

# Risoluzione numerica di una PDE diffusiva in un potenziale

Federico Fattorini

22 ottobre 2023

## 1 Introduzione

L'obbiettivo di questa relazione è quello di studiare schemi di integrazione per un'equazione alle derivate parziali che descrive un processo di diffusione all'interno di un potenziale. Tale equazione sarà costituita quindi da un termine diffusivo accompagnato da un termine di avvezione, la cui velocità sarà, in generale, spazialmente dipendente. Per integrarla, verranno utilizzati uno schema completamente implicito e quello di Crank–Nicolson; di entrambi verrà provata la stabilità e verranno implementate condizioni al bordo sia assorbenti che riflettenti. Dopo aver testato il corretto comportamento fisico delle soluzioni numeriche per  $v$  indipendente dal tempo, la dinamica del sistema sarà complicata con l'aggiunta al potenziale di un termine di asimmetria periodico nel tempo, di cui verranno studiati gli effetti sulla soluzione.

L'equazione di interesse è del tipo:

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x}(v(x, t)u(x, t)) + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x, t)$$

dove, al fine di una maggiore comprensione fisica del problema, si può immaginare  $v(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x}U(x, t)$ , mentre per semplicità e per la stabilità fisica del problema verrà assunto  $D$  costante e positivo.

## 2 Metodo implicito

Il primo dei due metodi usati per l'integrazione è quello completamente implicito, che essenzialmente consiste nel calcolare i termini a destra dell'equazione al tempo alla fine dello step temporale e nella risoluzione del conseguente sistema lineare ad ogni passo di integrazione.

Per prima cosa i termini vengono discretizzati nel seguente modo, immaginando il problema su una griglia temporale  $t_n = ndt$  e spaziale  $x_j = x_0 + jdx$  con  $j = 0, 1, \dots, N$  (per  $u_j^n$  l'apice indica lo step temporale, il pedice quello spaziale):

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}u(x, t)|_{x=x_j, t=t_n} &= \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t) \\ \frac{\partial}{\partial x}v(x, t)u(x, t)|_{x=x_j, t=t_n} &= \frac{v(x_{j+1}, t_{n+1})u_{j+1}^{n+1} - v(x_{j-1}, t_{n+1})u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x, t)|_{x=x_j, t=t_n} &= \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)\end{aligned}$$

e mettendo tutto insieme si ottiene:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = -\frac{v(x_{j+1}, t_{n+1})u_{j+1}^{n+1} - v(x_{j-1}, t_{n+1})u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} + D\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2}$$

Di conseguenza, per ciascuno step temporale il problema si riduce alla risoluzione del seguente sistema lineare (le condizioni al bordo saranno trattate successivamente):

$$(1 + 2D\frac{\Delta t}{\Delta x^2})u_j^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta x}(\frac{v(x_{j+1}, t_{n+1})}{2} - \frac{D}{\Delta x})u_{j+1}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x}(\frac{v(x_{j-1}, t_{n+1})}{2} + \frac{D}{\Delta x})u_{j-1}^{n+1} = u_j^n \quad \forall j = 1, 2, \dots, N-1$$

Si tratta quindi di un sistema lineare rappresentato da una matrice tridiagonale, il quale può essere risolto in modo computazionalmente efficiente per trovare il vettore soluzione  $u^{n+1}$ . Si noti che il metodo è corretto al primo ordine temporale e al secondo spaziale.

## 2.1 Analisi di stabilità del metodo implicito

Per l'analisi di stabilità del metodo implicito viene utilizzata la procedura di Von Neumann, che consiste nello studiare indipendentemente ciascun modo di Fourier della soluzione numerica e nel dimostrare che nessuno di questi ha un'ampiezza divergente con l'aumentare degli step di integrazione. In particolare, si suppone  $u_j^n = \xi^n e^{ikj\Delta x}$ , si sostituisce nel particolare metodo in considerazione e si verifica che  $|\xi| \leq 1$ , condizione per la quale il metodo di integrazione risulta stabile. Per semplicità, si considera costante e omogenea  $v$ , nel qual caso il metodo di Von Neumann assicura la stabilità locale del metodo numerico.

Nel problema in considerazione, sostituendo nell'equazione per lo step implicito, si ottiene:

$$(1 + 2D\frac{\Delta t}{\Delta x^2})\xi + \frac{\Delta t}{\Delta x}(\frac{v}{2} - \frac{D}{\Delta x})\xi e^{ik\Delta x} - \frac{\Delta t}{\Delta x}(\frac{v}{2} + \frac{D}{\Delta x})\xi e^{-ik\Delta x} = 1$$

Da cui:

$$\xi = \frac{1 + 4D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} - iv\frac{\Delta t}{\Delta x} \sin k\Delta x}{(1 + 4D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2})^2 + v^2 \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \sin^2 k\Delta x}$$

e infine:

$$|\xi|^2 = \xi\xi^* = \frac{1}{(1 + 4D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2})^2 + v^2 \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \sin^2 k\Delta x} \leq 1$$

Che dimostra quindi che il metodo è incondizionatamente stabile.

## 3 Metodo di Crank–Nicolson

Il metodo completamente implicito fornisce una soluzione incondizionatamente stabile, ma è corretto solo al primo ordine temporale. Per considerare il secondo ordine temporale, si fa uso del metodo di Crank–Nicolson, il quale discretizza i singoli termini spaziali nel seguente modo:

$$\frac{\partial}{\partial x}v(x, t)u(x, t)\Big|_{x=x_j, t=t_n} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{v(x_{j+1}, t_{n+1})u_{j+1}^{n+1} - v(x_{j-1}, t_{n+1})u_{j-1}^{n+1}}{4\Delta x} + \frac{v(x_{j+1}, t_n)u_{j+1}^n - v(x_{j-1}, t_n)u_{j-1}^n}{4\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\
&\quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \Big|_{x=x_j, t=t_n} = \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x^2} + \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{2\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)
\end{aligned}$$

Mettendo le espressioni insieme, e arrangiando i termini in modo da separare i termini calcolati a tempo  $t_n$  e tempo  $t_{n+1}$ , si trova il seguente sistema lineare di equazioni:

$$\begin{aligned}
&(1 + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2})u_j^{n+1} + \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\frac{v(x_{j+1}, t_{n+1})}{2} - \frac{D}{\Delta x})u_{j+1}^{n+1} - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\frac{v(x_{j-1}, t_{n+1})}{2} + \frac{D}{\Delta x})u_{j-1}^{n+1} = \\
&= (1 - D \frac{\Delta t}{\Delta x^2})u_j^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\frac{v(x_{j+1}, t_n)}{2} - \frac{D}{\Delta x})u_{j+1}^n + \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\frac{v(x_{j-1}, t_n)}{2} + \frac{D}{\Delta x})u_{j-1}^n \quad \forall j = 1, 2, \dots, N-1
\end{aligned}$$

Anche in questo caso per ogni passo temporale la soluzione può essere trovata risolvendo un sistema lineare con matrice tridiagonale.

### 3.1 Analisi di stabilità

Per lo studio della stabilità viene utilizzato nuovamente il metodo di Von Neumann. In particolare, sostituendo  $u_j^n = \xi^n e^{ikj\Delta x}$  nell'equazione per lo step temporale, si ottiene:

$$\begin{aligned}
&(1 + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2})\xi + \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\frac{v(x_{j+1}, t_{n+1})}{2} - \frac{D}{\Delta x})\xi e^{ik\Delta x} - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\frac{v(x_{j-1}, t_{n+1})}{2} + \frac{D}{\Delta x})\xi e^{-ik\Delta x} = \\
&= (1 - D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}) - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\frac{v(x_{j+1}, t_n)}{2} - \frac{D}{\Delta x})e^{ik\Delta x} + \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\frac{v(x_{j-1}, t_n)}{2} + \frac{D}{\Delta x})e^{-ik\Delta x}
\end{aligned}$$

Da cui:

$$\xi = \frac{1 - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} - iv \frac{\Delta t}{2\Delta x} \sin k\Delta x}{1 + 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} + iv \frac{\Delta t}{2\Delta x} \sin k\Delta x}$$

Imponendo  $|\xi| \leq 1$  si ottiene:

$$|1 - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} - iv \frac{\Delta t}{2\Delta x} \sin k\Delta x| \leq |1 + 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} + iv \frac{\Delta t}{2\Delta x} \sin k\Delta x|$$

Ovvero:

$$(1 - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2})^2 + v^2 \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} \sin^2 k\Delta x \leq (1 + 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2})^2 + v^2 \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} \sin^2 k\Delta x$$

e infine:

$$(1 - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2})^2 \leq (1 + 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2})^2$$

che risulta verificata per qualsiasi valore di  $\Delta x$  e  $\Delta t$ , dimostrando che anche il metodo di Crank-Nicolson è incondizionatamente stabile per l'equazione di interesse.

## 4 Fattore di amplificazione

Il termine sopra calcolato  $|\xi|$  è anche noto come *fattore di amplificazione*, in quanto esprime di quanto si amplifica o decade la  $u^n$  in ciascun passo di integrazione. Come dimostrato, in entrambi i metodi studiati  $|\xi| \leq 1$ , tuttavia si vuole studiare l'effetto sulle varie lunghezze d'onda spaziali al variare dei parametri; in particolare, i parametri che verranno variati saranno  $\alpha = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$  e  $\beta = v \frac{\Delta t}{\Delta x}$ . Sostituendo nelle espressioni delle sezioni precedenti si trova:

$$|\xi_{impl}| = \frac{1}{\sqrt{(1 + 4\alpha \sin^2 \frac{k\Delta x}{2})^2 + \beta^2 \sin^2 k\Delta x}}$$

$$|\xi_{cn}| = \left| \frac{1 - 2\alpha \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} - i\beta \sin k\Delta x}{1 + 2\alpha \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} + i\beta \sin k\Delta x} \right|$$

Si può dunque graficare le precedenti espressioni al variare dei  $k\Delta x$ , e fissando  $\alpha$  e  $\beta$ . In figura 1 si riportano i fattori di amplificazione per 4 valori di  $\alpha$ , avendo fissato  $\beta = 0.1$ . Si noti che i grafici risultano piuttosto differenti al variare di  $\alpha$ : tale differenza non è dovuta al solo metodo numerico, ma è dovuta anche all'effetto della diffusione fisica espressa da  $D$  e di conseguenza proporzionale ad  $\alpha$ . Si osserva infine come i metodi si comportino in modo equivalente, se non per  $\alpha = 1$ , dove il "dumping" ad alte frequenze spaziali del Crank-Nicolson risulta più marcato.

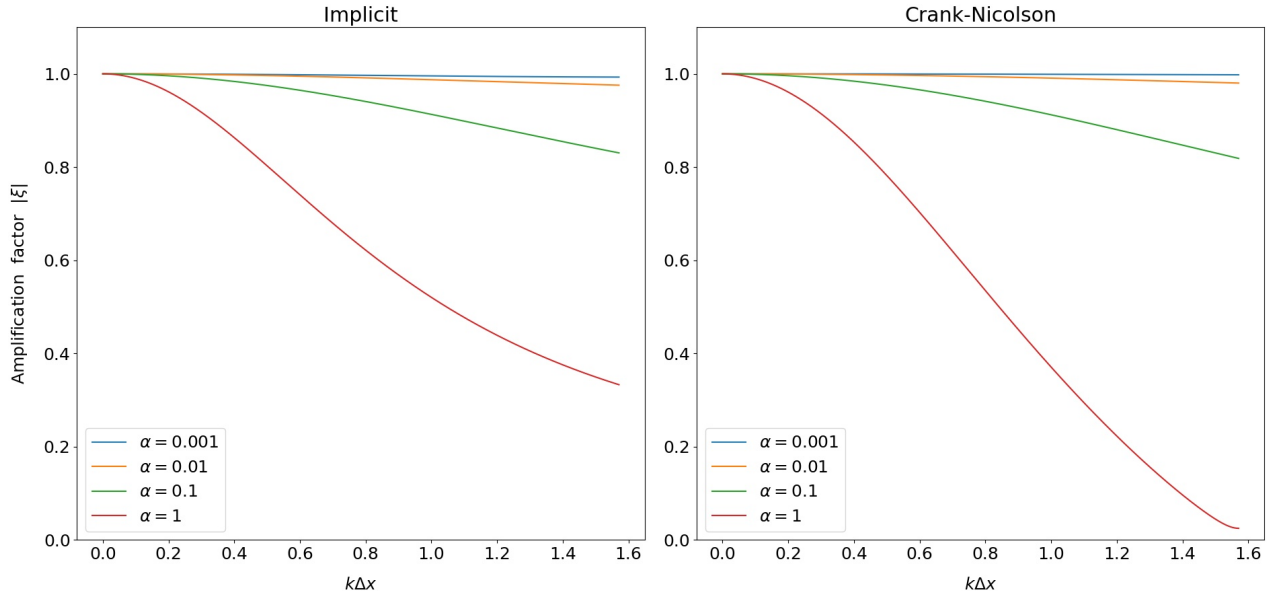


Figura 1: Fattore di amplificazione per i due metodi, al variare di  $\alpha$  e con  $\beta = 0.1$ .

In figura 2 al contrario si fissa  $\alpha = 0.1$  e si varia il parametro  $\beta$ . In questo caso, tale parametro, rappresentando il termine avvevativo, non dovrebbe modificare fisicamente gli effetti diffusivi ed è infatti quello che si osserva per piccoli  $\beta$ . Per  $\beta$  maggiori, al contrario, si osserva una diminuzione maggiore del fattore di amplificazione (soprattutto per il metodo implicito), da attribuire quindi ad effetti numerici. Di conseguenza, nelle simulazioni successive, dove  $v$  sarà dell'ordine di grandezza

dell'unità, si userà un passo di integrazione temporale di un ordine di grandezza inferiore a quello spaziale, al fine di evitare effetti numerici dovuti ad un  $\beta$  troppo grande.

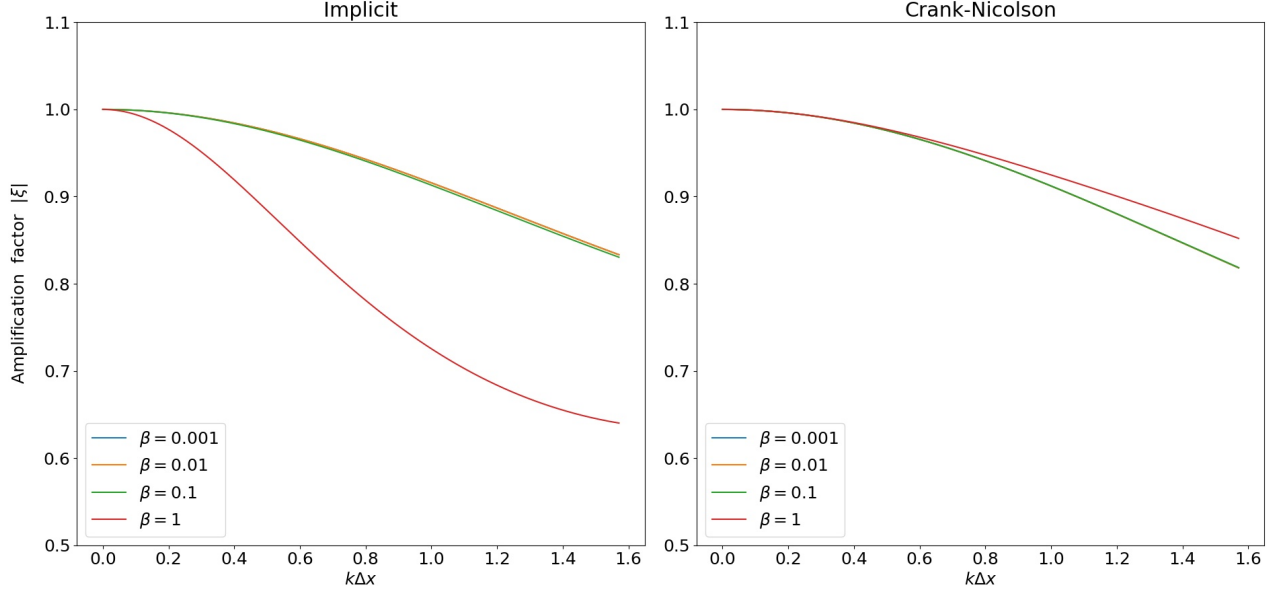


Figura 2: Fattore di amplificazione per i due metodi, al variare di  $\beta$  e con  $\alpha = 0.1$ .

## 5 Condizioni al bordo

In questa relazione si useranno, dove altrimenti non specificato, condizioni al bordo assorbenti. Per entrambi i metodi, esse possono essere imposte sia lasciando fuori dalla risoluzione del sistema lineare i termini  $u_0^{n+1}$ ,  $u_N^{n+1}$  e imponendoli esplicitamente a 0, sia considerandoli all'interno del sistema; nel secondo caso, la matrice tridiagonale va modificata appositamente. In particolare, si impone il primo e l'ultimo elemento della diagonale uguali ad 1, e rispettivamente il primo e ultimo elemento della diagonale superiore e inferiore a 0, insieme ai termini espliciti a destra del sistema, di modo che le equazioni per i termini di bordo impongano l'annullamento di questi nella risoluzione del sistema lineare.

In alternativa alle condizioni assorbenti è possibile imporre quelle riflettenti, che consistono nell'annullamento del flusso  $J(x, t) = v(x, t)u(x, t) - D \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}$  ai bordi. Considerando il secondo ordine spaziale di approssimazione, come fatto in entrambi i metodi di integrazione, tale condizione può essere tradotta in (per semplicità si riporta solo  $x_0$  e il caso implicito):

$$J(x_0, t) = v(x_0, t)u(x_0, t) - D \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=x_0, t=t_n} = v(x_0, t_{n+1})u_0^{n+1} - D \frac{u_1^{n+1} - u_{-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}((\Delta x)^2)$$

da cui le condizioni  $u_{-1}^{n+1} = u_1^{n+1} - \frac{2D}{\Delta x}v(x_0, t_{n+1})u_0^{n+1}$  e  $u_{N+1}^{n+1} = u_{N-1}^{n+1} + \frac{2D}{\Delta x}v(x_N, t_{n+1})u_N^{n+1}$ . Tali uguaglianze possono essere inserite negli step di integrazione per  $j = 0$  e  $j = N$ , che prima non potevano essere calcolati per la mancanza dei valori  $u_{-1}^{n+1}$  e  $u_{N+1}^{n+1}$ . In particolare, per il metodo implicito si ottiene (per semplicità si riporta solo  $j = 0$ ):

$$\left[ 1 + 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{2\Delta t}{D}v(x_0, t_{n+1}) \left( \frac{v(x_0, t_{n+1})}{2} - \frac{D}{\Delta x} \right) \right] u_0^{n+1} +$$

$$+\frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\frac{v(x_1, t_{n+1})}{2} - \frac{v(x_{-1}, t_{n+1})}{2} - 2\frac{D}{\Delta x}\right)u_1^{n+1} = u_0^n$$

Mentre per il Crank-Nicolson:

$$\begin{aligned} \left[1 + D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{\Delta t}{D}v(x_0, t_{n+1})\left(\frac{v(x_0, t_{n+1})}{2} - \frac{D}{\Delta x}\right)\right]u_0^{n+1} + \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left(\frac{v(x_1, t_{n+1})}{2} - \frac{v(x_{-1}, t_{n+1})}{2} - 2\frac{D}{\Delta x}\right)u_1^{n+1} = \\ = \left[1 - D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{D}v(x_0, t_n)\left(\frac{v(x_0, t_n)}{2} - \frac{D}{\Delta x}\right)\right]u_0^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left(\frac{v(x_1, t_n)}{2} - \frac{v(x_{-1}, t_n)}{2} - 2\frac{D}{\Delta x}\right)u_1^n \end{aligned}$$

avendo imposto condizioni riflettenti anche allo step  $n$ .

## 6 Risultati per $v$ omogenea

Si riportano adesso i risultati per alcuni valori di  $D$  e  $v$ . In particolare, si vuole integrare l'equazione considerando  $v$  costante, nel dominio  $x = [-1, 1]$ , per una durata temporale  $T = 1$ . Inoltre, per semplicità si impongono condizioni assorbenti in  $x = -1$  e  $x = 1$ . In figura 3 si riporta l'evoluzione temporale di  $u(x, t)$  per 4 tempi diversi, ottenuta tramite il metodo implicito (a sinistra) e il metodo di Crank-Nicolson (a destra). Come condizione iniziale è stata usata una gaussiana normalizzata e centrata in  $x = 0$ :  $u(x, 0) = \sqrt{\frac{10}{\pi}}e^{-10x^2}$ .

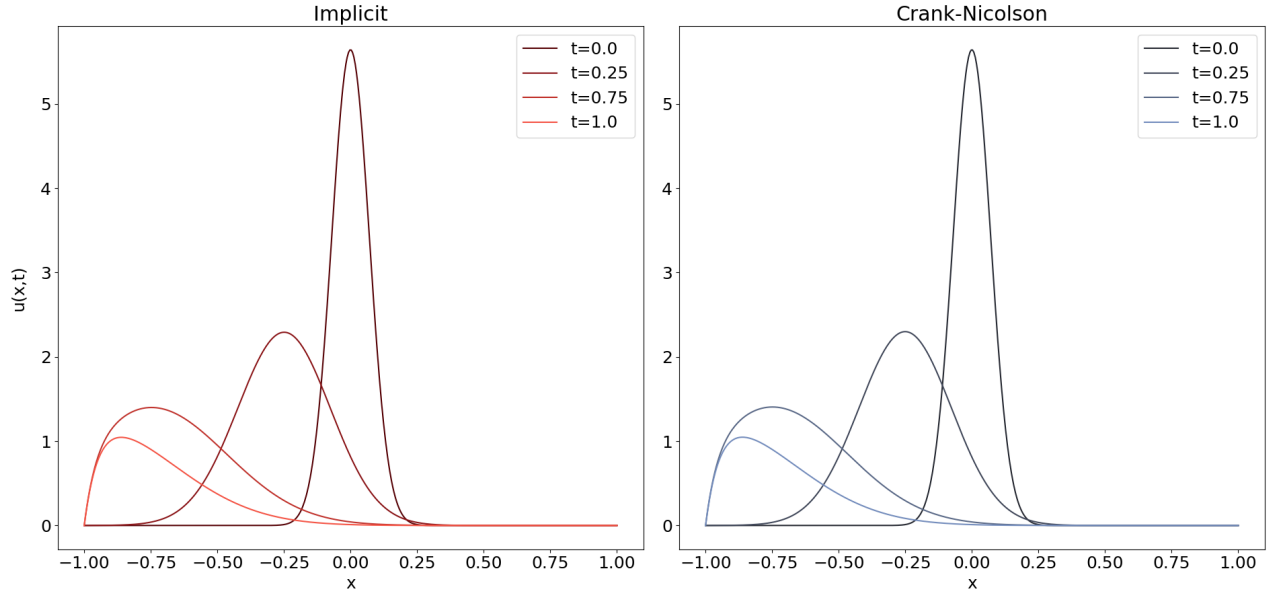


Figura 3: Evoluzione temporale di  $u(x, t)$  a 4 tempi diversi.  $\Delta t = 0.0005$ ,  $\Delta x = 0.005$ ,  $v = 1$ ,  $D = 0.05$ .

Come ci si aspetta dall'interpretazione fisica dell'equazione, la gaussiana aumenta la propria deviazione standard a causa del processo di diffusione, mentre il termine di avvezione la trasla verso valori negativi delle  $x$ . Tale processo può essere osservato chiaramente nel contour plot in figura 4, ottenuta con il metodo implicito, dove il processo di traslazione con velocità costante è

maggiormente evidente. Ovviamente, tornando alla figura 3, l'area totale sotto la curva decresce con il passare del tempo a causa delle condizioni assorbenti, che "dissipano" la  $u(x, t)$ .

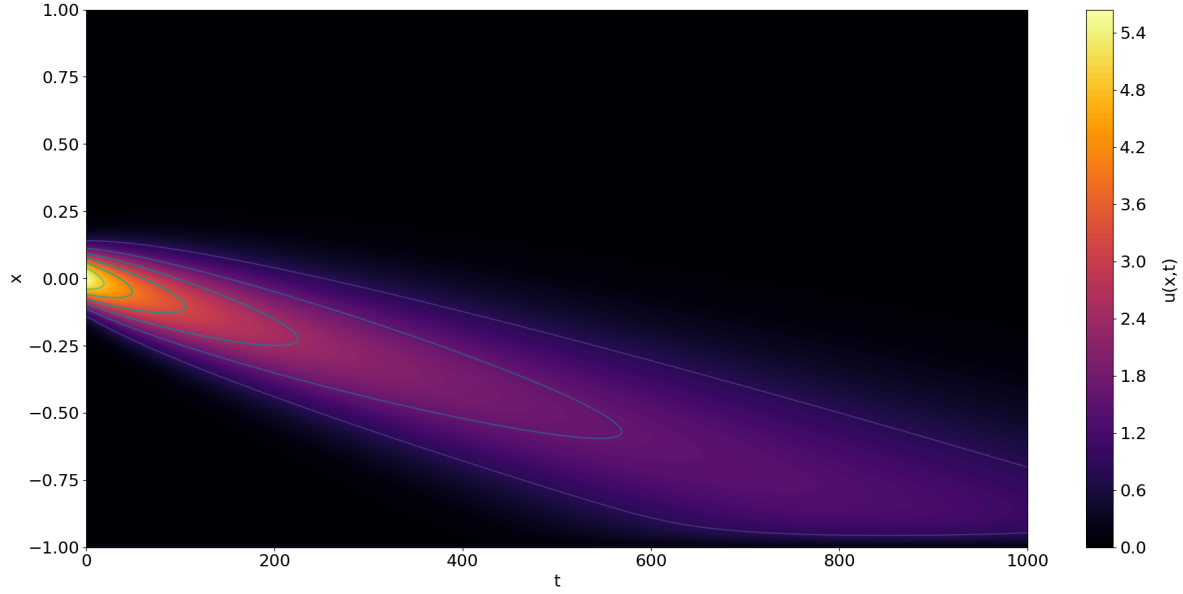


Figura 4: Evoluzione temporale di  $u(x, t)$ , rappresentata tramite countour plot.  $\Delta t = 0.0005$ ,  $\Delta x = 0.005$ ,  $v = 1$ ,  $D = 0.05$ .

Il corretto funzionamento dei metodi di integrazione può essere osservato anche per valori maggiori del parametro di diffusione  $D$ , come si può notare dalla figura 5. In questo caso si nota come la diffusione sia dominate rispetto all'avvezione.

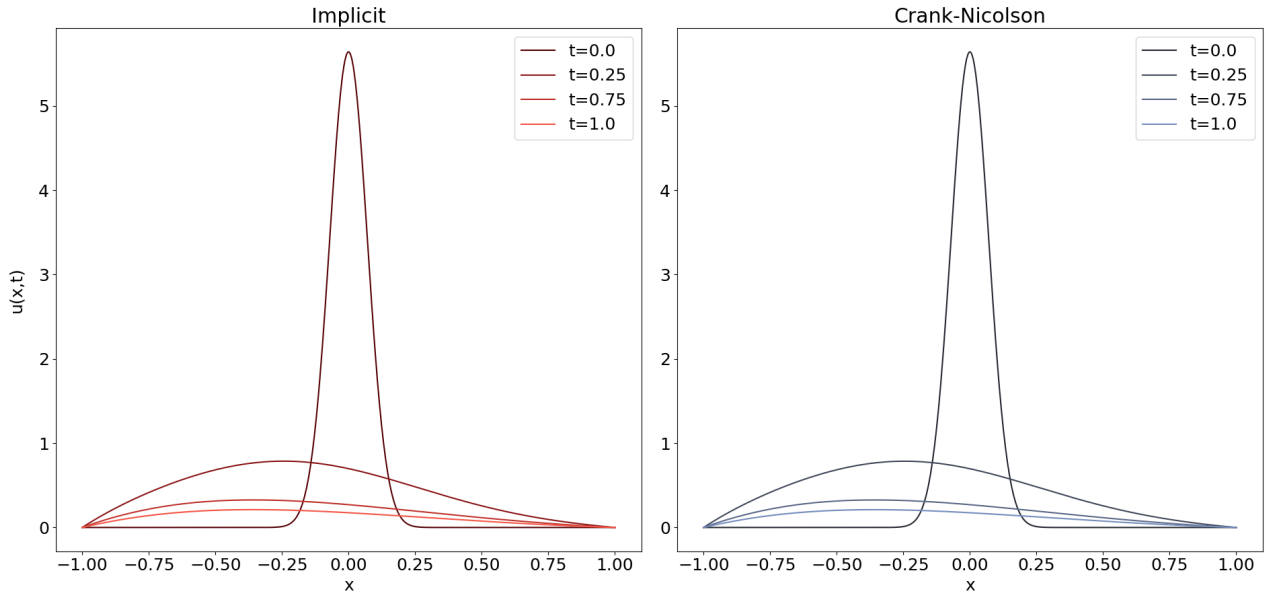


Figura 5: Evoluzione temporale di  $u(x, t)$ , rappresentata tramite countour plot.  $\Delta t = 0.0005$ ,  $\Delta x = 0.005$ ,  $v = -1$ ,  $D = 0.5$ .

Infine si mostra come entrambi i metodi funzionino correttamente per una differente condizione iniziale, un impulso di forma quadrata. In particolare, i modi corrispondenti alle frequenze spaziali maggiori vengono smorzati dagli effetti della diffusione, perdendo l'originale forma ad onda quadra.

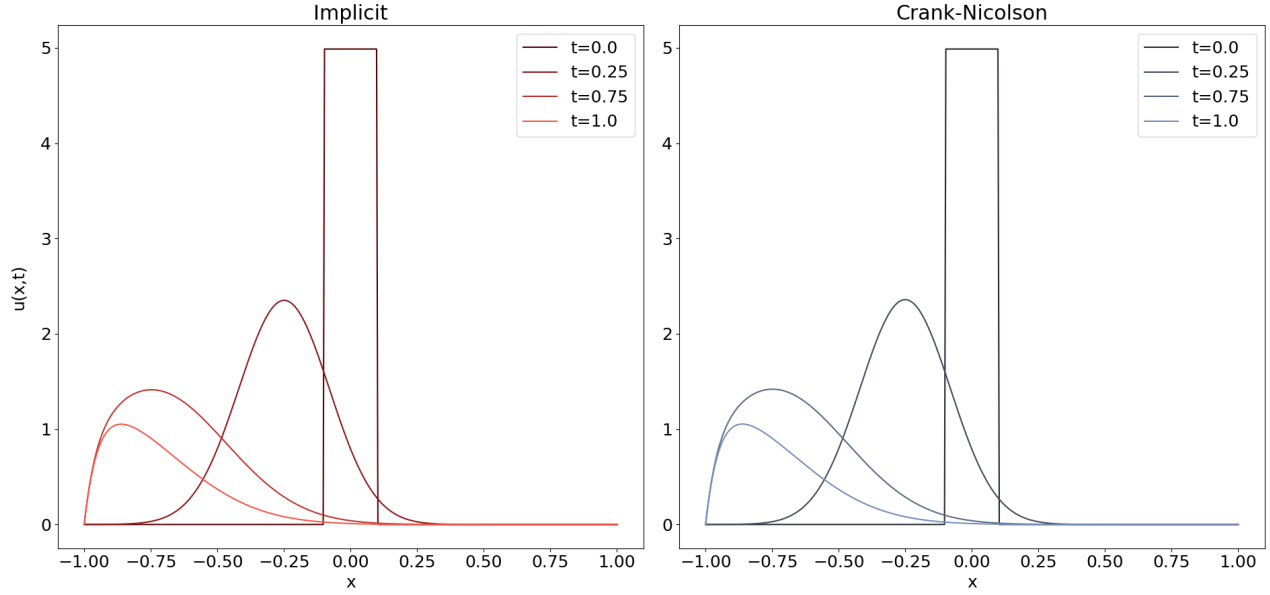


Figura 6: Evoluzione temporale di  $u(x,t)$  a 4 tempi diversi, usando come condizione iniziale un'onda quadra normalizzata.  $\Delta t = 0.0005$ ,  $\Delta x = 0.005$ ,  $v = 1$ ,  $D = 0.05$ .

## 7 Risultati per il potenziale a doppia buca

I metodi di integrazione vengono adesso applicati al caso in cui  $v$  non sia più omogenea, ma derivante da un potenziale con due minimi separati da un massimo locale. In particolare, il potenziale utilizzato sarà  $U(x) = 5(x^4 - \frac{1}{2}x^2)$ , da cui  $v(x) = -5(4x^3 - x)$ .

Per un problema di diffusione all'interno di un potenziale, ci si aspetta un comportamento stazionario non banale, descritto dall'espressione  $u_s(x) = \mathcal{N}e^{(-\frac{U(x)}{D})}$ , con  $\mathcal{N}$  costante di normalizzazione. A fine illustrativo, in figura 7 si riporta la rappresentazione del potenziale considerato con la rispettiva distribuzione stazionaria normalizzata, per  $D = 0.1$ .



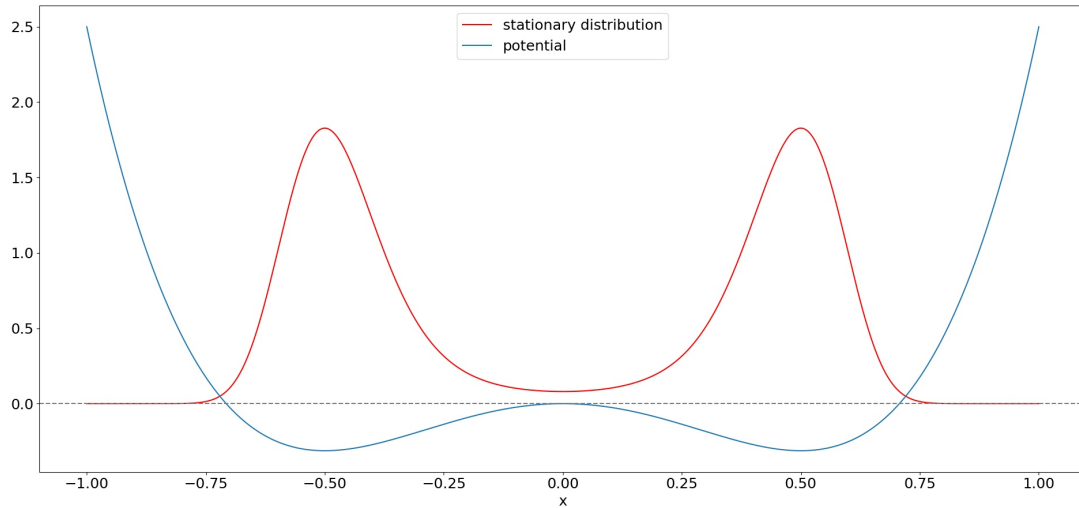


Figura 7: Potenziale considerato e rispettiva distribuzione stazionaria, per  $D = 0.1$ .

Si procede quindi con l'integrazione con la medesima condizione iniziale gaussiana descritta sopra. Si riportano i risultati per entrambi i metodi di integrazione, al variare di  $D$ . Come confronto, si raffigura anche la distribuzione stazionaria sopra citata, anche se essa risulta essere una soluzione di confronto solo per piccoli valori di  $D$ ; infatti, nel calcolo di questa si considera tutto  $\mathcal{R}$  come dominio e non si tiene conto delle condizioni assorbenti in  $x = 1$  e  $x = -1$ , i cui effetti diventano evidenti per valori maggiori di  $D$ , in quanto la diffusione in tal caso prevale sull'effetto confinante del potenziale, come risulta evidente dalla figura 9.

In tutti i casi entrambi i metodi di integrazione forniscono soluzioni in accordo tra di loro e con il processo fisico rappresentato dall'equazione per  $u(x, t)$ : dopo una fase di diffusione iniziale, gli effetti del potenziale determinano la distribuzione stazionaria a due picchi, la cui larghezza dipende dal parametro  $D$ . Nel caso di  $D$  molto grande, gli effetti del potenziale sono meno evidenti, causando una distribuzione più appiattita e una maggiore influenza delle condizioni al bordo assorbenti.

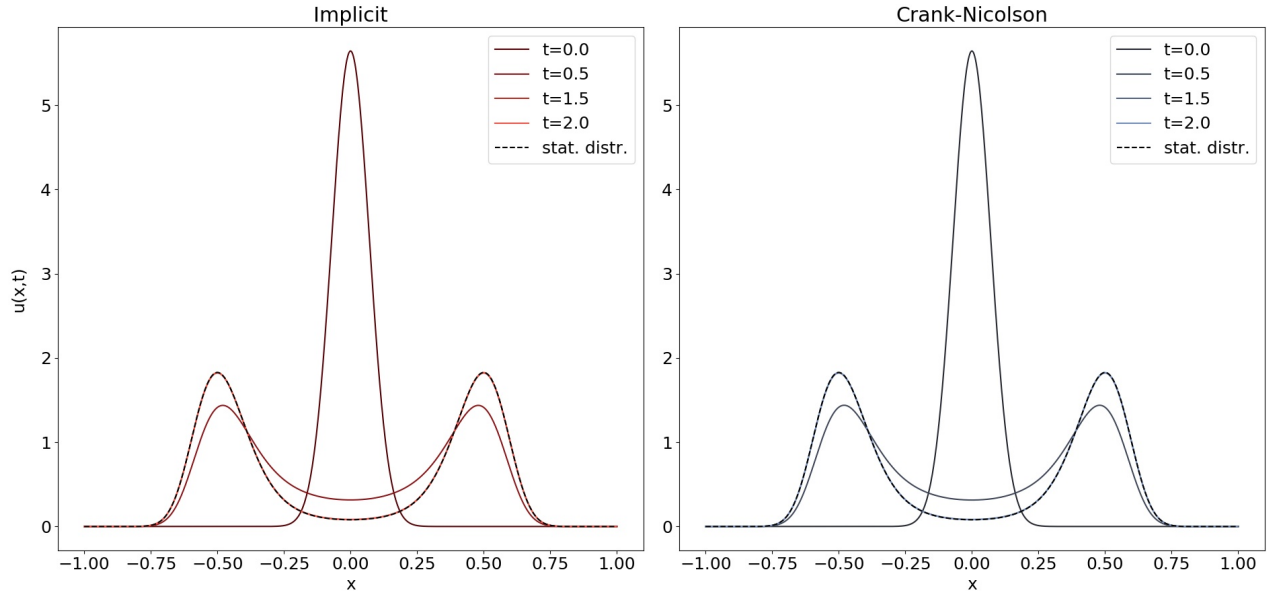


Figura 8: Evoluzione temporale di  $u(x,t)$  a 4 tempi diversi, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.01$ . Si raffigura anche la distribuzione stazionaria analitica.

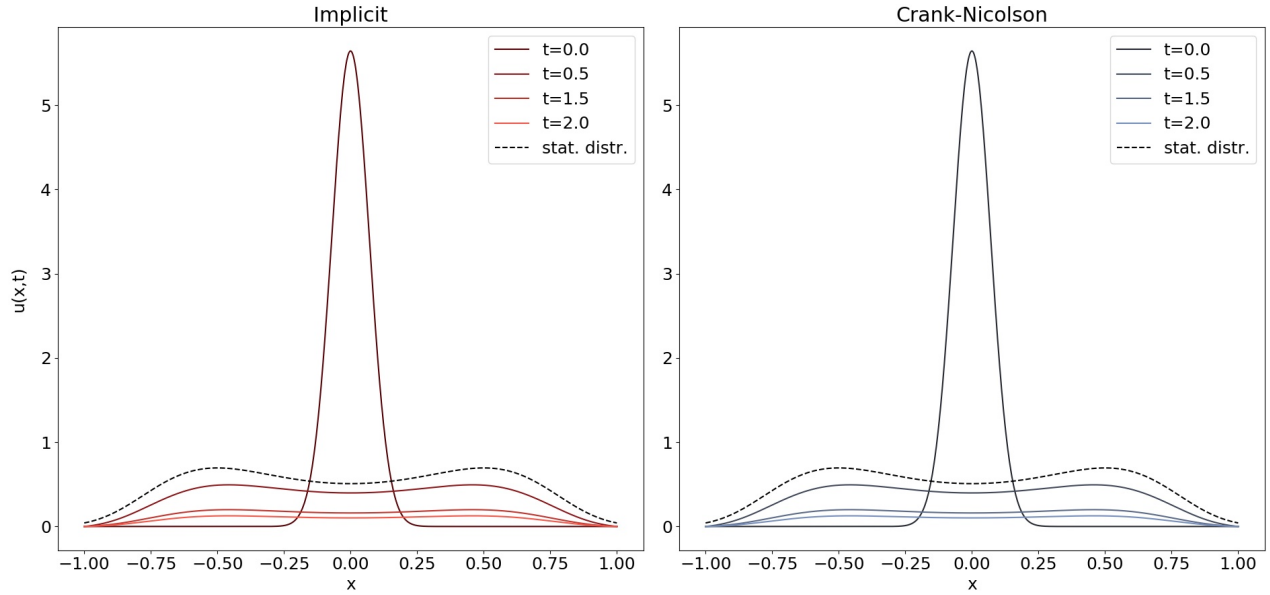


Figura 9: Evoluzione temporale di  $u(x,t)$  a 4 tempi diversi, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 1$ . Si raffigura anche la distribuzione stazionaria analitica.

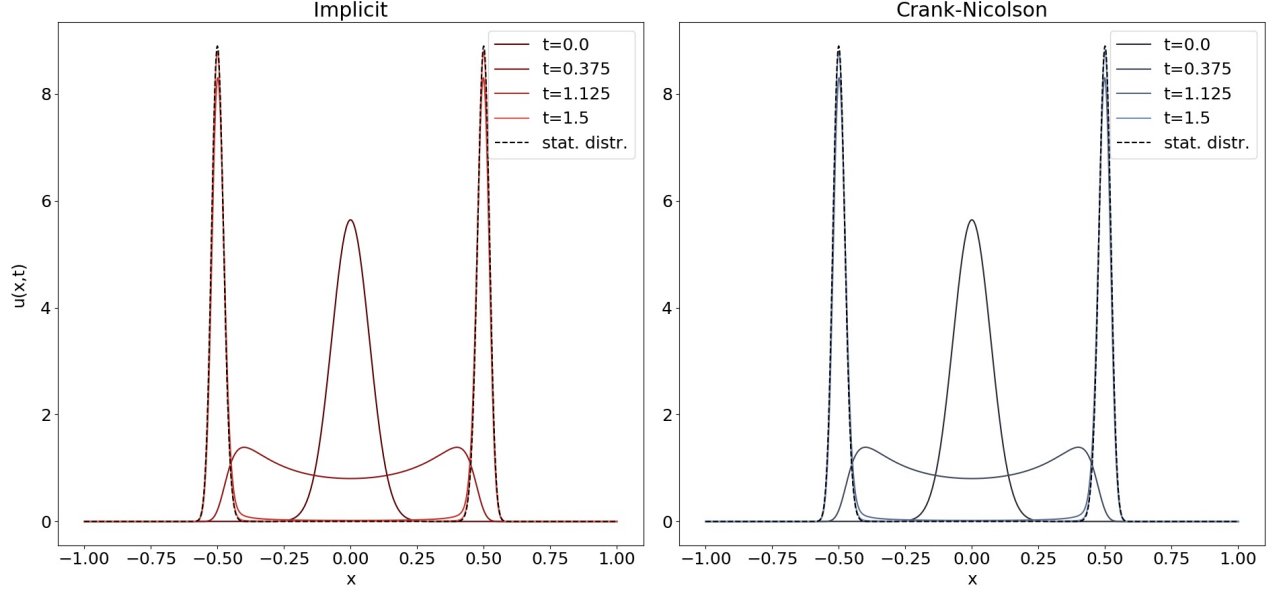


Figura 10: Evoluzione temporale di  $u(x, t)$  a 4 tempi diversi, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.005$ . Si raffigura anche la distribuzione stazionaria analitica.

## 8 Risultati per $v$ dipendente dal tempo

Si decide adesso di studiare il comportamento dell'equazione differenziale in presenza di un potenziale a doppia buca, con perturbazione periodica; in particolare, la velocità viene modificata in  $v(x, t) = -5(4x^3 - x) - \sin 2\pi wt$ , da cui  $U(x, t) = 5(x^4 - \frac{1}{2}x^2) + x \sin 2\pi wt$ . Tale modifica rende quindi il potenziale asimmetrico, diminuendo periodicamente il valore di uno dei due minimi. Si riportano quindi vari risultati al variare di  $D$  e della frequenza della perturbazione. Il metodo di integrazione usato in questa sezione è sempre il metodo implicito, dato che non si sono osservate differenze evidenti tra i due metodi, per i passi di integrazione usati. In figura 11 si riporta l'evoluzione temporale per 4 tempi (espressi in unità di periodo) della  $u(x, t)$  e del potenziale, con lo scopo di mostrare il differente comportamento rispetto al caso costante nel tempo. In particolare, non è ovviamente presente alcuna distribuzione stazionaria.

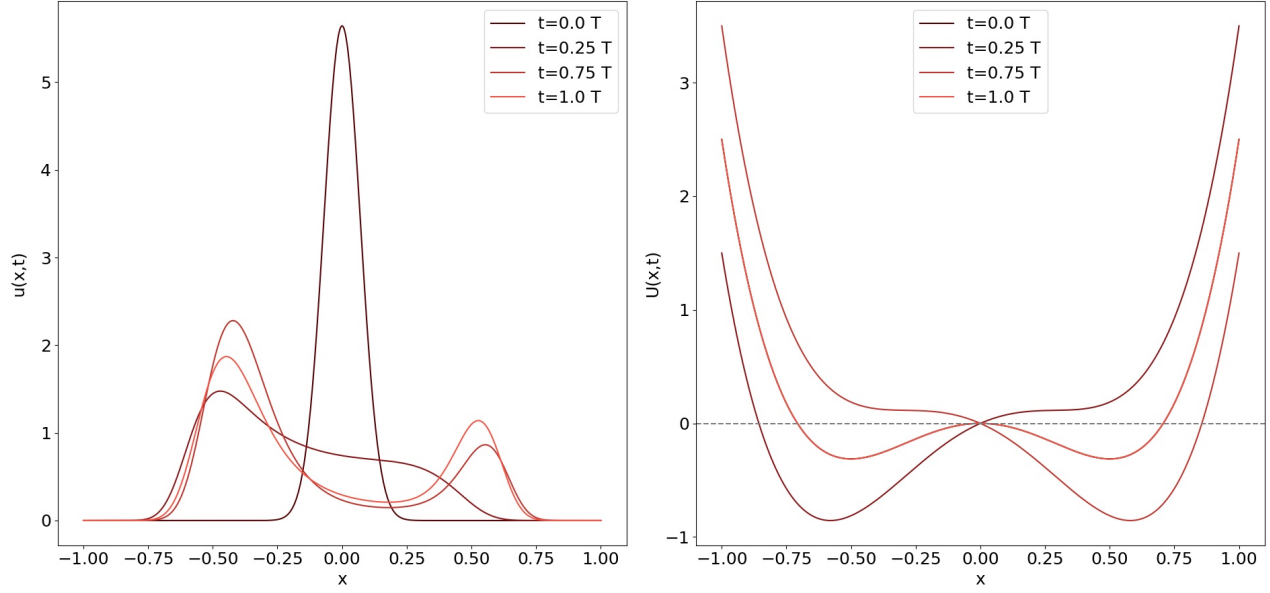


Figura 11: Evoluzione temporale di  $u(x,t)$  e del potenziale a 4 tempi diversi, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.1$ ,  $w = 1$ . I tempi sono espressi in unità di periodo del potenziale.

## 8.1 Dipendenza da $D$

Al fine di una migliore comprensione della dipendenza temporale si riportano diversi contour plot della  $u(x,t)$ , al crescere del parametro  $D$ , rispettivamente nelle figure 12, 13 e 14.

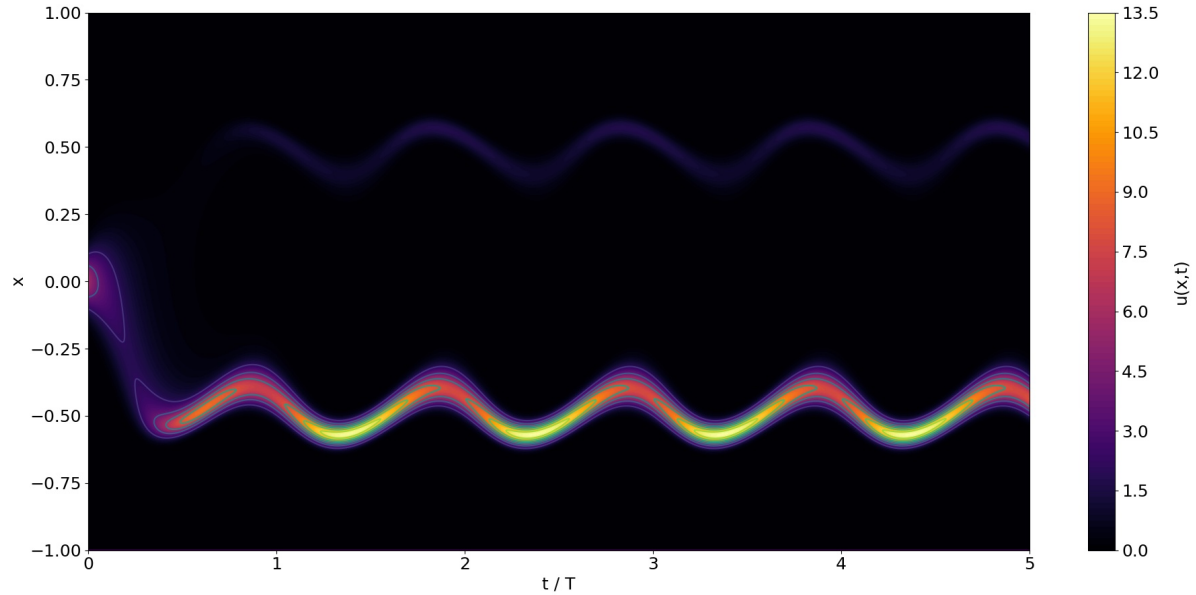


Figura 12: Evoluzione temporale di  $u(x,t)$ , rappresentata tramite contour plot, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.01$ ,  $w = 1$ . I tempi sono espressi in unità di periodo del potenziale.

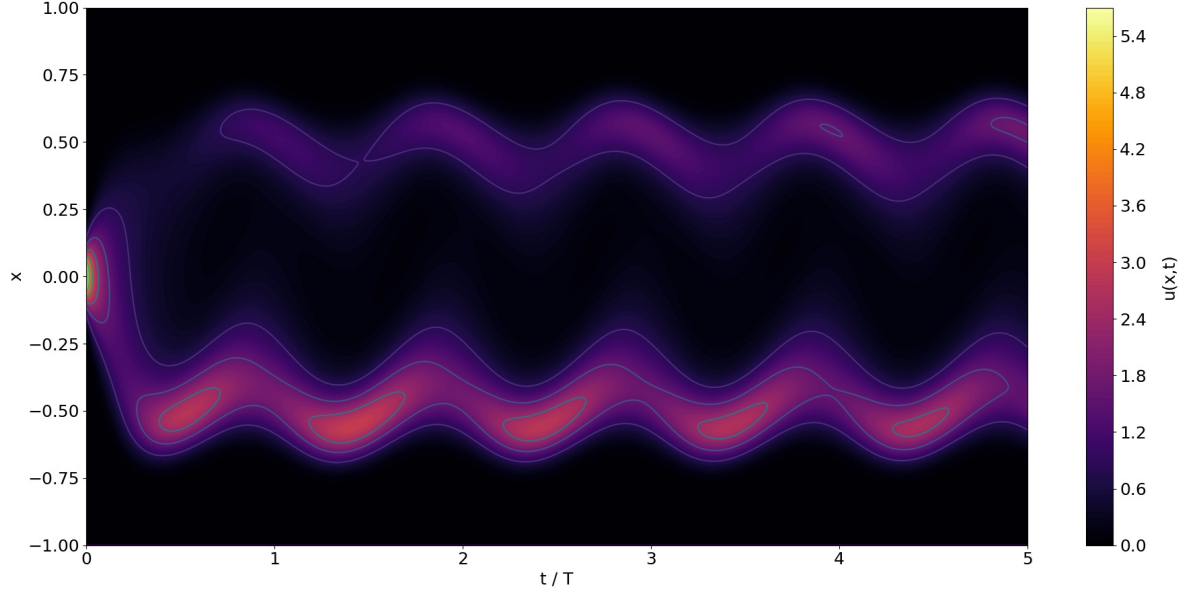


Figura 13: Evoluzione temporale di  $u(x,t)$ , rappresentata tramite contour plot, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.1$ ,  $w = 1$ . I tempi sono espressi in unità di periodo del potenziale.

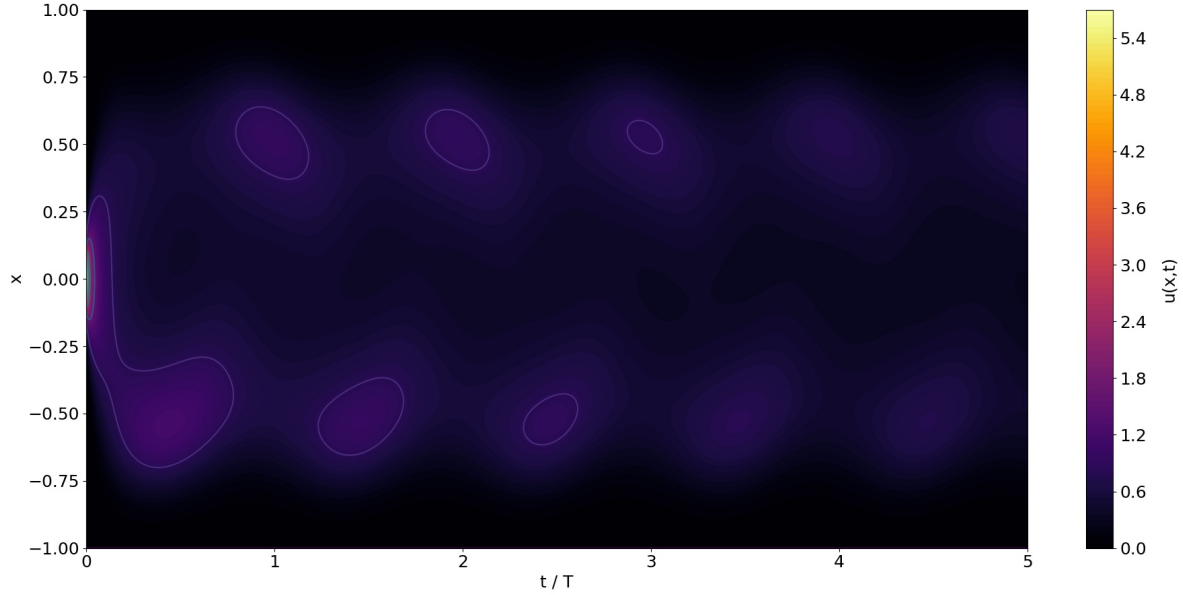


Figura 14: Evoluzione temporale di  $u(x,t)$ , rappresentata tramite contour plot, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.5$ ,  $w = 1$ . I tempi sono espressi in unità di periodo del potenziale.

In tutte le figure risulta evidente la presenza della perturbazione periodica, tuttavia si nota come il comportamento di  $u(x,t)$  sia determinato anche dal valore iniziale del potenziale: essendo la velocità inizialmente negativa, la distribuzione iniziale viene prima spostata verso  $x$  negative, dove però rimane confinata (per i tempi scala considerati) a causa dalla presenza del minimo

del potenziale. Tale comportamento, che causa una asimmetria nell'evoluzione della  $u(x, t)$ , è più evidente per valori minori di  $D$ : ciò è dovuto al fatto che la diffusione ha un effetto minore in tale regime, rendendo più "difficile" per la  $u(x, t)$  superare la barriera di potenziale presente per  $x = 0$  e ribilanciare le distribuzioni nei due minimi. Aumentando  $D$ , al contrario, entrambe le buche del potenziale finiscono per essere popolate in modo simmetrico entro pochi periodi della perturbazione, come evidente dalla figura 14. Tuttavia, in tal caso si osserva anche l'effetto maggiore delle barriere assorbenti.

## 8.2 Dipendenza dalla frequenza della perturbazione

Infine, si riporta nelle figure 15 e in 16 il comportamento di  $u(x, t)$  aumentando il valore della frequenza della perturbazione di uno e due ordini di grandezza, rispettivamente. Si noti come la perturbazione agisca su tempi caratteristici minori rispetto a quelli di diffusione, riducendo l'asimmetria che invece si osservava nei precedenti esempi.

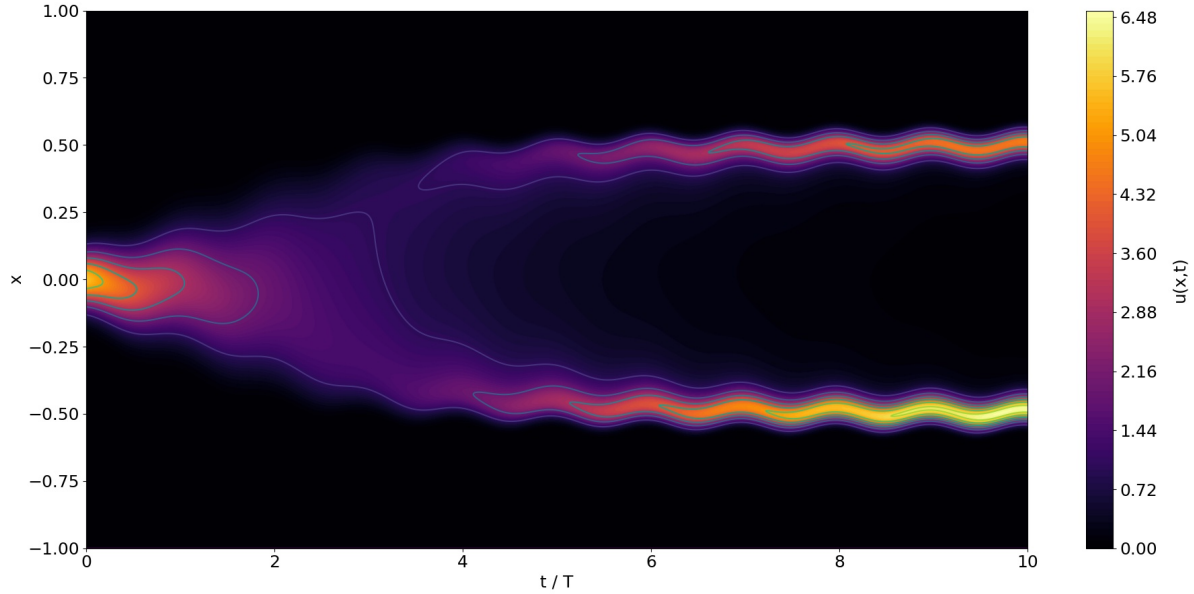


Figura 15: Evoluzione temporale di  $u(x, t)$ , rappresentata tramite contour plot, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.01$ ,  $w = 10$ . I tempi sono espressi in unità di periodo del potenziale.

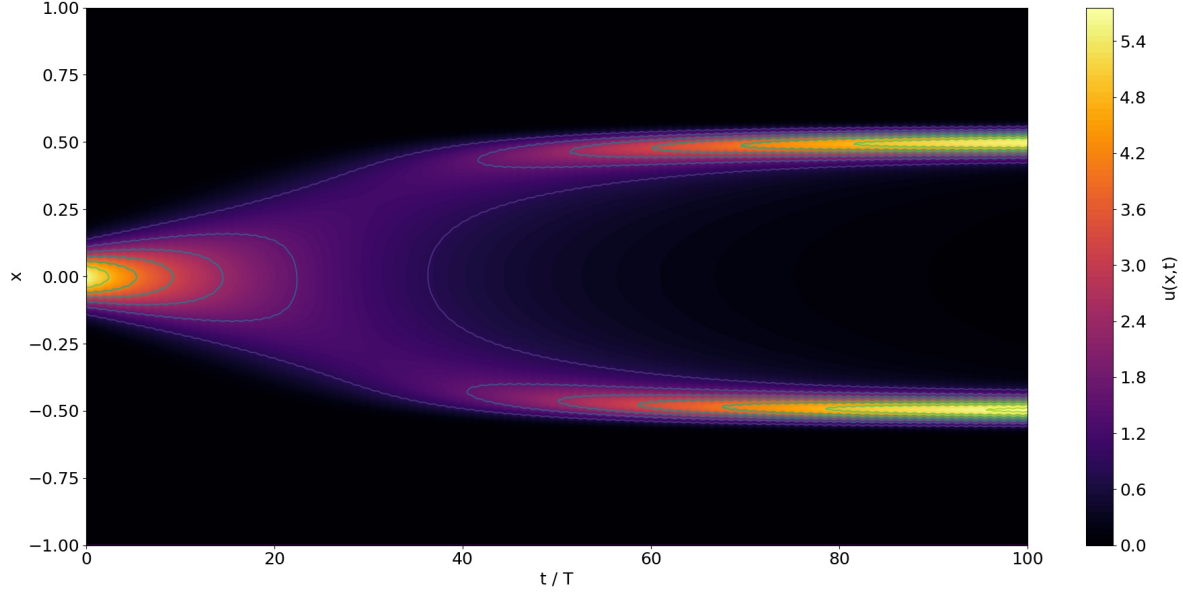


Figura 16: Evoluzione temporale di  $u(x, t)$ , rappresentata tramite contour plot, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.01$ ,  $w = 100$ . I tempi sono espressi in unità di periodo del potenziale.

## 9 Risultati nel caso di condizioni riflettenti

Infine, si valuta l'effetto delle condizioni riflettenti (imposte sempre in  $x = -1$  e  $x = 1$ ) e la corretta implementazione di queste in 3 diverse situazioni:  $v = 0$ ,  $v$  omogenea e  $v$  determinata dal potenziale a doppia buca.

Il caso di più semplice interpretazione è quello in assenza di termine avveztivo: in tal caso l'evoluzione temporale è dettata solo dalla diffusione, la quale è appunto delimitata dalle condizioni riflettenti. Il risultato stazionario quindi, come evidente in figura 17, è quello in cui la  $u(x, t)$  copre uniformemente l'intervallo in considerazione, senza tuttavia annullarsi come nel caso di barriere assorbenti.

Aggiungendo un termine di avvezione con  $v = -1$  costante, il risultato è diverso. Infatti, come visto in precedenza, il termine avveztivo trasla verso valori negativi della  $x$  la gaussiana, fino a quando le condizioni riflettenti non lo contrastano. Il risultato è che la  $u(x, t)$  tende a 'schiacciarsi' sempre di più sul bordo, come evidente in figura 3, assumendo valori sempre maggiori e portando infine ad una divergenza di natura fisica, e di conseguenza numerica.

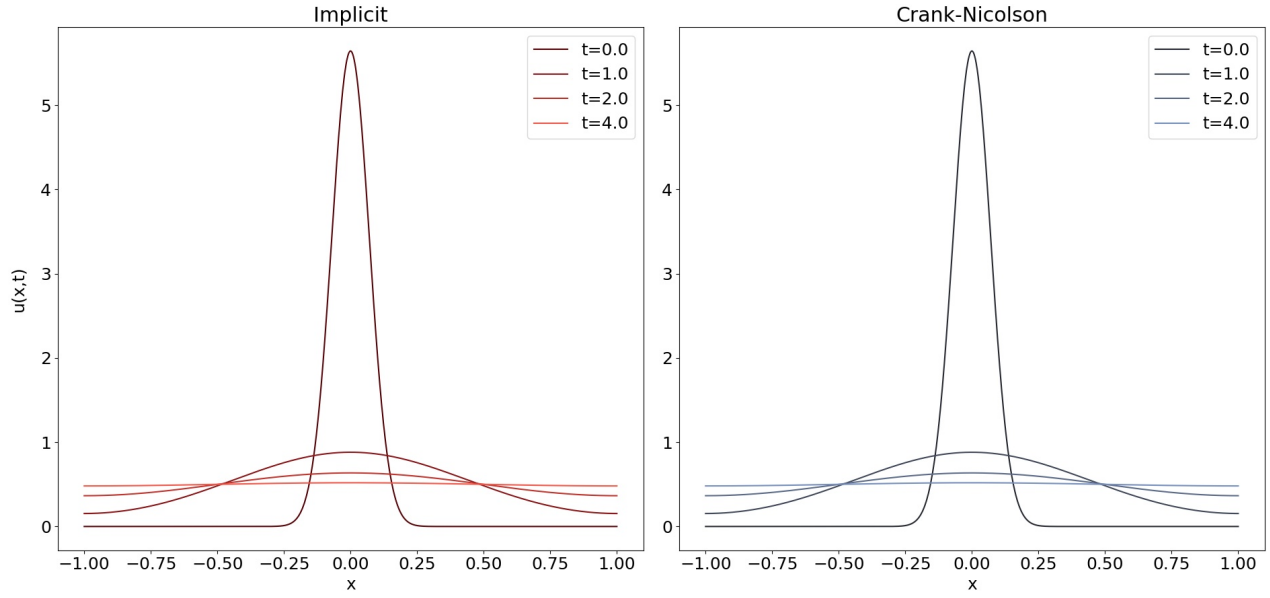


Figura 17: Evoluzione temporale di  $u(x,t)$  per 4 tempi diversi, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata e condizioni al bordo riflettenti.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.1$ .

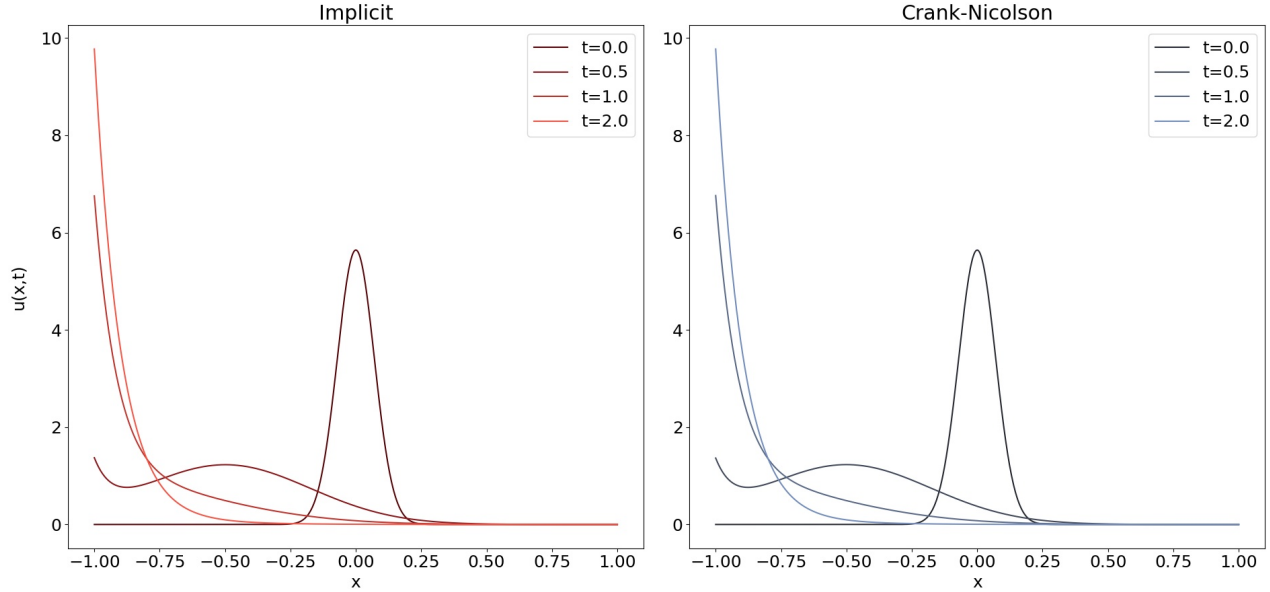


Figura 18: Evoluzione temporale di  $u(x,t)$  per 4 tempi diversi, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata e condizioni al bordo riflettenti.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 0.1$ ,  $v = -1$ .

Infine in figura 19 si riporta anche la soluzione per  $v$  non omogenea e caratterizzata dal potenziale a doppia buca. In questo caso gli effetti dei bordi sono meno evidenti a causa del confinamento del potenziale, anche per  $D$  maggiori, ma si nota che essi influiscono sulla distribuzione stazionaria: questa, nel caso di condizioni riflettenti, risulta avere valori maggiori rispetto a quella con condizioni assorbenti e stessi parametri, per l'ovvio effetto confinante dei bordi.



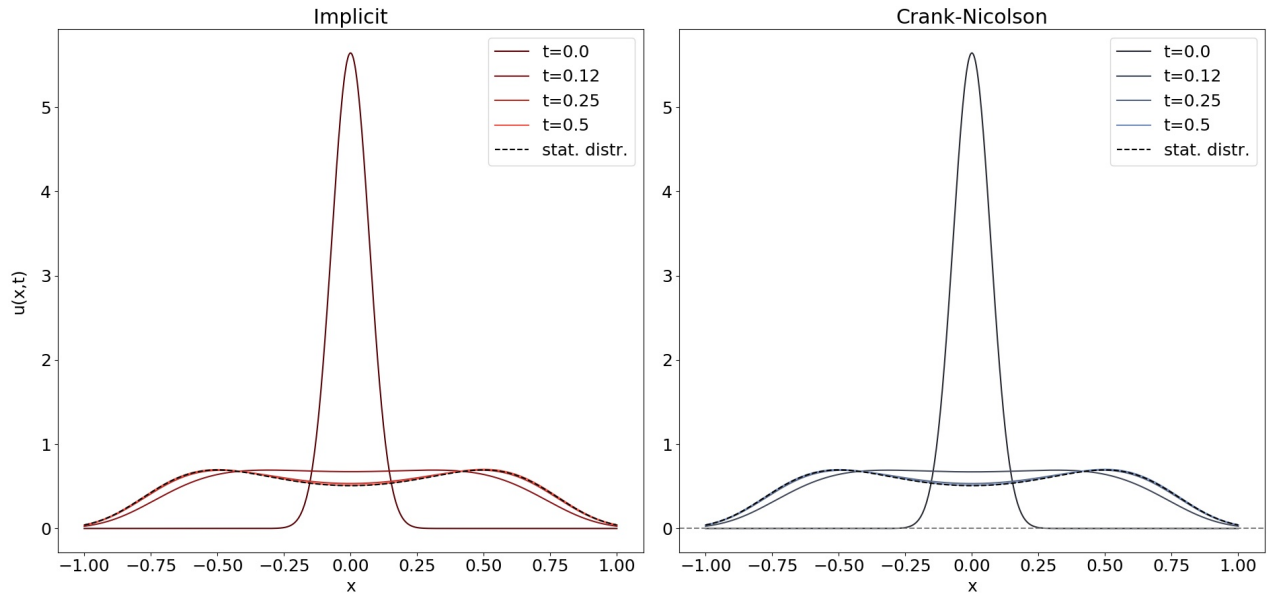


Figura 19: Evoluzione temporale di  $u(x, t)$  per 4 tempi diversi, usando come condizione iniziale una gaussiana normalizzata e condizioni al bordo riflettenti.  $\Delta t = 0.0001$ ,  $\Delta x = 0.001$ ,  $D = 1$ ,  $v = -1$ .

## Riferimenti bibliografici

- [1] *Numerical recipes: the art of scientific computing*. Cambridge University Press, Cambridge, UK; New York, 3rd ed edition, 2007.
- [2] Hans Petter Langtangen and Svein Linge. *Finite Difference Computing with PDEs*. Springer, Jun 2017.
- [3] Randall J LeVeque. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations*. Jan 2007.