1 Introduzione: matematica

1.1 Derivate numeriche

Per prima cosa inizio con un piccolo elenco di derivate numeriche, usando il metodo delle differenze numeriche:

La derivata prima (in avanti) è:

$$\frac{\partial F}{\partial x}(a) \simeq \frac{F(a+h) - F(a)}{h} + O(h) \tag{1.1.1}$$

Ma la sua precisione è al primo ordine, per cui utilizzerò la versione cosiddetta "centrale":

$$\frac{\partial F}{\partial x}(a) \simeq \frac{F(a+h) - F(a-h)}{2 * h} + O(h^2) \tag{1.1.2}$$

Per la derivata seconda il discorso e' simile ma in entrambi i casi la precisione è sempre al secondo ordine:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(a) \simeq \frac{\frac{\partial F}{\partial x}(a+h) - \frac{\partial F}{\partial x}(a)}{h} = \frac{F(a+2h) + F(a) - 2F(a+h)}{h^2} + O(h^2) \tag{1.1.3}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(a) \simeq \frac{F(a+h) + F(a-h) - 2F(a)}{h^2} + O(h^2) \tag{1.1.4}$$

1.2 Equazione del calore

Per prima cosa parto dall'equazione del calore

$$\frac{\partial T}{\partial t} = K\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{1.2.1}$$ {eq:cal

Per calcolare l'equazione come prima cosa calcoliamo le derivate:

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x,t) = \frac{T(x, t+\Delta t) - T(x,t)}{\Delta t} \tag{1.2.2}$$

e

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x,t) = \frac{T(x+\Delta x, t) + T(x-\Delta x, t) - 2T(x,t)}{\Delta x^2} \tag{1.2.3}$$

Per prima cosa eguaglio le derivate (ma devo ricordare che la risoluzione che si avrebbe precisione Δx^2 nello spazio e Δt nel tempo):

$$T(x, t+\Delta t) = k\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(T(x+\Delta x, t) + T(x-\Delta x, t) - 2T(x,t)\right) + T(x,t) \tag{1.2.4}$$

e andando avanti:

$$\frac{T(x, t+\Delta t) - T(x,t)}{\Delta t} = k\frac{T(x+\Delta x, t) + T(x-\Delta x, t) - 2T(x,t)}{\Delta x^2} \tag{1.2.5}$$

A questo punto calcolo ogni punto conoscendo i tre del passo precedente, ma non aproffondirò la cosa.

Oppure posso mettere ugualiare con la derivata spaziale all'istante sucessivo:

$$\frac{T(x, t+\Delta t) - T(x,t)}{\Delta t} = k\frac{T(x+\Delta x, t+\Delta t) + T(x-\Delta x, t+\Delta t) - 2T(x,t+\Delta t)}{\Delta x^2} \tag{1.2.6}$$

proseguo:

$$T(x, t+\Delta t) - k\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(T(x+\Delta x, t+\Delta t) + T(x-\Delta x, t+\Delta t) - 2T(x,t+\Delta t)\right) = T(x,t) \tag{1.2.7}$$

Anche in questo caso non approfondisco, preferisco ricavare il metodo di Crank-Nicolson per poi generalizzarlo e descriverne l'algoritmo utilizzato per la risoluzione dell'equazione:

1.3 Un'esempio di come ricavare il metodo di Crank Nicolson: l'equazione del calore

Innanzitutto utilizzamo la definizione centrale della derivata prima in modo da avere una precisione di Δt^2 anche per quanto riguarda il tempo, ma la calcolo in $t + \Delta t/2$ con incremento Δt:

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t + \Delta t/2) \simeq \frac{T(x, t + \Delta t/2 + \Delta t/2) - T(x, t - \Delta t/2 + \Delta t/2)}{2 * \Delta t/2} = \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} \tag{1.3.1}$$

Per lo spazio utilizziamo le derivate calcolate negli esempi precedenti. A questo punto abbiamo $\frac{\partial T}{\partial t}(x, t + \Delta t/2)$, $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t)$ e $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t + \Delta t)$ per rispettare l'equazione facciamo la media delle due derivate spaziali ai tempi t e $t + \Delta t$.

$$\begin{aligned}\frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} = \frac{K}{2}\Bigg(&\frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2T(x, t)}{\Delta x^2} \\ &+ \frac{T(x + \Delta x, t + \Delta t) + T(x - \Delta x, t + \Delta t) - 2T(x, t + \Delta t)}{\Delta x^2}\Bigg)\end{aligned} \tag{1.3.2}$$

{eq:Hea

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

$$\left(\frac{2}{\eta} + 2\right) T(x, t + \Delta t) - T(x + \Delta x, t + \Delta t) - T(x - \Delta x, t + \Delta t) = \left(\frac{2}{\eta} - 2\right) T(x, t) + T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) \tag{1.3.3}$$

Per ogni istante di tempo ho una matrice tridiagonale per il passo temporale che conosco e per quello successivo. In subsection 2.2 descriverò come si risolve una di queste matrici.

2 Costruzione dell'algoritmo

2.1 Ottenere il sistema

Ho fatto un esempio col l'equazione del calore. Prima di procedere alla spiegazione su come si semplifica e si risolve un sistema di equazioni riconducibile ad una matrice tridiagonale spiegherò come condurre la PDE più generale ad un sistema del genere.

Partendo da una generica equazione di secondo ordine:

$$\partial_t F = D_2 \partial_x^2 F + D_1 \partial_x F + V(x, t)F + U(x, t) \tag{2.1.1}$$

{eq:gen

Il coefficiente della derivata temporale è ignorato perché è incluso negli altri coefficienti, ovviamente D_2, il coefficiente della derivata seconda spaziale non deve essere mai uguale a zero! Inoltre preferisco lasciare D_1 e D_2 come costanti nel tempo e nello spazio, e lascio la dipendenza temporale e spaziale a V e U, che possono essere costanti a loro volta.

In seguito indicherò la il passo nello spazio a pedice con i e quello nel tempo in apice con j. Discretizzando l'equazione ottengo quindi (ho mantenuto la definizione di derivata centrale anche per quella prima spaziale in modo da mantenere la precisione):

$$\begin{aligned}\frac{F_i^{j+1} - F_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{2}\Bigg(&D_2\frac{F_{i+1}^j + F_{i-1}^j - 2F_i^j}{\Delta x^2} + D_1\frac{F_{i+1}^j - F_{i-1}^j}{2\Delta x} + F_i^j V_i^j + U_i^j + \\ &D_2\frac{F_{i+1}^{j+1} + F_{i-1}^{j+1} - 2F_i^{j+1}}{\Delta x^2} + D_1\frac{F_{i+1}^{j+1} - F_{i-1}^{j+1}}{2\Delta x} + F_i^{j+1}V_i^{j+1} + U_i^{j+1}\Bigg)\end{aligned} \tag{2.1.2}$$

Salto i passaggi e indico con $\eta = \frac{D_2 \Delta t}{\Delta x^2}$ posso scrivere:

$$\begin{aligned}&\left(-\eta + D_1\frac{\Delta t}{2\Delta x}\right) F_{i-1}^{j+1} + \left(2 + 2\eta - \Delta t V_i^{j+1}\right) F_i^{j+1} + \left(-\eta - D_1\frac{\Delta t}{2\Delta x}\right) F_{i+1}^{j+1} - \Delta t U_i^{j+1} = \\ &\left(\eta - D_1\frac{\Delta t}{2\Delta x}\right) F_{i-1}^j + \left(2 - 2\eta + \Delta t V_i^j\right) F_i^j + \left(\eta + D_1\frac{\Delta t}{2\Delta x}\right) F_{i+1}^j + \Delta t U_i^j\end{aligned} \tag{2.1.3}$$

Per rendere più chiara spiegazione e risoluzione della matrice tridiagonale riassumo l'equazione precedente in:

$$\begin{aligned} a_i^j &= -1 + \tfrac{D_1}{D_2}\tfrac{\Delta x}{2} & ak_i^j &= 1 - \tfrac{D_1}{D_2}\tfrac{\Delta x}{2} & &\text{parametri dei } (F_{i-1}^*) \\ d_i^j &= \tfrac{1}{\eta}\left(2 - \Delta t V_i^{j+1}\right) + 2 & dk_i^j &= \tfrac{1}{\eta}\left(2 + \Delta t V_i^j\right) - 2 & &\text{parametri dei } (F_i^*) \\ c_i^j &= -1 - \tfrac{D_1}{D_2}\tfrac{\Delta x}{2} & ck_i^j &= 1 + \tfrac{D_1}{D_2}\tfrac{\Delta x}{2} & &\text{parametri dei } (F_{i+1}^*) \\ e_i^j &= -\tfrac{\Delta x^2}{D_2}U_i^{j+1} & ek_i^j &= \tfrac{\Delta x^2}{D_2}U_i^j & &\text{funzioni esterne} \end{aligned} \tag{2.1.4}$$

{eq:par

2.2 La matrice Tridiagonale: soluzione

Per ogni istante di tempo j ho un sistema di N equazioni nella forma:

$$a_i F_{i-1}^{j+1} + d_i F_i^{j+1} + c_i F_{i+1}^{j+1} + e_i = ak_i F_{i-1}^{j} + dk_i F_i^{j} + ck_i F_{i+1}^{j} + ek_i \tag{2.2.1}$$

Dove j rappresenta l'istante di tempo che conosco e $j+1$ quello che sto calcolando. La prima cosa da fare è portare nel membro a destra tutte le cose che conosco, dando per scontato che l'unica incognita dell'equazione è la funzione:

$$a_i F_{i-1}^{j+1} + d_i F_i^{j+1} + c_i F_{i+1}^{j+1} = ak_i F_{i-1}^{j} + dk_i F_i^{j} + ck_i F_{i+1}^{j} + ek_i - e_i \tag{2.2.2}$$

Per proseguire con la risoluzione è meglio passare alla rappresentazione matriciale del sistema (rappresento gli N punti rispettando le convenzioni del C, quindi $i = 0 \rightarrow N-1$):

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_0 & & & & \\ a_1 & d_1 & c_1 & & & \\ & & ... & & & \\ & & & a_{N-2} & d_{N-2} & c_{N-2} \\ & & & & a_{N-1} & d_{N-1} \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} dk_0 & ck_0 & & & & \\ ak_1 & dk_1 & ck_1 & & & \\ & & ... & & & \\ & & & ak_{N-2} & dk_{N-2} & ck_{N-2} \\ & & & & ak_{N-1} & dk_{N-1} \end{pmatrix} F^{j} + \begin{pmatrix} ek_0 - e_0 \\ ek_1 - e_1 \\ ... \\ ek_{N-2} - e_{N-2} \\ ek_{N-1} - e_{N-1} \end{pmatrix} \tag{2.2.3}$$

Per comodità compatto il lato conosciuto in un vettore B^j le cui componenti sono:

$$b_i^j = ak_i F_{i-1}^{j} + dk_i F_i^{j} + ck_i F_{i+1}^{j} + ek_i - e_i \tag{2.2.4}$$ {eq:bi}

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_0 & & & & \\ a_1 & d_1 & c_1 & & & \\ & & ... & & & \\ & & & ... & & \\ & & & a_{N-2} & d_{N-2} & c_{N-2} \\ & & & & a_{N-1} & d_{N-1} \end{pmatrix} F^{j+1} = B^j \tag{2.2.5}$$

A questo punto procedo con il trasformare la matrice nella somma di una matrice identità e di una matrice con valori non nulli solo nelle celle sopra alla diagonale, faccio vedere i primi passaggi:

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_0 & 0 & ... & 0 \\ a_1 & d_1 & c_1 & ... & 0 \\ . & . & . & & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ ... \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{c_0}{d_0} & 0 & ... & 0 \\ a_1 & d_1 & c_1 & ... & 0 \\ . & . & . & & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} \frac{b_0}{d_0} \\ b_1 \\ ... \end{pmatrix} \tag{2.2.6}$$

Proseguendo, chiamando $h_0 = \frac{c_0}{d_0}$ e $p_0 = \frac{b_0}{d_0}$, moltiplico la prima riga per a_1 e la sottraggo alla seconda, in modo da eliminare a_1 dalla seconda riga:

$$\begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & ... & 0 \\ a_1 - a_1 & d_1 - a_1 h_0 & c_1 & ... & 0 \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ b_1 - a_1 p_0 \\ ... \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & \frac{c_1}{d_1 - a_1 h_0} & ... & 0 \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ \frac{b_1 - a_1 p_0}{d_1 - a_1 h_0} \\ ... \end{pmatrix} \tag{2.2.7}$$

A questo punto chiamo $h_1 = \frac{c_1}{d_1 - a_1 h_0}$ e $p_1 = \frac{b_1 - a_1 p_0}{d_1 - a_1 h_0}$ e ripeto il ragionamento precedente sottraendo la seconda riga alla terza:

$$\begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & h_1 & ... & 0 \\ 0 & a_3 - a_3 & d_3 - a_3 h_1 & c_3 & ... \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ b_3 - a_3 p_1 \\ ... \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & h_1 & ... & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{c_3}{d_3 - a_3 h_1} & ... \\ & . & . & . & \end{pmatrix} F^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \frac{b_3 - a_3 p_1}{d_3 - a_3 h_1} \\ ... \end{pmatrix} \tag{2.2.8}$$

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:

$$h_i = \frac{c_i}{d_i - a_i h_{i-1}} \tag{2.2.9}$$ {eq:hi}

e

$$p_i = \frac{b_i - a_i p_{i-1}}{d_i - a_i h_{i-1}} \tag{2.2.10}$$ {eq:pi}

A questo punto ho semplificato il sistema:

$$\begin{pmatrix} 1 & h_0 & & & & \\ & 1 & h_1 & & & \\ & & ... & & & \\ & & & ... & & \\ & & & & 1 & h_{N-2} \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} F^{j+1} = P \tag{2.2.11}$$

(2.2.12)

Per risolvere il sistema devo calcolare il vettore delle P per poi ottenere i valori di F^{j+1} a partire dall'ultimo $F_{N-1}^{j+1} = p_{N-1}$ con la formula:

$$F_i^{j+1} = p_i + h_i F_{i+1}^{j+1} \tag{2.2.13}$$

A questo punto ho bisogno di conoscere come trattare le condizioni al contorno.

3 Condizioni al contorno

In seguito espongo come è possibile adottare 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

3.1 Dirichlet

Conosco il valore della funzione negli estremi del dominio.

$$F(x,t) = f(x,t) \forall x \in \partial D \tag{3.1.1}$$

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 $N-2$ per tenere conto delle condizioni devo cambiare i valori:

$$\begin{array}{ll|ll} a'_0 = 0 & ak'_0 = 0 & a'_1 = 0 & ak'_1 = ak_1 \\ d'_0 = 1 & dk'_0 = 0 & d'_1 = d_1 & dk'_1 = dk_1 \\ c'_0 = 0 & ck'_0 = 0 & c'_1 = c_1 & ck'_1 = ck_1 \\ e'_0 = -F_0^{j+1} & ek'_0 = 0 & e'_1 = e_1 + a_1 F_0^{j+1} & ek'_1 = ek_1 \end{array} \tag{3.1.2}$$

Che equivale a scrivere:

$$\begin{array}{lll} b'_0 = F_0^{j+1} & h'_0 = 0 & p'_0 = F_0^{j+1} \\ b'_1 = b_1 - a_1 F_0^{j+1} & h'_1 = \frac{c_1}{d'_1} & p'_1 = \frac{b'_1}{d'_1} \end{array} \tag{3.1.3}$$

Di conseguenza $F_1^{j+1} = p'_1 + h'_1 F_2^{j+1}$ e $F_0^{j+1} = p'_0 + h'_0 F_1^{j+1} = F_0^{j+1}$. Mentre se la condizione si presenta per l'ultimo punto del dominio:

$$\begin{array}{ll|ll} a'N-2 = a_{N-2} & ak'_{N-2} = ak_{N-2} & a'_{N-1} = 0 & ak'_{N-1} = 0 \\ d'_{N-2} = d_{N-2} & dk'_{N-2} = dk_{N-2} & d'_{N-1} = 1 & dk'_{N-1} = 0 \\ c'_{N-2} = 0 & ck'_{N-2} = ck'_{N-2} & c'_{N-1} = 0 & ck'_{N-1} = 0 \\ e'_{N-2} = e_{N-2} + c_{N-2} F_{N-1}^{j+1} & ek'_{N-2} = -F_{N-1}^{j+1} & e'_{N-1} = -F_{N-1}^{j+1} & ek'_{N-1} = 0 \end{array} \tag{3.1.4}$$

Che posso riscrivere:

$$\begin{array}{lll} b'_{N-2} = b_{N-2} - c_{N-2} F_{N-1}^{j+1} & h'_{N-2} = 0 & p'_{N-2} = p_{N-2} \\ b'_{N-1} = F_{N-1}^{j+1} & h'_{N-1} = 0 & p'_{N-1} = F_0^{j+1} \end{array} \tag{3.1.5}$$

e di conseguenza $F_{N-1}^{j+1} = p'_{N-1} = F_{N-1}^{j+1}$ e $F_{N-2}^{j+1} = p'_{N-2} + h'_{N-2} F_{N-1}^{j+1} = p'_{N-2}$.

3.2 Neumann

Conosco il valore della derivata negli estremi del dominio.

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x,t) = f(x,t)\forall x \in \partial D \tag{3.2.1}$$

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

3.3 Robin

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

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x,t) + r(x,t)F(x,t) = f(x,t)\forall x \in \partial D \tag{3.3.1}$$

{eq:Rob

Come prima, per mantenere la precisione del metodo (Δx^2) non posso usare la definizione centrale, ho quindi bisogno di inventarmi un "nodo fantasma" F_{-1}^{j+1} (o F_N^{j+1} se fosse la condizione nell'ultimo punto del dominio):

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x(i=0),t(j=j+1)) = \frac{F_1^{j+1} - F_{-1}^{j+1}}{2\Delta x} \tag{3.3.2}$$

Prendo la (3.3.1) e faccio le adeguate sostituzioni per $i=0$ e al tempo geerico $j=n$:

$$\frac{F_1^n - F_{-1}^n}{2\Delta x} + R_0^n F_0^n = f_0^n \rightarrow F_{-1}^n = F_1^n + 2\Delta x\left(R_0^n F_0^n - f_0^n\right) \tag{3.3.3}$$

Partendo dalla forma matriciale del problema generico:

$$a_0 F_{-1}^{j+1} + d_0 F_0^{j+1} + c_0 F_1^{j+1} + e_0 = ak_0 F_{-1}^j + dk_0 F_0^j + ck_0 F_1^j + ek_0 \tag{3.3.4}$$

e sostituendo i vari F_{-1}^n:

$$a_0\left(F_1^{j+1} + 2\Delta x\left(R_0^{j+1}F_0^{j+1} - f_0^{j+1}\right)\right) + d_0 F_0^{j+1} + c_0 F_1^{j+1} = ak_0\left(F_1^j + 2\Delta x\left(R_0^j F_0^j - f_0^j\right)\right) + dk_0 F_0^j + ck_0 F_1^j \tag{3.3.5}$$

A questo punto raccolgo i termini con lo stesso punto della funzione:

$$\left(d_0 + 2a_0 R_0^{j+1}\Delta x\right)F_0^{j+1} + \left(c_0 + a_0\right)F_1^{j+1} - 2a_0 f_0^{j+1}\Delta x = \left(dk_0 + 2ak_0 R_0^j \Delta x\right)F_0^j + \left(ck_0 + ak_0\right)F_1^j - 2ak_0 f_0^j \Delta x \tag{3.3.6}$$

E quindi i parametri interessati della matrice diventano:

$$\begin{array}{ll} a_0' = 0 & ak_0' = 0 \\ d_0' = d_0 + 2a_0 R_0^{j+1}\Delta x & dk_0' = dk_0 + 2ak_0 R_0^j \Delta x \\ c_0' = a_0 + c_0 & ck_0' = ak_0 + ck_0 \\ e_0' = e_0 - 2a_0 f_0^{j+1}\Delta x & ek_0' = ek_0 - 2ak_0 f_0^j \Delta x \end{array} \tag{3.3.7}$$

Che equivale a scrivere:

$$\begin{array}{l} b_0' = dk_0' F_0^j + ck_0' F_1^j + 2\Delta x\left(a_0 f_0^{j+1} - ak_0 f_0^j\right) \\ h_0' = \frac{c_0'}{d_0'} \\ p_0' = \frac{b_0'}{d_0'} \end{array} \tag{3.3.8}$$

e di conseguenza $F_0^{j+1} = p_0' + h_0' F_1^{j+1}$.

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

$$\frac{F_N^n - F_{N-2}^n}{2\Delta x} + R_{N-1}^n F_{N-1}^n = f_{N-1}^n \rightarrow F_N^n = F_{N-2}^n - 2\Delta x\left(R_{N-1}^n F_{N-1}^n - f_{N-1}^n\right) \tag{3.3.9}$$

Salto i passaggi, molto simili a quelli della spiegazione precedente, per il calcolo di b_{N-1}' andranno usati i seguenti parametri:

$$\begin{array}{ll} a_{N-1}' = a_{N-1} + c_{N-1} & ak_{N-1}' = ak_{N-1} + ck_{N-1} \\ d_{N-1}' = d_{N-1} - 2c_{N-1}R_{N-1}^{j+1}\Delta x & dk_{N-1}' = dk_{N-1} - 2ck_{N-1}R_{N-1}^j \Delta x \\ c_{N-1}' = 0 & ck_{N-1}' = 0 \\ e_{N-1}' = e_{N-1} + c_{N-1}f_{N-1}^{j+1}\Delta x & ek_{N-1}' = ek_{N-1} + ck_{N-1}f_{N-1}^{j+1}\Delta x \end{array} \tag{3.3.10}$$

Che equivale a scrivere:

$$\begin{aligned}
&b_{N-1} = ak'_{N-1}F^j_{N-2} + dk'_{N-1}F^j_{N-1} - 2\Delta x\left(c_{N-1}f^{j+1}_{N-1} - ck_{N-1}f^j_{N-1}\right)\\
&h'_{N-1} = 0\\
&p'_{N-1} = \tfrac{b'_{N-1}+a'_{N-1}p_{N-2}}{d'_{N-1}-a'_{N-1}h_{N-2}}
\end{aligned} \tag{3.3.11}$$

e di conseguenza $F^{j+1}_{N-1} = p'_{N-1}$.

Se faccio in modo di eliminare il coefficiente che moltiplica il valore della funzione (gli R) ottengo le condizioni a contorno di Neuman.

4 applicazione

4.1 Equazione del calore

4.2 Equazione di Schrodinger

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:

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

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:

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

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

$$-\psi^{j+1}_{i-1} + \left(\frac{2-\Delta tV^{j+1}_i}{\eta}+2\right)\psi^{j+1}_i - \psi^{j+1}_{i+1} = \psi^j_{i-1} + \left(\frac{2+\Delta tV^j_i}{\eta}-2\right)\psi^j_i + \psi^j_{i+1}$$