Maxwell–Schrödinger 系统有限元分析与多尺度算法

马楚鹏

摘要

Maxwell–Schrödinger (M-S) 系统是研究光与物质相互作用的半经典模型. 近年来随着光学技术和纳米科技的发展, M-S 系统越来越多地被应用于极端非线性光学和纳米光子学的模拟, 其数值算法和理论分析也受到了广泛的关注. 本论文主要研究了 M-S 系统的有限元方法及其误差分析, 多尺度模型和算法, 以及在纳米等离子学中的应用.

第一部分, 针对 Weyl 规范, Lorentz 规范, Coulomb 规范下的 M-S 系统以及 Coulomb 规范下的 Maxwell–Klein–Gordon 系统提出了有限元方法并给出了这些方法的误差分析. 其中第三章我们针对 Weyl 规范下修正的 M-S 系统提出了 Crank–Nicolson 有限元方法, 在时间步长 $\tau \leq \frac{1}{5}$ 的条件下证明了该方法的最优误差估计. 第四章我们给出了 Lorentz 规范下的 M-S 系统的全离散有限元方法, 对三维的情形在时间步长 τ 和空间网格尺寸 h 充分小的条件下证明了最优误差估计, 对二维的情形在时间步长 τ 满足一个较弱的约束的条件下给出了最优误差估计. 第五章我们详细讨论了 Coulomb 规范下 M-S 系统的数学理论和计算方法. 我们首先证明了该系统在光滑有界区域中弱解的整体存在性, 接下来我们针对该系统提出了能量守恒的全离散数值格式, 证明了离散系统解的存在唯一性, 在时间步长 τ 充分小的条件下给出了该方法的最优误差估计. 值得指出的是我们针对 M-S 系统的全离散有限元方法给出的误差估计并不需要对时间步长 τ 和空间网格尺寸 h 有类似 $\tau \leq Ch^{\alpha}$ 的约束关系. 数值算例验证了我们的理论分析结果. 第六章我们证明了 Coulomb 规范下的 Maxwell–Klein–Gordon 系统在光滑有界区域中弱解的整体存在性, 给出了有限元半离散误差估计, 并提出了保持能量不增的全离散算法, 在一定的假设下证明了离散系统解的存在性和唯一性.

第二部分, 研究了具有周期间断系数的 M-S 系统的多尺度方法并将 M-S 系统应用于纳米等离子学的模拟. 其中第七章针对有效质量和磁导率都是周期间断系数的 Weyl 规范的 M-S 系统, 发展了均匀化和多尺度方法, 并在二阶多尺度方法效果不理想的情形给出了修正的多尺度解. 第八章针对有效质量, 介电常数和磁导率都是周期间断系数的电偶极子近似的 M-S 系统, 发展了均匀化和多尺度方法. 数值结果验证了多尺度方法有效性. 第九

章我们应用 M-S 系统模拟了纳米等离子学中表面等离激元与量子点的相互作用过程并揭示了将 Maxwell 方程组和 Schrödinger 方程耦合的必要性.

关键词: Maxwell–Schrödinger, 有限元, 误差分析, 多尺度方法, 纳米等离子学