} & N_{-2,-1} & N_{-1,-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 - N_{-1,-1} & -N_{-2,-1} & -N_{-3,-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -N_{-2,-1} & 1 - N_{-2,-2} & -N_{-3,-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -N_{-3,-1} & -N_{-3,-2} & 1 - N_{-3,-3} \end{pmatrix}$$

No caso geral, para chegar aos sistemas de equações lineares que permitem determinar os  $N_{mn}$ , quando se considera a sobreposição do limite inferior de integração, deve ter-se em conta (B.16). E para o limite superior ter em conta a igualdade (B.14).

$$N_{mn} = \begin{cases} \delta_{mn} & , \text{ se } 0 \leq m \leq b - 2K + 1 \wedge \\ & 0 \leq n \leq b - 2K + 1 \\ 0 & , \text{ se } m < -2K + 2 \vee n < -2K + 2 \vee \\ & |m - n| \geq 2K - 1 \\ \sum_{l,l'=0}^{2K-1} h_l h_{l'} N_{2m+l,2n+l'} & , \text{ se } -2K + 2 \leq k < 0, k = m, n \wedge \\ & |m - n| < 2K - 1. \end{cases} \quad (\text{B.16})$$



# Apêndice C

## Função de onda do deutério e as três novas funções

	<i>Kernel</i> para resolver o Sist. Eq. Lineares	<i>Kernel</i> para construir a função de onda	Função de onda não normalizada
$\psi(p)$	$\tilde{k}(u, v) = \frac{bv^2}{(b-v)^4} \frac{\tilde{V}(u, v)}{E - \frac{v^2}{m(b-u)^2}}$	$k(p, p'_n) = \frac{(p'_n)^3(1+p'_n)^2}{b} \frac{V(p, p'_n)}{E - \frac{p^2}{m}}$	$\psi(p) = \sum_{n=-2K+2}^{b-1} f_n k(p, p'_n) w_n$
$\Psi(p)$	$\tilde{K}(u, v) = \frac{bv}{(b-v)^3} \frac{u}{(b-u)} \frac{\tilde{V}(u, v)}{E - \frac{v^2}{m(b-u)^2}}$	$K(p, p'_n) = \frac{p(p'_n)^2(1+p'_n)}{b} \frac{V(p, p'_n)}{E - \frac{p^2}{m}}$	$\psi_\Psi(p) = \frac{1}{p} \sum_{n=-2K+2}^{b-1} f_n K(p, p'_n) w_n$
$\gamma(p)$	$\bar{k}(u, v) = \frac{bv^2}{(b-v)^4} \frac{\tilde{V}(u, v)}{E - \frac{v^2}{m(b-v)^2}}$	$k'(p, p'_n) = \frac{(p'_n)^3(1+p'_n)^2}{b} \frac{V(p, p'_n)}{E - \frac{(p'_n)^2}{m}}$	$\psi_\gamma(p) = \frac{1}{(E - \frac{p^2}{m})} \sum_{n=-2K+2}^{b-1} f_n k'(p, p'_n) w_n$
$\Gamma(p)$	$\bar{K}(u, v) = \frac{bv}{(b-v)^3} \frac{u}{(b-u)} \frac{\tilde{V}(u, v)}{E - \frac{v^2}{m(b-v)^2}}$	$K'(p, p'_n) = \frac{p(p'_n)^2(1+p'_n)}{b} \frac{V(p, p'_n)}{E - \frac{(p'_n)^2}{m}}$	$\psi_\Gamma(p) = \frac{1}{p(E - \frac{p^2}{m})} \sum_{n=-2K+2}^{b-1} f_n K'(p, p'_n) w_n$

Tabela C.1: *Kernel*, para resolver os sistemas de equações e para construir a função de onda do deutério com o potencial Malfliet-Tjon V, correspondentes às funções  $\psi(p)$ ,  $\Psi(p)$ ,  $\gamma(p)$  e  $\Gamma(p)$ . Construção das funções de onda não normalizadas,  $\psi(p)$ ,  $\psi_\Psi(p)$ ,  $\psi_\gamma(p)$  e  $\psi_\Gamma(p)$ , usando os *kernel* para cada um dos casos. A normalização das funções  $\psi_\Psi(p)$ ,  $\psi_\gamma(p)$  e  $\psi_\Gamma(p)$  é análoga ao que foi feito no capítulo 4 para a função  $\psi(p)$ , mas a equação (4.29) é substituída pelas expressões dadas nesta tabela. Os pontos  $p$  são os pontos de quadratura Gauss-Legendre e  $p'_n = \frac{u_n}{b - u_n}$ , onde  $n$  é a translação da função *scaling*.