Iniziamo con la formulazione delle derivate:

Prima (in avanti):

$$\frac{\partial F}{\partial x}(a) \simeq \frac{F(a+h)-F(a)}{h}$$

Prima (centrale):

$$\frac{\partial F}{\partial x}(a) \simeq \frac{F(a+h/2)-F(a-h/2)}{2*h/2}$$

Seconda(in avanti):

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(a) \simeq \frac{\frac{\partial F}{\partial x}(a+h)-\frac{\partial F}{\partial x}(a)}{h} = \frac{F(a+2h)+F(a)-2F(a+h)}{h^2}$$

Seconda(centrale):

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(a) \simeq \frac{F(a+h)+F(a-h)-2F(a)}{h^2}$$

Partiamo dall'equazione del calore:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = K\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

saltiamo le varie definizioni in avanti e indietro e passiamo direttamente al Cranck Nicholson:

Schematizziamo la temperatura come $I * J$ punti (I spazio, J tempo): T_i^j.

Per il tempo calcoliamo la derivata centrale in $t + \Delta t/2$.:

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t+\Delta t/2) \simeq \frac{T(x, t+\Delta t/2+\Delta t/2)-T(x, t-\Delta t/2+\Delta t/2)}{2*\Delta t/2} = \frac{T(x, t+\Delta t)-T(x,t)}{\Delta t}$$

Per lo spazio le derivate al secondo ordine sono:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x,t) \simeq \frac{T(x+\Delta x, t)+T(x-\Delta x, t)-2T(x,t)}{\Delta x^2}$$

per l'equazione si fa la media $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x,t) + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x,t+\Delta t)$:

$$\frac{T(x,t+\Delta t)-T(x,t)}{\Delta t} = \frac{K}{2}\left(\frac{T(x+\Delta x,t)+T(x-\Delta x,t)-2T(x,t)}{\Delta x^2}\right.$$
$$\left.+\frac{T(x+\Delta x,t+\Delta t)+T(x-\Delta x,t+\Delta t)-2T(x,t+\Delta t)}{\Delta x^2}\right)$$

in pochi passaggi si arriva a separare le parti a tempo differente:, con $\eta = K\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$:

$$\left(\frac{2}{\eta}+2\right)T(x,t+\Delta t)-T(x+\Delta x,t+\Delta t)-T(x-\Delta x,t+\Delta t) = \left(\frac{2}{\eta}-2\right)T(x,t)+T(x+\Delta x,t)+T(x-\Delta x,t)$$

a questo punto procedo con il metodo della matrice tridiagonale

Lavoriamo con l'equazione di Schrodinger dipendente dal tempo:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,t)\right]\psi(x,t)$$

Similmente si arriva a:

$$i\hbar\frac{\psi(x,t+\Delta t)-\psi(x,t)}{\Delta t} = -\frac{\hbar^2}{4m}\left(\frac{\psi(x+\Delta x,t)+\psi(x-\Delta x,t)-2\psi(x,t)}{\Delta x^2}\right.$$
$$\left.+\frac{\psi(x+\Delta x,t+\Delta t)+\psi(x-\Delta x,t+\Delta t)-2\psi(x,t+\Delta t)}{\Delta x^2}\right)$$
$$+\frac{1}{2}\left(\psi(x,t)V(x,t)+\psi(x,t+\Delta t)V(x,t+\Delta t)\right)$$

Come prima definisco un $\eta = i\frac{\hbar}{2m}\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ e riscrivo:

$$\begin{aligned}
2\frac{\psi(x,t+\Delta t)-\psi(x,t)}{\eta} =& \psi(x+\Delta x,t)+\psi(x-\Delta x,t)-2\psi(x,t) \\
&+\psi(x+\Delta x,t+\Delta t)+\psi(x-\Delta x,t+\Delta t)-2\psi(x,t+\Delta t) \\
&+\frac{\Delta t}{\eta}\left(\psi(x,t)V(x,t)+\psi(x,t+\Delta t)V(x,t+\Delta t)\right)
\end{aligned}$$

E similmente a prima ottengo un'equazione in cui separo i termini a tempi differenti:

$$\left(\frac{2-\Delta t V(x,t+\Delta t)}{\eta}+2\right)\psi(x,t+\Delta t)-\psi(x+\Delta x,t+\Delta t)-\psi(x-\Delta x,t+\Delta t) =$$
$$\left(\frac{2+\Delta t V(x,t)}{\eta}-2\right)\psi(x,t)+\psi(x+\Delta x,t)+\psi(x-\Delta x,t)$$

per impostare la tabella tridiagonale discretizzo ψ e V, i indice spaziale j indice temporale:

$$-\psi_{i-1}^{j+1}+\left(\frac{2-\Delta t V_i^{j+1}}{\eta}+2\right)\psi_i^{j+1}-\psi_{i+1}^{j+1}=\psi_{i-1}^{j}+\left(\frac{2+\Delta t V_i^{j}}{\eta}-2\right)\psi_i^{j}+\psi_{i+1}^{j}$$

0.1 Generalizzando

Partendo da una generica equazione di secondo ordine:

$$\partial_t F = D_2\partial_x^2 F + D_1\partial_x F + V(x,t)F + U(x,t)$$

Non metto coefficienti davanti alla derivata temporale perchè posso includerlo in D_1 e D_2, mentre per la funzione che moltiplica F o che si somma il coefficente e' compreso in essa. In poche parole:

$$\begin{aligned}
\frac{F_i^{j+1}-F_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{2}\Bigg(& D_2\frac{F_{i+1}^j+F_{i-1}^j-2F_i^j}{\Delta x^2}+D_1\frac{F_{i+1}^j-F_{i-1}^j}{2\Delta x}+F_i^jV_i^j+U_i^j+ \\
& D_2\frac{F_{i+1}^{j+1}+F_{i-1}^{j+1}-2F_i^{j+1}}{\Delta x^2}+D_1\frac{F_{i+1}^{j+1}-F_{i-1}^{j+1}}{2\Delta x}+F_i^{j+1}V_i^{j+1}+U_i^{j+1}\Bigg)
\end{aligned}$$

Se indico con $\eta = \frac{D_2\Delta t}{\Delta x^2}$ posso scrivere:

$$-\left(1+\frac{D_1}{D_2}\frac{\Delta x}{2}\right)F_{i+1}^{j+1}+\left(\frac{2}{\eta}+2-\frac{\Delta x^2}{D_2}V_i^{j+1}\right)F_i^{j+1}-\left(1-\frac{D_1}{D_2}\frac{\Delta x}{2}\right)F_{i-1}^{j+1}-\frac{\Delta x^2}{D_2}U_i^{j+1}=$$

$$\left(1+\frac{D_1}{D_2}\frac{\Delta x}{2}\right)F_{i+1}^{j}+\left(\frac{2}{\eta}-2+\frac{\Delta x^2}{D_2}V_i^{j}\right)F_i^{j}+\left(1-\frac{D_1}{D_2}\frac{\Delta x}{2}\right)F_{i-1}^{j}+\frac{\Delta x^2}{D_2}U_i^{j}$$

Ai fini del prossimo capitolo indico:

$$\begin{array}{ll}
a_i^j = -1-\frac{D_1}{D_2}\frac{\Delta x}{2} & ak_i^j = 1+\frac{D_1}{D_2}\frac{\Delta x}{2} \\
d_i^j = \frac{1}{\eta}\left(2-\Delta t V_i^{j+1}\right)+2 & dk_i^j = \frac{1}{\eta}\left(2+\Delta t V_i^{j}\right)-2 \\
c_i^j = -1+\frac{D_1}{D_2}\frac{\Delta x}{2} & ck_i^j = 1-\frac{D_1}{D_2}\frac{\Delta x}{2} \\
e_i^j = -\frac{\Delta x^2}{D_2}U_i^{j+1} & ek_i^j = \frac{\Delta x^2}{D_2}U_i^{j}
\end{array}$$

0.2 La matrice Tridiagonale: soluzione

A questo punto mi trovo con la forma dell'equazione (calcolata per il tempo j):

$$a_iF_{i-1}^{j+1}+d_iF_i^{j+1}+c_iF_{i+1}^{j+1}+e_i = ak_iF_{i-1}^j+dk_iF_i^j+ck_iF_{i+1}^j+ek_i$$

che equivale al sistema(con $i = 0- > N-1$, ovvero un sistema con N punti rispettando le convenzioni del C, in cui a destra ci sono le variabili ci cui conosco i valori e a sinistra quelli ignoti:

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_0 & & & & \\ a_1 & d_1 & c_1 & & & \\ & & ... & & & \\ & & & a_{N-2} & d_{N-2} & c_{N-2} \\ & & & & a_{N-1} & d_{N-1} \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} dk_0 & ck_0 & & & & \\ ak_1 & dk_1 & ck_1 & & & \\ & & ... & & & \\ & & & ak_{N-2} & dk_{N-2} & ck_{N-2} \\ & & & & ak_{N-1} & dk_{N-1} \end{pmatrix} F^j + \begin{pmatrix} ek_0 - e_0 \\ ek_1 - e_1 \\ ... \\ ek_{N-2} - e_{N-2} \\ ek_{N-1} - e_{N-1} \end{pmatrix}$$

La trattazione attuale non tiene conto delle condizioni al contorno, ne parlerò in seguito

Per comodita' compatto il lato conosciuto in un vettore B^j:

$$b_i^j = ak_i F_{i-1}^j + dk_i F_i^j + ck_i F_{i+1}^j + ek_i - e_i$$

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_0 & & & & \\ a_1 & d_1 & c_1 & & & \\ & & ... & & & \\ & & & ... & & \\ & & & a_{N-2} & d_{N-2} & c_{N-2} \\ & & & & a_{N-1} & d_{N-1} \end{pmatrix} F^{j+1} = B^j$$

a questo punto procedo con il trasformare la prima matrice in una matrice identita' + una matrice con valori non nulli solo nelle celle sopra alla diagonale:

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_0 & 0 & ... & 0 \\ a_1 & d_1 & c_1 & ... & 0 \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ ... \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{c_0}{d_0} & 0 & ... & 0 \\ a_1 & d_1 & c_1 & ... & 0 \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} \frac{b_0}{d_0} \\ b_1 \\ ... \end{pmatrix}$$

Proseguendo, chiamando $h_0 = \frac{c_0}{d_0}$ e $p_0 = \frac{b_0}{d_0}$

$$\begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & ... & 0 \\ a_1 - a_1 & d_1 - a_1 h_0 & c_1 & ... & 0 \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ b_1 - a_1 p_0 \\ ... \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & \frac{c_1}{d_1 - a_1 h_0} & ... & 0 \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ \frac{b_1 - a_1 p_0}{d_1 - a_1 h_0} \\ ... \end{pmatrix}$$

A questo punto chiamo $h_1 = \frac{c_1}{d_1 - a_1 h_0}$ e $p_1 = \frac{b_1 - a_1 p_0}{d_1 - a_1 h_0}$:

$$\begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & h_1 & ... & 0 \\ 0 & a_3 - a_3 & d_3 - a_3 h_1 & c_3 & ... \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ b_3 - a_3 p_1 \\ ... \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & h_1 & ... & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{c_3}{d_3 - a_3 h_1} & ... \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \frac{b_3 - a_3 p_1}{d_3 - a_3 h_1} \\ ... \end{pmatrix}$$

A questo punto chiamo $h_3 = \frac{c_3}{d_3 - a_3 h_1}$ e $p_3 = \frac{b_3 - a_3 p_1}{d_3 - a_3 h_1}$ e proseguo, ottengo così le regole:

$$h_i = \frac{c_i}{d_i - a_i h_{i-1}}$$

e

$$p_i = \frac{b_i - a_i p_{i-1}}{d_i - a_i h_{i-1}}$$

da cui ottengo il sistema:

$$\begin{pmatrix} 1 & h_0 & & & & \\ & 1 & h_1 & & & \\ & & ... & & & \\ & & & ... & & \\ & & & & 1 & h_{N-2} \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} F^{j+1} = P$$

ottengo i valori di F_i^{j+1} a partire dall'ultimo $F_{N-1}^{j+1} = p_{N-1}$ con la formula (nell'algoritmo ho impostato $h_{N-1} = 0$)

$$F_i^{j+1} = p_i + h_i F_{i+1}^{j+1}$$

A questo punto ho bisogno di conoscere le condizioni al contorno

1 Condizioni al contorno

In seguito espongo come è possibile adattare alcune condizioni al contorno:

- Dirichlet: Conosco i valori della funzione negli estremi del dominio
- Neumann: Conosco i valori della derivata della funzione negli estremi del dominio
- Robin: Conosco una combinazione lineare tra il valore della funzione e la sua derivata negli estremi del dominio
- Miste: Negli estremi ho tipi differenti di condizioni al contorno

1.1 Dirichlet

Conosco il valore della funzione negli estremi del dominio.

$$F(x,t) = f(x,t) \forall x \in \partial D$$

Assegno a F_0^{j+1} e F_{N-1}^{j+1} il valore noto, e' quindi inutile calcolare la prima e l'ultima riga della matrice $N \times N$ e posso trattare tutto come se la matrice fosse $N-2 \times N-2$, con indici da 1 a $N-2$ con la differenza che devo usare i seguenti valori:

$$b_1^j = ak_1F_0^j + dk_1F_1^j + ck_1F_2^j - a_1F_0^{j+1}$$

$$b_{N-2}^j = ak_1F_{N-3}^j + dk_1F_{N-2}^j + ck_1F_{N-1}^j - c_1F_{N-1}^{j+1}$$

1.2 Neumann

Conosco il valore della derivata negli estremi del dominio.

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x,t) = f(x,t) \forall x \in \partial D$$

La spiegazione e l'esempio per questa risoluzione lo fornisco nel paragrafo dedicato a Robin.

1.3 Robin

Conosco una combinazione lineare tra la derivata e il valore della funzione negli estremi del dominio.

$$s(x,t)\frac{\partial F}{\partial x}(x,t) + r(x,t)F(x,t) = f(x,t) \forall x \in \partial D$$

Un esempio è necessario per poter affrontare queste Condizioni. Prima però una piccola precisazione sulla derivata che devo utilizzare.

Per mantenere la precisione del metodo (Δx^2) non posso usare la definizione della derivata "in avanti", perchè ha una precisione minore (Δx), ma quella centrale, ho quindi bisogno di inventarmi un "nodo fantasma" F_{-1}^{j+1} :

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x(i=0), t(j=j+1)) = \frac{F_1^{j+1} - F_{-1}^{j+1}}{2\Delta x}$$

La condizione è:

$$s(x,t)\frac{\partial F}{\partial x}(x,t) + r(x,t)F(x,t) = f(x,t) \forall x \in \partial D$$

E svolgo il calcolo per $i = 0$:

$$S_0^n \frac{F_1^n - F_{-1}^n}{2\Delta x} + R_0^n F_0^n = f_0^n \to F_{-1}^n = F_1^n + \frac{2}{S_0^n}\Delta x \left(R_0^n F_0^n - f_0^n\right)$$

Parto dalla forma matriciale del problema generico:

$$a_0F_{-1}^{j+1} + d_0F_0^{j+1} + c_0F_1^{j+1} = ak_0F_{-1}^j + dk_0F_0^j + ck_0F_1^j$$

e sostituisco F^n_{-1}:

$$a_0 \left(F_1^{j+1} + \frac{2\Delta x}{S_0^{j+1}} \left(R_0^{j+1} F_0^{j+1} - f_0^{j+1} \right) \right) + d_0 F_0^{j+1} + c_0 F_1^{j+1} = ak_0 \left(F_1^j + \frac{2\Delta x}{S_0^j} \left(R_0^j F_0^j - f_0^j \right) \right) + dk_0 F_0^j + ck_0 F_1^j$$

$$\left(d_0 + 2a_0 \frac{R_0^{j+1}}{S_0^{j+1}} \Delta x \right) F_0^{j+1} + (c_0 + a_0) F_1^{j+1} = \left(dk_0 + 2ak_0 \frac{R_0^j}{S_0^j} \Delta x \right) F_0^j + (ck_0 + ak_0) F_1^j + 2\Delta x \left(a_0 \frac{f_0^{j+1}}{S_0^{j+1}} - ak_0 \frac{f_0^j}{S_0^j} \right)$$

per il calcolo di b_0 andranno usati i seguenti parametri, quelli senza apice sono quelli originali:

$$\begin{array}{ll} a'_0 = 0 & ak'_0 = 0 \\ d'_0 = d_0 + 2a_0 \frac{R_0^{j+1}}{S_0^{j+1}} \Delta x & dk'_0 = dk_0 + 2ak_0 \frac{R_0^j}{S_0^j} \Delta x \\ c'_0 = a_0 + c_0 & ck'_0 = ak_0 + ck_0 \end{array}$$

$$b_0 = dk'_0 F_0^j + ck'_0 F_1^j + 2\Delta x \left(a_0 \frac{f_0^{j+1}}{S_0^{j+1}} - ak_0 \frac{f_0^j}{S_0^j} \right)$$

Mentre se la condizione si presenta come ultimo punto del dominio:

$$S^n_{N-1} \frac{F^n_N - F^n_{N-2}}{2\Delta x} + R^n_{N-1} F^n_{N-1} = f^n_{N-1} \rightarrow F^n_N = F^n_{N-2} - \frac{2}{S^n_{N-1}} \Delta x \left(R^n_{N-1} F^n_{N-1} - f^n_{N-1} \right)$$

per il calcolo di b_{N-1} andranno usati i seguenti parametri, quelli senza apice sono quelli originali:

$$\begin{array}{ll} a'_{N-1} = a_{N-1} + c_{N-1} & ak'_{N-1} = ak_{N-1} + ck_{N-1} \\ d'_{N-1} = d_{N-1} - 2c_{N-1} \frac{R_{N-1}^{j+1}}{S_{N-1}^{j+1}} \Delta x & dk'_{N-1} = dk_{N-1} - 2ck_{N-1} \frac{R_{N-1}^j}{S_{N-1}^j} \Delta x \\ c'_{N-1} = 0 & ck'_{N-1} = 0 \end{array}$$

$$b_{N-1} = ak'_{N-1} F_{N-2}^j + dk'_{N-1} F_{N-1}^j - 2\Delta x \left(c_0 \frac{f_0^{j+1}}{S_0^{j+1}} - ck_0 \frac{f_0^j}{S_0^j} \right)$$

Con $r = 0$ ottengo le CC di Neumann.