

## EVOLUCIÓN TEMPORAL DE FUNCIONES DE ONDA UTILIZANDO TRANSFORMADA RÁPIDA DE PADÉ (FPT) Y DESCOMPOSICIÓN ESPECTRAL

Marcelo F. Ciappina\*, Mariano Febbo\*, and Walter R. Cravero\*

\*Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur  
Av. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina  
e-mail: ciappina@criba.edu.ar

**Key Words:** Descomposición espectral. Aproximantes de Padé. FFT. Mecánica Cuántica. Integración Multidimensional. Algoritmos de computación científica.

**Abstract.** *En este trabajo describiremos la evolución temporal de funciones de onda, que son soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente de tiempo, en presencia de diferentes potenciales. Para ello usaremos un método espectral basado en la Transformada Rápida de Padé (FPT), que permitirá resolver numéricamente el problema y visualizar la evolución de las soluciones. Compararemos la FPT con los métodos usuales para este tipo de problemas (distintos algoritmos para calcular las Transformadas de Fourier). Finalmente discutiremos la utilidad general de este método en el cálculo de integrales de varias dimensiones.*

## 1 INTRODUCCIÓN

En la resolución numérica de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales existen numerosos métodos que pueden dividirse en dos grandes grupos: los métodos directos, entre los cuales podemos mencionar las diferencias finitas, elementos finitos, etc., y los indirectos, entre los que se encuentran los métodos espectrales que utilizaremos en este trabajo, cada uno con sus ventajas y problemas.<sup>1</sup>

Los métodos de diferencias finitas convergen a la solución de una manera directa, no obstante en algunos problemas particulares existen ventajas significativas intentando encontrar la solución de forma indirecta como ya veremos.

La Transformada de Fourier, implementada numéricamente a través de distintos algoritmos, FFT (Fast Fourier Transform), DFT (Discrete Fourier Transform), etc.,<sup>2</sup> resulta ser la base de métodos de solución extremadamente precisos y eficientes. La idea fundamental de los métodos espectrales es transformar el problema a partir de su formulación inicial en otro que involucre la transformada de Fourier de la solución. La motivación para utilizar esta descripción es que en muchas situaciones la solución en el espacio transformado es mucho más fácil de obtener que la solución en el espacio original. Luego, la solución al problema se obtiene evaluando la Transformada Inversa de Fourier. Las ecuaciones a las que pueden aplicarse estos métodos son usualmente las ecuaciones que involucran evoluciones temporales, por ejemplo, ecuaciones de transporte, de difusión, de onda, etc.

Basado en la FFT recientemente se ha desarrollado con singular éxito un método que se conoce como Transformada Rápida de Padé (Fast Pade Transform FPT) que utiliza tanto la eficiencia y rapidez de la FFT como la convergencia de los aproximantes de Padé. Este método se ha utilizado para el procesamiento de imágenes tomográficas ya que disminuye dramáticamente el volumen de datos a almacenar y permite reconstruir dichas imágenes con un mínimo de información.<sup>3</sup> En este trabajo vamos a aplicar el método espectral utilizando FFT y FPT en la ecuación de Schrödinger que es la ecuación fundamental que gobierna la evolución temporal de la función de onda de la mecánica cuántica. Luego de una descripción teórica del problema y del método numérico, aplicaremos el esquema a la evolución temporal de las funciones de onda de un sistema sencillo como es el oscilador armónico. Analizaremos las ventajas de este método tanto desde el punto de vista de tiempo de cálculo como de precisión en las soluciones. Para finalizar mostraremos como este esquema numérico puede aplicarse para el cálculo de integrales multidimensionales.

## 2 MARCO TEÓRICO

### 2.1 Ecuación de Schrödinger

La ecuación que gobierna la evolución temporal de la función de onda  $\psi$  de un sistema cuántico es la *ecuación de Schrödinger*.<sup>4</sup> En una dimensión esta ecuación resulta

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = (\mathbf{T} + \mathbf{V}) \psi(x, t) \quad (1)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t) \quad (2)$$

donde  $m$  es la masa de la partícula,  $\hbar$  la constante de Planck,  $\mathbf{T}$  es el operador energía cinética y  $\mathbf{V}$  el operador potencial. El operador  $\mathbf{T}$  es un operador diferencial ya que  $\mathbf{T}\psi$  se obtiene derivando dos veces la función  $\psi$ , mientras que  $\mathbf{V}$  es simplemente un operador multiplicativo. El módulo cuadrado de esta función,  $|\psi(x, t)|^2$ , representa la probabilidad de encontrar a la partícula en el punto  $x$  para un dado tiempo  $t$ .

Puesto que la ecuación (1) es una ecuación diferencial ordinaria, o una ecuación diferencial a derivadas parciales si trabajamos en 2 o 3 dimensiones, pueden emplearse los métodos numéricos usuales para resolverla en forma directa (diferencias finitas, elementos finitos, etc.). En este trabajo vamos a mostrar la conveniencia de utilizar los métodos espectrales en conjunto con algunos algoritmos de aceleración de la convergencia.

Considerando la dependencia temporal podemos escribir la solución formal de la ecuación (1)

$$\psi(x, t) = e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})(t-t_0)/\hbar} \psi(x, t_0) \quad (3)$$

donde se ha definido la exponencial de un operador a partir de la serie

$$e^{\mathbf{A}} = 1 + \mathbf{A} + \frac{1}{2!} \mathbf{A}\mathbf{A} + \frac{1}{3!} \mathbf{A}\mathbf{A}\mathbf{A} + \dots$$

La ecuación (3) permite conocer la función  $\psi(x, t)$  conociendo su valor en un tiempo anterior  $t_0$ , para lo cual debemos calcular la exponencial de una suma de operadores, i.e.  $e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\delta t/\hbar}$ , donde por comodidad hemos definido  $\delta t = t - t_0$ .

A partir de esta última definición estaríamos tentados a escribir

$$e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\delta t/\hbar} \stackrel{?}{=} e^{-i\mathbf{T}\delta t/\hbar} e^{-i\mathbf{V}\delta t/\hbar}$$

y resolver el problema, pero desafortunadamente esta expresión es incorrecta ya que los operadores  $\mathbf{T}$  y  $\mathbf{V}$  no conmutan, debido a la naturaleza diferencial de  $\mathbf{T}$ , i.e

$$\mathbf{V}\mathbf{T}\psi(x, t) \neq \mathbf{T}\mathbf{V}\psi(x, t).$$

## 2.2 Métodos espectrales y Transformada de Fourier

Supongamos que conocemos la función de onda en un tiempo  $t_0$  de manera discreta, i.e. tenemos un vector que tiene su valor en puntos  $x_j$ ,  $\psi(x_j, t_0)$ . Utilizando la FFT podremos encontrar la función de onda en el espacio transformado  $k$ . Es necesario tener en cuenta que el rango total en la coordenada espacial  $x$  determina el *espaciado* de la grilla en el espacio  $k$  a través de  $\Delta k = \frac{2\pi}{N\Delta x}$  donde  $N$  es el número de puntos de la grilla espacial que en general será una potencia de 2 para utilizar eficientemente la FFT. Luego, la función de onda en un tiempo  $t$  estará dada aproximadamente por

$$\psi(x, t) \approx e^{-i\mathbf{V}\delta t/2\hbar} e^{-i\mathbf{T}\delta t/\hbar} e^{-i\mathbf{V}\delta t/2\hbar} \psi(x, t_0) + \mathcal{O}(\delta t^2) \quad (4)$$

donde hemos realizado una descomposición simétrica de la suma  $\mathbf{T} + \mathbf{V}$  y utilizado algunas propiedades de los operadores<sup>4</sup> con el objetivo de aumentar el orden de la aproximación. Puesto que  $V$  es una función de las coordenadas puede evaluarse fácilmente en los puntos de la grilla  $x_j$ . Definamos entonces una función  $\chi(x)$  tal que

$$\chi(x) = e^{-i\mathbf{V}\delta t/2\hbar} \psi(x, t),$$

evaluada en los puntos de la grilla espacial

$$\chi(x_j) = e^{-iV(x_j)\delta t/2\hbar} \psi(x_j, t_0).$$

Este cálculo se hace en forma directa en el espacio de coordenadas ya que es solamente una multiplicación. En cada paso de tiempo  $\delta t$  es constante y podemos almacenar en un vector los valores de  $\chi(x_j)$ .

El siguiente paso es determinar el resultado de la exponencial del operador energía cinética  $\mathbf{T}$  operando sobre la función  $\chi$ ,

$$\phi(x) = e^{-i\mathbf{T}\delta t/\hbar} \chi(x),$$

Este cálculo en el espacio de coordenadas es sumamente complicado ya que involucra la exponencial de un operador derivada segunda. En el espacio transformado, como veremos a continuación, la derivada es fácil de calcular, ya que simplemente consiste en multiplicar por un factor a la función respectiva.

Comenzaremos definiendo la transformada de Fourier  $\Phi(k)$  de la función  $\chi(x)$ ,

$$\Phi(k) = \mathcal{F}[\chi(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(x) e^{-ikx} dx, \quad (5)$$

y la transformada inversa

$$\chi(x) = \mathcal{F}^{-1}[\Phi(k)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) e^{ikx} dk. \quad (6)$$

A partir de (5) y (6) y luego de un poco de álgebra el término  $\phi(x)$  resulta

$$\begin{aligned}\phi(x) &= e^{-i\mathbf{T}\delta t/\hbar}\chi(x) \\ &= \mathcal{F}^{-1}\left[e^{-iT(k)\delta t/\hbar}\Phi(k)\right]\end{aligned}$$

donde la energía cinética en el espacio  $k$  es

$$T(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

La función de onda en el tiempo  $t$  se obtiene finalmente multiplicando (7) por el término que contiene al potencial. La propagación completa para un  $\delta t$  resulta

$$\psi(x, t) \approx e^{-iV(x)\delta t/2\hbar}\mathcal{F}^{-1}\left[e^{-iT(k)\delta t/\hbar}\mathcal{F}\left[e^{-iV(x)\delta t/2\hbar}\psi(x, t_0)\right]\right].$$

Aunque este resultado puede verse bastante complicado, utilizando las técnicas de la FFT y FPT veremos que es relativamente fácil de calcular con gran precisión en un tiempo de cálculo relativamente bajo.

### 2.3 El oscilador armónico

En virtud de poder aplicar el método descrito anteriormente a un problema concreto, hemos elegido el problema del oscilador armónico cuántico, del cual es posible conocer analíticamente su solución exacta. El oscilador armónico tiene como potencial asociado

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (7)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia de oscilación.

Este modelo es la base de estudio para modelos más complicados y es útil y sencillo de resolver mediante los métodos espectrales que son el eje de este trabajo. Resolviendo la ecuación (1) con el potencial (7) tenemos que las *autofunciones* y los *autovalores* exactos tienen la forma<sup>4</sup>

$$\psi_n(x) = (\sqrt{\pi}2^n n! \sigma_0)^{-1/2} H_n\left(\frac{x}{\sigma_0}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_0^2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

y

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

donde  $n$  es el número cuántico principal,  $H_n$  son los polinomios de Hermite<sup>5</sup> de orden  $n$  y  $\sigma_0 = (\hbar/m\omega)^{1/2}$  es el *ancho* de la función de onda del estado fundamental.

En la Figura 1 puede verse que al aumentar el número cuántico  $n$  la distribución de probabilidad posee un mayor número de *nodos*. Se han elegido las constantes adecuadas de manera que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad (9)$$

A diferencia del comportamiento clásico, donde la energía tiene un valor arbitrario, en mecánica cuántica los valores *permitidos* de energía están cuantificados.

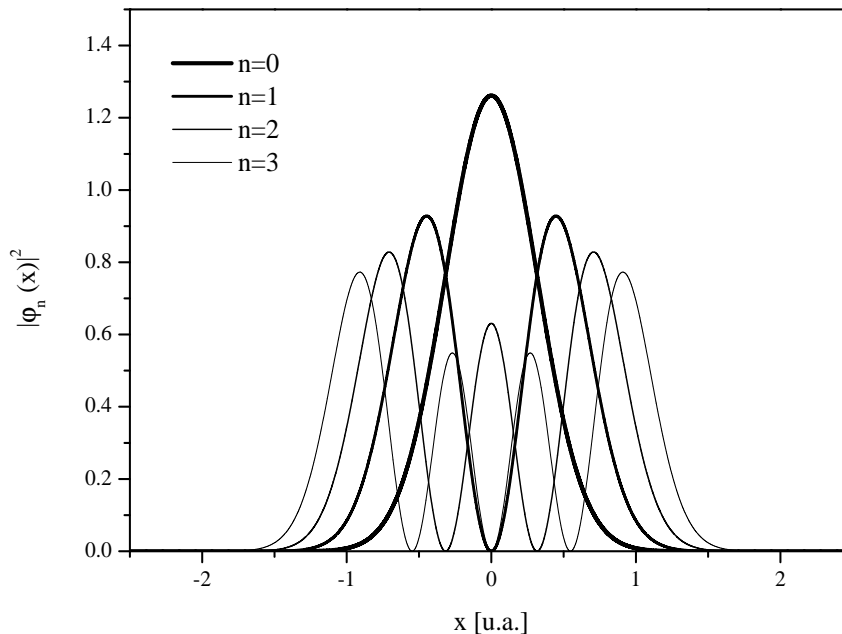


Figure 1: Distribución de probabilidad  $|\psi_n(x)|^2$  para diferentes autoestados del oscilador armónico simple

### 3 ALGORITMO DE PADÉ

El punto de partida para la Transformada Rápida de Padé (FPT) es la definición de integrales de Fourier (en una o más dimensiones) del tipo (5) y (6). En esta sección analizaremos y describiremos el método en una dimensión, pero, como podrá verse más adelante, es fácilmente extensible a dos, tres o más dimensiones espaciales.

Sea la integral de Fourier  $\mathcal{F}(k)$  de una función  $f(x)$

$$\mathcal{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx \quad (10)$$

donde, si bien utilizaremos el módulo del vector de onda  $k$  y la coordenada  $x$  como un conjunto de variables conjugadas, este esquema también puede extenderse a cualquier par de variables con este tipo de propiedad. Por completitud se define la transformada inversa de Fourier cuando se conoce  $\mathcal{F}(k)$  y quiere encontrarse la  $f(x)$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(k) e^{-ikx} dk. \quad (11)$$

En la práctica estas integrales se resuelven numéricamente por cuadraturas discretizando las variables en, por ejemplo, un espaciado equidistante, i.e

$$k = n\Delta k; \quad x = m\Delta x$$

donde

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L}; \quad \Delta x = \frac{L}{2N}. \quad (12)$$

La longitud de los datos muestrados es  $2N$  y  $-N \leq n, m \leq N - 1$ . Para facilitar la aplicación de la FFT y hacer más eficiente el algoritmo de Tukey-Cooley,<sup>2</sup> se elige a  $N$  como una potencia de 2,  $N = 2^r$  ( $r = 0, 1, 2, \dots$ ). La longitud total de discretización es  $L$  y este valor pone un límite a los valores de  $k$  como puede verse en (12). Las integrales (10) y (11) evidentemente se calculan numéricamente en un rango finito, por lo que podemos escribir

$$\mathcal{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) e^{ikx} dx \quad (13)$$

y de la misma forma para (11). La discretización de estas integrales conforma la Transformada Discreta de Fourier (DFT). Esta última es una variante a las cuadraturas usuales utilizando una regla trapezoidal para la integral (13) con puntos seleccionados en la grilla de Fourier para las variables  $k$  y  $x$ ,

$$\mathcal{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2^{r+2}} \sum_{m=-2^r}^{2^r-1} f_m e^{ikm\Delta x} \quad (14)$$

y

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-2^r}^{2^r-1} \mathcal{F}_n e^{-inx\Delta k} \quad (15)$$

donde  $f_m = f(m\Delta x)$  y  $\mathcal{F}_n = f(n\Delta k)$ . La razón de reordenar el *muestreo* en la grilla  $k$  es poder utilizar algoritmos FFT en el cálculo de la DFT. La FFT se obtiene a partir de la DFT usando  $N = 2^r$  en conjunto con el algoritmo de Tukey-Cooley el cual, por ejemplo, en una dimensión reduce el número de multiplicaciones de  $N^2$  a  $N \log_2 N$ , lo que disminuye dramáticamente el tiempo de cálculo al aumentar el número de puntos  $N$ . El algoritmo FFT es rápido para un  $N$  fijo, pero converge muy lentamente al aumentar  $N$ . En una dimensión esta convergencia es de sólo  $1/N$  por lo que es necesario una cantidad de puntos relativamente grande para tener una buena descripción de la función muestreada.

Para acelerar la convergencia de la FFT uno puede emplear tanto algoritmos lineales de convergencia (Euler, Romberg, etc.) como no lineales (Padé, Levin, etc.). El algoritmo de Padé se encuentra entre los más eficientes para hacer esta tarea como veremos a continuación. Cuando una secuencia de FFTs de diferentes longitudes se aplica en conjunto con los Aproximantes de Padé (PA) tenemos lo que se conoce como Transformada Rápida de Padé (FPT), que se ha desarrollado y aplicado recientemente para la digitalización, almacenamiento y reconstrucción de imágenes tomográficas bidimensionales.<sup>3</sup> Entre las características principales de los PA se encuentra la aceleración de la convergencia de

series o sucesiones lentamente convergentes, y eso es provechoso en este caso, ya que con una menor cantidad de puntos de muestreo tendremos una descripción más precisa de la función en el espacio  $k$  o de su transformada.

Para aplicar los PA haremos uso del algoritmo recursivo  $\epsilon$  de Wynn<sup>6</sup> para acelerar la convergencia de las sucesiones de sumas parciales  $\{f_\mu(x)\}_{\mu=0}^r$  que construiremos a partir de las FFT, esto es

$$f_\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-2^\mu}^{2^\mu-1} \mathcal{F}_n e^{-inx\Delta k}, \quad \mu = 0, 1, 2, 3, \dots, r$$

con la propiedad que  $\lim_{\mu \rightarrow r} f_\mu(x) = f(x)$ . La única diferencia con (14) es que aquí se reemplaza el arreglo completo de puntos de longitud  $N = 2^r$  por la sucesión parcial  $N = 2^\mu$ . La aceleración de la sucesión de sumas parciales,  $\{f_\mu\}$  ( $0 \leq \mu \leq r$ ) se realiza mediante el algoritmo  $-\epsilon$ , el cual se sabe que es estable, robusto y fácilmente programable a través de la relación de recurrencia

$$\epsilon_\nu^{(\mu)} = \epsilon_{\nu-1}^{(\mu+1)} + \frac{1}{\epsilon_\nu^{(\mu+1)} - \epsilon_\nu^{(\mu)}}; \quad \mu, \nu \geq 0 \quad (16)$$

donde para comenzar la recursión es necesario definir

$$\epsilon_{-1}^{(\mu)} = 0; \quad \epsilon_0^{(\mu)} = f_\mu(x); \quad (\mu = 0, 1, 2, 3, \dots, r) \quad (17)$$

Este algoritmo permanece inalterado si las funciones  $f_\mu(x)$  son funciones en  $nD$  dimensiones, excepto que la suma parcial para inicializar en (17) debe reemplazarse por una función  $f_\mu(\mathbf{x})$ . La recursión (16) se realiza en un punto fijo  $x$  del espacio de coordenadas. El cálculo se repite luego para otros puntos en la grilla de Fourier para barrer el área completa de estudio con extremos  $\pm L$ . Entonces, en un punto seleccionado  $x$  primero generamos la sucesión  $\{\epsilon_\nu^{(\mu)}\}$  y luego continuamos monitoreando su convergencia con respecto a los subíndices pares solamente,  $\nu = 2j$  ( $j = 1, 2, 3, \dots$ ). El límite de esta última subsucesión de vectores representa una estimación de la FPT para  $f(x)$ . Para tomar ventajas de la FFT, la sucesión de sumas parciales se calcula solamente en los puntos de Fourier de la grilla espacial. La precisión es el punto débil de la FFT, es por ello que con este método logramos combinar la rapidez y eficiencia de los métodos de FFT con la aceleración de la convergencia que poseen los PA.

#### 4 EVOLUCIÓN TEMPORAL

Aplicaremos el método descrito anteriormente a la ecuación de evolución (3) para las funciones de onda del oscilador armónico (8). El algoritmo de cálculo puede verse esquemáticamente en la Figura 2.

Las funciones  $\psi_n(x)$  son autoestados del Hamiltoniano  $\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V}$ , es decir que son invariantes a lo largo del tiempo. En particular la normalización (9) debe permanecer



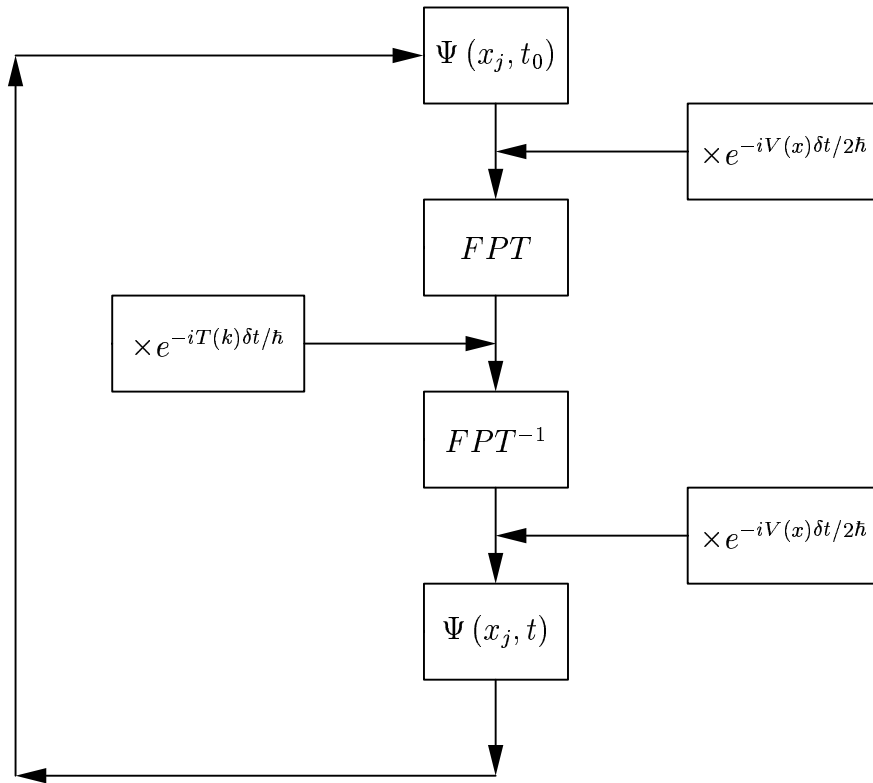


Figure 2: Esquema de cálculo para la evolución temporal

constante para diferentes valores de los parámetros  $N$ ,  $L$  y  $\delta_t$  donde  $N$  es el número de puntos de la grilla espacial,  $L$  es el ancho de muestreo y  $\delta_t$  es la discretización temporal utilizada.

En la Figuras 3 y 4 se muestra el error relativo entre el valor de la normalización exacto y el calculado en cada paso temporal en función del tiempo para una ancho de muestreo  $L = 10$  y dos diferentes valores de  $\delta_t = 0.5, 0.2$ , medido en unidades atómicas donde  $\hbar = m = 1$  aquí  $m$  la masa del electrón. Vemos como la FPT, que surge de evaluar el algoritmo  $\epsilon$  con parámetros  $\mu = 4, \nu = 2$ , mejora en general la precisión alcanzada con la FFT. En las Figuras 5, 6 y 7 se disminuye el ancho del muestreo a  $L = 4$  y evaluamos la evolución con  $\delta_t = 0.5, 0.2, 0.1$  respectivamente. Aquí puede verse que por más que se aumenta el número de puntos de muestreo el error relativo tiene un límite y se debe a que la función original no ha sido bien *muestreada*. De todas maneras la FPT muestra un menor error relativo en estos casos.

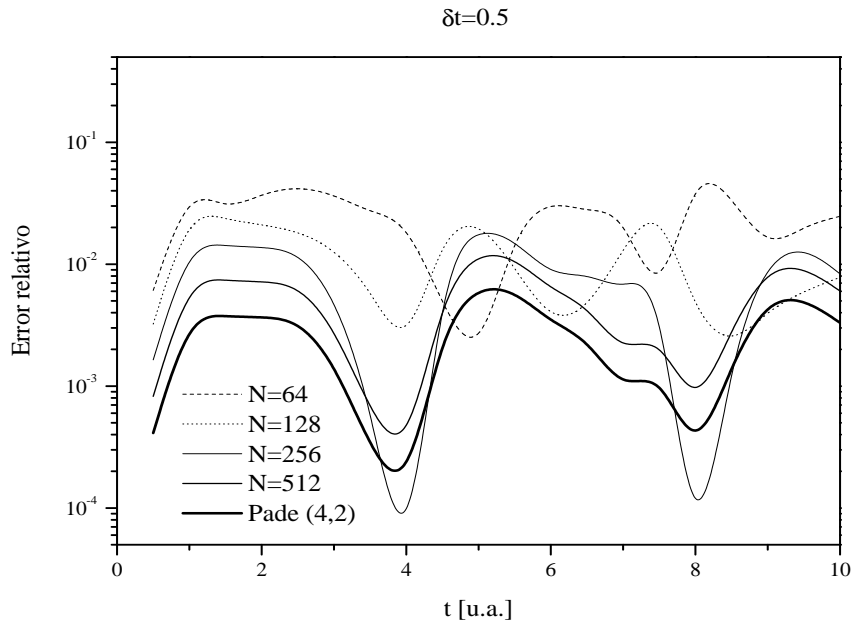


Figure 3: Error relativo de la normalización en función del tiempo para el estado fundamental del oscilador armónico,  $\psi_0$  con  $L = 10$

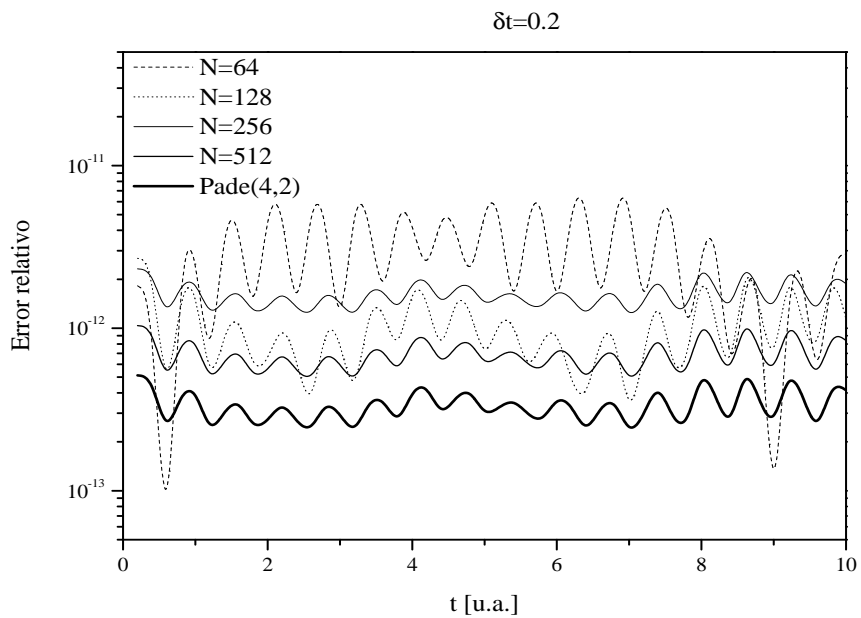


Figure 4: Idem Figura 3 con  $\delta t = 0.2$

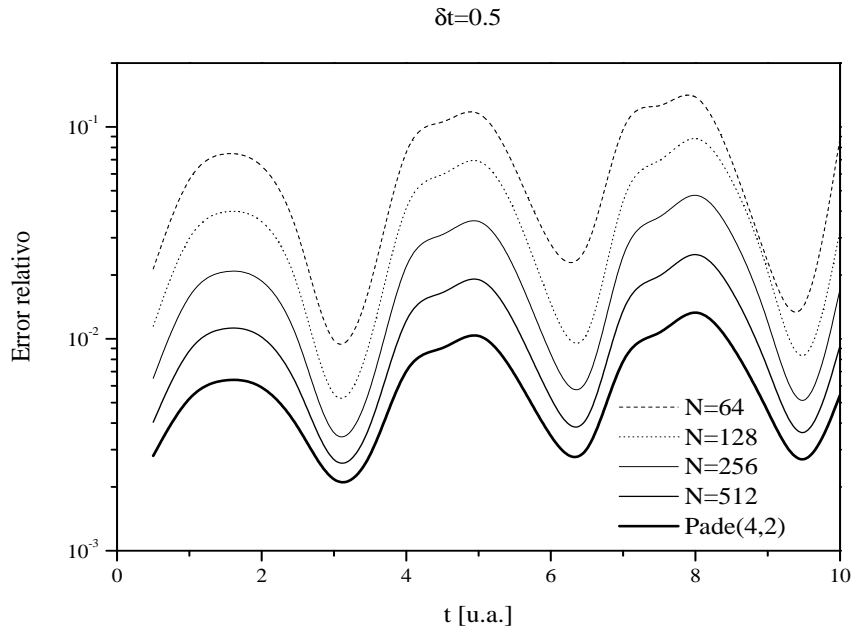


Figure 5: Idem Figura 3 pero con  $L = 4$

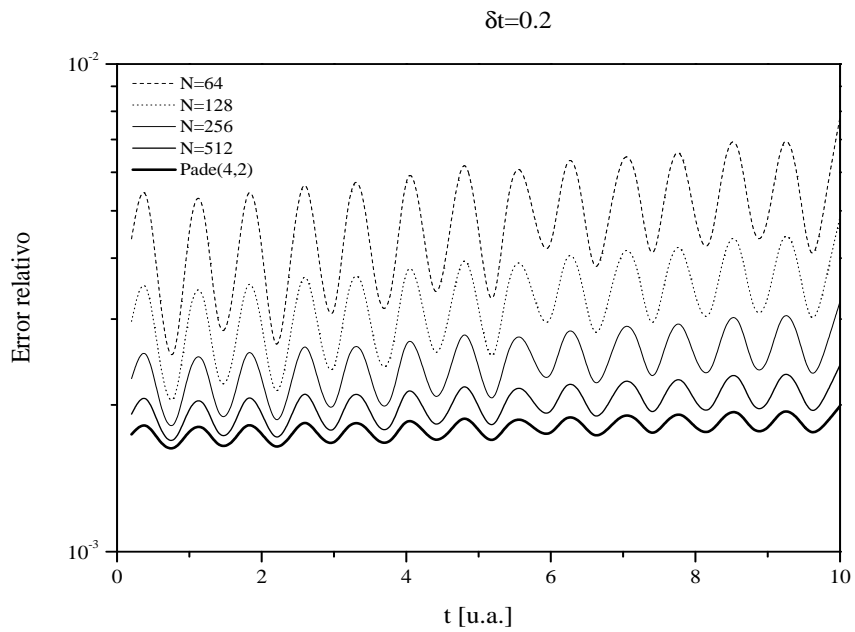
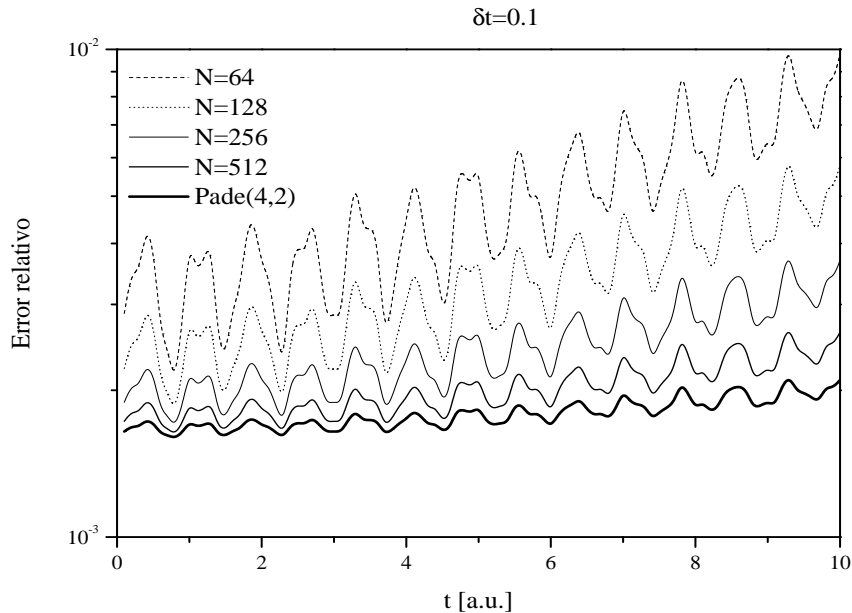


Figure 6: Idem Figura 5 con  $\delta t = 0.2$


 Figure 7: Idem Figura 5 con  $\delta t = 0.1$ 

## 5 INTEGRALES MULTIDIMENSIONALES

El cálculo numérico de integrales multidimensionales es de particular interés en numerosos ámbitos de la física, desde la integración de las ecuaciones de movimiento de la mecánica clásica hasta las integrales multidimensionales de física estadística, pasando por la solución de la ecuación de Schrödinger en el problema de dispersión de partículas, entre otros.

El método de la FPT presenta una alternativa de los denominados métodos deterministas en contraste con aquellos llamados aleatorios, e.g. Monte Carlo, que también se utilizan para integrales en varias dimensiones.

Si bien mostraremos un par de ejemplos utilizando integrales del tipo de Fourier y comparando con la FFT, debemos decir que este método puede usarse aplicando otros métodos deterministas como cuadraturas gaussianas, trapezoidales, método de Simpson, etc.

Vemos la espectacular precisión que muestra la FPT en este caso, en contraste con la lenta convergencia de la FFT. El resultado exacto se calculó utilizando algoritmos adaptivos incorporados en MATHEMATICA.<sup>7</sup>

El primer ejemplo corresponde a la integral tridimensional

$$f_1(x, y, z) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \cos \frac{3}{4}(x + y + z) d\mathbf{x}$$

para  $\mathbf{k} = 0$ , puesto que queremos mostrar la utilidad del método en integrandos con valores reales, los resultados obtenidos pueden verse en la Tabla 1.

El segundo ejemplo resulta de evaluar

$$f_2(x, y, z) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp(-x - y - z) \frac{\sin(x + y + z)}{x + y + z} d\mathbf{x}$$

y también se muestra en la Tabla 1.

Table 1: Comparación entre la FFT y la FPT para las funciones  $f_1$  y  $f_2$  con diferentes valores de  $r$  que corresponden a una cantidad de puntos de muestreo  $N = 2^r$ . Los resultados obtenidos que se muestran subrayados indican la cantidad de cifras decimales *exactas*.

Función	$f_1(x, y, z)$		$f_2(x, y, z)$	
Exacta	<u>0.401767070469</u>	<u>0.401767070469</u>	<u>0.268816517890</u>	<u>0.268816517890</u>
$r$	FFT	FPT	FFT	FPT
0	1.000000000000	1.000000000000	3.875784585037	3.875784585037
2	0.622059037873	-1.220323096771	0.639907314212	<u>0.424067939992</u>
4	<u>0.459965527350</u>	<u>0.401202019496</u>	<u>0.341001545981</u>	<u>0.274447992301</u>
6	<u>0.416489780171</u>	<u>0.401773155873</u>	<u>0.285737649156</u>	<u>0.268849809913</u>
8	<u>0.405458211846</u>	<u>0.401767071568</u>	<u>0.272978880143</u>	<u>0.268816557031</u>
10	<u>0.402690504245</u>	<u>0.401767070469</u>	<u>0.269852900426</u>	<u>0.268816517890</u>

## 6 CONCLUSIONES

Si bien este es un ejemplo sencillo donde se conocen las soluciones exactas, ha servido para la construcción e implementación numérica de la FPT. La FPT ha demostrado ser una alternativa a tener en cuenta a la hora de aplicar los métodos espectrales ya que permite disminuir el tiempo de cálculo y al mismo tiempo mejorar sensiblemente la precisión de las soluciones.

Adicionalmente la FPT demuestra también su gran utilidad para evaluar numéricamente integrales multidimensionales y proporciona una mayor precisión cuando se la compara con los métodos basados en la Transformadas de Fourier. Aprovechando la naturaleza general de los algoritmos basados en los PA, nuestra intención es explorar la posibilidad de construir integradores multidimensionales con convergencia acelerada basados en la conjunción de los PA y otros métodos numéricos de integración tales como las cuadraturas gaussianas.

## AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el CONICET, los PGI 24/F027 y 24/F032 de la UNS y el PICT 99/03/06249 de la ANPCYT.

**REFERENCES**

- [1] P.L. De Vries. *A First Course in Computational Physics*. John Wiley and Sons, (1994).
- [2] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P Flannery. *Numerical Recipes in FORTRAN*. Cambridge University Press, (1992).
- [3] Dž. Belkić. Leading distorted wave theories and computational methods. *Journal of Computational Methods in Science and Engineering*, **1**, 1–74 (2001).
- [4] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum Mechanics*, volume I. John Wiley and Sons, (1977).
- [5] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, (1972).
- [6] G.A. Baker Jr. and P. Graves-Morris. *Padé Approximants. Part I: Basic Theory*. Addison Wesley Publishing Company, (1981).
- [7] Wolfram Research. *MATHEMATICA 3.0*. (1996).