

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

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

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:

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

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

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

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

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

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 coefficiente e' compreso in essa. In poche parole:

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

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

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

Ai fini del prossimo capitolo indico:

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

0.2 La matrice Tridiagonale: soluzione

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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:

$$b_1^j = ak_1 F_0^j + dk_1 F_1^j + ck_1 F_2^j - a_1 F_0^{j+1}$$
$$b_{N-2}^j = ak_{N-2} F_{N-3}^j + dk_{N-2} F_{N-2}^j + ck_{N-2} F_{N-1}^j - c_{N-2} F_{N-1}^{j+1}$$

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.

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

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:

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

E svolgo il calcolo per $i = 0$:

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

Parto dalla forma matriciale del problema generico:

$$a_0 F_{-1}^{j+1} + d_0 F_0^{j+1} + c_0 F_1^{j+1} = ak_0 F_{-1}^j + dk_0 F_0^j + ck_0 F_1^j$$

e sostituisco F_{-1}^n :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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