

Kapitel 1 - Grundlagen

Electronic Transport in Mesoscopic Systems

Conductance from transmission

Zur Berechnung eines Kontaktwiderstandes G_C^{-1} wird ein Strom für eine gegebene Potentialdifferenz $\mu_1 - \mu_2$ in einem ballistischen Leiter (Ein Leiter ohne Streuphänomene) betrachtet. Dabei wird angenommen, dass die Kontakte Reflektionsfrei sind. Dies führt dazu, dass \mathbf{k} -Zustände nur erlaubt sind wenn Elektronen über den linken Kontakt eintreten während $-\mathbf{k}$ -Zustände für am rechten Rand entstehende Elektronen erlaubt sind. Weiter wird angenommen, dass das quasi-Fermi-Level F^+ für die $+\mathbf{k}$ -Zustände immer gleich dem Potential μ_1 ist und ebenso das quasi-Fermi-Level F^- für die $-\mathbf{k}$ -Zustände dem Potential μ_2 gleich.

Einschub: Transversale Moden (Oder Magneto-elektrische Subbänder)

Betrachte einen rechteckigen Leiter, welcher in x-Richtung homogen ist. Die Beschreibung der Dynamik erfolgt dann über die effektive Masse-Gleichung

$$\left[E_s + \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + U(y) \right] \Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (1)$$

Bei niedrigen Temperaturen und niedrigen Trägerdichten spielen hohe Subbandindizes keine große Rolle und die z-Dimension kann im Potential vernachlässigt werden. Das magnetische Feld steht senkrecht auf der Fläche, damit gilt $\mathbf{A} = \hat{x}By$. Die Lösung der Gleichung kann in der Form ebener Wellen

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ikx) \chi(y) \quad (2)$$

dargestellt werden, so dass sich für $\chi(y)$ die Gleichung

$$\left[E_s + \frac{(\hbar k + eBy)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + U(y) \right] \chi(y) = E\chi(y) \quad (3)$$

Für ein parabolisches Potential $U(y) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 y^2$ kann eine analytische Lösung gefunden werden. Es können dann drei Fälle unterschieden werden:

- i) Gebundene Elektronen $U \neq 0$ ohne äußeres Magnetfeld $B = 0$:
Hier lautet die Dispersionsrelation

$$E(n, k) = E_s + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0 \quad (4)$$

Zustände mit unterschiedlichen Indizes n und n' gehören zu verschiedenen Subbändern. Diese werden in Analogie zu elektromagnetischen Wellenleiter auch als transversale Moden bezeichnet.

- ii) Ungebundene Elektronen ($U = 0$) in äußerem Magnetfeld $B \neq 0$:

Mit $y_k = \frac{\hbar k}{eB}$ und $\omega_c = \frac{|e|B}{m}$ kann die Gleichung (3) ebenso als eine Schrödinger-Gl mit parabolischem Potential aufgefasst werden, so dass sich die Dispersionsrelation

$$E(n, k) = E_s + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \quad (5)$$

Diese beschreibt Landau-Niveaus (oder Magnetische Subbänder). Der physikalische Unterschied zu den elektrischen Subbändern liegt z.B. in der Geschwindigkeit $v(n, k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(n, k)}{\partial k} = 0$. Würde ein Wellenpaket mit ebenen Wellen als Eigenzuständen konstruiert, würde es sich nicht bewegen, analog zur klassischen Elektrodynamik, in der Elektronen unter dem Einfluss von Magnetfeldern geschlossene Orbitale bilden. Die Wellenvektorkomponenten k_i , die ohne Magnetfeld auf das Gitter mit Abständen $\frac{2\pi}{L_i}$ verteilt sind, kondensieren auf zylinderförmigen Flächen (Landau-Röhren). Dabei ist die Zahl der Zustände auf einem Landau-Level $N = \frac{|e|BA}{\pi\hbar}$.

iii) Gebundene Elektronen ($U \neq 0$) im Magnetfeld ($B \neq 0$):

Mit Hilfe der Frequenz $\omega_{c0}^2 = \omega_c^2 + \omega_0^2$ folgt die Dispersionsrelation

$$E(n, k) = E_s + \frac{\omega_0^2}{\omega_{c0}^2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_{c0} \quad (6)$$

Die Geschwindigkeit ergibt sich damit zu $v(n, k) = \frac{\omega_0^2}{\omega_{c0}^2} \frac{\hbar k}{m}$. Der Vergleich mit Fall i) zeigt, dass das Magnetfeld eine Änderung der Masse $m \rightarrow m \left[1 + \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2}\right]$. Die Wellenfunktion ist um den Ort $y = -y_k$ zentriert. Diese hängt allerdings von der Geschwindigkeit über $y_k = v(n, k) \frac{\omega_0^2 + \omega_c^2}{\omega_c \omega_0}$.

Die Anzahl transversaler Moden bei einer Energie E wird durch die Summierung über alle Moden, deren cut-off-Energie $\epsilon_N = E(N, k = 0)$ mit der Dispersionsrelation der Mode $E(N, k)$ kleiner als E ist:

$$M(E) = \sum_N \theta(E - \epsilon_N) \quad (7)$$

Der Strom, welcher von den $+k$ -Zuständen eines einzelnen Modus getragen wird, ergibt sich durch

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_k v f^+(E) = \frac{e}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E) = \frac{2e}{\hbar} \int_{\epsilon}^{\infty} f^+(E) dE \quad (8)$$

Dieses Ergebnis kann auf Multimoden-Wellenleiter verallgemeinert werden

$$I^+ = \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f^+(E) M(E) dE \quad (9)$$

Für einen Leiter, dessen Modenzahl über das Energiespektrum $\mu_1 > E > \mu_2$ konstant ist, besitzt einen Widerstand $G_C^{-1} = \frac{\hbar}{2e^2 M} \approx \frac{12.9 \text{ k}\Omega}{M}$. Die Anzahl der Ausbreitungsfähigen Moden ergibt sich durch die Überlegung, dass die erlaubten Werte von k_y auf einem Gitter mit dem Abstand $\frac{2\pi}{W}$ verteilt sind die Relation $-k_f < k_y < k_f$ erfüllen. Somit gilt $M = \lfloor \frac{k_f W}{\pi} \rfloor$.

Die Landauer-Formel

$$G = \frac{2e^2}{\hbar} M T \quad (10)$$

gibt den elektrischen Widerstand eines Leiters an, wobei T die mittlere Wahrscheinlichkeit ist, dass ein Elektron, welches an einem Ende eintritt zum anderen Ende transmittiert wird.

Transmission function, S-Matrix and Green's functions

Non-equilibrium

Die Dynamik von Elektronen kann im semiklassischen Bild durch Verteilungsfunktionen $f(\mathbf{k})$, welche die Anzahl der Elektronen mit dem Impuls \mathbf{k} misst. Es wird eine Situation gefordert, in der die Nebendiagonalelemente der Dichtematrix $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ vernachlässigbar sind (wenn die Phasenrelaxations-Länge sehr klein ist) und somit eben keine Mischzustände existieren. Dann kann das System auch durch die Verteilung $f(\mathbf{k})$ beschrieben werden. Nur in Phasenkohärenten Leitern können die Nebendiagonalelemente nicht vernachlässigt werden. Mithilfe von Darstellungen unitärer Transformationen kann die Dichte-Matrix diagonalisiert werden.

Um die Zeitkoordinate einzubeziehen, wird die $t - t'$ -Korrelationsfunktion $f(\mathbf{k}; t) \rightarrow G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t')$ eingeführt, welche die Korrelation eines Zustands \mathbf{k} zum Zeitpunkt t zu einem Zustand \mathbf{k}' zum Zeitpunkt t' vermittelt. In einem konservativem (Gleichgewichtszustands-System) System ist diese Funktion nur von der Differenz abhängig und kann mithilfe der Fourier-Transformation in

$$G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) = \frac{1}{\hbar} \int G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \tau) e^{-\frac{iE\tau}{\hbar}} d\tau \quad (11)$$

mit $\tau = t - t'$ in ein Energiespektrum überführt werden. Für $t' = t$ ergibt sich die Dichtematrix

$$\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t) = G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t')|_{t'=t} = \frac{1}{2\pi} \int dE G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) \quad (12)$$

Ebenso ergibt sich die Verteilungsfunktion als Diagonale der Korrelationsfunktion, also für $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. Dies ist auch in allen anderen Darstellungen gültig (z.B. Ortsdarstellung).

In semiklassischen Gleichungen stellt sich gewöhnlich ein Gleichgewicht zwischen eingehenden (auch Ausfluss an Löchern mit $1 - f$) und ausgehenden Elektronen ein. Zur Beschreibung des Ausflusses an Löchern wird die Korrelationsfunktion G^p eingeführt. Mit der zweiten Quantisierung gilt

$$G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t') = \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t') a_{\mathbf{k}}(t) \rangle \quad (13)$$

$$G^p(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t') = \langle a_{\mathbf{k}}(t) a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t') \rangle \quad (14)$$

Die Streufunktion $S^{\text{out}}(\mathbf{k}, t)$ gibt Auskunft über die Rate, mit der Elektronen im Zustand \mathbf{k} in einen anderen Zustand überführt werden. Die Verallgemeinerung $S^{\text{out}}(\mathbf{k}, t) \rightarrow \Sigma^{\text{out}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t')$ enthält Phasenkorrelationen. Auch hier kann eine Fouriertransformierte $\Sigma^{\text{out}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)$ angeführt werden. Dasselbe Konzept kann auch für $\Sigma^{\text{in}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)$ angewandt werden. Die hier verwendete Notation unterscheidet sich ein wenig von der gebräuchlichen:

Klassische Analogon	Notation hier	Standardnotation
$f, (1 - f)$	G^n, G^p	$-iG^<, iG^>$
$S^{\text{in}}, S^{\text{out}}$	$\Sigma^{\text{in}}, \Sigma^{\text{out}}$	$-i\Sigma^<, i\Sigma^>$

Kapitel 2 - Physikalische Problemstellung

Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device

Statistische Mechanik

Die statistische Beschreibung ist notwendig, um zum einen die Überlagerung von komplexwertigen Amplituden, was zu Interferenzeffekten führt, und zum anderen die Überlagerung von reellen Amplituden, was zu Inkohärenz-Phänomenen führt.

Die Dichte-Matrix ist definiert als

$$\rho(x, x') = \langle x | \rho | x' \rangle = \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} \langle x | \Psi_{\alpha} \rangle \langle \Psi_{\alpha} | x' \rangle \quad (15)$$

mit dem Multi-Index α und der Wahrscheinlichkeit ω_{α} . Die Dynamik der Dichtematrix ist durch die Neumann-Gleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] = \frac{1}{i\hbar} L\rho = \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) \rho + (v(x) - v(x')) \rho \right] \quad (16)$$

Das Potential $v(x)$ enthält Eigenschaften der zugrundeliegenden mesoskopischen Struktur in Form heterojunction Band-diskontinuitäten und Aufgrund des elektrostatischen (Hartree) Potentials durch freie Elektronen, Ionisationsstörstellen und externen Feldern. Es soll angenommen werden, dass die 1-Elektron-reduzierte Dichtematrix zur Beschreibung ausreicht. Die Wigner-Funktion wird erreicht durch Einführung der Koordinaten-Transformation $\chi = \frac{1}{2}(x + x')$ und $\xi = x - x'$. Die Position kann dann mit χ identifiziert werden und der Impuls durch eine Fourier-Transformation

$$f(\chi, k) = \int_{\mathbb{R}} d\xi e^{-ik\xi} \rho \left(\chi + \frac{1}{2}\xi, \chi - \frac{1}{2}\xi \right) \quad (17)$$

bezügl. ξ . Die dynamische Gleichung für die Wigner-Funktion lautet dann (die Dichtematrix verschwindet auf dem Rand)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f}{\partial \chi} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(\chi, k - k') f(\chi, k') \quad (18)$$

mit Kern des Potentials

$$V(\chi, k) = 2 \int_0^{\infty} d\xi \sin(k\xi) \left(v(\chi + \frac{1}{2}\xi) - v(\chi - \frac{1}{2}\xi) \right) \quad (19)$$

Die Elektronen-Dichte ergibt sich durch

$$n(\chi) = \rho(\chi, \chi) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f(\chi, k) \quad (20)$$

Ebenso kann der Strom

$$j(\chi) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m} f(\chi, k) \quad (21)$$

durch k-Integration der von Neumann-Gleichung (18) bestimmt werden, da der Potentialoperator $V(\chi, k)$ aufgrund der antisymmetrie verschwindet.

Der Liouville-Operator ist für ein konservatives und abgeschlossenes System hermitesch. Solch ein System kann nur oszillatorisches Verhalten zeigen. Werden die Randbedingungen so geändert, dass ein Teilchenstrom in das System oder aus dem System möglich ist, wird die Hermitizität verletzt, was zu komplexen Eigenwerten führen kann. Für ein offenes System ist eine plausible Randbedingung $\frac{\partial \rho}{\partial \chi} = 0$ auf Rändern parallel zur x- und x'-Achse, da dies eine konstante Dichte an diesen Grenzen bedeutet (Annäherung eines konstantes chemischen Potentials an den Grenzen, dies führt zu einem Ohmschen Kontakt). Allerdings führt die Nicht-Hermitizität auch zu einem symmetrischen Realanteil, sodass die Zeitumkehr zu einem unphysikalischen Anwachsen der Lösung der von Neumann-Gleichung führt. Die Stabilität des Modells dieses offenen Systems muss durch die Randbedingungen selbst garantiert werden und diese dürfen nicht Zeitumkehrinvariant sein.

Es wird angenommen, dass die angrenzenden Reservoirs ähnliche Eigenschaften haben wie ein schwarzer Körper: Die Verteilungsfunktion eingekoppelte Elektronen hat die selben Eigenschaften wie die thermische Gleichgewichtsverteilung des Reservoirs. Alle Elektronen, die aus dem Gebiet in das Reservoir eintreten, werden ohne Reflektionen absorbiert. Die Randbedingungen des offenen Systems lauten

$$f(0, k)|_{k>0} = f_l(k) \quad (22)$$

$$f(l, k)|_{k<0} = f_r(k) \quad (23)$$

Weil die k-Abhängigkeit als Integral dargestellt wird, sind hier keine Randbedingungen in k-Richtung notwendig. Das Reservoir kann charakterisiert werden als

$$f_{l,r}(k) = \frac{m}{\pi \hbar^2 \beta_{l,r}} \ln \left[1 + \exp \left(-\beta_{l,r} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_{l,r} \right) \right) \right] \quad (24)$$

Approximation of a Phase Space Operator for the Numerical Solution of the Wigner Equation

Kapitel 3 - DG-Verfahren für elliptische Probleme

Mathematische Konzepte und Räume

Das Gebiet Ω beschreibt ein begrenztes polygonales Gebiet in \mathbb{R}^d , $d \geq 2$. Der Raum $\mathcal{D}(\Omega)$ ist der Raum aller C^∞ -Funktionen mit kompaktem Träger in Ω . Der duale Raum $\mathcal{D}'(\Omega)$ ist der Distributionenraum mit der Ableitung $D^\alpha v \in \mathcal{D}'(\Omega)$, welche durch

$$\forall \phi \in \mathcal{D}(\Omega), \quad D^\alpha v(\phi) = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} v(x) \frac{\partial^{|\alpha|} \phi}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}} \quad (25)$$

gegeben ist. Mit diesem schwachen Ableitungsbegriff kann der Sobolev-Raum als

$$H^s(\Omega) = \{v \in L^2(\Omega) : \forall 0 \leq |\alpha| \leq s, D^\alpha v \in L^2(\Omega)\} \quad (26)$$

definiert werden. Es kann gezeigt werden, dass wenn $v \in L^2(\Omega)$, kann v als eine Distribution in der Weise $\forall \phi \in \mathcal{D}, \quad v(\phi) = \int_{\Omega} v \phi$ identifiziert werden und es gelten die Ableitungen nach Gl. (25). Die zu $H^s(\Omega)$ -gehörige Sobolev-Norm ist

$$\|v\|_{H^s(\Omega)} = \left(\sum_{0 \leq |\alpha| \leq s} \|D^\alpha v\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (27)$$

und die zugehörige Seminorm ist

$$|v|_{H^s(\Omega)} = \|\nabla^s v\|_{L^2(\Omega)} = \left(\sum_{|\alpha|=s} \|\mathcal{D}^\alpha v\|_{L^2(\Omega)} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (28)$$

In der modernen Theorie partieller Differentialgleichungen spielt das Konzept von Gebieten mit Lipschitz-Rand eine wichtige Rolle. Anschaulich sind dies n -dimensionale Gebiete Ω , zu denen zu jedem Punkt in einer lokalen Umgebung ein Graph auf einer $(n-1)$ -dimensionale Hyperfläche existiert und dieser durch eine Lipschitz-stetige Funktion beschrieben wird. Durch die Aufteilung in Randteile $\partial\Omega_i$ ergibt sich in natürlicher Weise das $(n-1)$ -dimensionale Lebesgue-Maß auf dem Rand.

Bemerkung: Für eine beliebige Teilmenge $A \subseteq \Omega$ heißt die Abbildung $\mathcal{P}(\Omega) \rightarrow [0, \infty]$ mit

$\lambda(A) := \inf \left\{ \sum_i \mu(Q_i) \mid A \subseteq \bigcup_i Q_i \right\}$ äußeres Lebesgue-Maß von A , wobei das Infimum über alle endlichen (oder abzählbaren Folgen) $\{Q_i\}$ zu nehmen ist, deren Vereinigung A überdeckt. Dabei ist die σ -Additivität $\lambda\left(\bigcup_i A_i\right) = \sum_i \lambda(A_i)$ nicht notwendigerweise erfüllt. Die Menge $A \subseteq \Omega$ ist daher Lebesgue-Messbar, falls $\lambda(E) = \lambda(E \cap A) + \lambda(E \cap A^c)$, $\forall E \subseteq \Omega$ und es ist $A \in \mathcal{L}$.

Räume mit fraktionalen Indizes ergeben sich aus der Interpolation zwischen den Räumen mit den nächsten ganzzahligen Indizes mit $H^{s+1}(\Omega) \subset H^{s+1/2}(\Omega) \subset H^s(\Omega)$. Für ein gegebenes $v \in H^s(\Omega)$ wird das Splitting mit $v = v_1 + v_2$ mit $v_1 \in H^s(\Omega)$ und $v_2 \in H^{s+1}(\Omega)$. Für eine gegebene reelle Zahl t wird der Kernel

$$K(v, t) \left(\inf_{v_1+v_2=v} \left(\|v_1\|_{H^s(\Omega)}^2 + t^2 \|v_2\|_{H^{s+1}(\Omega)}^2 \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (29)$$

definiert.

Zusätzlich wird die Vervollständigung V einer Teilmenge $V' \subset V$ definiert. Zu einer Teilmenge $V' \subset V$ existiert ein vollständiger normierter Raum (Banachraum) und eine isometrische Isomorphie (in diesem Sinne eine bijektive Abbildung, die linear und normerhaltend ist) $W : V' \rightarrow V$, so dass $W(V')$ dicht in V ist, d.h. für jedes $\delta > 0$ und zu jedem Element $v \in V$ gibt es ein Element $w \in W$, so dass $\|v - w\|_V \leq \delta$ gilt. Man kann also jedes Element $v \in V$ beliebig genau mit approximieren. Man kann ihn konstruieren, indem V als die Menge aller Äquivalenzklassen aller Cauchy-Folgen in V' und W als die Menge aller Cauchy-Folgen in V' identifiziert wird. Jedem Element $v' \in V'$ kann man eine Cauchy-Folge zuordnen und die Äquivalenzklasse ist dann $w := \{\xi \in W \mid \xi \propto w(v')\}$.

Der Raum $H^{s+1/2}(\Omega)$ ist dann definiert als die Vervollständigung aller Funktionen in $H^{s+1}(\Omega)$ mit der Norm

$$\|v\|_{H^{s+1/2}(\Omega)} = \left(\int_0^\infty t^{-2} K^2(v, t) dt \right)^{\frac{1}{2}} \quad (30)$$

Für ein Gebiet mit Lipschitz-Rand gibt eine eindeutige lineare Abbildung (Spur-Operator) $\gamma_0 : H^s \rightarrow H^{s-1/2}(\partial\Omega)$ für $1 \leq s \leq \infty$, mit $\gamma_0(u) = u|_{\partial\Omega} \forall u \in C^\infty(\bar{\Omega})$. Dann gilt auch die Green-identität

$$\int_\Omega \left(u \frac{\partial v}{\partial x_i} + v \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) dx = \int_{\partial\Omega} \gamma_0(u) \gamma_0(v) n_i dS \quad (31)$$

mit $u \in H^s(\Omega)$, $v \in H^{\frac{s-1}{2}}(\Omega)$. Der Raum $H_0^s(\Omega) = \{u \in H^s(\Omega) \mid \gamma_0 u = 0 \text{ auf } \partial\Omega\}$ kann als die Abgeschlossenheit des Raumes $C_0^\infty(\Omega)$ in der Topologie der Räume $H^s(\Omega)$ angesehen werden. Die Abbildung $\gamma_1 : H^s \rightarrow H^{s-3/2}$ mit $\gamma_1 v = \nabla v \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} \forall v \in C^\infty(\bar{\Omega})$ ist ebenfalls eine Spur. Es gelten die häufig genutzten Abschätzungen in der Analysis von DG-Methoden für $v \in H^s(E)$:

$$\|\gamma_0 v\|_{L^2(e)} \leq C \sqrt{\frac{|e|}{|E|}} \left(\|v\|_{L^2(E)} + h_E \|\nabla v\|_{L^2(E)} \right) \quad s \geq 1 \forall e \subset E \quad (32)$$

$$\|\gamma_1 v\|_{L^2(e)} \leq C \sqrt{\frac{|e|}{|E|}} \left(\|\nabla v\|_{L^2(E)} + h_E \|\nabla^2 v\|_{L^2(E)} \right) \quad s \geq 2 \forall e \subset E \quad (33)$$

Für ein v aus dem Raum der Polynome $\mathbb{P}_k(E) = \text{span} \{x_1^{i_1} \dots x_d^{i_d} : i_1 + \dots + i_d \leq k, \mathbf{x} \in E\}$ wird die Spurinvariante zu

$$\|v\|_{L^2(e)} \leq C_t h_E^{-1/2} \|v\|_{L^2(E)} \quad (34)$$

$$\|\nabla v \cdot \mathbf{n}\|_{L^2(e)} \leq C_t h_E^{-1/2} \|\nabla v \cdot \mathbf{n}\|_{L^2(E)} \quad (35)$$

mit $C_t = \frac{1}{2} \sqrt{(k+1)(k+2) \frac{|e|}{|E|}}$ in $d = 2$.

Bei der Approximation von $v \in H^s(E)$ durch $\tilde{v} \in \mathbb{P}_k(E)$ gilt die Abschätzung für $s \geq 1$ und eine ganze Zahl $k \geq 0$

$$\|v - \tilde{v}\|_{H^q(E)} \leq C h_E^{\min(k+1, s) - q} |v|_{H^s(E)} \quad \forall 0 \leq q \leq s \quad (36)$$

mit dem Diameter $h_E = \sup_{x, y \in E} \|x - y\|$. Ist das Gebiet Ω in Dreiecke aufgeteilt, gibt es eine globale, stetige Approximation \tilde{v} , die diese Abschätzung ebenfalls erfüllt. Außerdem gilt

$$\int_e \mathbf{K} \nabla(\tilde{v} - v) \mathbf{n}_E = 0 \quad \forall e \in \partial E \quad (37)$$

und

$$\|\nabla^i(\tilde{v} - v)\|_{H^q(E)} \leq C h_E^{\min(k+1, s) - q} |v|_{L^2(E)} \quad (38)$$

Modell

Das Modell ist für gegebenes $f \in L^2(\Omega)$, $g_D \in H^{1/2}(\Gamma_D)$ und $g_N \in L^2(\Gamma_N)$ das elliptische Problem

$$-\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla p) + \alpha p = f \quad \text{in } \Omega \quad (39)$$

$$p = g_D \quad \text{auf } \Gamma_D \quad (40)$$

$$\mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n} = g_N \quad \text{auf } \Gamma_N \quad (41)$$

mit der symmetrischen, positiv definiten und nach oben und unten begrenzten $(K_0 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \leq \mathbf{K} \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \leq K_1 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x})$ Matrix \mathbf{K} und der nicht-negativen skalaren Funktion α . Die klassische Lösung $p \in C^2(\overline{\Omega})$ erfüllt Gl. (??) punktweise und heißt starke Lösung.

Betrachte einen Hilbert-Raum V . Ist eine bilineare Form $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ die i) stetig: $|a(u, v)| \leq C_1 \|u\|_V \|v\|_V$ und ii) Koerzitiv: $C_2 \|u\|_V^2 \leq a(u, u)$. Mit einem linearen Funktional $L : V \rightarrow \mathbb{R}$ existiert ein eindeutiges $u \in V$, welches $a(u, v) = L(v) \quad \forall v \in V$. Weiter ist die Lösung begrenzt durch $\|u\|_V \leq \frac{1}{C_2} \|L\|$.

Es wird angenommen, dass ein Gebiet in Dreiecke unterteilt und ein konformes Netz \mathcal{E}_h mit dem maximalen Diameter h bildet. Ein reguläres Netz erfüllt die Bedingung $\frac{h_E}{\rho_E} \leq \rho$. Der gebrochene Sobolev-Raum für jede reelle Zahl s ist $H^s(\mathcal{E}_h) = \{v \in L^2(\Omega) : \forall E \in \mathcal{E}_h, v|_E \in H^s(E)\}$ mit der gebrochenen Sobolev-Norm und der gebrochenen gradient Seminorm

$$\|v\|_{H^s(\mathcal{E}_h)} = \left(\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \|v\|_{H^s(E)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (42)$$

$$\|\nabla v\|_{H^0(\mathcal{E}_h)} = \left(\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \|\nabla v\|_{L^2(E)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (43)$$

Für $v \in H^1(\mathcal{E}_h)$ ist die Spur von v auf jeder Seite eines Elements wohldefiniert. Wenn sich zwei Elemente eine Seite e teilen, sind zwei Spuren auf e definiert, daher kann der Mittelwert und Sprung definiert werden:

$$\{v\} = \frac{1}{2} (v|_{E_1^e} + v|_{E_2^e}) \quad (44)$$

$$[v] = v|_{E_1^e} - v|_{E_2^e} \quad (45)$$

Sei $e \subset \partial E_1^e \cap \partial \Omega$, dann gilt $\{v\}_e = [v]_e = v_1^e$

Variationale Formulierung

Im folgenden wird die Annahme $s > \frac{3}{2}$ gemacht. Definiere zwei bilineare Formen

$$J_0^{\sigma_0, \beta_0}(v, w) = \sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \frac{\sigma_e^0}{|e|^{\beta_0}} \int_e [v][w] \quad (46)$$

$$J_1^{\sigma_1, \beta_1}(v, w) = \sum_{e \in \Gamma_h} \frac{\sigma_e^1}{|e|^{\beta_1}} \int_e [\mathbf{K} \nabla v \cdot \mathbf{n}_e][\mathbf{K} \nabla w \cdot \mathbf{n}_e] \quad (47)$$

mit den Straftermen $\sigma_e^i > 0$. Die bilineare Form $a_\epsilon : H^s(\mathcal{E}_h) \times H^s(\mathcal{E}_h) \rightarrow \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} a_\epsilon(v, w) &= \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \mathbf{K} \nabla v \nabla w + \int_\Omega \alpha v w - \sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e \{\mathbf{K} \nabla v \cdot \mathbf{n}_e\}[w] \\ &\quad - \epsilon \sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e \{\mathbf{K} \nabla w \cdot \mathbf{n}_e\}[v] + J_0^{\sigma_0, \beta_0}(v, w) + J_1^{\sigma_1, \beta_1}(v, w) \end{aligned} \quad (48)$$

und die lineare Form $L : H^s(\mathcal{E}_h) \rightarrow \mathbb{R}$

$$L(v) = \int_\Omega f v + \epsilon \sum_{e \in \Gamma_D} \int_e \left(\mathbf{K} \nabla v \cdot \mathbf{n}_e + \frac{\sigma_e^0}{|e|^{\beta_0}} v \right) g_D + \sum_{e \in \Gamma_N} \int_e v g_N \quad (49)$$

definieren das DG-Verfahren: Finde ein $p \in H^s(\mathcal{E}_h)$, $s \geq \frac{3}{2}$, so dass

$$a_\epsilon(p, v) = L(v), \quad \forall v \in H^s(\mathcal{E}_h) \quad (50)$$

Umgekehrt, wenn $p \in H^1(\Omega) \cap H^s(\mathcal{E}_h)$.

Beweis:

Zu dem Modellproblem (39) wird ein $v \in H^s(\mathcal{E}_h)$ multipliziert und über ein Element E integriert und über alle Elemente $E \in \mathcal{E}_e$ summiert. Unter Verwendung der Green-identität

$$- \int_E w \nabla \cdot \mathbf{K} \nabla v = \int_E \mathbf{K} \nabla v \cdot \nabla w - \int_{\partial E} \mathbf{K} \nabla v \cdot \mathbf{n}_E w \quad (51)$$

ergibt sich

$$\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \left[\int_E (\mathbf{K} \nabla p \cdot \nabla v + \alpha p v) - \int_{\partial E} \mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_E v \right] = \int_\Omega f v \quad (52)$$

Mit der Aufteilung in innere Schnittstellen $e \in \Gamma_h$ und äußere Schnittstellen $e \in \Omega_h$ folgt unter Beachtung $\mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_e = \{\mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_e\}$ ergibt sich die Beobachtung

$$\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_{\partial E} \mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_E v = \sum_{e \in \Gamma_h} \int_e \underbrace{[\mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_e v]}_{\{\mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_e\}[v]} + \sum_{e \in \partial \Omega} \int_e \mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_e v \quad (53)$$

Unter Verwendung der Neumann Randbedingung (41) ergibt sich

$$\begin{aligned} &\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E (\mathbf{K} \nabla p \cdot \nabla v + \alpha p v) - \sum_{e \in \Gamma_h} \int_e \{\mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_e\}[v] \\ &\quad - \sum_{e \in \Gamma_D} \int_e \mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_e v = \int_\Omega f v + \sum_{e \in \Gamma_N} \int_e g_N v \end{aligned} \quad (54)$$

Nun werden die Terme $\epsilon \sum_{e \in \Gamma_D} \int_e (\mathbf{K} \nabla v \cdot \mathbf{n}_e) p$ und $\sum_{e \in \Gamma_D} \frac{\sigma_e^0}{|e|^{\beta_0}} \int_e p v$ auf beiden Seiten aufaddiert und die Dirichlet-Randbedingung (40) genutzt. Außerdem gilt für die inneren Schnittstellen $[p] = [\mathbf{K} \nabla p \cdot \mathbf{n}_e] = 0$.

Somit ergibt sich sofort (50).

Umgekehrt wird nun $v \in \mathcal{D}(E)$ angenommen, was sofort zu

$$\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \mathbf{K} \nabla p \cdot \nabla v + \int_{\Omega} \alpha p v = \int_{\Omega} f v \quad (55)$$

führt. Damit ist (39) auf E im Sinne der distributionellen Ableitung sofort erfüllt. Die Relation

$$\int_e [\mathbf{K} \nabla \cdot \mathbf{n}_e] v = 0, \quad \forall v \in H_0^2(E_e^1 \cup E_e^2) \quad (56)$$

impliziert, dass der Sprung auf allen Kanten verschwindet, und somit $\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla p \in L^2(\Omega)$ und somit (55) auch global gilt. Wird Gl. (55) mit $v \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ und $v \in H^2(\Omega)$, $v|_{\Gamma_D}$ multipliziert, ergeben sich die Randbedingungen (40) und (41). \square

Je nach Wahl von $\epsilon \in \{-1, 0, 1\}$ und σ_e ergeben sich die DG-Verfahren:

1. Für $\epsilon = -1$ erhält man das symmetric interior penalty Galerkin (SIPG)-Verfahren. Dieses Verfahren konvergiert, sofern der Parameter σ_e^0 groß genug ist
2. Für das nonsymmetric interior penalty Galerkin (NIPG)-Verfahren gilt $\epsilon = +1$. Diese Verfahren konvergiert für alle nichtnegativen Werte von σ_e^0
3. Ist $\epsilon = 0$, handelt es sich um das incomplete interior penalty Galerkin (IIPG)-Verfahren. Dieses Konvergiert unter den selben Bedingungen wie das SIPG.
4. Für $\sigma_e^1 \neq 0$ erhält man einen extra Stabilisierungsterm. Die Analyse ist unabhängig von diesem Term.

Im folgenden wird angenommen, dass $\sigma_e^1 = 0$ ist.

Finite Elemente

Der finite Elemente Teilraum des Sobolev-Raumes $H^s(\mathcal{E}_h)$, $s \geq \frac{3}{2}$ ist

$$\mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h) = \{v \in L^2(\Omega) : \forall E \in \mathcal{E}_h, v|_E \in \mathbb{P}_k\} \quad (57)$$

Die Elemente dieses Raumes heißen Testfunktionen und sind unstetig an den Schnittstellen des Netzes. Die allgemeine DG Finite Elemente-Methode lautet: Suche ein $P_h \in \mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h)$, so dass

$$a_\epsilon(P_h, v) = L(v), \quad \forall v \in \mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h) \quad (58)$$

Jedes Element E wird auf ein Referenz-Element \hat{E} abgebildet, da die Integration über jedes physikalische Element zu aufwändig wäre. Das Referenz-Element \hat{E} hat die Eckpunkte $\hat{A}_1(0, 0)$, $\hat{A}_1(1, 0)$ und $\hat{A}_1(0, 1)$. Es existiert eine affine Abbildung zum Element E

$$F_E \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathbf{B}_E \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} + \mathbf{b}_E, \quad x^j = \sum_i x_i^j \hat{\phi}_i^j(\{\hat{x}^j\}) \quad (59)$$

mit $j = 1, 2$ und $i = 1, 2, 3$ und

$$\hat{\phi}_1(\hat{x}, \hat{y}) = 1 - \hat{x} - \hat{y}, \quad \hat{\phi}_2(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{x}, \quad \hat{\phi}_3(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{y} \quad (60)$$

Es gilt $\det \mathbf{B}_E = 2|E|$ und $\|\mathbf{B}_E\| = \sup_{(\hat{x}, \hat{y}) \in \hat{E}} \leq \frac{h_E}{\hat{\rho}}$. Die affine Abbildung bedeutet einem Variablenwechsel

$\hat{v} = v \circ F_E$ mit $\hat{\nabla} \hat{v} = \mathbf{B}_E^T \nabla v \circ F_E$.

Bemerkung: Der Raum $\mathcal{D}(\mathcal{E}_h)$ ist auf dem physikalischen Element E definiert und nicht auf dem Referenz-Element \hat{E} . In der Praxis wählt man also den Raum

$$\tilde{\mathcal{D}}(\mathcal{E}_h) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \forall E \in \mathcal{E}_h, v \circ F_E \in \mathbb{P}_k(\hat{E}) \right\} \quad (61)$$

Die approximativen Ergebnisse sind für Elemente wie Dreiecke oder Parallelepipede die selben. Für beliebige Vierecke wird statt $\mathbb{P}_k(E)$ der Tensorraum $\mathbb{Q}_k(\hat{E})$ von Polynomen der Ordnung k in jeder Richtung gewählt. Für $\mathcal{D}(\mathcal{E}_h)$ kann eine Basis span $\{\phi_i^E : 1 \leq i \leq N_{\text{loc}}, E \in \mathcal{E}_h\}$ mit

$$\phi_i^E(\mathbf{x}) \begin{cases} \hat{\phi}_i \circ F_E(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in E \\ 0, & \mathbf{x} \notin E \end{cases} \quad (62)$$

Für den Fall der Verwendung von Monomen $\hat{\phi}_i(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{x}^I \hat{y}^J$ mit $I + J = i$ und $0 \leq i \leq k$ ergibt sich die lokale Dimension zu $N_{\text{loc}} = \frac{1}{2}(k+1)(k+2)$. Die Integration über das Referenz-Element kann mit Hilfe der Gausschen-Quadratur

$$\int_E \hat{v} \approx \sum_{j=1}^{Q_D} w_j \hat{v}(s_{x,j}, s_{y,j}) \quad (63)$$

Die Integrale über das physikalische Element ergeben sich dann zu

$$\int_E v \approx 2|E| \sum_{j=1}^{Q_D} w_j \hat{v}(s_{x,j}, s_{y,j}) \quad (64)$$

$$\int_E \nabla v \cdot \mathbf{w} \approx 2|E| \sum_{j=1}^{Q_D} (\mathbf{B}_E^T)^{-1} w_j \hat{\nabla} \hat{v}(s_{x,j}, s_{y,j}) \hat{\mathbf{w}}(s_{x,j}, s_{y,j}) \quad (65)$$

$$\int_E \nabla v \cdot \nabla w \approx 2|E| \sum_{j=1}^{Q_D} (\mathbf{B}_E^T)^{-1} w_j \hat{\nabla} \hat{v}(s_{x,j}, s_{y,j}) (\mathbf{B}_E^T)^{-1} \hat{\nabla} \hat{w}(s_{x,j}, s_{y,j}) \quad (66)$$

Eigenschaften DG-Verfahren

Es wird angenommen, dass $p \in H^2(\Omega)$ eine schwache Lösung des Problems (39) - (41) ist und $P_h \in \mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h)$ die approximative Lösung in eine, endlich dimensionalem Raum. Es wird ein unendlich dimensionaler Funktionenraum $H^2(\mathcal{E}_h)$ eingeführt, so dass $H^2(\Omega) \subset H^2(\mathcal{E}_h)$ und $\mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h) \subset H^2(\mathcal{E}_h)$. In der abstrakten numerischen Analyse werden folgende Eigenschaften erwartet:

- i) Die approximative Lösung P_h existiert und ist eindeutig
- ii) Die approximative Lösung P_h konvergiert gegen die exakte Lösung p in der $\|\cdot\|_{\mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h) \subset H^2(\mathcal{E}_h)}$ -Norm für, d.h. $\lim_{h \rightarrow 0} \|p - P_h\|_{\mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h) \subset H^2(\mathcal{E}_h)} = 0$.
- iii) Es gibt eine a priori Fehlerabschätzung, derart, dass $\|p - P_h\|_{\mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h) \subset H^2(\mathcal{E}_h)} \leq Ch^\alpha$

Koerzitivität:

Definiere die Energie-Norm auf $\mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h)$

$$\|v\|_{\mathcal{E}} = \left(\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \mathbf{K} \nabla v \cdot \nabla v + \int_{\Omega} \alpha v^2 + J_0^{\sigma_0, \beta_0}(v, v) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (67)$$

Die Koerzitivität erfordert, dass die Bedingung

$$\kappa \|v\|_{\mathcal{E}}^2 \leq a(v, v) \quad (68)$$

Für den Fall $\epsilon = 1$ ist diese Bedingung mit $\kappa = 1$ immer erfüllt. Für die anderen beiden Fälle wird die Cauchy-Schwarz'sche Ungleichung verwendet, um

$$\sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e \{\mathbf{K} \nabla v \cdot \mathbf{n}_e\} [v] \leq \sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \|\{\mathbf{K} \nabla v \cdot \mathbf{n}_e\}\|_{L^2(e)} \left(\frac{1}{|e|} \right)^{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}} \| [v] \|_{L^2(e)} \quad (69)$$

zu erhalten. Bei Betrachtung von inneren Schnittstellen, Ausnutzung der Beschränktheit von \mathbf{K} , Verwendung der Spur-Ungleichung (35) und $|e| \leq h_E^{d-1} \leq h^{d-1}$ ergibt sich

$$\int_e \{\mathbf{K} \nabla v \cdot \mathbf{n}_e\} [v] \leq C_t K_1 \left(\|\{\nabla v\}\|_{L^2(E_1^e)}^2 + \|\{\nabla v\}\|_{L^2(E_2^e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{|e|^{\beta_0}} \right)^{\frac{1}{2}} \|\{[v]\}\|_{L^2(e)}^2 \quad (70)$$

falls $\beta_0(d-1) \geq 0$ und $h \leq 1$ ist. Wenn die äußeren Ränder mit einbezogen werden, ergibt sich ein ähnliches Resultat. Mit der maximalen Anzahl an Nachbarn n_0 in einem konformen Netz (Dreieck $n_0 = 03$) ergibt sich

$$\sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e \{\mathbf{K} \nabla v \cdot \mathbf{n}_e\} [v] \leq C_t K_1 \sqrt{n_0} \left(\sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \frac{1}{|e|^{\beta_0}} \|\{v\}\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \|\{\nabla v\}\|_{L^2(E)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (71)$$

Mithilfe der Youngschen Ungleichung ($ab \leq \frac{\delta}{2}a^2 + \frac{1}{2\epsilon}b^2$) und $\delta > 0$ folgt

$$a_\epsilon(v, v) \geq \left(1 - \frac{\delta}{2}|1 - \epsilon|\right) \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \|\{\mathbf{K}^{\frac{1}{2}} \nabla v\}\|_{L^2(E)}^2 + \sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \frac{\sigma_e^0 - \frac{C_t^2 K_1^2 n_0}{2\delta K_0} |1 - \epsilon|}{|e|^{\beta_0}} \|\{[v]\}\|_{L^2(E)}^2 + \alpha \|\{v\}\|_{L^2(\Omega)}^2 \quad (72)$$

Für $\epsilon = 0$ setze beispielsweise $\delta = 1$, $\sigma_e^0 \geq \frac{C_t^2 K_1^2 n_0}{K_0}$ und für $\epsilon = -1$ beispielsweise $\delta = \frac{1}{2}$, $\sigma_e^0 \geq \frac{2C_t^2 K_1^2 n_0}{K_0}$. Damit ergibt sich $\kappa = \frac{1}{2}$.

Stetigkeit:

Für die Stetigkeit muss die Bedingung

$$a(v, w) \leq M \|\{v\}\|_{\mathcal{E}}^2 \|\{w\}\|_{\mathcal{E}}^2, \quad \forall v \in \mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h) \quad (73)$$

erfüllt werden, was für σ_e^0 der Fall ist. Die bilineare Form ist im Allgemeinen nicht stetig auf $H^2(\mathcal{E}_h)$.

Lokale Massenerhaltung:

Wähle eine Testfunktion $v \in \mathcal{D}_\parallel(\mathcal{E}_h)$ so, dass sie sich nur innerhalb eines fixen Elements E von null unterscheidet, ergibt sich (58) zu

$$\underbrace{\int_E (\alpha P_h - f)}_{(i)} + \underbrace{\sum_{e \in \partial E} \frac{\sigma_e^0}{|e|^{\beta_0}} \int_e (P_h|_E - P_h|_{\mathcal{N}(e;E)})}_{(ii)} = \underbrace{\int_{\partial E} \{\mathbf{K} \nabla P_h \cdot \mathbf{n}_E\}}_{(iii)} \quad (74)$$

wobei $\mathcal{N}(e; E)$ die Elemente beschreibt, die an das Element E grenzen. Die Größe P_h kann als Dichte interpretiert werden. Der Term (i) beschreibt dann einen Zuwachs oder eine Abnahme durch Erzeugung bzw. Vernichtung. Der Term (ii) beschreibt den Fluss über die Grenzen des Elements. Der Term (iii) ist ein rein numerischer Anteil, welcher für die starke Lösung verschwindet.

Existenz und Eindeutigkeit:

Annahme, dass eine der drei Bedingungen wahr ist:

1. Im Fall der NIPG gilt $k \geq 1$ und weiter $\alpha > 0$ oder $\sigma_e^0 > 0$
2. Im Fall SIPG oder IIPG gilt $k \geq 1$ und σ_e^0 ist durch eine festzulegende Konstante nach unten beschränkt.
3. Im Fall NIPG gilt $k \geq 2$, $\alpha = 0$ und $\sigma_e^0 = 0$

Fehleranalyse

Mit der Dreiecksungleichung

$$\|p - P_h\|_{\mathcal{E}} \leq \|p - \tilde{p}\|_{\mathcal{E}} + \|P_h - \tilde{p}\|_{\mathcal{E}} \quad (75)$$

für eine Funktion $\tilde{p} \in \mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h)$, die die exakte schwache Lösung am besten approximiert. Bei Konsistenz gilt die Galerkin-Orthogonalität

$$a_\epsilon(P_h - p, v) = 0, \quad \forall v \in \mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h) \quad (76)$$

Mit der Identifizierung $a_\epsilon(\xi, v) = a_\epsilon(p - \tilde{p}, v)$ mit $\xi = P_h - \tilde{p}$ und unter Benutzung der Koerzivitat und der Wahl $v = \xi$ folgt

$$\kappa \|\xi\|_{\mathcal{E}}^2 \leq \left| \underbrace{\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E (\mathbf{K} \nabla(p - \tilde{p}) \nabla \xi + \alpha(p - \tilde{p}) \xi)}_{T_1} - \underbrace{\sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e \{\mathbf{K} \nabla(p - \tilde{p}) \cdot \mathbf{n}_e\} [\xi]}_{T_2} \right| \quad (77)$$

$$+ \epsilon \left| \underbrace{\sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e \{\mathbf{K} \nabla \xi \cdot \mathbf{n}_e\} [p - \tilde{p}]}_{T_3} + \underbrace{J_0^{\sigma_0, \beta_0}(p - \tilde{p}, \xi)}_{T_4} \right| \quad (78)$$

TODO

Implementierung

Zuerst wir die lokale Matrix A_E aus dem Integral $\int_E (\mathbf{K} \nabla v \nabla w + \alpha v w)$ bestimmt, so dass sich

$$(A_E)_{i,j} = \int_E (\mathbf{K} \nabla \phi_{i,E} \nabla \phi_{j,E} + \alpha \phi_{i,E} \phi_{j,E}) \quad (79)$$

$$= 2|E| \int_{\hat{E}} \left(\mathbb{K} (\mathbf{B}_E^T)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_{i,E} (\mathbf{B}_E^T)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_{j,E} + (\alpha \circ F_E) \hat{\phi}_{i,E} \hat{\phi}_{j,E} \right) \quad (80)$$

Die rechte Seite lautet dann

$$(b_E)_i = \int_E f \phi_{i,E} \quad (81)$$

Ebenso verfahren man mit den lokalen Matrizen uber eine Schnittstelle. Dies ergibt grundlegende Algorithmen:

- 1) Berechnung der lokalen Matrix A_E :
 - Setze die Quadraturgewichte und -punkte
 - Schleife uber alle Quadraturpunkte 1 to N_G :
 - * Berechne die Jacobi-Matrix \mathbf{B}_E
 - * Berechne nun fur den Punkt den Funktionswert und die Ableitung fur alle Basisfunktionen $\phi_{i,E}$ fur $i = 1, \dots, N_{\text{loc}}$ auf dem Element
 - * Berechne die globalen Punkte des Quadraturpunktes und berechne daraus den Funktionswert der globalen Funktion f
 - * Schleifen uber Matrixdimension $N_{\text{loc}} \times N_{\text{loc}}$. Addiere auf das Matricelement den aktuellen Summanden aus der Gau-Quadratur
- 2) Berechnung der Beitrage der Schnittstellen
 - Setze die Quadraturgewichte und -punkte, berechne $|e|$ und n_e
 - Finde Schnittstellennachbarn E_e^1 und E_e^1
 - Schleife uber alle Quadraturpunkte 1 to N_G :
 - * Berechne nun fur den Punkt den Funktionswert und die Ableitung fur alle Basisfunktionen $\phi_{i,E}$ fur $i = 1, \dots, N_{\text{loc}}$ auf der Schnittstelle
 - * Schleifen uber Matrixdimension $N_{\text{loc}} \times N_{\text{loc}}$. Addiere auf das Matricelement den aktuellen Summanden aus der Gau-Quadratur
- 3) Berechnung globale Volumenmatrix
 - Schleife uber alle Elemente 1 to N_{el}