

Parte VI

Equazioni differenziali alle derivate parziali

Questa parte del corso è dedicata ad alcune delle equazioni differenziali alle derivate parziali di solo tipo lineare che rivestono particolare importanza nello studio della fisica.

19 Equazione di Poisson

Uno dei casi più frequenti in cui siamo richiesti di risolvere un'equazione di Poisson è quello del calcolo di un campo elettrico data una distribuzione di carica $\rho(\mathbf{r})$. Le equazioni di Maxwell pongono:

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}) \quad (203)$$

invece di risolvere direttamente questo problema andiamo a trovare il potenziale elettrostatico $\phi(\mathbf{r})$ tale che $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi(\mathbf{r})$, tramite la soluzione dell'equazione di Poisson:

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (204)$$

dove per il potenziale dobbiamo considerare delle condizioni al contorno.

Per avere un formalismo più generale consideriamo la soluzione del problema:

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \quad (205)$$

con \mathbf{r} all'interno di un volume $\Omega = [a_x, b_x] \times [a_y, b_y] \times [a_z, b_z]$. Le condizioni al contorno sono del tipo $\phi(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r})$ per \mathbf{r} sul bordo del volume Ω che indichiamo con $\partial\Omega$. Scriviamo ora il problema in termini della coordinate di \mathbf{r} , (x, y, z) :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\phi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\phi(x, y, z) = f(x, y, z) & (x, y, z) \in \Omega \\ \phi(x, y, z) = g(x, y, z) & (x, y, z) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (206)$$

Ora discretizziamo i tre intervalli $[a_x, b_x], [a_y, b_y], [a_z, b_z]$, con un numero di punti N_x, N_y, N_z e distanza tra punti h_x, h_y, h_z , rispettivamente.

$$\begin{cases} x_1 & = a_x \\ x_{N_x} & = b_x \\ h_x & = \frac{b_x - a_x}{N_x - 1} \\ y_1 & = a_y \\ y_{N_y} & = b_y \\ h_y & = \frac{b_y - a_y}{N_y - 1} \\ z_1 & = a_z \\ z_{N_z} & = b_z \\ h_z & = \frac{b_z - a_z}{N_z - 1} \end{cases} \quad (207)$$

Indichiamo con $\phi_{ijk} = \phi(x_i, y_j, z_k)$ Abbiamo che le condizioni al contorno vengono espresse da:

$$\begin{cases} \phi_{1ij} & = g_{1ij} \\ \phi_{N_x ij} & = g_{N_x ij} \\ \phi_{i1j} & = g_{i1j} \\ \phi_{iN_y j} & = g_{iN_y j} \\ \phi_{ij1} & = g_{ij1} \\ \phi_{ijN_z} & = g_{ijN_z} \end{cases} \quad \forall i, j \quad (208)$$

L'equazione di Poisson viene allora scritta usando le note formule per le derivate:

$$\frac{\phi_{i+1jk} - 2\phi_{ijk} + \phi_{i-1jk}}{h_x^2} + \frac{\phi_{ij+1k} - 2\phi_{ijk} + \phi_{ij-1k}}{h_y^2} + \frac{\phi_{ijk+1} - 2\phi_{ijk} + \phi_{ijk-1}}{h_z^2} = f_{ijk} \quad (209)$$

Possiamo facilmente trasformare questo problema in un problema matriciale. Per prima cosa introduciamo un nuovo indice unico $l \in [0, N_x N_y N_z - 1]$ per individuare i punti (i, j, k) :

$$(i, j, k) \rightarrow l = (k - 1) N_x N_y + (j - 1) N_x + (i - 1) \quad (210)$$

la trasformazione inversa è data da:

$$l \rightarrow (i, j, k) = \begin{cases} k &= \text{floor}(l / (N_x N_y)) + 1 \\ j &= \text{floor}((l - (k - 1) N_x N_y) / N_x) + 1 \\ i &= l - (k - 1) N_x N_y - (j - 1) N_x + 1 \end{cases} \quad (211)$$

Dove con $\text{floor}(x)$ con $x > 0$ intendiamo il numero intero minore o uguale a x più grande possibile. Quindi possiamo scrivere la funzione cercata nei punti del nostro reticolo come ϕ_l e analogamente scriveremo f_l . Introduciamo la matrice M , che definiamo in questo modo, sia $l \longleftrightarrow (i, j, k)$ e $m \longleftrightarrow (i', j', k')$ se l non appartiene al bordo poniamo:

$$M_{lm} = \begin{cases} \frac{1}{h_x^2} & (i', j', k') = (i + 1, j, k) \\ -2 \left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2} \right) & (i', j', k') = (i, j, k) \\ \frac{1}{h_x^2} & (i', j', k') = (i - 1, j, k) \\ \frac{1}{h_y^2} & (i', j', k') = (i, j + 1, k) \\ \frac{1}{h_y^2} & (i', j', k') = (i, j - 1, k) \\ \frac{1}{h_z^2} & (i', j', k') = (i, j, k + 1) \\ \frac{1}{h_z^2} & (i', j', k') = (i, j, k - 1) \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (212)$$

inoltre se l individua un punto sul bordo poniamo

$$\begin{cases} M_{ll} = 1 \\ M_{lm} = 0 \end{cases} \quad m \neq l \quad (213)$$

In questa maniera il mio problema viene scritto come:

$$\sum_m M_{lm} \phi_m = (f_l + b_l) \quad (214)$$

dove il vettore \mathbf{b} è definito da:

$$\begin{cases} b_l = g_l & l \in \partial\Omega \\ b_l = 0 & l \notin \partial\Omega \end{cases} \quad (215)$$

per risolverlo una possibilità è quella di invertire la matrice M :

$$\phi_l = \sum_m M_{lm}^{-1} (f_l + b_l) \quad (216)$$

Per invertire la matrice posso usare le routines di algebra lineare come quelle della libreria LAPACK. Tale metodo però potrebbe non essere fattibile nel caso che la dimensione di M ossia $N_x N_y N_z$ sia grande. Ad esempio se $N_x = N_y = N_z = 100$ per allocare in memoria la matrice in doppia precisione ho bisogno di $100^6 * 8 \text{ bytes} = 7.45 \text{ TB}$.

Per ovviare a questo problema vengono usati **algoritmi iterativi**. Questi sono basati sul fatto che anche se immagazzinare M in memoria è non possibile è (ancora) possibile calcolare $\sum_m M_{lm} \phi_m$.

19.1 Metodo di Jacobi e di Gauss-Seidel

Un metodo largamente usato è quello di Gauss-Seidel. Partiamo dal problema:

$$M \cdot \phi = \mathbf{f} \quad (217)$$

in cui ϕ è l'incognita e introduciamo la matrice A definita come:

$$\begin{cases} A_{ll} = \frac{1}{M_{ll}} \\ A_{lm} = 0 \end{cases} \quad m \neq l \quad (218)$$

allora otteniamo:

$$AM \cdot \phi = A \cdot \mathbf{f} \quad (219)$$

dove:

$$(AM)_{lm} = \begin{cases} 1 & l = m \\ \frac{M_{lm}}{M_{ll}} & l \neq m \end{cases} \quad (220)$$

introduciamo la matrice \tilde{M} :

$$\tilde{M}_{lm} = \begin{cases} 0 & l = m \\ -\frac{M_{lm}}{M_{ll}} & l \neq m \end{cases} \quad (221)$$

ed il vettore

$$\tilde{f}_l = \frac{f_l}{M_{ll}} \quad (222)$$

Il nostro problema allora diventa:

$$\phi = \tilde{M}\phi + \tilde{\mathbf{f}} \quad (223)$$

possiamo allora provare a risolvere il problema iterando. Parto da:

$$\phi^{(0)} = \tilde{\mathbf{f}} \quad (224)$$

poi pongo:

$$\phi^{(1)} = \tilde{M}\phi^{(0)} + \tilde{\mathbf{f}} \quad (225)$$

e così via per le iterazioni successive:

$$\phi^{(i+1)} = \tilde{M}\phi^{(i)} + \tilde{\mathbf{f}} \quad (226)$$

se ad una certa iterazione viene raggiunta la *convergenza* ossia $\phi^{(i+1)} = \phi^{(i)}$ (in pratica considererò un valore soglia per il modulo del vettore differenza $\phi^{(i+1)} - \phi^{(i)}$) allora tale vettore è proprio la soluzione che cerchiamo. Formalmente possiamo anche scrivere:

$$\phi = \frac{1}{\mathbb{I} - \tilde{M}} \tilde{\mathbf{f}} = \left(\mathbb{I} + \tilde{M} + \tilde{M}^2 + \tilde{M}^3 + \dots \right) \tilde{\mathbf{f}} = \tilde{\mathbf{f}} + \tilde{M}\tilde{\mathbf{f}} + \tilde{M}^2\tilde{\mathbf{f}} + \tilde{M}^3\tilde{\mathbf{f}} + \tilde{M}^4\tilde{\mathbf{f}} + \dots \quad (227)$$

quindi ritrovando i termini che calcoliamo con il procedimento iterativo. Questo algoritmo prende il nome di metodo di Jacobi.

Si può renderlo più veloce aggiornando un elemento di matrice dopo l'altro ossia rimpiazzando Eq. 226:

$$\phi_j^{(i+1)} = \sum_{k < j} \tilde{M}_{jk} \phi_k^{(i+1)} + \sum_{l \geq j} \tilde{M}_{jl} \phi_l^{(i)} \tilde{f}_l \quad (228)$$

Tale variante prende il nome di algoritmo di Gauss-Seidl.

19.2 Il Metodo di Richardson

Un altro metodo iterativo frequentemente usato è quello di Richardson, come nel caso precedente vogliamo risolvere:

$$M \cdot \phi = \mathbf{f} \quad (229)$$

Iniziamo l'algoritmo ciclico scegliendo un coefficiente $\alpha > 0$ e scegliamo $\phi^{(0)}$ in maniera casuale. Poi iteriamo con la regola:

$$\phi^{(i+1)} = \phi^{(i)} + \alpha \left(\mathbf{f} - M \cdot \phi^{(i)} \right) \quad (230)$$

Si vede subito che nel caso si giunga a convergenza ossia se vale $\phi^{(i+1)} = \phi^{(i)}$ allora anche l'equazione 229 è soddisfatta.

19.3 Relazione con problema di minimizzazione

Risolvere Eq. 229 è equivalente a trovare il minimo del funzionale che scriviamo usando la notazione di Dirac per i vettori $|\phi\rangle$:

$$E(|\phi\rangle) = \langle\phi|M|\phi\rangle - (\langle f|\phi\rangle + \langle\phi|f\rangle) \quad (231)$$

infatti la condizione di minimo viene scritta come

$$\frac{\partial E(|\phi\rangle)}{\partial \langle\phi|} = M|\phi\rangle - f = 0 \quad (232)$$

Per il problema generale di trovare il minimo di una funzione reale generica $e(\mathbf{x})$, con \mathbf{x} appartenente ad un opportuno spazio vettoriale, uno dei metodi più semplici da implementare anche se generalmente alquanto lento è quello del *steepest descent*. Cominciamo con una prima scelta $\mathbf{x}^{(0)}$ poi applichiamo il seguente algoritmo

1. calcoliamo il gradiente $\mathbf{g}^{(i)} = -\frac{\partial e(\mathbf{x}^{(i)})}{\partial \mathbf{x}}$
2. consideriamo la funzione reale $f(\lambda) = e(\mathbf{x}^{(i)} + \lambda \mathbf{g}^{(i)})$ con $\lambda \in \mathbb{R}$
3. calcolo λ_{min} che minimizza $f(\lambda)$ imponendo $\frac{df}{d\lambda} = 0$
4. troviamo il nuovo vettore \mathbf{x} con $\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} + \lambda_{min} \mathbf{g}^{(i)}$
5. Torniamo al punto 1

Vediamo che Richardson corrisponde alla minimizzazione steepest-descent con la scelta di porre sempre $\lambda_{min} = \alpha$.

20 Equazione di Schrödinger stazionaria a tre dimensioni

L'equazione di Schrödinger stazionaria ha la forma:

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) + c(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (233)$$

consideriamo il caso in cui \mathbf{r} appartenga al volume Ω descritto in Sezione 19 con condizioni al contorno $\psi(\mathbf{r}) = 0$ $\mathbf{r} \in \partial\Omega$, trasformiamo il problema in un problema matriciale usando le definizioni della Sezione 19 definiamo la matrice H_{lm} $l, m \notin \partial\Omega$ di dimensione $(N_x - 2)(N_y - 2)(N_z - 2)$, con $i \in [2, N_x - 1]$, $j \in [2, N_y - 1]$, $k \in [2, N_z - 1]$ e abbiamo $l \longleftrightarrow (i, j, k)$ e $m \longleftrightarrow (i', j', k')$

$$H_{lm} = \begin{cases} \frac{1}{h_x^2} & (i', j', k') = (i + 1, j, k), \quad i + 1 \neq N_x \\ -2 \left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2} \right) + c_l & (i', j', k') = (i, j, k) \\ \frac{1}{h_x^2} & (i', j', k') = (i - 1, j, k) \quad i - 1 \neq 0 \\ \frac{1}{h_y^2} & (i', j', k') = (i, j + 1, k) \quad j + 1 \neq N_y \\ \frac{1}{h_y^2} & (i', j', k') = (i, j - 1, k) \quad j - 1 \neq 0 \\ \frac{1}{h_z^2} & (i', j', k') = (i, j, k + 1) \quad k + 1 \neq N_z \\ \frac{1}{h_z^2} & (i', j', k') = (i, j, k - 1) \quad k - 1 \neq 0 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (234)$$

il nostro problema diventa:

$$\sum_m H_{lm} \psi_m = E \psi_l \quad (235)$$

dove voglio trovare le coppie (ψ, E) di autofunzioni-autovalori soluzioni del problema tali che le ψ trovate siano ortogonali tra di loro. Per la soluzione di questo problema posso usare gli algoritmi di algebra lineare per diagonalizzare la matrice H nel caso la sua dimensione non sia proibitiva (ad esempio potrò usare le routine LAPACK) altrimenti potrò ricorrere ad algoritmi iterativi.

21 Formulazione del problema agli autovalori/autostati come problema di minimo

Trovare lo stato fondamentale di H risolvendo l' Eq. 235 è equivalente a trovare il minimo rispetto a $|\psi\rangle$ del seguente funzionale che scriviamo usando la notazione di Dirac:

$$E(|\psi\rangle) = \langle\psi|H|\psi\rangle \quad (236)$$

soggetto alla condizione di (orto-) normalizzazione

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad (237)$$

Possiamo trattare tale vincolo inserendo un moltiplicatore di Lagrange λ e minimizzando rispetto a $|\psi\rangle$ e λ il funzionale:

$$E'(|\psi\rangle) = \langle\psi|H|\psi\rangle - \lambda(\langle\psi|\psi\rangle - 1) \quad (238)$$

Infatti nel minimo devono essere soddisfatte le seguenti equazioni:

$$\begin{cases} \frac{\partial E'}{\partial \langle\psi|} = 0 \\ \frac{\partial E'}{\partial \lambda} = 0 \\ H|\psi\rangle - \lambda|\psi\rangle = 0 \\ \langle\psi|\psi\rangle - 1 = 0 \end{cases} \quad (239)$$

quindi nel minimo il valore del moltiplicatore di Lagrange è pari all'energia dello stato fondamentale. Per trovare il minimo l'algoritmo più semplice è lo steepest-descent, poniamo α parametro reale costante (es. 0.1):

1. Partiamo da guess iniziale $\psi^{(0)}$ che soddisfa $\langle\psi^{(0)}|\psi^{(0)}\rangle = 1$
2. Calcoliamo per la i -esima iterazione il gradiente cambiato di segno $|G(\lambda)\rangle = -H|\psi^{(i)}\rangle + \lambda|\psi^{(i)}\rangle$
3. Scegliamo λ in maniera che $|\psi^{(i)}\rangle + \eta|G(\lambda)\rangle|^2 = 1 + O(\eta^2)$ che porge $\lambda^{(i)} = \langle\psi^{(i)}|H|\psi^{(i)}\rangle$
4. Poniamo $|\tilde{\psi}^{(i+1)}\rangle = |\psi^{(i)}\rangle + \alpha|G(\lambda^{(i)})\rangle$
5. Normalizziamo $|\psi^{(i+1)}\rangle = \frac{|\tilde{\psi}^{(i+1)}\rangle}{\sqrt{\langle\tilde{\psi}^{(i+1)}|\tilde{\psi}^{(i+1)}\rangle}}$
6. Torniamo al punto 2

Tale procedura permette il calcolo dello stato fondamentale. Possiamo trovare gli autostati di autoenergia via via maggiore proiettando ad ogni passo i vettori coinvolti sul sottospazio ortogonale al sottospazio degli autostati che sono già stati calcolati.

22 Equazione di diffusione

Consideriamo il solo caso dell'equazione di diffusione con costante di diffusione costante:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) = D\Delta\rho(\mathbf{r}, t) \quad (240)$$

per semplicità ci limitiamo al caso unidimensionale:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, t) \quad (241)$$

con $x \in [a, b]$ e con le condizioni al contorno $\rho(a, t) = g_a$ e $\rho(b, t) = g_b$ e con le condizioni iniziali $\rho(x, t_0) = \rho^0(x)$. Come al solito introduciamo una griglia di N punti su $[a, b]$ con spaziatura h , in maniera tale che $x_1 = a$, $x_N = b$ e $h = (b - a)/(N - 1)$. Inoltre introduciamo una griglia sull'asse temporale di istanti di tempo con spaziatura dt , e poniamo:

$$t_n = t_0 + ndt \quad (242)$$

e

$$\rho_i^{(n)} = \rho(x_i, t_n) \quad (243)$$

Per discretizzare il termine a sinistra dell'uguale in Eq. 241 possiamo scegliere tra i propagatori che abbiamo introdotto in Sezione 7. La scelta più semplice è quella di utilizzare il metodo di Eulero esplicito:

$$\begin{aligned}\rho_i^{(n+1)} &= \rho_i^{(n)} + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) \Big|_{\substack{x=x_i \\ t=t_n}} \times dt \\ \rho_i^{(n+1)} &= \rho_i^{(n)} + D \left(\frac{\rho_{i+1}^{(n)} - 2\rho_i^{(n)} + \rho_{i-1}^{(n)}}{h^2} \right) dt\end{aligned}\quad (244)$$

Si vede e si può mostrare analiticamente che tale algoritmo diventa instabile se

$$\frac{Ddt}{h^2} > \frac{1}{2} \quad (245)$$

limitando quindi la scelta del time step a valori piccoli. Per ovviare a questo problema si può usare come propagatore il metodo di Eulero implicito:

$$\rho_i^{(n+1)} = \rho_i^{(n)} + D \left(\frac{\rho_{i+1}^{(n+1)} - 2\rho_i^{(n+1)} + \rho_{i-1}^{(n+1)}}{h^2} \right) dt \quad (246)$$

ora però risulta meno immediato calcolare $\rho^{(n+1)}$ e dobbiamo ricorrere ad una formulazione matriciale. Introduciamo la matrice :

$$M_{ij} = \begin{cases} \frac{D}{h^2} dt & j = i + 1, i \neq 1, i \neq N \\ -\frac{2D}{h^2} dt & j = i, i \neq 1, i \neq N \\ \frac{D}{h^2} dt & j = i - 1, i \neq 1, i \neq N \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (247)$$

che risulta essere tridiagonale. In forma matriciale il nostro problema diviene:

$$\rho^{(n+1)} = \rho^{(n)} + M \cdot \rho^{(n+1)} dt \quad (248)$$

che posso scrivere come:

$$(\mathbb{I} - M) \cdot \rho^{(n+1)} = \rho^{(n)} \quad (249)$$

risolvo questo equazione con i metodo dell'algebra lineare o usando metodi iterativi.

23 Equazione delle onde

Vogliamo trovare soluzioni all'equazione delle onde in una dimensione in un mezzo non dispersivo:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x, t) = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \quad (250)$$

nel caso siano date le condizioni iniziali $u(x, t_0)$ e $\frac{\partial}{\partial t} u(x, t_0)$. Cominciamo col introdurre una griglia equispaziata sull'asse x dove h è la spaziatura ed una griglia equispaziata sull'asse t dove dt è la spaziatura. Indichiamo con $u_i^{(n)} = u(x_i, t_n)$. La formula di Eq. 24 permette di scrivere

$$\frac{u_i^{(n+1)} - 2u_i^{(n)} + u_i^{(n-1)}}{dt^2} = c^2 \frac{u_{i+1}^{(n)} - 2u_i^{(n)} + u_{i-1}^{(n)}}{h^2} \quad (251)$$

dove il termine incognito è $u_i^{(n+1)}$ che diviene:

$$u_i^{(n+1)} = 2u_i^{(n)} - u_i^{(n-1)} + \frac{c^2 dt^2}{h^2} (u_{i+1}^{(n)} - 2u_i^{(n)} + u_{i-1}^{(n)}) \quad (252)$$

Quindi per propagare la funzione d'onda $u(x, t)$ dal tempo t_0 abbiamo bisogno non solo di $\{u_i^{(0)}\}$ ma anche di $\{u_i^{(1)}\}$ che possiamo calcolare utilizzando lo sviluppo in serie di Taylor:

$$u_i^{(1)} = u_i^{(0)} + \left(\frac{\partial}{\partial t} u_i^{(0)} \right) dt + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} u_i^{(0)} \right) dt^2 + O(dt^3) \quad (253)$$

dove $\frac{\partial}{\partial t} u_i^{(0)} = g_i$ è una funzione data e sostituiamo $\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} u_i^{(0)} \right) = c^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} u_i^{(0)} \right)$. Quindi si arriva alla formula:

$$u_i^{(1)} = u_i^{(0)} + g_i dt + \frac{c^2}{2} \frac{u_{i+1}^{(0)} - 2u_i^{(0)} + u_{i-1}^{(0)}}{h^2} dt^2 \quad (254)$$

Si vede numericamente e si può mostrare numericamente che tale algoritmo è stabile solo se:

$$\frac{c dt}{h} \leq 1 \quad (255)$$

che viene chiamata condizione di *Courant-Friedrichs-Lewy*.

Inoltre come fatto nelle sezioni precedenti possono essere facilmente scelte delle condizioni al contorno.

24 Equazione di Schrödinger tempo dipendente

Consideriamo la soluzione dell'equazione di Schrödinger tempo dipendente:

$$H\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (256)$$

con

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (257)$$

dove H non dipende dal tempo e $x \in [a, b]$ con le condizioni al contorno $\psi(a, t) = 0$ e $\psi(b, t) = 0$. Inoltre le condizioni iniziali $\psi(x, t_0)$ sono date. Come nella sezione precedente consideriamo una griglia sull'asse x di N_x punti spaziali h e time steps di dt . La soluzione formale di Eq. 256 viene scritta come:

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_o(x) \quad (258)$$

che incorporando le condizioni iniziali scriviamo come:

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H (t-t_0)} \psi(x, t_0) = U(t, t_0) \psi(x, t_0) \quad (259)$$

dove $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H (t-t_0)}$ è l'operatore di evoluzione temporale. Esso è un operatore unitario e questo garantisce la conservazione della norma di ψ : $\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1$.

Il metodo più semplice per risolvere numericamente è approssimare:

$$\psi(x, t + dt) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H dt\right) \psi(x, t) \quad (260)$$

con la solita notazione $\psi_i^{(n)} = \psi(x_i, t_n)$ la formula diventa:

$$\psi_i^{(n+1)} = \psi_i^{(n)} - \frac{idt}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_i^{(n)} \right) + V_i \psi_i^{(n)} \right) \quad (261)$$

che approssimiamo come:

$$\psi_i^{(n+1)} = \psi_i^{(n)} - \frac{idt}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{i+1}^{(n)} - 2\psi_i^{(n)} + \psi_{i-1}^{(n)}}{h^2} \right) + V_i \psi_i^{(n)} \right) \quad (262)$$

tale metodo è equivalente a quello di Eulero esplicito quindi equivalente all'integrazione con il metodo dei rettangoli naif. Per una soddisfacente conservazione della norma della funzione d'onda bisogna però ricorrere a dt piccoli visto che l'operatore approssimato $U(t + dt, t) \approx (1 - \frac{i}{\hbar} H dt)$ non è unitario. Per usare dt maggiore possiamo basarci sul metodo di Crank Nicolson ossia sul metodo di integrazione con i trapezi. Formalmente procediamo nel seguente modo:

$$\psi \left(t_n + \frac{1}{2} dt \right) = U \left(t_{n+\frac{1}{2}}, t_n \right) \psi(t_n) = U \left(t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1} \right) \psi(t_{n+1}) \quad (263)$$

che discretizziamo con:

$$\psi_i^{(n)} - \frac{idt}{2\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{i+1}^{(n)} - 2\psi_i^{(n)} + \psi_{i-1}^{(n)}}{h^2} \right) + V_i \psi_i^{(n)} \right) = \psi_i^{(n+1)} + \frac{idt}{2\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{i+1}^{(n+1)} - 2\psi_i^{(n+1)} + \psi_{i-1}^{(n+1)}}{h^2} \right) + V_i \psi_i^{(n)} \right) \quad (264)$$

Anche in questo caso il problema può essere posto come un'equazione matriciale e per ottenere una forma più snella dividiamo ambo i membri per $-i\hbar dt / (4mh^2)$:

$$\sum_{\substack{i=2, N_x-1 \\ j=2, N_{x-1}}} M_{ij} \psi_j^{(n+1)} = F_i \quad (265)$$

con:

$$M_{ij} = \begin{cases} i \frac{4mh^2}{\hbar dt} - 2 - \frac{2mh^2}{\hbar^2} V_i & j = 1 \\ 1 & j = i + 1 \\ 1 & j = i - 1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (266)$$

e con:

$$F_i = -\psi_{i+1}^{(n)} + 2\psi_i^{(n)} - \psi_{i-1}^{(n)} + i \frac{4mh^2}{\hbar dt} \psi_i^{(n)} + \frac{2mh^2}{\hbar^2} V_i \psi_i^{(n)} \quad (267)$$

25 Metodo risolutivo per matrici tridiagonali

Consideriamo il problema generico di calcolare il vettore \mathbf{a} tale che :

$$M\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad (268)$$

con M matrice di tridiagonale di dimensione N . Il problema è equivalente ad un sistema di Nequazioni lineari. La prima di queste è:

$$M_{11}a_1 + M_{12}a_2 = b_1 \quad (269)$$

che possiamo scrivere come:

$$a_2 = \alpha_1 a_1 + \beta_1 \quad (270)$$

dove:

$$\alpha_1 = -\frac{M_{11}}{M_{12}} \quad (271)$$

e

$$\beta_1 = \frac{b_1}{M_{12}} \quad (272)$$

per le altre equazioni possiamo sempre scrivere:

$$a_{i+1} = \alpha_i a_i + \beta_i \quad (273)$$

dove i coefficienti α_i e β_i vengono trovati tramite il seguente procedimento iterativo, dove usiamo $a_{i-1} = \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} - \frac{\beta_{i-1}}{\alpha_{i-1}}$:

$$\begin{aligned} M_{i,i-1}a_{i-1} + M_{ii}a_i + M_{i,i+1}a_{i+1} &= b_i \\ M_{i,i-1} \left(\frac{a_i}{\alpha_{i-1}} - \frac{\beta_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \right) + M_{ii}a_i + M_{i,i+1}a_{i+1} &= b_i \\ M_{i,i+1}a_{i+1} &= \left(-\frac{M_{i,i-1}}{\alpha_{i-1}} - M_{ii} \right) a_i + b_i + \frac{M_{i,i-1}}{\alpha_{i-1}} \beta_{i-1} \end{aligned} \quad (274)$$

da cui:

$$\alpha_i = \left(-\frac{M_{i,i-1}}{M_{i,i+1}\alpha_{i-1}} - \frac{M_{ii}}{M_{i,i+1}} \right) \quad (275)$$

e

$$\beta_i = \frac{b_i}{M_{i,i+1}} + \frac{M_{i,i-1}}{M_{i,i+1}} \frac{\beta_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \quad (276)$$

questo ci permette di trovare tutti i coefficienti fino a:

$$a_N = \alpha_{N-1}a_{N-1} + \beta_{N-1} \quad (277)$$

l'ultima equazione del sistema invece porge:

$$M_{NN}a_N + M_{N,N-1}a_{N-1} = b_N \quad (278)$$

metto a sistema le ultime due equazioni e trovo:

$$\frac{a_N}{\alpha_{N-1}} - \frac{\beta_{N-1}}{\alpha_{N-1}} = -\frac{M_{N,N}}{M_{N,N-1}}a_N + \frac{b_N}{M_{N,N-1}} \quad (279)$$

da cui trovo:

$$a_N = \left(\frac{1}{\alpha_{N-1}} + \frac{M_{N,N}}{M_{N,N-1}} \right)^{-1} \left(\frac{b_N}{M_{N,N-1}} + \frac{\beta_{N-1}}{\alpha_{N-1}} \right) \quad (280)$$

trovato a_N posso trovare tutti gli altri $\{a_i\}$ utilizzando Eq. 273