

VILNIUS GEDIMINAS TECHNICAL UNIVERSITY

Inga LAUKAITYTĖ

**CONSTRUCTION AND ANALYSIS
OF NUMERICAL METHODS
FOR SOLUTION OF LASER PHYSICS
AND NONLINEAR OPTICS PROBLEMS**

SUMMARY OF DOCTORAL DISSERTATION

PHYSICAL SCIENCES,
MATHEMATICS (01P)



LEIDYKLA
VILNIUS TECHNIKA 2010

Doctoral dissertation was prepared at Vilnius Gediminas Technical University in 2006–2010.

Scientific Supervisor

Prof Dr Habil Raimondas ČIEGIS (Vilnius Gediminas Technical University, Physical Sciences, Mathematics – 01P).

The dissertation is being defended at the Council of Scientific Field of Mathematics at Vilnius Gediminas Technical University:

Chairman

Prof Dr Aleksandras KRYLOVAS (Vilnius Gediminas Technical University, Physical Sciences, Mathematics – 01P).

Members:

Prof Dr Habil Feliksas IVANAUSKAS (Vilnius University, Physical Sciences, Mathematics – 01P),

Prof Dr Paulius MIŠKINIS (Vilnius Gediminas Technical University, Physical Sciences, Physics – 02P),

Prof Dr Habil Konstantinas PILECKAS (Vilnius University, Physical Sciences, Mathematics – 01P),

Prof Dr Habil Mifodijus SAPAGOVAS (Institute of Mathematics and Informatics, Physical Sciences, Mathematics – 01P).

Opponents:

Prof Dr Romas BARONAS (Vilnius University, Physical Sciences, Informatics – 09P),

Assoc Prof Dr Mečislavas MEILŪNAS (Vilnius Gediminas Technical University, Physical Sciences, Mathematics – 01P).

The dissertation will be defended at the public meeting of the Council of Scientific Field of Mathematics at in the Senate Hall of Vilnius Gediminas Technical University at 1 p. m. on 10 June 2010.

Address: Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius, Lithuania.

Tel.: +370 5 274 4952, +370 5 274 4956; fax +370 5 270 0112;

e-mail: doktor@vgtu.lt

The summary of the doctoral dissertation was distributed on 7 May 2010.

A copy of the doctoral dissertation is available for review at the Libraries of Vilnius Gediminas Technical University (Saulėtekio al. 14, LT-10223 Vilnius, Lithuania) and the Institute of Mathematics and Informatics (Akademijos g. 4, LT-08663 Vilnius, Lithuania).

VILNIAUS GEDIMINO TECHNIKOS UNIVERSITETAS

Inga LAUKAITYTĖ

LAZERIŲ FIZIKOS IR NETIESINĖS
OPTIKOS UŽDAVINIŲ
SKAITINIŲ SPRENDIMO METODŲ
SUDARYMAS IR ANALIZĖ

DAKTARO DISERTACIJOS SANTRAUKA

FIZINIAI MOKSLAI,
MATEMATIKA (01P)



LEIDYKLA
VILNIUS TECHNIKA 2010

Disertacija rengta 2006–2010 metais Vilniaus Gedimino technikos universitete.

Mokslinis vadovas

prof. habil. dr. Raimondas ČIEGIS (Vilniaus Gedimino technikos universitete., fiziniai mokslai, matematika – 01P).

Disertacija ginama Vilniaus Gedimino technikos universiteto Matematikos mokslo krypties taryboje:

Pirmininkas

prof. dr. Aleksandras KRYLOVAS (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, fiziniai mokslai, matematika – 01P).

Nariai:

prof. habil. dr. Feliksas IVANAUSKAS (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, matematika – 01P),

prof. dr. Paulius MIŠKINIS (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02P),

prof. habil. dr. Konstantinas PILECKAS (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, matematika – 01P),

prof. habil. dr. Mifodijus SAPAGOVAS (Matematikos ir informatikos institutas, fiziniai mokslai, matematika – 01P).

Oponentai:

prof. dr. Romas BARONAS (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, informatika – 09P),

doc. dr. Mečislavas MEILŪNAS (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, fiziniai mokslai, matematika – 01P).

Disertacija bus ginama viešame Matematikos mokslo krypties tarybos posėdyje 2010 m. birželio 10 d. 13 val. Vilniaus Gedimino technikos universiteto senato posėdžių salėje.

Adresas: Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius, Lietuva.

Tel.: (8 5) 274 4952, (8 5) 274 4956; faksas (8 5) 270 0112;

el. paštas doktor@vgtu.lt

Disertacijos santrauka išsiuntinėta 2010 m. gegužės 7 d.

Disertaciją galima peržiūrėti Vilniaus Gedimino technikos universiteto (Saulėtekio al. 14, LT-10223 Vilnius, Lietuva) ir Matematikos ir informatikos instituto (Akademijos g. 4, LT-08663 Vilnius, Lietuva) bibliotekose.

VGTU leidyklos „Technika“ 1750-M mokslo literatūros knyga.

© Inga Laukaitytė, 2010

Introduction

Problem formulation

Mathematical models describing the Q-switched laser generation, which is a widely used laser technique for producing short intense pulses of light, belong to the class of semi-nonlinear models where only source terms nonlinearly depend on the solution. Numerical methods for solution of systems of semi-nonlinear partial differential equations have been extensively studied in many papers. Schrödinger-type equations, parabolic-type equations or general diffusion-reaction models arise in nonlinear optics. Such differential problems are solved mainly by finite-difference and Galerkin methods. The convergence analysis is based on the stability analysis of the linearized problems.

The construction and theoretical analysis of discrete schemes for one-dimensional problem give a basis for a numerical solution of more general two-dimensional and three-dimensional problems where a diffraction process is taken into account. The two-dimensional problem simulates the dynamics of high-power semiconductor lasers. To solve the problems simulating propagation of photon fluxes in the nonlinear disperse medium, the finite-difference time-domain method is used. However, the major drawback of this method is that the computational domain must be sufficiently large. In order to restrict the computational domain and to solve the problem only in the region of interest, special artificial boundary conditions are investigated.

The three-dimensional problem simulates an interaction of counter propagating laser waves when one of them reflects from the screen with a hole in the middle. We deal with the Kerr nonlinearity in this problem. We develop a conservative finite difference scheme, the solution of which satisfies both discrete invariants.

Topicality of the research work

Nowadays mathematical modeling is used in various scientific fields, such as natural sciences (e. g. physics, biology and meteorology), engineering, social sciences (e. g. economics, sociology and politics) and computer science. The mathematical model has helped in easy way and by simple means to change parameters of a process or a device, to monitor reactions of the object to a variety of effects. In real physical conditions this can be done more difficult and costly.

Real life problems of laser physics and nonlinear optics are simulated in this work. Such mathematical models are described by partial differential equations.

Systems of nonlinear partial differential equations describing problems of nonlinear optics considered in this work are approximated by finite difference schemes and theoretical analysis of schemes is proposed. To solve Schrödinger problem defined in an infinite domain, we restrict the computational domain by introducing special artificial boundary conditions. These conditions enable us to simulate accurately the asymptotical behavior of the solution and do not induce numerical reflections at the boundaries.

For numerical experiments of mathematical models effective numerical algorithms are developed. In order to solve computationally large problems faster, we apply parallel algorithms. The complexity and scalability analysis of proposed parallel algorithms is performed.

Research object

The main research objects of the dissertation are lasers, which nowadays are used in various fields of life. For instance, the Q-switched fiber lasers are widely used to produce short intense pulses of light. Moreover, semiconductor lasers are compact devices and can serve a key role in different laser technologies such as free space communication, printing or pumping fiber amplifiers. Besides, optical switches with short (pico- and femtoseconds) response time and ceration of optical processors are used for the development of optical processors with the three-dimensional optical memory.

The aim of the work

The aim of this dissertation is to construct and analyze numerical methods for the solution of some laser physics and nonlinear optics problems, to apply parallel algorithms for the simulation of the generation dynamics of solid-state and semiconductor lasers.

Tasks of the work

To achieve the aim of the work the following tasks have to be solved:

1. To develop and validate numerical algorithms simulating generation dynamics of solid-state lasers with active and/or passive Q-switching.
2. To propose and investigate sequential and parallel numerical algorithms for the simulation of the dynamics of high-power edge-emitting semiconductor lasers.
3. To perform numerical analysis of the three-dimensional problem describing a nonlinear interaction of two counter-propagating laser waves, and to construct parallel algorithms for numerical experiments.

Applied methods

The following methods and techniques were used in the work: finite difference and finite volume methods as well as their stability and convergence analysis, staggered grids allowing linearization of nonlinear finite difference schemes, transparent boundary conditions used for the reducing of large computational domain, and parallel algorithms as well as their complexity and scalability analysis.

Scientific novelty

Some topical laser physics and nonlinear optics problems were solved during preparation of the thesis. For the solution of these problems, finite difference schemes in the staggered grids are proposed. Their stability and convergence are investigated.

Transparent boundary conditions, which give a sufficiently precise solution of the whole-space problem, are applied.

Parallel algorithms allowing to solve larger problems and to do that much faster, are developed for modeled tasks. The domain decomposition paradigm is used for parallelization of the algorithm.

Practical value

The results obtained in the doctoral dissertation were used in the international scientific projects EUREKA: No. E!3691 OPTCABLES “Optimization Of The Cable Harness” and No. E!3483 EULASNET LASCAN “Advanced Laser Renovation Of Old Paintings, Paper, Parchment And Metal Objects”; in the project B-03/2008 of the Lithuanian State Science and Studies Foundation “Global optimization of complex systems using high performance computing and grid technologies”.

Defended propositions

1. The finite difference scheme of the second order accuracy can be proposed for simulation of generation dynamics of solid-state lasers with active and/or passive Q-switching.

2. Transparent boundary conditions, which enable us to simulate accurately the asymptotical behavior of the solution and do not induce numerical reflections at the boundaries, can be introduced for the simulation of the dynamics of high-power edge-emitting semiconductor lasers.

3. The conservative finite difference scheme, the solution of which satisfies both discrete invariants, can be applied for the three-dimensional problem describing a nonlinear interaction of two counter-propagating laser waves.

4. The developed parallel algorithms and performed analysis help us to solve two-dimensional and three-dimensional nonlinear optics problems effectively.

The scope of the scientific work

The doctoral dissertation consists of an introduction, four chapters, conclusions, a list of references and a list of author's publications. The scope of the dissertation: 87 pages, 17 figures, 4 tables. In the work 87 references are cited. The results of the doctoral dissertation are published in 8 publications. The results were presented in six national and six international conferences. The language of the doctoral dissertation is Lithuanian.

1. Overview of numerical methods used for solution of laser physics and nonlinear optics problems

In this chapter, we shortly describe the problems of laser physics and nonlinear optics, solved in this thesis. We introduce an overview of numerical methods used for the solution of discussed problems.

2. Simulation of active and passive Q-switched fiber laser using the traveling wave model

In this chapter, we consider a mathematical model which describes the propagation of two photon fluxes I^\pm propagating in the opposite directions. These fluxes interact through boundary conditions and active medium. Gain evolution in a laser medium is described by function $k(z, t)$.

We develop a finite-difference scheme for approximation of a system of nonlinear partial differential equations describing the Q-switching process. We construct it on staggered grids. The transport equations are approximated along characteristics, and quadratic nonlinear functions are linearized using a special selection of staggered grids.

Let define the difference functions

$$U_j^{\pm, n} = U^\pm(z_j, t^n), \quad K_{j+1/2}^{n+1/2} = K(z_{j+1/2}, t^{n+1/2}),$$

here $U_j^{\pm, n}$ approximates $I^\pm(z, t)$, and $K_{j+1/2}^{n+1/2}$ approximates the gain function $k(z, t)$.

We construct a difference scheme:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{U_j^{+,n} - U_{j-1}^{+,n-1}}{h_z} = \left(K_{j-1/2}^{n-1/2} - \rho_m \right) \frac{U_j^{+,n} + U_{j-1}^{+,n-1}}{2}, \\ \frac{U_{j-1}^{-,n} - U_j^{-,n-1}}{h_z} = \left(K_{j-1/2}^{n-1/2} - \rho_m \right) \frac{U_{j-1}^{-,n} + U_j^{-,n-1}}{2}, \\ \frac{K_{j-1/2}^{n+1/2} - K_{j-1/2}^{n-1/2}}{h_z} = \frac{K_{j-1/2}^{n+1/2} + K_{j-1/2}^{n-1/2}}{2E_s} \frac{\sum_{k=j-1}^j \left(U_k^{+,n} + U_k^{-,n} \right)}{2}, \end{array} \right. \quad (1.1)$$

where E_s is the saturation energy density describing the amount of energy that can be stored in a laser, and ρ_m is the coefficient of linear losses. Here the convection terms are approximated along characteristics, and time integration is implemented by using the Crank-Nicolson method.

The discrete boundary and initial conditions are defined as

$$U_0^{+,n} = R_1 U_0^{-,n} + f(t), \quad U_J^{-,n} = R_2 U_J^{+,n}, \quad t^n \in \omega_{h_t}, \quad (1.2)$$

$$U_j^{\pm,0} = I_0^{\pm}, \quad z_j \in \omega_{h_z}, \quad K_{j-1/2}^0 = k_0(z_{j-1/2}), \quad z_{j-1/2} \in \tilde{\omega}_{h_z}.$$

We compute the values $K_{j-1/2}^{1/2}$ at the first step of the staggered time grid by using the linearized Euler integration method

$$K_{j-1/2}^{1/2} = \left(\frac{1 - 0.25h_t D_{j-1/2}^0}{1 + 0.25h_t D_{j-1/2}^0} \right) K_{j-1/2}^0, \quad j=1,2,\dots,J_F, \quad (1.3)$$

where

$$D_{j-1/2}^n = \frac{1}{2E_s} \sum_{k=j-1}^j \left(U_k^{+,n} + U_k^{-,n} \right), \quad n \geq 0.$$

At the transmission point of the Q-switch $z_S = Z_s$, we change the approximation of the transport equations taking into account the conjugation conditions:

$$\frac{U_{S+1}^{+,n} - T_s^{+,n-1} U_S^{+,n-1}}{h_z} = -\rho_m \frac{U_{S+1}^{+,n} + T_s^{+,n-1} U_S^{+,n-1}}{2}, \quad (1.4)$$

$$\frac{U_{S-1}^{-,n} - T_s^{-,n-1} U_S^{-,n-1}}{h_z} = -\rho_m \frac{U_{S-1}^{-,n} + T_s^{-,n-1} U_S^{-,n-1}}{2}.$$

The stability analysis proves that a connection between time and space steps arises only due to approximation requirements in order to follow exactly the directions of characteristics. The convergence analysis of this scheme is done in two steps. First, some estimates of the uniform boundedness of the discrete solution are proved. This part of the analysis is done locally, in some neighborhood of the exact solution. Second, on the basis of the obtained estimates, the main stability inequality is proved. The second-order convergence rate with respect to the space and time coordinates follows from this stability estimate. Using the obtained convergence result, we prove that the local stability analysis in the selected neighborhood of the exact solution is sufficient.

We assume that the discrete functions U^\pm are bounded from above:

$$\|U^{\pm,n}\|_\infty \leq M. \quad (1.5)$$

Here we introduce the discrete uniform norm $\|U^n\|_\infty = \max_{0 \leq j \leq J} |U_j^n|$. A constant

$$M \text{ can be selected as } M = \max_{0 \leq t \leq T} \|I^\pm(t)\|_{C(0,Z)} + 1.$$

Let us assume that the initial data satisfy

$$0 \leq K_{j+1/2}^0 \leq \tilde{k}_0, \quad U_j^{\pm,0} \geq 0, \quad z_j \in \omega_z. \quad (1.6)$$

Theorem 2.1. *Let us assume that the initial data satisfy (1.6) and that the analysis is done in a local neighborhood of the exact solution, i.e., estimates (1.5) are valid. Then, for sufficiently small time step $h_t \leq h_t^0$, the a priori estimates*

$$0 \leq K_{j+1/2}^{n+1/2} \leq \tilde{k}_0, \quad U_j^{\pm,n} \geq 0 \quad (1.7)$$

are valid for all $n = 1, 2, \dots, N$ and $j = 0, 1, \dots, J$.

Theorem 2.2. *Let us assume that difference scheme (1.1)–(1.4) is considered in a local neighborhood of the exact solution, i.e., estimates (1.5) are satisfied. Then, for sufficiently small time steps $h_t \leq h_0$, finite-difference scheme (1.1)–(1.4) is stable, and the following error estimate is valid:*

$$\|P^n\|_\infty + \|Z^{n+1/2}\|_\infty \leq C_6 \frac{e^{C_5 t^{n-1}}}{C_5} \max_{0 \leq j \leq n} \left(\|R_u^{j+1/2}\|_\infty + \|R_k^j\|_\infty \right). \quad (1.6)$$

Theorem 2.3. For sufficiently small time and space grid steps $h_t \leq h_t^0$ and $h_z = \nu h_t$, the discrete solution of the finite-difference scheme (1.1)–(1.4) converges to the solution of the differential problem (2.1), and the error estimate

$$\left\| P^n \right\|_{\infty} + \left\| Z^{n+1/2} \right\|_{\infty} \leq Ch_t^2 \quad (1.6)$$

is valid.

The computational experiment was done and its results were presented.

3. Simulation of semiconductor multisection lasers by using traveling wave model

In this chapter, we deal with a (2+1)-D dynamical partial differential equations model. The model equations will be considered in the region

$$Q_{z,x,t} = \{(z, x, t) : (z, x, t) \in (0, L) \times (-X, X) \times (0, T)\},$$

where L is length of the laser, interval $(-X, X)$ exceeds the lateral size of laser and T is the length of time interval where we perform an integration. The dynamics of the considered laser device is defined by spatial-temporal evolution of the counter-propagating complex slowly varying amplitudes of optical fields $E^{\pm}(z, x, t)$, complex polarization functions $p^{\pm}(z, x, t)$ and the real carrier density function $N(z, x, t)$. The optical fields are scaled so that

$$P(z, x, t) = |E^+(z, x, t)|^2 + |E^-(z, x, t)|^2$$

represents local photon density at the time moment t . All these functions are governed by the following (2+1)-D traveling wave model:

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial E^{\pm}}{\partial t} \pm \frac{\partial E^{\pm}}{\partial z} = -iD_f \frac{\partial^2 E^{\pm}}{\partial x^2} - i\beta(N, P)E^{\pm} - i\kappa^{\mp}E^{\mp} - \frac{g_p}{2}(E^{\pm} - p^{\pm}) + F_{sp}^{\pm}, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial p^{\pm}}{\partial t} = i\omega_p p^{\pm} + \gamma_p(E^{\pm} - p^{\pm}), \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_N \frac{\partial N}{\partial x} \right) + \frac{I}{ed} - (AN + BN^2 + CN^3) - \frac{v_g G(N)P}{1 + \varepsilon P}, \quad (2.3)$$

where $i = \sqrt{-1}$, β – a propagation factor, $G(N)$ – the peak gain function and $\hat{n}(N)$ – the carrier dependence of the refractive index:

$$\beta(N, P) = \delta + \tilde{n}(N) + \frac{i}{2} \left(\frac{G(N)}{1 + \varepsilon P} - \alpha \right), \quad G(N) = g' n_r \log \left(\frac{\max(N, n_*)}{n_r} \right),$$

$$\tilde{n}(N) = \sigma n_{tr} \left(\sqrt{\max(N, n^*) / n_{tr}} - 1 \right), \quad 0 < \frac{n^*}{n_{tr}} \ll 1.$$

The fields E^\pm at the laser facets $z=0$ and $z=L$ satisfy the reflecting boundary conditions

$$E^+(0, x, t) = r_0(x) E^-(0, x, t), \quad E^-(L, x, t) = r_L(x) E^+(L, x, t), \quad (2.4)$$

where $r_{0,L}$ are complex reflectivity factors, $|r_{0,L}| \leq 1$.

At the initial time moment initial values of the fields, polarizations and carrier densities are defined on $\overline{Q}_{z,x} = [0, L] \times [-X, X]$ as

$$E^\pm(z, x, 0) = E_{in}^\pm(z, x), \quad p^\pm(z, x, 0) = p_{in}^\pm(z, x), \quad N(z, x, 0) = N_{in}(z, x) \quad (2.5)$$

The lateral boundary conditions are defined on $\overline{Q}_{z,t} = [0, L] \times (0, T]$ as

$$\begin{aligned} E^\pm(z, -X, t) &= 0, & E^\pm(z, X, t) &= 0, & (2.6) \\ N(z, -X, t) &= N_{bnd}, & N(z, X, t) &= N_{bnd}. \end{aligned}$$

The model equations describing the multisection broad-area semiconductors lasers are solved by the finite difference scheme, which is constructed on staggered grids. This nonlinear scheme is linearized applying the predictor-corrector method.

The finite differential system is defined on the structured staggered grid and the complexity of computations at each node of the grid is approximately the same. For such problems the parallelization of the algorithm can be done by using domain decomposition paradigm.

The parallel algorithm was implemented by using the mathematical objects library ParSol. This tool is written using MPI library and it implements some important linear algebra objects in C++. Due to object oriented structure with both sequential and parallel classes of the same objects, ParSol allows to parallelize semi-automatically data parallel algorithms on distributed and shared memory computers.

In the amplifier region the computational domain $(-X, X)$ should be sufficiently large if we want to solve numerically a whole-space evolution of laser beams. But due to computational restrictions (CPU time and memory resources of the computer), one has to restrict the computational domain and to solve the problem only in the region of interest (or a slightly larger domain). Then the main challenge is to introduce special artificial boundary conditions which enable us to simulate accurately the asymptotical behavior of the solution and not induce numerical reflections at the boundaries.

Three types of artificial boundary conditions are defined: reflective (see Fig. 1a), absorbing (see Fig. 1b) and transparent (see Fig. 2). The main

conservation properties of the solution are proved. Numerical discretization of the given problem is performed. The main attention is given to the efficient discretization of absorbing and transparent boundary conditions. It is proved that the proposed difference schemes conserve the discrete analogues of the mass and the energy.

Results of computational experiments are presented in Fig. 1, 2.

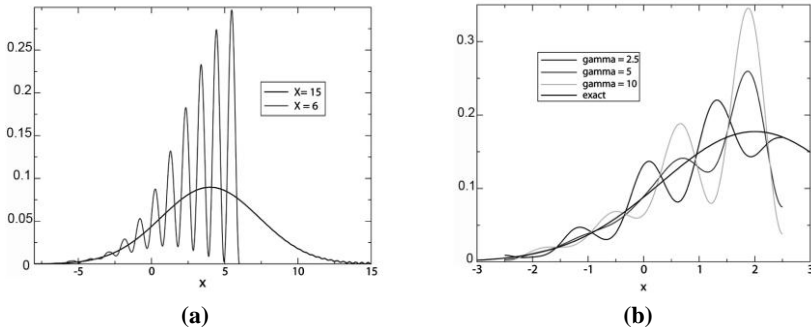


Fig. 1. Numerical solutions of the finite difference scheme: (a) plots of $|U^n|$ at $t=1$ for extended domains with $X=6$ and $X=15$ (reflective boundary conditions), (b) plots of $|U^n|^2$ at $t=0.5$ with $\gamma = 2.5; 5; 10$ (absorbing boundary conditions)

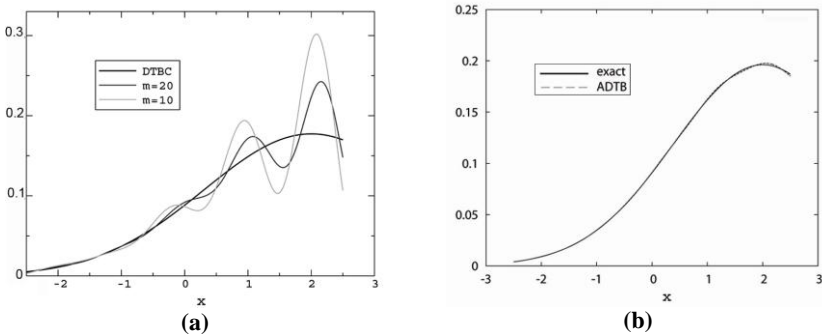


Fig. 2. Numerical solutions for (a) discrete transparent boundary conditions (DTBC) and the truncated version of $DTBC(m)$, and for (b) the approximate DTBC

Results of numerical simulations are presented in Fig. 3.

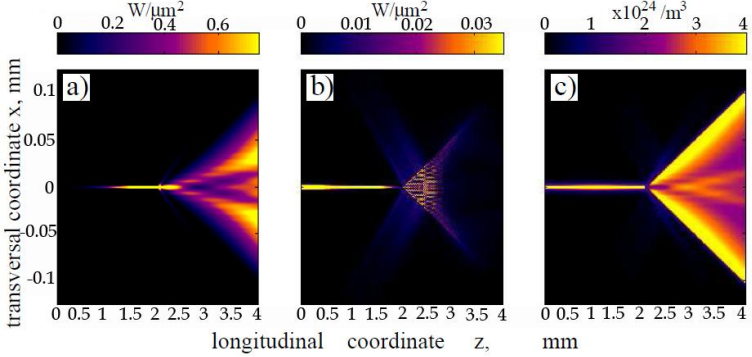


Fig. 3. Spatial distributions of forward and backward field intensities (a,b) and carriers (c) at the stable CW state. The injection currents $I_1 = 0.4$ A and $I_2 = 3$ A, respectively.

Panel a) shows propagation and amplification of the optical field E^+ . The largest intensity of this field is achieved at the left edge of the power amplifier section ($z=L$), where it is emitted from the laser. Obviously, the residual reflection $r_L \neq 0$ implies the presence and amplification of the field E^- within the power amplifier (see panel b), and causes feedback to the master oscillator with dramatic consequences. Strong intensity variations cause spatial hole burning of carriers within the power amplifier section of the device (see panel c).

4. Simulation of the interaction of two counter propagating laser beams in nonlinear Kerr medium

Since in practical applications the greatest interest deals with nonlinear response of medium, we shall consider the Kerr nonlinearity in the domain $D(z, X) = (0 \leq z \leq L_z) \times D(X)$, $D(x) = 0 \leq x_k \leq L_x$, $k = 1, 2$ dimensionless equations and boundary conditions describing a nonlinear interaction of two counter propagating laser beams are given by the system of equations

$$\begin{cases} \frac{\partial A^+}{\partial t} + \frac{\partial A^+}{\partial z} + i \sum_{k=1}^2 D_k \frac{\partial^2 A^+}{\partial x_k^2} + i\gamma (0.5 |A^+|^2 + |A^-|^2) A^+ = 0, \\ \frac{\partial A^-}{\partial t} - \frac{\partial A^-}{\partial z} + i \sum_{k=1}^2 D_k \frac{\partial^2 A^-}{\partial x_k^2} + i\gamma (0.5 |A^-|^2 + |A^+|^2) A^- = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

and the boundary conditions

$$A^+(t, z=0, x_1, x_2) = A_0(t) \exp\left(-\sum_{k=1}^2 \frac{(x_k - x_{ck})^{m_k}}{r_{pk}}\right), \quad (3.2)$$

$$A^-(t, z=L_z, x_1, x_2) = A^+(t, z=L_z, x_1, x_2) R_0 \times \left(1 - \exp\left(-\sum_{k=1}^2 \frac{(x_k - x_{mk})^{q_k}}{R_{ak}}\right)\right) \exp\left(i \sum_{k=1}^2 \frac{(x_k - x_{mk})^2}{R_{mk}}\right). \quad (3.3)$$

Here A^\pm are complex amplitudes of counter propagating pulses, γ characterizes the nonlinear interaction of laser pulses, x_{ck} are coordinates of the beam center, r_{pk} are radius of input beam on the transverse coordinates and $A_0(t)$ is a temporal dependence of input laser pulses. In the boundary conditions, R_0 is the reflection coefficient of the mirror, R_{ak} are the radius of the hole along the transverse coordinates, x_{mk} are coordinates of the hole center, R_{mk} characterize curvature of the mirror.

At the initial time moment the amplitudes of laser pulses are equal to zero $A^\pm(0, z, x_1, x_2) = 0, (z, x_1, x_2) \in D$. Boundary conditions along transverse coordinates are equal to zero.

We develop a conservative finite difference scheme, solution of which satisfies discrete invariants.

The given mathematical model depends on three space coordinates (z, x_1, x_2) thus the computational complexity is really large. We've proposed a parallel version of the numerical algorithm and implemented it by using ParSol tool of parallel numerical objects. The parallelization of algorithm is done by using one-dimensional domain decomposition algorithm, decomposing the grid only in z direction. Such a strategy enables us to use a sequential version of the fast Fourier transform algorithm for solution of the 2D linear systems with respect to (x_1, x_2) coordinates. The parallel code was tested on the Vilkas cluster of PCs at Vilnius Gediminas Technical University (<http://vilkas.vgtu.lt>). The following results of computational experiments are presented in Tables 1, 2.

Table 1. Results of computational experiments on Vilkas cluster with Intel® Core™ 2 Quad Q6600 @ 2.4 GHz processors.

	1×2	2×1	1×4	2×2	4×1	2×4	4×2	8×1
$S_p(63 \times 127)$	1.54	1.56	2.54	2.55	2.58	4.57	4.57	4.60
$E_p(63 \times 127)$	0.77	0.78	0.63	0.64	0.65	0.57	0.57	0.58
$S_p(127 \times 255)$	1.88	1.89	3.02	3.04	3.05	5.44	5.48	5.50
$E_p(127 \times 255)$	0.94	0.95	0.76	0.76	0.77	0.68	0.69	0.69

Table 2. Results of computational experiments on Vilkas cluster with Intel® Core™ i7-860 @ 2.80 GHz processors.

	1×2	2×1	1×4	2×2	4×1	2×4	4×2	8×1
$S_p(63 \times 127)$	1.40	1.41	2.22	2.49	2.55	4.14	4.53	4.70
$E_p(63 \times 127)$	0.70	0.71	0.56	0.62	0.64	0.52	0.57	0.59
$S_p(127 \times 255)$	1.50	1.69	2.39	2.44	2.75	4.41	4.37	4.97
$E_p(127 \times 255)$	0.75	0.85	0.60	0.64	0.69	0.55	0.59	0.62

The results of computational experiments show that the best configuration for fixed number of processes is one process per node. We can also notice that the bigger size of problem we have the better efficiency of parallel algorithm we get.

Modeling results are obtained for two-dimensional and three-dimensional cases of our problem. Our target is to investigate the power of laser beam which

has passed through the hole: $P_{out} = \int_0^{L_{x2}} \int_0^{L_{x1}} |A_{out}|^2 dx_1 dx_2$.

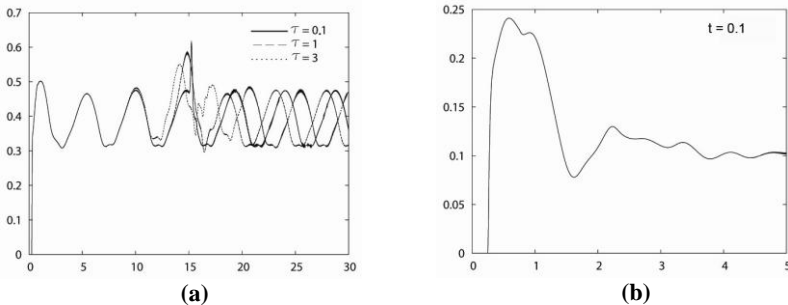


Fig. 4. The power of the beam passed through the hole with a) $\tau_s = 0.1, 1, 3$ for two-dimensional case, b) $\tau_s = 0.1$ for three-dimensional case.

In two-dimensional case we wanted to compare our results with the ones published in Nikitenko, Trofimov (1999) article. From Fig. 4a we see that our obtained results are different, i. e. we don't see effects described in the above mentioned article. The shape of the power curve in the three-dimensional case (Fig. 4b) is similar to the shape obtained in the two-dimensional case.

General conclusions

1. In the travelling wave model the shape of generated pulses depends on the parameters of initial conditions and the external signal. The proposed finite-difference scheme is second-order accurate.

2. The new parallel algorithm for simulation of the dynamics of high-power semi-conductor lasers is presented. The codes of algorithm implement second order accurate in space and time finite-difference scheme.

3. For the Schrödinger equation with different boundary conditions it is proved that the discrete solution satisfies conservation laws for the mass and the energy if such integrals are conserved for the differential problem.

4. The results of computational experiments show that the reflective boundary conditions can be applied only if artificial boundary conditions are formulated for a sufficiently large domain and therefore they cannot be used for many real world applications. The absorbing boundary conditions are efficient if the solution consists of only few simple waves. In general they are more efficient than the reflective boundary conditions. A similar effect is achieved by using the artificial layer at the boundaries of the domain with a potential $i\alpha(x)$ (we get a sink term). It was found out that the best is to approximate nonlocal in time transparent boundary conditions by using the rational local approximations.

5. The conservative discrete scheme is applied for the solution of three-dimensional problem describing nonlinear interaction of two counter-propagating laser waves. The finite difference scheme is linearized in such way that iterative scheme also satisfies the discrete invariants.

6. Computational experiments for the two-dimensional problem described in Nikitenko, Trofimov (1999) article let us specify results about the existence of the switching effect.

List of published works on the topic of the dissertation

In the reviewed scientific periodical publications

Laukaitytė, I.; Čiegis, R. 2008. Numerical algorithms for simulation of the Q-switched fiber laser using travelling wave model *Mathematical Modelling and Analysis* 13(2): 211–222. ISSN 1392-6292 (Thomson ISI Web of Science)

Čiegis, R.; Dement'ev, A.; Laukaitytė, I. 2008. Finite-Difference Scheme for One Problem of Nonlinear Optics, *Lithuanian Mathematical Journal* 48(3): 270–281. ISSN 0363-1672 (Thomson ISI Web of Science)

Čiegis, R.; Laukaitytė, I.; Radziunas, M. 2009. Numerical algorithms for Schrödinger equation with artificial boundary conditions, *Numerical Functional Analysis and Optimization* 30(9): 903–923. ISSN 0163-0563 (Thomson ISI Web of Science)

Dementev, A.; Čiegis, R.; Laukaitytė, I.; Slavinskis, N. 2010. Numerical Analysis of Laser Diode Longitudinally Pumped Solid-State Laser Generation Dynamics Using Traveling Wave Model, *Mathematical Modelling and Analysis* 15(1): 1392–6292. ISSN 1392-6292 (Thomson ISI Web of Science)

In the other editions

Laukaitytė, I.; Čiegis, R.; Lichtner, M.; Radziunas, M. 2008. Parallel numerical algorithm for the traveling wave model, *Parallel scientific computing and optimization: advances and application* 27: 237–253. ISBN 9780387097060 (Conference Proceedings Citation Index (Web of Science))

Jakušev, A.; Čiegis, R.; Laukaitytė, I.; Trofimov, V. 2008. Effective Parallelization of Linear Algebra Algorithms Using ParSol Library of Mathematical Objects, *Parallel scientific computing and optimization: advances and application* 27: 25–36. ISBN 9780387097060 (Conference Proceedings Citation Index (Web of Science))

Čiegis, R.; Laukaitytė, I. 2007. Aktyvios kokybės moduliacijos lazerių modeliavimas naudojant bėgančių bangų modelį, *10-osios jaunųjų mokslininkų konferencijos „Mokslas - Lietuvos ateitis medžiaga“*, Matematika ir informatika, Technika, p. 145–153.

About the author

Inga Laukaitytė was born in Vilnius on 9 of December 1980.

First degree in Statistics, Faculty of Mathematics and Informatics, Vilnius University, 2003. Master of Science in Statistics, Faculty of Mathematics and Informatics, Vilnius University, 2005. In 2006–2010 – PhD student of Vilnius Gediminas technical university.

In 2005–2009, was working as an assistant of mathematics at Vilnius Gediminas technical university and in 2009–2010 as a lecturer of mathematics at the same university.

LAZERIŲ FIZIKOS IR NETIESINĖS OPTIKOS UŽDAVINIŲ SKAITINIŲ SPRENDIMO METODŲ SUDARYMAS IR ANALIZĖ

Problemos formulavimas. Matematiniai modeliai, aprašantys aktyvios ir pasyvios kokybės moduliacijos lazerių, kurie leidžia išgauti trumpus intensyvius šviesos impulsus, generaciją, priklauso pusiau netiesinių modelių klasei, kai tik šaltinio narys netiesiškai priklauso nuo sprendinio. Skaitiniai

metodai pusiau netiesinių diferencialinių lygčių su dalinėmis išvestinėmis sistemų sprendimui plačiai išstudijuoti daugelyje straipsnių. Netiesinėje optikoje atsiranda Šrėdingerio tipo lygtys, parabolinio tipo lygtys ar bendri difuzijos-reakcijos modeliai. Tokie diferencialiniai uždaviniai dažniausiai sprendžiami baigtinių skirtumų ir Galiorkino metodais.

Vienmačio uždavinio diskrečių schemų konstravimas ir teorinė analizė sudaro pagrindą bendresnių, dvimačių ir trimačių uždavinių, kai atsižvelgiama į difrakcijos procesą, skaitiniam sprendimui. Dvimatis uždavinys modeliuoja puslaidininkų lazerių su besiplečiančiu pluoštu aktyvioje terpėje generaciją. Uždavinių, modeliuojančių labai trumpų optinių impulsų sklidimą netiesinėje dispersinėje terpėje, sprendimui naudojamas baigtinių skirtumų laiko srities metodas (ang. *Finite-difference time-domain method*). Tačiau šio metodo silpnoji vieta yra ta, kad skaičiavimo sritis turi būti pakankamai didelė. Tam, kad ją sumažinti ir spręsti uždavinį tik dominančioje srityje įvedamos specialios dirbtinės kraštinės sąlygos.

Trimačiame uždavinyje modeliuojama dviejų priešingomis kryptimis sklindančių šviesos pluoštų sąveika, kai vienas iš jų netiesiškai atsispindi nuo ekrano su skylė centre. Šiame uždavinyje nagrinėjame Kero netiesiškumą (ang. *Kerr nonlinearity*). Netiesiniam Šrėdingerio uždaviniui taikome konservatyviąją diskrečiąją schemą.

Modeliuodami realius uždavinius susiduriame su didelės apimties (kompiuterinių ir laiko resursų atžvilgiu) skaičiavimais, todėl naudojame lygiagrečiuosius algoritmus.

Disertacijoje aukščiau minėtų lazerinių prietaisų generacijos dinamikos modeliavimui pritaikyti skaitiniai algoritmai, pateikta algoritmų konvergavimo ir stabilumo analizė. Skaitiniams eksperimentams sukurti lygiagretieji algoritmai, ištirta jų sudėtingumo ir išplečiamumo analizė.

Darbo aktualumas. Matematinis modeliavimas šiais laikais yra naudojamas įvairiose mokslo srityse, tokiose kaip gamtos mokslai (pvz., fizika, biologija, meteorologija), inžinerija, socialiniai mokslai (pvz., ekonomika, sociologija, politologija), informatika. Matematinio modelio pagalba galime lengvai ir paprastomis priemonėmis keisti modeliuojamo proceso ar prietaiso parametrus, stebėti modeliuojamo objekto reakcijas į įvairius poveikius. Realiomis sąlygomis tai daryti yra žymiai sudėtingiau ir brangiau.

Šiame darbe yra modeliuojami realūs uždaviniai, išskylantys netiesinėje optikoje. Tokie matematiniai modeliai užrašomi diferencialinėmis lygtimis dalinėmis išvestinėmis.

Netiesinių diferencialinių lygčių dalinėmis išvestinėmis sistemos, aprašančios darbe nagrinėjamus netiesinės optikos uždavinius, aproksimuotos baigtinių skirtumų schemomis ir pateikta jų teorinė analizė. Šrėdingerio tipo

lygtims, kurios sprendžiamos begalinėse arba labai didelėse erdvinėse srityse, įvestos specialios kraštinės sąlygos, susiaurinančios skaičiavimų sritį. Šios sąlygos leidžia mums tiksliai imituoti sprendinio asimptotinę elgesį ir nesukelia skaitinių atspindžių kraštuose.

Matematinų modelių skaitiniams eksperimentams atlikti sukurti efektyvūs skaitiniai algoritmai. Kadangi uždavinių skaičiavimai yra didelės apimties, tad skaičiavimams naudojami lygiagretieji algoritmai. Atlikta pasiūlytų lygiagrečiųjų algoritmų sudėtingumo ir išplečiamumo analizė.

Tyrimų objektas. Disertacijoje nagrinėjamos lygtimis modeliuojama lazerių, kurie šiais laikais naudojami įvairiose gyvenimo srityse, generavimo dinamika. Tai aktyvios ir pasyvios kokybės moduliacijos kietakūniai minilazeriai, generuojantys trumpus intensyvius šviesos impulsus, kurie plačiai naudojami šiuolaikinėse technologijose. Puslaidininkiai lazeriai, kurie yra kompaktiški prietaisai, naudojami technologiniuose procesuose ir įrenginiuose, tokiuose kaip spausdinimas, laisvos erdvės komunikacijos ar kietojo kūno lazerių kaupinimo sistemos. Čia taip pat svarbu paminėti optinius perjungėjus su trumpa (piko- ir femtosekundžių) reakcija ir mažomis energijos sąnaudomis, naudojamus optinių procesorių su trimate optine atmintimi kūrimui.

Darbo tikslas. Šio darbo tikslas – kai kurių lazerių fizikos ir netiesinės optikos uždavinių skaitinių sprendimo metodų sudarymas ir analizė, lygiagrečiųjų algoritmų pritaikymas šviesolaidinių ir kietakūnių lazerių bei puslaidininkių lazerių generavimo dinamikos modeliavimui.

Darbo uždaviniai. Darbo tikslui pasiekti darbe reikia išspręsti šiuos uždavinius:

1. Sukurti ir pagrįsti skaitinį algoritmą, skirtą moduliuotos kokybės šviesolaidinių ir kietakūnių minilazerių generacijos dinamikos modeliavimui.
2. Sudaryti skaitinį algoritmą puslaidininkių lazerių su Brego gardelėmis ir besiplečiančiu pluoštu stiprinimo terpėje generacijos modeliavimui, skaitiniams eksperimentams pritaikyti lygiagrečiuosius algoritmus.
3. Atlikti trimačio uždavinio, skirto priešingomis kryptimis bėgančių bangų netiesinės sąveikos modeliavimui, skaitinę analizę, skaitiniams eksperimentams sukurti lygiagrečiuosius algoritmus.

Tyrimų metodika. Darbe tyrimui taikomi skaitiniai metodai ir jų stabilumo bei konvergavimo analizė, paslinktieji tinklai, leidžiantys linearizuoti netiesinę baigtinių skirtumų schemą, pralaidžios kraštinės sąlygos, kurios naudojamos didelės skaičiavimo srities sumažinimui, lygiagretieji algoritmai, jų sudėtingumo ir išplečiamumo analizė.

Darbo mokslinis naujumas. Šioje disertacijoje skaitiniais metodais buvo sprendžiami šiuo metu aktualūs lazerių fizikos ir netiesinės optikos uždaviniai. Šių uždavinių skaitiniam sprendimui pasiūlytos baigtinių skirtumų schemos paslinktuose tinkluose, ištirtas jų stabilumas ir konvergavimas.

Netiesiniam Šrėdingerio uždaviniui pritaikytos pralaidžios kraštinės sąlygos, kurios duoda pakankamai tikslų pilnos erdvės uždavinio sprendinį.

Modeliuojamiems uždaviniams sukurti lygiagretieji algoritmai, leidžiantys išspręsti tikslesnius didesnės apimties matematinius modelius ir tai padaryti žymiai greičiau. Algoritmų lygiagretinimui naudojama srities skaidymo paradigma.

Darbo rezultatų praktinė reikšmė. Tyrimų rezultatai buvo panaudoti tarptautiniuose EUREKA projektuose E!3691 OPTCABLES ir E!3483 EULASNET LASC, taip pat Lietuvos Aukštųjų technologijų projekte GRIDGLOBOPT.

Ginamieji teiginiai

1. Moduluotos kokybės šviesolaidinių ir kietakūnių minilazerių generacijos dinamikos modeliavimui gali būti pasiūlyta antros eilės tikslumo baigtinių skirtumų schema.

2. Puslaidininkų lazerių su Brego gardelėmis ir besiplečiančiu stiprintuvu generacijos modeliavimui gali būti pritaikytos specialios dirbtinės kraštinės sąlygos, kurios leidžia pakankamai tiksliai imituoti sprendinio asimptotinių elgesį ir nesukelia skaitinių atspindžių kraštuose.

3. Trimačiam uždaviniui, modeliuojančiam priešingomis kryptimis bėgančių bangų netiesinę sąveiką, gali būti pateikta konservatyvi baigtinių skirtumų schema, kurios sprendinys tenkina du diskrečius invariantus.

4. Sukurtus lygiagrečiuosius algoritmus galima naudoti dvimačių ir trimačių netiesinės optikos uždavinių efektyviam sprendimui.

Darbo rezultatų aprobavimas. Su disertacijos tema susiję rezultatai paskelbti 8 straipsniuose: keturi – Thomson ISI Web of Sciences, trys – konferencijos medžiagoje ISI Proceedings bei vienas – respublikinės konferencijos medžiagoje. Disertacijos tema perskaityti 12 pranešimų Lietuvos bei kitų šalių konferencijose. Disertacija pristatyta Vilniaus Gedimino technikos universiteto ir Vilniaus universiteto seminaruose.

Disertacijos struktūra. Disertaciją sudaro įvadas, 4 skyriai, išvados, literatūros sąrašas ir autorės publikacijų disertacijos tema sąrašas. Bendra disertacijos apimtis – 87 puslapiai, 17 paveikslų, 4 lentelės. Darbe cituojami 86 literatūros šaltiniai.

Pirmasis skyrius skirtas mokslinės literatūros analizei ir netiesinės optikos sąvokų bei sprendžiamų lygčių aptarimui. Antrajame skyriuje nagrinėjamas matematinis modelis, aprašantis aktyvios kokybės moduliacijos lazerio generacijos dinamiką. Pateikta baigtinių skirtumų schema, ištirtas skaitinio algoritmo konvergavimas ir sudėtingumas. Pabaigoje aprašyti skaitinių eksperimentų rezultatai. Trečiajame skyriuje nagrinėjamas matematinis modelis, aprašantis daugiasekcinį plačiajuosčius puslaidininkius lazerius. Uždavinys sprendžiamas paslinktajame tinkle sukonstruota baigtinių skirtumų schema. Netiesinė schema linearizuojama taikant prediktoriaus-korektoriaus metodą. Sprendžiant Šrėdingerio tipo lygtis susiduriame su būtinybe spręsti uždavinį labai didelėje srityje. Tam, kad ją sumažinti įvedamos specialios pralaidžios kraštinės sąlygos. Šiame skyriuje taip pat aprašytas ir išanalizuotas algoritmo lygiagretinimas, pateikti skaitinių eksperimentų rezultatai. Ketvirtajame skyriuje skaitiškai modeliuojama dviejų priešingomis kryptimis sklindančių bangų sąveika, kai viena iš jų netiesiškai atsispindi nuo ekrano su skylė centre. Pateikta konservatyvi baigtinių skirtumų schema, kurios sprendinys tenkina du diskrečius invariantus. Skaitiniams eksperimentams sukurtas lygiagretusis algoritmas.

Bendrosios išvados

1. Vienmačiame bėgančių bangų modelyje nuo pradinių sąlygų parametru ir išorinio signalo parinkimo priklauso generuojamų impulsų pavidalas.

2. Sudarytas naujas lygiagretusis algoritmas, skirtas didelės galios puslaidininkių lazerių dinamikos simuliacijai. Algoritmo programa realizuoja antros eilės tikslumo baigtinių skirtumų schemas erdvėje ir laike.

3. Vienmatės Šrėdingerio lygties atveju įrodėme, kad naudojant atspindinčias ir sugeriančias kraštines sąlygas diskretus sprendinys tenkina masės ir energijos tvermės dėsnius, jeigu atitinkami integralai yra išsaugomi diferencialiniam uždaviniui.

4. Skaitinių eksperimentų rezultatai rodo, kad atspindinčios kraštinės sąlygos gali būti naudojamos tik tada, jeigu dirbtinės kraštinės sąlygos yra konstruojamos pakankamai didelei sričiai. Taigi jos negali būti naudojamos realiuose uždaviniuose. Sugeriančios kraštinės sąlygos yra efektyvios, jeigu sprendinį sudaro tik kelios paprastos bangos. Bendru atveju, jos gali būti efektyvesnės nei atspindinčios kraštinės sąlygos. Panašus rezultatas yra gautas srities kraštuose naudojant dirbtinį sluoksnį su potencialu $i\alpha(x)$ (gauname sugėrimo narį). Nustatyta, kad nelokalias laike pralaidžias kraštines sąlygas geriausia aproksimuoti naudojant racionalias lokalias aproksimacijas.

5. Pateikta konservatyvi diskrečioji schema, skirta trimačio, lazerio pluoštų sąveiką netiesinėje Kero terpėje modeliuojančio, uždavinio sprendimui.

Baigtinių skirtumų schema linearizuota tokiu būdu, kad iteracinei schemai taip pat galioja diskretūs invariantai.

6. Atlikti skaičiavimai patikslina dvimačio uždavinio rezultatus apie perjungimo efekto egzistavimą, aprašytus Nikitenko, Trofimov (1999) straipsnyje.

Trumpos žinios apie autorę

Inga Laukaitytė gimė 1980 m. gruodžio mėn. 9 d. Vilniuje.

1999–2003 m. studijavo Vilniaus universiteto Matematikos ir informatikos fakultete ir įgijo statistikos bakalauro laipsnį. 2005 m. įgijo statistikos magistro laipsnį tame pačiame fakultete. 2006–2010 m. studijavo matematikos krypties doktorantūroje Vilniaus Gedimino technikos universiteto Matematinio modeliavimo katedroje. 2005–2009 m. dirbo asistente, o nuo 2009 – lektore Vilniaus Gedimino technikos universiteto Matematinio modeliavimo katedroje.

Inga LAUKAITYTĖ

CONSTRUCTION AND ANALYSIS OF NUMERICAL METHODS FOR
SOLUTION OF LASER PHYSICS AND NONLINEAR OPTICS PROBLEMS

Summary of Doctoral Dissertation
Physical Sciences, Mathematic (01P)

Inga LAUKAITYTĖ

LAZERIŲ FIZIKOS IR NETIESINĖS OPTIKOS UŽDAVINIŲ SKAITINIŲ
SPRENDIMO METODŲ SUDARYMAS IR ANALIZĖ

Daktaro disertacijos santrauka
Fiziniai mokslai, matematika (01P)

2010 04 27. 1,5 sp. l. Tiražas 70 egz.
Vilniaus Gedimino technikos universiteto
leidykla „Technika“,
Saulėtekio al. 11, 10223 Vilnius,
<http://leidykla.vgtu.lt>
Spausdino UAB „Biznio mašinų kompanija“,
J. Jasinskio g. 16A, 01112 Vilnius
<http://www.bmk.lt>