

分步傅里叶法求解广义非线性薛定谔方程的 改进及精度分析*

赵磊[†] 隋展 朱启华 张颖 左言磊

(中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2008 年 10 月 13 日收到, 2008 年 12 月 2 日收到修改稿)

利用分步傅里叶算法求解广义非线性薛定谔方程时, 对非线性项的处理往往采取了较多的数值近似, 而且需要特别小心选择空间和时间的步长以及窗口尺寸, 以保证精度要求. 以描述光子晶体光纤中超连续谱产生的广义非线性薛定谔方程为例, 利用分步傅里叶方法求解时, 对非线性项直接采用积分处理, 而不采取任何数学近似. 数值计算时, 又将积分变成卷积, 利用傅里叶变换求解, 从而方便而又精确地完成了非线性项的计算. 整个过程没有任何人为的近似, 从而保证了计算模型的精确度. 同时, 还对因步长选择引起的计算精度进行了分析, 提出了从频谱图上判断空间、时间步长选取合理性, 从时域图上判断时间窗口合理性的方法, 从而为广义非线性薛定谔方程求解过程中的步长选择等问题提供了直观参考标准.

关键词: 非线性光学, 广义非线性薛定谔方程, 分步傅里叶方法, 超连续谱产生

PACC: 4281D

1. 引言

非线性薛定谔方程 (nonlinear Schrödinger equation, NLSE) 是现代物理学研究中经常遇到的各种非线性发展方程中的一种, 它也是研究非线性色散媒质中光脉冲传播问题的一个十分重要的基本方程^[1,2]. NLSE 方程是非线性偏微分方程, 在一般情况下不适于解析求解, 只能依靠各种各样的数值解法^[3]. 这些方法大体上可以分为有限差分法和伪频谱法两大类, 一般来说, 达到相同的精度, 伪频谱法较有限差分法快一两个数量级. 分步傅里叶方法 (split-step Fourier method, SSFM) 就是一种已经广泛应用到解非线性色散介质的脉冲传输问题的伪频谱法. 这种方法相对于大多数有限差分法有较快的速度, 部分原因是采用了快速傅里叶变换算法.

虽然分步傅里叶算法相对简洁, 但对非线性项的处理往往采取了较多的数值近似, 而且需要特别小心选择空间 z 和时间 T 的步长以及窗口尺寸, 以保证精度要求^[1]. 最佳步长的选择依赖于问题的复

杂程度, 通常需要通过减小步长重复计算来保证数值算法的精度. 而不恰当的步长选择则可能会引起伪边带抖动^[4]和伪四波混频^[5]等失真现象.

本文以描述光子晶体光纤中超连续谱产生的广义非线性薛定谔方程为例, 利用分步傅里叶方法求解时, 对非线性项直接采用积分处理, 而不采取任何数学近似. 数值计算时, 又将积分变成卷积, 利用傅里叶变换求解, 从而方便而又精确地完成了非线性项的计算. 整个过程没有任何人为的近似, 从而保证了计算模型的精确度. 同时, 本文还对因步长选择引起的计算精度进行了分析, 提出了从频谱图上判断空间、时间步长选取合理性, 从时域图上判断时间窗口合理性的方法, 从而为广义非线性薛定谔方程求解过程中的步长选择等问题提供了直观参考标准.

2. 理论模型及改进

2.1. 广义非线性薛定谔方程改进形式

由 Maxwell 方程组可以得到描述光脉冲在非线

* 高温高密度等离子体物理国防科技重点实验室基金(批准号: 9140C6803010803)和中国工程物理研究院科学技术发展基金(批准号: 2008A0401017)资助的课题.

[†] 通讯联系人, E-mail: leizhao@nudt.edu.cn

性色散介质中传输的广义非线性薛定谔方程

$$\frac{\partial A}{\partial z} + \frac{\alpha}{2}A - i \sum_{k \geq 1} \frac{i^k \beta_k}{k!} \frac{\partial^k A}{\partial t^k} = i\gamma \left(1 + \frac{i}{\omega_0} \frac{\partial}{\partial t} \right) \times [A(z, t) \int_{-\infty}^{\infty} R(t') |A(z, t-t')|^2 dt'] \quad (1)$$

其中, α 是介质的损耗系数; ω_0 是脉冲的中心频率; $\beta_k = (d^k \beta / d\omega^k)_{\omega=\omega_0}$ 表示各阶色散 (k 为色散阶数);

$\gamma = \frac{n_2 \omega_0}{c A_{\text{eff}}}$ 为非线性系数, 介质的有效面积可以根据光场的横向分布函数 $F(x, y)$ 计算: $A_{\text{eff}} =$

$$\frac{\left(\iint |F(x, y)|^2 dx dy \right)}{\left(\iint |F(x, y)|^4 dx dy \right)}; n_2 \text{ 为非线性折射率系数, 对}$$

石英光子晶体光纤一般取为 $n_2 = 2.6 \times 10^{-20} \text{ m}^2 \cdot \text{W}^{-1}$.

响应函数^[6,7] $R(t)$ 包含电学的和振动的(拉曼)影响. 假设电学的影响几乎是瞬时的, $R(t)$ 的函数形式可以写成

$$R(t) = (1 - f_R) \delta(t) + f_R h_R(t), \quad (2)$$

式中 f_R 为延时拉曼响应对非线性极化的贡献, 利用已知的峰值拉曼增益系数值可以算出 f_R 约为 0.18. 拉曼响应函数 $h_R(t)$ 的一个有用形式为

$$h_R(t) = \frac{\tau_1^2 + \tau_2^2}{\tau_1 \tau_2} \exp(-t/\tau_1) \sin(t/\tau_2) \theta(t) \quad (3)$$

τ_1 和 τ_2 是两个可以调节的参数, 通常使用的数值是 $\tau_1 = 12.2 \text{ fs}$ 和 $\tau_2 = 32 \text{ fs}$. $\theta(t)$ 是 Heaviside 函数.

记广义非线性薛定谔方程(1)式中右边的积分为

$$\begin{aligned} \Omega &= \int_{-\infty}^{\infty} R(t') |A(z, t-t')|^2 dt' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} [(1 - f_R) \delta(t) + f_R h_R(t)] \\ &\quad \times |A(z, t-t')|^2 dt' \\ &= (1 - f_R) |A(z, t)|^2 \\ &\quad + f_R \int_{-\infty}^{\infty} h_R(t-t') |A(z, t')|^2 dt'. \end{aligned} \quad (4)$$

这样, 把这个复杂的积分变成了拉曼响应函数 $h_R(t)$ 和光场 $A(z, t)$ 的卷积, 数值计算时又可以通过方便的傅里叶变换和逆变换求解卷积, 巧妙而又精确的解决了非线性项的计算. 同时(1)式可以写为

$$\frac{\partial A}{\partial z} + \underbrace{\frac{\alpha}{2}A}_{\text{gain/loss}} - \underbrace{i \sum_{k \geq 1} \frac{i^k \beta_k}{k!} \frac{\partial^k A}{\partial t^k}}_{\text{Dispersion}} = i\gamma \left[(1 - f_R) \underbrace{\delta(t)}_{\text{SPM}} \underbrace{|A|^2 A}_{\text{Self-steepening}} + \underbrace{f_R \left(1 + \frac{i}{\omega_0} \frac{\partial}{\partial t} \right) \int_{-\infty}^{\infty} h_R(t-t') |A(z, t')|^2 dt'}_{\text{Delayed Raman Response}} \right], \quad (5)$$

这样, 方程每一项的物理意义也都很明确, 方程左边表示损耗/增益和色散, 右边表示各种非线性效应: 自相位调制(SPM), 自陡(self-steepening)^[8]、拉曼响应(delayed raman response).

通过作变换: $T = t - z/v_g = t - \beta_1 z$, 引入以群速度 v_g 移动的参考系(即所谓的移动坐标系), 方程可以进一步化成

$$\frac{\partial A}{\partial z} = -\frac{\alpha}{2}A + i \sum_{k \geq 2} \frac{i^k \beta_k}{k!} \frac{\partial^k A}{\partial T^k} + i\gamma \left(1 + \frac{i}{\omega_0} \frac{\partial}{\partial T} \right) (A * \Omega). \quad (6)$$

2.2. 分步傅里叶方法

为便于了解分步傅里叶算法的基本原理^[3], 把方程(6)改写成如下形式:

$$\frac{\partial A}{\partial z} = (\hat{D} + \hat{N})A, \quad (7)$$

式中, \hat{D} 是差分算符, 表示线性介质的色散和吸收; \hat{N} 是非线性算符, 代表非线性效应. 这两种算符可以表示为

$$\hat{D} = -\frac{\alpha}{2} + i \sum_{k \geq 2} \frac{i^k \beta_k}{k!} \frac{\partial^k}{\partial T^k}, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \hat{N} &= i\gamma \left(1 + \frac{i}{\omega_0} \frac{\partial}{\partial T} \right) (A * \Omega) A \\ &= i\gamma \left(\Omega + \frac{1}{A} \frac{i}{\omega_0} \frac{\partial}{\partial T} (A * \Omega) \right). \end{aligned} \quad (9)$$

一般来说, 沿光纤的长度方向, 色散和非线性是同时作用的. 分步傅里叶方法就是通过假定在传输过程中, 光场每通过一小段距离 h , 色散和非线性效应可分别作用, 得到近似结果. 更准确地说, 从 z

到 $z + h$ 的传输过程中分两步进行. 第一步, 仅有色散作用(令 $\hat{N} = 0$); 第二步, 仅有非线性作用($\hat{D} = 0$). 其数学表示为

$$A(z + h, T) \approx \exp(h\hat{N})\exp(h\hat{D})A(z, T). \quad (10)$$

注意到, 计算色散时存在高阶偏微分项, 在时域中不方便计算, 但可利用傅里叶变换, 把偏微分方程变换为代数方程进行运算. 根据傅里叶变换的微分性质, 算符 \hat{D} 中的时间微分 $\partial^n/\partial T^n$ 用 $(i\omega)^n$ 代替, 利用傅里叶变换和逆变换, 表达式(10)变为

$$A(z + h, T) \approx \exp(h\hat{N})F^{-1}\{\exp(h\hat{D}(i\omega))F[A(z, T)]\} \quad (11)$$

采用一个不同的步骤, 光场在最初的传输过程中只与色散有关, 在 $z + \frac{h}{2}$ 处, 光场应乘以一非线性项, 以代表整个区间 h 内的非线性效应, 最后, 光场在剩下的 $\frac{h}{2}$ 区间传输, 只与色散有关, 得到 $A(z + h, T)$. 即由下式代替(10)式:

$$A(z + h, T) \approx \exp\left(\frac{h}{2}\hat{D}\right)\exp[h\hat{N}(z + h/2)] \times \exp\left(\frac{h}{2}\hat{D}\right)A(z, T). \quad (12)$$

此过程与上一过程主要的不同在于非线性效应包含在小区间的中间而不是边界, 该方法称为对称分步傅里叶算法. 采用对称形式的最重要的优点是主要误差项来自(12)式中的双对易子, 它是步长 h 的三阶项, 因此其精度要比采用(11)式计算更高^[9].

3. 精度分析

在使用分步傅里叶算法时, 需要小心选择时间窗口^[3,10]. 在某些问题中, 脉冲能量往往扩散很快,

一旦能量扩散到窗口边界, 到达窗口一边的能量就会从窗口的另一边自动进入(FFT算法的使用隐含着周期性边界条件), 这就可能导致传输后的数值结果出现失真. 另一方面, 步长的选择也是应用分步傅里叶算法时需要重视的问题, 不恰当的步长选择则可能会引起伪边带抖动^[4]和伪四波混频^[5]等失真现象. 通常应选择足够宽的时间窗口, 以保证脉冲能量一直限制在时间窗口内. 在实际计算中, 通过反复调整纵向传输步长和横向时间步长以及脉冲取样点数来保证计算精度. 这里以描述光子晶体光纤中超连续谱产生的广义非线性薛定谔方程为例, 对因时间窗口、步长选择引起的计算精度进行分析. 采用文献[11]中的数据, 使用 15 cm 长的高非线性光子晶体光纤, 非线性系数为 $\gamma = 0.11$ (W·m⁻¹), 零色散点位于 780 nm 处, 其他各阶色散分别为 $\beta_2 = -11.830$ ps²/km, $\beta_3 = 8.1038 \times 10^{-2}$ ps³/km, $\beta_4 = -9.5205 \times 10^{-5}$ ps⁴/km, $\beta_5 = 2.0737 \times 10^{-7}$ ps⁵/km, $\beta_6 = -5.3943 \times 10^{-10}$ ps⁶/km, $\beta_7 = 1.3486 \times 10^{-12}$ ps⁷/km, $\beta_8 = -2.5495 \times 10^{-15}$ ps⁸/km, $\beta_9 = 3.0524 \times 10^{-18}$ ps⁹/km, $\beta_{10} = -1.7140 \times 10^{-21}$ ps¹⁰/km. 抽运光采用中心波长 835 nm 的无啁啾双曲正割脉冲, 脉冲宽度(FWHM)为 50 fs, 峰值功率 1 kW.

3.1. 频谱/时间窗口的选取

在频谱/时间窗口的选取上, 合适的尺度能够获得足够的精度并保证较快的计算速度. 为了方便计算, FFT 要求电场的取样点 $N = 2^m$, 并要求具有合适的时间分辨率(时间步长), 以保证合适的频谱窗口尺度, 避免混淆和重叠误差. 根据 Nyquist 取样法则, 时间步长至少应为两倍频谱宽度的倒数. 小的时间步长对应较大的频谱窗口尺度, 但小的时间步长必须要求小的空间步长与之配合, 又会影响计算速度.

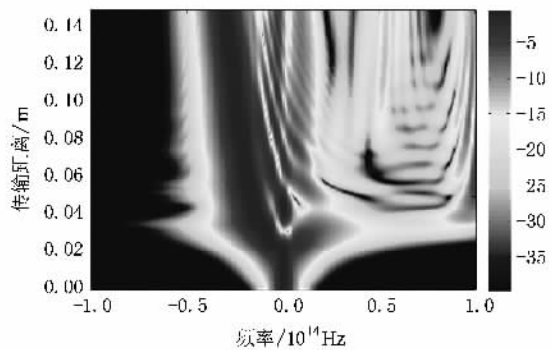
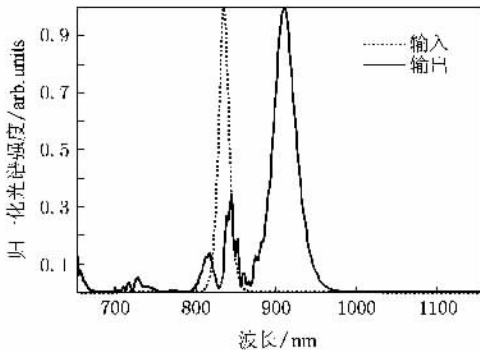


图1 时间步长为 5 fs 时输出超连续谱频域

同时,要采用足够多的采样点数以保证合适的时间窗口.首先,取样精度必须使得频谱窗口能够包含所有频谱成分.否则,超出频谱窗口的频率成分将会混淆和叠加在窗口内形成不正确的光谱.如图 1 所示,

选择时间步长为 5 fs 时,频谱窗口太窄,导致部分频谱成分溢出边界,在 700 nm 附近形成不正确的光谱.重新选择时间步长为 4 fs 时,即可得到较为合适的频谱窗口和正确的模拟结果,如图 2 所示.

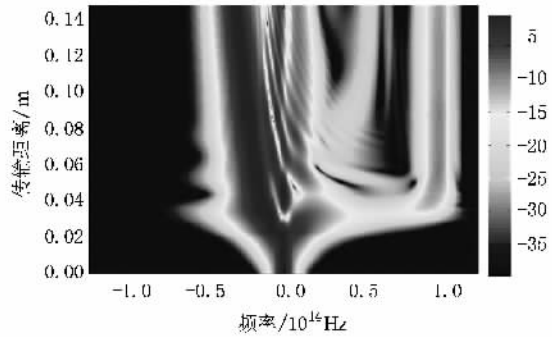
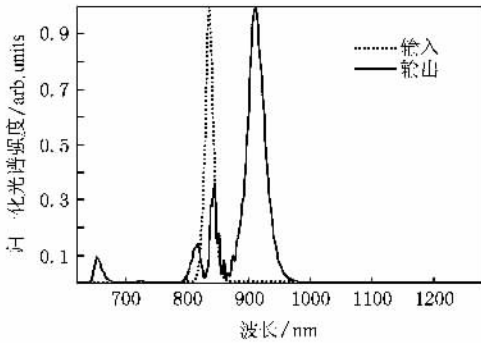


图 2 时间步长为 4 fs 时输出超连续谱频域

时间窗口的宽度也需要宽到脉冲传输到光纤输出之后的展宽宽度.时间窗口太宽,即需要很多的采样点数,使得计算速度变慢.如果时间窗口太窄,一部分脉冲能量进入窗口边界后会从窗口另一边自动进入(FFT 算法隐含着周期性边界条件),导致数值

不稳定,如图 3 所示.时间步长取为 4 fs ,采样点数为 2^8 (对应时间窗口为 0.5 ps)时,时间窗口太窄,计算结果失真.采样点数为 2^9 (对应时间窗口为 1 ps)时,即可得到较为合适的时间窗口和正确的模拟结果,如图 4 所示.

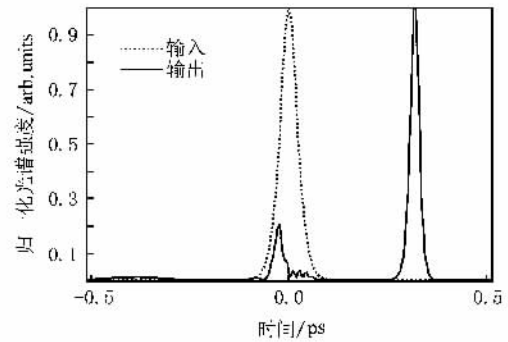
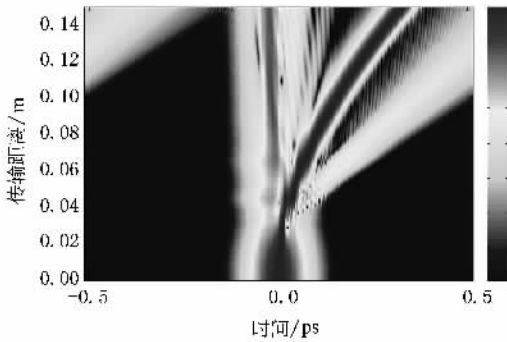


图 3 采样点数为 2^8 (对应时间窗口为 0.5 ps)时输出超连续谱时域

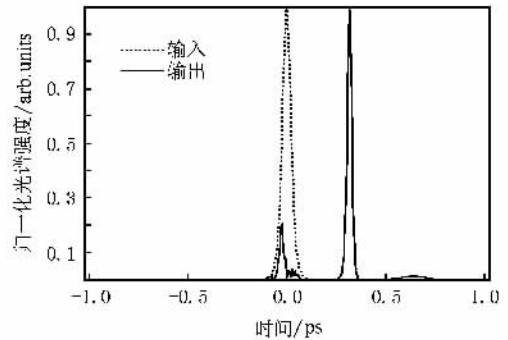
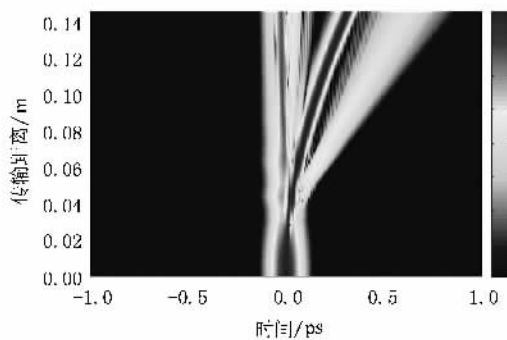


图 4 采样点数为 2^9 (对应时间窗口为 1 ps)时输出超连续谱时域

3.2. 空间步长的选取

分步傅里叶算法需要采用尽可能小的空间步长来保证数值精度,步长越小计算精度越高,但小的步长降低了计算效率.如何选择合适的空间步长,使得在满足计算精度要求的基础上具有比较高的计算效率是步长选择的原则.在步长选择上,首先要参考色散长度 $L_D = T_0^2/|\beta_2|$ 和非线性长度 $L_{NL} = 1/\gamma P_0$, 空间步长必须同时小于这两个长度,实际上,当非线性或色散较强时,空间步长要比这两个长度小很多才会有比较好的精度.本例中,色散长度 $L_D = 0.21$ m,非线性长度 $L_{NL} = 0.009$ m,当空间步长取 0.0006 m 时即出现了失真现象,如图 5 所示,频谱图上出现了明显的调制伪四波混频.步长小于 0.0005 m 时,即可以得到图 2 所示的精确结果.

3.3. 改进算法的精度分析

分步傅里叶算法将非线性薛定谔方程中描述的

色散和各种非线性效应看作是独立作用的,分步分别在频域和时域进行计算,结合傅里叶变换算法,可简洁而又快速地对非线性薛定谔方程进行求解.但是,对非线性项的处理往往采取了较多的数值近似,而且计算精度较低.本文直接从广义非线性薛定谔方程出发,利用分步傅里叶方法求解时,对非线性项直接采用积分处理,而不采取任何数学近似,数值计算时又将积分变成卷积利用傅里叶变换求解,从而方便而又精确地完成了非线性项的计算.这一算法既继承了分步傅里叶算法的思想又保证了计算模型的精确度.这里仍以上面模拟超连续谱产生为例,比较传统二阶差分处理非线性与这里改进后的算法在计算精度上的差别.由于传统分步傅里叶法在求解广义非线性薛定谔方程时只是对非线性项采取了近似处理,因此这里对两种算法进行比较时均忽略了二阶色散的影响,即令 $\beta_2 = 0$.在其他参数不变时,两种算法得到的超连续谱时域和频域分别如图 6、图 7 所示.

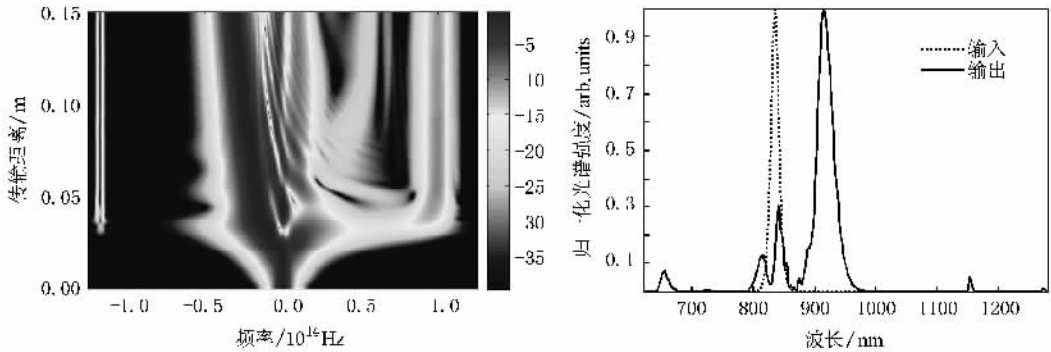


图 5 空间步长为 0.0006 m 时输出超连续谱频域

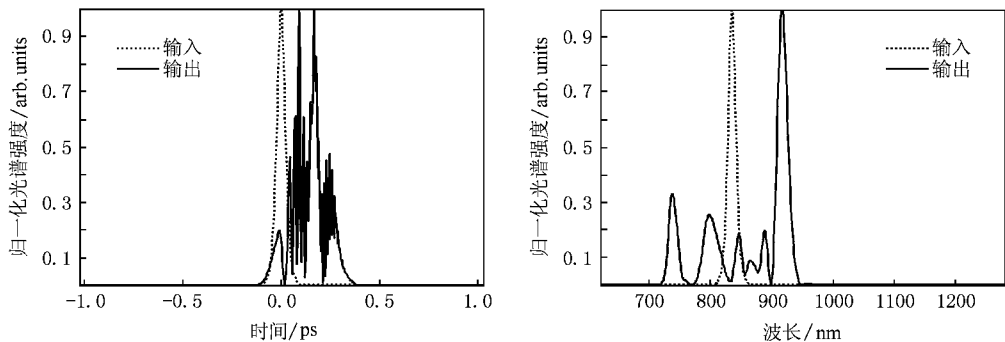


图 6 改进后算法得到的超连续谱时域和频域

文献 [3] 有理论和实验结果指出,在不考虑二阶色散的情况下,由于三阶色散量较大,引起脉冲时域

震荡,对这里 $\beta_3 > 0$ 的情形,震荡结构出现在脉冲后沿.由于自相位调制的作用,脉冲能量集中于两频

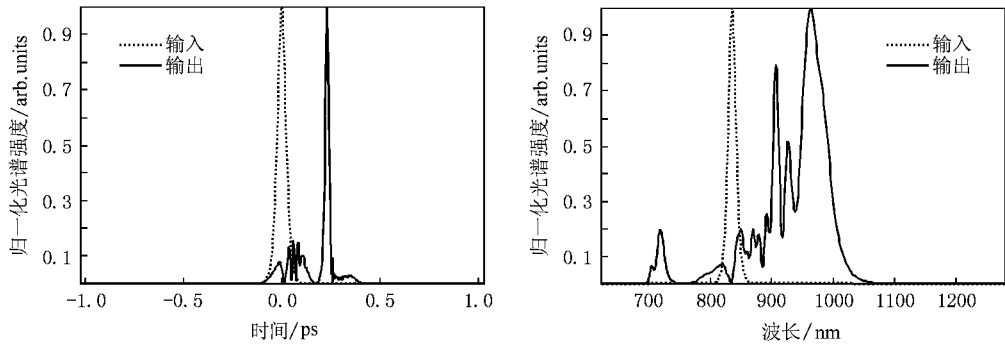


图 7 传统差分算法得到的超连续谱时域和频域

谱边带.同时,由于拉曼和自陡效应的存在,导致频谱的不对称性,红移峰较蓝移峰有较大的强度;另外,蓝移侧(反斯托克斯侧)较红移侧(斯托克斯侧)有更大的频谱展宽.显然,改进后算法得到的结果(图 6)与这些理论和实验结果更为符合.

4. 结 论

以上以描述光子晶体光纤中超连续谱产生的广义非线性薛定谔方程为例,利用分步傅里叶方法求解时,对非线性项直接采用积分处理,而不采取任何

数学近似,数值计算时又将积分变成卷积利用傅里叶变换求解,从而方便而又精确的完成了非线性项的计算.整个过程没有任何人为的近似,从而保证了计算模型的精确度.同时,本文还对因步长选择引起的计算精度进行了分析,提出了根据频域窗口选择时间步长,根据时域窗口判断时间窗口合理性,选择采样点数的方法,再根据频谱图上伪四波混频等边带调制确定空间步长选择合理性,从而为广义非线性薛定谔方程求解过程中的步长选择等问题提供了直观参考标准.

- [1] Zhao Y Q , Zhu H Y , Liu J H *et al* 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2174 (in Chinese) [赵应桥、朱鹤元、刘建华等 1997 物理学报 **46** 2174]
- [2] Chao W H , Zhang Y W , Liu S H *et al* 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 919 (in Chinese) [曹文华、张有为、刘颂豪等 1997 物理学报 **46** 919]
- [3] Agrawal G P 2001 *Nonlinear Fiber Optics* 3rd ed (San Diego : Academic Press)
- [4] Matera F , Mecozzi A , Romagnoli M , Settembre M 1993 *Opt. Lett.* **18** (18) 1499

- [5] Bosco G , Carena A , Curri V *et al* 2000 *IEEE Photon. Techn. Lett.* **12** 489
- [6] Stolen R H , Gordon J P , Tomlinson W J *et al* 1989 *J. Opt. Soc. Am.* B **6** 1159
- [7] Blow K J , Wood D 1989 *IEEE J. Quantum Electron.* **25** 2665
- [8] Brabec T , Krausz F 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 3282
- [9] Fleck J A , Morris J R , Feit M D 1976 *Appl. Phys.* **10** 129
- [10] Sinkin O V , Holzlohner R , Zweck J , Menyuk C R 2003 *J. Lightwave Technol.* **21** 61
- [11] Dudley J M , Genty G , Coen S 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 1135

Improvement and precision analysis of the split-step Fourier method in solving the general nonlinear Schrödinger equation *

Zhao Lei[†] Sui Zhan Zhu Qi-Hua Zhang Ying Zuo Yan-Lei

(*Research Center of Laser Fusion , Mianyang 621900 , China*)

(Received 13 October 2008 ; revised manuscript received 2 December 2008)

Abstract

Many numerical approximations are introduced in solving the general nonlinear Schrödinger equation (GNLSE) using the split-step Fourier method (SSFM). In addition, careful consideration of the spatial and the temporal step sizes and the temporal window is needed to ensure the numerical precision. Supercontinuum generation in photonic crystal fiber is analyzed to show the improvement and precision control. The nonlinear term is treated directly by an integral instead of any mathematical approximation. Then the integral term can be transformed to a convolution to be solved by the Fourier transform, which facilitates the accurate numerical computation of the nonlinear term. High precision is ensured since no factitious approximation is introduced. Computation precision with respect to the step size choice is analyzed. Criteria are proposed as follows. The temporal and spatial step sizes can be appropriately chosen from the spectrogram, and the temporal figure provides a criterion for the temporal step size. These conclusions present direct criteria for the difficult job of step size choice in solving the GNLSE.

Keywords : nonlinear optics , general nonlinear Schrödinger equation , split-step Fourier method , supercontinuum generation

PACC : 4281D

* Project supported by the Science and Technology Foundation of State Key Laboratory of High Temperature and Density Plasma Physics (Grant No. 9140C6803010803) and the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2008A0401017).

[†] Corresponding author. E-mail : leizhao@nudt.edu.cn