Equazione

Discretizzazione con differenze finite per l'equazione

$$\partial_t \varphi(t,x) + V \cdot \nabla \varphi(t,x) = D\, \nabla^2 \varphi(t,x) + a(x)\varphi(t,x) - b\varphi(t,x)^2.$$

Supponiamo $\varphi : [0,T] \times [0,L] \to \mathbb{R}$, quindi $x \in [0,L]$ ha dimensione 1. L'equazione diventa

$$\partial_t \varphi(t,x) + V\, \partial_x \varphi(t,x) = D\, \partial_{xx} \varphi(t,x) + a(x)\varphi(t,x) - b\varphi(t,x)^2.$$

Griglie

Discretizziamo $[0,T]$ con passo Δt e $[0,L]$ con passo Δx. Otteniamo due griglie di punti: $t_0, t_1, \ldots, t_N$, $x_0, x_1, \ldots x_M$. Più precisamente

$$\begin{aligned} t_n &= n\Delta t, \quad n = 0, \ldots, N, \\ x_j &= j\Delta x, \quad j = 0, \ldots, M. \end{aligned}$$

Cerchiamo le seguenti approssimazioni:

$$\varphi_j^n \approx \varphi(t_n, x_j), \qquad n = 0, \ldots, N, \quad j = 0, \ldots, M.$$

Discretizzazione degli operatori differenziali

Applichiamo le seguenti discretizzazioni locali.

- Differenza in avanti per le derivate del primo ordine:

$$\begin{aligned} \partial_t \varphi(t_n, x_j) &\approx \frac{\varphi(t_{n+1}, x_j) - \varphi(t_n, x_j)}{\Delta t}, \\ \partial_x \varphi(t_n, x_j) &\approx \frac{\varphi(t_n, x_{j+1}) - \varphi(t_n, x_j)}{\Delta x}. \end{aligned}$$

- Discretizzazione con stencil $[1, -2, 1]$ per la derivata seconda:

$$\partial_{xx} \varphi(t_n, x_j) \approx \frac{\varphi(t_n, x_{j+1}) - 2\varphi(t_n, x_j) + \varphi(t_n, x_{j-1})}{\Delta x^2}.$$

Schema numerico

Vogliamo ottenere numericamente un'approssimazione $\varphi_j^n \approx \varphi(t_n, x_j)$. Bisogna avere in input i valori $a_j = a(x_j)$.

Con questo schema otteniamo l'equazione

$$\frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n}{\Delta t} + V\frac{\varphi_{j+1}^n - \varphi_j^n}{\Delta x} = D\frac{\varphi_{j+1}^n - 2\varphi_j^n + \varphi_{j-1}^n}{\Delta x^2} + a_j\varphi_j^n - b \cdot (\varphi_j^n)^2,$$

che scritta in maniera esplicita diventa

$$\varphi_j^{n+1} = \left[1 + \Delta t\left(\frac{V}{\Delta x} - 2\frac{D}{\Delta x^2} + a_j\right)\right]\varphi_j^n - \Delta t \cdot b \cdot (\varphi_j^n)^2 \\ + \Delta t\left(-\frac{V}{\Delta x} + \frac{D}{\Delta x^2}\right)\varphi_{j+1}^n + \Delta t\frac{D}{\Delta x^2}\varphi_{j-1}^n.$$

Condizioni al bordo

Per utilizzare lo schema descritto, servono certamente le condizioni iniziali φ_j^0 per $j = 0, \ldots, M$, ossia ci serve la funzione $\varphi^{(0)}(x) = \varphi(0, x)$ assegnata. Inoltre, le formule che descrivono lo schema non sono valide a priori per calcolare φ_0^{n+1} e φ_M^{n+1}, in quanto necessiterebbero dei valori φ_{-1}^{n+1} e φ_{N+1}^{n+1} che non sono definiti.

Condizioni periodiche

Un modo per ovviare questo problema è utilizzare la seguente condizione di periodicità:

$$\varphi(t, 0) = \varphi(t, L) \quad \text{per ogni } t \in [0, T].$$

In questo modo si impone $\varphi_0^n = \varphi_M^n$ per ogni n, e si può quindi usare la convenzione $\varphi_{-1}^n = \varphi_{M-1}^n$ e $\varphi_{M+1}^n = \varphi_1^n$.

Condizioni non periodiche

Le condizioni periodiche potrebbero non essere un buon modello per determinate situazioni fisiche, o potrebbero dare problemi dal punto di vista computazionale. Per evitarle, bisogna assegnare le condizioni iniziali

$$\varphi(t, 0) = \varphi^{(1)}(t), \quad \varphi(t, L) = \varphi^{(2)}(t).$$

In questo modo sono assegnati tutti i valori φ_0^n, φ_M^n per $n = 0, \ldots, N$.

Questioni

- Come scegliere le condizioni al contorno.
- Come inizializzare $a(x)$.
- Come scegliere i passi $\Delta t, \Delta x$ (forse bisogna far sì che $\Delta x << \Delta t$).
- Estendere lo schema al caso 2d.