# Metodi numerici nella risoluzione di problemi concreti

Francesco Gargano

Palermo 20 Dicembre 2016.

# Sommario

# Equazione del calore

- Consideriamo una sbarra di lunghezza $L > 0$ fissata. Vogliamo studiare la distribuzione della temperatura in ogni punto della sbarra nel tempo.
- Indichiamo con $x$ il generico punto della sbarra $(0 \leq x \leq L)$ e con $t \geq 0$ un istante di tempo.
- L'incognita del nostro problema è la funzione $u(t, x)$ che indica la temperatura all'istante $t$ e nella posizione $x$.
- Supponiamo che al tempo $t = 0$ la distribuzione sia

$$u(0, x) = u_0(x), \quad \forall x \in [0, L],$$

e che la sbarra sia sottoposta ad un irraggiamento di calore, dato da una sorgente di calore rappresentata dalla funzione nota $f(t, x)$.

L'equazione che permette di determinare l'evoluzione della distribuzione di temperatura $u(t,x)$ nel tempo e nello spazio è l'equazione alle derivate parziali (PDE):

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2} + f(t,x),$$
$$u(0,x) = u_0(x) \rightarrow \text{ Condizione Iniziale}$$

$+$ CONDIZIONI AL CONTORNO SPAZIALI

- problema di Dirichlet

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2} + f(t,x),\\
u(0,x) = u_0(x),\\
u(t,0) = V_-(t), \quad u(t,L) = V_+(t),
\end{aligned}
$$

con $V_-, V_+$ funzioni assegnate.

- problema di Neumann

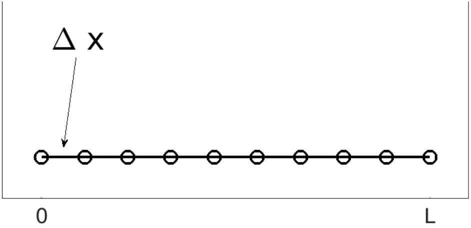
$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2} + f(t,x),\\
u(0,x) = u_0(x),\\
\partial_x u(t,x)_{x=0} = \tilde{V}_-(t), \quad \partial_x u(t,x)_{x=L} = \tilde{V}_+(t),
\end{aligned}
$$

con $\tilde{V}_-, \tilde{V}_+$ funzioni assegnate.

# Metodi numerici per la soluzione

1. Si discretizza nel tempo la funzione $u(t,x)$, ovvero si considerano $M_t$ intervalli temporali di ampiezza $\Delta t = T/M_t$, detto $T$ il tempo finale.
2. Si discretizza nello spazio la funzione $u(t,x)$, ovvero si considerano $M_x$ intervalli spaziali di ampiezza $\Delta x = L/M_x$.
3. La funzione $u$ è così discretizzata :

$$u_j^k := u(k\Delta t, j\Delta x), \quad k = 0, 1, \cdots, M_t, \quad j = 0, 1, \cdots, M_x$$



L'equazione del calore

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

diventa discretizzata

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\Delta t} = D\frac{(u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1})}{\Delta x^2} + f_j^{k+1}$$

1. derivata prima nel tempo viene approssimata tramite la formula discreta

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t}\Big|_{t=k\Delta t, x=j\Delta x} \approx \frac{(u_j^{k+1} - u_j^k)}{\Delta t}$$

2. la derivata seconda nello spazio viene approssimata tramite la formula discreta (**metodo implicito**)

$$\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2}\Big|_{t=k\Delta t, x=j\Delta x} \approx \frac{(u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1})}{\Delta x^2}$$

$$u_{j+1}^{k+1}(-D\frac{\Delta t}{\Delta x^2})+u_j^{k+1}(1+2D\frac{\Delta t}{\Delta x^2})+u_{j-1}^{k+1}(-D\frac{\Delta t}{\Delta x^2}) = u_j^k+\Delta t f_j^{k+1}, \quad \forall k,j$$

$$\Downarrow$$

$$AU^{k+1} = C^K$$

con

$$A = \begin{pmatrix} 1+2D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 0 & 0 & \cdots \\ -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 1+2D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 0 & \cdots \\ 0 & -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 1+2D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & \cdots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$u_{j+1}^{k+1}(-D\frac{\Delta t}{\Delta x^2})+u_j^{k+1}(1+2D\frac{\Delta t}{\Delta x^2})+u_{j-1}^{k+1}(-D\frac{\Delta t}{\Delta x^2}) = u_j^k+\Delta t f_j^{k+1}, \quad \forall k,j$$

$$\Downarrow$$

$$AU^{k+1} = C^K$$

con

$$U^{k+1} = \begin{pmatrix} u_1^{k+1} \\ u_2^{k+1} \\ u_3^{k+1} \\ \vdots \\ u_{M_x-1}^{k+1} \end{pmatrix}; C^k = \begin{pmatrix} u_1^k + \Delta t f_1^{k+1} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} V_-^{k+1} \\ u_2^k + \Delta t f_2^{k+1} \\ u_3^k + \Delta t f_3^{k+1} \\ \vdots \\ u_{M_x-1}^k + \Delta t f_{M_x-1}^{k+1} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} V_+^{k+1} \end{pmatrix}$$

CONDIZIONI AL CONTORNO DI DIRICHLET

$$u(t,0) = V_-(t), \quad u(t,L) = V_+(t).$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 + D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 0 & 0 & \cdots \\ -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 1 + 2D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 0 & \cdots \\ 0 & -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 1 + 2D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & -D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} & \cdots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix};$$

$$C^k = \begin{pmatrix} u_1^k + \Delta t f_1^{k+1} - \frac{D\Delta t}{\Delta x}\tilde{V}_-^{k+1} \\ u_2^k + \Delta t f_2^{k+1} \\ u_3^k + \Delta t f_3^{k+1} \\ \vdots \\ u_{M_x-1}^k + \Delta t f_{M_x-1}^{k+1} - \frac{D\Delta t}{\Delta x}\tilde{V}_+^{k+1} \end{pmatrix}$$

CONDIZIONI AL CONTORNO DI NEUMANN

$$\partial_x u(t,x)_{x=0} = \tilde{V}_-(t), \quad \partial_x u(t,x)_{x=L} = \tilde{V}_+(t).$$

La soluzione numerica dell'equazione del calore si ottiene risolvendo

$$AU^{k+1} = C^K, \quad k = 0, \cdots, M_t$$

problemi di algebra lineare.
I vettori $U^{k+1}$ contengono gli $M_x - 1$ valori interni di della soluzione $u(t,x)$ al tempo $t = (k+1)\Delta t$

# Oscillatore armonico quantistico

Operatore Hamiltoniano per una particella di massa $m$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$$

- $\omega =$ pulsazione dell'oscillatore
- $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ è l'operatore momento
- $\hat{x}$ è l'operatore posizione $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$

# Oscillatore armonico quantistico

Operatore Hamiltoniano per una particella di massa $m$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}$$

- $\omega =$ pulsazione dell'oscillatore
- $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ è l'operatore momento
- $\hat{x}$ è l'operatore posizione $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$

IMPORTANZA DELL'OSCILLATORE ARMONICO:

- Ogni sistema, vicino ad una configurazione di equilibrio stabile, può essere approssimato da un oscillatore armonico

# Equazione di Schrödinger

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x,t)}$$

- la codizione al contorno naturale è quella di Dirichlet omogenea all'infinito:

$$\lim_{x\to\pm\infty}\psi(x,t) = 0$$

- $\psi(x,t)$ è la funzione d'onda quantistica : $\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx$ indica la probabilità di trovare la particella nell'intervallo $[a,b]$ al tempo $t$.

# Stati fondamentali e livelli energetici

Gli stati fondamentali $\psi_n(x)$ soddisfano l'equazione tempo indipendente di Schrödinger

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

dove $E_n$ sono i possibili valori energetici della particella, $n \geq 0$.

- $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4} e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}} H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$
- $H_n(x) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n}(e^{-z^2})$ sono i polinomi di Hermite di grado $n$
- Livelli energetici $E_n = (2n+1)\frac{\hbar\omega}{2}$

# Metodo numerico per l'Equazione di Schrödinger

Assumendo

1. unità di Energia $\hbar\omega$
2. unità di distanza $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$

$$i\frac{(\psi_j^{k+1}-\psi_j^k)}{\Delta t} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\psi_{j+1}^{k+1}-2\psi_j^{k+1}+\psi_{j-1}^{k+1}}{\Delta x^2}\right)+\frac{1}{2}(V_j^{k+1})^2\psi_j^{k+1}$$

$$\Downarrow$$

$$\psi_{j+1}^{k+1}(\frac{\Delta t}{\Delta x^2})+\psi_j^{k+1}(2i-2\frac{\Delta t}{\Delta x^2}-\Delta t V_j^{k+1})+\psi_{j-1}^{k+1}(\frac{\Delta t}{\Delta x^2}) = 2i\psi_j^k, \quad \forall k, j$$

$$\Downarrow$$

$$A\Psi^{k+1} = C^K$$

$$A = \begin{pmatrix} 2i - 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2} - \Delta t V_j^{k+1} & \frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 0 & 0 & \cdots \\ \frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 2i - 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2} - \Delta t V_j^{k+1} & \frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{\Delta t}{\Delta x^2} & 2i - 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2} - \Delta t V_j^{k+1} & \frac{\Delta t}{\Delta x^2} & \cdots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix};$$

$$\Psi^{k+1} = \begin{pmatrix} \psi_1^{k+1} \\ \psi_2^{k+1} \\ \psi_3^{k+1} \\ \vdots \\ \psi_{M_x-1}^{k+1} \end{pmatrix}; C^k = i \begin{pmatrix} \psi_1^k \\ \psi_2^k \\ \psi_3^k \\ \vdots \\ \psi_{M_x-1}^k \end{pmatrix}$$

# Differenti Potenziali

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x)$$

1. Potenziale elastico decentrato $V(x) = -(x - x_0)^2/2$
2. Potenziale centrifugo $V(x) = \tilde{\omega}(x - x_0)^2$
3. Buca di potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_0 \\ k \neq 0, & x > x_0 \end{cases}$$