

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ДЕКАРТОВОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

А.А. Дегтярев, А.Е. Деркач
Самарский государственный аэрокосмический университет

Аннотация

Для решения уравнения Шредингера, описывающего распространение электромагнитной волны в нелинейной среде, строится разностная схема типа Писмена-Рекфорда с итерационным уточнением, имеющая квадратичный порядок точности по всем трем пространственным переменным. Для исследования схемы рассмотрены частные случаи задачи, допускающие аналитическое решение. Проведено сопоставление аналитического и численного решений. Приведены результаты численного моделирования процесса распространения электромагнитной волны в нелинейной среде, позволяющие наблюдать как явление самофокусировки светового пучка, так и его самодефокусировки, что полностью согласуется с теорией электромагнитных волн [1].

Отмечается возможность применения разностной схемы для исследования процессов распространения электромагнитной волны в средах с пространственно-зависимым показателем преломления.

Введение

Как известно [1], нелинейное уравнение Шредингера является частным случаем волнового уравнения в параболическом приближении, записанном с учетом эффекта самовоздействия. Эффект самовоздействия проявляется при распространении оптического излучения в средах с кубичной нелинейностью (поляризация пропорциональна напряженности электрического поля в третьей степени).

С учетом этого эффекта уравнение Шредингера в декартовой системе координат запишем как [1]

$$\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{i}{2kn_0} \Lambda_D U + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} |U|^2 U = 0, \quad (1)$$

$$-\frac{L_x}{2} \leq x \leq \frac{L_x}{2}, \quad -\frac{L_y}{2} \leq y \leq \frac{L_y}{2}, \quad 0 \leq z \leq L,$$

где $\Lambda_D \equiv \Lambda_x + \Lambda_y \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$ - оператор Лапласа

в декартовой системе координат,

U - напряженность электрического поля,

k - волновой вектор,

n_0 - показатель преломления среды,

n_{nl} - изменение показателя преломления под действием поля распространяющейся волны.

Отметим, что ось Z совпадает с направлением распространения волны, а оси X и Y лежат в плоскости, перпендикулярной оси Z .

Для получения замкнутой краевой задачи дополним уравнение (1) следующими краевыми условиями

$$\begin{cases} U|_{z=0} = \phi(x, y) \\ U|_{x=-L_x/2} = 0 \\ U|_{x=L_x/2} = 0 \\ U|_{y=-L_y/2} = 0 \\ U|_{y=L_y/2} = 0 \end{cases} \quad (2)$$

Функция $\phi(r)$ описывает напряженность электрического поля волны на входе в среду (волновод), а нулевые граничные условия показывают, что среда (волновод) ограничена проводящей оболочкой.

Без учета нелинейных эффектов уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{i}{2kn_0} \Lambda_D U = 0 \quad (3)$$

В дальнейшем уравнение (1) будем называть нелинейным уравнением Шредингера, а уравнение (3) - линейным уравнением.

1. Расчетная конечно-разностная схема с итерационным уточнением

Для численного решения системы (1) - (2) построим разностную схему Писмена-Рэкфорда [2]. Определим сетку

$$z_k = k \cdot h_z, \quad k = \overline{0, K}, \quad h_z = L / K$$

$$x_i = i \cdot h_x, \quad i = \overline{-I/2, I/2}, \quad h_x = L_x / I$$

$$y_j = j \cdot h_y, \quad j = \overline{-J/2, J/2}, \quad h_y = L_y / J$$

h_z, h_x, h_y - шаги дискретизации по переменным z, x и y .

Обозначим через U_{ij}^k сеточный аналог численного решения $U(x_i, y_j, z_k)$.

Оператор Лапласа аппроксимируем следующим разностным оператором [2]:

$$\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^k = \frac{U_{i-1j}^k - 2U_{ij}^k + U_{i+1j}^k}{h_x^2}.$$

Задаче (1)-(2) поставим в соответствие следующую двухслойную нелинейную разностную схему:

$$\begin{cases} \frac{U_{ij}^{k+1/2} - U_{ij}^k}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^k \right) + \\ \quad + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} |U_{ij}^{k+1/2}|^2 U_{ij}^{k+1/2} = 0 \\ \frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^{k+1/2}}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^{k+1} \right) + \\ \quad + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} |U_{ij}^{k+1/2}|^2 U_{ij}^{k+1/2} = 0 \\ U_{ij}^0 = \phi(r) \\ U_{-I/2,j}^k = U_{I/2,j}^k = U_{i,-J/2}^k = U_{i,J/2}^k = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Первое уравнение системы разностных уравнений (4) является нелинейным. Для нахождения неизвестной функции $U_{ij}^{k+1/2}$ можно использовать итерационный метод последовательных приближений в сочетании с разностной прогонкой по x и y :

$$\frac{U_{ij}^{s+1k+1/2} - U_{ij}^k}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{s+1k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^k \right) + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} \left| U_{ij}^{s+1k+1/2} \right|^2 U_{ij}^{s+1k+1/2} = 0, \quad (5)$$

причем $U_{ij}^{0k+1/2} = U_{ij}^k$.

Таким образом, система (4) примет вид:

$$\begin{cases} \frac{U_{ij}^{s+1k+1/2} - U_{ij}^k}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{s+1k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^k \right) + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} \left| U_{ij}^{s+1k+1/2} \right|^2 U_{ij}^{s+1k+1/2} = 0 \\ \frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^{k+1/2}}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^{k+1} \right) + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} \left| U_{ij}^{k+1/2} \right|^2 U_{ij}^{k+1/2} = 0 \\ U_{ij}^0 = \phi(r), \quad U_{ij}^{0k+1/2} = U_{ij}^k \\ U_{-1/2j}^k = U_{1/2j}^k = U_{i-J/2}^k = U_{iJ/2}^k = 0 \end{cases} \quad (6)$$

В ходе теоретических исследований удалось доказать, что схема (6) имеет порядок аппроксимации $O(h_x^2, h_y^2, h_z^2)$.

В результате проведения вычислительных экспериментов получено подтверждение сходимости разностной схемы (6). Процесс итерационного уточнения обнаружил быструю сходимость: для уточнения решения до величин порядка 10^{-4} требуются 2-3 итерации.

2. Вычислительные эксперименты для среды с постоянным показателем преломления

Рассмотрим сначала аналитическое решение линейного уравнения.

Будем решать линейное уравнение методом разделения переменных. В этом случае одно из частных решений задачи (1)–(2) запишется в виде

$$U(x, y, z) = \exp \left(i \left(\frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2} \right) \alpha z \right) \sin \left(\frac{\pi x}{L_x} \right) \sin \left(\frac{\pi y}{L_y} \right),$$

$$\text{где } \alpha = \frac{1}{2kn_0}, \quad (7)$$

а начальное условие

$$\phi(x, y) = \sin \left(\frac{\pi x}{L_x} \right) \sin \left(\frac{\pi y}{L_y} \right)$$

2.1. Результаты экспериментальных исследований линейного уравнения

Пучок, описываемый формулой (7), является стационарным, так как $|U(x, y, z)|^2 = |U(x, y, 0)|^2$, то есть распределение интенсивности в плоскости OXY не зависит от расстояния z . Это распределение изображено на рис. 1.

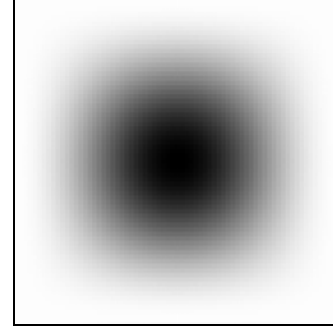


Рис. 1. Распределение интенсивности волны в линейной среде.

На рис. 2-4 приведены результаты численного решения линейного уравнения Шредингера на различных расстояниях от входа в среду.¹

Для проведения численных расчетов были использованы следующие значения параметров:

$$\begin{aligned} L_x = L_y = 50 \text{ мкм}; \\ \lambda = 0,63 \text{ мкм}, \text{ причем } \lambda = 2\pi/k; \\ n_0 = 1. \end{aligned}$$

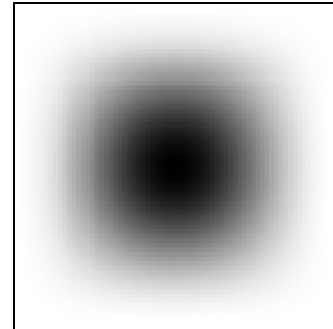


Рис. 2. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 100$ мкм, $n_z = 1000$, $n_x = 70$, $n_y = 70$).

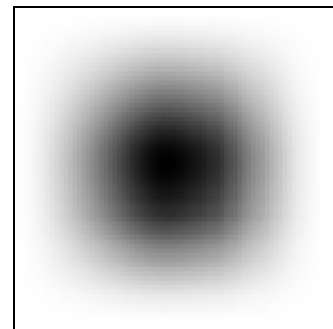


Рис. 3. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 500$ мкм, $n_z = 5000$, $n_x = 70$, $n_y = 70$).

¹ В дальнейшем использованы следующие обозначения: n_x, n_y, n_z - количество интервалов разбиений по осям x, y и z соответственно.

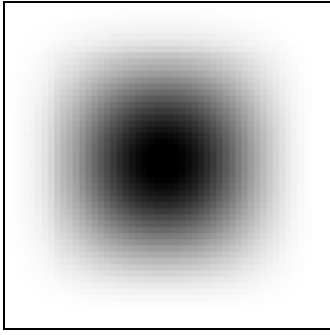


Рис. 4. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 1$ мм, $n_z = 5000$, $n_x = 70$, $n_y = 70$).

Из приведенных рисунков видно, что на расстояниях порядка миллиметра распределения интенсивности волны, полученные с помощью численного решения уравнения Шредингера практически совпадают с аналитически рассчитанным распределением. Среднеквадратическая ошибка при этом не превышает 5%.

3.2. Численное решение нелинейного уравнения Шредингера

Самофокусировка пучка

На рис. 5-7 приведены результаты численного решения нелинейного уравнения Шредингера следующими параметрами:

$$L_x = L_y = 50 \text{ мкм};$$

$$\lambda = 0,63 \text{ мкм, причем } \lambda = 2\pi/k;$$

$$n_0 = 1;$$

$$n_{\text{нл}}^2 = 0,001, \text{ причем } n_{\text{нл}} > 0.$$

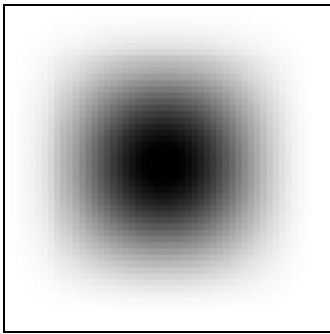


Рис. 5. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 100$ мкм, $n_z = 1000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

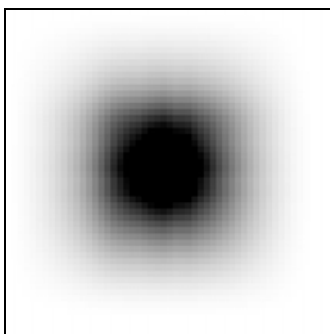


Рис. 6. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 300$ мкм, $n_z = 5000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

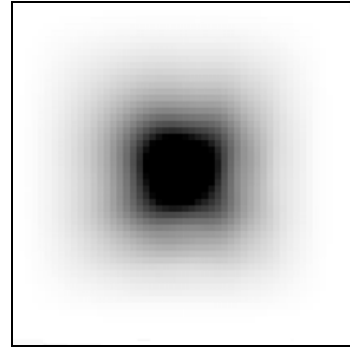


Рис. 7. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 500$ мкм, $n_z = 10000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

В работе [1] показано, что при $n_{\text{нл}} > 0$ происходит фокусировка пучка, то есть смещение энергии пучка к центру. Это явление можно наблюдать и на рисунках 5-7.

Самодефокусировка пучка

На рис. 8-11 приведены результаты численного решения нелинейного уравнения Шредингера со следующими параметрами:

$$L_x = L_y = 50 \text{ мкм};$$

$$\lambda = 0,63 \text{ мкм, причем } \lambda = 2\pi/k;$$

$$n_0 = 1;$$

$$n_{\text{нл}}^2 = 0,001, \text{ причем } n_{\text{нл}} < 0.$$

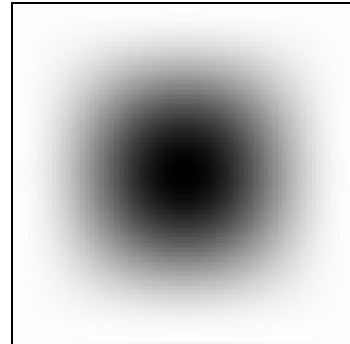


Рис. 8. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 200$ мкм, $n_z = 1000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

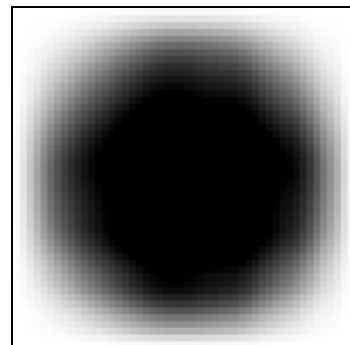


Рис. 9. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 500$ мкм, $n_z = 1000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

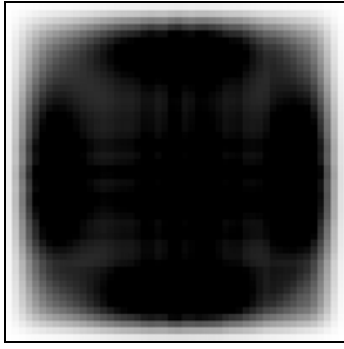


Рис. 10. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 800$ мкм, $nz = 1000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

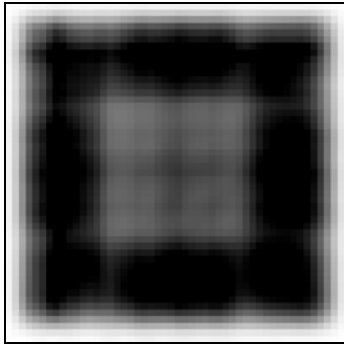


Рис. 11. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 1000$ мкм, $nz = 1000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

В работе [1] показано, что при $n_{nl} < 0$ происходит самодефокусировка пучка в нелинейной среде, то есть смещение энергии пучка в периферийную зону. Приведенные выше графики численного моделирования демонстрируют этот факт.

3. Вычислительные эксперименты для среды с показателем преломления, распределенным по параболическому закону

Пусть показатель преломления зависит от координаты x следующим образом

$$n_0^2 = n_1^2 \left(1 - 2\Delta \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right), \quad (8)$$

причем $n_{nl} = 0$.

Заметим [3], что при $x < a$

$$n_0 = n_1 \left(1 - \Delta \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right) \quad (9)$$

Будем искать решение уравнения в виде

$$U(x, y, z) = A(z)B(x)C(y). \quad (10)$$

Подставляя (10) в уравнение (1), получаем факторизованное уравнение

$$\frac{2ik}{A} \cdot \frac{\partial A}{\partial z} = \frac{1}{n_0} \left(\frac{1}{B} \Lambda_x B + \frac{1}{C} \Lambda_y C \right) = -f, \quad (11)$$

где f - произвольная константа.

$$\text{Таким образом, } A(z) = K \exp\left(i \frac{f}{2k} z\right). \quad (12)$$

Преобразуя (11), получаем

$$\frac{1}{B} \Lambda_x B + fn_0 = -\frac{1}{C} \Lambda_y C = g^2, \quad (13)$$

где g^2 - произвольная константа.

С учетом (13)

$$C = \sin(yg). \quad (14)$$

Представим $B(x)$ в виде произведения двух функций

$$B(x) = X(x) \exp\left(-\frac{x^2}{\omega_0^2}\right). \quad (15)$$

После подстановки (15) и (9) в (13), и осуществив замену переменных, получаем

$$X(x) = H_N \left(\frac{x\sqrt{2}}{\omega_0} \right) \quad (16)$$

где H_N - многочлен Эрмита, причем

$$2N = (fn_1 - g^2) \frac{\omega_0^2}{2} - 1, \quad (17)$$

$$\omega_0^2 = \frac{2a}{\sqrt{fn_1\Delta}}. \quad (18)$$

Таким образом, с учетом (15), (14), (12) и (9) получаем искомое решение

$$U(x, y, z) = K \exp\left(i \frac{f}{2k} z\right) \sin(yg) H_N \left(\frac{x\sqrt{2}}{\omega_0} \right) \times \exp\left(-\frac{x^2}{\omega_0^2}\right). \quad (19)$$

3.1. Результаты численного решения линейного уравнения Шредингера

Для вычислительных экспериментов выберем, например, моду Гаусса-Эрмита с номером $N=11$.

Для выполнения граничного условия необходимо, чтобы $H_N \left(\frac{\pm L_x \sqrt{2}}{\omega_0} \right) = 0$. Пусть, например,

$$\frac{\pm L_x \sqrt{2}}{\omega_0} = \pm 12, \quad (20)$$

так как $H_N(\pm 12) \approx \pm 10^{-16}$.

Для выполнения граничного условия при $y=L_y$ получаем

$$g = \frac{\pi}{L_y}. \quad (21)$$

Из (17) и (18) можно найти f и $p = \frac{\Delta}{a^2}$

На рис. 12 изображено распределение интенсивности в пучке, описываемом формулой (19).

На рис. 13 - 14 приведены результаты численного моделирования линейного уравнения со следующими параметрами:

$$R = 50 \text{ мкм};$$

$$\lambda = 0,63 \text{ мкм, причем } \lambda = 2\pi/k;$$

$$n_1 = 1.$$

Как видно из приведенных графиков, результат численного решения уравнения Шредингера практически полностью совпадает с результатом аналитического решения.

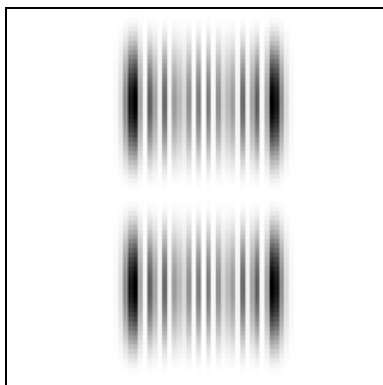


Рис. 12. Распределение интенсивности волны в линейной среде.

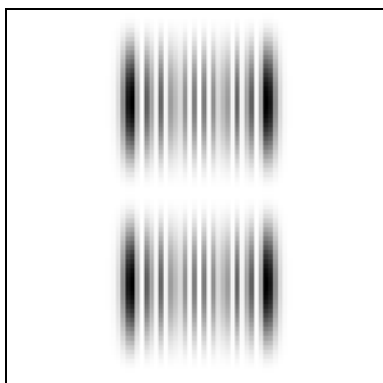


Рис. 13. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L=1 \text{ мм}$, $n_z = 1000$, $n_x = 80$, $n_y = 80$).

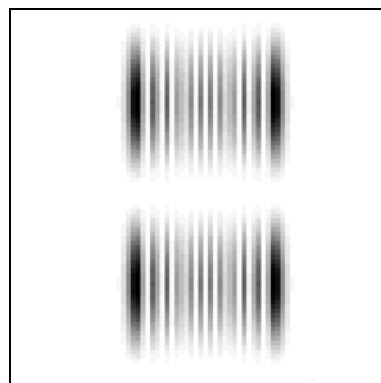


Рис. 14. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 10 \text{ мм}$, $n_z = 50000$, $n_x = 80$, $n_y = 80$).

Заключение

Проведенные исследования подтвердили высокую точность численного решения задачи на расстояниях порядка миллиметра. Так для модели среды, не учитывающей эффект самовоздействия, численное решение практически совпадает с аналитическим, рассчитанным по формуле (7).

Для среды с “параболическим профилем” показателя преломления моды Гаусса-Эрмита, рассчитанные с помощью схемы (6), практически не претерпевают изменений в процессе распространения волны на расстояния порядка десятков миллиметров, что соответствует теории [3].

Для модели среды, учитывающей эффект самовоздействия, численный расчет позволяет наблюдать как явление самофокусировки излучения, так и его самодефокусировки, что спрогнозировано теоретическими оценками, например, в работе [1].

Литература

1. Виноградова М.Б., Руденко О.В., Сухориков А.П. Теория волн // М., Наука. 1979.
2. Самарский А.А. Теория разностных схем // М., Наука. 1977.
3. Адамс М. Введение в теорию оптических волноводов // М., Мир. 1984.