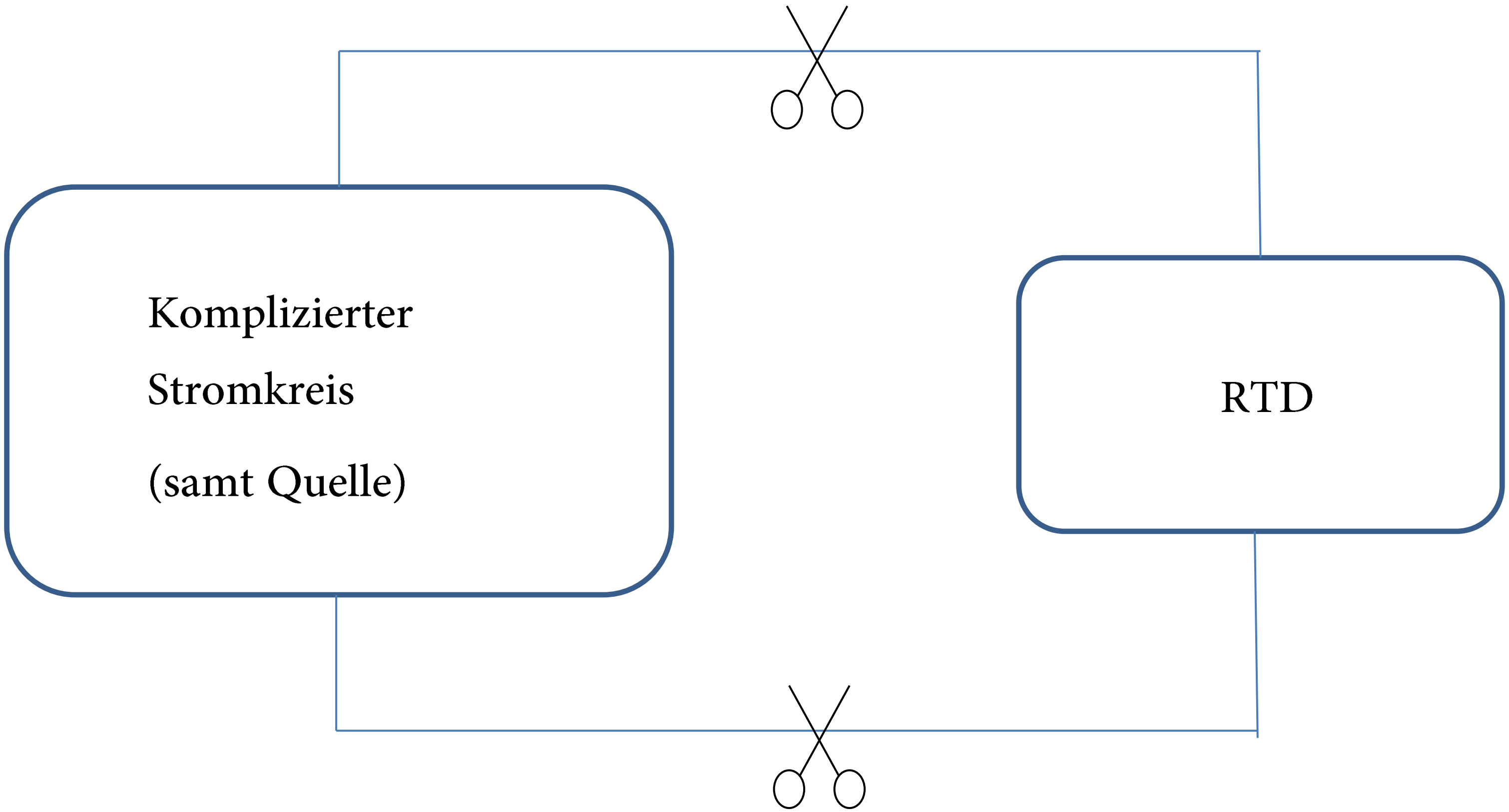
Diskontinuierlich-Galerkin Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

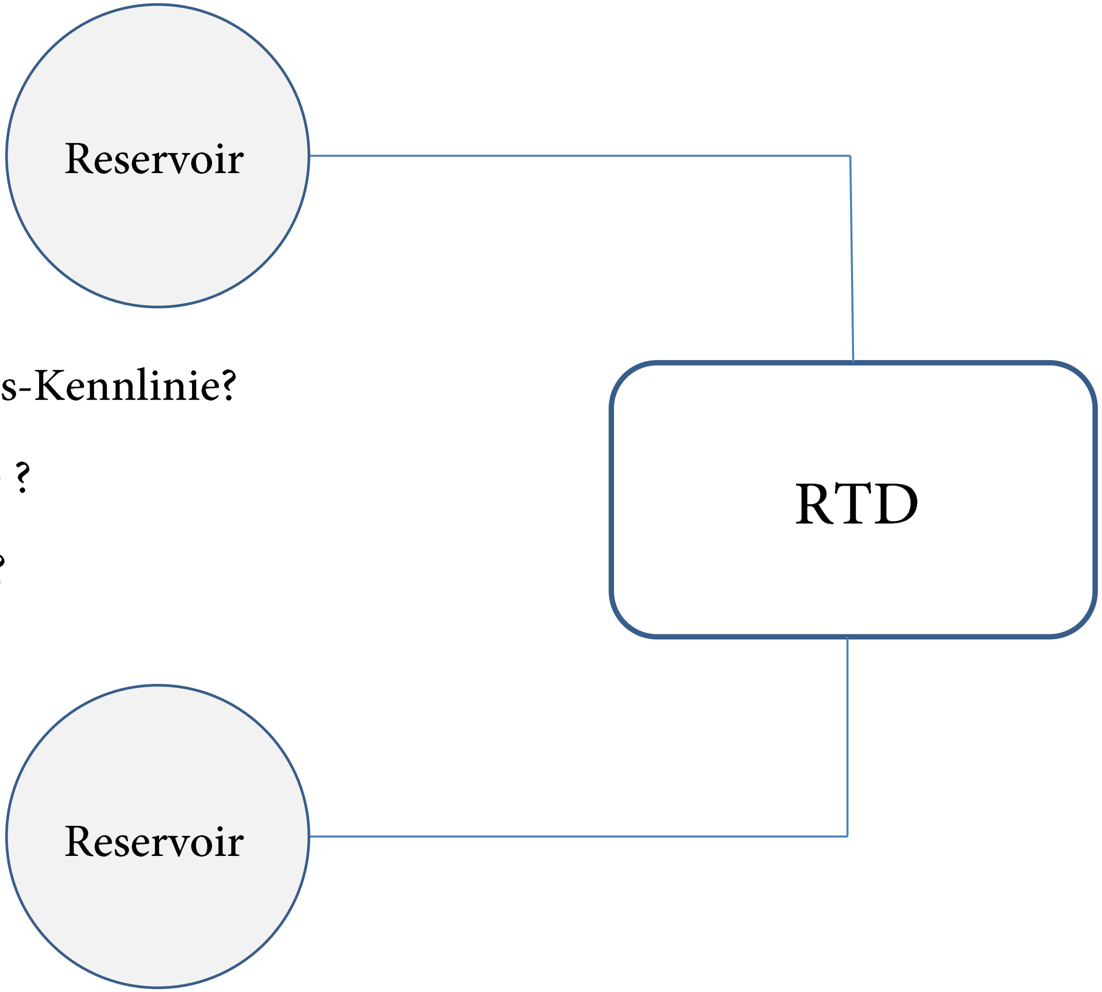
Inhalt

1. Problemstellung
2. FEM-Verfahren
3. DG-Verfahren
   a. Der numerische Fluss
   b. In Bilinearform-Schreibweise
4. Schema für die LvN-Gleichung
5. Ausblick

Übergang geschlossene $\longrightarrow$ offene Systeme



Übergang geschlossene $\longrightarrow$ offene Systeme



- Strom-Spannungs-Kennlinie?
- Elektronendichte ?
- Potentialverlauf ?

Beschreibe Transport von Elektronen

in Quantenstruktur

Bewegungsgleichung

Liouville-von-Neumann-Gleichung (LvN)

$$\partial_t \rho\left(x,y,t\right) = \frac{1}{i\hbar}\mathcal{L}\left(x,y,t\right)\rho\left(x,y,t\right)$$

$$\mathcal{L}\left(x,y,t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_x^2 - \partial_y^2\right) + V\left(x,t\right) - V^*\left(y,t\right)$$

Schwerpunkt- und Relativkoordinaten

$$r \equiv \frac{x+y}{2} \qquad q \equiv x - y$$

Einheitenskalierung

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{mV_0}} \qquad V_0 = 0{,}1768\,\mathrm{eV}$$

$$\xi = 2{,}62 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{m}$$

$$\tau = \frac{\hbar}{V_0} \qquad \tau = 3{,}72 \cdot 10^{-15}\,\mathrm{s}$$

$$\boxed{i\partial_t \rho(r,q,t) + \underbrace{\operatorname{div}\left(A\nabla\rho(r,q,t)\right)}_{\text{Diffusion}} - \underbrace{B(r,q,t)\,\rho(r,q,t)}_{\text{Drift}} = 0}$$

Elektronendichte und Strom

$$j\left(r,t\right)=\frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\{\partial_q\rho\left(r,q,t\right)|_{q=0}\}$$

$$n\left(r,t\right)=\mathrm{Re}\{\rho\left(r,q,t\right)|_{q=0}\}$$

Randbedingungen

$$\partial_t \rho\left(x,y,t\right) = \frac{1}{i\hbar}\mathcal{L}\left(x,y,t\right)\rho\left(x,y,t\right)$$

Geschlossenes, konservatives System

$\Leftrightarrow$

Nettostrom durch Oberfläche = 0

$\Leftrightarrow$

$\mathcal{L}$ hermitsch $\longrightarrow$ alle Eigenwerte reell

Offenes System

$\Uparrow$

Nettostrom durch Oberfläche $\neq$ 0

$\Downarrow$

$\mathcal{L}$ nicht-hermitsch

$\longrightarrow$ $\exists$ mind. ein komplexer Eigenwert

positiver Imaginärteil $\swarrow$

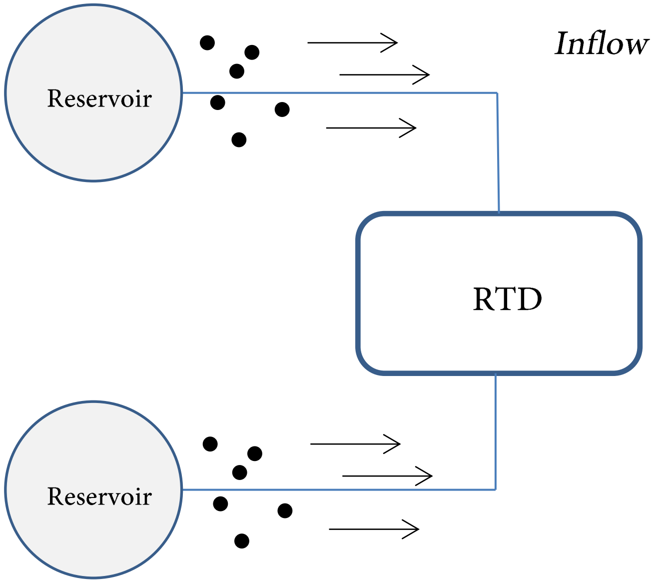
$\Rightarrow$ $\exists$ instabile, unphysikalische Lösung

$\longrightarrow$ brauchen Zeit-irreversible RB! [1]

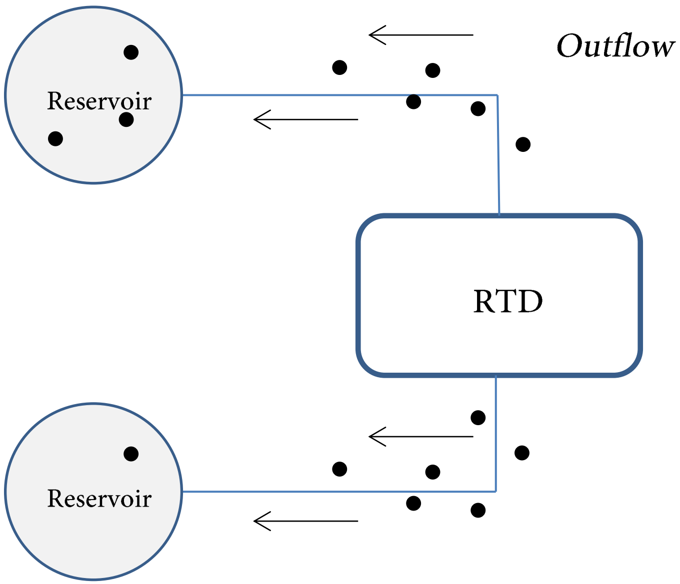
Randbedingungen

Reservoire als schwarze Strahler

Emission mit thermischer Gleichgewichts-Verteilung



Vollständige Absorption



Randbedingungen

Unterscheidung nach Geschwindigkeit des Teilchens erforderlich !

LvN im **Ortsraum**

$$\cancel{\rho|_{r=\pm L_r/2} = \hat{f}_{l,r}\,(q)}$$

Brauchen nach der Diskretisierung DFT

$$q \longrightarrow k \qquad \hat{\rho}\,(r,k) = \Phi\rho\,(r,q)$$

um Randbedingung für *inflow* (links)

und *inflow* (rechts) setzen zu können

$$\rho\,(r,k>0)\,|_{r=-L_r/2} = \Phi\hat{f}_l\,(q)$$

$$\rho\,(r,k<0)\,|_{r=+L_r/2} = \Phi\hat{f}_r\,(q)$$

$$\rho|_{q=\pm L_q/2} = ?$$

LvN im **Phasenraum**

$\triangleq$ Wigner-Transportgleichung (WTE)

Wahrscheinlichkeitsverteilung im Phasenraum :

Wigner-Funktion $f\,(r,k)$

= Wigner-Transformierte des Dichteoperators

$$f\,(r,k>0)\,|_{r=-L_r/2} = f_l\,(k)$$

$$f\,(r,k<0)\,|_{r=+L_r/2} = f_r\,(k) \qquad [1]$$

Keine weitere RB nötig, da k-Abhängigkeit in der WTE als Integral ausgedrückt

Selbstkonsistentes Potential

$$\boxed{i\partial_t \rho\left(r,q,t\right) + \operatorname{div}\left(A\nabla\rho\left(r,q,t\right)\right) - B\left(r,q,t\right)\rho\left(r,q,t\right) = 0}$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \qquad B\left(x,y,t\right) \equiv \frac{V\left(x+\frac{y}{2},t\right) - V^*\left(x-\frac{y}{2},t\right)}{V_0}$$

- Elektron-Elektron-WW. zunächst unbekannt
- ~~Elektron-Phonon-WW.~~ verbleibt unberücksichtigt
- Heterostruktur-Potential ✓
- Extern angelegtes Feld ✓

Selbstkonsistentes Potential

Initial Guess

$u^{(0)}$

$$i\partial_t \rho\left(r,q,t\right) + \operatorname{div}\left(A\nabla\rho\left(r,q,t\right)\right) - B\left(r,q,t\right)\rho\left(r,q,t\right) = 0$$

Liouville-von-Neumann-Gleichung

$u\left(x\right)$ $\qquad$ $n\left(x\right)$

Poisson-Gleichung

$$-\partial_x\left(\epsilon\left(x\right)\partial_x u\left(x\right)\right) = e^2\left(n\left(x\right) - N_D\left(x\right)\right)$$

Discontinuous Galerkin Verfahren

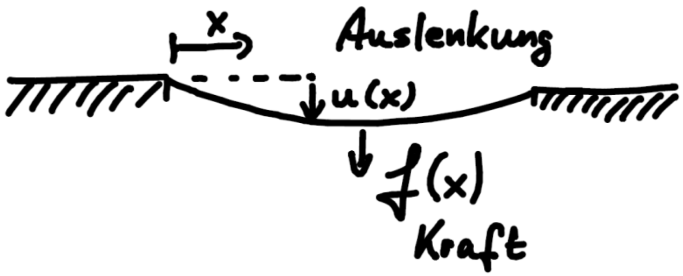
= erweitertes FEM Verfahren

Idee FEM:

1. Ritz-Galerkin-Ansatz: Formuliere das Problem als Variations-problem zur Minimierung einer Kostenfunktion
2. Approximiere Lösung $u \in \mathbb{V}$ einer pDGL durch u_h auf endlichdimensionalem Funktionenraum $\mathbb{V}_N$

1. Ritz-Galerkin-Ansatz (Schwache Formulierung)

Bsp. Membran-Problem [2]



$$E : C^1\left(\bar{\Omega}\right) \to \mathbb{R}$$

$$E\left(u\right) = \frac{\sigma}{2}\int_\Omega |\nabla u|^2 - \int_\Omega f u$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\epsilon} E\left(u + \epsilon v\right) = 0$$

⟶ Euler-Lagrange-Gleichung: $\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v = \int_\Omega f v \qquad \forall v \in \mathbb{V}$

Identifiziere im Bsp. Bilinearform und Linearform

$$\mathcal{B}\left(u, v\right) = \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v \qquad f\left(v\right) \equiv \left(f, v\right)_{L^2(\Omega)}$$

Schwache Formulierung: Finde $u \in \mathbb{V}$, sodass $\boxed{\mathcal{B}\left(u, v\right) = f\left(v\right) \quad \forall v \in \mathbb{V}}$

Sobolev-Raum

Starke Form

$$-\Delta u = f \qquad \text{in}\,\Omega, \qquad u = 0 \qquad \text{auf}\ \partial\Omega$$

Schwache Form

$$u \in \mathbb{V}: \qquad \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v = \int_\Omega f v \qquad \forall\, v \in \mathbb{V}_0$$

Satz von Gauß

Links: mehr Regularität verlangt

$\longrightarrow$ Schwache Lösungen sind in Sobolev-Räumen definiert [2]

$$H^s(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \forall 0 \le |\alpha| \le s, D^\alpha v \in L^2(\Omega) \right\}$$

„Schwache Ableitung“

2. Sobolev‘scher Einbettungssatz $\qquad s - \frac{d}{2} \ge l \qquad \Rightarrow \qquad H^s(\Omega) \hookrightarrow C^l\left(\bar{\Omega}\right)$

2. Ritz-Approximation

Achtung: $\mathbb{V}$ ist unendlich dimensionaler Hilbertraum!

Wähle nun endlichdim. Teilraum $\mathbb{V}_N \boxed{\subset} \mathbb{V}$

Finde $U_N \in \mathbb{V}_N$, sodass $\mathcal{B}\left(U_N, V_N\right) = f\left(V_N\right) \qquad \forall V_N \in \mathbb{V}_N$

Galerkin-Orthogonalität:

$$\mathbb{V}_N \subset \mathbb{V} \;\Rightarrow\; \mathcal{B}\left(u - U_N, V_N\right) = 0$$

Die wichtigsten Sätze

Nenne $\mathcal{B}$ koerziv, iff $\quad \mathcal{B}(v,v) \geq \alpha \|v\|_{\mathbb{V}}^2 \qquad \forall v \in \mathbb{V}$

Nenne $\mathcal{B}$ stetig, iff $\quad \mathcal{B}(u,v) \leq \|\mathcal{B}\| \|u\|_{\mathbb{V}} \|v\|_{\mathbb{V}} \qquad \forall u,v \in \mathbb{V}$

Lemma von Lax-Milgram

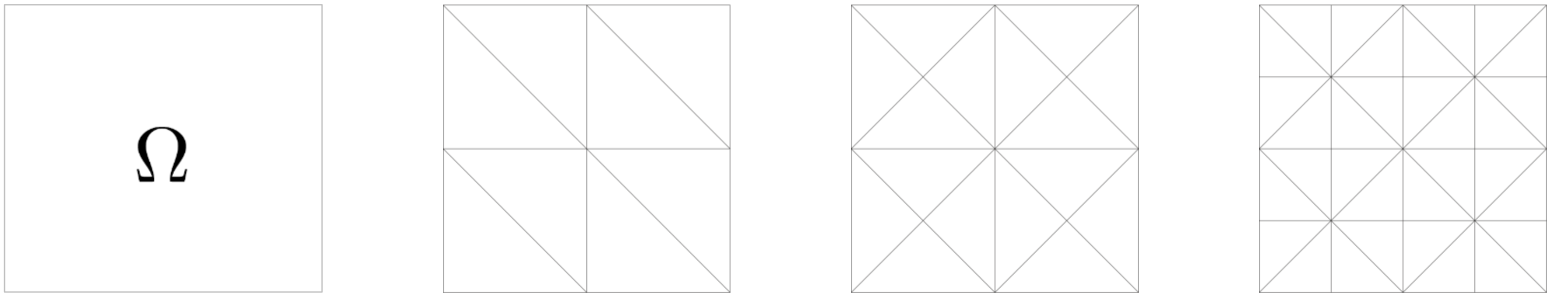
$\mathcal{B}(u,v) = f(v) \quad \forall v \in \mathbb{V}$ hat mit $f \in \mathbb{V}^*$ eindeutige Lösung $u \in \mathbb{V}$.

Cea's Lemma

$$\begin{aligned}\alpha \|U_N - u\|_{\mathbb{V}}^2 &\leq \mathcal{B}(U_N - u, U_N - u) = \mathcal{B}(U_N - u, V - u)\\ &\leq \|\mathcal{B}\| \|U_N - u\|_{\mathbb{V}} \|V - u\|_{\mathbb{V}} \qquad \forall V \in \mathbb{V}_N\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \|U_N - u\|_{\mathbb{V}} \leq \frac{\|\mathcal{B}\|}{\alpha} \inf_{V \in \mathbb{V}_N} \|V - u\|_{\mathbb{V}}$$

Triangulation, Finite-Elemente-Raum



...

$\partial\Omega$

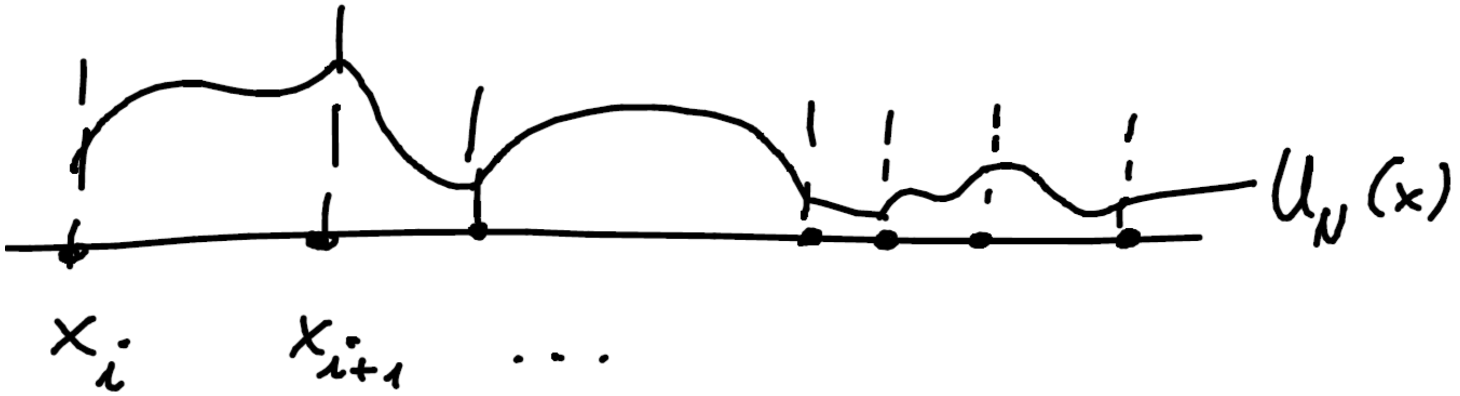
$$\Omega = \text{interior} \bigcup_{K \in \mathscr{T}} K$$

$$\mathbb{V}_N = \mathrm{FES}\left(\mathcal{T}, \mathbb{P}_N, \mathbb{V}\right) \equiv \{V \in \mathbb{V} \,|\, V_{|K} \in \mathbb{P}_N\left(K\right) \; \forall \, K \in \mathcal{T}\}$$

Lemma [2]

$$\{V \in C\left(\bar{\Omega}\right) \,|\, V_{|K} \in \mathbb{P}_N\left(K\right) \; \forall K \in \mathcal{T}\} = \mathrm{FES}\left(\mathcal{T}, \mathbb{P}_N, H^1\left(\Omega\right)\right)$$

Bsp. 1D



$$\left\{V \in C\left(\bar{\Omega}\right) \mid V_{|K} \in \mathbb{P}_N(K)\ \forall K \in \mathcal{T}\right\} = \mathrm{FES}\left(\mathcal{T}, \mathbb{P}_N, H^1(\Omega)\right)$$

Stetige Testfunktion!

Discontinuous Galerkin Verfahren

= erweitertes FEM Verfahren

Idee DG:

1. $\mathbb{V}_N = \mathrm{FES}\left(\mathcal{T}, \mathbb{P}_N, \mathbb{V}\right) \not\subset \mathbb{V}$ (Nicht-Konformität)

   Testfunktionen und schwache Lösung sind komplett unstetig.

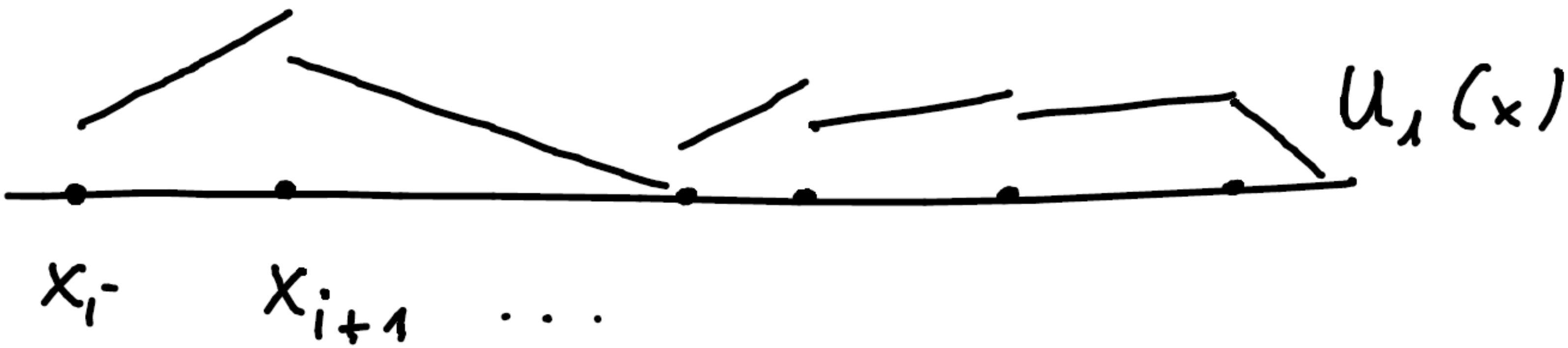
   Lösung verletzt ggf. sogar Dirichlet-RB.

   $\longrightarrow$ Mehr Flexibilität für Diskretisierung

2. Lösbarkeit wird erreicht durch geschickte Stabilisierungsterme, die zudem so gewählt werden, dass keine Konsistenzfehler auftreten. [3]

3. DG als Kombination von FEM und FV

Sichtweise A: Der mysteriöse „numerische Fluss“



$U_N(x_i)$ ist nicht eindeutig definiert.

$\longrightarrow$ Neue Freiheitsgrade: Lösungsvektor im 1d Fall mit N=1 doppelt so groß

Sichtweise A: Der mysteriöse „numerische Fluss“

Wie erhalten wir aber eine eindeutige Lösung an den betroffenen Knoten?

Antwort:

Per Definition aus dem „numerischen Fluss“

Ein Beispiel: skalare Advektionsgleichung (1D)

[4]

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial (a u(x,t))}{\partial x} = 0\,, \qquad x \in [0,\ell] = \Omega$$

$$u(x,0) = u_0(x)$$

$$u(0,t) = g(t) \qquad \text{mit}\, a \geq 0$$

Information fließt von links nach rechts

Beispiel (Fortsetzung)

Partitionierung:

(PDE 1): $v_t + v_x = 0 \quad \text{auf } D_1 = [0, \ell/2]$

(PDE 2): $w_t + w_x = 0 \quad \text{auf } D_2 = [\ell/2, \ell]$

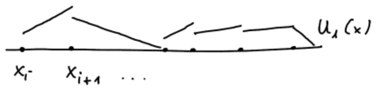
Kopplung:

Eine zusätzliche (neue) Randbedingung erzwingt Kontinuität <u>der exakten Lösung</u>: $w\,(1/2, t) = v\,(1/2, t)$

Multiplikation mit H^1 Testfunktion, Integration und partielle Integration

$$\int_{D_1} \psi v_t - \int_{D_1} \psi_x v + \int_{\partial D_1} \psi v \hat{n} = 0$$

?



Fluss

Beispiel (Fortsetzung)

Für die Diskretisierung definiere nun konsistenten numerischen Fluss!

$$\int_{D_1} \psi v_t - \int_{D_1} \psi_x \, v + \int_{\partial D_1} \psi v \hat{n} = 0$$

$$\longrightarrow \quad \int_{D_1} \psi_N v_{N,t} - \int_{D_1} \psi_{N,x} v_N + \int_{\partial D_1} \psi_N v_N^* \hat{n} = 0$$

Wähle dem Problem angepassten *upwind flux*

$$v_N^* = v_N^*\left(v_N^-, v_N^+\right) = \begin{cases} g\left(t\right), & x = 0 \\ \{\{v_N\}\} + \frac{1}{2}[\![v_N]\!] = v_N^-\left(\ell/2, t\right), & x = \ell/2 \\ v_N^+\left(\ell, t\right), & x = \ell \end{cases}$$

Sichtweise A: Der mysteriöse „numerische Fluss“

Muss folgende Eigenschaften erfüllen

- Konsistenz

  Schwache Lösung $u \in H^1(\Omega)$ löst auch gewählte Variationsformulierung

  $$\Leftrightarrow \qquad f^*(u,u) = f(u)$$

- Stabilität

  $$\sum_{K=1}^{\#\mathcal{T}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \|u_N\|_{2;K}^2 \leq 0$$

Konvergenz

[4]

Bonbon:

Kann darüber hinaus weitere physikalische Erhaltungsgrößen garantieren

Sichtweise B: Freiheit in der Wahl der Bilinearform

$$\mathcal{B}_N : \mathbb{V}_N + \mathbb{V} \times \mathbb{V}_N \to \mathbb{R}$$

$$\|U_N - u\|_{\mathbb{V}} \leq \frac{\|\mathcal{B}\|}{\alpha} \inf_{V \in \mathbb{V}_N} \|V - u\|_{\mathbb{V}}$$

Cea's Lemma wird zum 2. Strang Lemma: [2],[3]

$$\|U_N - u\|_N \lesssim \left(1 + \frac{\|\mathcal{B}_N\|}{\alpha_N}\right) \inf_{V \in \mathbb{V}_N} \|V - u\|_N + \underbrace{\frac{1}{\alpha_N} \sup_{V \in \mathbb{V}_N} \frac{|\mathcal{B}_N(u, V) - F_N(V)|}{\|V\|_N}}_{\text{Konsistenzfehler}}$$

Diskrete Bilinearform können wir aus der pDGL zusammenbasteln mit folgenden Wunscheigenschaften:

Sichtweise B: Wünsche an die Bilineaerform [3]

- *Stetigkeit*
- *Koerzivität*
- *Symmetrie*
- *Konsistenz*

$$\left\|U_N - u\right\|_N \lesssim \left(1 + \frac{\|\mathcal{B}_N\|}{\alpha_N}\right) \inf_{V \in \mathbb{V}_N} \|V - u\|_N + \cancel{\frac{1}{\alpha_N} \sup_{V \in \mathbb{V}_N} \frac{\left|\mathcal{B}_N(u, V) - F_N(V)\right|}{\|V\|_N}}$$

Stellschrauben im DG-Verfahren

- Wahl des numerischen Flusses
  - Hieraus resultieren weitere Parameter, z.B. der nominelle Wert für einen „Strafterm“
- Wahl des Raumes der Testfunktionen – wir wählen Galerkin-Ansatz: Lösungsraum = Testfunktionenraum
- Triangulierung
- Wahl einer Basis des Finite-Elemente-Raumes – wir benutzen Jacobi-Polynome

Schema als gemischtes DG-Verfahren

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

Überführe pDGL in System erster Ordnung

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

Entwicklung in Polynombasis [4]

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

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

Modale Entwicklung (Jacobi-Polynome)

Nodale Entwicklung (Lagrange-Interpolation)

Kurzschreibweise

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

Starke Formulierung

$$i \int_K \partial_t \sum_{j=1}^{N_p} u_N^K\left(\xi_j^K, t\right) \ell_j^K(\mathbf{x}) \, \ell_i^K(\mathbf{x}) - \int_K \sum_{j=1}^{N_p} \mathbf{q}_N^K\left(\xi_j^K, t\right) \ell_j^K(\mathbf{x}) \cdot \nabla \ell_i^K(\mathbf{x})$$

$$+ \int_{\partial K} \sum_{j=1}^{N_p} \mathbf{q}^{*,K}\left(\xi_j^K, t\right) \ell_j^K(\mathbf{x}) \, \ell_i^K(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}} - \int_K \sum_{j=1}^{N_p} g_N^K\left(\xi_j^K, t\right) \ell_j^K(\mathbf{x}) \, \ell_i^K(\mathbf{x}) = 0$$

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

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

$$= 2 \int_K \sum_{j=1}^{N_p} \left(\mathbf{q}_N^K\right)_{x/y} \left(\xi_j^K, t\right) \ell_i^K(\mathbf{x}) \, \ell_j^K(\mathbf{x})$$

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

Definition Massen- und Steifigkeitsmatrix [4]

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

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

Ein mögliches Schema

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

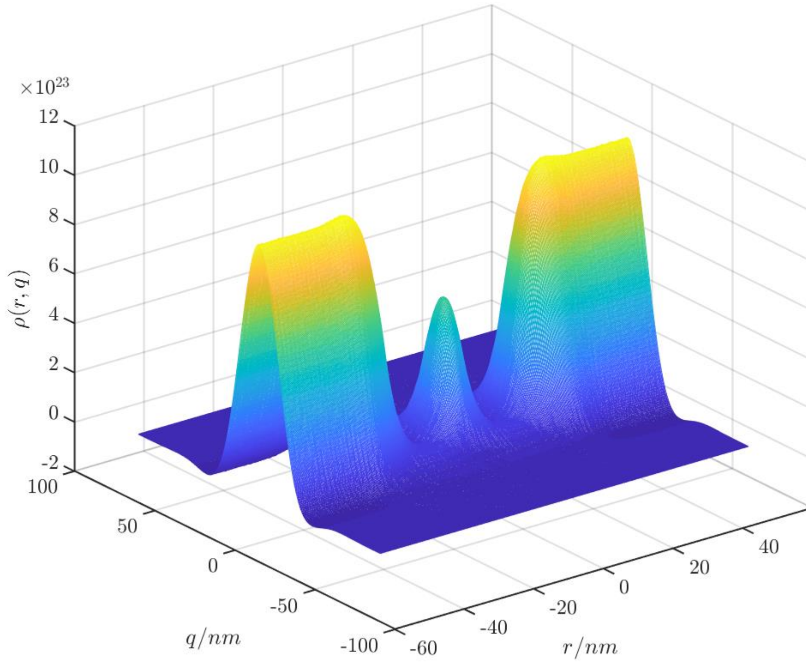
$$S_y^K \underline{u}_N^K + \int_{\partial K} \hat{n}_y \left(\underline{u}^{*,K} - \underline{u}_N^K\right) \underline{\ell}(\mathbf{x}) = 2M^K \left(\underline{\mathbf{q}}_N^K\right)_x$$

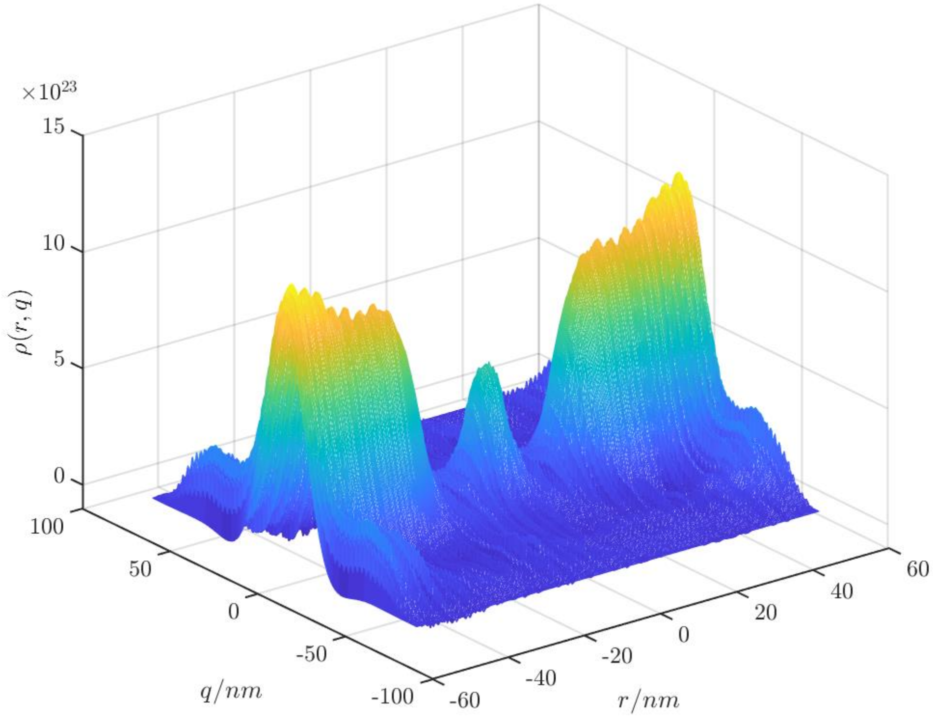
$$S_x^K \underline{u}_N^K + \int_{\partial K} \hat{n}_x \left(\underline{u}^{*,K} - \underline{u}_N^K\right) \underline{\ell}(\mathbf{x}) = 2M^K \left(\underline{\mathbf{q}}_N^K\right)_y$$

Fluss

$$\underline{\mathbf{q}}^{*,K} = \{\{\underline{\nabla u_N^K}\}\} - \tau [\![\underline{u_N^K}]\!] \qquad \underline{u}^{*,K} = \{\{\underline{u_N^K}\}\}$$

Gleichgewichtslösung





Aktuelle Fragestellungen

- Diskrete Fouriertransformation bzgl. q Variable, um Randbedingung für Nicht-Gleichgewicht setzen zu können
  - Anpassung des numerischen Flusses, um Inflow Charakter gerecht zu werden
  - Implementierung der selbstkonsistenten Lösung
- Zeitableitung berücksichtigen
- Ist eine direkte DG-Methode zu bevorzugen?
- Formulierung und Verifizierung der a-priori Fehlerabschätzung
- Alternative Randbedingungen?

Quellen

[1] William R Frensley. *Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device*. In: *Physical Review B* 36.3 (1987), S. 1570.

[2] Kreuzer, C. Vorlesungsskript *Finite Elemente Methoden*. TU Dortmund, 2019.

[3] Verfürth, R. Vorlesungsskript *Numerik II, Finite Elemente*. Ruhr-Universität Bochum, 2016.

[4] Hesthaven, J. S., & Warburton, T. *Nodal discontinuous Galerkin methods: algorithms, analysis, and applications*. Springer Science & Business Media, 2007.