

## CÁLCULO DE INTEGRALES MULTIDIMENSIONALES UTILIZANDO LA TRANSFORMADA RÁPIDA DE PADÉ: APLICACIONES A FÍSICA DE RADIACIONES Y COLISIONES ATÓMICAS

Marcelo F. Ciappina\*, Walter R. Cravero\*

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

**Key Words:** Aproximantes de Padé, Transformadas de Fourier, Colisiones Atómicas.

**Abstract.** *En el cálculo numérico de integrales multidimensionales se emplean generalmente dos grandes métodos de solución. Por un lado, aquellos que utilizan cuadraturas de diversos tipos y configuran lo que se conoce como métodos deterministas. Por otro lado, cuando la dimensión aumenta, estos métodos han mostrado ser ineficientes si se los compara con los métodos aleatorios, siendo los basados en técnicas de Monte Carlo (MC) los más usados. En integrales con argumentos oscilatorios, los métodos que utilizan la Transformada de Fourier (TF) y sus versiones discretas DFT (Discrete Fourier Transform) y FFT (Fast Fourier Transform) han mostrado ser los más adecuados. En numerosas áreas de la Física (Física de radiaciones y de transporte y colisiones atómicas, entre otras) la magnitud de interés es la sección eficaz, calculada a partir de matrices de transición, expresadas usualmente como integrales en el espacio de coordenadas. Estas integrales suelen contener funciones hipergeométricas y exponenciales complejas, lo que les confieren un carácter altamente oscilatorio. Mostraremos cómo calcular dichas integrales mediante una técnica que combina las ventajas de convergencia de los Aproximantes de Padé (PA) con la rapidez de las diferentes implementaciones de las TF's, conformando lo que se conoce como Transformada Rápida de Padé (FPT). Si bien las integrales que resolveremos tienen solución analítica, servirán como benchmark para incorporar integrandos más complejos que carecen de solución cerrada. Presentaremos un análisis de convergencia y precisión para los diferentes métodos utilizados para atacar este tipo de problemas.*

## 1 INTRODUCCIÓN

En la resolución numérica de integrales multidimensionales existen numerosos métodos que pueden dividirse en dos grandes grupos: los métodos deterministas, entre los cuales podemos mencionar aquellos basados en cuadraturas (gaussianas, trapezoidales, etc.) y los aleatorios, entre los que se encuentran los métodos de Monte Carlo (MC), cada uno de ellos aplicables a problemas particulares. Cada una de éstas dos estrategias presenta ventajas y también algunos problemas. Dependiendo de la naturaleza del integrando y de las dimensiones involucradas dependerá principalmente la decisión sobre la elección del integrador a utilizar.

Para integrandos altamente oscilatorios, la Transformada de Fourier (FT), implementada numéricamente a través de distintos algoritmos, FFT (Fast Fourier Transform), DFT (Discrete Fourier Transform), etc.,<sup>1</sup> resulta ser la base de métodos de resolución extremadamente precisos y eficientes. La idea fundamental de éstos esquemas, conocidos como 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 simple: 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 original se obtiene evaluando la Transformada Inversa de Fourier. Los problemas a los que pueden aplicarse son usualmente aquellos 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 (PA). Este método se ha ensayado 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>2</sup>

En la teoría de colisiones atómicas es de interés calcular secciones eficaces, que se contrastan directamente con los datos experimentales y por lo tanto permiten un mejor entendimiento de la física del problema. Esta magnitud se obtiene a partir de la matriz de transición, que en general es una integral de varias dimensiones en el espacio de coordenadas, dependiendo del grado de detalle con que se ataque el problema. Otro ámbito donde aparecen integrales de este tipo es en Física de Radiaciones, donde se modela la interacción del campo electromagnético con átomos y moléculas. Utilizaremos a lo largo de este trabajo unidades atómicas, i.e.  $\hbar = m_e = Z_e = 1$ .

## 2 MARCO TEÓRICO

### 2.1 Integrales útiles para colisiones atómicas

Aunque los resultados que se presentan aquí son de utilidad general, nuestro principal interés lo constituyen las integrales que habitualmente se emplean en cálculos de colisiones atómicas.<sup>3,4</sup>

Es bien conocido que la solución para un sistema de dos partículas cargadas se puede resolver

en el marco de la mecánica cuántica en forma cerrada.<sup>5</sup> Un *estado* con energía positiva, es decir del *continuo*, puede describirse por una función de onda que, en consecuencia, puede obtenerse analíticamente, y que se escribe en términos de la función hipergeométrica confluyente o función de Kummer:<sup>6</sup>

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}_T) = N \left( \frac{Z_T}{k} \right) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_T) {}_1F_1 \left( -i \frac{Z_T}{k}, 1, i(kr_T - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_T) \right) \quad (1)$$

ó

$$\psi_{\mathbf{k}}^-(\mathbf{r}_T) = N^* \left( \frac{Z_T}{k} \right) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_T) {}_1F_1 \left( i \frac{Z_T}{k}, 1, -i(kr_T + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_T) \right) \quad (2)$$

donde

$$N \left( \frac{Z_T}{k} \right) = \exp \left( \frac{\pi Z_T}{2k} \right) \Gamma \left( 1 - i \frac{Z_T}{k} \right)$$

es el factor de Coulomb proveniente de la normalización de la función de onda y el supraíndice  $\pm$  designa la condición asintótica de onda saliente (+) o entrante (-). El cómputo de amplitudes de transición para colisiones atómicas involucra el cálculo de integrales que contienen una o varias funciones de onda de este tipo. Procesos de tres y cuatro cuerpos contienen integrales de un grado de dificultad mucho mayor aún.

Las integrales más sencillas de este tipo (llamadas integrales de Nordsieck<sup>7</sup>) aparecen en el cálculo de la primera aproximación de Born (FBA) para procesos de colisiones y en física de Radiaciones. La integral básica puede escribirse,

$$J^{FBA} = \int \frac{d\mathbf{r}}{r} e^{-zr+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} {}_1F_1 (ia_1, 1, i(p_1r + \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r})) \quad (3)$$

donde la exponencial decreciente aparece como consecuencia de la presencia de un estado ligado,  $1/r$  corresponde al potencial coulombiano, y la función hipergeométrica confluyente tiene en cuenta el estado final del *continuo* para una transición  $1s \rightarrow \mathbf{p}$  del electrón. La exponencial oscilatoria surge de las ondas planas que representan el proyectil en su estado inicial y final.

Esta integral puede resolverse analíticamente utilizando una representación integral para la función hipergeométrica confluyente.<sup>4</sup>

Una extensión usual de la integral precedente suele aparecer en otros cálculos de ionización por impacto de iones pesados:

$$J_1 = \int \frac{d\mathbf{r}}{r} e^{-zr+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2 \quad (4)$$

donde  $\mathfrak{F}_j = {}_1F_1 (ia_j, 1, i(p_jr + \mathbf{p}_j \cdot \mathbf{r}))$ . Bess<sup>8</sup> y Nordsieck<sup>7</sup> resolvieron analíticamente esta integral utilizando dos métodos diferentes. El método de Nordsieck, basado en la representación integral de la  ${}_1F_1 (a, 1, z)$  tuvo gran repercusión y por ese motivo las integrales del tipo  $J_1$  se designan con el nombre de integrales de Nordsieck.

## 2.2 Transformadas de Fourier y el 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 (3) y (4). 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  $f(x)$

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

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  $f(x)$

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

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

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L}; \quad \Delta x = \frac{L}{2N}. \quad (7)$$

La longitud de los datos muestreados 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>1</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 (7). Las integrales (5) y (6) evidentemente se calculan numéricamente en un rango finito, por lo que podemos escribir

$$\mathcal{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) e^{ikx} dx \quad (8)$$

y de la misma forma para (6). 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 (8) con puntos seleccionados en la grilla de Fourier para las variables  $k$  y  $x$ ,

$$\mathcal{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2^{r+2}} \sum_{m=-2^r}^{2^r-1} f_m e^{ikm\Delta x} \quad (9)$$

y

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-2^r}^{2^r-1} \mathcal{F}_n e^{-inx\Delta k} \quad (10)$$

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 para 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>2</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>9</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 (9) 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

$$\epsilon_\nu^{(\mu)} = \epsilon_{\nu-1}^{(\mu+1)} + \frac{1}{\epsilon_\nu^{(\mu+1)} - \epsilon_\nu^{(\mu)}}; \quad \mu, \nu \geq 0 \quad (11)$$

donde para comenzar la recursión es necesario definir

$$\epsilon_{-1}^{(\mu)} = 0; \quad \epsilon_0^{(\mu)} = f_\mu(x); \quad (\mu = 0, 1, 2, 3, \dots, r) \quad (12)$$

Este algoritmo permanece inalterado si las funciones  $f_\mu(x)$  son funciones en  $nD$  dimensiones, excepto que la suma parcial para inicializar en (12) debe reemplazarse por una función  $f_\mu(\mathbf{x})$ . La recursión (11) 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.

### 3 RESOLUCIÓN DE INTEGRALES MULTIDIMENSIONALES USANDO FPT

Los denominados métodos deterministas se vuelven poco prácticos y muy lentos cuando la dimensionalidad del recinto de integración aumenta, sobre todo para integrandos oscilatorios. En estos casos el método de la FPT presenta una alternativa a los métodos aleatorios, e.g. Monte Carlo, que se usan sobre todo en Mecánica Estadística para resolver integrales en varias dimensiones. Para calcular las integrales de Nordsieck utilizaremos la FPT como *acelerador* de la Transformada de Fourier implementada a través de la FFT. Sin embargo debe notarse que la FPT puede usarse aplicando otros métodos deterministas como cuadraturas gaussianas, trapezoidales, método de Simpson, etc.

Para demostrar la precisión de este método, resolveremos numéricamente algunas integrales de Nordsieck que tienen solución analítica cerrada, las que utilizaremos de benchmark. Las integrales elegidas son:

$$J_1 = \int \frac{d\mathbf{r}}{r} e^{-zr+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2 \quad (13)$$

y

$$J_7 = \int d\mathbf{r} e^{-zr+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathfrak{F}_1 \mathfrak{E}_2 \quad (14)$$

siendo

$$\mathfrak{E}_j = \exp[-ia_j \ln(p_j r + \mathbf{p}_j \cdot \mathbf{r})]$$

la *fase eikonal*, que surge de considerar el límite *asintótico* de la función hipergeométrica confluente  ${}_1F_1(a, 1, z)$ .<sup>6</sup>

La soluciones analíticas de  $J_1$  y  $J_7$  pueden escribirse<sup>3</sup>

$$J_1 = \frac{4\pi}{D} A_1^{-ia_1} A_2^{-ia_2} F(x_0) \quad (15)$$

y

$$J_7 = \frac{4\pi}{D^2} \gamma(a_2) A_1^{-ia_1} U_2^{-ia_2} \left( J_{71} F(x_2) + \frac{ia_1 ia_2}{A_1 U_2} J_{72} F^+(x_2) \right) \quad (16)$$

con

$$J_{71} = 2z - \frac{ia_1 B_1}{A_1} - \frac{ia_2 B_2}{U_2} \quad (17)$$

$$J_{72} = \frac{(U_2 - U_3) B_1}{A_1} - \frac{U_3 B_2}{U_2} + B_3 \quad (18)$$

y

$$\begin{aligned} F(x) &= {}_2F_1(ia_1, ia_2, 1, x) \\ F^+(x) &= {}_2F_1(1 + ia_1, 1 + ia_2, 2, x) \\ D &= z^2 + q^2 \\ A_j &= (1 + U_j) \\ U_j &= \frac{2S_j}{D} \\ S_j &= \mathbf{p}_j \cdot \mathbf{q} - izp_j, j = 1, 2 \\ S_3 &= p_1 p_2 - \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 \\ x_0 &= 1 - \frac{(A_1 + A_2 - A_3)}{A_1 A_2} \\ x_2 &= 1 - \frac{(U_2 - U_3)}{U_1 U_2} \\ \gamma(a) &= \exp\left(\frac{\pi a}{2}\right) \Gamma(1 - ia) \\ B_j &= 2(ip_j + zU_j), j = 1, 2 \\ B_3 &= 2zU_3 \end{aligned}$$

respectivamente.

A continuación comparamos estas soluciones analíticas con las obtenidas utilizando la FFT, Monte Carlo y la FPT.

#### 4 RESULTADOS

Hemos calculado las integrales (13) y (14) para valores típicos de los parámetros. Así definimos  $a_1 = \alpha_T = Z_T/k_T$  con  $Z_T = 1.6875$  (carga efectiva para un átomo de He ionizado) y  $\mathbf{k}_T = \mathbf{p}_1 = (1, 0, 1)$  (que corresponde a una energía del electrón en el estado final de 40 eV) para el estado *final* de la colisión y  $a_2 = \alpha_i = Z_P/v_i$  con  $Z_P = 1$  (protones) y  $\mathbf{v}_i = \mathbf{p}_2 = (0, 0, 1)$  (correspondiente a una energía de impacto de 25 keV) para el estado *inicial*. Además utilizamos un valor de  $z = 1.6875$  para modelar un átomo de Helio en su estado fundamental. Para visualizar el comportamiento de los esquemas numéricos calculamos las integrales con diferentes valores de  $q$ . Este parámetro es importante dado que en ciertos casos es necesario realizar una integración adicional sobre él y resulta conveniente tener una idea acerca de la precisión de las aproximaciones.

Para el método de Monte Carlo (MC) hemos utilizado  $10^5$  puntos de muestreo para las tres dimensiones, mientras que para las FFT usamos  $2^{15} = 32768$  puntos. Implementamos el algoritmo  $\epsilon_2^{(4)}$  de la sección 2.2 para calcular las FPT y tener un esquema comparable a las otras dos aproximaciones (FFT y MC). Todas las rutinas fueron programadas utilizando un kernel de Mathematica<sup>10</sup> sobre Linux aprovechando las ventajas de nuestro cluster de cálculo y las características del problema que hacen trivial una paralelización *gruesa*: basta con ejecutar varios kernels en simultáneo (hasta 10) para estudiar el comportamiento de las aproximaciones para distintos valores del parámetro  $q$ . El balance de carga de los nodos en nuestro cluster se realiza automáticamente a través de un software instalado a tal efecto (MOSIX).

Valor exacto	Re( $J_1$ )		Im( $J_1$ )	
	0.4134254898	0.4134254898	-0.0934777416	-0.0934777416
$n$	FFT	FPT	FFT	FPT
0	$1.973767 \times 10^{-8}$	$1.973767 \times 10^{-8}$	$6.827199 \times 10^{-18}$	$6.827199 \times 10^{-18}$
2	0.0044100294	-0.0057576255	0.1104416986	0.0529778592
4	-0.0457598365	0.3383446587	-0.0002185115	0.0030103940
6	0.1516215213	0.4307477104	-0.0904060922	-0.0936660380

Tabla 1: Comparación entre la FFT y la FPT de las partes real e imaginaria de  $J_1$  con  $q_x = 0$  para diferentes valores de  $n$  que corresponden a una cantidad de puntos de muestreo  $N = 2^{3n}$ .

En la Tabla 1 realizamos un estudio de convergencia para los esquemas FPT y FFT donde puede observarse que la FPT tiende a la solución exacta en forma monótona, mientras la convergencia de la FFT muestra oscilaciones.

En las Figuras 1 y 2 se muestra una comparación entre los valores analíticos exactos de las partes real e imaginaria de la integral  $J_1$  y los diferentes esquemas de cálculo numérico, junto con sus errores porcentuales. Puede verse para este caso que los errores correspondientes a la

FPT muestran valores por debajo del 10% lo que configura un excelente grado de aproximación dado el número de puntos utilizado para el cómputo.

Por otra parte en las Figuras 3 y 4 se contrastan los valores analíticos exactos de las partes real e imaginaria de la integral  $J_7$  con las diferentes aproximaciones numéricas, en conjunto con los errores porcentuales. En este caso los errores correspondientes a la FPT muestran valores por debajo del 5% mostrando una mejora con respecto a los obtenidos para el cálculo de la  $J_1$ .

En lo que respecta a los tiempos de cálculo, puede decirse que en general los resultados obtenidos utilizando la FPT son computacionalmente más costosos que los obtenidos por FFT ya que el algoritmo  $\epsilon$ , calculado a partir de (11), necesita como *entrada* una serie cuyos elementos son valores calculados por FFT. Sin embargo, el mérito de la FPT, como sucede a menudo con los aproximantes de Padé, reside en alcanzar precisiones que resultan imposibles de lograr con la FFT, aún refinando arbitrariamente la grilla de cálculo.

## 5 CONCLUSIONES

Hemos evaluado la Transformada Rápida de Padé (FPT) para la resolución de integrales multidimensionales de interés en Física Atómica y Física de Radiaciones. Utilizamos integrales cuya solución analítica exacta es conocida a fin de estimar la precisión y velocidad del método. Los métodos basados en la FPT proporcionan una mayor precisión cuando se los compara con los métodos basados en la Transformada de Fourier (FFT). Además con un menor número de puntos obtuvimos una precisión comparable a los métodos de Monte Carlo. A diferencia de los otros esquemas la FPT mostró un error casi constante al variar el parámetro  $q_x$ . Aprovechando la naturaleza general de los algoritmos de aceleración basados en los PA, exploraremos 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 CONICET y por los PGI 24/F027 y 24/F032 de la Universidad Nacional del Sur.

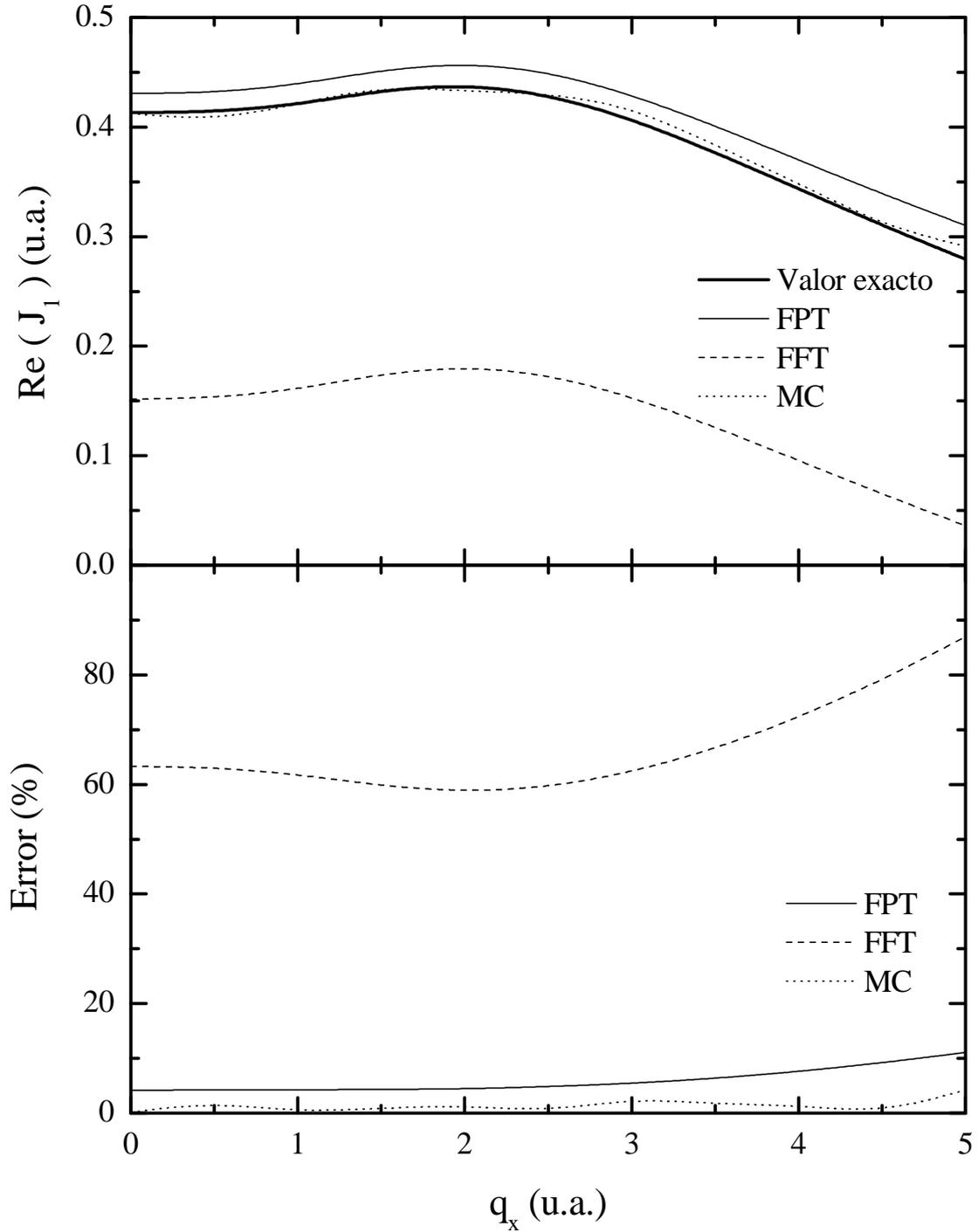


Figura 1: Parte real de  $J_1$  para diferentes valores de  $q_x$  y los errores porcentuales para cada esquema de cálculo.

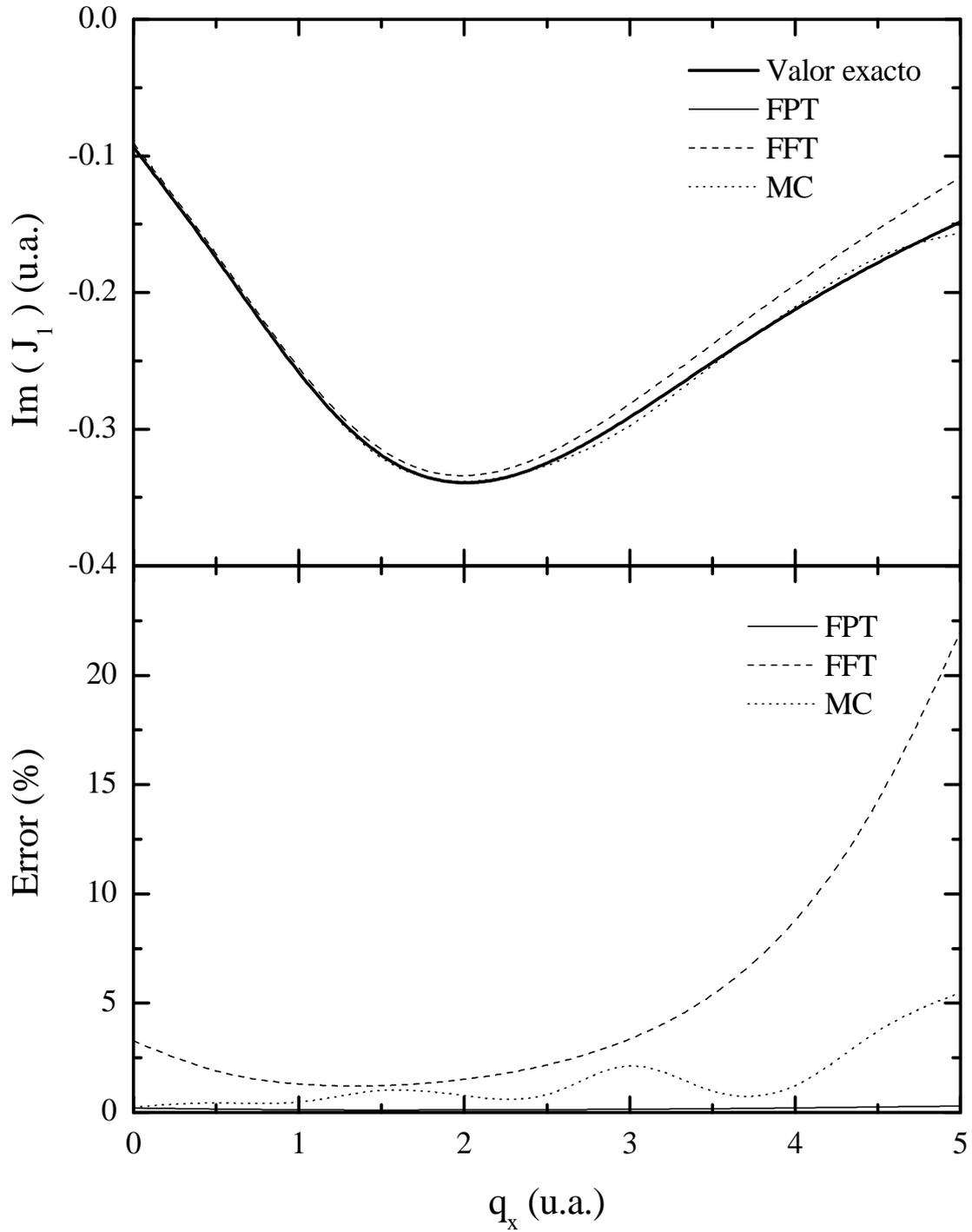


Figura 2: Parte imaginaria de  $J_1$  para diferentes valores de  $q_x$  y los errores porcentuales para cada esquema de cálculo.

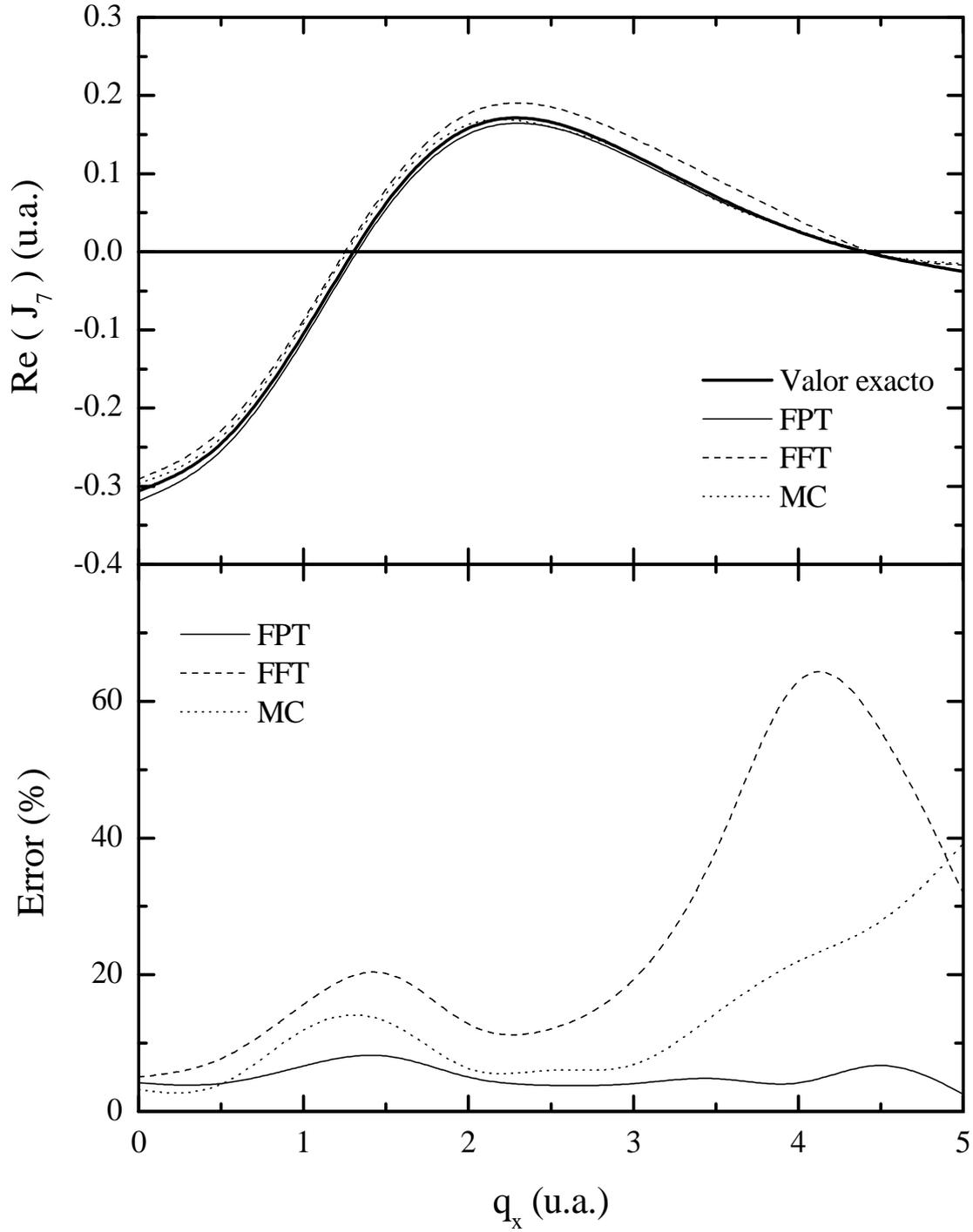


Figura 3: Idem Figura 1 para la integral  $J_7$ .

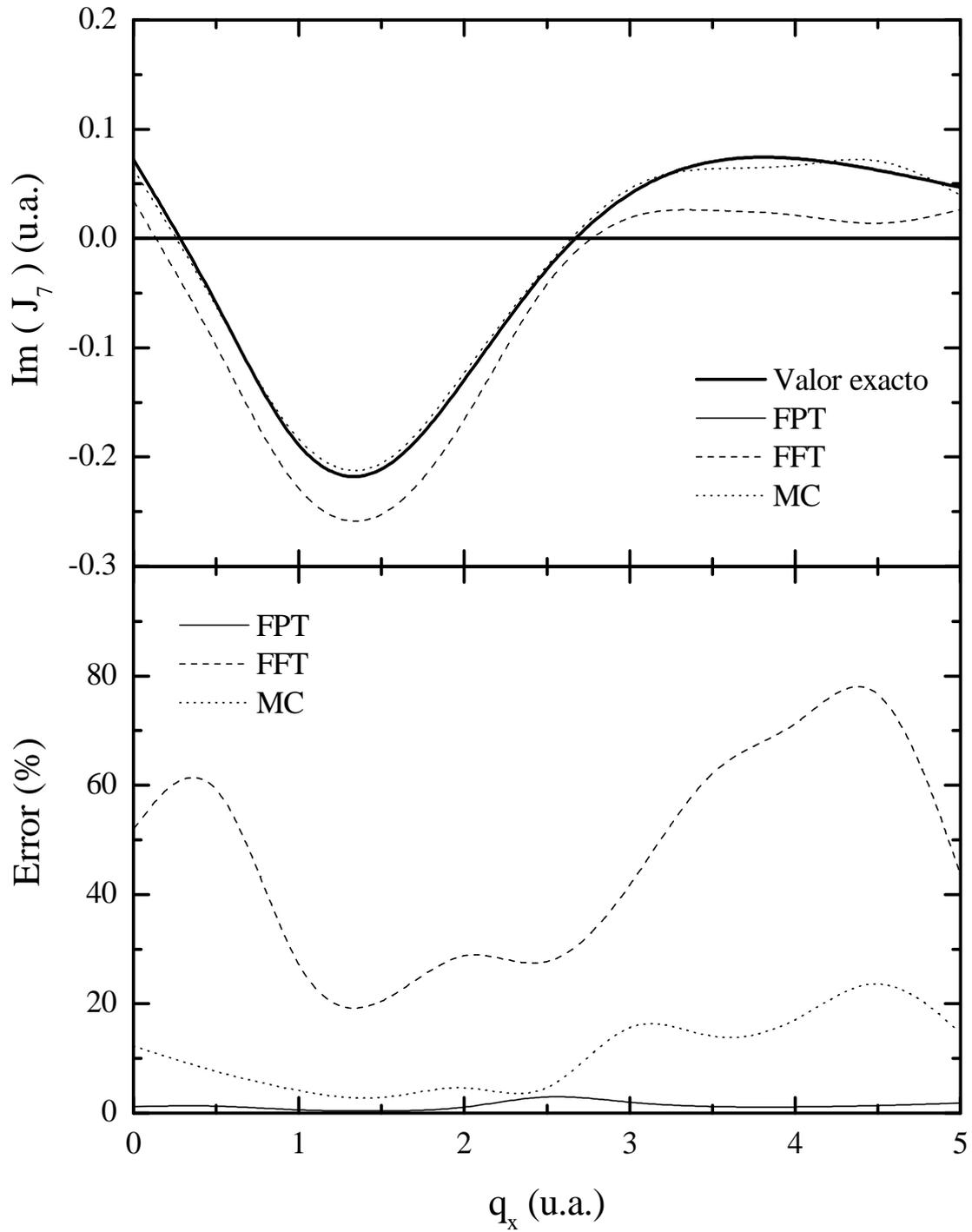


Figura 4: Idem Figura 2 para la integral  $J_7$ .

## REFERENCES

- [1] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical Recipes in FORTRAN*. Cambridge University Press, (1992).
- [2] Dž. Belkić. Leading distorted wave theories and computational methods. *Journal of Computational Methods in Science and Engineering*, **1**, 1–74 (2001).
- [3] M.S. Gravielle and J.E. Miraglia. Some Nordström integrals of interest in radiation and atomic collision theories. *Computer Physics Communications*, **69**, 53–58 (1992).
- [4] F.D. Colavecchia, Gasaneo G., and C.R. Garibotti. Hypergeometric integrals arising in atomic collisions physics. *J. Math. Phys.*, **38**, 6603–6612 (1997).
- [5] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum Mechanics*, volume I. John Wiley and Sons, (1977).
- [6] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, (1972).
- [7] A. Nordström. Reduction of an integral in the theory of bremsstrahlung. *Phys. Rev.*, **93**, 785–787 (1954).
- [8] L. Bess. Bremsstrahlung for heavy elements at extreme relativistic energies. *Phys. Rev.*, **77**, 550–556 (1949).
- [9] G.A. Baker Jr. and P. Graves-Morris. *Padé Approximants. Part I: Basic Theory*. Addison Wesley Publishing Company, (1981).
- [10] Wolfram Research. *MATHEMATICA 5.0*. (2003).