

# Metodo de Numerov

Rafael Obed Egurrola Corella

March 29, 2025

## Contents

<b>1</b>	<b>Ecuación de Schrödinger unidimensional, independiente del tiempo</b>	<b>1</b>
1.1	Oscilador Harmonico . . . . .	1
1.2	Unidades adimensionales . . . . .	1
<b>2</b>	<b>Método de Numerov</b>	<b>2</b>

## 1 Ecuación de Schrödinger unidimensional, independiente del tiempo

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi$$

### 1.1 Oscilador Harmonico

- Potencial  $V(x) = -\frac{1}{2}Kx^2$

### 1.2 Unidades adimensionales

- Variable adimensional  $\xi$
- Longitud  $\lambda$  de modo que  $x = \lambda\xi$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial (\lambda\xi)^2} = \left( -\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{mK\lambda^2}{\hbar^2}\xi^2 \right) \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} = \left( -\frac{2mE\lambda^2}{\hbar^2} + \frac{mK\lambda^4}{\hbar^2}\xi^2 \right) \psi$$

- Hacemos  $mK\lambda^4/\hbar^2 = 1$ , de donde

$$\lambda = (\hbar^2/mK)^{1/4}$$

- Relacionamos la frecuencia angular del oscilador con la constante de fuerza

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} \implies K = m\omega^2$$

- La variable adimensional queda

$$\lambda\xi = x \implies \xi = \left( \frac{mK}{\hbar^2} \right)^{1/4} x = \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} x$$

- Introducimos la energia adimensional  $\epsilon$

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

- Sustituyendo estas expresiones en la ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} = \left( -\frac{2mE\lambda^2}{\hbar^2} + \frac{mK\lambda^4}{\hbar^2} \xi^2 \right) \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} = \left( -\frac{2m(\epsilon \hbar \omega / 2)(\hbar^2 / m^2 \omega^2)^{1/2}}{\hbar^2} + \xi^2 \right) \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} = (\epsilon - \xi^2) \psi$$

## 2 Método de Numerov

Método numérico desarrollado por el astrónomo ruso Boris Vasilyevich Numerov en la década de 1910. Se basa en desarrollar la expansión de Taylor de una función  $y : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  alrededor de un punto  $x_0 \in I$ , donde  $y$  es solución a la ecuación diferencial de segundo orden

$$y''(x) = -g(x)y(x) + s(x),$$

con  $g : I \rightarrow \mathbb{R}$  y  $s : I \rightarrow \mathbb{R}$  como funciones conocidas, definidas en el mismo intervalo  $I$  que  $y$ . Para que la expansión de Taylor sea válida hasta el orden requerido, se exige que  $y$  sea al menos  $C^4$  i.e. cuatro veces diferenciable. Además,  $g$  y  $s$  deben ser funciones suficientemente suaves e.g. continuas, para garantizar la existencia de una solución.

El método de Numerov sigue un esquema de diferencias finitas, por lo que comenzamos con una expansión de Taylor, a quinto orden. Para un paso adelante ( $x = x_0 + \Delta x$ ) y un paso atrás ( $x = x_0 - \Delta x$ ), se tiene

$$y(x_0 + \Delta x) = y(x_0) + y'(x_0)\Delta x + \frac{y''(x_0)}{2!}\Delta x^2 + \frac{y'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \frac{y^{(4)}(x_0)}{4!}\Delta x^4 + \frac{y^{(5)}(x_0)}{5!}\Delta x^5 + \mathcal{O}(\Delta x^6),$$

$$y(x_0 - \Delta x) = y(x_0) - y'(x_0)\Delta x + \frac{y''(x_0)}{2!}\Delta x^2 - \frac{y'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \frac{y^{(4)}(x_0)}{4!}\Delta x^4 - \frac{y^{(5)}(x_0)}{5!}\Delta x^5 + \mathcal{O}(\Delta x^6).$$

Se define una malla uniforme  $x_n = x_0 + n\Delta x$  y se denota:

- $y(x_n) \equiv y_n$  (valores de la función en puntos de la malla).
- $y(x_n \pm \Delta x) \equiv y_{n\pm 1}$  (puntos adyacentes).

Así, las expansiones se reescriben como:

$$y_{n+1} = y_n + y'_n \Delta x + \frac{1}{2}y''_n(\Delta x)^2 + \frac{1}{6}y'''_n(\Delta x)^3 + \frac{1}{24}y^{(4)}_n(\Delta x)^4 + \frac{1}{120}y^{(5)}_n(\Delta x)^5 + \mathcal{O}(\Delta x^6)$$

$$y_{n-1} = y_n - y'_n \Delta x + \frac{1}{2}y''_n(\Delta x)^2 - \frac{1}{6}y'''_n(\Delta x)^3 + \frac{1}{24}y^{(4)}_n(\Delta x)^4 - \frac{1}{120}y^{(5)}_n(\Delta x)^5 + \mathcal{O}(\Delta x^6)$$

Al sumar ambos desarrollos se obtiene

$$y_{n+1} + y_{n-1} = 2y_n + y''_n(\Delta x)^2 + \frac{1}{12}y^{(4)}_n(\Delta x)^4 + \mathcal{O}[(\Delta x)^6]$$

Al discretizar la ecuación diferencial original, se tiene

$$z_n \equiv y'' = -g_n y_n + s_n,$$

y aplicamos la expresión obtenida

$$z_{n+1} + z_{n-1} = 2z_n + z''_n(\Delta x)^2 + \mathcal{O}[(\Delta x)^4]$$

Esta es una expresion para la segunda derivada desarrollando en Taylor hasta tercer orden, de modo que, ademas, se obtiene una expresion para la cuarta derivada

$$z_n'' = \frac{z_{n+1} + z_{n-1} - 2z_n}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}[(\Delta x)^2] = y_n''.$$

sustituyendo en la expresion

$$y_{n+1} + y_{n-1} = 2y_n + y_n''(\Delta x)^2 + \frac{1}{12}y_n''''(\Delta x)^4 + \mathcal{O}[(\Delta x)^6]$$

se obtiene la formula de Numerov

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + (z_n)(\Delta x)^2 + \frac{1}{12}(z_{n+1} + z_{n-1} - 2z_n)(\Delta x)^2 + \mathcal{O}((\Delta x)^6)$$

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + (-g_n y_n + s_n)(\Delta x)^2 + \frac{1}{12}[(-g_{n+1} y_{n+1} + s_{n+1}) + (-g_{n-1} y_{n-1} + s_{n-1}) - 2(-g_n y_n + s_n)](\Delta x)^2 +$$

$$y_{n+1} \left[ 1 + \frac{1}{12}g_{n+1}(\Delta x)^2 \right] = 2y_n \left[ 1 + \left( \frac{-g_n}{2} + \frac{g_n}{12} \right)(\Delta x)^2 \right] - y_{n-1} \left[ 1 + \frac{1}{12}g_{n-1}(\Delta x)^2 \right] + \frac{1}{12}(s_{n+1} + 10s_n + s_{n-1})(\Delta x)^2 +$$

$$y_{n+1} \left[ 1 + \frac{1}{12}g_{n+1}(\Delta x)^2 \right] = 2y_n \left[ 1 - \frac{5}{12}g_n(\Delta x)^2 \right] - y_{n-1} \left[ 1 + \frac{1}{12}g_{n-1}(\Delta x)^2 \right] + \frac{1}{12}(s_{n+1} + 10s_n + s_{n-1})(\Delta x)^2 + \mathcal{O}((\Delta x)^6)$$

que nos permite propagar la sucesion  $y_n$  conociendo los primeros dos valores  $y_0$  y  $y_1$ . Las ecauciones que se van a resolver por medio de esta formula cuentan con  $s(x) = 0$ , entonces podemos omitir los terminos de  $s_n$ .

- Podemos simplificar la formula por medio de la cantidad

$$f_n \equiv 1 + \frac{1}{12}g_n(\Delta x)^2,$$

haciendo

$$f_n - 1 = \frac{1}{12}g_n(\Delta x)^2$$

$$1 - 5(f_n - 1) = 1 - \frac{5}{12}g_n(\Delta x)^2$$

$$6 - 5f_n = 1 - \frac{5}{12}g_n(\Delta x)^2$$

$$12 - 10f_n = 2 \left( 1 - \frac{5}{12} \right) g_n(\Delta x)^2$$

se reescribe la formula de Numerov

$$y_{n+1} = \frac{(12 - 10f_n)y_n - f_{n-1}y_{n-1}}{f_{n+1}}$$