



UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA DE CHIAPAS



FACULTAD DE CIENCIAS EN
FÍSICA Y MATEMÁTICAS

EL MÉTODO DE APROXIMANTES DE PADÉ
PARA CÁLCULO DEL PROPAGADOR

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS FÍSICAS

PRESENTA:

**CARLOS ANÍBAL ESCANDON
ESPINOSA**

DIRECTOR:

DR. IDRISH HUET HERNÁNDEZ

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas

25 de marzo del 2020



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIAPAS
FACULTAD DE CIENCIAS EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS
DIRECCIÓN
CONTROL ESCOLAR POSGRADO



Tuxtla Gutiérrez, Chiapas
04 de marzo de 2020
Oficio No. FCFM/0152/20

Dr. Idrish Huet Hernández
Presidente y Director de Tesis
Presente

Por este medio me permito informarle que una vez efectuada la revisión de la tesis denominada:

"EL MÉTODO DE APROXIMANTES DE PADÉ PARA CÁLCULO DEL PROPAGADOR."

Ha sido aceptado para sustentar el Examen de Grado de Maestro en Ciencias Físicas del Lic. Carlos Anibal Escandon Espinosa con matrícula escolar X120011.

Se autoriza su impresión en virtud de cumplir con los requisitos correspondientes.

Atentamente

"Por la conciencia de la necesidad de servir"



Dra. Karen Salomé Caballero Mora
Directora

C.c.p. Dr. Florencio Corona Vázquez, Secretario Académico de la FCFM.
CP. Juan Manuel Aguilar Gámez.- Encargado de Posgrado FCFM
Archivo / Minutario
KSCM / jmag

Agradecimientos

Quiero agradecer a mi asesor el Dr. Idrish Huet Hernández por todo su apoyo en la realización de esta tesis y los consejos que me ha dado, para ser un mejor profesional. A todos los profesores de mi facultad, que han permitido mi desarrollo espiritual por la ciencia. A mi familia, madre, tía y hermano por estar conmigo en los malos momentos.

Índice general

Agradecimientos

1. Teoría perturbativa	5
1.1. El método de perturbaciones en la mecánica cuántica	5
1.2. Los términos de la expansión	5
1.3. Aplicación potencial: Efecto Casimir	6
1.4. La serie de Born	7
1.5. El propagador en el formalismo de integrales de camino	8
1.6. Cálculo del propagador de una partícula libre	9
1.7. La expansión perturbativa	10
1.8. Método de imágenes	11
2. Los Aproximantes de Padé	13
2.1. Aproximación de Padé	13
2.1.1. Aplicación del aproximante de Padé	14
2.2. El valor de una función en infinito asintóticamente	16
3. Teoría perturbativa y Aproximantes de Padé	19
3.1. Solución exacta del propagador	19
3.2. Cálculo del propagador a través del método de Padé	22
3.3. Conclusiones y Discusión	41
A. Algunos ejemplos de la aproximación secuencial de Padé	43
A.1. Ejemplo: 1	43
A.2. Ejemplo: 2	44
B. Algunos resultados clásicos de variable compleja	45
B.1. Teoremas de variable compleja	45
B.1.1. La fórmula integral de Cauchy	46
B.1.2. Teorema de Laurent	46
B.1.3. El teorema del residuo	47
C. Integrales de la serie perturbativa	49
C.1. Cálculo de las expresiones integrales	49

Índice de figuras

3.1. Deformación de contornos de integración.	22
3.2. Los logaritmos de los coeficientes c_n de la serie perturbativa para los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 1, t = 1$	25
3.3. El aproximante de Padé de la expansión perturbativa y el aproximante de Padé de la expansión del propagador completo a orden $[5/5]$, $\frac{x_0^2}{2t} = 1, t = 1$	26
3.4. El ajuste del aproximante de Padé de la serie perturbativa con respecto al aproximante de Padé de la solución analítica, $\frac{x_0^2}{2t} = 1, t = 1$	26
3.5. Los aproximantes de Padé diagonales $[N/N]$ evaluados en el límite de Dirichlet ADP vs. la solución exacta SE , $\frac{x_0^2}{2t} = 1, t = 1$	28
3.6. Distribución de los aproximantes de Padé ADP , $\frac{x_0^2}{2t} = 1, t = 1$	28
3.7. En la gráfica se puede observar que el aproximante de Padé de orden $[1/1]$ se encuentra por encima del valor exacto mientras que el aproximante de orden $[3/3]$ se encuentra por debajo del valor exacto, siendo el más cercano el aproximante de orden $[5/5]$, para $\frac{x_0^2}{2t} = 1, t = 1$	29
3.8. Los logaritmos de los coeficientes $ c_n $ de la serie perturbativa para los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 2, t = 1/2$	30
3.9. El aproximante de Padé de la expansión perturbativa vs transformación secuencial de Padé de la serie de Taylor de la solución exacta para $\frac{x_0^2}{2t} = 2, t = 1/2$	30
3.10. El ajuste de los aproximantes de Padé de la expansión perturbativa respecto al aproximante de Padé de la serie de Taylor de la solución analítica, para $\frac{x_0^2}{2t} = 2, t = 1/2$	31
3.11. En esta gráfica la línea de color verde indica el valor de la solución exacta SE y ADP representan los aproximantes de Padé diagonales, esencialmente podemos considerar la aproximación como exitosa al tener una coincidencia tan buena.	31
3.12. En esta gráfica se aprecia con mayor detalle la distribución de los aproximantes de Padé diagonales ADP en el límite de Dirichlet. Las desviaciones son siempre menores de 0.01 %, evidenciando la eficacia de la aproximación.	32
3.13. Los aproximantes de Padé diagonales de orden $[n/n]$ en límite de Dirichlet vs la solución exacta para $\frac{x_0^2}{2t} = 2, t = 1/2$	32

3.14. Los logaritmos de los coeficientes $ c_n $ de la serie perturbativa para los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 3, t = 1/3$	33
3.15. Los aproximantes de Padé de orden $[5/5]$ de la expansión perturbativa y el desarrollo en serie de Taylor de la solución exacta para, $\frac{x_0^2}{2t} = 3, t = 1/3$	34
3.16. El ajuste del aproximante de Padé de orden $[5/5]$ de la expansión perturbativa en comparación con el aproximante de Padé de la solución exacta, es decir, en una rango más amplio para, $\frac{x_0^2}{2t} = 3, t = 1/3$	34
3.17. Los aproximantes de Padé ADP de orden $[n/n]$ en el límite de Dirichlet, SE es la solución exacta con $\frac{x_0^2}{2t} = 3, t = 1/3$	35
3.18. En esta gráfica se aprecia con mayor detalle la distribución de los aproximantes de Padé diagonales ADP de orden $[n/n]$ para los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 3, t = 1/3$	35
3.19. Los logaritmos de los coeficientes $ c_k $ de la serie perturbativa para los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 4, t = 1/4$	36
3.20. El ajuste del aproximante de Padé de la expansión perturbativa y el aproximante de Padé de la solución analítica para $\frac{x_0^2}{2t} = 4, t = 1/4$	37
3.21. En un rango más amplio se puede observar cómo los aproximantes de Padé se ajustan muy bien, aquí tomamos los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 4, t = 1/4$	37
3.22. Los aproximantes de Padé diagonales ADP de orden $[1/1]$ hasta $[5/5]$. En esta gráfica la línea verde indica el valor de la solución exacta para $\frac{x_0^2}{2t} = 4, t = 1/4$	37
3.23. Los aproximantes de Padé diagonales $[1/1]$ hasta $[5/5]$ en el límite de Dirichlet para $\frac{x_0^2}{2t} = 4, t = 1/4$	38
3.24. Los aproximantes de Padé diagonales $[1/1]$ hasta $[5/5]$ en el límite de Dirichlet ADP vs solución exacta SE para $\frac{x_0^2}{2t} = 4, t = 1/4$	38
3.25. La desviación estandar σ de los aproximantes de Padé diagonales $[N/N]$, $N = 1, \dots, 5$ con sus respecto valores de los párametros $\frac{x_0^2}{2t} = 1, \dots, 4, t = 1, 1/2, 1/3, 1/4$	40

Resumen

En este trabajo de tesis se analiza el propagador de una partícula que se rige por la ecuación de Schrödinger en una barrera de potencial de tipo delta de Dirac cuyo potencial es proporcional a la variable $\lambda > 0$ (repulsivo). Usando teoría de perturbaciones calculamos la amplitud de propagación como un polinomio en λ con coeficientes numéricos. La idea central es averiguar si es posible recuperar el límite de Dirichlet ($\lambda = \infty$) mediante la serie perturbativa. Para esto usamos el método de Padé en la expansión perturbativa para determinar los aproximantes de Padé diagonales hasta orden $[5/5]$. Dado que este problema es un caso de estudio donde conocemos la solución exacta, podemos comparar nuestros resultados con la misma y los coeficientes de la serie perturbativo con la expansión en serie de Taylor de la solución exacta encontrando resultados en perfecta concordancia, con un margen de error cercano al 1 %. Comentamos también sobre el significado de esta aproximación y su aplicación potencial a problemas de teoría cuántica de campo.

Introducción

El presente trabajo trata con **los aproximantes de Padé para el cálculo del propagador** y se puede decir que es la aplicación de un método conocido en un contexto poco común, en particular hasta donde sabemos aún no se ha difundido su uso en este problema específico.

La base principal de este problema es el análisis de la propagación de una partícula en una barrera de potencial tipo delta $v(x) = \lambda\delta(x)$, (repulsivo $\lambda > 0$), usando a λ como parámetro de perturbación en la serie de Born. Como consecuencia cuando el potencial es débil en comparación a su energía cinética ($\lambda \rightarrow 0$) el método perturbativo da muy buenos resultados.

La investigación de este problema se realizará con el objetivo que determinar si el límite $\lambda \rightarrow \infty$, que no es tratable en el marco perturbativo, puede determinarse a partir de la información de la serie perturbativa.

Para esto existe un método que funciona para una clase grande de funciones[1], el método de los aproximantes de Padé, el cual consiste en interpolar la serie de Taylor a un orden dado mediante una secuencia de funciones racionales de orden $[m/n]$, en particular planeamos usar los aproximantes diagonales $[n/n]$ de Padé para extrapolar al valor $\lambda \rightarrow \infty$ [2].

La “filosofía” entonces, de este trabajo, es obtener resultados no perturbativos (límite de Dirichlet del propagador $\lambda = \infty$) partiendo del conocimiento de la serie perturbativa (de Taylor alrededor de $\lambda = 0$). Preveemos que estos resultados sugieran una estrategia para un nuevo tratamiento teórico con aplicaciones al efecto Casimir.

Tenemos la ventaja, además, de que el resultado exacto de este propagador para cualquier valor de λ es conocido.

En el capítulo 1 se hace un repaso de los siguientes temas: teoría perturbativa, la interpretación física de los términos de la perturbación, la serie de Born, el cálculo del propagador de la partícula libre, el efecto casimir que es la motivación principal para que se realizará esta investigación y como tema final de capítulo el método de imágenes. En el capítulo 2 veremos ¿Qué es un aproximante de Padé?, ¿cuales son las aplicaciones?, ¿Qué tipo de aproximantes existen?, etc. En este capítulo se desarrollará prácticamente toda la teoría necesaria para el proceso de esta investigación.

En el capítulo 3 se determinará la solución exacta del propagador completo, luego se calcularán los coeficientes de la expansión perturbativa de forma numérica.

Posteriormente se hará una expansión en serie de Taylor de la solución analítica obteniendo los coeficientes d_i , como consecuencia se comparará con los coeficientes c_i de la expansión perturbativa. En este capítulo se calcula la amplitud de permanencia al tiempo t , es decir la amplitud de probabilidad de que la partícula, partiendo del punto x_0 se encuentre en el punto x_0 al tiempo t ; se mostrarán tablas de los correspondientes coeficientes de la expansión, con sus respectivos valores de los parámetros, $\frac{x_0^2}{2t}$, t . Además se podrá observar gráficas donde se nota claramente cómo los aproximantes de Padé a orden $[5/5]$ de la expansión perturbativa y la serie de Taylor de la solución exacta coinciden. Así mismo se analizará el comportamiento de los aproximantes de Padé en el límite infinito, se encontrará que conforme aumenta el orden de los aproximantes de Padé, se aproximan mejor a la solución exacta. En una tabla posterior se presentará los resultados que se tienen de aplicar el método Padé, y los resultados de la aplicación del refinamiento de la extrapolación de Bender. Por último se presentan los resultados de las soluciones exactas obtenidas a través del método de imágenes.

Capítulo 1

Teoría perturbativa

1.1. El método de perturbaciones en la mecánica cuántica

En mecánica cuántica existen sistemas físicos que se encuentran bajo la influencia de algún potencial, es decir, que la acción contiene solamente términos cinéticos y si además el potencial es débil en comparación con la energía cinética se puede tratar al potencial como una perturbación.

Sin embargo, muchos de los potenciales que surgen en la área de la mecánica cuántica no son tan fáciles de tratar, tal ejemplo es el potencial de **Yukawa**, **Pöschl-Teller** modificado, el potencial de **Coulomb** entre otros. En estos potenciales el propagador no se puede expresar de forma cerrada fácilmente (si acaso) y también se les conoce como potenciales singulares[3]. En este capítulo desarrollaremos el método de expansión perturbativa que consiste en expandir una solución en serie de Taylor.

La expansión perturbativa en el aspecto matemático es de gran importancia, sin embargo, en este trabajo nos interesa usar la expansión perturbativa en una manera menos conocida con la idea de que nos conduzca a una mejor y más intuitiva comprensión del comportamiento mecánico-cuántico en el régimen no-perturbativo.

Si, por ejemplo, se considera el trayecto de una partícula que es dispersada por un átomo y después se describe la interacción de dispersión, se encontrará útil la noción clásica de una sección transversal que el átomo presenta al electrón impactante, aunque esta área se encuentra íntimamente relacionado con el tamaño del átomo, se hallará que la descripción completa depende de los aspectos mecánico-cuántico del sistema en el que interactúa [4].

1.2. Los términos de la expansión

Supongamos que una partícula se mueve sobre un potencial $V(x, t)$. El movimiento se encuentra restringido a una dimensión, entonces el **kernel** del propa-

gador entre los puntos a y b es

$$K_V(b, a) = \int_a^b \text{Exp} \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x, t) \right) dt \right] Dx(t), \quad (1.1)$$

como se muestra en [4], donde el subíndice indica que el propagador se encuentra en el potencial V y posteriormente la notación K_0 representa el movimiento de una partícula libre.

Supongamos que el efecto del potencial es pequeño o bien la integral de tiempo del potencial a lo largo del camino es pequeño en comparación a $\hbar$. Entonces la parte de la ecuación (1.1) que depende de $V(x, t)$ se expande como

$$\begin{aligned} \text{Exp} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, t) dt \right] &= \\ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, t) dt &+ \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, t) dt \right)^2 + \dots, \end{aligned}$$

usando la expansion en la ecuación (1.1), se definen

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) + K_1(b, a) + K_2(b, a) + \dots \quad (1.2)$$

Explicaremos la interpretación de los términos de esta serie. La interacción entre la partícula y el potencial revela [4] que se puede interpretar al potencial $-(i/\hbar)V$ como amplitud de dispersion por unidad de volumen y por unidad de tiempo. En esta interpretación física podemos describir a K_V como la suma sobre todas las clases de caminos que tiene la partícula para moverse de a a b .

- La partícula no es dispersada K_0 .
- La partícula es dispersada una vez K_1 .
- La partícula es dispersada dos veces K_2 .

de manera que se tiene en general K_n , con un número n veces de dispersión.

1.3. Aplicación potencial: Efecto Casimir

Una aplicación potencial del método que hemos bosquejado en este trabajo es el cálculo de fuerzas de Casimir[5] que se manifiestan en el efecto del mismo nombre. Este fenómeno cuántico se predijo primeramente entre dos placas metálicas neutras paralelas en el vacío separadas a una cierta distancia del orden de micrones o nanómetros entre las cuales surge una fuerza atractiva. Una forma de interpretar y explicar este fenómeno es mediante la diferencia de modos vibracionales de las ondas estacionarias entre las placas y su exterior. A este efecto cuántico que se produce, se conoce como fuerza de **Casimir**, donde esta fuerza

es de tipo atractiva (en algunos experimentos se pretende convertirla en fuerza repulsiva para diferentes propósitos),

$$P(z) = \frac{f(z)}{s} = -\frac{\hbar c \pi^2}{240 z^4}, \quad (1.3)$$

donde $P(z)$ es la presión ejercida, $f(z)$ es la fuerza, s es el área de las placas, $\hbar$ es la constante de Planck reducida, c es la constante de la luz y z es la separación entre las dos placas como se muestra en [6]. En el estudio del vacío cuántico o energía de punto cero existen dos perspectivas para su interpretación:

- se supone que la perturbación que se crea entre las dos placas, se debe a la interacción de van der Waals de las partículas que las conforman.
- se dice que las fluctuaciones cuánticas del vacío son las responsables debido al cambio de la energía del vacío por la introducción de las fronteras.

Este fenómeno es muy conocido y ha sido estudiado experimentalmente también. Una forma equivalente de calcularlo es mediante la formulación de línea de mundo de la teoría del campo cuántico (en este caso electromagnético). Se estima que el uso de aproximantes de Padé en el cálculo no-perturbativo ayude al desarrollo de nuevas técnicas numéricas más eficientes en el cálculo del efecto Casimir y otros problemas.

1.4. La serie de Born

La aproximación de Born tiene su similitud con la aproximación de impulso en la teoría de dispersión clásica, podemos suponer que tenemos a una partícula que viaja en línea recta y después de cierto tiempo es defleada debido a la interacción con otra partícula de aquí podemos calcular la fuerza de impulso y el ángulo de dispersión de forma clásica. En la física de este fenómeno tenemos los siguientes casos, cuando la partícula pasa cierta porción de área sin interactuar con ninguna de las partículas (corrección a orden cero), posteriormente tenemos correcciones a primer orden, segundo orden, hasta de orden n , bajo condiciones razonables cuando el potencial de interacción es débil respecto a la energía cinética o actúa durante un corto tiempo la serie de Born generalmente converge. Las correcciones están asociadas al número de dispersiones que hay en el sistema.

Supongamos que tenemos la forma integral que corresponde a la ecuación de Schrödinger¹,

$$\Psi = \Psi_0 + \int gV\Psi, \quad (1.4)$$

donde Ψ es la función de onda, V es el potencial de dispersión y $g(x) \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikx}}{x}$ (en una dimensión). Si tomamos la expresión anterior y lo insertamos en la misma

¹Las integrales aquí se refieren a integrales sobre el volumen de espacio-tiempo $\int d^4x$ en la región donde actúa el potencial y durante el tiempo en que actúa [1]

expresión bajo el signo integral.

$$\Psi = \Psi_0 + \int gV\Psi_0 + \int gV \int gV\Psi, \quad (1.5)$$

continuando el proceso de forma iterada llegamos obtener una serie formal para Ψ :

$$\Psi = \Psi_0 + \int gV\Psi_0 + \int gV \int gV\Psi_0 + \int gV \int gV \int gV\Psi_0 + \cdots; \quad (1.6)$$

Observemos que en cada integrando aparece la función de onda incidente Ψ_0 y con las potencias del término gV .

La serie de Born constituyó la base para la formulación de Feynman de su propia serie en mecánica cuántica relativista que se expresa en forma gráfica en términos de los vértices y líneas (los propagadores) conectados entre sí en los diagramas de Feynman[8].

1.5. El propagador en el formalismo de integrales de camino

R.P. Feynman demostró que el propagador en mecánica cuántica puede verse como una integral funcional, la cual suma amplitudes complejas sobre una colección infinita de caminos en el espacio-tiempo[4]. En forma discreta esta amplitud de propagación se puede representar mediante la siguiente integral múltiple, en ella los caminos han sido discretizados como una serie de puntos $\{x_i\}$ separados en el tiempo por la cantidad ϵ :

$$\begin{aligned} K_M(x, y; t) &= \int \prod_{i=1}^{N-1} dx_i \left(\frac{m}{2i\epsilon\pi} \right)^{N/2} \\ &\times \exp\left(i \sum_{i=1}^N \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon} \right)^2 - v(x_j) \right]\right), \end{aligned}$$

esta es la ecuación en el formalismo de integrales de camino, tal noción de integrales viene de los puntos conectados por líneas, generando un camino continuo a trozos que conecta y con x .

La suma se puede interpretar como una integral a lo largo del camino (como una suma de **Riemann**) suponiendo que hay un número infinito de puntos en el camino, es decir, $\epsilon \rightarrow 0$ entonces la acción clásica surge de:

$$\sum_{i=1}^N \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon} \right)^2 - v(x_j) \right] \sim \int_0^t dt' \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx(t')}{dt'} \right)^2 - v(x) \right], \quad (1.7)$$

y la medida en la integral de camino es

$$\prod_{i=1}^{N-1} dx_i \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{N/2} \sim Dx(t).$$

En el exponencial la fase es la acción clásica medida en unidades de $\hbar$, $\frac{iS[x(t)]}{\hbar}$, donde

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= \int_0^t dt' \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx(t')}{dt'} \right)^2 - v(x) \right] \\ &= \int_0^t dt' \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2(t') - v(x) \right]. \end{aligned}$$

El propagador, en el formalismo de integrales de camino, es representado por

$$K_M(x, y; t) = \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} Dx(t) e^{\frac{iS[x(t)]}{\hbar}}. \quad (1.8)$$

1.6. Cálculo del propagador de una partícula libre

Dado que el hamiltoniano de una partícula libre es

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad (1.9)$$

posteriormente se calcula el propagador de una partícula que se mueve de y a x a un cierto tiempo $t > 0$.

$$K_M(x, y; t) = \langle x | e^{-i\hat{H}t} | y \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dp e^{-i\frac{p^2 t}{2m}} \langle x | p \rangle \langle p | y \rangle, \quad (1.10)$$

usando resultados conocidos de mecánica cuántica que se encuentran en [9]

$$\langle x | p \rangle = e^{ipx}, \quad (1.11)$$

$$\langle x | p \rangle^* = \langle p | x \rangle = e^{-ipx}, \quad (1.12)$$

entonces

$$K_M(x, y; t) = \frac{1}{2\pi} \int dp e^{-i\frac{p^2 t}{2m} + i(x-y)p}, \quad (1.13)$$

si usamos que

$$\int dp e^{iap^2 + ibp} = \sqrt{\frac{i\pi}{a}} e^{-\frac{ib^2}{4a}}, \quad (1.14)$$

por lo tanto

$$K_M(x, y; t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i t}} e^{\frac{im(x-y)^2}{2t}}, \quad (1.15)$$

aplicando la rotación de **Wick** que consiste en pasar de un espacio de **Minkowski** a un espacio Euclideo, es decir, $t \rightarrow -it$,

$$K_E(x, y; t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} e^{-\frac{m(x-y)^2}{2t}}. \quad (1.16)$$

1.7. La expansión perturbativa

Supongamos que la partícula se mueve de un punto a a b en el espacio-tiempo, bajo un potencial $V(x) = \lambda\delta(x)$ en una dimensión, entonces el **kernel**

$$K_V(b, a) = \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right) Dx(t), \quad (1.17)$$

donde

$$S[x(t)] := \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - \lambda\delta(x)\right) dt, \quad (1.18)$$

y usando la expansión en serie:

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots, \quad (1.19)$$

tenemos la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} -\lambda\delta(x) dt\right) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \lambda\delta(x) dt \\ &+ \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \lambda\delta(x) dt\right)^2 \\ &+ \frac{1}{3!} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \lambda\delta(x) dt\right)^3 + \dots, \end{aligned}$$

es posible mostrar que si se usan eigenestados de la energía y la posición $|x\rangle_E$ se obtiene la siguiente expansión perturbativa para el propagador

$$\begin{aligned} K_V(b, a) &= \langle x_b | x_a \rangle_E - \frac{i\lambda}{\hbar} \langle x_b | 0 \rangle_E \langle 0 | x_a \rangle_E \\ &- \frac{\lambda^2}{2\hbar^2} \langle x_b | 0 \rangle_E \langle 0 | 0 \rangle_E \langle 0 | x_a \rangle_E + \dots \\ &= \langle x_b | x_a \rangle_E - \frac{i\lambda}{\hbar} \left(1 + \frac{i\lambda}{2\hbar} \langle 0 | 0 \rangle_E\right)^{-1} \langle x_b | 0 \rangle_E \langle 0 | x_a \rangle_E \\ &= \langle x_b | x_a \rangle_E - \frac{i\lambda}{\hbar} \frac{\langle x_b | 0 \rangle_E \langle 0 | x_a \rangle_E}{1 + \frac{i\lambda}{2\hbar} \langle 0 | 0 \rangle_E}. \end{aligned}$$

Remarcando que se puede sumar la serie completa de manera exacta porque es una serie geométrica, por lo tanto

$$K_V(b, a) = \langle x_b | x_a \rangle_E - \frac{i\lambda}{\hbar} \frac{\langle x_b | 0 \rangle_E \langle 0 | x_a \rangle_E}{1 + \frac{i\lambda}{2\hbar} \langle 0 | 0 \rangle_E}, \quad (1.20)$$

más detalles de este cálculo se encuentran en [10].

1.8. Método de imágenes

El método de imágenes en la teoría electromagnética es una técnica que permite calcular campos eléctricos y potenciales en situaciones con cierta simetría. Se propone una carga q , o sistema de cargas, ficticias situada(s) adecuadamente para reproducir las condiciones de frontera del problema en una región determinada. El caso más simple es el de una carga situada frente a una placa conductora infinita, en este caso es bien conocido que la placa puede reemplazarse por una carga imagen $-q$, se dice que el potencial que producen las dos cargas sobre la placa es cero. Esta técnica se puede usar en otros problemas físicos, por ejemplo en propagación de ondas. En este caso nos interesa usarlo para hallar la solución exacta con condiciones de Dirichlet para una partícula que se mueve en una dimensión, es decir el problema de la propagación libre de una partícula sobre la **semi-recta**

$$\begin{aligned} K(x^{**}, x^*; \tau) &= K_0(x^{**}, x^*; \tau) - K_0(x^{**}, -x^*; \tau) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{1/2} \left[\exp\left(-\frac{m}{2\hbar\tau}(x^{**} - x^*)^2 \right) - \exp\left(-\frac{m}{2\hbar\tau}(x^{**} + x^*)^2 \right) \right], \end{aligned} \quad (1.21)$$

en esta ecuación la representación de la imagen es el propagador

$$K_0(x^{**}, -x^*; \tau).$$

De tal manera que se cumple la correspondiente condición de frontera al problema. En cuanto $x = 0$ la función de onda es reflejada, por lo tanto la función se anula. De esto podemos decir que se crea una función de onda incidente y una función de onda reflejada donde la suma de la función de onda directa y la función de onda reflejada nos da la función de Green, kernel o propagador.

Capítulo 2

Los Aproximantes de Padé

2.1. Aproximación de Padé

La aproximación de Padé da la mejor aproximación de una función en términos de una función racional cuya expansión en serie de Taylor coincide con la expansión de la función en serie de Taylor trunca hasta un orden dado[2]. Frecuentemente se usa para extrapolar valores de la función incluso fuera del radio de convergencia de la serie de Taylor. Este es el uso que le daremos.

Sea f una función, $m \geq 0$ y $n \geq 0$, la aproximación de Padé de orden $[m/n]$ es la función racional ($Q_m(x)$ y $P_n(x)$ son polinomios en x de órdenes m y n),

$$R(x) = \frac{Q_m(x)}{P_n(x)}, \quad (2.1)$$

que concuerda con f en el máximo orden posible, es decir,

$$\begin{aligned} f(0) &= R(0), \\ f'(0) &= R'(0), \\ &\vdots \\ f^{(m+n)}(0) &= R^{(m+n)}(0), \end{aligned}$$

si $R(x)$ se expande en una serie de Taylor alrededor de $x = 0$ (serie de Maclaurin), sus primeros $m + n$ términos coincidirían con los primeros $m + n$ términos de $f(x)$, con este requerimiento la aproximación de Padé es única ya que dado $[n/m]$ los coeficientes que definen a los polinomios $Q_m(x), P_n(x)$, llamados a_i, b_j pueden ser determinados de manera unívoca[11].

$$Q_m(x) = \sum_{i=0}^m a_i x^i, \quad P_n(x) = \sum_{j=0}^n b_j x^j$$

La aproximación de Padé se le denota también como,

$$[m/n]f(x),$$

para una x dada, la aproximación de Padé puede ser calculada mediante el llamado algoritmo épsilon [11] y también por otras secuencias de transformaciones de sus sumas parciales,

$$s_n(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + \cdots + c_nx^n, \quad (2.2)$$

donde los coeficientes de la series de Taylor de f son

$$c_k = \frac{f^k(0)}{k!}, \quad (2.3)$$

nótese que f también puede ser una serie formal de potencias, por lo que la aproximación de Padé puede ser aplicada también a la suma de series divergentes en esquemas de sumación similares a los de Borel o Césaro [11].

2.1.1. Aplicación del aproximante de Padé

Los aproximantes de Padé frecuentemente aproximan de mejor manera una función dada que su serie de Taylor truncada [1, 2]. Los coeficientes del aproximante de Padé son únicos salvo un factor común en denominador y numerador, así que por convención elegimos $b_0 = 1$ de forma que si se tiene la serie de Taylor

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k, \quad (2.4)$$

el aproximante de Padé de orden $[M/N]$ resulta

$$[M/N]_f(x) = \frac{\sum_{i=0}^M a_i x^i}{1 + \sum_{j=1}^N b_j x^j}, \quad (2.5)$$

donde M y N son enteros positivos. Esta convención fija de manera unívoca los coeficientes $\{a_i, b_j\}$

Observando que hay $M + 1$ coeficientes del numerador y N del denominador tenemos $M + N + 1$ coeficientes desconocidos, lo cual requiere que conozcamos $N + M + 1$ coeficientes c_k de la serie de Taylor de $f(x)$ para determinar igual de coeficientes en el aproximante

$$\frac{\sum_{i=0}^M a_i x^i}{1 + \sum_{j=1}^N b_j x^j} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k + o(x^{M+N+1}), \quad (2.6)$$

multiplicando por el denominador de la función racional a ambos miembros de la ecuación anterior,

$$\begin{aligned} a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_Mx^M = \\ (c_0 + c_1x + c_2x^2 + \cdots)(1 + b_1x + b_2x^2 + \cdots + b_Nx^N) + o(x^{M+N+1}), \end{aligned} \quad (2.7)$$

para determinar los coeficientes primeramente notamos que para x^n con $M + 1 \leq n \leq M + N$ los coeficientes del lado derecho deben anularse, lo que nos lleva a

un sistema lineal de N ecuaciones

$$\begin{aligned} b_N c_{M-N+1} + b_{N-1} c_{M-N+2} + \cdots + b_1 c_M + c_{M+1} &= 0 \\ b_N c_{M-N+2} + b_{N-1} c_{M-N+3} + \cdots + b_1 c_{M+1} + c_{M+2} &= 0 \\ \vdots & \\ b_N c_M + b_{N-1} c_{M+1} + \cdots + b_1 c_{M+N-1} + c_{M+N} &= 0 \end{aligned} .$$

las cuales pueden escribirse en forma compacta como

$$c_n + \sum_{j+k=n} b_j c_k = 0, \quad M+1 \leq n \leq M+N$$

o en forma matricial de la manera

$$\begin{pmatrix} c_{M-N+1} & c_{M-N+2} & \cdots & c_N \\ c_{M-N+2} & c_{M-N+3} & \cdots & c_{N+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \cdots & c_{M+N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_N \\ b_{N-1} \\ \vdots \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{N+1} \\ c_{N+2} \\ \vdots \\ c_{M+N} \end{pmatrix} .$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones lineales, por ejemplo mediante la regla de Cramer, podemos encontrar los coeficientes b_j . Por otro lado los coeficientes a_i se obtienen por substitución un vez que se conocen los b_j mediante

$$a_i = c_i + \sum_{j+k=i} b_j c_k, \quad 1 \leq i \leq M$$

Utilizando la regla de Cramer es posible expresar mediante determinantes el aproximante de Padé de orden $[M/N]$:

$$[M/N]_f(x) = \frac{\begin{vmatrix} x^N f_{M-N} & x^{N-1} f_{M-N+1} & \cdots f_M x \\ c_{M-N+1} & c_{M-N+2} & \cdots c_{M+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \cdots c_{M+N} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} x^N & x^{N-1} & \cdots 1 \\ c_{M-N+1} & c_{M-N+2} & \cdots c_{M+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \cdots c_{M+N} \end{vmatrix}}, \quad (2.8)$$

donde $f_q = c_0 + c_1 x + \cdots + c_r x^q$ es la q -ésima suma parcial de la serie de Taylor para f , es decir la serie de Taylor de f truncada a orden q . Algunos ejemplos y más detalles pueden consultarse en el apéndice [A](#)

Vale la pena mencionar que **Claude Brezinski** ha descrito nuevas expresiones matemáticas para los aproximantes de Padé y algunas de sus variantes[13]. Como hemos expuesto un aproximante de Padé es una función racional cuya expansión en serie de potencias ascendentes de la variable coincide con una serie de potencias formal dada en la medida de lo posible. Por lo tanto se puede interpretar como un interpolante racional de **Hermite**[13] en cero, generalmente se escribe bajo la forma racional. Otras variantes de los aproximantes de Padé existen y han sido estudiadas extensivamente, por ejemplo los aproximantes de Padé restrictivos o los aproximantes parciales de Padé donde se prescriben polos y ceros, los cuales se tratan en [13].

2.2. El valor de una función en infinito asintóticamente

Nos concierne un problema específico desde el punto de vista matemático, queremos determinar el valor de una función en $x = \infty$, es decir $f(\infty)$ a partir de los valores para $f(x)$ cuando x es cercano a 0. Por supuesto en el caso general esto no es posible, sin embargo para muchas funciones esto es posible, por ejemplo para funciones de Herglotz [14] mediante aproximantes de Padé.

La idea esencial es calcular la serie de Taylor de $f(x)$ alrededor de $x = 0$ hasta un orden $2N + 1$

$$f(x) = \sum_{k=0}^{2N+1} c_k x^k$$

este sería el resultado de una serie perturbativa como serie de potencias en el parámetro x , buscamos el valor de $f(\infty)$ que puede obtenerse mediante la serie perturbativa directamente (porque $x = \infty$ está fuera del radio de convergencia, y porque solamente tenemos una serie de Taylor trunca.) Sabemos que en nuestro problema el valor de $f(\infty)$ es finito y distinto de cero, tiene entonces sentido como se señala en [14] considerar los aproximantes de Padé diagonales

$$[N/N]_f(x) = \frac{\sum_{i=0}^N a_i x^i}{1 + \sum_{j=1}^N b_j x^j}$$

y aproximar el valor que buscamos mediante el límite del aproximante, es decir $f(\infty) \approx \lim_{x \rightarrow \infty} [N/N]_f(x)$:

$$f(\infty) \approx \frac{a_N}{b_N}.$$

Típicamente valores grandes de N mejoran la aproximación, de hecho en este esquema el mejor valor que puede obtenerse es

$$f(\infty) \approx \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{a_N}{b_N}$$

Un refinamiento de esta idea fue introducida por **Carl Bender**, a continuación describimos las ideas principales. En la solución de un problema no perturbativo (en particular C. Bender estaba interesado en problemas de campos sobre redes (lattices) en el régimen de acoplamiento fuerte [14, 7]) se parte de la solución perturbativa del problema, al cual tiene frecuentemente la estructura de una serie de Fubini:

$$f(x) = x^\alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$$

donde α es un número real, no necesariamente entero ni positivo. La primera idea es tomar la raíz α -ésima en ambos lados, resultando en

$$(f(x))^{1/\alpha} = x \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n x^n := g(x)$$

Seguidamente esta función se aproxima mediante aproximantes de Padé, donde se calculan los aproximantes diagonales $[N/N]_f(x)$ a diferentes órdenes N . C. Bender observó que para una clase amplia de problemas hay un comportamiento logarítmico en la convergencia del tipo

$$[N/N]_g(\infty) \approx g(\infty) + \frac{B}{\ln N}$$

con alguna constante B específica para la función g . La idea es ahora utilizar un esquema de extrapolación de Richardson[15] donde se utilizan dos (o preferentemente más) valores de N para calcular $g(\infty)$. Por ejemplo, si tomamos $N, N+1$ tendremos

$$[N+1/N+1]_g(\infty) \approx g(\infty) + \frac{B}{\ln(N+1)}$$

de donde combinando ambas ecuaciones se obtiene:

$$g(\infty) \approx \frac{\ln(N+1)[N+1/N+1]_g(\infty) - \ln(N)[N/N]_g(\infty)}{\ln(1+1/N)}$$

El método consiste entonces en calcular primero suficientes valores de N para confirmar el **Ansatz** del comportamiento logarítmico (o en su defecto algún otro modelo) y luego mediante extrapolación de Richardson obtener el valor aproximado de $g(\infty)$, aún sin ir a valores de N demasiado grandes. Por supuesto al final $f(\infty) = g(\infty)^\alpha$. Aunque no usaremos extensivamente el método de Bender en esta tesis, resulta interesante comparar el resultado de este refinamiento con el resultado que proveen directamente los aproximantes diagonales tal como hemos descrito. Tal comparación sí la llevamos a cabo para algunos de los cálculos numéricos obtenidos. Este método refinado de Padé es aplicable, como hemos mencionado, a series divergentes también, por ejemplo a muchas de las series asintóticas donde típicamente el comportamiento de los coeficientes γ_n cumple con

- $\gamma_n \approx n!$ para cuando $n \rightarrow \infty$.
- Los coeficientes γ_n exhiben un patrón de signos doblemente alternos $+, +, -, -, +, +, -, -, \dots$

En este trabajo investigamos más bien la utilidad de estos métodos en la idea que resulta cuando f es el propagador de una partícula en un potencial singular que depende un parámetro λ , mismo que juega el papel de la variable x . Nuestra intención es recobrar el límite con $\lambda = \infty$ a partir de la serie de Born para λ pequeño, aunque es un método bien conocido y que ha sido aplicado a una serie de problemas en teoría cuántica, estimamos que vale la pena analizar este problema en vista de generalizaciones más interesantes.

Capítulo 3

Teoría perturbativa y Aproximantes de Padé

3.1. Solución exacta del propagador

La solución para el propagador libre en una dimensión espacial de una partícula de masa m que obedece la ecuación de Schrödinger, tomando $m = 1, \hbar = 1$ y (mediante una rotación de Wick) tiempo imaginario (de forma que las amplitudes son puramente reales) es [4]:

$$K_0(x_0, t_0 | x_1, t_1) = \frac{e^{-(x_1 - x_0)^2 / 2(t_1 - t_0)}}{\sqrt{2\pi(t_1 - t_0)}} \theta(t_1 - t_0). \quad (3.1)$$

Esta función representa la amplitud de propagación de una partícula del punto x_0 al tiempo t_0 al punto x_1 al tiempo t_1 . Debido a la homogeneidad del tiempo sabemos que K_0 depende solamente de la diferencia de tiempo $t_1 - t_0$, por esto definimos la transformada de Fourier:

$$\hat{K}_0(x_0, x_1 | \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} K_0(x_0, 0 | x_1, t) dt = \int_0^{+\infty} \frac{e^{i\omega t - (x_1 - x_0)^2 / 2t}}{\sqrt{2\pi t}} dt \quad (3.2)$$

Esta integral se resuelve mediante el cambio de variable: $u = \sqrt{-i\omega t} - \frac{|x_1 - x_0|}{2\sqrt{t}}$, donde se usa la rama principal de la raíz. Usando este truco llegamos a

$$\hat{K}_0(x_0, x_1 | \omega) = \frac{1}{\sqrt{-2i\omega}} e^{-\sqrt{-2i\omega} |x_1 - x_0|} \quad (3.3)$$

Ahora nos ocuparemos de encontrar una expresión para el propagador cuando hay un potencial presente $V(x) = \lambda \delta(x)$. En general dado un potencial $V(x)$ el propagador, que en nuestro caso llamaremos K_λ satisface una ecuación integral [4]:

$$K_\lambda(x_0, t_0 | x_1, t_1) = K_0(x_0, t_0 | x_1, t_1) - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x_0, t_0 | y, \tau) V(y) K_\lambda(y, \tau | x_1, t_1), \quad (3.4)$$

iterando esta relación se puede escribir una serie formal que contiene solamente a $V(x)$ y a K_0 bajo integrales, la cual para valores pequeños de λ se interpreta como una serie perturbativa. Tomando la transformada de Fourier de esta serie perturbativa, para el caso del potencial $V(x) = \lambda\delta(x)$ es posible sumar la serie de potencias completa para λ (que resulta no ser más que una serie geométrica en este caso) y se llega a

$$\hat{K}_\lambda(x_0, x_1|\omega) = \lambda \frac{\hat{K}_0(x_0, 0|\omega)\hat{K}_0(0, x_1|\omega)}{1 + \lambda\hat{K}_0(0, 0|\omega)}.$$

Invirtiendo la transformada de Fourier se llega finalmente a la expresión integral para el propagador

$$K_\lambda(x_0, t_0|x_1, t_1) = \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{K}_0(x_0, 0|\omega)\hat{K}_0(0, x_1|\omega)e^{-i\omega t}}{1 + \lambda\hat{K}_0(0, 0|\omega)} \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (3.5)$$

Grosche demostró [16] que esta integral se puede resolver de manera cerrada, siguiendo nuestro propio camino encontramos una manera de hacerlo mediante integración de contorno en el plano complejo, algunos elementos básicos de variable compleja que fueron necesarios han sido resumidos en el apéndice B.

El primer paso es notar que si definimos $a = |x_0| + |x_1|$ la integral a resolver es

$$\frac{\lambda}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\sqrt{-2i\omega}a - i\omega t}}{\sqrt{-2i\omega} + \lambda \sqrt{-2i\omega}} d\omega. \quad (3.6)$$

Esta integral puede resolverse sin dificultad en el límite de Dirichlet $\lambda \rightarrow \infty$, porque en tal caso por inspección concluimos que es la transformada inversa de la transformada de Fourier de un propagador libre, el de la fuente imagen:

$$K_0(0, 0|a, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{K}_0(x_0, 0|\omega)\hat{K}_0(0, x_1|\omega)}{\hat{K}_0(0, 0|\omega)} e^{-i\omega t} d\omega.$$

En el caso general la integral (3.5) es mucho más complicada¹, sin embargo estamos interesados en la expansión en serie de Taylor de esta función alrededor de $\lambda = 0$. Para este fin realizamos un cambio en el contorno de integración usando el teorema de Cauchy, este puede verse en dos pasos, primero deformando el contorno para que pase por el eje imaginario (ver figura 3.1), sin embargo ambas deformaciones de contorno solamente son posibles para $t > 0$, pues para $t < 0$ la integral se anula, lo cual puede verse del hecho de que estas deformaciones son ahora imposibles, pero es posible deformar el contorno siguiendo los arcos mostrados en la figura (3.1). Con estas observaciones se llega a la forma siguiente para (3.5)

$$\theta(t) \frac{\lambda}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ipa - \frac{1}{2}p^2 t}}{ip + \lambda} dp \quad (3.7)$$

¹la principal complicación proviene por las ramas principales de la raíz que cambian cuando cambia el signo de ω .

En este punto deseamos obtener una expansión en serie de Taylor alrededor de $\lambda = 0$, pero no es posible hacerlo de forma directa (ingenua) pues expandir el denominador en serie de Laurent en el integrando lleva obviamente a integrales divergentes:

$$\theta(t) \frac{\lambda}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{ip} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i\lambda}{p} \right)^k e^{-ipa - \frac{1}{2}p^2t}$$

Aunque es posible darle sentido a estas integrales en el sentido de la parte principal de Cauchy de cada integral, nos parece mejor optar por intentar encontrar una forma cerrada usando el contorno mostrado en la figura 3.1, en la parte recta del contorno usamos la variable compleja $q \in (-\infty, \infty)$ tal que $p = i\lambda + q$, esta contribución a (3.7) es (omitiendo la función $\theta(t)$ para abreviar)

$$\frac{\lambda}{2\pi} e^{\frac{1}{2}\lambda^2t + \lambda a} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i(a+\lambda t)q - \frac{1}{2}q^2t}}{iq} dq, \quad (3.8)$$

que se reduce a

$$-\frac{\lambda}{2\pi} e^{\frac{1}{2}\lambda^2t + \lambda a} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{sen}((a + \lambda t)q)}{q} e^{-\frac{t}{2}q^2} dq,$$

aprovechando el resultado conocido de la integral²

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{sen}(\alpha x)}{x} e^{-\beta x^2} dx = \pi \text{Erf} \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\beta}} \right), \quad (\beta > 0)$$

obtenemos una forma cerrada de (3.8)

$$-\frac{\lambda}{2} e^{\lambda a + \frac{1}{2}\lambda^2t} \text{Erf} \left(\frac{\lambda t + a}{\sqrt{2t}} \right) \quad (3.9)$$

Para calcular la contribución de la muesca usamos el teorema de residuos (para mayores detalles consultar el apéndice B), o equivalentemente la representación

$$\frac{1}{z} = P.P. \frac{1}{z} + i\pi\delta(z),$$

donde hasta el momento hemos calculado el resultado de la parte principal $P.P.$. Por cualquiera de estos métodos obtenemos para esta contribución. Para $q = \epsilon e^{i\phi}$, $\phi \in [-\pi, 0]$, $\epsilon \rightarrow 0$ entonces

$$\begin{aligned} \frac{\lambda}{2\pi} e^{\lambda a + \frac{1}{2}\lambda^2t} \int \frac{\text{Exp}[-i(a + \lambda t)q - \frac{1}{2}q^2t]}{iq} dq = \\ \frac{\lambda}{2\pi} e^{\lambda a + \frac{1}{2}\lambda^2t} \int_{-\pi}^0 d\phi = \frac{\lambda}{2} e^{\lambda a + \frac{1}{2}\lambda^2t} \end{aligned}$$

Con lo cual obtenemos una forma cerrada para la diferencia de propagadores en el potencial dado:

²En nuestra convención la función $\text{Erf}(z) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-s^2} ds$, es una función impar.

$$\frac{\lambda}{2} e^{\lambda a + \frac{1}{2} \lambda^2 t} \left(1 - \operatorname{Erf} \left(\frac{\lambda t + a}{\sqrt{2t}} \right) \right) \theta(t) \quad (3.10)$$

finalmente, obtenemos el siguiente resultado (donde $a = |x_0| + |x_1|$)

$$K_\lambda(x_0, 0|x_1, t) = K_0(x_0, 0|x_1, t) - \frac{\lambda}{2} e^{\lambda a + \frac{1}{2} \lambda^2 t} \left(1 - \operatorname{Erf} \left(\frac{a + \lambda t}{\sqrt{2t}} \right) \right) \theta(t) \quad (3.11)$$

El cual también se puede escribir de la manera

$$K_\lambda(x_0, 0|x_1, t) = K_0(x_0, 0|x_1, t) - \frac{\lambda}{2} e^{\lambda a + \frac{1}{2} \lambda^2 t} \operatorname{Erfc} \left(\frac{a + \lambda t}{\sqrt{2t}} \right) \theta(t)$$

Donde $\operatorname{Erfc}(x) = 1 - \operatorname{Erf}(x)$ es la función error complementaria. Este es exactamente el resultado reportado por Grosche en [16].

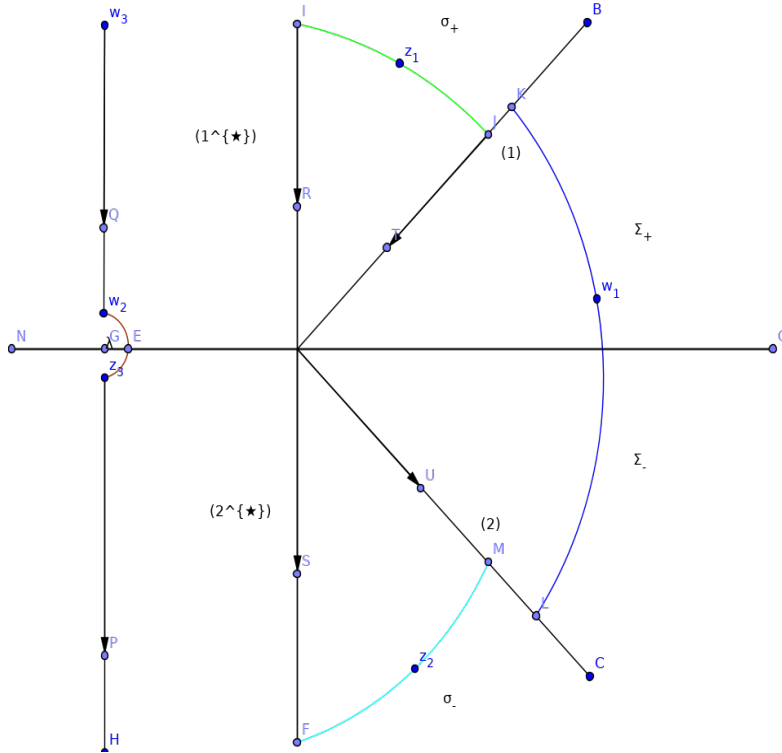


Figura 3.1. Deformación de contornos de integración.

3.2. Cálculo del propagador a través del método de Padé

Dada una partícula sometida a la influencia de una barrera de potencial en una dimensión, se dice que este potencial es de tipo dirac, es decir, que $V(x) = \lambda \delta(x)$, donde $\lambda > 0$ es el parámetro que mide la intensidad de la barrera y será nuestro

3.2. CÁLCULO DEL PROPAGADOR A TRAVÉS DEL MÉTODO DE PADÉ²³

parámetro de perturbación en la serie de Born. La dinámica de esta partícula cuántica está dada por la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K_\lambda(x_0, t_0|x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} K_\lambda(x_0, t_0|x, t) + \lambda \delta(x) K_\lambda(x_0, t_0|x, t), \quad (3.12)$$

con condición inicial,

$$K_\lambda(x_0, t_0|x, t) = \delta(x - x_0), \quad K_\lambda(x, t|x_0, t_0) = 0, \quad t < t_0. \quad (3.13)$$

(La partícula empieza en un estado localizado en x_0 al tiempo t_0)

Dado el término general de la expansión perturbativa en una barrera de potencial infinito que corresponde a la ecuación de Schrödinger, se determina la amplitud de propagación de la partícula tomando $t_0 = 0$, $K_\lambda(x_0, 0|x, t)$. Por simplicidad usaremos la notación $t_{n+1} := t$,

$$\begin{aligned} K_\lambda(x_0, 0|x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2t}} - \lambda \int_0^t dt_1 \frac{1}{2\pi \sqrt{(t-t_1)t_1}} e^{-\frac{x^2}{2(t-t_1)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} \\ &+ \dots + \frac{(-\lambda)^n}{(2\pi)^{\frac{n+1}{2}}} \int_0^{t_2} dt_1 \int_0^{t_3} dt_2 \dots \int_0^t dt_n \\ &\times \frac{1}{\sqrt{t_1(t-t_n) \prod_{n=1}^{k-1} (t_{n+1} - t_n)}} e^{-\frac{x^2}{2(t-t_n)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} + \dots \end{aligned}$$

Esta es una serie de potencias en λ , y como tal tiene un radio de convergencia $\mathcal{R}$ por lo cual converge si $|\lambda| < \mathcal{R}$. Esta serie puede usarse con éxito si λ es pequeño en el sentido $\lambda \ll \mathcal{R}$

Ahora queremos usar aproximantes de Padé para extrapolar el valor de K_λ hasta $\lambda = \infty$. Para esto estudiaremos un tipo de amplitudes particulares, las amplitudes de permanencia, es decir fijaremos $x = x_0$ y daremos una serie de valores a t de modo que definimos

$$f(\lambda) := K_\lambda(x_0, t; x_0, 0),$$

y buscamos una aproximación de Padé:

$$\begin{aligned} f(\lambda) &\approx \frac{a_0 + a_1\lambda + \dots + a_N\lambda^N}{b_0 + b_1\lambda + \dots + b_N\lambda^N} \\ &= c_0 + c_1\lambda + \dots + c_{2N}\lambda^{2N} + \dots \end{aligned}$$

Calcularemos los coeficientes c_k de la serie de Taylor alrededor de $\lambda = 0$, por ejemplo para el primer coeficiente c_1 tenemos

$$c_1 := \int_0^t dt_1 \frac{1}{2\pi \sqrt{(t-t_1)t_1}} e^{-\frac{x_0^2}{2(t-t_1)} - \frac{x_0^2}{2t_1}}. \quad (3.14)$$

Introducimos el cambio de variable, $t_1 = tu_1$ y definimos $\frac{x_0^2}{2t} := \alpha$, de tal forma que

$$c_1 := \int_0^1 \frac{du_1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{(1-u_1)u_1}} e^{-\frac{\alpha}{1-u_1} - \frac{\alpha}{u_1}}. \quad (3.15)$$

similarmente se obtiene

$$c_2 := \frac{\sqrt{t}}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^{u_2} du_1 \int_0^1 du_2 \frac{1}{\sqrt{(1-u_2)(u_2-u_1)u_1}} e^{-\frac{\alpha}{1-u_2} - \frac{\alpha}{u_1}}. \quad (3.16)$$

De manera parecida se encuentran los demás coeficientes de la expansión perturbativa, en nuestro caso calculamos los primeros once, $c_0, c_1, \dots, c_{10}$. Las integrales correspondientes se encuentran de forma explícita en el apéndice C. Más adelante a manera de verificación comparamos numéricamente también los coeficientes de la expansión perturbativa con respecto a los coeficientes de la serie de Taylor de la solución exacta mostrando que coinciden, como era de esperarse.

Usaremos el programa **Mathematica** para calcular numéricamente las integrales que se requieren para conocer los coeficientes c_k .

En la figura (3.2) podemos observar los coeficientes de la serie perturbativa donde la sigla (**LCDEP**: significa los coeficientes de la expansión perturbativa).

$$f(\lambda) = c_0 + c_1\lambda + c_2\lambda^2 + \dots + c_{10}\lambda^{10} + \dots \quad (3.17)$$

los signos de los coeficientes c_k son siempre alternantes.

En tablas hemos comparado los coeficientes de la expansión perturbativa con los coeficientes que se determinan de la serie de Taylor de la solución exacta, por ejemplo en el cuadro (3.1), que como es de esperarse coinciden.

La solución exacta del propagador completo se encuentra en [16, 17], la hemos calculado de manera independiente. En particular, Grosche trata también potenciales atractivos ($\lambda < 0$), nosotros solamente repulsivos ($\lambda > 0$).

Además de la amplitud de permanencia hemos calculado para otros valores de t , a con puntos no coincidentes tales como³ $t = 1$, $a = |x_1| + |x_0| = \sqrt{8}$,

La expresión general de la solución exacta del propagador es, para $t > 0$,

$$K_\lambda(x_0, 0|x_1, t) = K_0(x_0, 0|x_1, t) - \frac{\lambda}{2} e^{\lambda a + \frac{1}{2}\lambda^2 t} \text{Erfc} \left(\frac{a + \lambda t}{\sqrt{2t}} \right).$$

³Nota: Para valores diferentes de t , $\frac{x_0^2}{2t}$, el valor de a se preserva.

posteriormente tenemos la gráfica (3.3) donde se muestra **ADPEP** que denota el aproximante de Padé de la expansión perturbativa a orden $[5/5]$, **VA** es el valor asintótico de la función predicho mediante el método de Padé, es decir, $f(\infty) \approx \frac{a_5}{b_5}$, **MDI** es el valor exacto que se determina de la solución analítica por el método de imágenes y **ADPS** es el aproximante de Padé formado a partir de la serie de Taylor de la solución exacta.

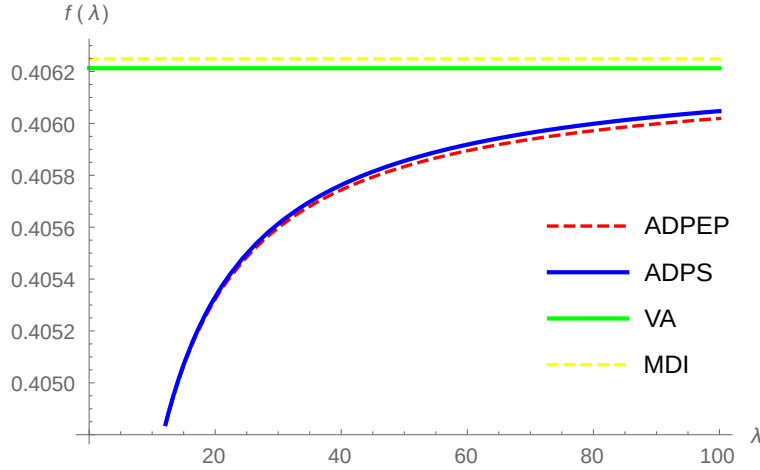


Figura 3.3. El aproximante de Padé de la expansión perturbativa y el aproximante de Padé de la expansión del propagador completo a orden $[5/5]$, $\frac{x_0^2}{2t} = 1$, $t = 1$.

En la figura (3.4) podemos ver un rango más amplio de los aproximantes de Padé, donde se ajustan muy bien estos aproximantes a las soluciones exactas. De esto decimos que el valor asintótico y exacto coinciden razonablemente.

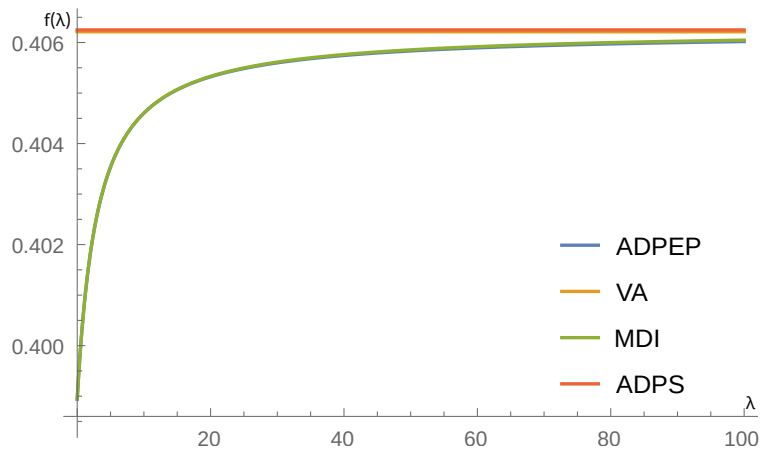


Figura 3.4. El ajuste del aproximante de Padé de la serie perturbativa con respecto al aproximante de Padé de la solución analítica, $\frac{x_0^2}{2t} = 1$, $t = 1$.

En la gráfica posterior (3.5), se muestran los distintos aproximantes de Padé en el límite de Dirichlet $\lambda \rightarrow \infty$, y se contrasta con la solución exacta del método de imágenes (como lo indica la línea verde en la gráfica), donde el valor numérico de estos aproximantes se aproxima al valor exacto. En cuanto a los puntos

3.2. CÁLCULO DEL PROPAGADOR A TRAVÉS DEL MÉTODO DE PADÉ27

que representan las transformaciones secuenciales de Padé (secuencia de aproximantes diagonales de órdenes crecientes), podemos observar en la gráfica (3.6) la distribución de los aproximantes de Padé y su comportamiento, es decir, qué tan cerca se encuentra de la solución exacta, y más adelante en la gráfica (3.7) encontramos una comparación considerablemente buena de los aproximantes de Padé en el límite de Dirichlet, con respecto a la solución exacta.

Para $\frac{x_0^2}{2t} = 2$, $t = 1/2$ tenemos los siguientes valores de los coeficientes de la expansión perturbativa c_k y los coeficientes d_k de la expansión en serie de Taylor de la solución exacta, como se puede observar en el cuadro (3.2), en este caso hay una leve diferencia respecto al valor exacto. La razón de esto es clara: el orden de aproximante necesario para obtener una buena aproximación depende de los parámetros del propagador, por otra parte también tenemos algunas desviaciones leves que son consecuencia del error numérico en el cálculo de los coeficientes c_k mediante integración numérica.

La gráfica (3.8) presenta los valores absolutos de los coeficientes de la expansión perturbativa. Posteriormente en la gráfica (3.9) tenemos los aproximantes de Padé de la expansión perturbativa y la solución analítica a orden $[5/5]$. En esta gráfica se puede notar el valor asintótico en comparación con el valor exacto del método de imágenes. La gráfica (3.10) muestra el ajuste en un rango más amplio de los aproximantes de Padé y además en (3.11) se muestra cómo los aproximantes de Padé diagonales se aproximan a la solución exacta. En cuanto a la gráfica (3.12) en ella mostramos el comportamiento de los aproximantes, vemos que conforme aumenta el orden N en $[N/N]$ primeramente la aproximación empeora antes de mejorar, este es un comportamiento típico de aproximaciones asintóticas respecto al orden.

En la gráfica (3.13) se puede observar cómo el aproximante de Padé de orden $[4/4]$ se aproxima mejor en la parte superior de la solución exacta (la línea verde es la solución exacta). De tal manera que el aproximante de orden $[1/1]$, se puede considerar una cota superior, mientras que el aproximante de orden $[3/3]$ es una cota inferior

Cuando los parámetros toman los valores $\frac{x_0^2}{2t} = 3$, $t = 1/3$, tenemos que los coeficientes de la serie de Born c_k y los coeficientes d_k de la expansión en serie de Taylor de la solución analítica, se puede encontrar una representación de estos coeficientes en el cuadro (3.3).

Los coeficientes c_k de este cuadro se han usado en la gráfica (3.14). En la gráfica (3.15) se pueden observar a los aproximantes de Padé de la expansión perturbativa y la solución exacta a orden $[5/5]$. De aquí también notamos cómo el valor asintótico se aproxima al valor exacto una vez más.

En la gráfica (3.16) se graficaron los aproximantes de Padé de la expansión perturbativa y la solución analítica del propagador completo, observando que coinciden, en un rango extenso. La gráfica (3.17) muestra los aproximantes de Padé diagonales en el límite de Dirichlet a órdenes $[N/N]$, $N = 1, \dots, 5$ donde vemos nuevamente una buena coincidencia con la solución exacta.

Es interesante mencionar, cómo en la gráfica (3.18) los aproximantes de Padé

no difieren considerablemente uno de otro.

Por otra parte para los valores $\frac{x_0^2}{2t} = 4$, $t = 1/4$ tenemos el cuadro (3.4) donde se muestran los valores de los coeficientes c_k y d_k donde cada punto se muestra en la siguiente gráfica (3.19). Posteriormente en la gráfica (3.20) se observa un empalme casi completo de los aproximantes de Pade de la serie de Born y la solución analítica, incluso es difícil discernirlas.

De modo similar la gráfica (3.21) muestra los aproximantes de Padé de la expansión perturbativa vs. la solución exacta, de manera que se ajustan en un rango amplio. La gráfica (3.22) muestra cómo los aproximantes diagonales de Padé $[N/N]$, $N = 1, \dots, 5$ en el límite de Dirichlet se aproximan a la solución analítica. Es notable destacar que en la gráfica (3.23) se observa la distribución de los aproximantes, todos predicen valores cercanos entre sí y cercanos a la solución analítica. Finalmente la gráfica (3.24) muestra también que el aproximante de orden $[5/5]$ se aproxima mejor a la solución exacta, en general al incrementar el orden N de $[N/N]$ la aproximación mejorará.

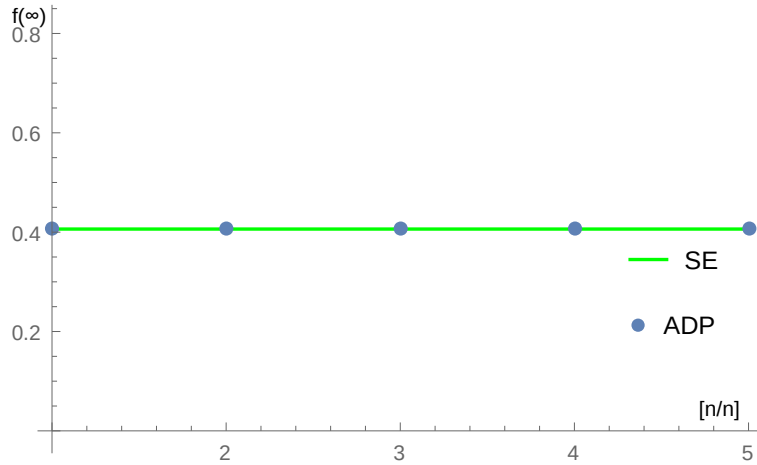


Figura 3.5. Los aproximantes de Padé diagonales $[N/N]$ evaluados en el límite de Dirichlet **ADP** vs. la solución exacta **SE**, $\frac{x_0^2}{2t} = 1$, $t = 1$.

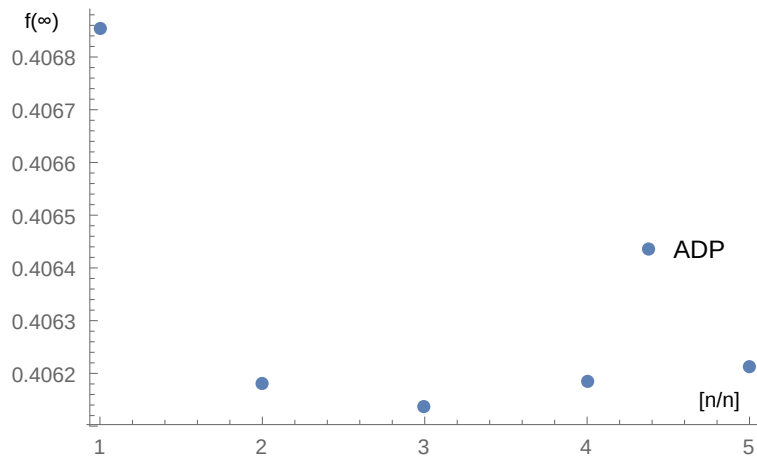


Figura 3.6. Distribución de los aproximantes de Padé **ADP**, $\frac{x_0^2}{2t} = 1$, $t = 1$.

3.2. CÁLCULO DEL PROPAGADOR A TRAVÉS DEL MÉTODO DE PADÉ²⁹

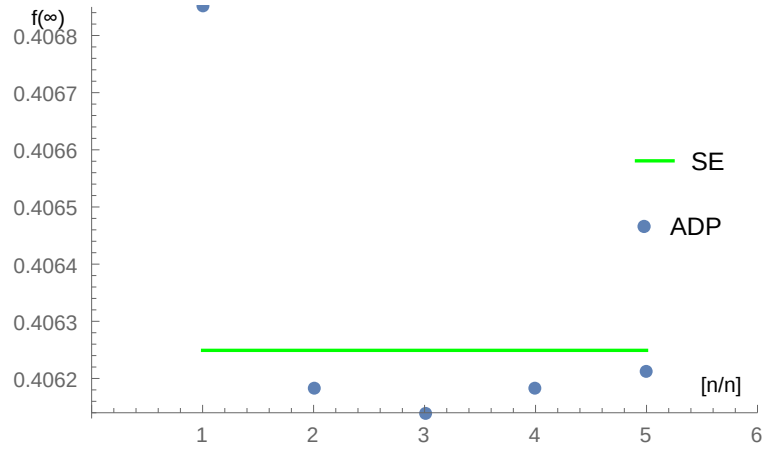


Figura 3.7. En la gráfica se puede observar que el aproximante de Padé de orden $[1/1]$ se encuentra por encima del valor exacto mientras que el aproximante de orden $[3/3]$ se encuentra por debajo del valor exacto, siendo el más cercano el aproximante de orden $[5/5]$, para $\frac{x_0^2}{2t} = 1$, $t = 1$.

coeficientes	valores absolutos	coeficientes	valores absolutos
$ c_0 $	0,5641895835477563	$ d_0 $	0,5641895835477563
$ c_1 $	0,00003167124183312013	$ d_1 $	0,0000316712
$ c_2 $	$5,052460721231713 \times 10^{-6}$	$ d_2 $	$5,05246 \times 10^{-6}$
$ c_3 $	$7,725483103592307 \times 10^{-7}$	$ d_3 $	$7,72552 \times 10^{-7}$
$ c_4 $	$1,1364466491378046 \times 10^{-7}$	$ d_4 $	$1,13708 \times 10^{-7}$
$ c_5 $	$1,616453833890327 \times 10^{-8}$	$ d_5 $	$1,61655 \times 10^{-8}$
$ c_6 $	$2,2072313046619552 \times 10^{-9}$	$ d_6 $	$2,2262 \times 10^{-9}$
$ c_7 $	$2,771208089287789 \times 10^{-10}$	$ d_7 $	$2,97685 \times 10^{-10}$
$ c_8 $	$3,045735548693566 \times 10^{-11}$	$ d_8 $	$3,87311 \times 10^{-11}$
$ c_9 $	$2,9110971511205704 \times 10^{-12}$	$ d_9 $	$4,9118 \times 10^{-12}$
$ c_{10} $	$2,648540812023228 \times 10^{-13}$	$ d_{10} $	$6,08096 \times 10^{-13}$

Cuadro 3.2. Los valores absolutos de los coeficientes de la serie perturbativa vs valores absolutos de los coeficientes de la expansión en serie de Taylor de solución exacta, $\frac{x_0^2}{2t} = 2$, $t = 1/2$.

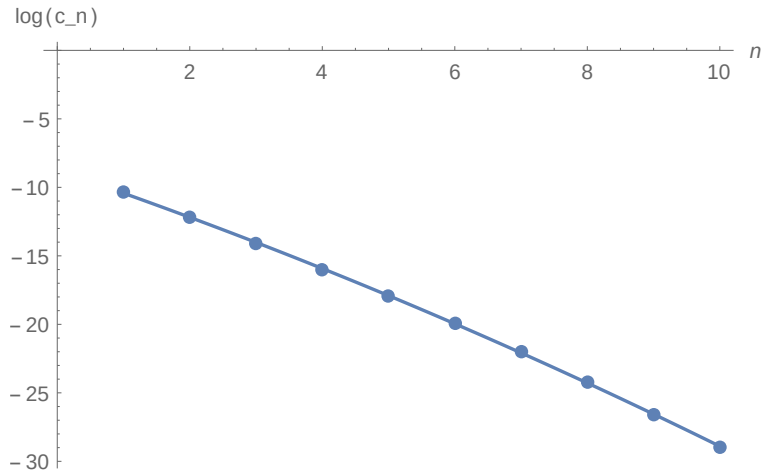


Figura 3.8. Los logaritmos de los coeficientes $|c_n|$ de la serie perturbativa para los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 2$, $t = 1/2$.

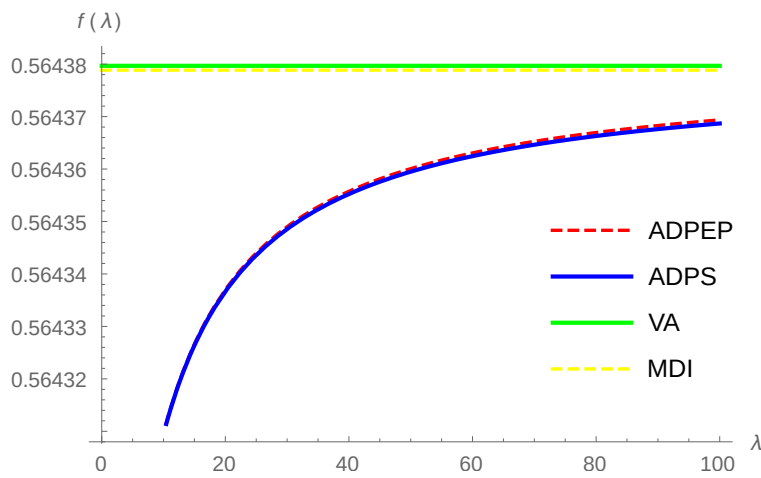


Figura 3.9. El aproximante de Padé de la expansión perturbativa **vs** transformación secuencial de Padé de la serie de Taylor de la solución exacta para $\frac{x_0^2}{2t} = 2$, $t = 1/2$.

3.2. CÁLCULO DEL PROPAGADOR A TRAVÉS DEL MÉTODO DE PADÉ³¹

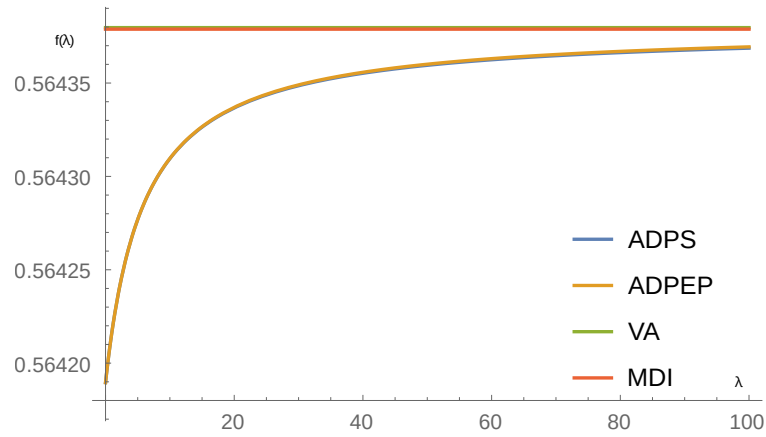


Figura 3.10. El ajuste de los aproximantes de Padé de la expansión perturbativa respecto al aproximante de Padé de la serie de Taylor de la solución analítica, para $\frac{x_0^2}{2t} = 2$, $t = 1/2$.

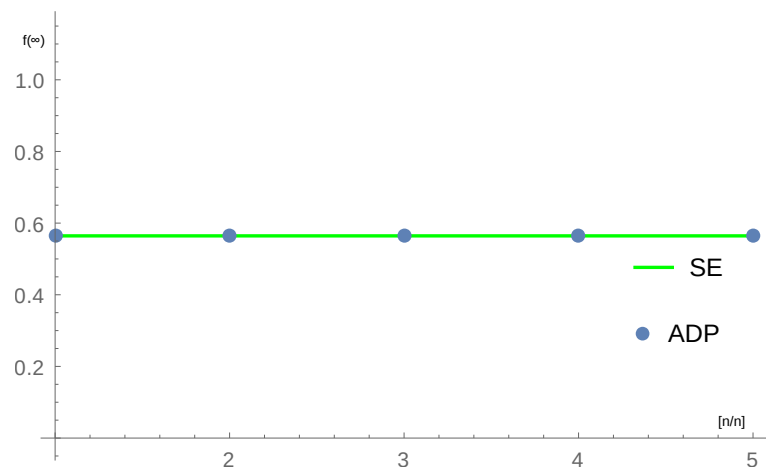


Figura 3.11. En esta gráfica la línea de color verde indica el valor de la solución exacta **SE** y **ADP** representan los aproximantes de Padé diagonales, esencialmente podemos considerar la aproximación como exitosa al tener una coincidencia tan buena.

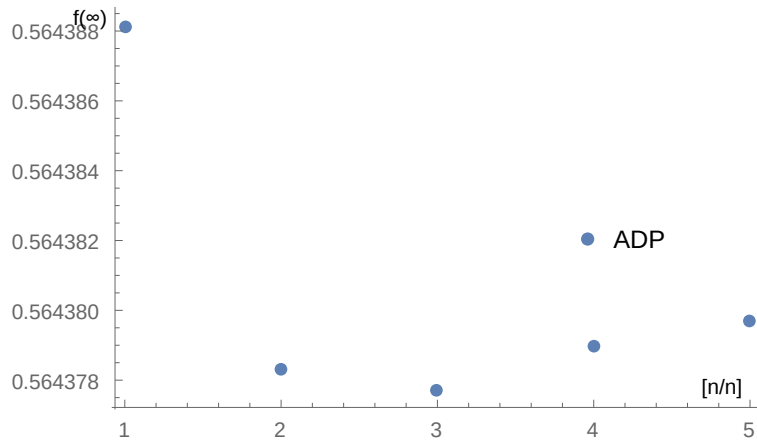


Figura 3.12. En esta gráfica se aprecia con mayor detalle la distribución de los aproximantes de Padé diagonales **ADP** en el límite de Dirichlet. Las desviaciones son siempre menores de 0.01 %, evidenciando la eficacia de la aproximación.

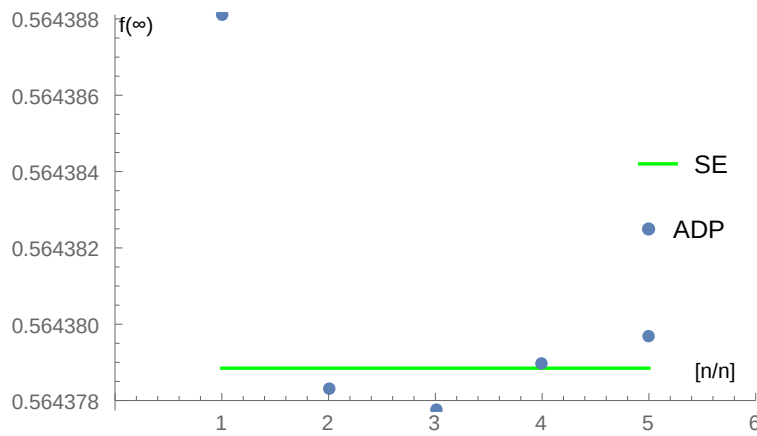


Figura 3.13. Los aproximantes de Padé diagonales de orden $[n/n]$ en límite de Dirichlet vs la solución exacta para $\frac{x_0^2}{2t} = 2$, $t = 1/2$.

3.2. CÁLCULO DEL PROPAGADOR A TRAVÉS DEL MÉTODO DE PADÉ33

coeficientes	valores absolutos	coeficientes	valores absolutos
$ c_0 $	0,690988298942671	$ d_0 $	0,690988298942671
$ c_1 $	$4,816785043386305 \times 10^{-7}$	$ d_1 $	$4,81679 \times 10^{-7}$
$ c_2 $	$5,2800399823087406 \times 10^{-8}$	$ d_2 $	$5,28004 \times 10^{-8}$
$ c_3 $	$5,6086782573477635 \times 10^{-9}$	$ d_3 $	$5,60871 \times 10^{-9}$
$ c_4 $	$5,782861319636943 \times 10^{-10}$	$ d_4 $	$5,7877 \times 10^{-10}$
$ c_5 $	$5,807137765319041 \times 10^{-11}$	$ d_5 $	$5,814 \times 10^{-11}$
$ c_6 $	$5,65920267237318 \times 10^{-12}$	$ d_6 $	$5,69576 \times 10^{-12}$
$ c_7 $	$5,109962609943808 \times 10^{-13}$	$ d_7 $	$5,4499 \times 10^{-13}$
$ c_8 $	$4,321849166350337 \times 10^{-14}$	$ d_8 $	$5,10175 \times 10^{-14}$
$ c_9 $	$3,1558312001555835 \times 10^{-15}$	$ d_9 $	$4,6705 \times 10^{-15}$
$ c_{10} $	$6,66436612398127 \times 10^{-22}$	$ d_{10} $	$4,2174 \times 10^{-16}$

Cuadro 3.3. Los valores absolutos de los coeficientes $|c_k|$ de la serie perturbativa vs valores absolutos de los coeficientes $|d_k|$ de la expansión en serie de Taylor de la solución exacta, $\frac{x_0^2}{2t} = 3$, $t = 1/3$.

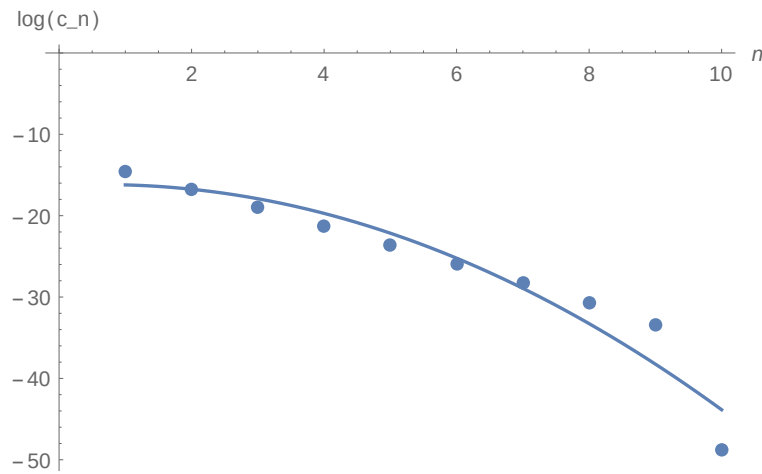


Figura 3.14. Los logaritmos de los coeficientes $|c_n|$ de la serie perturbativa para los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 3$, $t = 1/3$.

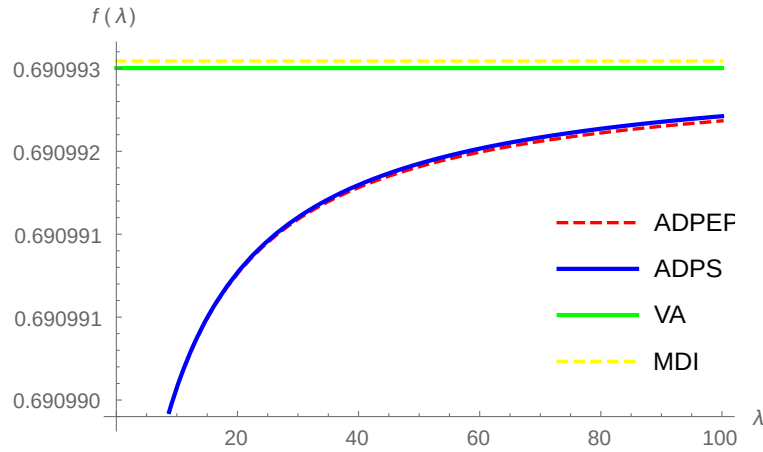


Figura 3.15. Los aproximantes de Padé de orden $[5/5]$ de la expansión perturbativa y el desarrollo en serie de Taylor de la solución exacta para, $\frac{x_0^2}{2t} = 3$, $t = 1/3$.

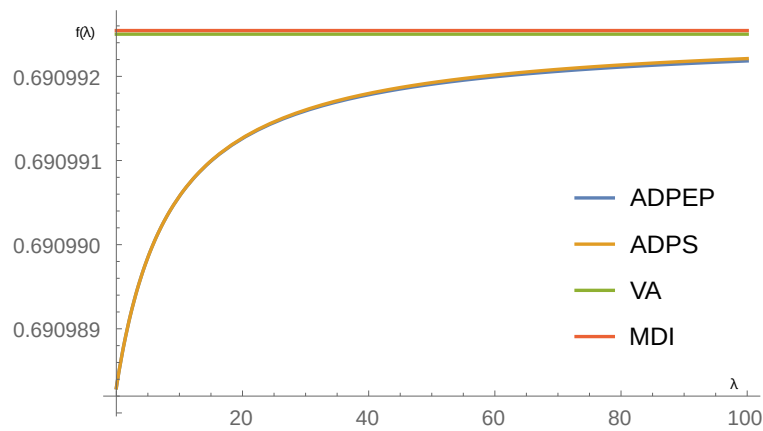


Figura 3.16. El ajuste del aproximante de Padé de orden $[5/5]$ de la expansión perturbativa en comparación con el aproximante de Padé de la solución exacta, es decir, en una rango más amplio para, $\frac{x_0^2}{2t} = 3$, $t = 1/3$.

3.2. CÁLCULO DEL PROPAGADOR A TRAVÉS DEL MÉTODO DE PADÉ³⁵

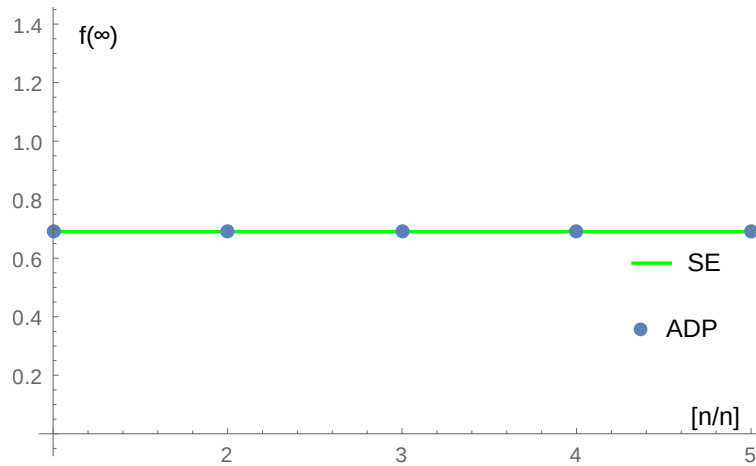


Figura 3.17. Los aproximantes de Padé **ADP** de orden $[n/n]$ en el límite de Dirichlet, **SE** es la solución exacta con $\frac{x_0^2}{2t} = 3$, $t = 1/3$.

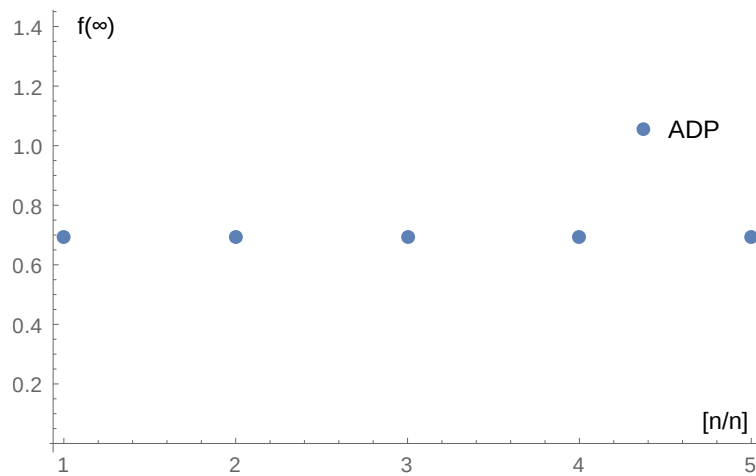


Figura 3.18. En esta gráfica se aprecia con mayor detalle la distribución de los aproximantes de Padé diagonales **ADP** de orden $[n/n]$ para los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 3$, $t = 1/3$.

coeficientes	valores absolutos	coeficientes	valores absolutos
$ c_0 $	0,7978845608028654	$ d_0 $	0,7978845608028654
$ c_1 $	$7,708628950140022 \times 10^{-9}$	$ d_1 $	$7,70863 \times 10^{-9}$
$ c_2 $	$6,442243853128391 \times 10^{-10}$	$ d_2 $	$6,44224 \times 10^{-10}$
$ c_3 $	$5,250739938479641 \times 10^{-11}$	$ d_3 $	$5,25078 \times 10^{-11}$
$ c_4 $	$4,177476756750727 \times 10^{-12}$	$ d_4 $	$4,18056 \times 10^{-12}$
$ c_5 $	$3,2529064353100326 \times 10^{-13}$	$ d_5 $	$3,2563 \times 10^{-13}$
$ c_6 $	$2,476751824310984 \times 10^{-14}$	$ d_6 $	$2,48242 \times 10^{-14}$
$ c_7 $	$1,794539147901319 \times 10^{-15}$	$ d_7 $	$1,86568 \times 10^{-15}$
$ c_8 $	$1,1266148575684488 \times 10^{-16}$	$ d_8 $	$1,32728 \times 10^{-16}$
$ c_9 $	$7,03884288124861 \times 10^{-18}$	$ d_9 $	$1,13761 \times 10^{-17}$
$ c_{10} $	$8,068910992843334 \times 10^{-27}$	$ d_{10} $	$1,11731 \times 10^{-19}$

Cuadro 3.4. Los valores absolutos de los coeficientes de la serie Born vs valores de los coeficientes de la expansión en serie Taylor de la solución analítica, $\frac{x_0^2}{2t} = 4$, $t = 1/4$.

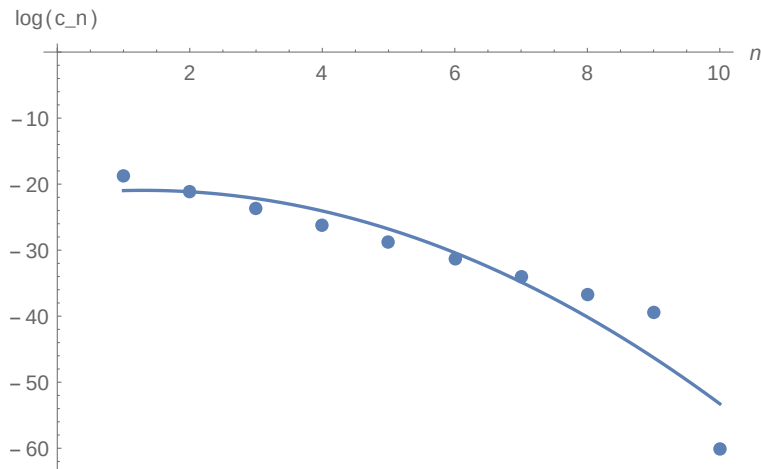


Figura 3.19. Los logaritmos de los coeficientes $|c_k|$ de la serie perturbativa para los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 4$, $t = 1/4$.

3.2. CÁLCULO DEL PROPAGADOR A TRAVÉS DEL MÉTODO DE PADÉ³⁷

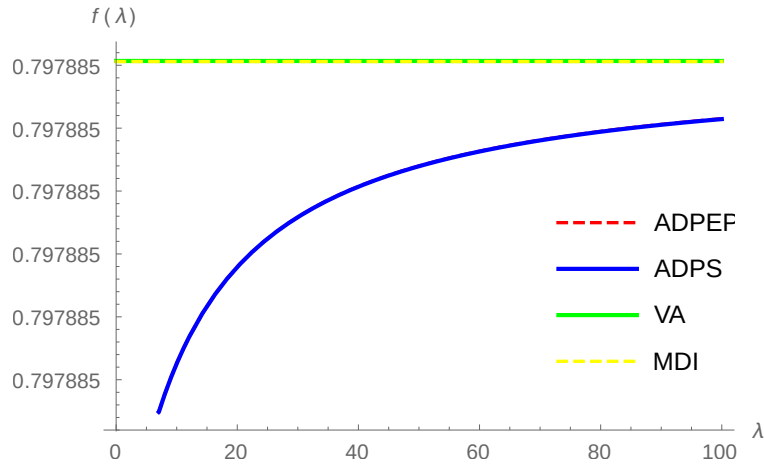


Figura 3.20. El ajuste del aproximante de Padé de la expansión perturbativa y el aproximante de Padé de la solución analítica para $\frac{x_0^2}{2t} = 4$, $t = 1/4$.

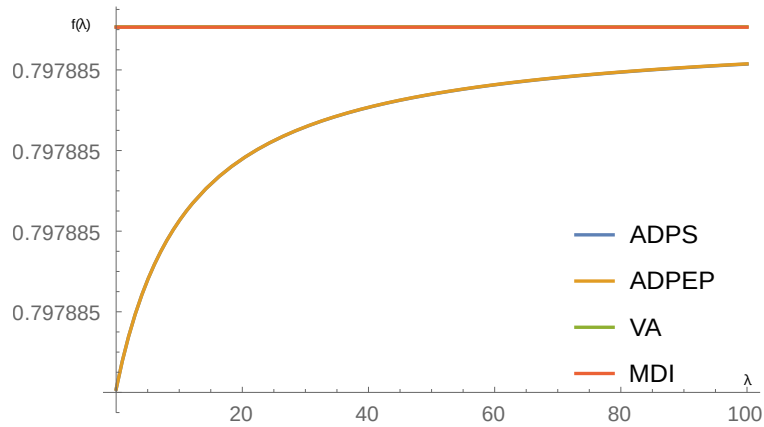


Figura 3.21. En un rango más amplio se puede observar cómo los aproximantes de Padé se ajustan muy bien, aquí tomamos los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 4$, $t = 1/4$.

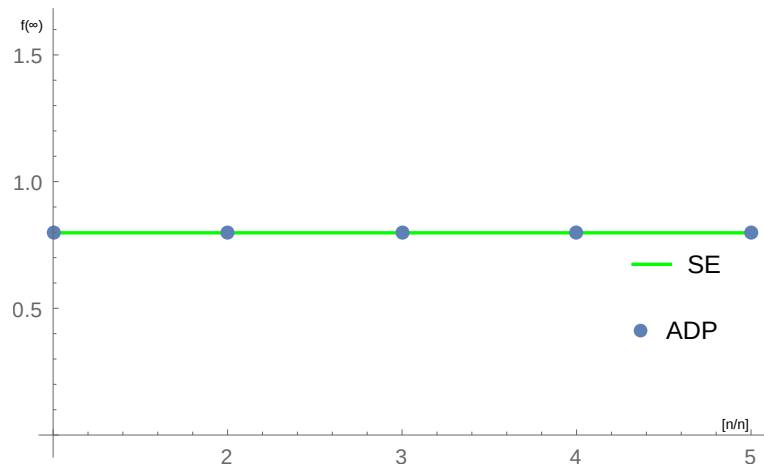


Figura 3.22. Los aproximantes de Padé diagonales **ADP** de orden $[1/1]$ hasta $[5/5]$. En esta gráfica la línea verde indica el valor de la solución exacta para $\frac{x_0^2}{2t} = 4$, $t = 1/4$.

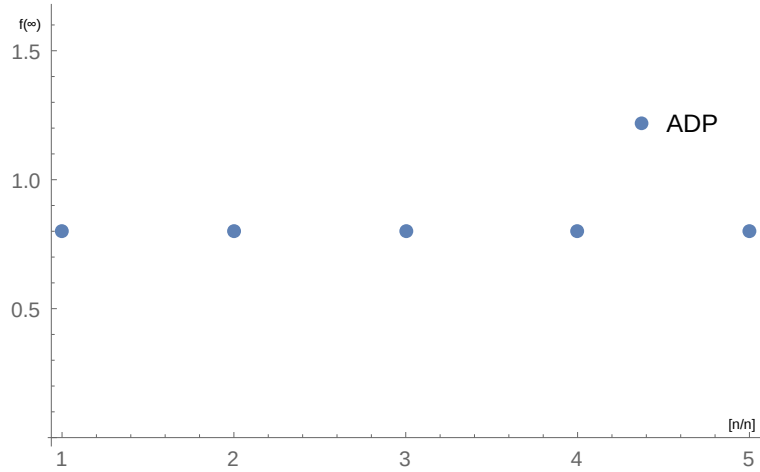


Figura 3.23. Los aproximantes de Padé diagonales $[1/1]$ hasta $[5/5]$ en el límite de Dirichlet para $\frac{x_0^2}{2t} = 4$, $t = 1/4$

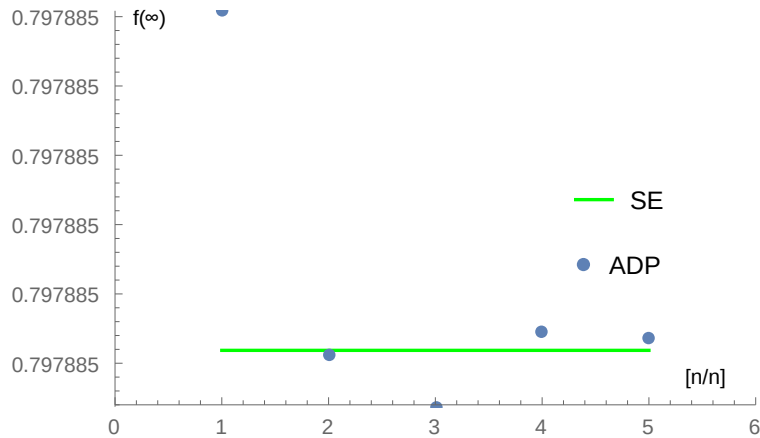


Figura 3.24. Los aproximantes de Padé diagonales $[1/1]$ hasta $[5/5]$ en el límite de Dirichlet **ADP** vs solución exacta **SE** para $\frac{x_0^2}{2t} = 4$, $t = 1/4$.

Previamente, al final de la sección 2.2, hemos mencionado brevemente un refinamiento del método de Padé para calcular el valor límite $f(\infty)$ que fue propuesto por C. Bender en [14] el cual supone una mejora cuando n es suficientemente grande en $[n/n]$, respecto al método directo, en cuanto a la velocidad de convergencia. Sin embargo hemos podido constatar a través de cálculos directos y comparación que este método de Padé-Bender no supone realmente una ventaja significativa respecto al método directo de Padé que ya hemos discutido. Esto significa que para nuestro problema, con los parámetros que hemos investigado, $n = 5$ no resulta suficientemente grande como para que se pueda considerar realmente útil este refinamiento.

3.2. CÁLCULO DEL PROPAGADOR A TRAVÉS DEL MÉTODO DE PADÉ39

$\frac{x_0^2}{2t}$	t	ADP	EDC	MDI (solución exacta.)
1	1	0,406213	0,406371	0,406249
2	1/2	0,56438	0,564384	0,564379
3	1/3	0,6909925425964445	0,6909924722727255	0,6909925445215134
4	1/4	0,7978846506816821	0,7978846506816821	0,7978846505929439

Cuadro 3.5. Se muestra ADP, que es el resultado que se obtiene del aproximante de Padé diagonal directamente, EDC es la extrapolación de C. Bender y MDI es el resultado provisto por el método de imágenes

Orden	$\frac{x_0^2}{2t} = 1, t = 1$	$\frac{x_0^2}{2t} = 2, t = 1/2$
[1/1]	0,406852	0,5643881140489508
[2/2]	0,406183	0,5643782975803707
[3/3]	0,406139	0,564377737784033
[4/4]	0,406185	0,5643789936706667
[5/5]	0,406213	0,5643796746643943
solución exacta	0,406249	0,5643788480680884

Cuadro 3.6. Los aproximantes de Padé diagonales en el límite de Dirichlet **vs** solución exacta.

Orden	$\frac{x_0^2}{2t} = 3, t = 1/3$	$\frac{x_0^2}{2t} = 4, t = 1/4$
[1/1]	0,6909926931173802	0,7978846530424043
[2/2]	0,6909925403759405	0,7978846505564652
[3/3]	0,690992527767729	0,797884650186051
[4/4]	0,6909925425964445	0,797884650724505
[5/5]	0,6909925015224527	0,7978846506816821
solución exacta	0,6909925445215134	0,7978846505929439

Cuadro 3.7. Los aproximantes de Pade diagonal, en el límite de Dirichlet **vs** solución exacta.

En los cuadros (3.6), (3.7) se muestran los correspondientes valores de los aproximantes de Padé en el límite de Dirichlet a orden [1/1], [2/2], [3/3], [4/4], [5/5] y la solución exacta con sus respectivos parámetros $\frac{x_0^2}{2t}, t$. En la gráfica (3.25) se muestra la desviación estandar de los aproximantes de Padé diagonales $[n/n]$ (en el límite de Dirichlet) con sus respecto valores de los parámetros. En cambio el cuadro (3.5) vemos una comparación de la extrapolación de Bender (EDC) contra la aproximación de Padé (ADP), se aprecia en este cuadro que la ADP es en cada caso significativamente mejor, además de requerir menos cálculos para obtenerse.

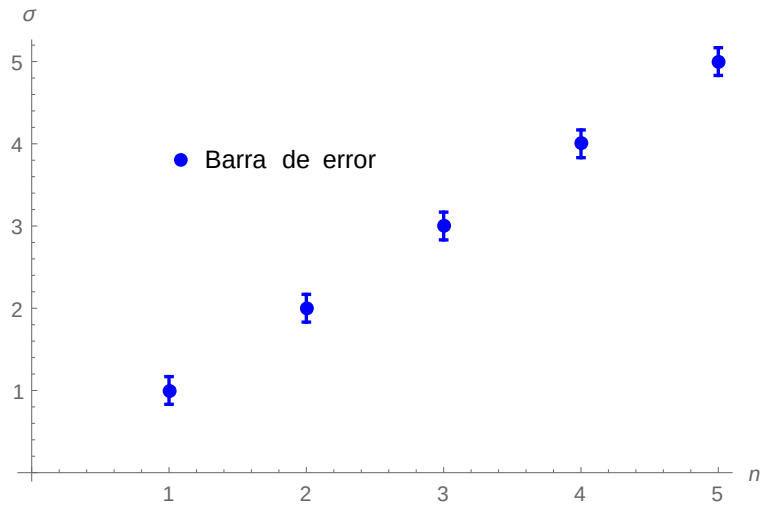


Figura 3.25. La desviación estandar σ de los aproximantes de Padé diagonales $[N/N]$, $N = 1, \dots, 5$ con sus respecto valores de los parámetros $\frac{x_0^2}{2t} = 1, \dots, 4$, $t = 1, 1/2, 1/3, 1/4$.

3.3. Conclusiones y Discusión

En esta tesis se llevó a cabo un estudio analítico-numérico de la aplicabilidad del método de extrapolación por aproximantes de Padé al cálculo de amplitudes de propagación en mecánica cuántica. Por simplicidad hemos tratado el problema en una dimensión solamente, aunque claramente extender este cálculo a tres dimensiones es sencillo. Podemos senalar los siguientes comentarios y observaciones que derivan del presente trabajo:

- Como un caso de estudio muy simple estudiamos la propagación de una partícula sujeta a un potencial estático singular $V(x) = \lambda\delta(x)$ (con $\delta > 0$, un potencial repulsivo). Elegimos este sistema porque además de ser exactamente soluble provee un ejemplo sencillo que se presta a generalizaciones útiles en el contexto de aplicaciones al efecto Casimir, aunque no hemos tratado con estas aplicaciones en esta tesis.
- La idea principal consistió en investigar una manera de calcular el propagador en el límite $\lambda \rightarrow \infty$ en el cual la barrera se vuelve impenetrable (anulando la función de onda en ella, razón por la que nos referimos a este como el límite de Dirichlet) a partir de la serie perturbativa en potencias de λ .
- Dicha serie de potencias posee un radio de convergencia finito $\mathcal{R}$, y es inadecuada para calcular directamente el límite de Dirichlet. La serie de perturbaciones es apropiada para valores que pueden considerarse pequeños de λ .
- La solución exacta en el caso de λ finito o infinito se conoce a través del trabajo previo de Grosche et al. y del método de imágenes, de manera que tenemos la solución exacta para comparar la extrapolación de Padé.
- La comparación fue llevada a cabo para distintos valores de parámetros del propagador y el resultado mostró un acuerdo excelente con las predicciones analíticas. Esto significa que es posible recuperar el resultado no perturbativo para el propagador en este sistema simple a partir de la serie perturbativa. Estudiamos la concordancia en un rango de parámetros amplio, llegando siempre a concluir la utilidad del método de Padé.
- La serie perturbativa, por cierto, coincide con la serie de Taylor del propagador, algo que también verificamos en nuestro análisis numérico.
- A modo de experimentación decidimos también comparar el resultado que obtuvimos mediante el método de los aproximantes diagonales de Padé con un refinamiento de este método propuesto por Carl Bender, sin embargo no observamos una ventaja de hacer esto último, estimamos que la razón es que el método de Bender supone una ventaja para valores más grandes del orden de aproximación n .

- Obviamente la idea detrás de este estudio es proveer las bases para que este tipo de método se aplique en problemas más complejos donde una solución analítica no se conoce de antemano. La teoría de los aproximantes de Padé ha sido extensivamente desarrollada y continúa en desarrollo, aún así sigue siendo un método relativamente poco conocido pero que tienen un gran potencial de aplicabilidad en problemas como el que hemos analizado

Apéndice A

Algunos ejemplos de la aproximación secuencial de Padé

En este apéndice mostramos algunos ejemplos de la transformación secuencial de Padé.

A.1. Ejemplo: 1

Sea $f(\alpha)$ una función en expansión de serie de Taylor

$$f(\alpha) = 1 - (1/2)\alpha + (1/3)\alpha^2 + \dots \quad (\text{A.1})$$

usando la ecuación (2.7) e igualando los coeficientes obtenemos el siguiente sistema lineal

$$\begin{aligned} a_0 &= b_0 = 1 \\ a_1 &= b_1 - 1/2 \\ a_2 &= b_2 - (1/2)b_1 + 1/3 \end{aligned}$$

Desde luego que se considera a $b_0 = 1$, los coeficientes $a_2 = b_2 = 0$ entonces

$$b_1 = \frac{2}{3} \quad (\text{A.2})$$

$$a_1 = \frac{1}{6} \quad (\text{A.3})$$

Por lo tanto el aproximante de orden $[1/1]$ la serie (A.1) se encuentra representado como

$$[1/1]_f(\alpha) = \frac{1 + \frac{1}{6}\alpha}{1 + \frac{2}{3}\alpha} + o(\alpha^3) \quad (\text{A.4})$$

El valor que extrapoláramos a este orden para $f(\infty)$ sería $[1/1]_f(\infty) = \frac{1}{4}$.

A.2. Ejemplo: 2

En este ejemplo calcularemos el aproximante de Padé de la función $f(x) = \cos x$ a orden $[2/2]$, o sea, $[2/2]_f$.

Sea $f(x) = \cos x$ una función en serie de Taylor

$$\cos x = 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4 - \dots \quad (\text{A.5})$$

Dado que el aproximante de Padé de una función, se puede expresar de forma racional,

$$\cos x = 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4 - \dots = \frac{a_0 + a_1x + a_2x^2}{b_0 + b_1x + b_2x^2}, \quad (\text{A.6})$$

multiplicando la ecuación (A.6) por el denominador de la función racional,

$$\left(1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4 - \dots\right)(b_0 + b_1x + b_2x^2) = a_0 + a_1x + a_2x^2, \quad (\text{A.7})$$

realizando el producto de los factores e igualando los coeficientes,

$$\begin{aligned} a_0 &= b_0, \\ a_1 &= b_1, \\ a_2 &= b_2 - (1/2)b_0, \\ -(1/2)b_1 &= 0, \\ (1/24)b_0 - (1/2)b_2 &= 0. \end{aligned}$$

Posteriormente se considera el hecho de que $b_0 = a_0 = 1$, como los coeficientes del polinomio de grado 1 tienen valores de $a_1 = b_1 = 0$ entonces,

$$a_2 = -\frac{5}{12}, \quad (\text{A.8})$$

$$b_2 = \frac{1}{12}, \quad (\text{A.9})$$

por lo tanto el aproximante de Padé de la función $\cos x$ a orden $[2/2]$ es,

$$[2/2]_f(x) = \frac{1 - \frac{5}{12}x}{1 + \frac{1}{12}x}. \quad (\text{A.10})$$

Apéndice B

Algunos resultados clásicos de variable compleja

B.1. Teoremas de variable compleja

En este apéndice hemos resumido algunos resultados clásicos de variable compleja que resultaron útiles durante el cálculo analítico del propagador en el caso de λ finita. Los teoremas, así como sus pruebas y mucha más información al respecto pueden consultarse, por ejemplo en [18] y [19].

Una función analítica es una función $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ que es diferenciable en el sentido complejo en una región abierta de $\mathbb{C}$. Para una función analítica se cumplen varias propiedades especiales.

Teorema B.1 *Sea $f(z)$ una función analítica en una región R (simplemente conexa) y sobre su frontera C entonces*

$$\oint_C f(z)dz = 0 \quad (\text{B.1})$$

Este teorema a menudo suele llamarse teorema de **Cauchy-Goursat**, es válido para regiones simplemente conexas R . La prueba de este teorema no es trivial, pero consiste esencialmente en partir la región R en elementos infinitesimales y mostrar que en cada uno la integral cerrada se anula debido a la analiticidad de f .

Como consecuencia simple de este teorema se tiene el siguiente

Teorema B.2 *Sea $f(z)$ una función analítica en una región limitada por dos curvas simples C y C_1 entonces se tiene que*

$$\oint_C f(z)dz = \oint_{C_1} f(z)dz \quad (\text{B.2})$$

Donde C y C_1 son ambas atravesadas en el sentido positivo del plano complejo (antihorario).

la prueba es estándar y consiste en formar un contorno cerrado formado por C y C_1 (siendo C_1 atravesado en sentido horario) conectados por tramos rectos muy cercanos atravesados en sentidos opuestos.

B.1.1. La fórmula integral de Cauchy

Si $f(z)$ es analítica dentro y sobre el contorno C de una región R simplemente conexa se satisface la fórmula integral de **Cauchy** para cada punto $a \in R$

$$f(a) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z-a} dz \quad (\text{B.3})$$

Dado que $f(z)/(z-a)$ es analítica adentro sobre C excepto en el punto $z = a$, por el teorema anterior **B.2**,

$$\oint_C \frac{f(z)}{z-a} dz = \oint_\Gamma \frac{f(z)}{z-a} dz \quad (\text{B.4})$$

Donde podemos cambiar a cualquier Γ siempre que en la región intermedia entre C y Γ sea f analítica. Sea Γ un círculo de radio ϵ con centro en a entonces la ecuación para Γ es $|z-a| = \epsilon$ o $z = a + \epsilon e^{i\theta}$ entonces $z-a = \epsilon e^{i\theta}$ donde $dz = i\epsilon e^{i\theta} d\theta$

$$\oint_\Gamma \frac{f(z)}{z-a} dz = i \int_0^{2\pi} f(a + \epsilon e^{i\theta}) d\theta \quad (\text{B.5})$$

Tomando el límite cuando ϵ tiende a cero¹

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \oint_\Gamma \frac{f(z)}{z-a} dz = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_0^{2\pi} f(a + \epsilon e^{i\theta}) d\theta = 2\pi i f(a)$$

Por lo tanto

$$\oint_\Gamma \frac{f(z)}{z-a} dz = 2\pi i f(a) \quad (\text{B.6})$$

Si se deriva con respecto a , hasta orden n , usando el hecho (no trivial) de que es posible derivar bajo el signo de integral, se obtiene la fórmula integral de Cauchy:

$$f^n(a) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-a)^{n+1}} dz \quad (\text{B.7})$$

Si $f(z)$ no es analítica en un punto a no podemos usar el teorema de Taylor para expandir f alrededor de este punto, sin embargo el teorema de Laurent nos permite una expansión similar, pero más general:

B.1.2. Teorema de Laurent

Teorema B.3 *Sea f una función analítica en la región anular R limitada por dos círculos de radios R_1, R_2 tales que $R_1 < R_2$, y sea C un contorno simple cerrado alrededor de a , orientado positivamente en el plano complejo y completamente contenido en R . Entonces en todo punto $z \in R$ se cumple que*

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n (z-a)^n$$

¹a grandes rasgos este es un bosquejo de prueba, hay detalles y sutilezas matemáticas que no trataremos pero que pueden consultarse en [18].

donde los coeficientes son

$$c_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\zeta)}{(\zeta - a)^{n+1}} d\zeta$$

La parte $c_0 + c_1(z-a) + c_2(z-a)^2 + \dots$ es la parte analítica de la serie de Laurent, mientras el resto de la serie contiene potencias inversas de $z-a$, y no es analítica en $z=a$, es conocida como la parte principal de la serie de Laurent. Claramente si la parte principal es cero, la serie de Laurent se reduce a la serie de Taylor. Se le conoce a c_{-1} como el residuo de $f(z)$ en $z=a$.

El siguiente teorema es el más importante en cuanto a aplicaciones de la teoría de variable compleja al cálculo de integrales reales, es el famoso teorema del residuo.

B.1.3. El teorema del residuo

Teorema B.4 Sea $f(z)$ una función analítica en una región R salvo en los puntos a_k en los cuales tiene residuos ξ_k respectivamente, se cumple entonces para cualquier curva cerrada simple C que encierre a los puntos a_k , orientada en el sentido positivo del plano complejo, la siguiente identidad:

$$\oint_C f(z) dz = 2\pi i \sum_k \xi_k \quad (\text{B.8})$$

es decir, la integral de $f(z)$ alrededor de C es $2\pi i$ veces la suma de los residuos de f en las singularidades encerradas por C .

Tanto el teorema de Laurent como el teorema del residuo son consecuencias elaboradas del teorema de Cauchy y de la fórmula integral de Cauchy, nuevamente referimos a [18] y [19] para consultar detalles.

Apéndice C

Integrales de la serie perturbativa

C.1. Cálculo de las expresiones integrales

En este apéndice mostramos algunas de las fórmulas para los coeficientes c_k que usamos durante el desarrollo de esta tesis, estas expresiones provienen de la expansión perturbativa del propagador bajo el potencial $V(x) = \lambda\delta(x)$ y del propagador de la partícula libre que está dado por (masa $m = 1$, tiempo imaginario, una dimensión espacial)

$$K(x, x_0; t, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}$$

Los coeficientes se calcularon numéricamente mediante *Mathematica 11.0* evaluando las siguientes integrales para diferentes valores de los parámetros:

$$\begin{aligned} I^1 &:= \int_0^t dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 K_0(x, x_1; t, t_1) \lambda \delta(x_1) K_0(x_1, x_0; t_1, 0) \\ &= \lambda \int_0^t dt_1 K_0(x, 0; t, t_1) K_0(0, x_0; t_1, 0) \\ &= \lambda \int_0^t dt_1 \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_1)}} e^{-\frac{x^2}{2(t-t_1)}} \frac{1}{\sqrt{2\pi t_1}} e^{-\frac{x_0^2}{2t_1}} \\ &= \frac{\lambda}{2\pi} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t-t_1)t_1}} e^{-\frac{x^2}{2(t-t_1)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I^2 &:= \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x, x_2; t, t_2) \\
&\quad \times \lambda \delta(x_2) K_0(x_2, x_1; t_2, t_1) \lambda \delta(x_1) K_0(x_1, x_0; t_1, 0) dx_1 dx_2 \\
&= \lambda^2 \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 K_0(x, 0; t, t_2) K_0(0, 0; t_2, t_1) K_0(0, x_0; t_1, 0) \\
&= \lambda^2 \int_0^t \int_0^t \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_2)}} e^{-\frac{x^2}{2(t-t_2)}} \frac{1}{\sqrt{2\pi t_2 - t_1}} \times e^{-\frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 dt_2 \\
&= \frac{\lambda^2}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^t \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t-t_2)(t_2-t_1)t_1}} e^{-\frac{x^2}{2(t-t_2)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 dt_2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I^3 &:= \lambda^3 \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x, x_3; t, t_3) \delta(x_3) K_0(x_3, x_2; t_3, t_2) \\
&\quad \times \delta(x_2) K_0(x_2, x_1; t_2, t_1) \delta(x_1) K_0(x_1, x_0; t_1, 0) dx_1 dx_2 dx_3 \\
&= \lambda^3 \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 K_0(x, 0; t, t_3) K_0(0, 0; t_3, t_2) K_0(0, 0; t_2, t_1) K_0(0, x_0; t_1, 0) \\
&= \frac{\lambda^3}{4\pi^2} \int_0^t \int_0^t \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t-t_3)(t_3-t_2)(t_2-t_1)t_1}} e^{-\frac{x^2}{2(t-t_3)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 dt_2 dt_3
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I^4 &:= \lambda^4 \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x, x_4; t, t_4) \delta(x_4) K_0(x_4, x_3; t_4, t_3) \\
&\quad \times \delta(x_3) K_0(x_3, x_2; t_3, t_2) \delta(x_2) K_0(x_2, x_1; t_2, t_1) \delta(x_1) K_0(x_1, x_0; t_1, 0) dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 \\
&= \lambda^4 \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 K_0(x, 0; t, t_4) K_0(0, 0; t_4, t_3) \\
&\quad \times K_0(0, 0; t_3, t_2) K_0(0, 0; t_2, t_1) K_0(0, x_0; t_1, 0) \\
&= \frac{\lambda^4}{(2\pi)^{5/2}} \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t-t_4)(t_4-t_3)(t_3-t_2)(t_2-t_1)t_1}} e^{-\frac{x^2}{2(t-t_4)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 dt_2 dt_3 dt_4
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I^5 &:= \lambda^5 \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \\
&\times K_0(x, x_5; t, t_5) \delta(x_5) K_0(x_5, x_4; t_5, t_4) \\
&\times \delta(x_4) K_0(x_4, x_3; t_4, t_3) \delta(x_3) K_0(x_3, x_2; t_3, t_2) \\
&\times \delta(x_2) K_0(x_2, x_1; t_2, t_1) \delta(x_1) K_0(x_1, x_0; t_1, 0) dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 dx_5 \\
&= \lambda^5 \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 K_0(x, 0; t, t_5) K_0(0, 0; t_5, t_4) \\
&\times K_0(0, 0; t_4, t_3) K_0(0, 0; t_3, t_2) K_0(0, 0; t_2, t_1) K_0(0, x_0; t_1, 0) \\
&= \frac{\lambda^5}{(2\pi)^5} \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t-t_5)(t_5-t_4)(t_4-t_3)(t_3-t_2)(t_2-t_1)t_1}} e^{-\frac{x^2}{2(t-t_5)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} \\
&\times dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I^6 &:= \lambda^6 \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x, x_6; t, t_6) \delta(x_6) K_0(x_6, x_5; t_6, t_5) \\
&\times \delta(x_5) K_0(x_5, x_4; t_5, t_4) \delta(x_4) K_0(x_4, x_3; t_4, t_3) \\
&\times \delta(x_3) K_0(x_3, x_2; t_3, t_2) \delta(x_2) K_0(x_2, x_1; t_2, t_1) \delta(x_1) K_0(x_1, x_0; t_1, 0) dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 dx_5 dx_6 \\
&= \lambda^6 \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 K_0(x, 0; t, t_6) K_0(0, 0; t_6, t_5) \\
&\times K_0(0, 0; t_5, t_4) K_0(0, 0; t_4, t_3) K_0(0, 0; t_3, t_2) K_0(0, 0; t_2, t_1) K_0(0, x_0; t_1, 0) \\
&= \frac{\lambda^6}{(2\pi)^{7/2}} \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t-t_6)(t_6-t_5)(t_5-t_4)(t_4-t_3)(t_3-t_2)(t_2-t_1)t_1}} \\
&\times e^{-\frac{x^2}{2(t-t_6)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I^7 &:= \frac{\lambda^6}{(2\pi)^4} \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 dt_7 \\
&\times \frac{1}{\sqrt{(t-t_7)(t_7-t_6)(t_6-t_5)(t_5-t_4)(t_4-t_3)(t_3-t_2)(t_2-t_1)t_1}} \\
&\times e^{-\frac{x^2}{2(t-t_7)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 dt_7
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I^8 &:= \frac{\lambda^8}{(2\pi)^{9/2}} \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 dt_7 dt_8 \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{(t-t_8)(t_8-t_7)(t_7-t_6)(t_6-t_5)(t_5-t_4)(t_4-t_3)(t_3-t_2)(t_2-t_1)t_1}} \\
&\quad \times e^{-\frac{x^2}{2(t-t_8)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 dt_7 dt_8 \\
\\
I^9 &:= \frac{\lambda^9}{(2\pi)^5} \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 dt_7 dt_8 dt_9 \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{(t-t_9)(t_9-t_8)(t_8-t_7)(t_7-t_6)(t_6-t_5)(t_5-t_4)(t_4-t_3)(t_3-t_2)(t_2-t_1)t_1}} \\
&\quad \times e^{-\frac{x^2}{2(t-t_9)} - \frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 dt_7 dt_8 dt_9 \\
\\
I^{10} &:= \frac{\lambda^{10}}{(2\pi)^{11/2}} \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 dt_7 dt_8 dt_9 dt_{10} \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{(t-t_{10})(t_{10}-t_9)(t_9-t_8)(t_8-t_7)(t_7-t_6)(t_6-t_5)(t_5-t_4)(t_4-t_3)(t_3-t_2)(t_2-t_1)t_1}} \\
&\quad \times e^{-\frac{x^2}{2(t-t_{10})} - \frac{x_0^2}{2t_1}} dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 dt_5 dt_6 dt_7 dt_8 dt_9 dt_{10}
\end{aligned}$$

Bibliografía

- [1] Ismail, H. N., Youssef, I. K. & Rageh, T. M. New approaches for Taylor and Padé approximations.
- [2] Baker, G. A., Graves-Morris, P. (1996). Encyclopedia of Mathematics and its Applications. Cambridge Univ, 30(25), 20.
- [3] Edwards, J. P., Gerber, U., Schubert, C., Trejo, M. A., Tsiftsi, T., & Weber, A. (2019). Applications of the worldline Monte Carlo formalism in quantum mechanics. arXiv preprint arXiv:1903.00536.
- [4] Feynman, R. P. & A. R. Hibbs (1965). Quantum Mechanics and Path integrals. McGraw Hill College.
- [5] Lamoreaux, S. K. (1997). Demonstration of the Casimir force in the 0.6 to 6 m range. Physical Review Letters, 78(1), 5.
- [6] Klimchitskaya, G. L. & Mostepanenko, V. M. (2006). Experiment and theory in the Casimir effect. Contemporary Physics, 47(3), 131-144.
- [7] Blugel, S. (2012). A 2 Scattering Theory: Born Series.
- [8] Griffiths, D. J. & Schroeter, D. F. (2018). Introduction to quantum mechanics. Cambridge University Press.
- [9] Cohen-Tannoudji, C., Laloe, F. & Diu, B. (2019). Quantum mechanics.
- [10] Kleinert, H. (2009). Path integrals in quantum mechanics, statistics, polymer physics, and financial markets. World scientific.
- [11] Baker Jr, G. A. (2012). Padé approximant. Scholarpedia, 7(6), 9756.
- [12] Boz, A. & Gülsever, F. (2016). Numerical Solution of the Diffusion Equation with Restrictive Pade Approximation. Journal of Applied Mathematics and Physics, 4(11), 2031.
- [13] Brezinski, C., Redivo-Zaglia, M. (2014). New representations of Padé and Padé-type approximants. arXiv preprint arXiv:1404.6917.
- [14] Bender, C. M., Boettcher, S. (1994). Determination of $f(\infty)$ from the asymptotic series for $f(x)$ about $x = 0$. Journal of Mathematical Physics, 35(4), 1914-1921.

- [15] Bach, F. (2020). On the Effectiveness of Richardson Extrapolation in Machine Learning. arXiv preprint arXiv:2002.02835.
- [16] Grosche, C. (1990). Path integrals for potential problems with δ -function perturbation. Journal of Physics A: Mathematical and General, 23(22), 5205.
- [17] Grosche, C. (1993). Path integration via summation of perturbation expansions and applications to totally reflecting boundaries, and potential steps. Physical review letters, 71(1), 1.
- [18] R. V. Churchill, J. W. Brown (1992). Variable compleja y aplicaciones. McGrawHill/Interamericana S.A.
- [19] Spiegel, M. R. (1971). Teoría y problemas de variable compleja (No. 515.9 SPI).