

**FRIEDRICH-ALEXANDER-UNIVERSITÄT
ERLANGEN-NÜRNBERG**
TECHNISCHE FAKULTÄT • DEPARTMENT INFORMATIK

Lehrstuhl für Informatik 10 (Systemsimulation)



Numerische Simulation der Verstärkung von Laserpulsen

Lukas Liebischer

Bachelorarbeit

Numerische Simulation der Verstärkung von Laserpulsen

Lukas Liebischer

Bachelorarbeit

Aufgabensteller: Prof. Dr. C. Pflaum

Betreuer: Prof. Dr. C. Pflaum

Bearbeitungszeitraum: 11.04.2016 – 31.07.2016

Erklärung:

Ich versichere, dass ich die Arbeit ohne fremde Hilfe und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen angefertigt habe und dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegen hat und von dieser als Teil einer Prüfungsleistung angenommen wurde. Alle Ausführungen, die wörtlich oder sinngemäß übernommen wurden, sind als solche gekennzeichnet.

Der Universität Erlangen-Nürnberg, vertreten durch den Lehrstuhl für Systemsimulation (Informatik 10), wird für Zwecke der Forschung und Lehre ein einfaches, kostenloses, zeitlich und örtlich unbeschränktes Nutzungsrecht an den Arbeitsergebnissen der Bachelorarbeit einschließlich etwaiger Schutzrechte und Urheberrechte eingeräumt.

Erlangen, den 27. Juni 2016

.....

1 Kurzfassung

Die Verstärkung eines Laserpulses mithilfe eines Festkörperverstärkers verändert das eingehende Signal. Die nicht-lineare Veränderung des Eingangssignal wird im Folgenden anhand verschiedener Formen des Eingangspulses untersucht. Hierzu werden die von [Frantz und Nodvik, 1963] hergeleiteten gekoppelten partiellen Differential Gleichungen (PDGs) im eindimensionalen Raum verwendet. Zu diesen PDGs werden die analytischen Lösungen der unterschiedlichen Eingangssignale (Rechtecks-, Lorentz- und Sägezahnimpuls) berechnet, welche leicht vergleichbar mit den hergeleiteten Approximationen sind (Die von Frantz und Nodvik berechnete Lösung für den Lorentzimpuls ist falsch, wird jedoch richtig in dieser Bachelorarbeit berechnet).

Anschließend werden die PDGs und das dazugehörige Gebiet auf mehrere Arten diskretisiert und unterschiedliche Simulationsdurchgänge durchlaufen. Dabei werden jeweils mehrere Ergebnisse miteinander verglichen. Hierzu gehören das Konvergenzverhalten, der globale Fehler, die Konsistenzordnung der finiten Differenzenquotienten und die physikalische Erwartung an das Verhalten der Amplifikation. Nur die *Version 2* der Diskretisierung der Photonendichte erfüllt die Erwartungen bzw. erreicht ein ausreichendes, einfaches Konvergenzverhalten. Weiterhin stellt sich heraus, dass ebenfalls die *Version 2* der Diskretisierung der Populationsinversen das beste Ergebnis mit dem niedrigsten globalen Fehler liefert. Somit liefert die Kombination der beiden *Versionen 2* der Diskretisierungen die besten Resultate.

Außerdem wird auf die Implementierung der verwendeten Simulationssoftware und die verwendeten Algorithmen, sowie Datenstrukturen eingegangen.

Inhaltsverzeichnis

1	Kurzfassung	4
2	Einführung	6
3	Analytische Lösung	6
3.1	Einfache analytische Lösungen	8
3.1.1	Rechteckspuls	8
3.1.2	Lorentzpuls	9
3.1.3	Sägezahnspuls	9
4	Diskretisierung	11
4.1	Diskretisierung Photonendichte - Version 1	11
4.2	Diskretisierung Photonendichte - Version 2	12
4.3	Diskretisierung Populationsdifferenz	14
5	Implementation	15
6	Untersuchung der unterschiedlichen Diskretisierungen	19
6.1	Untersuchung Photonendichte - Version 1	20
6.2	Untersuchung Populationsdifferenz	21
6.3	Untersuchung Photonendichte - Version 2	21
6.3.1	Rechteckspuls	21
6.3.2	Lorentzpuls	22
6.3.3	Sägezahnspuls	26
	Abbildungsverzeichnis	28
	Tabellenverzeichnis	28
	Quellenverzeichnis	28

2 Einführung

Ziel dieser Bachelorarbeit ist die Modellierung und Simulation der Verstärkung von ultrakurzen Laserpulsen in Festkörperverstärkern. Solche energiereichen Ultrakurzpulslaser werden z.B. zur Zeit in der Medizin zum Abtragen von Knochengewebe [Ashforth u. a., 2015] oder als neuartige Möglichkeit im "Micromachining" [Nolte u. a., 2016, 155] genauer erforscht. Gerade die Kombination mit einem herkömmlichen Resonator bietet die Vorteile, dass man entweder eine größere Endenergie erreicht, als mit einem Resonator alleine, oder, dass die gleiche Energie mit einer kleineren Divergenz des Strahls erreicht wird [Koechner, 2006]. Eine Anforderung dabei ist es ihre Leistung zu steigern und dabei die Veränderung der Form des ausgehenden Pulses zu kennen. Um das zu erreichen gibt es verschiedene Ansatzpunkte. Laut [Koechner, 2006, 150] kann eine Laserverstärkung durch ein optisch-aktives Material dazu beitragen Laserquellen mit hoher Energie und Helligkeit zu entwerfen. Dabei kommen Stangen (rods), oder Scheiben (discs) auf Kristallbasis wie Nd:YAG, Nd:YVO oder Titan:Saphier zur Verwendung, um die Leistung und Energie eines Laserpulses zu erhöhen. Der Laserstrahl kann mehrfach (multi-pass) oder nur einmal (single-pass) [Koechner, 2006, 157] durch das Medium geschickt werden. Wobei ersteres erheblich schwerer umzusetzen ist. Wie man sieht tragen u.a. diese Faktoren und noch mehr zur Verstärkung in einem Festkörperverstärker bei. Besonders die nicht lineare Ausbreitung des Laserstrahls und die anschließende Interaktion setzen ein tiefes Verständnis des Verhaltens des Pulses voraus [Nolte u. a., 2016, V]. Um diese nun zu erhalten muss eine ausreichend genaue Simulation erreicht werden, ohne dabei komplexe Rechenvorschriften zu verwenden. Im folgenden werden wir eine eindimensionale single-pass Stange auf Rubinbasis verwenden, um unterschiedliche Formen des Eingangssignals zu untersuchen. Dabei werden die Fragen geklärt, wie gut die gewählten Diskretisierungen die exakte Lösung approximieren, welches Konvergenzverhalten diese haben und wie sich der Eingangspuls nach der Amplifikation verändert. Die zugrunde liegende Theorie stammt von [Frantz und Nodvik, 1963].

3 Analytische Lösung

Die Verstärkung des Laserpulses wird mit nicht-linearen, zeitabhängigen Strahlungs-Transportgleichungen beschrieben. Hierzu wird im Folgenden auf die *Frantz und Nodvik Theorie* zurückgegriffen. Herrscht eine inverse Populationsdichte (auch: Besetzungsinversion oder Populationsdifferenz) im Verstärkermedium, so erfährt die das Medium durchlaufende Strahlung eine Verstärkung. Die Wachstumsrate ist zunächst bei einer infinitesimalen Pulsweite durch eine Exponentialfunktion gegeben. Hat jedoch der Puls eine merkliche Dauer, dann ändert die Front des Pulses die Populationsdichte im Kristall. Somit erfährt sein Ende eine niedrigere Population im Medium und damit eine schwächere Amplifikation. Es wird zunächst nur der eindimensionale Fall im Ort mit einem monochromatischen Lichtstrahl beschrieben. Die gegeben gekoppelten partiellen Differentialgleichungen (PDGs) auf dem Gebiet $x \in \Omega = (0, L)$ aus der Frantz-Nodvik Theorie lauten:

$$\frac{\partial \Delta}{\partial t} = -2\sigma n \Delta \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + c \frac{\partial n}{\partial x} = \sigma c n \Delta \quad (2)$$

Dabei ist σ der Wirkungsquerschnitt der induzierten Emission, c die Lichtgeschwindigkeit im jeweiligen Medium und $n(x, t)$ die Photonendichte im Gebiet Ω . Die Populationsdifferenz $\Delta(x, t)$ im Gebiet Ω erhält man aus der Subtraktion der Nummernichte der Atome im angeregten Zustand von denen im Grundzustand. Gibt es mehr angeregte Atome und somit eine positive Populationsdifferenz, dann handelt es sich um ein verstärkendes Medium. Die Einheiten der einzelnen Bestandteile der beiden Gleichungen findet man in Tabelle 1.

Als Anfangsbedingungen, bevor der Laserpuls auf das Medium trifft, legen wir für die Populationsdifferenz

$$\Delta(x, -\infty) = \Delta_0(x), \quad 0 \leq x \leq L \quad (3)$$

und als Randbedingung des Gebiets für die Eingangsphtonendichte am linken Rand des Kristalls bei $x = 0$

$$n(0, t) = n_0(t), \quad t \geq 0 \quad (4)$$

fest (siehe Abbildung 1).

Bestandteil	Einheit
$n(x, t)$	m^{-3}
$\Delta(x, t)$	m^{-3}
σ	m^2
c	$\frac{m}{s}$

Tabelle 1: Übersicht Einheiten der Bestandteile von Gleichungen (1) und (2). $n(x, t)$ steht dabei für die Photonendichte am Ort x zum Zeitpunkt t , $\Delta(x, t)$ für die entsprechende Populationsdifferenz, σ für den Wirkungsquerschnitt der induzierten Emission und c für die Lichtgeschwindigkeit im Verstärkermedium.

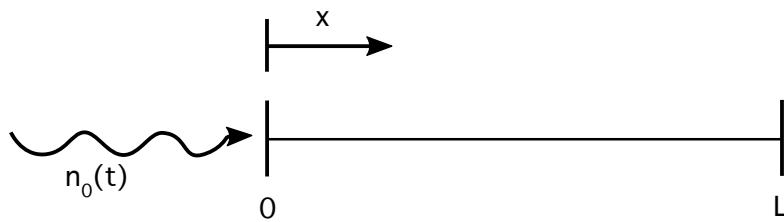


Abbildung 1: Die schematische Darstellung des eindimensionalen Kristalls der Länge L . Am linken Ende $x = 0$ trifft der Eingangspuls mit der Stärke $n_0(t)$ auf das Gebiet und wird im Folgenden verstärkt. Der Puls tritt an der Stelle $x = L$ verstärkt aus dem Kristall aus.

Die Theorie von Frantz und Nodvik stellt uns ebenfalls analytische Lösungen für $\Delta(x, t)$ und $n(x, t)$ mit beliebigen $n_0(t)$ und $\Delta_0(x)$ zur Verfügung. Sie lauten:

$$n(x, t) = \frac{n_0(t - \frac{x}{c})}{1 - \left[1 - e^{-\sigma \int_0^x \Delta_0(x') dx'} \right] e^{-2\sigma c \int_{-\infty}^{t-x/c} n_0(t') dt'}} \quad (5)$$

$$\Delta(x, t) = \frac{\Delta_0(x) e^{-\sigma \int_0^x \Delta_0(x') dx'}}{e^{2\sigma c \int_{-\infty}^{t-x/c} n_0(t') dt'} + e^{-\sigma \int_0^x \Delta_0(x') dx'} - 1} \quad (6)$$

Wenn man den Zähler von (5) genauer untersucht, erkennt man die für Transportgleichungen typische Eigenschaft, dass die initialen Eingangspotonen $n_0(t)$ mit der Geschwindigkeit c durch den Kristall transportiert werden [LeVeque, 2007, 313] und durch den Vorfaktor im Nenner des Bruchs verstärkt am Ort $x = L$ zur Zeit $t + L/c$ den Kristall wieder verlassen. Voraussetzung hierfür ist einerseits, dass die Geschwindigkeit positiv ist $c \geq 0$ und somit die Photonen den Kristall in positiver x-Richtung durchlaufen. Andererseits muss erfüllt sein, dass die Populationsdifferenz zu Beginn im ganzen Kristall positiv ist $\Delta_0(x) \geq 0, \forall x \in \Omega$. Wäre sie negativ, dann würden die Lösungen ein absorbierendes und nicht verstärkendes Medium beschreiben.

3.1 Einfache analytische Lösungen

3.1.1 Rechteckspuls

Zur Untersuchung verschiedener Pulsformen kann zunächst der mathematisch einfachste Fall, ein Rechteckspuls, herangezogen werden [Frantz und Nodvik, 1963]. Für die analytische Lösung wird zur Vereinfachung angenommen, dass die initiale Populationsdifferenz zum Zeitpunkt $t = 0$ konstant ist

$$\Delta(x, 0) = \Delta_0(x) = \Delta_0 = \text{const}, \quad \forall x \in \Omega \quad (7)$$

und, dass das rechteckige Eingangssignal $n_0(t)$ den Betrag n_0 und die Länge τ hat:

$$n_0(t) = \begin{cases} n_0, & 0 \leq t \leq \tau \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (8)$$

Setzt man nun (7) und (8) in (5) ein und integriert über das Gebiet bzw. die Zeit, dann ergibt sich die diskrete analytische Lösung für die Photonen-Dichte wie folgt:

$$n(x, t) = \begin{cases} \frac{n_0}{1 - [1 - \exp\{-\sigma \Delta_0 x\} \exp\{-2\sigma n_0 c \tau (t - x/c)\}]}, & 0 \leq t - \frac{x}{c} \leq \tau \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (9)$$

Um nun den verstärkten Ausgangspuls zu errechnen, muss man die Gleichung (9) am Ort $x = L$ und zur Zeit $t = t + L/c$ auswerten. Somit ergibt sich die Ausgangsphotondichte zur Zeit t zu:

$$n_L(t) = n(L, t + \frac{L}{c}) = \frac{n_0}{1 - [1 - \exp\{-\sigma \Delta_0 L\} \exp\{-2\sigma n_0 c \tau t\}]}, \quad 0 \leq t \leq \tau \quad (10)$$

Die verstärkte Photonendichte des Pulsendes zum Zeitpunkt $t = \tau$ am Ausgang lautet dann $n_L(\tau) = n(L, \tau + \frac{L}{c})$. Der Grund für die Verschiebung der Variable t um L/c ergibt sich aus der zusätzlich benötigten Zeit des Laserpulses, um das Medium zu durchqueren. Diese Anpassung verknüpft den Input auf der linken Seite des Mediums zur Zeit t_{in} nun mit dem Output auf der rechten Seite zur Zeit $t_{out} = t_{in} + L/c$. Sie ermöglicht also unabhängig der örtlichen Lage des Ein- und Ausgangs des Pulses den Vergleich Beider.

Für eine erste Abschätzung der Verstärkung eines Rechteckpulses, kann man sich das Verhalten der Gleichung bei einem infinitesimal kurzen Puls betrachten. Dies würde im physikalischen Sinne dem "ersten Photon" des Pulses entsprechen. Wenn $\lim_{t \rightarrow 0} n_L(t) \Leftrightarrow \lim_{t \rightarrow 0} e^{-2\sigma n_0 c \tau t} \rightarrow 1 \Rightarrow n_L = n_0 e^{\sigma \Delta_0 L}$. Man erkennt, dass der Ursprungspuls exponentiell verstärkt wird. Somit muss zum Zeitpunkt $t = 0$ für den Output das erste Eingangsphton $e^{\sigma \Delta_0 L}$ -mal verstärkt aus dem Medium austreten.

3.1.2 Lorentzpuls

Eine weitere in der Frantz und Nodvik Theorie angesprochene Form des Eingangspulses ist der Lorentzpuls. Die initiale Populationsdifferenz ist wie zuvor bei (7) über das ganze Gebiet konstant. Die Eingangsphotonendichte mit der Halbweite T

$$n_0(t) = \frac{n_0 \tau T}{\pi} \frac{1}{t^2 + T^2} \quad (11)$$

hat nun die Form einer Lorentzkurve. Wie man in Abbildung 2 erkennen kann, liegt das Maximum der Kurve bei $max = n_0(t = 0)$ und hängt außerdem von T ab. Die in [Frantz und Nodvik, 1963] angegebene analytische Lösung der Ausgangsphotonendichte eines Lorentzpulses ist *falsch*. Nach einsetzen von (7) und (11) in (5) erhält man die *richtige* Lösung

$$n_L(t) = n(L, t + \frac{L}{c}) = \frac{n_0 \tau T}{\pi} \frac{1}{t^2 + T^2} \left[1 - (1 - e^{-\sigma \Delta_0 L}) \exp \times \left\{ -2\sigma c \left(\frac{1}{\pi} n_0 \tau \tan^{-1} \left(\frac{t}{T} \right) + \frac{1}{2} n_0 \tau \right) \right\} \right]^{-1} \quad (12)$$

der Ausgangsphotonendichte am Ort $x = L$.

Für die spätere Simulation ist es noch sinnvoll auf den Unterschied zwischen dem Maximalwert des Eingangspulses max und dem physikalischen Parameter n_0 hinzuweisen, um eine mögliche Peakleistung eines Lasers modellieren zu können. $max \neq n_0$, sondern $max = n_0 \frac{\tau}{\pi T}$. Dementsprechend muss man den Betrag von n_0 abhängig von T bestimmen, um den gewünschten Maximalwert des Eingangspulses zu erhalten. Wählt man nun wiederum die Halbweite in Abhängigkeit der Länge des Pulses $T = a\tau$, $0 < a < 1$, vereinfacht sich die Gleichung zu $max = n_0 \frac{1}{\pi a}$. Wenn man nun $a \leq 1/\pi$ wählt, dann erhält die Kurve seine typische Form, wie man in Abbildung 2 sehen kann.

3.1.3 Sägezahn puls

Ein Sägezahn puls ist ein zusätzliches, relativ simples Eingangssignal, welches von Frantz und Nodvik [1963] nicht angesprochen wird (siehe Gleichung (13)). Er eignet sich beson-

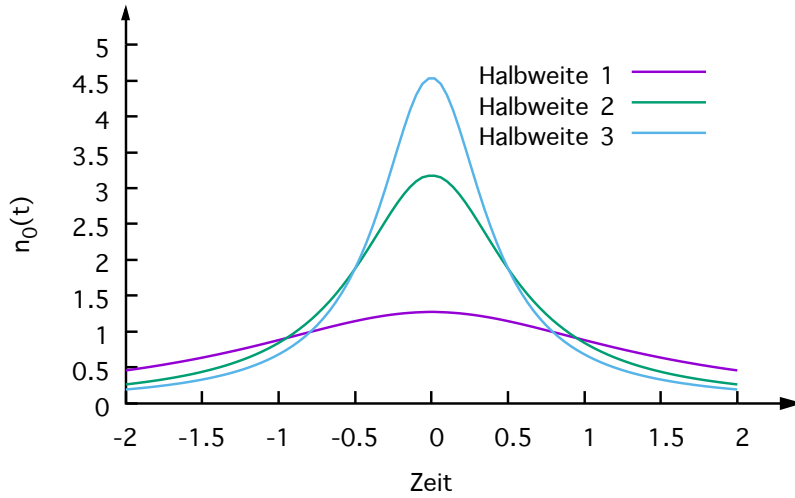


Abbildung 2: Die Form einer Lorentzkurve, wie sie für Gleichung (11) der Eingangsphtonendichte benötigt wird, hängt unter anderem von ihrer Halbweite T ab. Das Maximum max der Kurve befindet sich immer bei $t = 0$. Im positiven wie im negativen Unendlichen fällt die Kurve und geht gegen 0.

ders für eine genauere Untersuchung, da er sich leicht integrieren lässt und somit noch eine analytische Lösung zulässt.

$$n_0(t) = \begin{cases} n_0 \frac{t}{\tau}, & 0 \leq t \leq \tau \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (13)$$

Dabei steht τ für die gesamte Länge des Eingangssignals und n_0 für den maximalen Betrag bei $t = \tau$ zu dem linear interpoliert wird. Setzt man nun (13) und (7) wieder in (5) ein, dann erhält man die diskrete analytische Lösung für den Falls eines sägezahnartigen Eingangssignals:

$$n(x, t) = \begin{cases} \frac{n_0 \frac{t - \frac{x}{c}}{\tau}}{1 - [1 - \exp\{-\sigma \Delta_0 x\} \exp\{-2\sigma c n_0 \frac{(t - \frac{x}{c})^2}{2\tau}\}]}, & 0 \leq t - \frac{x}{c} \leq \tau \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (14)$$

Um nun den verstärkten Ausgangspuls auszuwerten, muss $x = L$ gesetzt werden. Damit erhält man die Gleichung

$$n_L(t) = n(L, t + \frac{L}{c}) = \frac{n_0 \frac{t}{\tau}}{1 - [1 - \exp\{-\sigma \Delta_0 L\} \exp\{-2\sigma c n_0 \frac{t^2}{2\tau}\}]}, \quad 0 \leq t \leq \tau \quad (15)$$

mit der vorhin bereits angesprochenen Verschiebung der Zeit von $t + L/c$.

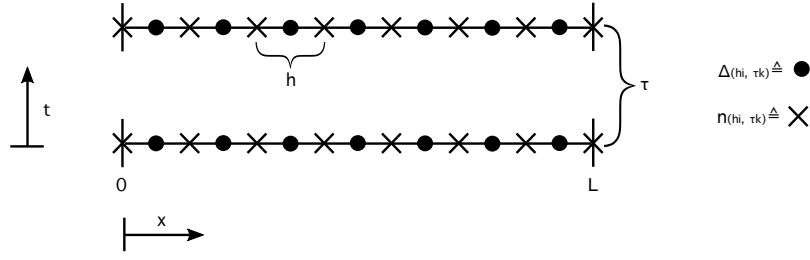


Abbildung 3: Die einzelnen Gitterpunkte liegen mit der Länge h auseinander. Die zeitliche Schrittweite beträgt τ . Die Kreise stehen für die inverse Populationsdichte, die Kreuze für die Photonendichte am jeweiligen Gitterpunkt.

4 Diskretisierung

Das zugrunde liegende, im Ort eindimensionale, Problem lässt sich mittels finiter Differenzen diskretisieren. Hierbei muss das Gebiet $\Omega = (0, L)$ in ein diskretisiertes Gebiet (Gitter) mit n_x Gitterpunkten

$$\Omega_h = \{(ih) | i = 0, \dots, n_x - 1\}, \quad \text{mit } h = \frac{L}{n_x - 1} \quad (16)$$

überführt werden, welches dabei aus Punkten mit äquidistanten Abständen aufgebaut ist. Dabei steht h für den konstanten Abstand zwischen zwei Punkten und n_x für die Anzahl der Gitterpunkte (einschließlich der Randpunkte). Weiterhin wird angenommen, dass sich die Punkte der Populationsdifferenz $\Delta(x, t)$ zwischen denen der Photonendichte befinden. Damit gibt es $n_x - 1$ diskrete Punkte für $\Delta(x, t)$ (siehe Abbildung 3). Die zeitliche Diskretisierung erfolgt über

$$t_k := \tau k, \quad k \in \mathbb{N}_0, \quad (17)$$

was der Zeit t_k zum k -ten Zeitschritt mit Zeitschrittweite τ entspricht.

4.1 Diskretisierung Photonendichte - Version 1

Die wohl einfachste Art die Gleichung (2) zu diskretisieren ist die Verwendung eines Rückwärtsdifferenzenquotient ("upwind difference") mit einfacher Schrittweite für die Approximation der Ableitung im Ort [Bronstein u. a., 2012, 989], [Hoffmann u. a., 2006, 581]:

$$\frac{\partial n}{\partial x}(x, t) \approx \frac{n_i^k - n_{i-1}^k}{h} + O(h) \quad (18)$$

Hierbei steht der Index k für den k -ten Zeitschritt und der Index i für den i -ten Gitterpunkt. Zusätzlich wird noch ein Vorwärtsdifferenzenquotient für die Ableitung in der Zeit verwendet [ebd.]:

$$\frac{\partial n}{\partial t}(x, t) \approx \frac{n_i^{k+1} - n_i^k}{\tau} + O(\tau) \quad (19)$$

Diskretisiert man jetzt die Gleichung (2) unter der Verwendung von (18) und (19), dann erhält man folgende Approximation am aktuellen Punkt i für den jeweils neuen Zeitschritt $k + 1$ für die Photonendichte

$$\frac{n_i^{k+1} - n_i^k}{\tau} + c \frac{n_i^k - n_{i-1}^k}{h} = \sigma c n_i^k \Delta_i^k \quad (20)$$

$$n_i^{k+1} = \left(1 - \frac{c\tau}{h} + \tau\sigma c \Delta_i^k\right) n_i^k + \frac{c\tau}{h} n_{i-1}^k. \quad (21)$$

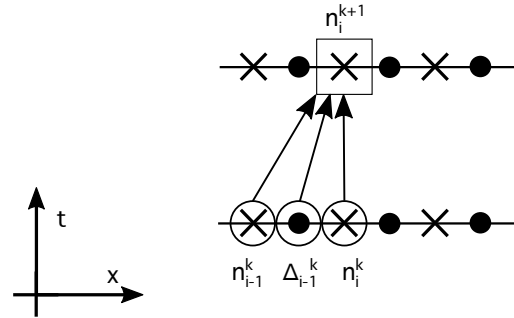


Abbildung 4: Stencil der Photonendichte gemäß der Gleichung (21). Die Photonen durchlaufen das Gebiet von links nach rechts.

Wie man in Abbildung 4 erkennen kann, benötigt man für die Berechnung der neuen Photonendichte am aktuellen Ort sowohl die Photonendichte am aktuellen Ort des alten Zeitschritts, als auch die Photonendichte des linken Nachbarpunktes des alten Zeitschritts. Wie man später in Abschnitt 5 feststellt, stellt dieser Stencil für die PDG (2) ein Problem dar. Da es sich bei der PDG um eine Transportgleichung handelt, muss die Photonendichte n_i^{k+1} nur von Photonen eines Gitterpunktes abhängen, welche innerhalb eines Zeitschritts τ die Strecke τc zurücklegen. Dies ist hier eindeutig nicht der Fall für die Werte an der Stelle i zum Zeitpunkt k . Deshalb ist eine weitere Diskretisierung des Ausgangsproblems zu suchen.

4.2 Diskretisierung Photonendichte - Version 2

Ziel hierbei ist eine Berechnungsvorschrift für n_i^{k+1} zu finden, welche auf der *Methode der Charakteristik* beruht. Dabei wird lediglich die Richtungsableitung zwischen dem alten Punkt n_{i-1}^k und dem neuen n_i^{k+1} betrachtet [LeVeque, 1992, 19] [Sarraf, 2004] (siehe Abbildungen 5 und 6, gestrichelte Linie). Die Photonen zum Zeitschritt k am Ort $i - 1$ sind beim neuen Zeitschritt $k + 1$ am Ort i . Somit muss auch nur die Photonendichte n_{i-1}^k zur Berechnung der neuen beitragen. Mittels einer einfachen Änderung des vorherigen Schemas können wir das geforderte Verhalten der Diskretisierung erreichen. Hierbei muss lediglich die rechte Seite der Gleichung (20) zu

$$\sigma c n_{i-1}^{k+1} \Delta_i^k \quad (22)$$

geändert werden. Durch diese Änderung können später bestimmte Terme gekürzt werden. Wird die neue Gleichung jetzt entsprechend umgestellt, dann erhält man zunächst folgende, ungekürzte Berechnungsvorschrift

$$n_i^{k+1} = \left(\frac{1}{\tau} - \sigma c \Delta\right)^{-1} \left(\left(-\frac{c}{h} + \frac{1}{\tau}\right) n_i^k + \frac{c}{h} n_{i-1}^k \right), \quad (23)$$

welche sich unter der Annahme,¹ dass $\tau = h/c \leftrightarrow -c/h + 1/\tau = 0$ vereinfachen lässt zu

$$n_i^{k+1} = \frac{1}{1 - \sigma h \Delta_{i-1}^k} n_{i-1}^k. \quad (24)$$

Wie man sieht, ist der nicht benötigte Term $(-\frac{c}{h} + \frac{1}{\tau})n_i^k$ aus der Gleichung gekürzt worden und die Gleichung hängt nun nur noch von n_{i-1}^k ab. Damit ist das Ziel erreicht. In Abbildung 5 erkennt man nochmal übersichtlich das eben genannte Vorgehen.

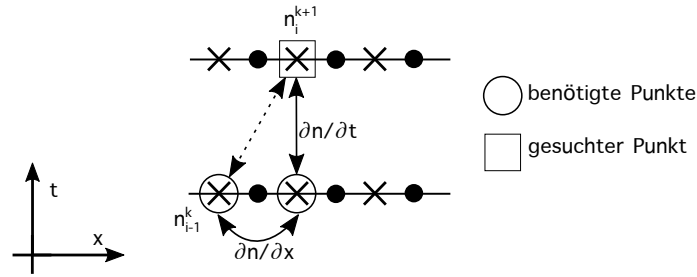


Abbildung 5: Darstellung der beiden Differenzenquotienten der Ableitungen (19) und (18). Wenn man nun die Annahme trifft, dass $\tau = h/c$, dann fällt der "Umweg" über den Punkt n_i^k heraus und übrig bleibt die direkte Verknüpfung des Punktes n_{i-1}^k und n_i^{k+1} (gestrichelte Linie).

Interessanterweise kann man das gleiche Resultat auch über einen alternativen Ansatz erhalten. Dazu diskretisiert man die zeitliche Ableitung nun mithilfe der zeitlichen Änderung der linken Nachbarpunkte $i - 1$

$$\frac{\partial n}{\partial t} \approx \frac{n_{i-1}^{k+1} - n_{i-1}^k}{\tau} + O(\tau) \quad (25)$$

und die Ableitung im Ort alternativ mithilfe des impliziten Vorwärtsdifferenzenquotientens

$$\frac{\partial n}{\partial x} \approx \frac{n_i^{k+1} - n_{i-1}^{k+1}}{h} + O(h) \quad (26)$$

¹Zwar könnte nach [LeVeque, 2007, 211] die Parameter so gewählt werden, dass $0 \leq c\tau/h \leq 1$, jedoch wird im Fortlaufenden nur die einfache Annahme getroffen, dass $c\tau/h = 1$. Von [Zhou u. a., 1998, 2] wird unsere Bedingung als *Courant-Friedrichs-Lewy Condition* $\lambda \equiv \tau c/h \leq 1$ bezeichnet. Auch sie ist erfüllt.

laut [Bronstein u. a., 2012, 989] und [Hoffmann u. a., 2006, 581].

In Abbildung 6 sieht man das Zusammenspiel der Gleichungen (25) und (26), welche das gleiche Resultat wie zuvor liefern. Wenn man nun (25) und (26) in (2) einsetzt, erhält man die Berechnungsvorschrift

$$n_i^{k+1} = \frac{1}{c/h - \sigma c \Delta_{i-1}^k} \left[\left(\frac{c}{h} - \frac{1}{\tau} \right) n_{i-1}^{k+1} + \frac{1}{\tau} n_{i-1}^k \right], \quad (27)$$

welche unter der Annahme, dass $\tau = h/c \leftrightarrow c/h - 1/\tau = 0$ wieder vereinfacht werden kann. Dies führt gleichermaßen zur vorherigen Berechnungsvorschrift (24). Der zu dazu passende Stencil ist in Abbildung 7 dargestellt.

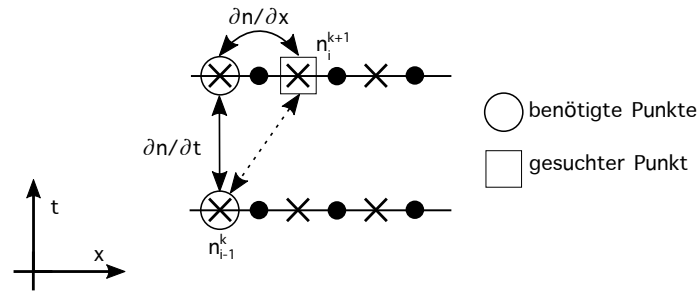


Abbildung 6: Darstellung der beiden Differenzenquotienten der Ableitungen (25) und (26). Der Rest ist analog zu Abbildung 5.

Somit ist es egal welche der beiden Disrektisierungsarten verwendet wird, da unter der Annahme $\tau = c/h$ unnötige Terme heraus gekürzt werden können. Man muss lediglich darauf achten, dass die rechte Seite der Gleichung (20) richtig gewählt wird.

4.3 Diskretisierung Populationsdifferenz

Für die Diskretisierung der Zeitableitung der Populationsdifferenz in Gleichung (1) wird zunächst ein einfacher Vorwärtsdifferenzenquotient [ebd.]

$$\frac{\partial \Delta}{\partial t}(x, t) \approx \frac{\Delta_i^{k+1} - \Delta_i^k}{\tau} + O(\tau) \quad (28)$$

verwendet. Setzt man diesen nun in (1) ein,

$$\frac{\Delta_i^{k+1} - \Delta_i^k}{\tau} = -2\sigma n_i^k \Delta_i^k \quad (29)$$

$$\Delta_i^{k+1} = (-2\sigma c \tau n_i^k + 1) \Delta_i^k \quad (30)$$

erhält man eine Berechnungsvorschrift für die Populationsdifferenz im neuen Zeitschritt.

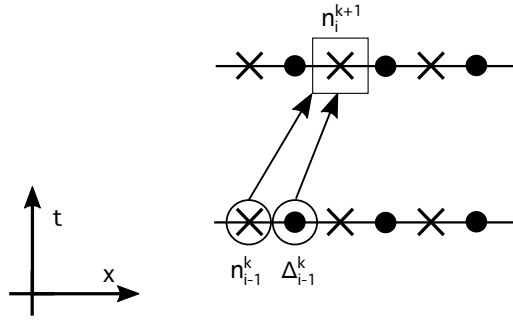


Abbildung 7: Stencil der Photonendichte gemäß der Gleichung (24). Die neue Photonendichte am aktuellen Ort hängt nur noch von der alten Dichte der Photonen des linken Nachbarpunktes ab. Die Photonen am Punkt $i - 1$ legen innerhalb eines Zeitschrittes τ genau die Länge h zurück. Somit erscheinen die Photonen des linken Nachbarpunktes im neuen Zeitschritt genau am Punkt i .

Jedoch ist dies nicht die einzige Möglichkeit diese Gleichung zu diskretisieren. Orientiert man sich nun an Abschnitt 4.2, so führt die gleiche Änderung der rechten Seite der Gleichung (29)

$$- 2\sigma n_i^{k+1} \Delta_i^{k+1} \quad (31)$$

zu einer neuen, alternativen Berechnungsvorschrift

$$\frac{\Delta_i^{k+1} - \Delta_i^k}{\tau} = -2\sigma n_i^{k+1} \Delta_i^{k+1} \quad (32)$$

$$\Delta_i^{k+1} = \frac{1}{(2\tau\sigma n_i^{k+1} + 1)} \Delta_i^k, \quad (33)$$

welche nun die *neue* Photonendichte am aktuellen Ort mit einbezieht. Somit muss für den Zeitschritt $k + 1$ zuerst die Photonendichte und anschließend mit den aktuellen Werten die inverse Populationsdichte ausgewertet werden. Der Vorteil hierbei ist, dass die alternative Berechnungsvorschrift (33) schon den aktualisierten Wert der Photonendichte miteinbezieht und somit eine bessere Modellierung der physikalischen Ereignisse nach sich zieht.

5 Implementation

Die Gleichungen aus dem Abschnitt 4 lassen sich nun in ein Programm übertragen. Dabei werden sowohl für die Populationsdifferenz Δ , als auch für die Photonendichte n jeweils ein Array für die alte Zeit k und ein Array für die neue Zeit $k + 1$ angelegt. Die Anfangsbedingung von der inversen Populationsdichte Δ_0 kann dabei in einem

Parameter	Initialer Wert
n_0	$3.9146 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
Δ_0	$8.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
σ	$2.5 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$
c	$1.703 \times 10^{10} \frac{\text{cm}}{\text{s}}$
L	10 cm
p	$6 \times 10^{-9} \text{ s}$

Tabelle 2: Die Anfangswerte der physikalischen Parameter der Simulation. n_0 steht für die Eingangs-Photonen-Dichte, Δ_0 für die Populationsinverse zu Beginn, σ für den Wirkungsquerschnitt, c für die Lichtgeschwindigkeit, L für die Länge des Kristalls und p für die Pulsdauer des Eingangssignals bzw. Simulationsdauer. Die Werte wurden so gewählt, dass $\sigma\Delta_0L = 2$.

Parameter	Initialer Wert
h	L/n_x
τ	h/c
$steps$	p/τ

Tabelle 3: Numerische Parameter verwendet für die Simulation. h steht für die Schrittweite, τ für die Zeitschrittweite, $steps$ für die Anzahl der nötigen Zeitschritte und n_x für die Anzahl der geforderten Gitterpunkte. Die restlichen Parameter sind physikalisch bestimmt und in Tabelle 2 aufgelistet.

Array vorinitialisiert werden und die Randbedingung des Eingangssignals $n_{i=0}^k$ im jeweils ersten Element des neuen Arrays von n eingetragen werden. Des Weiteren ist es für die Implementation wichtig zwischen den Simulationsparametern und den physikalischen Parametern zu unterscheiden. In Tabelle 2 sind die physikalischen Parameter aufgeführt, die für die Simulation notwendig sind. Dabei wurde c so gewählt, dass es der Lichtgeschwindigkeit in einem Rubinkristall entspricht [Mandarino, 1959] und die restlichen Parameter, so dass $\sigma\Delta_0L = 2$.

Den zweiten Teil der Parameter, welcher ausschließlich für die numerische Simulation benötigt wird, findet man in Tabelle 3. Hierbei wurde wie zuvor die Zeitschrittweite τ in Abhängigkeit vom Gitterpunktabstand h gewählt, so dass die Photonen mit Geschwindigkeit c innerhalb eines Zeitschrittes exakt einen Gitterpunkt voranschreiten.

Der allgemeine Algorithmus 1 (`EXPLIZITES_UPDATE()`) ist so gestaltet, dass die dort eingebundenen Input- und Update-Funktionen vor dem Aufruf festgelegt sein müssen. Dies kann z.B. mit Hilfe eines Funktionspointers in der `main()`-Methode geschehen. Dadurch kann man verschiedene Eingangssignale oder auch Berechnungsvorschriften flexibel testen, ohne dabei den kompletten Algorithmus umzubauen. Jetzt müssen die drei Funktionen im Algorithmus 1 nur noch mit dem aktuellen Gitterpunktindex bzw. aktuellen Zeitschritt aufgerufen werden.

Die Initialisierung des Arrays `delta_old[]` muss nicht unbedingt mit einer Konstanten erfolgen, sondern kann über eine weitere spezielle Funktion beliebig für jeden Gitterpunkt einzeln initialisiert werden (Zeile 3). Die numerische Berechnung erfolgt mit zwei geschachtelten For-Schleifen. Die äußere (Z. 5) iteriert dabei über sämtliche Zeitschritte und die innere (Z. 8) über die Gitterpunkte 1 bis einschließlich $n_x - 2$. Die Gitterpunkte mit dem Index 0 und $n_x - 1$ müssen dabei besonders betrachtet werden. In jedem Zeitschritt k muss zunächst der Input, also die Größe der Eingangs-Photonendichte zur Zeit $t = k\tau$, abhängig des gewählten Eingangssignals, ausgewertet werden. Das erste Feld des Arrays der Photonendichte wird mit diesem Wert überschrieben (Z. 6). Da dieser Punkt nicht numerisch ausgerechnet werden muss, beginnt die innerste For-Schleife mit dem Index 1. Da jedoch der erste Wert der inversen Populationsdichte numerisch berechnet wird, muss der entsprechende Aufruf der Update-Funktion noch außerhalb der inneren Schleife aufgerufen werden (Z. 7). Bis zum Gitterpunkt $n_x - 2$ kann sowohl die Photonendichte, als auch die inverse Populationsdichte gemäß der Update-Funktionen berechnet werden (Z. 9 und 10). Dabei ist zu beachten, dass es nur $n_x - 1$ Punkte für die Populationsdichte gibt. Um nun noch die letzte Photonendichte am rechten Rand beim Punkt mit dem Index $n_x - 1$ auszurechnen, wird die Update-Funktion für diesen manuell außerhalb der innersten Schleife aufgerufen (Z. 12). Als nächstes wird überprüft, ob die Simulationszeit so weit vorangeschritten ist, dass die ersten Photonen das Gebiet wieder verlassen (Z. 13). Dabei wird wieder auf die Annahme $\tau = h/c$ zurückgegriffen. Um per Hand die benötigten z Zeitschritte auszurechnen, um zum Ort $x = L$ zu kommen ($z\tau = L/c$), setzt man nun $h = L/(n_x - 1)$ in die Gleichung ein. Daraus erhält man schließlich $z = \frac{L}{L/(n_x - 1)} = n_x - 1$. Das heißt, dass das erste Photon $n_x - 1$ Zeitschritte benötigt, um die andere Seite des Kristalls zu erreichen und, dass ab diesem Zeitpunkt das verstärkte Ausgangssignal in einer Datei gespeichert werden kann (Z. 14)(vgl. Abschnitt 3.1). Bei diesem Funktionsaufruf wird der erste Parameter $[k - (n_x - 1)]\tau$ so gewählt, dass die Ausgabe der verstärkten Photonen zur besseren Vergleichbarkeit ebenfalls bei $t_{out} = 0$ beginnt. Somit werden wie zuvor die Ausgangsphotonen ebenfalls zeitlich um $t_{out} := t_{in} - L/c$, $t_{in} \geq L/c \Leftrightarrow k \geq z = n_x - 1$ verschoben. Am Ende jeden Zeitschritts, also nach dem einmaligen Durchlaufen aller Gitterpunkte, müssen die alten und neuen Arrays der Photonendichte und der Populationsdifferenz getauscht werden, um der zeitlichveränderlichen Eigenschaft der PDEs gerecht zu werden (Z. 16 und 17).

Die Funktionen zur Auswertung der Form des Eingangssignals sind trivial aufgebaut. Die Funktion für den Lorentzpuls wertet die Gleichung (11) für den passenden Zeitpunkt $k\tau$ aus und gibt den entsprechenden Wert zurück (siehe Algorithmus 3). Äquivalent verhält sich die Funktion des Rechteckpuls, welche für jeden Aufruf den Wert n_0 zurück gibt (siehe Algorithmus 2). Der Alogrithmus 4 des Sägezahnimpulses gibt ein linear von 0 bis n_0 ansteigendes Signal zurück.

Algorithm 1 Expliziter Algorithmus

```
1: procedure EXPLIZITES_UPDATE( )
2:   allokiere n_old[ $n_x$ ], n_new[ $n_x$ ], delta_old[ $n_x - 1$ ], delta_new[ $n_x - 1$ ]
3:   initialisiere delta_old[ ] mit  $\Delta_0$ 
4:   initialisiere n_old[ ] mit 0
5:   for each Zeitschritt  $k$  in steps do
6:     n_new[0] = INPUT_N( $k\tau$ )
7:     delta_new[0] = UPDATE_DELTA(0)
8:     for each Gitterpunkt  $1 \leq i \leq (n_x - 2)$  do
9:       n_new[ $i$ ] = UPDATE_N( $i$ )
10:      delta_new[ $i$ ] = UPDATE_DELTA( $i$ )
11:    end for
12:    n_new[ $n_x - 1$ ] = UPDATE_N( $n_x - 1$ )
13:    if  $k \geq n_x - 1$  then
14:      PRINT_TO_FILE( $(k - (n_x - 1))\tau$ , n_new[ $n_x - 1$ ])
15:    end if
16:    tausche n_old und n_new
17:    tausche delta_old und delta_new
18:  end for
19: end procedure
```

Algorithm 2 Rechteckpuls - Eingang

```
1: procedure INPUT_N_RECHTECK(ZEIT  $t$ )
2:   return  $n_0$ 
3: end procedure
```

Algorithm 3 Lorentzpuls - Eingang

```
1: procedure INPUT_N_LORENTZ(ZEIT  $t$ )
2:   return  $(n_0\tau/\pi)(t^2 + T^2)$ 
3: end procedure
```

Algorithm 4 Sägezahn - Eingang

```
1: procedure INPUT_N_SÄGEZAHN(ZEIT  $t$ )
2:   return  $n_0 \cdot \frac{t}{p}$ 
3: end procedure
```

Die erste Version der Funktion zum Update der Populationsdifferenz findet man im Algorithmus 5. Sie bezieht sich dabei auf Gleichung (30). Algorithmus 6 ist die zweite, alternative Möglichkeit die neuen Werte der Populationsdifferenz zu berechnen. Sie beruht dabei auf der Gleichung (33). Die Funktion 5 oder 6 wird im Hauptalgorithmus

1 in den Zeilen 7 und 10 benötigt. Sie gibt den berechneten Wert für den jeweiligen Gitterpunkt i an den Aufrufer zurück.

Algorithm 5 Update Populationsdifferenz Version 1

```
1: procedure UPDATE_DELTA_1(ORT  $i$ )
2:   return  $(-2\sigma c\tau \cdot n_{\text{old}}[i] + 1) \cdot \text{delta\_old}[i]$ 
3: end procedure
```

Algorithm 6 Update Populationsdifferenz Version 2

```
1: procedure UPDATE_DELTA_2(ORT  $i$ )
2:   return  $(2\sigma c\tau \cdot n_{\text{new}}[i] + 1)^{-1} \cdot \text{delta\_old}[i]$ 
3: end procedure
```

Die Funktion zum Update der Photonendichte findet man im Algorithmus 7. Sie bezieht sich dabei auf Gleichung (21) und entspricht der hergeleiteten Version 1 zur Aktualisierung der Photonendichte im Abschnitt 4.1. Die Funktion wird im Algorithmus 1 in den Zeilen 9 und 12 aufgerufen. Die zweite Version der Funktion zur Aktualisierung der Photonendichte beruht auf der bereits gekürzten Gleichung (24) (Version 2). Dabei wird der Algorithmus 8 genau wie sein Äquivalent (Algorithmus 7) verwendet.

Algorithm 7 Update Photonendichte Version 1

```
1: procedure UPDATE_N_1(ORT  $i$ )
2:   return  $(1 - c\tau/h + \tau\sigma c \cdot \text{delta\_old}[i-1]) \cdot n_{\text{old}}[i] + (c\tau/h) \cdot n_{\text{old}}[i-1]$ 
3: end procedure
```

Algorithm 8 Update Photonendichte Version 2

```
1: procedure UPDATE_N_2(ORT  $i$ )
2:   return  $(1/(1 - \sigma h \cdot \text{delta\_old}[i-1])) \cdot n_{\text{old}}[i-1]$ 
3: end procedure
```

6 Untersuchung der unterschiedlichen Diskretisierungen

Für die nachfolgenden Auswertungen und Vergleiche wurden die Parameter aus Tabelle 2 und 3 verwendet. Wenn nichts anderes angemerkt ist, dann ist davon auszugehen, dass $n_x = 10$ Gitterpunkte für die Simulation verwendet wurden. Die Simulationsparameter wurden so gewählt, dass $\sigma\Delta_0 L = 2$. Wenn man diese nun in Gleichung (10) einsetzt und für eine erste grobe Abschätzung von einer infinitesimalen Pulsweite ausgeht, dann sieht man, dass die initiale Verstärkung $n_0 e^{\sigma\Delta L} = n_0 e^2 \approx 7.39 n_0$ betragen sollte.

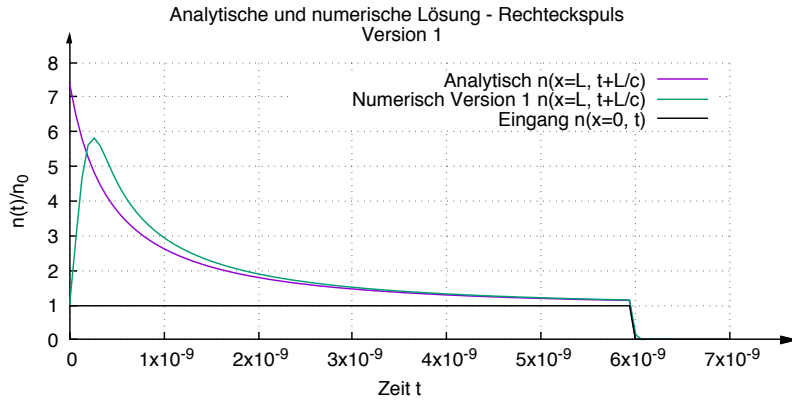


Abbildung 8: Vergleich analytische und numerische Lösung bei Verwendung von Gleichung (21) bzw. Stencil in Abb. 4 mit $n_x = 10$. Die Ergebnisse wurden mit dem Betrag n_0 normiert. Klar zu erkennen ist die Verschiebung der numerischen Lösung nach rechts. Dies ist auf eine ungeeignete Diskretisierung zurückzuführen.

6.1 Untersuchung Photonendichte - Version 1

Zunächst wird die analytische Lösung (9) des rechteckigen Eingangssignals mit konstantem Δ_0 mit der Lösung der Simulation unter Verwendung der Diskretisierung (21) und (33) verglichen (Version 1 der Photonendichte und Version 2 der Populationsdifferenz). Dabei wird für den Haupt-Algorithmus 1 folgende Funktionen über die Funktionspointer festgelegt. Die erste Variante zum Update der Photonendichte `UPDATE_N_1()` (Alg. 7), die Update-Funktion für die inverse Populationsdichte `UPDATE_DELTA_2()` (Alg. 6) und die Rechteckeingangs-Funktion `INPUT_N_SQUARE()` (Alg. 2).

Bei dieser Konfiguration fällt auf, dass die maximale Amplifikation erst zeitlich verzögert eintrifft (s. Abbildung 8). Beginnend beim Zeitpunkt $t = 0$ am Ort $x = L$ sollte, wie es die analytische Lösung zeigt, die Verstärkung maximal mit $e^2 n_0$ sein und im Verlauf asymptotisch abfallen. Durch die zuvor erstellte grobe Abschätzung lässt sich schließen, dass die analytische Lösung in der Abbildung richtig sein sollte. Die Differenz zwischen numerischem und analytischem Ergebnis lässt sich mit dem gewählten Stencil der Variante 1 (30) erklären. Wie Abbildung 4 zeigt, hängt die neue Photonen-Dichte am aktuellen Ort von zwei Punkten aus dem alten Zeitschritt k ab. Wird nun das Gitter mit der innersten Schleife punktweise durchlaufen, tauchen zu Beginn Gitterpunkte auf bei denen beim alten Zeitschritt noch kein Photon aufgetreten ist $n_i^k \hat{=} n_{\text{old}}[i] = 0$. Durch die Multiplikation mit 0 verschwindet bei Gleichung (21) die Klammer auf der rechten Seite und zusätzlich ist $c\tau/h = 1$. Damit ergeben sich für diese Fälle die neue Photonen-Dichte mit $n_{\text{neu}}[i] = n_{\text{old}}[i-1]$. Die so durchgeschobenen, aber nicht verstärkten Photonen, entsprechen nicht der physikalischen Erwartung. Entsprechend ist diese Diskretisierung der PDGs für den Fall des rechteckigen Eingangssignals und allen anderen

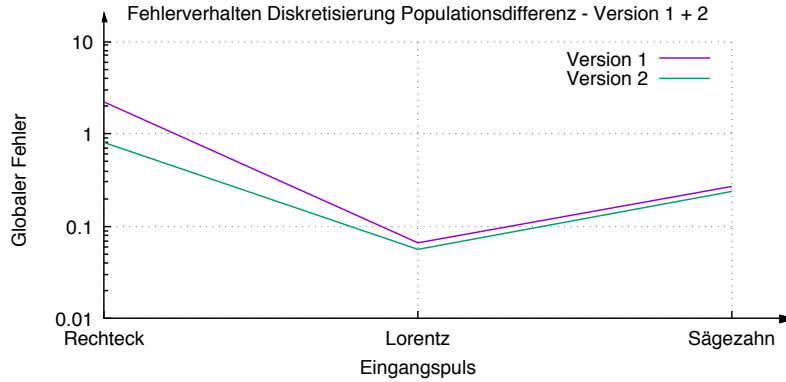


Abbildung 9: Fehlerverhalten der beiden unterschiedlichen Diskretisierungen der Populationsdifferenz. Version 2 hat den kleineren Fehler bei allen Eingangspulsen und wird somit fortan benutzt. Der Simulationdurchlauf erfolgte mit $n_x = 10$ Gitterpunkten und der Funktion `UPDATE_N_2()`

Eingangsformen zu vernachlässigen.

6.2 Untersuchung Populationsdifferenz

Da wir nun wissen, dass sich Version 1 der Diskretisierung der Photonendichte grundlegend nicht eignet, wird ab sofort mit der Version 2 `UPDATE_N_2()` der Gleichung (24) weiter gearbeitet. Nun stellt sich die Frage, welche der beiden Diskretisierungen der Populationsdifferenz am geeignetsten ist. Hierzu verwenden wir die Auswertung des globalen Fehlers (34) der beiden Versionen für die drei Eingangspulse (Rechtecks-, Lorentz-, Sägezahnimpuls). Es werden Simulation mit jeweils $n_x = 10$ Gitterpunkten herangezogen. Wie Abbildung 9 zeigt, hat Version 2 `UPDATE_Delta_2()` (Alg. 6) bei allen Pulsarten den niedrigsten Fehler und wird somit standardmäßig im Folgenden verwendet.

6.3 Untersuchung Photonendichte - Version 2

6.3.1 Rechteckspuls

Ab sofort für Version 2 der Photonendichte wird nur noch die alternative Diskretisierung zur Aktualisierung (24) untersucht. Für den eben verwendeten Algorithmus 1 muss dazu nur der Funktionspointer der Update-Photonendichte-Funktion auf die Funktion `UPDATE_N_2()` gesetzt werden. Der Rest des Programms wird dabei nicht geändert. Fertigt man nun mit dieser Konfiguration eine weitere Simulation eines rechteckigen Eingangssignals an, sieht man in Abbildung 10, dass gerade zu Beginn eine relativ große Differenz $e_{\max} \approx 0,8$ auftritt. Jedoch wurde für diese Berechnung lediglich 10 Gitterpunkte verwendet. Je feiner das Gitter wird, desto kleiner wird der Fehler. Um den Fehler

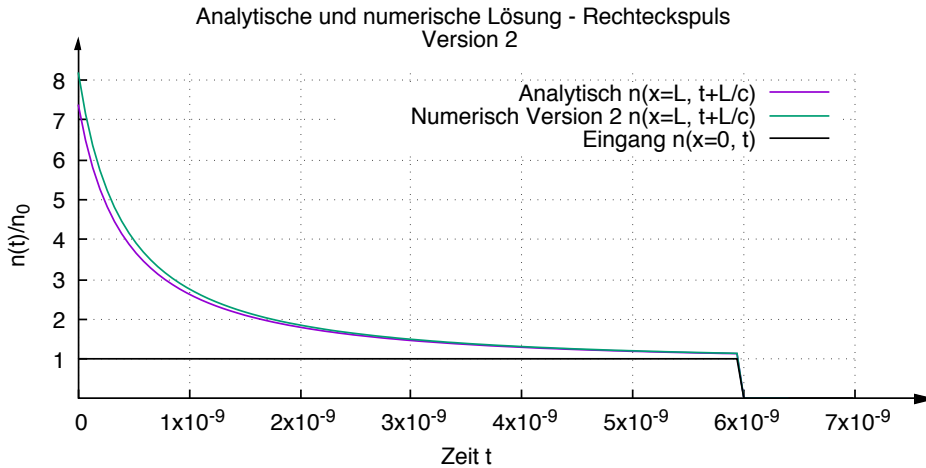


Abbildung 10: Vergleich zwischen analytischer und numerischer Lösung bei Verwendung von Gleichung (24) bzw. Stencil in Abb. 7 mit $n_x = 10$. Die Ergebnisse wurden mit dem Betrag n_0 normiert. Klar zu erkennen ist die am Anfang relativ große Differenz e_{max} zwischen exakter und numerischer Lösung.

zu messen wird die Maximumsnorm des Fehlers

$$e_{max} = \|n^* - n^h\|_{max} = \max |n^*(L, k\tau) - n^h(L, k\tau)| \quad \text{mit } k \in \mathbb{N}_0 \quad (34)$$

herangezogen [Bronstein u. a., 2012, 284]. Dabei entspricht n^* der exakten und n^h der approximierten Lösung. Die gewählte Norm hat dabei den Vorteil, dass sie sowohl den algebraischen, als auch den Diskretisierungsfehler beinhaltet [Strehmel u. a., 2012, 31] und somit den globalen Fehler wiedergibt. Wertet man nun den globalen Fehler abhängig der gewählten Anzahl an Gitterpunkten aus, dann lässt sich die Konvergenzordnung der Variante 2 abschätzen. In Abbildung 11 erkennt man im Log-Log-Plot einen linear fallenden Zusammenhang zwischen der Feinheit des Gitters und des globalen Fehlers. Somit kann man hierfür für eine Konvergenzordnung von $O(h)$ ausgehen. Dies passt auch mit den Differenzenquotienten in den Gleichungen (19) und (26) überein, welche die Konsistenzordnung $O(h)$ besitzen. Aus der Abbildung 10 lässt sich des Weiteren gut das Verhalten des diskreten Eingangssignals untersuchen. Zur Zeit $t > p$ mit der Pulsdauer $p = 6 \times 10^{-9}$ beträgt das Eingangssignal null. Der diskrete Abfall wird durch die verwendete Diskretisierung zum Zeitpunkt $t_{out} = p, t_{in} = p$ wie erwartet umgesetzt.

6.3.2 Lorentzpuls

In diesem Abschnitt wird das Verhalten eines Lorentzpluses untersucht. Dabei werden die gleichen Auswerten wie zuvor angefertigt. Bezogen auf den Algorithmus 1 wird nun der Input-Funktionspointer auf die entsprechende Funktion `INPUT_N_LORENTZ()` (Alg. 3) gesetzt. Der Rest des Programms bleibt der selbe. Führt man für diese Konfiguration eine

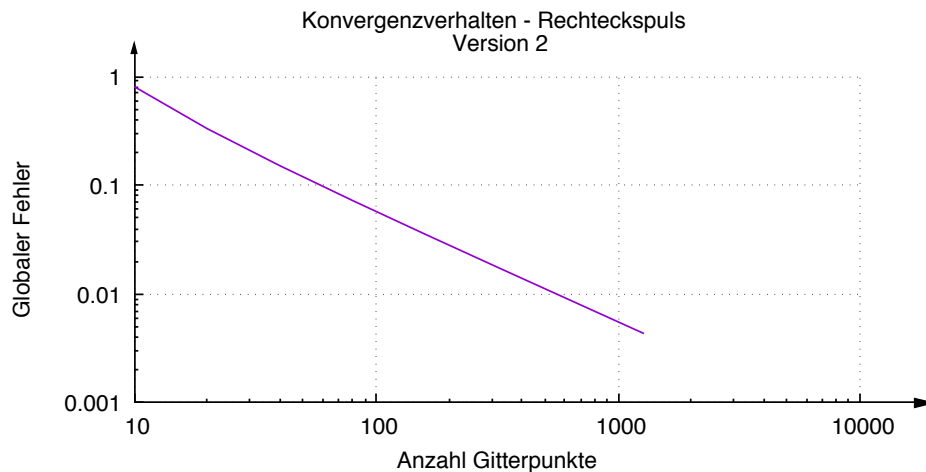


Abbildung 11: In diesem Log-Log-Plot besteht ein linearer Zusammenhang zwischen der Anzahl der Gitterpunkte und dem globalen Fehler bei einem rechteckigem Eingangssignal. Verdoppelt sich die Anzahl der Gitterpunkte, so halbiert sich der globale Fehler. Dies deutet auf ein Konvergenzverhalten von $O(h)$ hin.

erste Simulation durch, dann erkennt man in Abbildung 12 wieder eine leichte Differenz zu Beginn des Ausgangssignals.

Da es sich beim Eingangssignal um ein kontinuierliches Signal handelt (im Gegensatz zum diskreten Rechteckspuls) muss der komplette Definitionsbereich in die Simulation miteinbezogen werden. Der Lorentzspuls läuft im Unendlichen gegen Null $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} n_0(t) = 0$. Dies führt bei einer Simulation zu einem Problem bzw. zu einer weiteren Fehlerquelle und zusätzlicher Ungenauigkeit, da man nur ein bestimmtes Zeitintervall vor einem relevanten Punkt (hier das Maximum des Signals bei $t = 0$) mit in die Simulation fließen lassen kann. Damit sich der daraus ergebende Fehler e_{zusatz} möglichst klein bleibt, muss das zusätzlich in Betracht gezogene Zeitintervall (*Vorlauf*) geschickt gewählt werden. Im ausgeführten Programm wurde die Länge des zusätzlichen Intervalls in Abhängigkeit der Gitterpunkte gewählt. Je feiner das Gitter ist, desto länger wird das Intervall. Der Grund hierfür ist, dass durch eine größere Anzahl an Gitterpunkten der Diskretisierungsfehler sinkt und das numerische Ergebnis verbessert wird. Angenommen, bleibt das zusätzliche Zeitintervall jetzt jedoch unverändert, aber das Gitter wird verfeinert, dann bleibt der daraus resultierende Fehler e_{zusatz} gleich und somit hat der sinkende Diskretisierungsfehler weniger Gewicht im globalen Fehler. Damit wird mehr Rechenaufwand verursacht, ohne dabei den gesamten Fehler signifikant zu senken. Deshalb wird nun der Vorlauf für das zusätzliche Zeitintervall dynamisch mit der Länge $n_x p$ gewählt.

In Abbildung 13 sind beide Verhalten ersichtlich. Beim dynamisch gewählten Vorlauf erkennt man im Log-Log-Plot einen linearen Zusammenhang, was wie zuvor schon beim Rechteckspuls, auf eine Konvergenzordnung von $O(h)$ hindeutet. Bei einem statischen

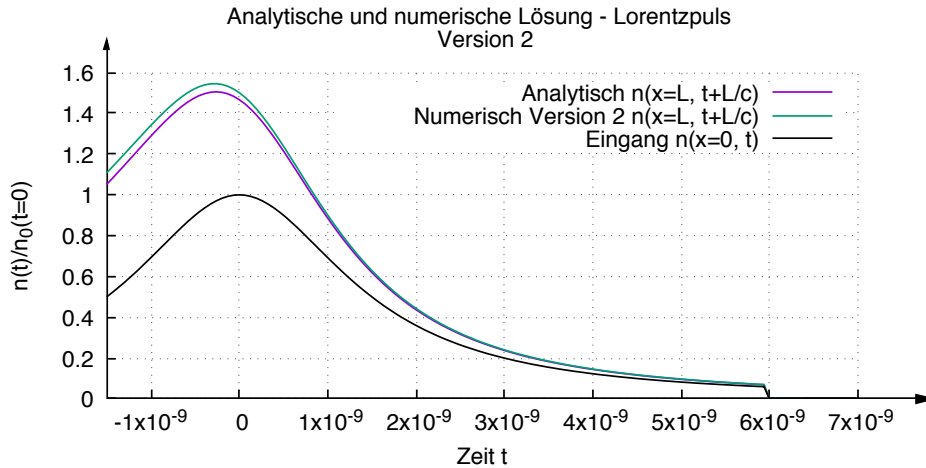


Abbildung 12: Vergleich analytische und numerische Lösung der Photonendichte bei Verwendung von Gleichung (24) bzw. Stencil in Abb. 7 und dem entsprechenden Eingangssignal. Die Ergebnisse wurden mit dem Betrag $n_0(t = 0)$ normiert

Vorlauf mit der Intervalllänge ($10p = const$) erkennt man den Einfluss des Fehlers e_{zusatz} . Die entsprechende Kurve hat eine wesentlich geringere Steigung, welche für zusätzliche Gitterpunkte zusätzlich kleiner wird. Somit kann das Verfahren mit einem statischen Vorlauf, egal ob mehr Gitterpunkte gewählt werden, nur eine gewisse Genauigkeit erreichen.

Nun muss nur noch der Zusammenhang zwischen der Länge des Vorlaufs und dem globalen Fehler untersucht werden. Hierzu kann Abbildung 14 herangezogen werden. Dabei wird stets von einer konstanten Anzahl an Gitterpunkten $n_x = 100$ ausgegangen. Wie man sieht kann man mit der Länge des Vorlaufs den globalen Fehler bis zu einem bestimmten Punkt senken. Der verbleibende Fehler wird wahrscheinlich dem Diskretisierungsfehler für $n_x = 100$ entsprechen. Vergleicht man diesen für einen sehr großen Vorlauf ($e_{max} = 0,0033$) mit der Auswertung des Fehlers des dynamischen Vorlaufs für 100 Gitterpunkte ($e_{max} \approx 0,0048$) in Abbildung 13, dann stimmen diese in etwa überein.

Der Nachteil der dynamischen Anpassung des Vorlaufs ist der erhöhte Rechenbedarf. Normalerweise müssen $steps = p/\tau$ Zeitschritte ohne Vorlauf für eine Simulation durchlaufen werden. Da $\tau = h/c$ und $h = L/(n_x - 1)$, ergibt das $steps = \frac{pc}{L}(n_x - 1) \approx O(n_x)$ Schritte. Lässt man nun die Anforderung des dynamischen Vorlaufs mit einfließen, dann ergibt das $steps = \frac{pc}{L}(n_x^2 - n_x) \approx O(n_x^2)$ Zeitschritte, die zur Berechnung der Approximation nötig sind.

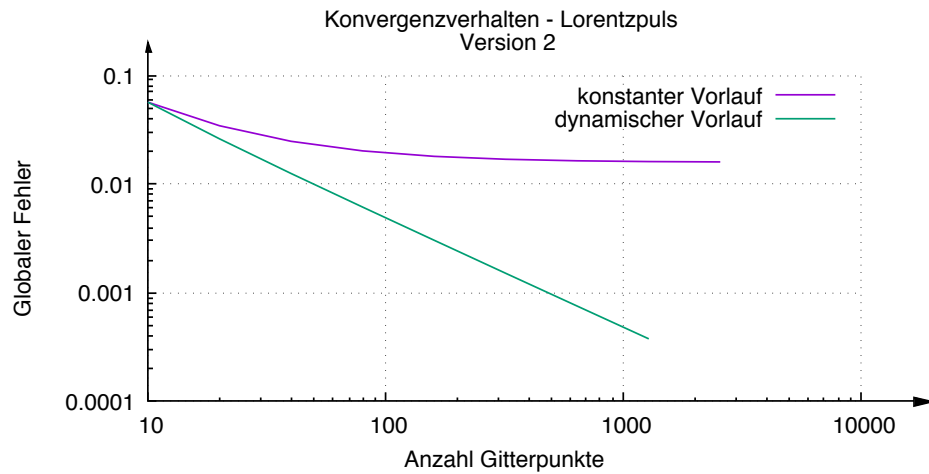


Abbildung 13: Zusammenhang zwischen der Anzahl der Gitterpunkte und des globalen Fehlers beim Lorentzpuls mit konstantem und dynamischem Vorlauf. Dabei wurde der konstante Vorlauf $= 10p = const$ gewählt und der dynamische Vorlauf $= n_x p$. Wenn das Gitter verfeinert wird (größere Anzahl an n_x), dann wird bei der dynamischen Variante die Länge des zusätzlichen Zeitintervalls ebenfalls erhöht. Dadurch sinkt der Fehler e_{zusatz} , sowie der Diskretisierungsfehler. Beim konstanten Vorlauf bleibt die Länge des Vorlaufs gleich und der Fehler verkleinert sich ab einer bestimmten Anzahl an Gitterpunkten nur noch minimal, da e_{zusatz} nicht mehr weiter verkleinert wird.

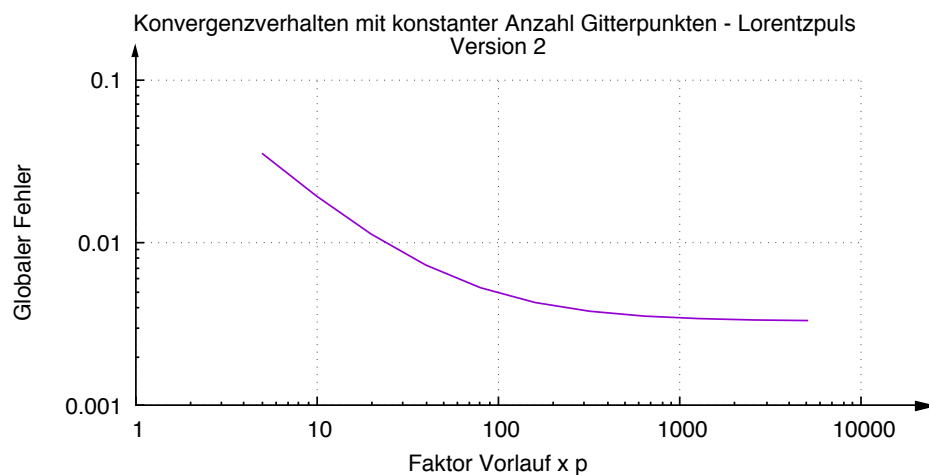


Abbildung 14: Zusammenhang zwischen der Länge des Vorlaufs und dem globalem Fehler bei konstanter Anzahl an Gitterpunkten, welche mit $n_x = 100$ gewählt wurde.

6.3.3 Sägezahnimpuls

Der Sägezahnimpuls hat ein spezielles Verhalten. Besonders in der Mitte ist die Differenz hoch, obwohl numerische und analytische Lösung im gleichen Punkt ($n^*(x = L, t = 0) = n^h(x = L, t = 0)$) starten. Jedoch dem Ende hingegen schmiegt sich die Approximation an die exakte Lösung wieder an (s. Abbildung 15).

Jetzt dürfte es auch nicht überraschend erscheinen, dass die bereits oben bestimmte Konvergenzordnung von $O(h)$ ebenfalls für den Sägezahnimpuls gilt. Abbildung 16 zeigt dies nochmals.

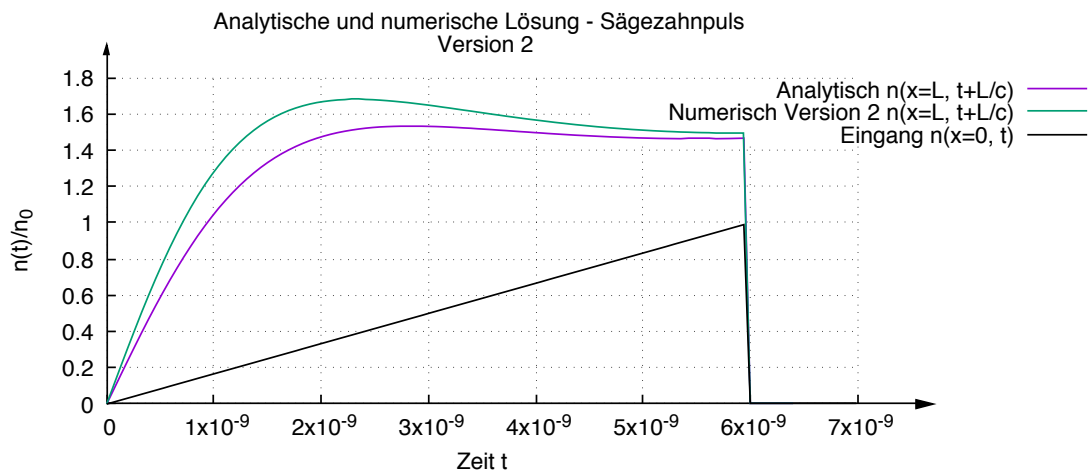


Abbildung 15: Analytischen, numerische Lösung und Eingang eines Sägezahnimpulses mit $n_x = 10$ Gitterpunkten. Die Ergebnisse wurden mit dem Betrag n_0 normiert.

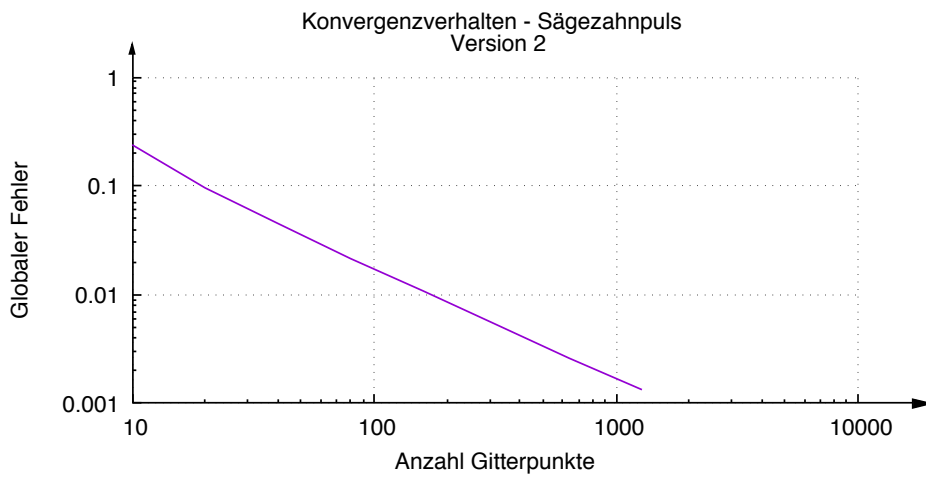


Abbildung 16: Konvergenzverhalten eines Sägezahnimpulses, approximiert mit Version 2. Ebenfalls eine Konvergenzordnung von $O(h)$.

Abbildungsverzeichnis

1	Die schematische Darstellung des Gebiets.	7
2	Allgemeine Form von Lorentzkurven	10
3	Diskretisierung des Gebiets.	11
4	Erster Stencil zur Berechnung der Photonendichte. Hängt nur vom alten, linken Nachbarpunkt ab.	12
5	Zusammenspiel beider Ableitungen in der Expliziten Diskretisierung 2 . .	13
6	Zusammenspiel beider Ableitungen in der Expliziten Diskretisierung 2 (Alternative)	14
7	Zweiter Stencil zur Berechnung der Photonendichte. Hängt nur vom alten, linken Nachbarpunkt ab.	15
8	Analytische und numerische Lösung bei Verwendung (21) - Rechteckspuls - Version 1.	20
9	Fehlerverhalten Diskretisierung Populationsdifferenz - Version 1 & 2. . . .	21
10	Analytischen und numerischen Lösung von (24) - Rechteckspuls - Version 2.	22
11	Konvergenzverhalten - Rechteckspuls - Version 2.	23
12	Analytische und numerische Lösung unter Verwendung von (24) - Lorentzpuls - Version 2.	24
13	Konvergenzverhalten konstanter/dynamischer Vorlauf - Lorentzpuls - Version 2.	25
14	Konvergenzverhalten mit konstanter Anzahl Gitterpunkten - Lorentzpuls - Version 2.	26
15	Analytische und numerische Lösung unter Verwendung von (24) - Sägezahnspuls - Version 2.	27
16	Konvergenzverhalten- Sägezahnspuls - Version 2.	27

Tabellenverzeichnis

1	Übersicht Einheiten der Bestandteile von Gleichungen (1) und (2)	7
2	Anfangswerte physikalischer Parameter der Simulation	16
3	Numerische Parameter der Simulation	16

Literatur

[Ashforth u. a. 2015] ASHFORTH, Simon A. ; SIMPSON, M. C. ; BODLEY, Owen ; OOSTERBEEK, Reece: *Ultrashort pulse laser interactions with cortical bone tissue for applications in orthopaedic surgery*. 2015

[Bronstein u. a. 2012] BRONSTEIN ; SEMENDJAJEW ; MUSIOL ; MÜHLIG: *Taschenbuch der Mathematik*. Bd. 8. Verlag Harri Deutsch, 2012

[Frantz und Nodvik 1963] FRANTZ, Lee M. ; NODVIK, John S.: Theory of Pulse Propagation in a Laser Amplifier. In: *Journal of Applied Physics* (1963)

- [Hoffmann u. a. 2006] HOFFMANN, Armin ; MARX, Bernd ; VOGT, Werner: *Mathematik für Ingenieure 2*. Pearson Studium, 2006
- [Koechner 2006] KOECHNER, Walter: *Solid-State Laser Engineering*. Springer, 2006
- [LeVeque 1992] LEVEQUE, Randall J.: *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser Verlag, 1992
- [LeVeque 2007] LEVEQUE, Randall J.: *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007
- [Mandarino 1959] MANDARINO, Joseph A.: Refraction, Absorption and Biasorption in Synthetic Ruby. In: *The American Mineralogist* 44 (1959)
- [Nolte u. a. 2016] NOLTE, Stefan ; DAUSINGER, Friedrich ; SCHREMPEL, Frank: *Ultrashort Pulse Laser Technology*. Springer, 2016
- [Sarra 2004] SARRA, Scott: The Method of Characteristics Conservation Laws. In: *Journal of Online Mathematics and its Applications* 3 (2004).
– URL <http://www.maa.org/press/periodicals/loci/joma/the-method-of-characteristics-conservation-laws-the-method-of-characteristics>
- [Strehmel u. a. 2012] STREHMEL, Karl ; WEINER, Rüdiger ; PODHAISKY, Helmut: *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Springer Spektrum, 2012
- [Zhou u. a. 1998] ZHOU, Mike H ; MASCAGNI, Michael ; QIAO, Alice Y: Explicit finite difference schemes for the advection equation. In: *Relation* 10 (1998), Nr. 1.55, S. 7098