

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Master of Science

**Diskontinuierliche Galerkin Methoden
zur Lösung der
Liouville-von-Neumann-Gleichung**

Matthias Jaeger
geboren in Würselen

25. Oktober 2019

Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik
Fakultät Physik
Technische Universität Dortmund

Erstgutachter: PD. Dr. Dirk Schulz
Zweitgutachter: Prof. Dr. Manfred Bayer
Abgabedatum: 17. Juli 2019

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
2	Problemstellung	2
2.1	Dichteoperator und Dichtematrix	2
2.2	Herleitung der Liouville-von-Neumann Gleichung	3
2.3	Schwerpunkt- und Relativkoordinaten	4
2.4	Charakteristische Einheiten	6
2.5	Mathematische Aspekte der Liouville-von-Neumann Gleichung	7
2.6	Randbedingungen	7
2.7	Strom- und Ladungsträgerdichte	9
2.8	Selbstkonsistentes Potential	9
2.9	Wigner Funktion	14
3	DG Verfahren	15
3.1	Konsistenz (in Anlehnung an den Vortrag)	15
3.2	DG Schema	16
3.3	Rankine-Hugoniot-Bedingung	20
3.4	FD-DG-Schema	24
	Literatur	33

1 Einleitung

Quantenstrukturen, wie sie heutzutage hergestellt werden können, eröffnen neue Möglichkeiten im Bereich der ultraschnellen Elektronik und Photonik. Solche Strukturen lassen sich in aller Regel als *offene* Systeme beschreiben. Es findet ein Austausch von lokal erhaltenen Fermionen – die Erhaltung wird durch eine lokale Kontinuitätsgleichung beschrieben – mit der Umgebung statt. Die Umgebung besteht dabei aus mindestens zwei verschiedenen Teilchen-Reservoirs. In diesem Fall kann also ein Nicht-Gleichgewichtszustand erreicht werden, beispielsweise durch das Anlegen einer Spannung. Das zu untersuchende System besitzt eine endliche Ausdehnung im Raum. Es muss im Nicht-Gleichgewichtsfall folglich ein Strom durch die Oberfläche als Rand des Systems fließen. Wir beschränken uns hier auf eindimensionale Quantenstrukturen, für die also die interessante Physik in einer Dimension stattfindet. Dabei wollen wir den Strom der Teilchen, also den quantenmechanischen Transport beschreiben. Dies geschieht allgemein in verschiedenen Anwendungsfällen (Hydrodynamik, Aerodynamik, Elektronik, Neutronentransport, ...) mit Hilfe einer die Dynamik beschreibenden Differentialgleichung. Hierfür werden Randbedingungen benötigt. Eben diese Randbedingungen definieren den offenen (oder auch geschlossenen) Charakter des Systems.

1.1 Motivation

"Unlike the IP methods for elliptic problems, these DG methods have been proven to be clearly superior to the already existing finite element methods for hyperbolic conservation laws." [1]

2 Problemstellung

2.1 Dichteoperator und Dichtematrix

Aus Ingenieurs-Sicht ist es sehr natürlich, nach der Elektronendichte $n(\mathbf{r})$ in einem Quantensystem zu fragen. Quantenmechanisch ist diese Größe eine Observable, also der Erwartungswert eines hermiteschen Operators bezüglich des Hilbertraums der L^2 -Funktionen. Anschaulich ist klar, dass sich die Elektronendichte aus zwei Wahrscheinlichkeiten zusammensetzt. Erstens benötigen wir die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Zustand mit Energie ϵ besetzt ist. Diese wird mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit, dass am Ort \mathbf{x} überhaupt ein Teilchen vorhanden ist, multipliziert. Im Gleichgewicht ergibt sich mit ϵ_α als Eigenwerte und Ψ_α als Eigenvektoren des Hamiltonoperators [2]

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} C_{\alpha} C_{\beta}^* \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

mit $|C_{\alpha}|^2 = f(\epsilon_{\alpha} - \mu)$, der mittleren Besetzungszahl für wechselwirkungsfreie Teilchen, gegeben durch

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(\beta E)} . \quad (2.2)$$

Wir bezeichnen mit $\tilde{\rho}(\alpha, \beta) = f_{\alpha} \delta_{\alpha, \beta}$ den diagonalen Dichteoperator in der Energiedarstellung und schreiben allgemein

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \tilde{\rho}(\alpha, \beta) \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}') , \quad (2.3)$$

sodass die Elektronendichte sich aus der Dichtematrix in Ortsdarstellung aus

$$n(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \quad (2.4)$$

ergibt. Nehmen wir freie-Teilchen-Näherung in y - und z -Richtung an mit $\lambda^2 = \hbar^2 / 2mk_B T$, so lässt sich die Dichtematrix separieren [grubin1993transport] gemäß

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \exp\left(\frac{(y - y')^2 + (z - z')^2}{4\lambda^2}\right) . \quad (2.5)$$

Wir konzentrieren uns daher im folgenden lediglich auf ein Modell unabhängiger Elektronen in einer Dimension, sodass es genügt, die Einteilchen-Dichtematrix zu betrachten.

2.2 Herleitung der Liouville-von-Neumann Gleichung

Die Gleichung (2.3) stellt eine unitäre Transformation $\rho = V\hat{\rho}V^\dagger$ mit $[V]_{\mathbf{r},\alpha} = \Psi_\alpha(\mathbf{r})$ dar. Unter Kenntnis der Eigenvektoren und -werte des Hamiltonoperators könnten wir also direkt die Dichtematrix in Ortsdarstellung erhalten. Dies gilt jedoch lediglich im Gleichgewichts-Fall.

Für zeitabhängige Probleme betrachten wir stattdessen direkt die Bewegungsgleichung für den Dichteoperator $\hat{\rho}$ – die von-Neumann-Gleichung – und daraus abgeleitet die Bewegungsgleichung für die Dichtematrix im Ortsraum $\rho(x, x')$ – die Liouville-von-Neumann Gleichung. Der Zusammenhang zwischen Operator und Matrix ist gegeben durch

$$\rho(x, x') = \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle \quad (2.6)$$

$$= \langle x | \left(\sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| \right) | x' \rangle, \quad (2.7)$$

wobei p_{α} die Eigenwerte von $\hat{\rho}$ sind.

2.2 Herleitung der Liouville-von-Neumann Gleichung

Die Liouville-von-Neumann Gleichung erhalten wir aus der von-Neumann-Gleichung wie folgt.

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, H] \quad (2.8)$$

$$\underbrace{\langle x | \frac{d\hat{\rho}}{dt} | y \rangle}_{=\partial_t \rho(x, y, t)} = \left\langle x \left| \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, H] y \right. \right\rangle \quad (2.9)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left(\underbrace{\langle x | \Psi_{\alpha} \rangle}_{\equiv \Psi_{\alpha}(x)} \langle \Psi_{\alpha} | H y \rangle - \langle x | H \Psi_{\alpha} \rangle \underbrace{\langle \Psi_{\alpha} | y \rangle}_{\equiv \Psi_{\alpha}^*(y)} \right) \quad (2.10)$$

Mit dem Hamiltonoperator für ein einzelnes Teilchen in einer Dimension in Ortsdarstellung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \Psi(x, t) = \langle x | H \Psi \rangle \equiv \mathcal{L}(x, t) \Psi(x, t) \quad (2.11)$$

folgt mit $H^\dagger = H$ und temporärer Unterdrückung der Zeitabhängigkeit

$$\partial_t \rho(x, y, t) = \frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} p_{\alpha} (\Psi_{\alpha}(x) \mathcal{L}^*(y) \Psi_{\alpha}^*(y) - \mathcal{L}(x) \Psi_{\alpha}(x) \Psi_{\alpha}^*(y)) \quad (2.12)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\mathcal{L}^*(y) - \mathcal{L}(x)) \sum_{\alpha} p_{\alpha} (\Psi(x) \Psi^*(y)) \quad (2.13)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\mathcal{L}^*(y) - \mathcal{L}(x)) \langle x | \left(\sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| \right) | y \rangle \quad (2.14)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\mathcal{L}^*(y) - \mathcal{L}(x)) \rho(x, y) \quad (2.15)$$

Wir definieren noch

$$\mathcal{L}(x, y) \equiv \mathcal{L}(x) - \mathcal{L}^*(y) \quad (2.16)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_x^2 - \partial_y^2) + V(x) - V^*(y) \quad (2.17)$$

und erhalten die Liouville-von-Neumann Gleichung im Ortsraum

$$\partial_t \rho(x, y, t) = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{L}(x, y, t) \rho(x, y, t) . \quad (2.18)$$

Es lassen sich zwei Fälle unterscheiden:

- Der stationäre Fall mit $\partial_t \rho(x, y, t) = 0$
- der allgemeinere transiente Fall $\partial_t \rho(x, y, t) \neq 0$.

2.3 Schwerpunkt- und Relativkoordinaten

Wir führen die Schwerpunkt- und Relativkoordinaten

$$r \equiv \frac{x + y}{2} \quad q \equiv x - y \quad (2.19)$$

$$\Leftrightarrow \quad x = r + \frac{q}{2} \quad y = r - \frac{q}{2} \quad (2.20)$$

ein. Die Ableitungen transformieren sich dabei gemäß

$$\partial_r \partial_q = \partial_r \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial q} \right) \quad (2.21)$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{2} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{-1}{2} \right) \quad (2.22)$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial x} 1 + \frac{\partial}{\partial y} 1 \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{2} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{-1}{2} \right) \quad (2.23)$$

$$= \frac{1}{2} \partial_x \partial_x - \frac{1}{2} \partial_x \partial_y + \frac{1}{2} \partial_y \partial_x - \frac{1}{2} \partial_y \partial_y \quad (2.24)$$

$$= \frac{1}{2} (\partial_x^2 - \partial_y^2) , \quad (2.25)$$

wobei im letzten Schritt der Satz von Schwarz genutzt wird. Damit ergibt sich der transformierte Liouville Operator zu

$$\mathcal{L}(r, q, t) = -\frac{\hbar^2}{m} \partial_r \partial_q + \underbrace{V\left(r + \frac{q}{2}, t\right) - V^*\left(r - \frac{q}{2}, t\right)}_{\equiv \tilde{B}(r, q, t)} . \quad (2.26)$$

Mit der Umbenennung

$$\rho \longrightarrow u$$

$$r \longrightarrow \tilde{x}$$

$$q \longrightarrow \tilde{y}$$

$$t \longrightarrow \tilde{t}$$

sowie der Definition

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

lautet die LvN Gleichung nun

$$i\hbar \partial_{\tilde{t}} u(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) + \frac{\hbar^2}{m} \operatorname{div} \left(A \nabla u(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \right) - \tilde{B}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) u(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) = 0 \quad (2.28)$$

2.4 Charakteristische Einheiten

Zunächst wird die Liouville-von-Neumann Gleichung in eine einheitenlose Form gebracht.

$$i \frac{\hbar}{V_0} \partial_{\tilde{t}} u(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) + \frac{\hbar^2}{m V_0} \operatorname{div} \left(A \nabla u(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \right) - \frac{\tilde{B}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})}{V_0} u(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) = 0 \quad (2.29)$$

Energien werden in Einheiten von V_0 gemessen, welche wir im weiteren Verlauf als die Potentialbarriere $V_0 = 0,1768 \text{ eV}$ wählen werden.

Wir führen folgende Skalierung ein, um nun auch Zeiten und Orte einheitenlos zu behandeln.

$$\begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \end{pmatrix} = \xi \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad \xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{m V_0}} \quad (2.30)$$

$$\tilde{t} = \tau t \quad \tau = \frac{\hbar}{V_0} \quad (2.31)$$

Damit folgt

$$\partial_{\tilde{t}} = \frac{\partial}{\partial(\tau t)} = \tau^{-1} \partial_t = \frac{V_0}{\hbar} \partial_t \quad (2.32)$$

$$\partial_{\tilde{x}}^2 = \frac{\partial^2}{(\partial(\xi x))^2} = \xi^{-2} \partial_x^2 = \frac{m V_0}{\hbar^2} \partial_x^2, \quad (2.33)$$

sodass die Liouville-von-Neumann Gleichung die Form

$$\boxed{i \partial_t u(x, y, t) + \operatorname{div} (A \nabla u(x, y, t)) - B(x, y, t) u(x, y, t) = 0} \quad (2.34)$$

annimmt. Hierbei ist

$$B(x, y, t) \equiv \frac{\tilde{B}(x, y, t)}{V_0} = \frac{V \left(x + \frac{y}{2}, t \right) - V^* \left(x - \frac{y}{2}, t \right)}{V_0} \quad (2.35)$$

eingeführt worden. Die Skalierung lässt sich berechnen, indem die effektive Masse als konstant

$$m = 0.063 m_0 = 0.063 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad (2.36)$$

angenommen wird. Damit ergibt sich folgende Skalierung zwischen SI-Einheiten und den hier eingeführten einheitenlosen Größen.

$$V_0 = 0,1768 \text{ eV} \quad (2.37)$$

$$\xi = 2,62 \cdot 10^{-9} \text{ m} \quad (2.38)$$

$$\tau = 3,72 \cdot 10^{-15} \text{ s} \quad (2.39)$$

2.5 Mathematische Aspekte der Liouville-von-Neumann Gleichung

Die eindimensionale Wellenfunktion $\Psi(x)$ eines Teilchens ist ein Vektor des unendlich-dimensionalen Hilbertraums $L^2(\mathbb{R})$ mit dem üblichen Skalarprodukt

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \Phi(x) dx. \quad (2.40)$$

Beschränken wir uns auf ein Rechengebiet L , so ist entsprechend $\Psi(x) \in L^2(L)$. Diskretisieren wir ferner das System, so wird der Hilbertraum endlichdimensional mit Dimension N . Dann ist die Dichtematrix in Gleichung (2.34) eine Matrix der Form $\mathbb{C}^N \times \mathbb{C}^N$ und der Liouville-Operator ein "Superoperator" [3] der Form $(\mathbb{C}^N \times \mathbb{C}^N) \times (\mathbb{C}^N \times \mathbb{C}^N)$. Letztlich wird numerisch gesehen N^2 der Anzahl Freiheitsgrade entsprechen und die Liouville-von-Neumann Gleichung wird wieder eine Matrix-Vektor-Gleichung sein. Dazu wird $u(x, y)$ nicht als Matrix, sondern als Vektor der Länge N^2 geschrieben.

Eigenschaften von $B(x, y)$ und A . Hermitizität von \mathcal{L} (frenseley).

2.6 Randbedingungen

Die Dynamik des in der Einleitung skizzierten Systems muss irreversibel in der Zeit sein. Andernfalls sind instabile Lösungen in der Zeit zulässig [3]. Solche instabilen Lösungen lassen sich anhand des Eigenwertspektrums des Liouvilleoperators aus Gleichung (2.18) erkennen. Es lässt sich zeigen, dass für geschlossene, konservative Systeme \mathcal{L} hermitisch ist als Folge der Hermitizität des Hamiltonoperators H [3].

$$H - H^\dagger = \frac{\hbar}{i} \int_s \mathbf{j} ds = 0 \quad (2.41)$$

Der Nettostrom durch die Oberfläche ist also Null. Damit treten lediglich oszillierende Lösungen der Liouville-von-Neumann Gleichung auf. Da wir nun offene Systeme modellieren wollen, müssen wir das Ein- und Austreten von Teilchen in das System erlauben und verletzen dadurch die Hermitizität von H und \mathcal{L} . Dadurch wird mindestens ein Eigenwert einen nicht-verschwindenden imaginären Teil bekommen. Anhand Gleichung (2.18) sehen wir, dass in der Zeit instabile Lösungen für Eigenwerte mit positivem Realteil auftreten. Falls die Randbedingungen reversibel in der Zeit sind, so sind die Realteile der Eigenwerte symmetrisch und es existieren unphysikalische, instabile Lösungen [3]. Ein Beispiel hierfür ist $\partial \rho / \partial r = 0$ entlang $x = 0$ und $y = 0$. Diese Randbedingung ist insofern plausibel, da sie zu konstanter

2 Problemstellung

Dichte an den Rändern führt und damit den Effekt eines fixierten chemischen Potentials beschreibt. Sie führt jedoch wegen der Zeit-Umkehrbarkeit zu unphysikalisch exponentiell steigenden Lösungen.

Die Randbedingungen müssen also irreversibel in der Zeit sein und ferner die Stabilität des Systems sicherstellen. Ein hierfür geeigneter Ansatz wird erstmals in [3] getroffen, indem die Reservoirs in Analogie zu einem schwarzen Körper gesehen werden. In das Reservoir eintretende Teilchen werden vollständig absorbiert. Umgekehrt "strahlt" das Reservoir Teilchen entsprechend der thermischen Gleichgewichts-Verteilung in das System ein. Damit ist klar, dass Randbedingungen für *Inflow*-Teilchen mit positiver Geschwindigkeit am linken Rand und solche mit negativer Geschwindigkeit am rechten Rand gesetzt sind, während für *Outflow*-Teilchen keine Randbedingung vorgegeben ist. Wir müssen also dazu in der Lage sein, Teilchen nach ihrer Geschwindigkeit zu unterscheiden. Es ist daher ein natürliches Vorgehen, nach einer Wahrscheinlichkeitsverteilung im Phasenraum zu fragen. Dieser Frage ging Eugene Wigner 1932 nach [4] und formulierte die nach ihm benannte Wignerverteilung $P(r, k)$, siehe Kapitel 2.9. Die klassische Position eines Teilchens wird dann mit r aus Gleichung (2.19) und der klassische Impuls mit $p = \hbar k$ identifiziert. Dabei ist k die zu q aus Gleichung (2.19) gehörende Wellenzahl. Positive und negative Geschwindigkeiten lassen sich einfach durch das Vorzeichen von k unterscheiden, sodass sich die Randbedingungen konkretisieren lassen.

$$P(-L/2, k) |_{k>0} = f_l(\epsilon k) \quad (2.42)$$

$$P(+L/2, k) |_{k<0} = f_r(\epsilon k) \quad (2.43)$$

Die Gleichgewichts-Verteilung der Reservoirs $f_{l,r}(k)$ ergibt sich aus der Fermi-Dirac-Statistik wie folgt durch Integration über die zwei senkrecht zu $k \equiv k_z$ stehenden Wellenzahlen.

$$\frac{\langle N \rangle}{A_\perp} = 2 \frac{1}{A_\perp} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 + \exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu))} \quad (2.44)$$

$$= 2 \frac{1}{A_\perp} \frac{A_\perp}{(2\pi)^2} \sum_{k_z} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \frac{1}{1 + \exp\left(\beta\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) \frac{\hbar^2}{2m} - \mu\right)} \quad (2.45)$$

$$= \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_{k_z} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dk_\perp k_\perp \frac{1}{1 + \exp\left(\beta\left(k_\perp^2 + k_z^2\right) \frac{\hbar^2}{2m} - \beta\mu\right)} \quad (2.46)$$

Wir substituieren $\epsilon = \left(k_\perp^2 + k_z^2\right) \frac{\hbar^2}{2m} - \mu$ und somit $dk_\perp = \frac{m}{\hbar^2 k} d\epsilon$. Für das Integral

nutzen wir $\frac{d}{dx} \ln(1 + \exp(-\beta x)) = -\beta / (1 + \exp(\beta x))$ und folgern weiter

$$\frac{\langle N \rangle}{A_{\perp}} = \frac{4\pi}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \sum_{k_z} \int_{\epsilon(0)}^{\epsilon(\infty)} d\epsilon \frac{1}{1 + \exp(\beta \epsilon)} \quad (2.47)$$

$$= \frac{m}{\pi \hbar^2} \left(\frac{-1}{\beta} \right) \sum_{k_z} \ln \left(1 + \exp \left(\beta \left(k_{\perp}^2 + k_z^2 \right) \frac{\hbar^2}{2m} + \beta \mu \right) \right) \Big|_0^{\infty} \quad (2.48)$$

$$= \sum_{k_z} \frac{m}{\pi \hbar^2 \beta} \ln \left(1 + \exp \left(\beta \left(\frac{-k_z^2 \hbar^2}{2m} + \mu \right) \right) \right) \quad (2.49)$$

Für lokal konstantes β erhalten wir daher in Übereinstimmung mit [3] die Randbedingungen

$$f_{l,r}(k) = \frac{m}{\pi \hbar^2 \beta} \ln \left(1 + \exp \left(\beta \left(\frac{-k^2 \hbar^2}{2m} + \mu_{l,r} \right) \right) \right). \quad (2.50)$$

2.7 Strom- und Ladungsträgerdichte

Aus der Dichtematrix $\rho(r, q, t)$ in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten lassen sich Strom- und Ladungsträgerdichte ableiten. Es gilt nach [5] bzw. Gleichung (2.4)

$$j(r, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \partial_q \rho(r, q, t) |_{q=0} \} \quad (2.51)$$

$$n(r, t) = \text{Re} \{ \rho(r, q, t) |_{q=0} \}. \quad (2.52)$$

Wie bauen wir das in die Liouville-von-Neumann Gleichung in Ortsdarstellung ein, ohne zum Wigner-Formalismus überzugehen?

2.8 Selbstkonsistentes Potential

Das Potential in dem Liouville-Operator (2.11) setzt sich zusammen aus dem Hartree Potential $u(x, y, z)$, dem Heterostuktur Potential $V_s(x, y, z)$ sowie dem äußeren Feld $-eU$.

$$V(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}) + V_s(\mathbf{x}) - eU \quad (2.53)$$

Auch hier lassen sich wieder zwei Fälle unterscheiden.

- Der Gleichgewichtsfall $U = 0$.

- Der Nicht-Gleichgewichtsfall $U \neq 0$.

Da das Hartree Potential von der Konstellation der Elektronen abhängt und umgekehrt, wird es selbstkonsistent berechnet, wie im folgenden Abschnitt erläutert wird.

2.8.1 Hartree-Potential

Das Hartree Potential ist mit der Elektronendichte $n(\mathbf{x})$ durch die Poisson-Gleichung [6]

$$-\nabla \cdot \epsilon(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x}) = e^2 (n(\mathbf{x}) - N_D(\mathbf{x})) , \quad (2.54)$$

verknüpft, wobei $N_D(\mathbf{x})$ die ortsabhängige Dichte der Donatoren in der Heterostruktur und $\epsilon(\mathbf{x})$ die Permittivität bezeichnet. Akzeptoren und Löcher werden aufgrund der Dotierung $N_D \gg N_A$ vernachlässigt. Ferner nehmen wir aufgrund der eindimensionalen Problemstellung an, dass $u(\mathbf{x}) = u(x)$ und $\epsilon(\mathbf{x}) = \epsilon(x)$ sodass die Poisson-Gleichung eindimensional wird.

$$-\partial_x (\epsilon(x) \partial_x u(x)) = e^2 (n(x) - N_D(x)) \quad (2.55)$$

Die Randbedingungen für u ergeben sich aus der Forderung nach Ladungsneutralität in ausreichend großer Entfernung [6]

$$u|_{\partial\Omega} = \mu(\mathbf{x})|_{\partial\Omega} - V_s(\mathbf{x})|_{\partial\Omega} - \frac{1}{\beta} \mathcal{F}_{1/2}^{-1}(N_D/N_C) . \quad (2.56)$$

Hierin ist $\mu(\mathbf{x})$ das chemische Potential, $\beta = 1/(k_B T)$ mit $T = 300$ K, $N_C = 2 \left(m^*/2\pi\hbar^2 \beta \right)^{3/2}$ die "effektive Zustandsdichte" und $\mathcal{F}_{1/2}$ das Fermi-Dirac Integral der Ordnung 1/2:

$$\mathcal{F}_j(x) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{t^j}{\exp(t-x) + 1} dt \quad (2.57)$$

Das Potential ergibt sich nach Gleichungen (2.55) und (2.4) aus dem Dichteoperator – umgekehrt ergibt sich der Dichteoperator nach Gleichung (2.34) aus dem Potential. Die Beziehung zwischen Potential und Dichte ist nicht-linear. Die gleichzeitige Lösung für Poisson- und Liouville-von-Neumann Gleichung zu finden erfordert daher Iteration. Das Problem wird *selbstkonsistent* gelöst. Dazu wird (2.34) zunächst mit einem geeigneten *initial guess* $V^{(0)}$ gelöst. Nun wird iteriert und alternierend gelöst, bis Dichte und Potential sich nicht mehr signifikant ändern. Im Fall der transienten Betrachtung entspricht eine Iteration gleichzeitig einem Zeitschritt. Das Verfahren

ist als *Gummel (Plug-in) Approach* etabliert und beispielsweise in [7] beschrieben. Die folgenden Ausführungen orientieren sich an dieser Literaturquelle.

Numerisch behandeln wir Gleichung (2.55) mit dem Finite-Differenzen Verfahren. Das Rechengebiet L wird diskretisiert gemäß

$$L_N \equiv \{x_i | x_i = ih \forall i = 0, 1, \dots, N \text{ mit } L = Nh\} \quad (2.58)$$

Aus der Taylorentwicklung einer Funktion $f : L \rightarrow \mathbb{R}$ folgt für die Ableitungen

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \quad (2.59)$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) . \quad (2.60)$$

Wir schreiben kurz $f(x_i) \equiv f_i$. Damit lässt sich mit $a_i \equiv (\epsilon_{i+1} - \epsilon_{i-1}) / (4h^2\epsilon_i)$ Gleichung (2.55) umschreiben zu

$$u_{i+1} \cdot (1 + a_i) - 2u_i + u_{i-1} \cdot (1 - a_i) - \underbrace{e^2 h^2 \frac{(N_{D,i} - n_i)}{\epsilon_i}}_{\equiv \text{rhs}_i} = 0 , \quad (2.61)$$

wobei berücksichtigt werden muss, dass u_0 und u_N über die Randbedingungen nach Gleichung (2.56) vorgegeben sind. Somit haben wir das LGS

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 + a_1 & & & 0 \\ 1 - a_2 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 + a_{N-2} \\ 0 & & & 1 - a_{N-1} & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{rhs}_1 \\ \vdots \\ \text{rhs}_{N-1} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} (1 - a_1) u_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ (1 + a_{N-1}) u_N \end{bmatrix} \quad (2.62)$$

zu lösen. An dieser Stelle halten wir kurz inne und fragen uns, ob wir nicht eine "bessere" Vorhersage für $u^{(n+1)}$ treffen können, sodass wir eine schnellere Konvergenz der Iteration erreichen können. Diese Überlegung führt uns auf das verallgemeinerte Newton-Raphson-Verfahren. Die linke Seite von Gleichung (2.61) definieren wir als Funktion $P_i(u_1, \dots, u_N)$ und wenden hierauf das Newton-Raphson-Verfahren an. Ausgehend von einem Startwert $\mathbf{u}^{(0)}$ erhalten wir das Fixpunktproblem

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{u}^{(n)} - (\mathbf{DP}|_{\mathbf{u}^{(n)}})^{-1} \mathbf{P}(\mathbf{u}^{(n)}) , \quad (2.63)$$

wobei wir die Vektorschreibweise

$$\mathbf{f} = (f_0, \dots, f_N)^T = (f(x_0), \dots, f(x_N))^T \quad (2.64)$$

eingeführt haben und D der Differentiationsoperator ist, in diesem Fall also die Jacobimatrix von P .

$$(\mathbf{DP}|_{\mathbf{u}^{(n)}})_{i,j} = \frac{\partial P_i}{\partial u_j^{(n)}} \quad (2.65)$$

$$\stackrel{(2.61)}{=} (1 + a_i) \delta_{i+1,j} - 2\delta_{i,j} + (1 - a_i) \delta_{i-1,j} + \frac{e^2 h^2}{\epsilon_i} \frac{\partial n_i^{(n)}}{\partial u_j^{(n)}} \quad (2.66)$$

An dieser Stelle ist anzumerken, dass nun auch die Dichte n einen Iterationsindex (n) bekommen hat. Dies ist auf die eingangs beschriebene alternierende Iteration zurückzuführen, in welcher abwechselnd $n^{(n)}$ und $u^{(n)}$ in einem einzigen Iterationsschritt (n) berechnet werden. Ferner ist die Ableitung $\frac{\partial n_i^{(n)}}{\partial u_j^{(n)}}$ zunächst nicht bekannt.

Es ist überhaupt eine Abweichung $\frac{\partial n_i^{(n)}}{\partial u_j^{(n)}} \neq 0$, die den Unterschied zwischen Newton-Iteration und direktem Lösen bewirkt. Im Allgemeinen liegt keine exakte Form dieser Ableitung vor, da hierzu ja gerade die Liouville-von-Neumann Gleichung zu lösen ist. Es lässt sich jedoch eine Abschätzung vornehmen, welche schnell und kostengünstig ist, sodass das Newton-Verfahren einen echten Vorteil gegenüber dem direkten Iterieren hat. Dazu bedienen wir uns der Maxwell-Boltzmann-Statistik

$$n(u) = N_0 \exp\left(\frac{u - u_0}{k_B T}\right) \quad (2.67)$$

als klassisches Gleichgewichts-Resultat. Dies ist wohlgermerkt eine Annahme und es lassen sich ebenso andere Annahmen, z.B. eine Fermi-Dirac-Statistik, wählen. Jedoch zeigt sich in der Praxis, dass diese Wahl zuverlässig zu einer Konvergenz des Verfahrens führt. Falls nicht stationär, sondern transient gelöst werden soll, sollte jedoch das Newton-Verfahren nicht verwendet werden, da ein Iterationsschritt hier einem Zeitschritt entspricht und die Annahme (2.67) heuristischer Natur ist. Somit würde physikalisches Verhalten implizit aufgeprägt werden, statt dass dieses durch die vorhandenen zwei Gleichungen beschrieben wird.

Für den stationären Fall folgt aus Annahme (2.67) für das diskretisierte System

$$\frac{\partial n_i}{\partial u_j} = \frac{n_i}{k_B T} \delta_{i,j} . \quad (2.68)$$

Statt die Jacobi-Matrix invertieren zu müssen, schreiben wir Gleichung (2.63) um.

$$\mathbf{DP}|_{\mathbf{u}^{(n)}} (\mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)}) = -\mathbf{P}(\mathbf{u}^{(n)}) \quad (2.69)$$

Explizit ausgeschrieben

$$(\mathbf{DP}|_{\mathbf{u}^{(n)}})_{i,j} = (1 + a_i) \delta_{i+1,j} + \left(\frac{e^2 \hbar^2}{\epsilon_i} \frac{n_i}{k_B T} - 2 \right) \delta_{i,j} + (1 - a_i) \delta_{i-1,j} \quad (2.70)$$

$$\left(\mathbf{P}(\mathbf{u}^{(n)}) \right)_i = u_{i+1}^{(n)} \cdot (1 + a_i) - 2u_i^{(n)} + u_{i-1}^{(n)} \cdot (1 - a_i) - e^2 \hbar^2 \frac{(N_{D,i} - n_i^{(n)})}{\epsilon_i} \quad (2.71)$$

mit $i, j = 1, \dots, N - 1$. Wir lösen das LGS für $(\mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)})$ und erhalten

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = (\mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)}) + \mathbf{u}^{(n)} . \quad (2.72)$$

2.8.2 Heterostuktur-Potential

Das Verfahren soll am Beispiel einer resonanten Tunneldiode (RTD) getestet werden. Dessen durch die Materialkomposition GaAs/AlGaAs resultierender Potentialverlauf $V_s(x)$ ist in Abbildung 2.1 gezeigt. Die eingezeichneten Längen wählen wir wie in

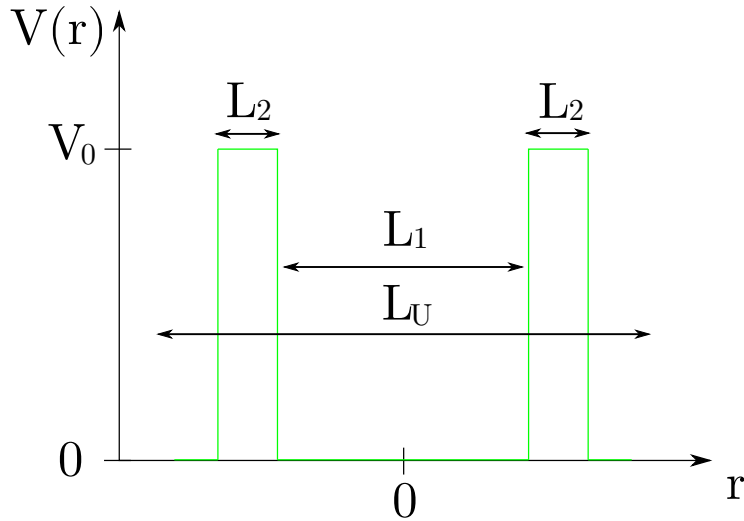


Abbildung 2.1 Potentialverlauf der RTD.

[5] zu

$$L_1 = 6 \text{ nm} \quad (2.73)$$

$$L_2 = 5 \text{ nm} \quad (2.74)$$

$$L_U = 30 \text{ nm} . \quad (2.75)$$

Hierin ist L_U die Länge, über der die Spannung U abfällt.

2.9 Wigner Funktion

Es ist mit $\langle x | \Psi \rangle = \Psi(x)$

$$P(x, p) \equiv \frac{1}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle x + y | \hat{\rho} | x - y \rangle e^{2ipy/\hbar} dy \quad (2.76)$$

die Wigner-Funktion gleich der Wigner-transformierten des Dichteoperators $\hat{\rho}$. Die Wigner Transformation ist eine invertierbare Abbildung

$$W : L(\mathcal{H}, \mathcal{H}) \rightarrow \text{Phasenraum}^* \quad (2.77)$$

$$\hat{G} \mapsto g(x, p) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x - s/2 | \hat{G} | x + s/2 \rangle e^{ips/\hbar} ds \quad (2.78)$$

3 DG Verfahren

3.1 Konsistenz (in Anlehnung an den Vortrag)

Unter Konsistenz verstehen wir, dass die Lösung der pDGL auch die von uns gewählte variationale Formulierung erfüllt.

- Dies bedeutet in Sichtweise A (numerischer Fluss)

$$f^*(u, u) = f(u) \quad (3.1)$$

Hierbei ist $f(u)$ der Fluss, der den Teil nach partieller Integration beschreibt.

$$\int_K v \operatorname{div}(A \nabla u) = \int_K \nabla v \cdot \underbrace{(-A \nabla u)}_{\equiv f(u)} + \int_{\partial K} v A \nabla u \cdot n_K \quad (3.2)$$

Hingegen ist $f^*(u^+, u^-)$ der numerische Fluss, der anhand der Charakteristik der pDGL gewählt werden kann. Diese Wahl ist das Herzstück der DG-Methoden. Die Wahl sollte Stabilität und Konsistenz gewährleisten. Stabilität bedeutet hier, kleine Änderungen der Daten resultieren in kleinen Änderungen der (numerischen) Lösungen. Außerdem auch, dass die Zeitableitung beschränkt ist, genauer gesagt

$$\sum_{K=1}^{\#\mathcal{T}} \frac{d}{dt} \|u_N\|_{2;K}^2 \leq 0 \quad (3.3)$$

- In Sichtweise B (Bilinearform) bedeutet Konsistenz erneut, dass die Lösung der pDGL die von uns gewählte variationale Formulierung, sprich die Galerkin-Gleichung, erfüllt.

$$\mathcal{B}_N(u, V) = F_N(V) \quad \forall V \in \mathbb{V}_N \quad (3.4)$$

Wir können in unserer Bilinearform beliebig Sprünge ergänzen, denn für die exakte Lösung gilt Stetigkeit und daher $\llbracket u \rrbracket = 0$.

konzeptionelle Beschreibung des Verfahrens, Vor- und Nachteile gegenüber anderen Verfahren / Motivation. Numerischer Fluss in Anlehnung an den Fluss im FV Verfahren ...

3.2 DG Schema

Wir verwenden das sogenannte *local* DG (LDG) Verfahren [8] und schreiben dazu die Differentialgleichung zweiter Ordnung in ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung um.

$$i\partial_t u(x, y, t) + \operatorname{div} \left(\underbrace{A \nabla u(x, y, t)}_{\equiv \mathbf{q}} \right) - \underbrace{B(x, y, t) u(x, y, t)}_{\equiv g(u)} = 0 \quad (3.5)$$

$$\begin{cases} i\partial_t u + \operatorname{div}(\mathbf{q}) - g(u) = 0 \\ \frac{1}{2}\partial_y u = q_x \\ \frac{1}{2}\partial_x u = q_y \end{cases} \quad (3.6)$$

Als Ansatzraum wählen wir wie üblich den endlichdimensionalen Funktionenraum der stückweisen, zweidimensionalen Polynome vom Grad $N_p - 1$.

$$\mathbb{V}_N = \bigoplus_{K \in \mathcal{T}} \{\Psi_n(K)\}_{n=1}^{N_p} \quad (3.7)$$

Hierbei ist \mathcal{T} die Triangulierung des Rechengebietes, sodass mit K eine einzelne Zelle bezeichnet wird. Für eine optimale Konditionierung der weiter unten eingeführten Massenmatrix ist es gemäß [9] sinnvoll, die orthonormierte Basis

$$\Psi_m(x, y) = \sqrt{2} P_i(a) P_j^{(2i+1, 0)}(b) (1-b)^i \quad (3.8)$$

mit

$$a = 2 \frac{1+x}{1-y} \quad b = y \quad (3.9)$$

zu wählen. Hierbei bezeichnet $P_n^{(\alpha, \beta)}$ das Jacobi-Polynom. Die in dem Raum \mathbb{V}_N liegende schwache Lösung ist durch eine Linearkombination der Basisfunktionen auf jeder Zelle K der Triangulierung \mathcal{T} eindeutig definiert.

$$\mathbf{x} \in K : u_N^K(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_p} \hat{u}_N^K(t) \Psi_m(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N_p} u_N^K(\xi_n^K, t) \ell_n^K(\mathbf{x}) \quad (3.10)$$

Die Darstellung links heißt "modale Entwicklung" und rechts "nodale Entwicklung", da hier die Entwicklungskoeffizienten wegen der Interpolationseigenschaft $\ell_n^K(\xi_m^K) =$

δ_{nm} gleich den Funktionswerten an den jeweiligen Interpolationspunkten ξ_n^K sind. Abkürzend definieren wir

$$\underline{u}_N^K \equiv \left(u_N^K(\xi_1^K, t), \dots, u_N^K(\xi_{N_p}^K, t) \right)^T. \quad (3.11)$$

Wir multiplizieren nun das Gleichungssystem (3.6) mit der Testfunktion ℓ_i , welche also ebenfalls Element des Ansatzraumes \mathbb{V}_N ist. Ferner wird über die Zelle K integriert und für den Divergenzterm eine partielle Integration durchgeführt. In unmittelbarer Anlehnung an das Schema für die Poissongleichung in zwei Dimensionen auf Seite 275, [9], erhalten wir

$$\begin{aligned} & i \int_K \partial_t \sum_{j=1}^{N_p} u_N^K(\xi_j^K, t) \ell_j^K(\mathbf{x}) \ell_i^K(\mathbf{x}) - \int_K \sum_{j=1}^{N_p} \mathbf{q}_N^K(\xi_j^K, t) \ell_j^K(\mathbf{x}) \cdot \nabla \ell_i^K(\mathbf{x}) \\ & + \int_{\partial K} \sum_{j=1}^{N_p} \mathbf{q}^{*,K}(\xi_j^K, t) \ell_j^K(\mathbf{x}) \ell_i^K(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}} - \int_K \sum_{j=1}^{N_p} g_N^K(\xi_j^K, t) \ell_j^K(\mathbf{x}) \ell_i^K(\mathbf{x}) = 0 \end{aligned}$$

$$\forall i = 1, \dots, N_p$$

$$\begin{aligned} & \int_K \sum_{j=1}^{N_p} u_N^K(\xi_j^K) \partial_{y/x} \ell_j^K(\mathbf{x}) \ell_i^K(\mathbf{x}) + \int_{\partial K} \hat{n}_{y/x} \sum_{j=1}^{N_p} \left(u^{*,K}(\xi_j^K) - u_N^K(\xi_j^K) \right) \ell_j(\mathbf{x}) \\ & = 2 \int_K \sum_{j=1}^{N_p} \left(\mathbf{q}_N^K \right)_{x/y}(\xi_j^K, t) \ell_i^K(\mathbf{x}) \ell_j^K(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Wegen der nicht eindeutigen Definition der schwachen Lösung am Zellenrand (sie ist eben *discontinuous*) müssen wir an dieser Stelle entscheiden, welchen Wert wir einsetzen wollen. Dazu erinnern wir uns an den vorangegangenen Abschnitt 3.1 und verwenden den numerischen Fluss $\mathbf{q}^{*,K}$ bzw. $u^{*,K}$, welchen wir später noch definieren müssen, um Konsistenz und Stabilität zu gewährleisten.

Definiere nun die Massenmatrix

$$\left(M^K \right)_{i,j} \equiv \int_K \ell_i^K(\mathbf{x}) \ell_j^K(\mathbf{x}) = J^K \int_{\hat{K}} \ell_i(\mathbf{x}) \ell_j(\mathbf{x}) \equiv J^K M \quad (3.12)$$

sowie die Steifigkeitsmatrix

$$\left(S_{x/y}^K\right)_{i,j} \equiv \int_K \partial_{x/y} \ell_j^K(\mathbf{x}) \ell_i^K(\mathbf{x}) = \left(M^K D_{x/y}\right)_{i,j} \quad (3.13)$$

Einschub: Die letzte Gleichheit folgt aus folgendem:

Mit dem Zusammenhang zwischen nodaler Basis $\ell_i(\mathbf{x})$ und modaler Basis $\Psi_i(\mathbf{x})$ gemäß [9], Seite 182

$$\ell_i = \sum_{j=1}^{N_p} \left(V^T\right)_{ij}^{-1} \Psi_j \quad (3.14)$$

und der logischen Tatsache, dass auch die Ableitung der modalen Basis (es handelt sich um ein Produkt von Lagrange-Polynomen, also letztlich ein Polynom vom Grad N) sich in selbiger entwickeln lassen gemäß

$$\partial_x \Psi_j(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_p} a_{jm} \Psi_m(\mathbf{x}) \quad (3.15)$$

folgt

$$\begin{aligned} \sum_n \ell_n \partial_x \ell_j|_{r_n} &= \sum_{n,m,p} \left(V^T\right)_{nm}^{-1} \left(V^T\right)_{jp}^{-1} \Psi_m \partial \Psi_p|_{r_n} \\ &= \sum_{n,m,p,q} \left(V^{-1}\right)_{mn} \left(V^T\right)_{jp}^{-1} \Psi_m a_{pq} V_{nq} \\ &= \sum_{p,q} \left(V^T\right)_{jp}^{-1} \Psi_q a_{pq} \\ &= \sum_p \left(V^T\right)_{jp}^{-1} \partial_x \Psi_p \\ &= \partial_x \ell_j \end{aligned}$$

Daher gilt

$$\int_K \partial_{x/y} \ell_j(\mathbf{x}) \ell_i(\mathbf{x}) = \sum_n \int_K \ell_n \left(\partial_{x/y} \ell_j|_{r_n} \right) \ell_i \quad (3.16)$$

$$= \sum_n \underbrace{\partial_{x/y} \ell_j|_{r_n}}_{\equiv (D_x)_{nj}} \int_K \ell_n \ell_i \quad (3.17)$$

$$= \left(M^K D_x \right)_{i,j} \quad (3.18)$$

Einsetzen der soeben definierten Matrizen liefert

$$i M^K \partial_t \underline{u}_N^K - \left(S_x^K \right)^T \left(\underline{\mathbf{q}}_N^K \right)_x - \left(S_y^K \right)^T \left(\underline{\mathbf{q}}_N^K \right)_y + \int_{\partial K} \hat{\mathbf{n}} \cdot \underline{\mathbf{q}}^{*,K} \underline{\ell}^K(\mathbf{x}) \ell_i^K(\mathbf{x}) - M^K \underline{g}_N^K = 0 \quad (3.19)$$

$$S_y^K \underline{u}_N^K + \int_{\partial K} \hat{n}_y \left(\underline{u}^{*,K} - \underline{u}_N^K \right) \underline{\ell}(\mathbf{x}) = 2 M^K \left(\underline{\mathbf{q}}_N^K \right)_x \quad (3.20)$$

$$S_x^K \underline{u}_N^K + \int_{\partial K} \hat{n}_x \left(\underline{u}^{*,K} - \underline{u}_N^K \right) \underline{\ell}(\mathbf{x}) = 2 M^K \left(\underline{\mathbf{q}}_N^K \right)_y \quad (3.21)$$

Als Flüsse wählen wir versuchsweise

$$\underline{u}^{*,K} = \{ \underline{u}_N^K \} \quad (3.22)$$

$$\underline{\mathbf{q}}^{*,K} = \{ \nabla u_N^K \} - \tau \llbracket u_N^K \rrbracket \quad (3.23)$$

mit einem *Strafparameter* τ , welcher Sprünge in der Ableitung bestraft, siehe [9], Seite 270.

3.3 Rankine-Hugoniot-Bedingung

Die Rankine-Hugoniot-Bedingung steht im Zusammenhang mit dem sogenannten Riemann-Problem

$$u(x, 0) = \begin{cases} u^-, & x < 0 \\ u^+, & x > 0 \end{cases} \quad (3.24)$$

für die Advektions-Gleichung

$$u_t + f_x(u) = 0 \quad (3.25)$$

mit dem Fluss $f(u(x)) = su(x)$. Genauer erfahren wir im Buch von LeVeque sowie in den Kapiteln 2.4 und 6.6 des Hesthaven Buches. Die Bedingung lautet im skalaren Fall

$$s(u^- - u^+) = (f^- - f^+) . \quad (3.26)$$

Die Größe s ist dabei die Geschwindigkeit, mit der sich die Diskontinuität ausbreitet (*shock speed*). Im allgemeineren Fall eines linearen Systems mit $f(u) = Au$ nehmen wir an, dass die Matrix A reelle, disjunkte Eigenwerte $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_m$ hat, das heißt A ist diagonalisierbar gemäß

$$A = R\Lambda R^{-1} \quad (3.27)$$

mit $R = [r_1 \ r_2 \ \dots \ r_m]$ als Transformationsmatrix mit den zugehörigen Eigenvektoren. Die Eigenwertgleichung lautet

$$Ar_p = \lambda_p r_p \quad \forall p = 1, \dots, m \quad (3.28)$$

In unserem Fall wird A ein symmetrisches Spektrum besitzen und so ausgelegt sein, dass der Eigenwert 0 nicht enthalten ist. Daher gilt mit geradzahligem m

$$\lambda_i < 0 \quad \forall i = 1, \dots, m/2 \quad (3.29)$$

$$\lambda_i > 0 \quad \forall i = m/2 + 1, \dots, m . \quad (3.30)$$

Zerlegen wir nun u^- und u^+ in die Eigenwertbasis gemäß

$$u^- = \sum_{p=1}^m \alpha_p r_p \quad u^+ = \sum_{p=1}^m \beta_p r_p, \quad (3.31)$$

so folgt mit $v = R^{-1}u$

$$v_p(x, 0) = \begin{cases} \alpha_p & x < 0 \\ \beta_p & x > 0 \end{cases} \quad (3.32)$$

und wegen der Charakteristik der Advektionsgleichung

$$v_p(x, t) = \begin{cases} \alpha_p & x - \lambda_p t < 0 \\ \beta_p & x - \lambda_p t > 0 \end{cases} \quad (3.33)$$

Bezeichnen wir mit $J(x, t)$ den größtmöglichen Index p , für den $x - \lambda_p t > 0$ gilt., so ist

$$u(x, t) = \sum_{p=1}^{J(x, t)} \beta_p r_p + \sum_{p=J(x, t)+1}^m \alpha_p r_p \quad (3.34)$$

und insbesondere für $x = 0$

$$u(0, t) = \sum_{p=1}^{m/2} \beta_p r_p + \sum_{p=m/2+1}^m \alpha_p r_p \quad (3.35)$$

Die Lösung ist konstant innerhalb der einzelnen Segmente. Entlang der p -ten Charakteristik springt die Lösung jedoch gemäß

$$[[u_p]] = (\beta_p - \alpha_p) r_p, \quad (3.36)$$

Tortendiagramm
Buch S.66

wie der Abbildung zu entnehmen ist. Hier sehen wir auch wieder die Rankine-Hugoniot-Bedingung analog zu Gleichung (3.26), denn es ist mit $f(u) = Au$

$$[[f]]_p = A[[u]]_p \quad (3.37)$$

$$\stackrel{(3.36)}{=} (\beta_p - \alpha_p) A r_p \quad (3.38)$$

$$\stackrel{(3.28)}{=} (\beta_p - \alpha_p) \lambda_p r_p \quad (3.39)$$

$$= \lambda_p [[u]]_p \quad (3.40)$$

Um nun den numerischen Fluss u^* zu bestimmen, interessieren wir uns für den Ort $x = 0$ und können daher, entweder von u^- ausgehend die Sprünge nach rechts aufaddieren oder von u^+ ausgehend die Sprünge nach links. Folglich gilt

$$u^* = u^- + \sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p = u^+ - \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \quad (3.41)$$

$$\Rightarrow u^* = \frac{u^- + u^+}{2} + \frac{1}{2} \left(\sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p - \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \right) \quad (3.42)$$

Multipliziere mit $A = R\Lambda R^{-1} = R(\Lambda^+ + \Lambda^-) R^{-1}$

$$\begin{aligned} (Au)^* &= A\{u\} + \frac{1}{2} \left(R(\Lambda^+ + \Lambda^-) R^{-1} \right) \sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(R(\Lambda^+ + \Lambda^-) R^{-1} \right) \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \\ &= A\{u\} + \frac{1}{2} \left(R\Lambda^- R^{-1} \sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p - R\Lambda^+ R^{-1} \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \right) \end{aligned}$$

wegen $\sum_j (R^{-1})_{i,j} r_p = \delta_{i,p} e_p$ (mit e_p als Einheitsvektor mit einer 1 an Stelle p).
Fassen wir weiter zusammen:

$$(Au)^* = A\{u\} + \frac{1}{2} \left(-R|\Lambda^-| R^{-1} \sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p - R\Lambda^+ R^{-1} \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \right) \quad (3.43)$$

$$= A\{u\} - \frac{1}{2} \underbrace{\left(R|\Lambda^-| R^{-1} + R\Lambda^+ R^{-1} \right)}_{=R|\Lambda|R \equiv |A|} \sum_p (\beta_p - \alpha_p) r_p \quad (3.44)$$

$$\stackrel{(3.41)}{=} A\{u\} - \frac{1}{2} |A| (u^+ - u^-) \quad (3.45)$$

$$= A\{u\} + \frac{1}{2} |A| \llbracket u \rrbracket \quad (3.46)$$

Die gesamte Argumentation funktioniert genau so, wenn A bereits diagonal ist. Wir gehen noch einmal an den Ausgangspunkt der vektoriellen Advektionsgleichung zurück und führen direkt eine Transformation $u = Rv$ durch.

$$u_t + Au_x = 0 \quad (3.47)$$

$$u_t + R\Lambda R^{-1}u_x = 0 \quad (3.48)$$

$$R^{-1}u_t + \Lambda R^{-1}u_x = 0 \quad (3.49)$$

$$v_t + \Lambda v_x = 0 \quad (3.50)$$

Es folgt wie oben gezeigt der numerische Fluss

$$(\Lambda v)^* = \Lambda\{v\} + \frac{1}{2} |\Lambda| \llbracket v \rrbracket, \quad (3.51)$$

und nun lassen sich die Randbedingungen aus Kapitel 2.6 auf einfache Weise einbauen, was im nächsten Kapitel geschehen soll.

3.4 FD-DG-Schema

Wir behandeln zunächst die q -Richtung mit Hilfe eines finite Differenzen (FD) Schemas gemäß den Herleitungen in [5]. Die skalierte Liouville-von-Neumann Gleichung lautet dann

$$\Delta q u_t(r, t) + A u_r(r, t) + C(r) u(r, t) = 0 \quad (3.52)$$

Die Matrizen A und $C(r)$ sind dabei gegeben durch

$$\begin{aligned} A_{i,i} &= 0 & \forall i = 1, \dots, N_q \\ A_{i,i+1} &= -\frac{i}{2} & A_{i+1,i} = +\frac{i}{2} & \forall i = 1, \dots, N_q - 1 \\ C_{i,i}(r) &= i \frac{\Delta q_i}{4} \left(B(r, q_{i+1/2}) + B(r, q_{i-1/2}) \right) & \forall i = 1, \dots, N_q \\ C_{i,i+1}(r) &= C_{i+1,i}(r) = i \frac{\Delta q_i}{4} B(r, q_{i+1/2}) & \forall i = 1, \dots, N_q - 1 \end{aligned}$$

und haben die Dimension $N_q \times N_q$, wobei N_q die Anzahl der Zellen in q -Richtung ist. Es gibt dementsprechend $N_q + 1$ Knoten oder auch Interfaces genannt. Im Potentialterm sollte das CAP berücksichtigt werden. Ferner sind die Randbedingungen $u|_{q=\pm L_q/2} = 0$ verwendet worden.

Vergleichen wir Gleichung (3.52) mit der vektoriellen Advektionsgleichung

$$u_t + f_x(u) = 0 \quad \text{mit} \quad f(u) = Au, \quad (3.53)$$

so ist es nach dem oben gesagten sinnvoll, das entwickelte FD-Schema einer Transformation zu unterziehen, um die Matrix A zu diagonalisieren. Die Eigenwerte und

Eigenvektoren der tridiagonalen Toeplitz Matrix A sind bekannt. Es gilt

$$\lambda_p = -2\sqrt{-(i/2)^2} \cos\left(\frac{p\pi}{N_q+1}\right) \quad (3.54)$$

$$r^p = \left(\left(\frac{i/2}{-i/2} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{1p\pi}{N_q+1}\right), \dots, \left(\frac{i/2}{-i/2} \right)^{N_q/2} \sin\left(\frac{N_q p\pi}{N_q+1}\right) \right). \quad (3.55)$$

Damit folgt

$$\Delta q v_t(r, t) + \Lambda v_r(r, t) + \underbrace{R^{-1} C(r)}_{\equiv G(r)} R v(r, t) = 0. \quad (3.56)$$

Um nun das DG-Verfahren anzuwenden, wird mit einer Testfunktion ℓ_i multipliziert und über Zelle K integriert. Wir erhalten für die j -te Gleichung des Systems

$$\Delta q \int_K \partial_t v_j(r, t) \ell_i(r) + \lambda_j \int_K \partial_r v_j(r, t) \ell_i(r) + \sum_{m=1}^{N_q} \int_K G_{jm}(r) v_m(r, t) \ell_i(r) = 0$$

und nach partieller Integration des Flussterms

$$\begin{aligned} \Delta q \int_K \partial_t v_j(r, t) \ell_i(r) - \lambda_j \int_K v_j(r, t) \partial_r \ell_i(r) + \sum_{m=1}^{N_q} \int_K G_{jm}(r) v_m(r, t) \ell_i(r) \\ = - \oint_{\partial K} \hat{n} (\lambda_j v_j)^*(r, t) \ell_i(r) \quad \forall i = 1, \dots, N_p, \end{aligned}$$

wobei wie üblich der numerische Fluss $(\lambda_j v_j)^*(r) = (\lambda_j v_j)^*(r^+, r^-)$ sowie der nach außen zeigende Normalenvektor \hat{n} eingeführt worden ist. Jetzt wird eine schwache Lösung dieser Gleichung gesucht und dazu v_j im Raum der Testfunktionen V_N entwickelt. Das Vorgehen ist in Kapitel 3.2 erläutert. Es ist zu beachten, dass der Potentialterm $G(r) u(r)$ günstigerweise entkoppelt wird, sodass

$$G_{jm}(r|_K) v_m(r|_K) = \sum_{k=1}^{N_p} G_{jm}^K(\xi_k) v_m^K(\xi_k) \ell_k(r) = \left(\text{diag}(\underline{G}_{jm}^K) \underline{v}_m^K \right) \cdot \underline{\ell} \quad (3.57)$$

gilt. Mit den Definitionen von Massematrix, Gleichung (3.12), und Steifigkeitsmatrix, Gleichung (3.13), folgt

$$\begin{aligned} \Delta q \partial_t M^K \underline{v}_j^K - \lambda_j S^T \underline{v}_j^K + \sum_{m=1}^{N_q} M^K \left(\text{diag} \left(\underline{G}_{jm}^K \right) \underline{v}_m^K \right) \\ = - \oint_{\partial K} \hat{n} (\lambda_j v_j)^* (r, t) \underline{\ell} (r) . \end{aligned}$$

Multiplizieren wir noch von links mit $(M^K)^{-1}$, erhalten wir das Schema in schwacher Form

$$\Delta q \partial_t \underline{v}_j^K - \lambda_j (M^K)^{-1} S^T \underline{v}_j^K + \sum_{m=1}^{N_q} \text{diag} \left(\underline{G}_{jm}^K \right) \underline{v}_m^K \quad (3.58)$$

$$= - \oint_{\partial K} \hat{n} (\lambda_j v_j)^* (r, t) (M^K)^{-1} \underline{\ell} (r) . \quad (3.59)$$

Eine weitere partielle Integration führt auf die starke Form

$$\Delta q \partial_t \underline{v}_j^K + \lambda_j (M^K)^{-1} S \underline{v}_j^K + \sum_{m=1}^{N_q} \text{diag} \left(\underline{G}_{jm}^K \right) \underline{v}_m^K \quad (3.60)$$

$$= \oint_{\partial K} \left(v_j (r, t) - (\lambda_j v_j)^* (r, t) \right) \hat{n} (M^K)^{-1} \underline{\ell} (r) , \quad (3.61)$$

wobei der Unterschied links in der Transponierung der Steifigkeitsmatrix sowie dem Vorzeichen des Diffusionsterms zu beachten ist. Auf der rechten Seite ist die Funktion $v_j (r, t)$ jeweils an den inneren Intervallgrenzen auszuwerten.

Für die Implementierung konkretisieren wir die rechte Seite der Gleichung nun und unterdrücken dazu temporär den Index j , welcher den Ort q beschreibt. Dazu

definieren wir zunchst

$$\underline{e}_r \equiv \left(M^K\right)^{-1} \underline{\ell}(r)|_{r_{K+1/2}} = \left(M^K\right)^{-1} \cdot (0, \dots, 0, 1)^T \quad (3.62)$$

$$\underline{e}_l \equiv \left(M^K\right)^{-1} \underline{\ell}(r)|_{r_{K-1/2}} = \left(M^K\right)^{-1} \cdot (1, 0, \dots, 0)^T \quad (3.63)$$

$$u^{r,-} \equiv \underline{u}_{K+1/2}^- \quad \text{innerer Wert} \quad (3.64)$$

$$u^{l,+} \equiv \underline{u}_{K-1/2}^+ \quad \text{uerer Wert} \quad (3.65)$$

$$(3.66)$$

und analog $u^{r,+}$ und $u^{l,-}$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} & \oint_{\partial K} \left(v(r, t) - (\lambda v)^*(r, t) \right) \hat{n} \left(M^K \right)^{-1} \underline{\ell}(r) \\ &= \left[\lambda u^{r,-} - \lambda \frac{u^{r,-} + u^{r,+}}{2} - \frac{1}{2} |\lambda| \left(u^{r,-} - u^{r,+} \right) \right] \underline{e}_r \\ & \quad - \left[\lambda u^{l,-} - \lambda \frac{u^{l,-} + u^{l,+}}{2} + \frac{1}{2} |\lambda| \left(u^{l,-} - u^{l,+} \right) \right] \underline{e}_l \\ &= \left[\lambda \frac{u^{r,-} - u^{r,+}}{2} - \frac{1}{2} |\lambda| \left(u^{r,-} - u^{r,+} \right) \right] \underline{e}_r \\ & \quad - \left[\lambda \frac{u^{l,-} - u^{l,+}}{2} + \frac{1}{2} |\lambda| \left(u^{l,-} - u^{l,+} \right) \right] \underline{e}_l \\ &= \left(\frac{1}{2} \lambda - \frac{1}{2} |\lambda| \right) \left(u^{r,-} - u^{r,+} \right) \underline{e}_r - \left(\frac{1}{2} \lambda + \frac{1}{2} |\lambda| \right) \left(u^{l,-} - u^{l,+} \right) \underline{e}_l \end{aligned}$$

Wir definieren noch

$$a_j \equiv \frac{1}{2}\lambda_j + \frac{1}{2}|\lambda_j| \quad (3.67)$$

$$b_j \equiv \frac{1}{2}\lambda_j - \frac{1}{2}|\lambda_j| \quad (3.68)$$

und erhalten schließlich mit der Definition des Sprungs (Hesthaven Buch)

$$\oint_{\partial K} \left(v(r, t) - (\lambda v)^*(r, t) \right) \hat{n} \left(M^K \right)^{-1} \underline{\ell}(r) = b_j \hat{n}_r \llbracket u \rrbracket_r e_r - a_j \hat{n}_k \llbracket u \rrbracket_l e_l \quad (3.69)$$

Um die Randbedingungen einzubauen, ignorieren wir zunächst die Tatsache, dass die Liouville-von-Neumann Gleichung in der Form nach Gleichung (3.56) aufgrund des Potentialterms $C(r)$ nicht die einfache Form der Advektionsgleichung annimmt und schreiben für die Randbedingungen gemäß den Überlegungen in Kapiteln 2.6 und 3.3

$$v \left(r_l^{K=1}, t \right)^{in} = \left(R^{-1} \right)^+ \hat{f}_l \quad (3.70)$$

$$v \left(r_r^{K=K_r}, t \right)^{in} = \left(R^{-1} \right)^- \hat{f}_r \quad (3.71)$$

Hierbei ist $\hat{f}_{l/r} = \hat{f}_{l/r}(q)$ die an den diskreten Knoten (q -Richtung) ausgewertete Fourier-Transformierte der eingeführten Fermi-Dirac Verteilung $f_{l/r}(k)$, siehe auch [5]. Die Matrix R wird gemäß des Vorzeichens der Eigenwerte in den Teil der rechtslaufenden Wellen R^+ korrespondierend zu positiven Eigenwerten sowie den Teil der linkslaufenden Wellen R^- korrespondierend zu negativen Eigenwerten aufgeteilt, sodass $R = R^+ + R^-$ bzw. $R^{-1} = \left(R^{-1} \right)^+ + \left(R^{-1} \right)^-$ gilt. Für die auslaufenden Wellen verwenden wir jeweils den Wert im inneren des Rechengebietes, sodass der Sprung Null ergibt.

Ist das gleich-
bedeutend mit
Neumann-RB?

Für die Wahl des numerischen Flusses bedienen wir uns des Resultates aus Kapitel 3.3 und wählen ihn gemäß Gleichung (3.51).

3.4.1 Existenz der stationären Lösung

Zum Beweis der Existenz wollen wir den Satz von Banach–Nečas–Babuška anwenden [buch_ma]. Um die Bilinearform herzuleiten, summieren wir Gleichung (3.57) über

alle K und integrieren noch einmal partiell, um auf die starke Form zu kommen.

$$\begin{aligned} \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \Delta q \int_{D^k} v_t^h(x, t) \cdot \ell^h(x) + \Lambda \int_{D^k} v_x^h(x, t) \cdot \ell^h(x) + \int_{D^k} G(x) v^h(x, t) \cdot \ell^h(x) \\ = \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \oint_{\partial D^k} \hat{n} \left(\Lambda v^h(x, t) - (\Lambda v^h)^*(x, t) \right) \cdot \ell^h(x) \end{aligned}$$

Hier haben wir außerdem in Anlehnung an das Paper r durch x ersetzt und schreiben nun nicht komponentenweise, sondern in Matrix-Vektor-Form, dh. $v^h(x, t) : \Omega_x \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{N_q}$. Λ ist die Diagonalmatrix mit $\Lambda_{i,j} = \delta_{i,j} \lambda_i$.

Die rechte Seite lässt sich unter Verwendung des hergeleiteten numerischen Flusses wie folgt umschreiben. Wir verwenden zunächst

$$\begin{aligned} \hat{n}^- (\Lambda v - (\Lambda v)^*) &= \hat{n}^- \left(\Lambda v^- - \frac{1}{2} \Lambda (v^- + v^+) - \frac{1}{2} |\Lambda| \hat{n}^- (v^- - v^+) \right) \\ &= \hat{n}^- \left(\frac{1}{2} \Lambda \hat{n}^- \llbracket v \rrbracket - \frac{1}{2} |\Lambda| \llbracket v \rrbracket \right) \\ &= \frac{1}{2} (\Lambda - \hat{n}^- |\Lambda|) \llbracket v \rrbracket \\ &\equiv F \llbracket v \rrbracket. \end{aligned}$$

Jetzt schreiben wir die Summe über alle Elemente in die Summe über alle Kanten um und müssen dabei berücksichtigen, dass jede Kante zwei Summanden bekommt, nämlich von Zelle 1 und von Zelle 2, siehe Bildchen. Damit gilt

$$\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} u_1^- = u_2^+ & & u_2^- = u_1^+ \\ \swarrow & & \searrow \\ 1 & \xrightarrow{\quad} & 2 \\ \nwarrow & & \nearrow \\ n_1^- = n_2^+ & & n_2^- = n_1^+ \end{array} \\ \Rightarrow \quad \begin{aligned} \llbracket u \rrbracket_1 &= n_1^- u_1^- + n_1^+ u_1^+ \\ &= n_1^+ u_2^+ + n_2^- u_2^- \\ &= \llbracket u \rrbracket_2 \end{aligned} \end{array}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \oint_{\partial D^k} \hat{n} \left(\Lambda v^h - (\Lambda v^h)^* \right) \cdot \ell^h \\
&= \sum_{e \in \Gamma_I} (F_1 \llbracket u \rrbracket_1 \cdot \ell_1 + F_2 \llbracket u \rrbracket_2 \cdot \ell_2) + \sum_{e \in \Gamma_D} F \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_e^{h,-} \\
&= \sum_{e \in \Gamma_I} (F_1 \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_1 + F_2 \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_2) + \sum_{e \in \Gamma_D} F \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_e^{h,-} \\
&= \sum_{e \in \Gamma_I} \frac{1}{2} \Lambda \llbracket u \rrbracket_e \cdot (\ell_1 + \ell_2) + \frac{1}{2} \left(-\hat{n}_1^- |\Lambda| \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_1^- - \hat{n}_2^- |\Lambda| \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_2^- \right) + \sum_{e \in \Gamma_D} F \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_e^h \\
&= \sum_{e \in \Gamma_I} \Lambda \llbracket u \rrbracket_e \cdot \{\ell\}_e - \frac{1}{2} |\Lambda| \llbracket u \rrbracket_e \cdot \left(\hat{n}_1^- \ell_1^- + \hat{n}_1^+ \ell_1^+ \right) + \sum_{e \in \Gamma_D} F \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_e^{h,-} \\
&= \sum_{e \in \Gamma_I} \Lambda \llbracket u \rrbracket_e \cdot \{\ell\}_e - \frac{1}{2} |\Lambda| \llbracket u \rrbracket_e \cdot \llbracket \ell \rrbracket_e + \sum_{e \in \Gamma_D} F \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_e^{h,-} \\
&= \sum_{e \in \Gamma_I} \underbrace{\left(\Lambda \{\ell\}_e - \frac{1}{2} |\Lambda| \llbracket \ell \rrbracket_e \right)}_{\equiv -c_e(\ell)} \cdot \llbracket u \rrbracket_e + \sum_{e \in \Gamma_D} F \llbracket u \rrbracket_e \cdot \ell_e^{h,-} \\
&= \sum_{e \in \Gamma_I} (-c_e(\ell)) \cdot \llbracket u \rrbracket_e + \sum_{e \in \Gamma_D} F n_e^- u_e^- \cdot \ell_e^{h,-} + \sum_{e \in \Gamma_D} F n_e^+ g \cdot \ell_e^{h,-}
\end{aligned}$$

In der vorletzten Zeile wird genutzt, dass Λ reell und diagonal ist, weshalb $\Lambda^\dagger = \Lambda$, sodass sich das Skalarprodukt $\langle x, \Lambda y \rangle = \langle \Lambda x, y \rangle$ schreiben lässt.

Wir interessieren uns zunächst für den stationären Fall $v_t = 0$ und schreiben die Terme ohne die Randbedingung g auf die linke Seite. Damit erhalten wir die

Bilinearform

$$a_{\text{strong}}^s(v^h, \ell) = \sum_{D^k} \Lambda \int_{D^k} v_x^h(x, t) \cdot \ell^h(x) + \sum_{D^k} \int_{D^k} G(x) v^h(x, t) \cdot \ell^h(x) \quad (3.72)$$

$$+ \sum_{e \in \Gamma_I} c_e(\ell) \cdot \llbracket v^h \rrbracket_e - \sum_{e \in \Gamma_D} F n_e^- u_e^- \cdot \ell^{h,-} \quad (3.73)$$

Wir schreiben statt $v^h \cdot \ell$ besser $\ell^\dagger v^h$, also

$$a_{\text{strong}}^s(v^h, \ell) = \sum_{D^k} \int_{D^k} \ell^{h,\dagger}(x) \Lambda v_x^h(x, t) + \sum_{D^k} \int_{D^k} \ell^{h,\dagger} G(x) v^h(x, t) \quad (3.74)$$

$$+ \sum_{e \in \Gamma_I} c_e^\dagger(\ell) \llbracket v^h \rrbracket_e - \sum_{e \in \Gamma_D} n_e^- (\ell^{h,-})^\dagger F u_e^- \quad (3.75)$$

Für Koerzivität untersuchen wir $a_{\text{weak}}^s(v^h, v^h)$ und teilen die vier Summanden in vier Schritte a) bis d) auf.

a) Wegen $\Lambda = \Lambda^\dagger$ gilt

$$\begin{aligned} \sum_{D^k} \int_{D^k} v^\dagger \Lambda v_x &= \frac{1}{2} \sum_{D^k} \int_{D^k} \partial_x (v^\dagger \Lambda v) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{D^k} \oint_{\partial D^k} \hat{n} (v^\dagger \Lambda v) \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{e \in \Gamma_I} \llbracket v^\dagger \Lambda v \rrbracket_e + \sum_{e \in \Gamma_D} \hat{n}_e^- (v_e^-)^\dagger \Lambda v_e^- \right) \\ &= \sum_{e \in \Gamma_I} \{v^\dagger\}_e \Lambda \llbracket v \rrbracket_e + \frac{1}{2} \sum_{e \in \Gamma_D} \hat{n}_e^- (v_e^-)^\dagger \Lambda v_e^- \end{aligned}$$

Hier ist im letzten Schritt die Relation $\llbracket u^\dagger v \rrbracket = \llbracket u \rrbracket^\dagger \{v\} + \{u\}^\dagger \llbracket v \rrbracket$ eingegangen.

b) Nichts zu tun erstmal.

c)

$$\begin{aligned} \sum_{e \in \Gamma_I} c_e^\dagger(v) \llbracket v \rrbracket_e &= \sum_{e \in \Gamma_I} \left(-\Lambda \{v\}_e + \frac{1}{2} |\Lambda| \llbracket v \rrbracket_e \right)^\dagger \llbracket v \rrbracket_e \\ &= \sum_{e \in \Gamma_I} -\{v\}_e^\dagger \Lambda \llbracket v \rrbracket_e + \frac{1}{2} \llbracket v \rrbracket_e^\dagger |\Lambda| \llbracket v \rrbracket_e \end{aligned}$$

d)

$$- \sum_{e \in \Gamma_D} n_e^- (v_e^-)^\dagger F v_e^- = - \sum_{e \in \Gamma_D} \frac{1}{2} (v_e^-)^\dagger \left(\Lambda - \hat{n}_e^- |\Lambda| \right) v_e^-$$

Addieren wir alles auf, so hebt sich Term a) mit Teilen der Terme c) und d) weg. Es verbleibt

$$a_{\text{weak}}^s(v^h, v^h) = \sum_{D^k} \int_{D^k} v^\dagger G v + \sum_{e \in \Gamma_I} \frac{1}{2} \llbracket v \rrbracket_e^\dagger |\Lambda| \llbracket v \rrbracket_e + \sum_{e \in \Gamma_D} \frac{1}{2} \hat{n}_e^- (v_e^-)^\dagger |\Lambda| v_e^-$$

Wir definieren Skalarprodukt und Norm

$$(u, v)_{D^k} \equiv \int_{D^k} u^\dagger v \, dx \quad \|\cdot\|_{D^k}^2 = (\cdot, \cdot)_{D^k} \quad (3.76)$$

und haben mit den Definitionen $S \equiv -G$ und $T \equiv |\Lambda|/2$ sowie den auf dem Rand eindeutig definierten Werten von \hat{n} und v

$$a_{\text{weak}}^s(v^h, v^h) = - \sum_{D^k} (v, S v)_{D^k} + \sum_{e \in \Gamma_I} (\llbracket v \rrbracket, T \llbracket v \rrbracket)_e + \sum_{e \in \Gamma_D} \hat{n} (v, T v)_e \quad (3.77)$$

$$= - \sum_{D^k} (v, S v)_{D^k} + \sum_{e \in \Gamma_I} \left\| \sqrt{T} \llbracket v \rrbracket \right\|_e^2 + \sum_{e \in \Gamma_D} \hat{n} \left\| \sqrt{T} v \right\|_e^2 \quad (3.78)$$

Literatur

- [1] Douglas N Arnold, Franco Brezzi, Bernardo Cockburn und L Donatella Marini. „Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic problems“. In: *SIAM journal on numerical analysis* 39.5 (2002), S. 1749–1779.
- [2] S. Datta. „Quantum transport: atom to transistor“. Cambridge university press, 2005.
- [3] William R Frensley. „Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device“. In: *Physical Review B* 36.3 (1987), S. 1570.
- [4] E Wigner. „E. Wigner, Phys. Rev. 40, 749 (1932).“ In: *Phys. Rev.* 40 (1932), S. 749.
- [5] Lukas Schulz und Dirk Schulz. „Numerical Analysis of the Transient Behavior of the Non-Equilibrium Quantum Liouville Equation“. In: *IEEE Transactions on Nanotechnology* 17.6 (2018), S. 1197–1205.
- [6] W. R. Frensley. „Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium“. In: *Reviews of Modern Physics* 62.3 (1990), S. 745.
- [7] B. A. Biegel. „Quantum electronic device simulation“. Diss. Stanford Univ., 1990.
- [8] Bernardo Cockburn und Chi-Wang Shu. „The local discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 35.6 (1998), S. 2440–2463.
- [9] Jan S Hesthaven und Tim Warburton. „Nodal discontinuous Galerkin methods: algorithms, analysis, and applications“. Springer Science & Business Media, 2007.