

DG-Verfahren für die von Neumann-Gl. im Ortsraum

October 28, 2018

Modell

Zu lösen ist die Gleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\mathcal{L}}{i\hbar} \rho$ mit dem Liouville-Operator $\mathcal{L} = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_x^2 - \partial_{x'}^2) + e (V(x) - V^\dagger(x')) \right]$ unter Beachtung geeigneter Randbedingungen. Das Problem kann auch folgendermaßen umgeschrieben werden:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla \rho) + B \rho = 0 \quad \text{in } (0, T) \times \Omega \quad (1)$$

$$\rho = \rho_D \text{ auf } (0, T) \times \Gamma_D \quad (2)$$

$$\rho = \rho_N \quad \text{auf } (0, T) \times \Gamma_N \quad (3)$$

$$\rho = \rho_0 \quad \text{auf } \{0\} \times \Omega \quad (4)$$

Dabei ist Ω eine kompakte Menge im \mathbb{R}^2 und $(0, T)$ ein Zeitintervall. Weiterhin ist $\rho_0 \in L^2(\Omega)$, $\rho_D \in L^2(0, T; H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_D))$ und $\rho_N \in L^2(\Gamma_N)$.

Herleitung Variationale Formulierung DG-Verfahren

Es wird die exakte Lösung ρ semidiskret durch $\rho_h \in \mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h) \forall t \geq 0$ approximiert. Dazu wird 1 mit einem $v \in H^s(\mathcal{E}_h)$ mit $s > \frac{3}{2}$ multipliziert und anschließend über ein Element $E \in \mathcal{E}_h$ integriert. Anschließend ergibt sich unter Verwendung des Green-Theorems

$$\int_E (\nabla v \cdot \mathbf{K} \nabla \rho + v \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla \rho)) = \int_{\partial E} \mathbf{F} \nabla \rho \cdot \mathbf{n}_E v \quad (5)$$

und die Summe über alle Elemente der Ausdruck

$$\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \left[\int_E \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} v + \nabla v \cdot (\mathbf{K} \nabla \rho) + B \rho v \right) - \int_{\partial E} v (\mathbf{K} \nabla \rho) \cdot \mathbf{n}_E \right] = 0 \quad (6)$$

Das Integral über die Oberfläche wird nun so aufgeteilt, dass über die einzelnen Kanten integriert wird. Dabei ist zu beachten, dass bei der Summation jedes Kantenintegral zweimal addiert wird, jeweils mit anderem Vorzeichen des Normalenvektors. Mit der Definition des Sprungs

$$[[w]] = w|_{E_1} - w|_{E_2} \quad \forall e \in \Gamma_h \quad (7)$$

$$[[w]] = w|_{E_1} \quad \forall e \in \partial\Omega \quad (8)$$

und des Mittelwertes

$$\{\{w\}\} = \frac{1}{2} w|_{E_1} + \frac{1}{2} w|_{E_2} \quad \forall e \in \Gamma_h \quad (9)$$

$$\{\{w\}\} = w|_{E_1} \quad \forall e \in \partial\Omega \quad (10)$$

an einer Kante e mit Nachbarelemente E_1 und E_2 gilt

$$\sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_{\partial E} v (\mathbf{K} \nabla \rho) \cdot \mathbf{n}_E = \sum_{e \in \Gamma_h} \int_e \underbrace{[[v (\mathbf{K} \nabla \rho) \cdot \mathbf{n}_E]]}_{[[v]] \{\{(\mathbf{K} \nabla \rho) \cdot \mathbf{n}_E\}\}} + \sum_{e \in \Gamma_D} \int_e v (\mathbf{K} \nabla \rho) \cdot \mathbf{n}_E + \sum_{e \in \Gamma_N} \int_e v \rho_N \quad (11)$$

Nun werden auf beiden Seiten die Terme $\epsilon \sum_{e \in \Gamma_D} \int_e \rho (\mathbf{K} \nabla v) \cdot \mathbf{n}_E$ und $\sum_{e \in \Gamma_D} \frac{\sigma_e^0}{|e|^{\beta_0}} \int_e \rho v$ addiert und auf der rechten Seite die Dirichlet-Randbedingungen angewandt. Zu guter Letzt wird ausgenutzt, dass der Sprung

$[[\rho]] = [[(\mathbf{K}\nabla\rho) \cdot \mathbf{n}_E]] = 0$ verschwindet an inneren Kanten. Somit kann insgesamt die bilineare Form $a_\epsilon : H^s(\mathcal{E}_h) \times H^s(\mathcal{E}_h) \rightarrow \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} a_\epsilon(\rho_h, v) &= \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E (\nabla v \cdot (\mathbf{K}\nabla\rho_h) + B\rho_h v) - \sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e [[v]] \{ \{ (\mathbf{K}\nabla\rho_h) \cdot \mathbf{n}_E \} \} \\ &\quad + \epsilon \sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e [[\rho_h]] \{ \{ (\mathbf{K}\nabla v) \cdot \mathbf{n}_E \} \} + J_0^{\sigma_0, \beta_0} \end{aligned} \quad (12)$$

mit

$$J_0^{\sigma_0, \beta_0} = \sum_{e \in \Gamma_D \cup \Gamma_h} \frac{\sigma_e^0}{|e|^{\beta_0}} \int_e [[\rho]] [[v]] \quad (13)$$

und die Linearform $L_\epsilon : H^s(\mathcal{E}_h) \rightarrow \mathbb{R}$

$$L_\epsilon(v) = \sum_{e \in \Gamma_D} \int_e \left(\epsilon (\mathbf{K}\nabla v) \cdot \mathbf{n}_e + \frac{\sigma_e^0}{|e|^{\beta_0}} v \right) g_D + \sum_{e \in \Gamma_N} \int_e v \rho_N \quad (14)$$

angegeben werden. Das allgemeine variationale Galerkin-Verfahren besteht darin, ein $\rho_h \in \mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h)$ zu finden, so dass $\forall t > 0$ und $\forall v \in \mathcal{D}_k(\mathcal{E}_h)$

$$\left(\frac{\partial \rho_h}{\partial t}, v \right)_\Omega + a_\epsilon(\rho_h, v) = L(v) \quad (15)$$

$$(\rho_h(0), v)_\Omega = (\tilde{\rho}_0, v)_\Omega \quad (16)$$

gilt, wobei $\tilde{\rho}_0$ eine Approximation von ρ_0 darstellt.

Finite Elemente und Stützstellen

Es werden zunächst lediglich Dreiecke betrachtet. Für das Referenzelement \hat{E} kann eine affine Abbildung $\mathbf{x} = \Psi(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{B}_E \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}_E$ definiert werden, so dass $\hat{v}(\hat{\mathbf{x}}) = (v \circ \Psi)(\mathbf{x})$, $\hat{\nabla} \hat{v}(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{B}_E^T (\nabla v \circ \Psi)(\mathbf{x})$ und $\det \mathbf{B}_E = 2|E|$ gilt. Ein Punkt M in \hat{E} , unterteilt das Dreieck in drei weitere Dreiecke. Das Verhältnis

$$\lambda_i(M) = \frac{|E_i|}{|E|} \quad (17)$$

mit $i = 1, 2, 3$ sind die baryzentrischen Koordinaten. Es gilt immer $\lambda^1 + \lambda^2 + \lambda^3 = 1$. Jeder Punkt in einem Referenzelement mit den Ecken $A_1 = (-1, 1)^T$, $A_2 = (-1, -1)^T$ und $A_3 = (1, -1)^T$ kann dann durch die Linearkombination

$$\hat{\mathbf{x}} = \lambda^1 \hat{A}_1 + \lambda^2 \hat{A}_2 + \lambda^3 \hat{A}_3 \quad (18)$$

dargestellt werden. Ebenso gilt für ein beliebiges Element E mit den Ecken A_1, A_2 und A_3

$$\mathbf{x} = \lambda^1 A_1 + \lambda^2 A_2 + \lambda^3 A_3 \quad (19)$$

So kann eine Abbildung $\mathbf{x} = \Psi(\hat{\mathbf{x}})$ gefunden werden.

Damit können die auftretenden Integrale mithilfe einer Gauss-Quadratur mit geeigneten Stützstellen als

$$\int_E v \approx 2|E| \sum_{j=1}^{Q_D} w_j \hat{v}(s_{x,j}, s_{y,j}) \quad (20)$$

$$\int_E \nabla v \cdot \mathbf{w} \approx 2|E| \sum_{j=1}^{Q_D} (\mathbf{B}_E^T)^{-1} w_j \hat{\nabla} \hat{v}(s_{x,j}, s_{y,j}) \hat{\mathbf{w}}(s_{x,j}, s_{y,j}) \quad (21)$$

$$\int_E \nabla v \cdot \nabla w \approx 2|E| \sum_{j=1}^{Q_D} (\mathbf{B}_E^T)^{-1} w_j \hat{\nabla} \hat{v}(s_{x,j}, s_{y,j}) (\mathbf{B}_E^T)^{-1} \hat{\nabla} \hat{w}(s_{x,j}, s_{y,j}) \quad (22)$$

dargestellt werden. Die Funktion v kann durch eine Basis innerhalb des Referenzelements dargestellt werden

$$\hat{v}(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{n=1}^{Q_D} \tilde{v}_n \psi_n(\hat{\mathbf{x}}) \quad (23)$$

Eine solche Basis kann beispielsweise

$$\psi_m(\hat{\mathbf{x}}) = \sqrt{2} P_i^{(0,0)} \left(2 \frac{1 + \hat{x}_1}{1 - \hat{x}_2} - 1 \right) P_j^{(2i+1,0)}(\hat{x}_2) (1 - \hat{x}_2)^i \quad (24)$$

mit $m = j + (N + 1)i + 1 - \frac{i}{2}(i - 1)$, $(i, j) \geq 0$, $i + j \leq N$ und orthonormalen Jacobi-Polynome. Auch die Basisfunktionen sind orthonormal auf dem Referenzelement, denn

$$\begin{aligned} \int_{\hat{E}} \psi_n(\hat{\mathbf{x}}) \psi_m(\hat{\mathbf{x}}) &= 2 \int_{-1}^1 dr \int_{-1}^{-r} ds P_i^{0,0} \left(2 \frac{1 + \hat{x}_1}{1 - \hat{x}_2} - 1 \right) P_j^{0,0} \left(2 \frac{1 + \hat{x}_1}{1 - \hat{x}_2} - 1 \right) \\ &\quad \times P_k^{2i+1,0}(\hat{x}_2) (1 - \hat{x}_2)^i P_l^{2j+1,0}(\hat{x}_2) (1 - \hat{x}_2)^j \\ &= \int_{-1}^1 da \int_{-1}^1 db P_i^{0,0}(a) P_j^{0,0}(a) P_k^{2i+1,0}(b) (1 - b)^i P_l^{2j+1,0}(b) (1 - b)^j (1 - b) = \delta_{ij} \delta_{kl} \end{aligned} \quad (25)$$

Eine anderer Weg ist die nodale Darstellung

$$\hat{v}(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{n=1}^{Q_D} \hat{u}(\xi_n) l_i(\hat{\mathbf{x}}) \quad (26)$$

bei der ein Satz von Interpolationspunkten vorgegeben ist, der idealerweise mit den Stützpunkten aus der Gauß-Quadratur übereinstimmen. Werden die Interpolationspunkte in die modale Form eingesetzt, ergibt sich das LGS

$$\hat{\mathbf{v}} = \begin{pmatrix} \hat{v}(\xi_1) \\ \vdots \\ \hat{v}(\xi_{Q_D}) \end{pmatrix} = \mathcal{V} \begin{pmatrix} \tilde{v}(\xi_1) \\ \vdots \\ \tilde{v}(\xi_{Q_D}) \end{pmatrix} = \mathcal{V} \tilde{\mathbf{v}} \quad (27)$$

mit der Vandermondematrix $(V)_{ij} = \psi_j(\xi_i)$. Bei Vergleich mit der nodalen Form ergibt

$$\psi_n(\hat{\mathbf{x}}) = (\mathcal{V}^T \ell)_n(\hat{\mathbf{x}}) \quad (28)$$

Die Frage die sich stellt ist nun, wie optimale Q_D Stützstellen für die Interpolation von \hat{v} auf \hat{E} gefunden werden können. Dazu wird ein gleichseitiges Dreieck betrachtet. Zunächst wird von einer äquidistanten Verteilung

$$(i, j) \geq 0, i + j \leq N : (\lambda^1, \lambda^3) = \left(\frac{i}{N}, \frac{j}{N} \right), \lambda^2 = 1 - \lambda^1 - \lambda^3 \quad (29)$$

auf dem gleichseitigen Dreieck ausgegangen. Dies ergibt mit den Ecken $A_1 = (-1, -\frac{1}{\sqrt{3}})^T$, $A_2 = (1, -\frac{1}{\sqrt{3}})^T$ und $A_3 = (0, \frac{\sqrt{3}}{2})^T$ die Punkte $\mathbf{x} = \left(-\lambda^2 + \lambda^3, \frac{1}{\sqrt{3}} (-\lambda^2 - \lambda^3 + \lambda^1) \right)^T$. Im eindimensionalen Fall kann die Funktion

$$w(x) = \frac{1}{1 - x^2} \sum_{i=1}^{Q_D} \left(r_i^{\text{LGL}} - r_i^{\text{equi}} \right) \ell_i^{\text{equi}}(x) \quad (30)$$

definiert werden, welche ein äquidistantes Gitter auf auf Legendre-Gauss-Lobatto (LGL)-Punkte zuordnet. Darauf basierend werden drei Warping-Funktionen

$$\mathbf{w}^1 = w(\lambda^3 - \lambda^2) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$\mathbf{w}^2 = w(\lambda^1 - \lambda^3) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (32)$$

$$\mathbf{w}^3 = w(\lambda^2 - \lambda^1) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (33)$$

und drei Blendfaktoren

$$b^1 = 4\lambda^3\lambda^2, \quad b^2 = 4\lambda^3\lambda^1, \quad b^3 = 4\lambda^2\lambda^1 \quad (34)$$

definiert. Damit ergeben sich die ungeordneten Punkte zu

$$\mathbf{x}^{\text{LGL}} = \mathbf{x}^{\text{equi}} + \left(1 + (\alpha\lambda^1)^2\right) b_1 \mathbf{w}^1 + \left(1 + (\alpha\lambda^2)^2\right) b_2 \mathbf{w}^2 + \left(1 + (\alpha\lambda^3)^2\right) b_3 \mathbf{w}^3 \quad (35)$$

Dies kann anschaulich so erklärt werden, dass mit jedem \mathbf{w}^1 in Kantenrichtung eine Umordnung der Stützpunkte stattfindet. Die Argumente in w ergeben sich aus dem verschwinden einer baryzentrischen Koordinate auf der betreffenden Kante. Durch eine Warping-Funktion werden alle Punkte in Richtung der beiden Vertices der Kante verschoben. Entfernen sich die Punkte von der Kante, wird der Einfluss der Warping-Funktion mithilfe der Blendfunktion b abgeschwächt. Insgesamt werden die Stützpunkte also in die Gegend der Vertices verschoben, um damit eine bessere numerische Konditionierung zu erhalten. Dies lässt sich mit einer Skalierung und einer Konstante α noch weiter optimieren. Zuletzt werden die so ermittelten Punkte noch mit der Koordinatentransformation Ψ^{-1} auf die des Referenzelementes umrechnen.

Anwendung auf das DG-Verfahren

Zunächst wird ρ_h in einer geeigneten Basis $\{\psi_n^i\}$ dargestellt. Außerdem wird die Test zu ψ_m gewählt. Die Elemente werden numeriert und Damit kann die Bilinearform a_ϵ umgeschrieben werden zu

$$\begin{aligned} a_\epsilon(\rho_h, v) = & \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E (\nabla v \cdot (\mathbf{K} \nabla \rho_h) + B \rho_h v) - \sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e [[v]] \{ \{ (\mathbf{K} \nabla \rho_h) \cdot \mathbf{n}_E \} \} \\ & + \epsilon \sum_{e \in \Gamma_h \cup \Gamma_D} \int_e [[\rho_h]] \{ \{ (\mathbf{K} \nabla v) \cdot \mathbf{n}_E \} \} + J_0^{\sigma_0, \beta_0} \end{aligned} \quad (36)$$