

0.0.1 Idea

Nel calcolo della corrente ai contatti si calcola sostanzialmente il residuo del problema DD globale, utilizzando però la matrice di sistema non ancora modificata per le condizioni al bordo di Dirichlet. Infine dato un contatto (e quindi un insieme di vertici), si sommano le componenti del residuo relative ai vertici che risiedono su quel contatto. In questo modo otteniamo la corrente di elettroni \mathcal{I}_n^k (k-esimo contatto). Possiamo affermare ovviamente che:

$$\mathcal{I}_n^k = \int_{\Gamma_k} \mathbf{J}_n \cdot \mathbf{n} d\Gamma_k \quad (1)$$

Poniamo di aver risolto il problema e di conoscere le densità su ogni vertice della triangolazione. **L'idea principale è di pensare ad ogni singolo elemento come un nuovo problema con condizioni di Dirichlet sui quattro vertici.** Applico nuovamente l'idea del calcolo della corrente ai contatti utilizzata per l'intero dominio di simulazione, ma questa volta ogni faccia del tetraedro costituisce un contatto. Quindi calcolo la matrice locale e la forzante locale del problema ed infine computo il residuo con la soluzione che già possiedo. Ora non mi resta che per ogni faccia (contatto) calcolare la corrente.

Assumendo \mathbf{J}_n nel discreto essa è una quantità definita sugli elementi, dunque sarà costante nel dominio che stiamo considerando in questo momento, possiamo affermare che data una faccia k dell'elemento:

$$\mathcal{I}_n^k = \mathbf{J}_n \cdot \mathbf{n}_k |\Gamma_k| \quad (2)$$

Così facendo è possibile recuperare quattro contributi alla corrente dell'elemento che tramite un'ortogonalizzazione alla Grand-Schmidt ci permettono di ricostruire il vettore densità di corrente.

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_n = & \mathcal{I}_n^1 \mathbf{n}_1 + (\mathcal{I}_n^2 \mathbf{n}_2 - \mathcal{I}_n^2 (\mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_1) \mathbf{n}_1) \\ & + (\mathcal{I}_n^3 \mathbf{n}_3 - \mathcal{I}_n^3 (\mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{v}_2) \mathbf{v}_2) + (\mathcal{I}_n^3 \mathbf{n}_3 - \mathcal{I}_n^3 (\mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{n}_1) \mathbf{n}_1) \\ & + (\mathcal{I}_n^4 \mathbf{n}_4 - \mathcal{I}_n^4 (\mathbf{n}_4 \cdot \mathbf{v}_3) \mathbf{v}_3) + (\mathcal{I}_n^4 \mathbf{n}_4 - \mathcal{I}_n^4 (\mathbf{n}_4 \cdot \mathbf{v}_2) \mathbf{v}_2) + (\mathcal{I}_n^4 \mathbf{n}_4 - \mathcal{I}_n^4 (\mathbf{n}_4 \cdot \mathbf{n}_1) \mathbf{n}_1) \end{aligned}$$

Mi sembra una possibile estensione del metodo dei residui all'interno del dispositivo anche se probabilmente potrei avere commesso degli errori nello sviluppo dell'idea. Tuttavia anche nel caso di una corretta base teorica, per come ho presentato il metodo mi sembra che si rischi di incorrere in problemi numerici date le numerose differenze che occorrerebbe fare.

Probabilmente aiutandoci con gli articoli di Hughes possiamo tirar fuori un'idea simile, sfruttando in qualche modo i flussi ausiliari che sono senza dubbio legati ai residui dei problemi locali.