随机 Schrödinger 方程的数值方法

陈 楚 楚

摘 要

本文主要研究 Stratonovich 意义的乘性噪声驱动的随机 Schrödinger 方程数值方法. 基于随机变分原理, 我们提出无穷维随机 Hamilton 系统的一般形式, 并应用于随机 Schrödinger 方程, 给出其无穷维随机 Hamilton 系统的表达式, 证明了它的解流保持无穷维随机辛性. 对于随机 Schrödinger 方程, 电荷守恒定律仍然成立, 但是能量却不再守恒, 而是满足随机演化公式 (Bouard and Debussche, 2003). 利用该公式及随机分析的工具, 我们证明能量具有一致有界性. 该性质蕴含着 d-维随机 Schrödinger 方程解的 $\mathbb{H}^1(\mathcal{O})$-稳定性. 特别地, 对于一维问题, 我们证明了解的 $\mathbb{H}^2(\mathcal{O})$-稳定性. 同时, 对于 d-维问题 ($d = 1, 2, 3$), 我们证明了解在 $\mathbb{L}^2(\mathcal{O})$-范数下的 Hölder 连续性, 特别地, 在一维情形, 解在 $\mathbb{H}^1(\mathcal{O})$-范数下也具有 Hölder连续性.

为构造保持无穷维随机辛性的数值方法, 我们给出一类在时间方向上半离散随机 Schrödinger 方程的随机 Runge-Kutta 方法, 并得到该方法保持无穷维随机辛性的条件, 证明了满足该条件的随机 Runge-Kutta 方法保持离散的电荷守恒定律. 我们给出了随机 Schrödinger 方程时间半离散格式的基本收敛性定理, 该定理表明一个格式的全局均方阶只依赖于局部误差和算子半群的性质, 它是全局均方收敛阶的一般性判别准则. 基于该定理, 我们以中点格式为例分析了它的均方收敛阶, 验证了定理的有效性.

因随机 Schrödinger 方程的能量具有一致有界性, 为使数值方法对应的离散能量继承该有界性, 我们提出一类 θ-方法, 并利用该方法在时间方向上离散随机 Schrödinger 方程. 为了产生足够的数值耗散性以控制离散噪声的影响, 这里 θ 在区间 $[\frac{1}{2} + O(\sqrt{\tau}), 1]$ 中取值. 我们证明了对于一般的 d-维问题, 这类方法对应的离散能量具有一致上界, 该上界只依赖于初始值 ψ_0、终端时间 T 和问题的区域. 离散能量的一致有界性蕴含着数值解的 $\mathbb{H}^1(\mathcal{O})$-稳定性, 基于此我们利用紧致理论得到数值解收敛到原问题温和解的结论. 为了更进一步刻画该方法的收敛性, 即得到其收敛阶, 对于一维问题, 我们利用解的稳定性、Hölder 连续性、Sobolev 嵌入定理以及随机分析的工具证明了当初始值 $\psi_0 \in L^8(\Omega; \mathbb{H}_0^1 \cap \mathbb{H}^2(\mathcal{O}))$ 时, 数值方法的收敛阶为 1/2; 当初始值 $\psi_0 \in L^6(\Omega; \mathbb{H}_\Delta \cap \mathbb{H}^4(\mathcal{O}))$ 时, 数值方法的最优收敛阶为 1.

关键词: 随机 Schrödinger 方程, 无穷维随机 Hamilton 系统, 时间半离散方法, 随机辛 Runge-Kutta 方法, θ-方法, 收敛阶