Demostración algoritmo de Numerov.

30 de enero de 2024 18:00

Usando una expansión en series de Taylor, se pueden encontrar expresiones para ψ_{k+1} y ψ_{k-1}.

$$\psi_{k+1} = \psi_k + \psi'_k h + \frac{\psi''_k h^2}{2!} + \frac{\psi'''_k h^3}{3!} + \frac{\psi^{(4)}_k h^4}{4!} + \frac{\psi^{(5)}_k h^5}{5!} + O(h^6)$$

$$\psi_{k-1} = \psi_k - \psi'_k h + \frac{\psi'' h^2}{2!} - \frac{\psi_k h^3}{3!} + \frac{\psi^{(4)} h^4}{4!} - \frac{\psi^{(5)} h^5}{5!} + O(h^6)$$

Sumando ambas expresiones:

$$\psi_{k+1} + \psi_{k-1} = 2\psi_k + h^2\psi''_k + \frac{1}{12}h^4\psi^{(4)}_k + O(h^6)$$

$$\Rightarrow \psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1} = h^2\psi''_k + \frac{1}{12}h^4\psi^{(4)}{}_k + O(h^6) \quad (1)$$

Además, se tiene que:

$$\psi^{(4)} = \frac{\psi''_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1}}{h^2}$$, por lo que se puede reemplazar en (1)

consiguiendo la expresión:

$$\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1} = h^2\psi''_k + \frac{1}{12}h^4\left[\frac{\psi''_{k+1} - 2\psi''_k + \psi''_{k-1}}{h^2}\right] + O(h^6)$$

$$\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1} = h^2\psi''_k + \frac{1}{12}h^{\cancel{4}}\left[\frac{\psi''_{k+1} - 2\psi''_k + \psi''_{k-1}}{\cancel{h^2}}\right] + O(h^6)$$

$$\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1} = h^2\psi''_k + \frac{1}{12}h^2\left(\psi''_{k+1} - 2\psi_k + \psi''_{k-1}\right) + O(h^6). \quad (2)$$

Retomando la forma de la ecuación diferencial que se pretende solucionar:

$\psi''(x) = R(x)\psi(x) + S(x)$, se pueden reemplazar los ψ''_k en (2) por la expresión, obteniendo:

$$\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1} = h^2(R_k\psi_k + S_k) + \frac{1}{12}h^2\left(R_{k+1}\psi_{k+1} + S_{k+1} - 2(R_k\psi_k + S_k) + R_{k-1}\psi_{k-1} + S_{k-1}\right) + O(h^6)$$

Por lo que, agrupando términos:

$$\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1} = h^2R_k\psi_k + h^2S_k + \frac{1}{12}h^2R_{k+1}\psi_{k+1} + \frac{1}{12}h^2S_{k+1} - \frac{1}{6}h^2R_k\psi_k - \frac{1}{6}S_kh^2 + \frac{1}{12}h^2R_{k-1}\psi_{k-1} + \frac{1}{12}h^2S_{k-1} + O(h^6).$$

$$\left(1 - \frac{1}{12}h^2R_{k+1}\right)\psi_{k+1} + \left(1 - \frac{1}{12}h^2R_{k-1}\right)\psi_{k-1} - 2\left(1 + \frac{5h^2}{12}R_k\right)\psi_k = \frac{5}{6}h^2S_k + \frac{1}{12}h^2S_{k+1} + \frac{1}{12}h^2S_{k-1} + O(h^6)$$

$$\boxed{\left(1 - \frac{1}{12}h^2R_{k+1}\right)\psi_{k+1} + \left(1 - \frac{1}{12}h^2R_{k-1}\right)\psi_{k-1} - 2\left(1 + \frac{5h^2}{12}R_k\right)\psi_k = \frac{h^2}{12}\left(S_{k+1} + 10S_k + S_{k-1}\right)}$$

Siendo esta la expresión que se buscaba. Por otro lado, si se conocen ψ_k y ψ_{k-1}, entonces:

$$\psi_{k+1} = \left(1 - \frac{1}{12}h^2R_{k+1}\right)^{-1}\left[\frac{h^2}{12}\left(S_{k+1} + 10S_k + S_{k-1}\right) - \left[\left(1 - \frac{1}{12}h^2R_{k-1}\right)\psi_{k-1} - 2\left(1 + \frac{5h^2}{12}R_k\right)\psi_k\right]\right]$$