

Pulsausbreitung in Medien mit anisotroper Dispersion

Inaugural-Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von
Kai Germaschewski
aus Düsseldorf

Düsseldorf
Februar 2001

Gedruckt mit der Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen
Fakultät der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Referent: Prof. Dr. K.-H. Spatschek
Koreferent: Prof. Dr. R. Grauer
Tag der mündlichen Prüfung: 5. Februar 2001

Elektronisch veröffentlicht unter
<http://www.ulb.uni-duesseldorf.de/diss/mathnat/2001/germaschewski.html>

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	5
2	Nichtlineare Schrödingergleichung	7
2.1	Einleitung	7
2.2	Lagrangedarstellung und Erhaltungsgrößen	8
2.3	Selbstfokussierung in der zweidimensionalen nichtlinearen Schrödingergleichung	11
2.4	Selbstfokussierung in dreidimensionalen anisotropischen Medien	13
2.4.1	Theorie von Fibich und Papanicolaou	14
2.4.2	Ein alternativer Ansatz von Bergé, Rasmussen, Kuznetsov <i>et al.</i>	15
2.5	Modulationsinstabilitäten	17
3	Numerische Verfahren	20
3.1	Einleitung	20
3.2	Verfahren auf dem Basisgitter	21
3.3	Verfahren auf den verfeinerten Gittern	24
3.4	Adaptive Gitterverfeinerung	26
3.4.1	Ablauf der numerischen Integration	27
3.4.2	Levels und Gitter	29
3.4.3	Kommunikation	31
3.4.4	Umsetzung in C++	32
3.4.5	Parallelisierung	36
4	Splitting von Gaußschen Pulsen	37
4.1	Einleitung	37
4.2	Evolution von Wellenpaketen mit überkritischer transversaler Masse	38
4.3	Grenzmassen für Splitting-Ereignisse in Abhängigkeit vom Dispersionskoeffizienten s	47
4.4	Einfach- und Mehrfachsplittings	55
4.4.1	Doppel-Gauß Anfangsbedingung, Abhängigkeit von der Distanz	55
4.4.2	Doppel-Gauß Anfangsbedingung, Abhängigkeit von der Amplitude	63
4.4.3	Einfluß eines Chirps	67

Inhaltsverzeichnis

5	Modulationsinstabilitäten von zylindrischen Wellenleitern	71
5.1	Einleitung	71
5.2	Bunch-Instabilität	73
5.3	Snake-Instabilität	75
5.4	Konkurrenz der beiden Instabilitäten	77
6	Zusammenfassung	82
7	Danksagung	83
	Literatur	84

1 Einführung

In der vorliegenden Arbeit sollen spezielle Eigenschaften der Wellenausbreitung, beschrieben durch die nichtlineare Schrödingergleichung, untersucht werden.

Während heute viele lineare Probleme gut verstanden sind und mit Standardverfahren gelöst werden können, stellt man gleichzeitig fest, daß viele Fragestellungen tatsächlich nichtlineare Probleme beinhalten und man die auftretenden nichtlinearen Terme nicht einfach vernachlässigen kann. So ist heute die Entwicklung von Lasern mit einer enorm hohen Pulsenergie von 10^{20}W/cm^2 möglich. Dies ermöglicht völlig neue Bereiche der Physik zu erforschen, wie hier die Wechselwirkung von Licht und Materie, wenn die durch das Licht erzeugten Kräfte vergleichbar mit den atomaren Bindungskräften werden. In einem solchen Bereich kann die Ausbreitung von Licht aber natürlich nicht mehr nur durch eine lineare Gleichung korrekt beschrieben werden.

Neue Arbeitsgebiete, die sich gerade mit diesen nichtlinearen Gleichungen beschäftigen, sind entstanden. Als Beispiel sei hier die Solitonentheorie genannt. Es wurde gefunden, daß die Anwesenheit eines nichtlinearen Terms im Zusammenspiel mit dem bekannten linearen Dispersionsterm unter bestimmten Voraussetzungen die Existenz von nichtlinear-stabilen Strukturen erlaubt, sogenannten Solitonen. Derartige Effekte können in einem weiten Bereich von Problemen beobachtet werden, angefangen bei eindimensionalen Flachwasserwellen und der Ausbreitung von Lichtpulsen in Glasfasern bis hin zu komplizierten dreidimensionalen Plasmasystemen.

Leider sind die analytischen Möglichkeiten zur Behandlung solcher Systeme bis heute begrenzt. Nur einige einfache Probleme können mit Hilfe hochentwickelter Methoden wie der Inversen Streutheorie vollständig analytisch gelöst werden, während man sonst häufig zu Näherungen und Störungstheorien oder aber zu einer numerischen Behandlung greifen muß.

Eine der interessanten grundlegenden Gleichungen ist die nichtlineare Schrödingergleichung. Untersucht wird im folgenden eine kubische Nichtlinearität, wie man sie häufig aus physikalischen Modellbildungen erhält. Beispielsweise ist die Dielektrizitätskonstante eines Mediums im allgemeinen tatsächlich ein Tensor, der zudem noch vom angelegten elektrischen Feld abhängt. Entwickelt man den Tensor nach dieser Abhängigkeit, so findet man als ersten nichtverschwindenden Term eine Korrektur der Dielektrizitätskonstante (und damit der Brechzahl) proportional zur Intensität des Feldes $|E|^2$. Dieser sogenannte *Kerr-Effekt* führt damit zu einer kubischen Nichtlinearität in der Schrödingergleichung, welche die Wellenausbreitung in einem solchen Kerr-Medium beschreibt.

In dieser Arbeit wird das Modellsystem einer dreidimensionalen nichtlinearen Schrödingergleichung mit anisotroper Dispersion untersucht. Nach dieser Einleitung werden zunächst bekannte analytische Ergebnisse zusammengefaßt. Interessant ist im speziellen die Frage, ob ein Kollaps eines Pulses in endlicher Zeit in diesem System möglich ist. Es ist schon lange bekannt, daß man im zweidimensionalen Fall, also bei Vernachlässigung des zusätzlichen anisotropen Dispersionstermes, aufgrund der kubischen Nichtlinearität einen solchen Kollaps be-

obachten und auch analytisch nachweisen kann. Die volle Gleichung zeigt jedoch stattdessen nach anfänglicher Kontraktion ein Aufsplitten des Anfangspulses in zwei, sich voneinander wegbewegende, neue Pulse. Es wurde vermutet, daß sich dieser Prozeß wiederholen kann, d.h. die zwei Pulse zerteilen sich wiederum in dann vier Pulse. Dies sollte sich fortsetzen, bis die entstandenen Pulse zu wenig Intensität für ein weiteres Splitting haben.

Eine andere Frage ist die nach der Modulationsinstabilität von dreidimensionalen Wellenleitern. Es wird also untersucht, ob eine Störung in longitudinaler Richtung beispielsweise eine *Bunch-* oder *Snake*-Instabilität der nahezu zweidimensionalen Struktur zur Folge hat.

Der Schwerpunkt bei der Bearbeitung des Themas lag in der numerischen Behandlung des Problems. Deshalb wird im nächsten Kapitel zunächst das benutzte numerische Verfahren ausführlich vorgestellt. Aufgrund des stark kontrahierenden Verhaltens der untersuchten Gleichung, ist es mit herkömmlichen Methoden kaum möglich, eine hinreichende Auflösung für interessante Parameterbereiche zu erhalten. Deshalb wurde das Verfahren der blockstrukturierten adaptiven Gitterverfeinerung eingesetzt, welches nur dort eine hohe Auflösung einsetzt, wo diese vom Problem auch benötigt wird. Dieses ressourcensparende Verfahren ermöglicht so eine deutlich höhere effektive Auflösung als konventionelle Methoden, allerdings um den Preis einer wesentlich aufwendigeren Entwicklung und Programmierung des Verfahrens selbst. Es werden sowohl die grundlegenden Ideen adaptiver Gitterverfeinerung vorgestellt, als auch spezielle Implementationsstrategien erörtert. Außerdem werden natürlich auch die verwendeten numerischen Schemata erklärt.

Die beiden folgenden Kapitel zeigen dann die erzielten numerischen Resultate. Zunächst werden Gaußsche Pulse als Anfangsbedingung untersucht und die grundlegenden Kontraktions- und Splittingeffekte erläutert. Dann wird die Abhängigkeit des Auftretens von Splittingereignissen des anfänglichen Pulses vom longitudinalen Dispersionskoeffizienten behandelt. Ein Hauptaugenmerk lag auf der Beobachtung von sukzessive hintereinander stattfindenden Mehrfachsplittings eines Pulses. Während die Theorie ein wiederholtes symmetrisches Aufteilen der Pulse vorhersagte, wurde dies in der Numerik nicht beobachtet. Um das entstandene Szenario besser zu verstehen, wurden weitere numerische Experimente durchgeführt, um die Evolution von zwei Gaußschen Pulsen in variierendem Abstand und mit variierender Amplitude zu bestimmen. Auch der Einfluß eines Chirps wurde untersucht.

Weiterhin wurde noch das Auftreten der Bunch- und Snake-Instabilität bei gestörten zweidimensionalen Wellenleitern beobachtet, und die relative Stärke dieser beiden Instabilitäten untersucht.

Abschließend wird noch eine Zusammenfassung der Ergebnisse und ein Ausblick auf verbleibende Fragestellungen gegeben.

2 Nichtlineare Schrödingergleichung

In diesem Kapitel wird zunächst die Schrödingergleichung vorgestellt. Sie beschreibt allgemein die Wellenausbreitung unter Berücksichtigung von Dispersionseffekten. Anwendung findet sie in Modellen der Quantenmechanik, in der Beschreibung von elektromagnetischen Wellen / Optik und beispielsweise auch in der Untersuchung von Wellenphänomenen in Plasmen.

Es ist schon lange bekannt, daß Lösungen der nichtlinearen Schrödingergleichung unter bestimmten Bedingungen ein kollapsartiges Verhalten zeigen. Bei kubischer Nichtlinearität erhält man im dreidimensionalen Fall einen gut verstandenen superkritischen Kollaps. Im zweidimensionalen erhält man gerade den Fall eines kritischen Kollapses, über den weniger bekannt ist. Die Theorie hierzu wird im folgenden noch einmal wiederholt.

Interessant ist nun die Frage, wie es bei der dreidimensionalen Schrödingergleichung mit anisotroper Dispersion aussieht, denn hier sind die Antworten keineswegs klar. Es gibt eine Konkurrenz zwischen der zweidimensionalen Selbstfokussierung in der transversalen Ebene und dem defokussierenden Verhalten senkrecht dazu. Verschiedene analytische Ansätze zur Behandlung dieses Problems werden im folgenden dargestellt.

Abschließend befaßt sich dieses Kapitel noch mit der Frage von Modulationsinstabilitäten dreidimensional gestörter Wellenleiterlösungen. Auch hier ist analytisch das Problem noch nicht vollständig verstanden, so daß numerische Simulationen zur Klärung beitragen können.

2.1 Einleitung

Die Schrödingergleichung, besonders natürlich aus der Quantenmechanik bekannt, beschreibt allgemein die Ausbreitung von Wellen unter Einfluß von Dispersion. Während die elementare Quantenmechanik durch eine lineare Gleichung beschrieben wird, nutzt man für elektromagnetische Wellen z. B. das Newell-Whitehead-Verfahren [26] um eine Enveloppengleichung für den langsam variierenden Anteil der Welle zu erhalten. Hier findet man bei Untersuchung von Welleneffekten in unterschiedlichen Medien häufig Terme höherer Ordnung, so z. B. eine kubische Nichtlinearität, beispielsweise begründet durch den Kerr-Effekt in der nichtlinearen Optik.

Hier lautet die sogenannte kubisch nichtlineare Schrödingergleichung dann

$$i\partial_t E + \Delta_{\perp} E + s\partial_z^2 E + |E|^2 E = 0 . \quad (2.1)$$

Der Koeffizient s bestimmt hier die Art der Dispersion, sowohl isotrope ($s > 0$) als auch anisotrope Dispersion ($s < 0$) werden durch obige Gleichung beschrieben. Im Verlaufe dieser Arbeit werden wir uns primär mit dem interessanteren Fall der Anisotropie beschäftigen.

Im Bereich der Plasmaphysik findet die Schrödingergleichung (2.1) Anwendung in der Modellierung von nichtlinearen Wellen mit anisotroper Dispersion, d.h. Wellen, bei denen in der

Dispersionsbeziehung $\omega = \omega(\vec{k})$ die zweiten Ableitungen $\partial^2 \omega / \partial k_x^2$, $\partial^2 \omega / \partial k_y^2$ und $\partial^2 \omega / \partial k_z^2$ unterschiedliches Vorzeichen haben.

Aus dem nahezu unerschöpflichen Vorrat an Welleneffekten in Plasmen erfüllen zahlreiche Wellen die obigen Eigenschaften, erwähnt seien hier beispielsweise Lower-Hybrid und Ionen-Zyklotron Wellen [25], sowie Whistlers und indirekte Plasmawellen in magnetisierten Plasmen, bei denen die Wellenvektoroberfläche in der Nähe des zentralen Wellenvektors negativ gekrümmt ist [22].

Von besonders großem Interesse ist die nichtlineare Schrödingergleichung auch im Bereich der nichtlinearen Optik. Hier entspricht der Skalar E der Einhüllenden einer elektromagnetischen Welle, die sich durch ein nichtlineares, dispersives Medium propagiert. In der optischen Beschreibung beschreibt die Variable t in der obigen Gleichung die longitudinale Länge in Ausbreitungsrichtung der Welle, die Größe z entspricht dafür einer retardierten Zeitvariablen $t' = t - z/\omega'$ ($\omega' \equiv \partial\omega/\partial k$). Der Term $s\partial_z^2 E$ in obiger Gleichung hat also die Bedeutung einer „zeitlichen“ Dispersion, die durch die Gruppengeschwindigkeitsdispersion (engl. group velocity dispersion, Abkürzung GVD) über den Koeffizienten $s \sim \partial^2 k / \partial \omega^2|_{\omega_0}$ [27] bestimmt wird.

Im Falle isotroper Dispersion, d.h. $s > 0$, ist die Dynamik des Feldes E gut verstanden [33, 4]. Unter der Bedingung, daß der Hamiltonian negativ ist, erfolgt ein dreidimensionaler Kollaps, d. h. man beobachtet eine Punktsingularität in endlicher Zeit. Im Gegensatz dazu ist das Verhalten im Falle anisotroper Dispersion noch ungeklärt. Die ungeklärten Fragen lauten wie folgt: Ist eine Singularität in endlicher Zeit unter passenden Anfangsbedingungen möglich? Wie beeinflusst der negative Dispersionsterm die Selbstfokussierung in der transversalen Ebene und, damit verbunden, was ist das Endstadium eines sich in transversaler Ebene kontrahierenden Wellenpackets? Gibt es ein generisches Verhalten in der Dynamik?

Im folgenden werden grundlegende theoretische Ergebnisse bezüglich der Dynamik von Lösungen der nichtlinearen Schrödingergleichung dargestellt.

2.2 Lagrangedarstellung und Erhaltungsgrößen

Die nichtlineare Schrödingergleichung (2.1) kann im Rahmen des Lagrange-Formalismus untersucht werden.

Man findet eine Lagrangedichte $\mathcal{L}$

$$\mathcal{L} = \frac{i}{2}(E_t E^* - E E_t^*) + |\nabla_{\perp} E|^2 + s|E_z|^2 + \frac{1}{2}|E|^4. \quad (2.2)$$

Aus der Forderung, daß das Wirkungsfunktional S

$$S[E] \equiv \int_{t_0}^{t_1} dt \int_{\Omega} d^3x \mathcal{L}(E, E_t, \nabla E) \quad (2.3)$$

2 Nichtlineare Schrödingergleichung

extremal wird, erhält man mit Hilfe einfacher Variationsrechnung und verschwindender Randbedingungen im Unendlichen die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E_t} - \frac{d}{d\vec{x}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E_{\vec{x}}} = 0 , \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E_t^*} - \frac{d}{d\vec{x}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E_{\vec{x}}^*} = 0 . \quad (2.5)$$

Setzt man die angegebene Lagrangedichte (2.2) in die Gleichung (2.5) ein, so erhält man die nichtlineare Schrödingergleichung in der bekannten Form, benutzt man die Gleichung (2.4), so erhält man die komplex konjugierte Form.

Aus den Symmetrien der Lagrangedichte kann man nun mit Hilfe des Noether-Theorems leicht Erhaltungsgrößen finden [28, 29].

In der Lagrangeschen Mechanik besteht nämlich ein enger Zusammenhang zwischen stetigen Symmetrien und Erhaltungsgrößen, so daß sich Erhaltungsgrößen i. a. ohne Integrationen aus den Symmetrien gewinnen lassen.

Man betrachtet infinitesimale Transformationen von Zeit, Ort und Feldern der Form

$$t \rightarrow \bar{t} = t + \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} \phi_0^{(\nu)} , \quad (2.6)$$

$$x_i \rightarrow \bar{x}_i = x_i + \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} \phi_i^{(\nu)} , \quad (2.7)$$

$$u \rightarrow \bar{u} = u + \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} \psi^{(\nu)} . \quad (2.8)$$

Die Funktionen ϕ_{μ} und ψ ergeben sich aus der gewählten stetigen Symmetrie. Es wurde die übliche Bezeichnung von griechischen Indizes $\in \{0 \dots 3\}$ für Zeit- und Raumkoordinaten verwendet, lateinische Indizes bezeichnen nur die Raumkoordinaten $\in \{1 \dots 3\}$. Ist das Wirkungsintegral $S[E]$ invariant unter dieser Transformation, so ist bekannt [28, 29], daß eine Kontinuitätsgleichung der Form

$$\partial_t I_0 + \nabla \cdot I = 0 \quad (2.9)$$

erfüllt ist, wobei der vierdimensionale Vektor I_{μ} definiert ist als

$$I_{\mu} \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{\mu}} [\sum_{\nu} u_{\nu} \phi_{\nu} - \psi] + c.c. - \mathcal{L} \phi_{\mu} . \quad (2.10)$$

Insbesondere erhält man durch Integration über den gesamten Raum das gesuchte Erhaltungsgesetz

$$\frac{d}{dt} \int I_0 d^3x = 0 \quad (2.11)$$

für den Fall, daß die Ströme I_j im Unendlichen verschwinden.

2 Nichtlineare Schrödingergleichung

Es gibt zahlreiche Erhaltungssätze der nichtlinearen Schrödingergleichung. Für die folgende analytische Behandlung werden sich folgende Erhaltungsgrößen als besonders nützlich erweisen, so daß ihre Herleitung hier noch einmal vorgestellt wird.

Zunächst enthält die Lagrangedichte nicht explizit die Zeit t , d.h. sie ist translationsinvariant bezüglich der Zeit. Man betrachtet also die Transformation

$$t \rightarrow \bar{t} = t + \varepsilon , \quad (2.12)$$

$$x \rightarrow \bar{x} = x , \quad (2.13)$$

$$E \rightarrow \bar{E} = E . \quad (2.14)$$

In der obigen Bezeichnung bedeutet dies, daß $\phi_0 \equiv 1$, $\phi_i \equiv 0$ und $\psi \equiv 0$.

Somit ist

$$I_0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E_t} E_t - \mathcal{L} + c.c. \quad (2.15)$$

und $\int I_0 d^3x$, besser bekannt als der Hamiltonian H

$$H = \int d^3x \left(|\nabla_{\perp} E|^2 + s |E_z|^2 - \frac{1}{2} |E|^4 \right) \quad (2.16)$$

eine Erhaltungsgröße.

Weiterhin ist offensichtlich, daß die Lagrangedichte $\mathcal{L}$ und damit das Wirkungsintegral $S[E]$ invariant bzgl. einer Phasendrehung $E \rightarrow E e^{i\varphi}$ ist. Infinitesimal lautet diese Transformation

$$t \rightarrow \bar{t} = t , \quad (2.17)$$

$$x \rightarrow \bar{x} = x , \quad (2.18)$$

$$E \rightarrow \bar{E} = E + i\varepsilon E . \quad (2.19)$$

Dies bedeutet nun, daß $\phi_{\mu} \equiv 0$ und $\psi = iE$.

Einsetzen in Gleichung (2.10) liefert

$$I_0 = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E_t} iE + c.c. = |E|^2 , \quad (2.20)$$

$$I_i = i(E \nabla E^* - E^* \nabla E) . \quad (2.21)$$

Es ergibt sich also, in der Sprache der Quantenmechanik, die bekannte Massenkontinuitätsgleichung, im speziellen ist die gesamte „Masse“ $\int |E|^2 d^3x$ erhalten. In der Sprache der Optik ist diese Größe die „Leistung“, im folgenden werden beide Begriffe gleichbedeutend verwendet.

Diese Aussagen lassen sich leicht auf den d -dimensionalen Fall verallgemeinern. Wir werden im folgenden auch die Erhaltung von Masse und Hamiltonian in zwei Dimensionen benutzen, ohne daß es nötig erscheint, die entsprechende Herleitung zu wiederholen.

2.3 Selbstfokussierung in der zweidimensionalen nichtlinearen Schrödingergleichung

Als Ausgangspunkt zur Behandlung des dreidimensionalen Falls mit anisotroper Dispersion sei hier zunächst an die selbstfokussierenden Eigenschaften von Lösungen der zweidimensionalen nichtlinearen Schrödingergleichung erinnert.

Nichtstationäre Lösungen der Gleichung (2.1) mit $s = 0$ können kollabieren, so daß die Amplitude $|E|$ in endlicher Zeit singulär wird.

Wir betrachten Anfangsbedingungen $E(\vec{r}, t = 0) \equiv E_0(\vec{r})$ aus dem Sobolev Raum H^1 . Für solche Lösungen E ist die L^2 -Norm $\|E\|_2 = \|E_0\|_2$ erhalten. Die L^p -Norm ist definiert als $\|f\|_p^p \equiv \int |f|^p dx$, die L^2 -Norm ist also gerade die in Gleichung (2.20) definierte Erhaltungsgröße Leistung bzw. Masse.

Die Lösung E existiert, solange die H^1 Norm endlich bleibt, die H^1 Norm ist definiert als $\|E\|_{H^1} \equiv (\|E\|_2^2 + \|\nabla E\|_2^2)^{1/2}$. Somit wird eine Singularität definiert durch die Existenz einer endlichen Zeit $t_0 < \infty$, so daß $\|E\|_{H^1} \rightarrow \infty$ für $t \rightarrow t_0$. Dies bedeutet, daß die Gradientennorm $\|\nabla E\|_2$ und damit auch $\max |E(\vec{r}, t)|$ im selben Limit divergieren [17, 42].

Die Existenz dieser singulären Dynamik folgt aus dem Verschwinden des sogenannten Virialintegrals

$$I(t) \equiv \|\vec{r}E\|_2^2 = \int x^2 |E|^2 d^2x \rightarrow 0 \quad (2.22)$$

für $t \rightarrow t_0^*$. Der Zeitpunkt t_0^* , an dem $I(t = t_0^*)$ verschwindet, ist im allgemeinen später als der Zeitpunkt der Singularität t_0 , aber endlich.

$I(t)$ ist ein Maß für das Quadrat der mittleren Breite des Wellenpakets, seine Zeitentwicklung wird durch die Gleichung $\partial_t^2 I(t) = 8H$ beschrieben (H ist der in (2.16) definierte Hamiltonian). Man sieht leicht, daß ein gegebenes Wellenpaket mit $H < 0$ unvermeidlich in eine Punktsingularität kollabiert.

Zusätzlich zeigt die Ungleichung [33]

$$\|E\|_2^2 \leq \|\nabla E\|_2 \|\vec{r}E\|_2, \quad (2.23)$$

daß nichttriviale Lösungen in der Gradientennorm divergieren, wenn $t \rightarrow t_0^*$, so daß die Lösung nicht global in H^1 überleben kann.

Eine notwendige Bedingung für die Singularität ist $\|E\|_2^2 > N_c \approx 11.68$. Hier ist die kritische Masse N_c die Norm der stationären Lösung $E(r, t) = \phi_0(r)e^{it}$ [43], wobei ϕ_0 die positive, radialsymmetrische Grundzustandslösung der Gleichung $-\phi_0 + (1/r)\partial_r r \partial_r \phi_0 + \phi_0^3$ ist.

In radialsymmetrischer Geometrie kann ein kollabierendes Feld mit folgendem Ansatz selbstständig modelliert werden:

$$E(r, t) = \frac{1}{R(t)} \phi(\xi, \tau) e^{i\tau - i\beta \xi^2/4}, \quad (2.24)$$

2 Nichtlineare Schrödingergleichung

wobei β eine Funktion der Zeit $\beta(t) \equiv -R\dot{R}$ (der Punkt bedeutet wie üblich Ableitung nach der Zeit) ist, $\xi \equiv r/R(t)$ die räumliche radiale Koordinate, reskaliert mit dem Radius des Wellenpakets $R(t)$, und τ eine reskalierte Zeit $\tau \equiv \int_0^t du/R^2(u)$.

Setzt man den Ansatz (2.24) in die zweidimensionale nichtlineare Schrödingergleichung (2.1) mit $s = 0$ ein, so erhält man als transformierte Gleichung

$$i\partial_\tau \phi + \Delta_\xi \phi + |\phi|^2 \phi + [\varepsilon(\tau)\xi^2 - 1]\phi = 0 \quad (2.25)$$

mit $\Delta_\xi \equiv (1/\xi)\partial_\xi \xi \partial_\xi$ und

$$\varepsilon_\tau \equiv -\frac{1}{4}R^3\ddot{R} = \frac{\beta^2 + \beta_\tau}{4} . \quad (2.26)$$

Um nun die Skalierung $R(t)$ zu bestimmen, nimmt man an, daß Lösungen der Gleichung (2.25) einen selbstähnlichen Zustand erreichen, d. h. $\partial_\tau \phi \rightarrow 0$, während die Funktionen ε und β gegen stationäre Werte ε_0 und β_0 konvergieren, indem sie $\varepsilon \approx \beta^2/4$ mit $|\partial_\tau \beta| \ll \beta^2$ erfüllen.

Man unterteilt nun die Lösung ϕ in zwei Beiträge, den Kern ϕ_c und den „Schwanz“ ϕ_t :

$$\phi(\xi, \tau) = \phi_c(\xi, \tau) + \phi_t(\xi, \tau) , \quad (2.27)$$

wobei ϕ_c dem zentralen Teil von ϕ entspricht, d.h. der Lösung für $\xi < \xi_t$. In diesem Bereich kommt ϕ_c dem selbstähnlichen Zustand $\phi_0(\xi)$ (der stationären Lösung von (2.25), wie oben eingeführt) sehr nahe, man kann es also störungstheoretisch als Taylor-Reihe beschreiben:

$$\phi_c(\xi, \varepsilon) = \phi_0(\xi) + (\varepsilon - \varepsilon_0) \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon_0} + \dots \quad (2.28)$$

Im Gegensatz dazu erstreckt sich ϕ_t über das verbleibende Gebiet $\xi > \xi_t$, wo man die kubische Nichtlinearität vernachlässigen kann. ϕ_t ist also die Lösung der parabolischen Zylindergleichung [4, 14, 15, 24, 21], die wie folgt aussieht:

$$\phi_t(\xi, \varepsilon) \approx C(\varepsilon) \frac{e^{i\sqrt{\varepsilon}\xi^2/2}}{\xi^{1+i/2\sqrt{\varepsilon}}} , \quad |C(\varepsilon)| \sim \varepsilon^{-1/4} e^{\pi/4\sqrt{\varepsilon}} . \quad (2.29)$$

Setzt man nun die Gleichungen (2.27), (2.28) und (2.29) in die Massenkontinuitätsgleichung für ϕ

$$\int_0^\varepsilon \partial_\tau |\phi(\xi', \tau)|^2 \xi' d\xi' = -2|\phi(\xi, \tau)|^2 \xi \partial_\xi \arg(\phi(\xi, \tau)) \quad (2.30)$$

ein, so findet man, daß die Funktion ε folgender Gleichung genügt:

$$\partial_\tau \varepsilon \approx -2K e^{-\frac{\pi}{2\sqrt{\varepsilon}}} , \quad (2.31)$$

mit einer positiven Konstante K . Diese Funktion geht zusammen mit β asymptotisch gegen Null. Es folgt so eine log-log Kontraktionsskala

$$R(t) = R(0) \sqrt{\frac{2\pi(t_0 - t)}{\ln \ln \left[\frac{1}{t_0 - t} \right]}}, \quad (2.32)$$

nachdem man $\beta(t) = -R\dot{R}$ und $\tau(t) \approx \ln[1/(t_0 - t)]$ benutzt hat. Im Gegensatz dazu findet man im isotropen dreidimensionalen Fall einen starken, nicht nur logarithmischen, Kollaps.

2.4 Selbstfokussierung in dreidimensionalen anisotropischen Medien

Im folgenden nehmen wir nun die z -Abhängigkeit in Gleichung (2.1) wieder hinzu, d.h. wir beschäftigen uns mit dem Fall anisotroper Dispersion $s < 0$.

Frühere Arbeiten [34, 11, 23] zeigen, daß die Evolution nun durch zwei Effekte beeinflusst wird, einmal die bekannte zweidimensionale Kompression in der transversalen Ebene und andererseits eine Defokussierung in longitudinaler Richtung. Die Kombination dieser Effekte bewirkt zunächst eine Kompression in transversaler Richtung, doch schließlich wird der Puls longitudinal auseinandergerissen und in zwei Pulse zerteilt. Dieses Ereignis wird „Splitting“ genannt.

Numerische Simulationen von gaußförmigen Pulsen als Anfangsbedingung zeigten, daß dieser Effekt ab einer unteren Schranke für die maximale transversale Masse $N_{\perp}(0)$ auftritt, wobei letztere wie folgt definiert wird:

$$N_{\perp}(0) = \int dx dy |E(x, y, z = 0, t = 0)|^2 \quad (2.33)$$

Beispielsweise wurde in [11] ein Splitting-Event ab $N_{\perp}(0) \approx 1.3N_c$ gefunden, wobei N_c die kritische Masse für einen Kollaps in der zweidimensionalen nichtlinearen Schrödingergleichung ist.

Neuere Arbeiten [32, 8] zeigen, daß bei Massen $N_{\perp}(0) \approx 1.4N_c \dots 1.5N_c$ das Aufsplitten klar zu beobachten ist und die beiden entstandenen Pulse mit unterkritischer transversaler Masse schließlich dispergieren.

Man sieht an diesen Beispielen, daß negative Dispersion tatsächlich den transversalen Kollaps verhindern kann.

Luther *et al.* [23] beschrieben die Begrenzung des Kollapses in einer selbstähnlichen Behandlung des Term $s\partial_z^2 E$ als diffuse Störung, die die Ebenen mit höchster transversaler Energie (d. h. mit dem kleinsten zeitlichen Fokuspoint t_0) dämpfen. Diese Analyse gilt für Wellen mit Massen nahe der kritischen Masse und $|s| \ll 1$.

Im Gegensatz dazu untersuchten Zharova und Mitarbeiter in [45] den Fall $N_{\perp}(0) \gg N_c$ und $s = -1$ und sagten folgendes Szenario voraus: Lokalisierte Wellen werden anfangs in longitudinaler Richtung gedehnt und zerfallen schließlich in mehrere Pulse, die nach langer Zeit

dann dispergieren. Diese Behauptung wurde durch numerische Simulationen in achsensymmetrischer Geometrie gestützt.

2.4.1 Theorie von Fibich und Papanicolaou

Um einen besseren Zugang zu dem Problem zu erhalten, entwickelten Fibich und Papanicolaou [13, 14] eine aufwendige Störungstheorie, die im Fall kleiner anisotroper Dispersion ($|s| \ll 1$) und einer leicht überkritischen transversalen Masse $N_\perp \gtrsim N_c$ gilt.

Ihr Verfahren besteht darin, den asymptotischen selbstähnlichen Zustand des zweidimensionalen Systems zu stören. Dieser asymptotische Zustand lautet für $t \rightarrow t_0$:

$$E_s(r, t, z) = \frac{1}{R(t, z)} \phi_0(\xi) e^{iS(r, z)} , \quad S(r, z) = \tau(t, z) + \frac{R_t(t, z)}{4R(t, z)} r^2 \quad (2.34)$$

mit $\xi \equiv r/R(t, z)$ und $\tau(t, z) \equiv \int_0^t dt' / R^2(t', z)$. ϕ_0 ist wieder der bekannte radialsymmetrische Grundzustand und $R(z, t)$ bezeichnet die Skalierung der radialen Distanz, abhängig von z und t . In Erweiterung des zweidimensionalen Falles ist R jetzt nicht nur von t sondern auch von z abhängig, um die Modifikationen durch den Term $s\partial_z^2 E$ miteinzubeziehen.

Diese Störungstheorie ist nur gültig für ein selbstfokussierendes Feld mit $R(z, t) \rightarrow 0$ in der Nähe des Kollapszeitpunktes t_0 unter den Annahmen, daß nicht nur $s\partial_z^2 E$ im Verhältnis zu den anderen Termen in Gleichung (2.1) klein bleibt, sondern auch die Funktionen β und ε aus Gleichung (2.26) viel kleiner als eins bleiben, während sich die Form des Feldes E dem selbstähnlichen Zustand ϕ_0 annähert.

Unter diesen Bedingungen findet man als Gleichung für ε

$$\varepsilon_t + \frac{v(\varepsilon)}{R^2} = \frac{(f_1)_t}{2M} - \frac{2f_s}{M} \quad (2.35)$$

wobei $v(\varepsilon) \sim K e^{-\pi/2\sqrt{\varepsilon}}$ aus Gleichung (2.31) folgt, $M \equiv \int \xi^2 \phi_0^2 d^2\xi$,

$$f_1(z, t) \equiv 2sR^3 \operatorname{Re} \int \left((\partial_z^2 E_s) e^{-iS} [1 + \xi \nabla_\xi] \phi_0(\xi) \right) d^2\xi \quad (2.36)$$

und

$$f_2(z, t) \equiv sR^2 \operatorname{Im} \int (E_s^* (\partial_z^2 E_s)) d^2\xi . \quad (2.37)$$

In den Grenzfällen $e^{-\pi/2\sqrt{\varepsilon}} \ll |(f_1)_t|/|f_2| \ll 1$ und $f_2 \sim sN_c \tau_{zz}$ bestimmt das dynamische System

$$\varepsilon \equiv -\frac{1}{4} R^3 \ddot{R} , \quad \varepsilon_t \approx -2sN_c \tau_{zz}/M , \quad \tau_t = 1/R^2 \quad (2.38)$$

die Entwicklung der Amplitude der Welle $\sim 1/R$ abhängig von z zu verschiedenen Zeiten.

Analysiert man das erhaltene System, so zeigt sich in $R(z, t)$ tatsächlich das erwartete Bild eines Splittings des Pulses in zwei symmetrisch entlang der z -Achse lokalisierte Strukturen. Um dies zu sehen, stellt man sich den dreidimensionalen Puls zerlegt in zweidimensionale Scheiben vor. Jede dieser Scheiben kontrahiert mit der Skala $R(t, z) = R(t_0(z) - t)$. Dabei ist $t_0(z)$ die Kurve der Kollapszeitpunkte, als Funktion von z . Der früheste Kollaps wird erwartet beim Minimum von $t_0(z)$, d.h. bei $z = z_0$, so daß $\dot{T}_0 \equiv d_z t_0|_{z_0} = 0$ und $\ddot{d}_{zz} t_0|_{z_0} > 0$, wobei das Minimum der Kollapszeit natürlich bei den Scheiben mit höchster transversaler Masse liegt.

Die Störung von ε ergibt sich durch Integration des Systems zu

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \gamma(-\ddot{T}_0 \tau + \dot{T}_0^2 \tau_t) \quad (2.39)$$

mit $\varepsilon_0 = \varepsilon(0, z) - \gamma \dot{T}_0^2 / R^2(0, z)$ und $\gamma = -2sN_c/M$. So sieht man, daß der Effekt der anisotropen Dispersion eine Verkleinerung von ε zu negativen Werten an den Scheiben größter Masse bewirkt und somit einen Kollaps verhindert. Die Symmetrie in z -Richtung verursacht so die Bildung von zwei Pulsen auf jeder Seite der z -Achse, im Falle eines Anfangspulses, der symmetrisch um $z_0 = 0$ ist.

Der Anwendungsbereich der gerade vorgestellten Methode ist leider sehr eingeschränkt. Die grundlegende Annahme $|\beta|, \varepsilon \ll 1$ zur Herleitung der Gleichungen (2.35) und (2.38) bricht zusammen, sobald der Term $s\partial_z^2 E$ nicht mehr nur eine kleine Störung ist und starke longitudinale Gradienten in der Nähe des Kollapszeitpunktes t_0 entstehen läßt. Schon für Wellen mit einer Masse von nur 10% Abweichung über dem kritischen Schwellwert N_c ist die Vorhersage der Gleichung (2.38) nicht mehr eine Dispersion der gesplitteten Peaks, sondern stattdessen wiederum ein kollapsartiges Verhalten mit divergierenden Amplituden.

Die Abbildung 4.13 zeigt im Vorgriff auf die Ergebnisse die numerisch bestimmte Evolution eines überkritischen Pulses mit $N_\perp(0) \approx 1.1N_c$. Es ist klar zu erkennen daß die gesplitteten Pulse zu späten Zeiten auseinanderlaufen und keineswegs kollabieren, wie es die Störungstheorie vorhersagen würde.

Somit ist die Theorie von Fibich und Papanicalaou aufgrund ihrer Konstruktion nicht in der Lage, das späte Verhalten der gesplitteten Pulse vorherzusagen (für Zeiten $t > t_0$). Nichtsdestotrotz wurde in [13, 14] argumentiert, daß kein weiteres Splitting der entstandenen Peaks entstehen könne, da die zweidimensionale Fokussierung unwichtig werden würde. Die später präsentierten Ergebnisse belegen jedoch, daß auch nach der ursprünglichen Kollapszeit t_0 eine weitere Fokussierung und ein weiterer Zerfall der Pulse möglich ist.

2.4.2 Ein alternativer Ansatz von Bergé, Rasmussen, Kuznetsov et al.

Ein anderer Weg, das Phänomen des Splittings eines Pulses zu beschreiben, wurde von Bergé, Rasmussen, Kuznetsov und anderen [7, 8, 6] gewählt. Aus der dreidimensionalen nichtlinearen Schrödingergleichung (2.1) lassen sich Evolutionsgleichungen für die mittleren Radien in

transversaler und longitudinaler Richtung herleiten:

$$\partial_t^2 I_z(t) \equiv \partial_t^2 \|zE\|_2^2 = 8s^2 \|\partial_z E\|_2^2 - 2s \|E\|_4^4, \quad (2.40)$$

$$\partial_t^2 I_\perp(t) \equiv \partial_t^2 \|rE\|_2^2 = 8 \|\nabla_\perp E\|_2^2 - 4 \|E\|_4^4, \quad (2.41)$$

wiederum mit $\|f\|_p^p \equiv \int |f|^p d^2 r dz$. Ausgehend von diesen Ausdrücken, wobei zur Vereinfachung $s = -1$ gesetzt wurde, kann gezeigt werden, daß für beliebige Anfangsbedingungen $I_z(t)$ in endlicher Zeit nicht verschwindet, sondern sogar durch eine positive untere Schranke begrenzt wird. In Bezug auf die Größe $I_\perp(t)$ wurde gezeigt, daß ein transversaler Kollaps mit $I_\perp \rightarrow 0$ in einem Regime absoluter Kompression nicht stattfinden kann, d. h. falls $\dot{I}_z < 0$ und $\dot{I}_\perp < 0$ in einer Umgebung um t_0^* . Dieses Verhalten folgt für ein beliebiges Zeitintervall $[T_0, t_0^*]$, in dem die Welle in allen Richtungen kollabiert aus der Abschätzung [6]

$$\mathcal{E}(t) = \dot{I}_z \dot{I}_\perp + 4H(I_\perp - 2I_z) - 4N^2 \ln(I_\perp) - 2N^2 \ln(I_z) \leq \mathcal{E}(T_0) < \infty, \quad (2.42)$$

so daß $I_\perp(t)$ unter obigen Annahmen nicht verschwinden kann und somit keine singuläre Konzentration der Pulsintensität, die zu einem Kollaps in der nichtlinearen Schrödingergleichung führen würde, möglich ist.

Zusätzlich wurde der Prozess des Aufsplittens mit Hilfe einer quasi-selbstähnlichen Analyse untersucht. Es wurden zwei räumliche Skalen benutzt, eine longitudinale Ausdehnung $Z(t)$, von der angenommen wurde, daß sie zunimmt, sowie eine transversale Skala $R(t)$, die in der Nähe des Fokuspunkts t_0 kleiner wird. Der folgende selbstähnliche Ansatz für die zwei Skalen enthaltende Lösung wurde benutzt:

$$E(\vec{r}, z, t) = \frac{\sqrt{A}}{R(t)\sqrt{Z(t)}} \tilde{\phi}(\xi, \zeta, \tau(t)) \exp \left\{ i\lambda\tau(t) + i\frac{R_t R}{4} \xi^2 - i\frac{Z_t Z}{4} \zeta^2 \right\}, \quad (2.43)$$

$$\tau(t) \equiv \int_0^t \frac{du}{R^2(u)}, \quad \xi \equiv \frac{r}{R(t)}, \quad \zeta \equiv \frac{z}{Z(t)}. \quad (2.44)$$

Hier ist A ein konstanter Intensitätsfaktor und $\lambda > 0$ bezeichnet den Eigenwert der NLS, welcher der lokalisierten Eigenfunktion $\tilde{\phi}$ zugeordnet ist.

Setzt man den Ansatz (2.43) in die nichtlineare Schrödingergleichung (2.1) mit $s = -1$ ein, so erhält man eine transformierte Gleichung für $\tilde{\phi}$, welche die zeitabhängigen Funktionen

$$\epsilon_R = [a_R^2 + \partial_\tau(a_R)]/4 = -R^3 R_{tt}/4 \text{ und } \gamma \epsilon_Z = -R^2 Z Z_{tt}/4 \quad (2.45)$$

mit $a_R \equiv -RR_t$ und $\gamma(t) \equiv R^2(t)/Z^2(t)$ enthält. Für t gegen t_0 kann argumentiert werden, daß im selbstähnlichen Limes $\partial_\tau \tilde{\phi} = 0 \rightarrow 0$ beide Funktionen in (2.45) gegen Werte vergleichbaren Betrages $|\epsilon|$ tendieren, während $\tau(t)$ gegen $\tau(t_0) = \infty$ geht.

Unter Benutzung des schnellen Abfalls von $\gamma(t) \rightarrow 0$ findet man, daß die Eigenfunktion $\tilde{\phi}$, nach entsprechender Renormierung, der folgenden quasi-zweidimensionalen Gleichung genügt:

$$i\partial_\tau \tilde{\phi} + \partial_\xi^2 \tilde{\phi} + (1/\xi)\partial_\xi \tilde{\phi} + [\epsilon(\xi^2 + \zeta^2) - \lambda]\tilde{\phi} + |\tilde{\phi}|^2 \tilde{\phi} = 0. \quad (2.46)$$

Hier verschwinden die reskalierten z -Ableitungen mit $\gamma(t)$. Die Variable ζ spielt die Rolle eines Lokalisierungsparameters, da $\tilde{\phi}$, welches $\partial_\tau \tilde{\phi} \rightarrow 0$ genügt, nur dann lokalisiert entlang der ζ -Achse sein kann, wenn $\tilde{\lambda} \equiv \lambda - \varepsilon \zeta^2 > 0$. Die mit Gleichung (2.46) verbundene Massenkonservierungsgleichung, die wie im zweidimensionalen Fall den Massenaustausch in der transversalen Ebene zwischen Kern und asymptotischer äußerer Lösung beschreibt, führt schließlich auf

$$K \partial_t \varepsilon = -2 \exp(-\pi(\lambda - \varepsilon \zeta^2)/(2\sqrt{\varepsilon})) \quad (2.47)$$

mit $K > 0$. Es ergibt sich, daß $a_R \sim 2\sqrt{\varepsilon}$ positiv im lokalisierenden Bereich $\zeta < \zeta^* \equiv \sqrt{\lambda/\varepsilon}$ ist, so daß man eine Kontraktionsrate nahe der in (2.32) erhält, aber negativ im delokalisierenden Bereich $\zeta > \zeta^*$, in dem $R(t)$ dispergiert. Diese Skala muß also in der Nähe des Übergangs ζ^* , an dem $|E|^2$ ein Maximum erreicht, minimal werden. Im Grenzfall $\zeta \rightarrow \zeta^*$ führt Gleichung (2.47) zu $\varepsilon_R \sim -2\tau < 0$ für $\tau \rightarrow \infty$, so daß $R(t)$ schließlich dispergiert und nicht verschwindet. Somit ist kein transversaler Kollaps möglich. Stattdessen entstehen symmetrisch zwei Peaks um $z = \pm Z(t_0)\zeta^*$, was das Auftreten des Aufsplittens erklärt.

Für Anfangsbedingungen mit hohen Energien ($N_\perp \gg N_c$) wurde geschlossen, daß sich dieser Prozess fortsetzen könne, indem obige Analyse wiederum auf die entstandenen neuen Pulse unabhängig vom Partnerpuls angewendet wird. Da dieser Prozess sich nur fortsetzen kann, bis die Masse die kritische Masse unterschreitet, wurde die Gesamtzahl der entstehenden Zellen zum Doppelten des Verhältnisses $N_\perp(t_0)/N_c$ abgeschätzt, was auch mit experimentellen Ergebnissen in optischen Versuchen zusammenpaßte [32, 12].

Wie in [41] betont wird, ist die Frage, ob nun ein Kollaps in endlicher Zeit auftreten kann, nach wie vor ungelöst. Auch die Frage, ob nach einem ersten Splitting weitere folgen können ist noch offen, da es keine numerischen Arbeiten gab, die das Auftreten von mehrfachem Splitting eindeutig nachweisen. In dieser Arbeit werden diese beiden Fragen numerisch untersucht, und wir werden insbesondere sehen, daß ein weiteres Aufsplitten möglich ist, jedoch nicht symmetrisch sondern an den äußeren Seiten der entstandenen Pulse.

2.5 Modulationsinstabilitäten

Wie bereits beschrieben, findet man stationäre Lösungen zur nichtlinearen Schrödingergleichung der Form $E(r, t) = \phi_0(r; \lambda) e^{i\lambda t}$, wobei ϕ_0 Lösung der Differentialgleichung

$$-\lambda \phi_0 + \Delta_\perp \phi_0 + \phi_0^3 = 0, \quad \lambda > 0 \quad (2.48)$$

ist.

Verändert man nun diese stationären Lösungen durch Störung entlang der z -Achse, so kann man die sogenannten Modulationsinstabilitäten untersuchen. Wir analysieren die Stabilität eines solitonartigen Zustandes bei Störung durch Terme der Form $(a(\vec{r}) + ib(\vec{r})) \exp(ikz + \gamma t)$, die durch die Anwachsrate γ für die reellen lokalisierten Funktionen $a(\vec{r})$ und $b(\vec{r})$ charakterisiert sind.

Im eindimensionalen Fall ($\nabla_{\perp}^2 = \partial_x^2$) zeigten Zakharov und Rubenchik [44], daß im Limes kleiner k die Anwachsrate für die instabile sogenannte gerade Mode durch $\gamma^2 = 4s\lambda k^2$ gegeben ist. Dies führt zu einem Einschnürverhalten im Falle $s > 0$. Die Anwachsrate für die ungerade Mode $\gamma^2 = -4s\lambda k^2/3$ führt zu einer Verbiegung im Falle $s < 0$, vergl. auch Referenzen [20, 35]. Für die hier untersuchten zweidimensionalen solitären Wellen zeigt sich, wie gleich beschrieben wird, daß beide Instabilitäten gleichzeitig auftreten können, wenn $s < 0$ ist.

Im Falle achsensymmetrischer Lösungen, d. h. die Abhängigkeit vom azimuthalen Winkel wird ignoriert, lautet der Laplace-Operator $\Delta_{\perp} = \partial_r^2 + (1/r)\partial_r$. Die Lösung ϕ_0 kann dann gestört werden als

$$E(r, z, t) = (\phi_0(r; \lambda) + \varepsilon \phi_1(r, z, t)) \exp(i\lambda t) \quad (2.49)$$

mit $\varepsilon \ll 1$. Die Störung ϕ_1 kann zerlegt werden in zwei reelle Normalmoden a, b , so daß $\phi_1(r, z, t) = (a(r) + ib(r))e^{ikz - \lambda t}$. Setzt man den Ansatz (2.49) in die nichtlineare Schrödingergleichung (2.1) ein und linearisiert die entstehende Gleichung, so erhält man das nicht selbstadjungierte Eigenwertproblem

$$(L_1 + \mu)a = -\gamma b, (L_0 + \mu)b = \gamma a \quad (2.50)$$

mit $L_0 = \lambda - \nabla_{\perp}^2 - \phi_0^2$, $L_1 = \lambda - \nabla_{\perp}^2 - 3\phi_0^2$ und $\mu \equiv sk^2$. Dieses Spektralproblem kann analytisch gelöst werden, indem man die Störungen auf die marginal stabilen Moden mit $\gamma = 0$ im Limes langer Wellenlängen $k \rightarrow 0$ bestimmt. In diesem Grenzfall bilden die Eigenzustände von Gleichung (2.50) eine orthogonale Basis von vier lokalisierten Eigenvektoren. Störungstheorie führt dann zu [20, 35, 7]

$$\gamma^4 \approx 16\lambda^2 \mu \frac{\langle \phi_0^2 \rangle}{\langle r^2 \phi_0^2 \rangle}. \quad (2.51)$$

Man erhält $\gamma^2 \sim \lambda^{3/2} \sqrt{|s|k^2}$ mit einem Extremum bei $|s|k^2 \sim \lambda$, für Eigenmoden, die in führender Ordnung mit $a \approx \gamma \partial_{\lambda} \phi_0$, $b \approx \phi_0$ skalieren. ϕ_0 und $\partial_{\lambda} \phi_0$ sind gerade Funktionen, die maximal im Zentrum sind und für $r \rightarrow \infty$ verschwinden. Dies bedeutet, daß die Äquipotentialflächen von ϕ für $\varepsilon \neq 0$ in periodische Bunches aufgesplittet werden, mit der Periodizitätslänge $2\pi/k$. Somit ist ϕ_0 modulationsinstabil bezüglich longitudinalen Störungen im Grenzfall langer Wellenlängen $k \rightarrow 0$ für beide Vorzeichen der Dispersion s .

Diese Ergebnisse sind jedoch nur gültig für axialsymmetrische Störungen, jegliche Abhängigkeit vom Winkel ist vernachlässigt worden. Betrachtet man die volle Geometrie (r, θ, z) , so kann sich die Natur der Instabilitäten ändern, da der azimuthale Winkel ϕ im transversalen Laplace-Operator $\Delta_{\perp} = \partial_r^2 + (1/r)\partial_r + (1/r^2)\partial_{\theta}^2$ erscheint. In diesem Fall bestehen nicht axialsymmetrische Störungen, charakterisiert durch eine Phase der Form $e^{im\theta}$ mit $|m| = 1$, aus ungeraden Normalmoden, aufgespannt durch $e^{im\theta}\partial_r\phi$ und $e^{im\theta}r\phi$. Diese Moden tragen zur Instabilität des Wellenleiters bei, indem sie das Zentrum verschieben und ein spontanes Einknicken in Medien mit negativer Dispersion ermöglichen.

Die Anwachsrate im Grenzfall großer Wellenlängen ist dann gegeben durch $\gamma^2 \approx -2s\lambda k^2$ [20, 35]. Im Gegensatz dazu ist für $s > 0$ der Wellenleiter gegenüber dieser Art von Störungen stabil. Aus diesen Abschätzungen kann man ableiten, daß für kleine k die Formierung von Bunches dominieren sollte, da $\gamma_{bunch}^2 > \gamma_{snake}^2$ für $k \rightarrow 0$. Andererseits sollte der Wellenleiter eher einknicken für große Wellenzahlen $k > 1$. Diese Voraussage erhält man, wenn man a priori die Abschätzungen $\gamma_{bunch}^2 \sim k$ und $\gamma_{snake}^2 \sim k^2$ auf große Wellenzahlen extrapoliert. Um diesen Punkt zu klären, muß man die Entwicklung dieser Instabilitäten und ihre gegenseitige Wechselwirkung numerisch untersuchen, was später auch durchgeführt wird.

3 Numerische Verfahren

3.1 Einleitung

Ein wesentlicher Teil bei der Bearbeitung des Themas dieser Arbeit war die Entwicklung, das Testen und das Anwenden geeigneter fortgeschrittener numerischen Methoden.

In diesem Abschnitt werden zunächst die benutzten Integrationsverfahren vorgestellt. Für die Integration der dreidimensionalen nichtlinearen Schrödingergleichung (2.1) auf dem Basisgitter wurde ein Operator-Splitting Verfahren genutzt, welches den Vorteil ausnutzt, daß die Lösungen des linearen bzw. nichtlinearen Teilproblems im Fourier- bzw. Ortsraum exakt bekannt sind.

Für die Integration auf den verfeinerten Gittern wurde ein finite Differenzen Verfahren benutzt, welches eine einfache Behandlung von Randbedingungen ermöglicht und im Gegensatz zur schnellen Fouriertransformation für alle Gittergrößen effektiv arbeitet. Die Invertierung des in diesem semi-impliziten Verfahren auftretenden Operators, der nahe der Eins liegt, erfolgt mit Hilfe eines Iterationsverfahrens vom Gauß-Seidel Typ, der aber aufgrund der blockstrukturierten adaptiven Gitterverfeinerung Mehrgittereigenschaften hat.

Die Zeitentwicklung der untersuchten Probleme zeigt eine starke räumliche Inhomogenität. Während auf einem Großteil des Integrationsgebietes die Strukturen sehr glatt sind, bilden sich in anderen Bereichen aufgrund des kollapsähnlichen Charakters der Schrödingergleichung extrem starke Gradienten. In einer solchen Situation ist die Anwendung des Verfahrens der blockstrukturierten adaptiven Gitterverfeinerung sehr hilfreich, da es nur dort hohe Auflösung benutzt, wo diese auch wirklich benötigt wird. Aufgrund dieser Ressourcen sparenden Eigenschaften ist es möglich, eine wesentlich genauere Integration im Vergleich zu konventionellen Methoden zu erreichen.

Es wird zunächst der grundsätzliche Ablauf einer solchen adaptiv verfeinerten Integration beschrieben, um dann nachher auch einige Details der Umsetzung in Computercode zu erläutern und spezielle Probleme, wie zum Beispiel die Parallelisierung für mehrere Prozessoren, zu erörtern.

3.2 Verfahren auf dem Basisgitter

Die nichtlineare Schrödingergleichung (2.1) kann wie folgt geschrieben werden:

$$\partial_t E = (\mathbf{L} + \mathbf{NL})E , \quad (3.1)$$

wobei die Bezeichnungen $\mathbf{L}$ für den linearen Operator $\mathbf{L}E = i(\Delta_\perp + s\partial_z^2)E$ und $\mathbf{NL}$ für den nichtlinearen Operator $\mathbf{NL}E = i|E|^2E$ gewählt wurden.

Betrachtet man den linearen und nichtlinearen Teil der Gleichung getrennt voneinander, so findet man, daß sich die lineare Gleichung trivial im Fourierraum lösen läßt, während die nichtlineare Gleichung im Ortsraum direkt integrierbar ist. Deshalb wurde die Methode des Operator-Splittings [31, 38] angewandt.

Die lineare Teilgleichung $\partial_t E - \mathbf{L}E = 0$ lautet im Fourierraum:

$$i\partial_t \tilde{E} + (-k_\perp^2 - sk_z^2)\tilde{E} = 0 , \quad (3.2)$$

hier ist $\tilde{E}(k_x, k_y, k_z, t)$ die im Ort Fourier-Transformierte des Feldes $E(x, y, z, t)$ und $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$.

Die Lösung ist trivial:

$$\tilde{E}(k_x, k_y, k_z, t + \Delta t) = \exp(i(-k_\perp^2 - sk_z^2)\Delta t) \tilde{E}(k_x, k_y, k_z, t) \quad (3.3)$$

$$\equiv \tilde{X}_L(\Delta t) \tilde{E}(k_x, k_y, k_z, t) . \quad (3.4)$$

Für die nichtlineare Teilgleichung $\partial_t E - \mathbf{NL}E = 0$ im Ortsraum

$$i\partial_t E + |E|^2 E = 0 \quad (3.5)$$

findet man die Lösung

$$E(x, y, z, t + \Delta t) = \exp(i|E|^2 \Delta t) E(x, y, z, t) \quad (3.6)$$

$$\equiv X_{NL}(\Delta t) E(x, y, z, t) , \quad (3.7)$$

da $\partial_t |E|^2 = E\partial_t E^* + E^*\partial_t E = -iE|E|^2 E^* + iE^*|E|^2 E = 0$ unter Benutzung von (3.5).

Da die exakten Lösungen der Teilprobleme in unterschiedlichen Räumen (Orts- bzw. Fourierraum) bekannt sind, lassen sie sich leider nicht direkt zu einer Lösung des ursprünglichen Problems kombinieren. Für die numerische Integration erhält man jedoch durch die Methode des Operator-Splittings ein Verfahren zweiter Ordnung in der Zeit.

Das Verfahren für die Propagation der Lösung um Δt sieht, ausgehend von der bekannten Lösung $E(t)$, wie folgt aus:

Mit Hilfe der Fast-Fourier-Transformation (FFT) erhält man $\tilde{E}(t)$. Nun wird im Fourierraum ein halber linearer Zeitschritt $\Delta t/2$ ausgeführt. Das Ergebnis $\tilde{E}_*$ wird in den Ortsraum transformiert. Mit Hilfe eines vollen nichtlinearen Teilschritts erhält man aus E_* das nächste Zwischenergebnis E_{**} . Es folgt ein zweiter linearer Halbschritt wie oben, d.h. inkl. Fourier- und Rücktransformation und man erhält somit schließlich das gesuchte $E(t + \Delta t)$.

Mit den oben für die verschiedenen Teilschritte eingeführten Operatoren X_{NL} , $X_L \equiv \text{iFFT } \tilde{X}_L \text{ FFT}$ läßt sich das Verfahren wie folgt beschreiben:

$$\begin{aligned} E_* &= X_L(\Delta t/2) E(t) , \\ E_{**} &= X_{NL}(\Delta t) E_* , \\ E(t + \Delta t) &= X_L(\Delta t/2) E_{**} . \end{aligned}$$

Während der numerischen Integration führt man natürlich viele Zeitschritte hintereinander durch. Am Beispiel von zwei Schritten

$$E(t + 2\Delta t) = X_L(\Delta t/2) X_{NL}(\Delta t) X_L(\Delta t/2) X_L(\Delta t/2) X_{NL}(\Delta t) X_L(\Delta t/2) E(t)$$

sieht man, daß man noch $X_L(\Delta t/2) X_L(\Delta t/2) = X_L(\Delta t)$ ausnutzen kann, d.h. man integriert letztendlich immer abwechselnd einen Schritt im Orts- und im Fourierraum.

Der Nachweis, daß dieses Verfahren tatsächlich zweiter Ordnung in der Zeit ist, wird so erbracht (vgl. Referenz [36]):

Taylor-Entwicklung der Gleichung (3.1) erzielt:

$$E_{\text{exakt}}(t + \Delta t) = E(t) + \Delta t \dot{E}|_t + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{E}|_t + O(\Delta t^3) \quad (3.8)$$

$$= \left[\mathbf{1} + \Delta t (L + NL_0) + \frac{\Delta t^2}{2} ((L + NL_0)^2 + \dot{NL}_0) + O(\Delta t^3) \right] E(t) \quad (3.9)$$

Hier benutzt der Operator NL_0 die Lösung zur Zeit t .

Für die Zeitschritt-Operatoren findet man analog:

$$E_* = X_L(\Delta t/2) E(t) \quad (3.10)$$

$$= \left[\mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2} L + \frac{\Delta t^2}{8} L^2 + O(\Delta t^3) \right] E(t) , \quad (3.11)$$

$$E_{**} = X_{NL}(\Delta t) E_*(t) \quad (3.12)$$

$$= \left[\mathbf{1} + \Delta t NL_* + \frac{\Delta t^2}{2} (NL_*^2 + \dot{NL}_*) + O(\Delta t^3) \right] E_* . \quad (3.13)$$

NL_* benutzt hier das Feld E_* .

Das Ergebnis des Operator-Splitting Verfahrens ist nach Ausmultiplizieren somit:

$$E_{split}(t + \Delta t) = X_L(\Delta t/2) X_{NL}(\Delta t) X_L(\Delta t/2) E(t) \quad (3.14)$$

$$= \left[\mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2} L + \frac{\Delta t^2}{8} L^2 + O(\Delta t^3) \right] \left[\mathbf{1} + \Delta t NL_* + \frac{\Delta t^2}{2} (NL_*^2 + \dot{NL}_*) + O(\Delta t^3) \right] \left[\mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2} L + \frac{\Delta t^2}{8} L^2 + O(\Delta t^3) \right] E(t) \quad (3.15)$$

$$= \left[\mathbf{1} + \Delta t (L + NL_*) + \frac{\Delta t^2}{2} ((L + NL_*)^2 + \dot{NL}_*) + O(\Delta t^3) \right] E(t) . \quad (3.16)$$

Die Differenz der Gleichungen (3.9) und (3.16) ist

$$\begin{aligned} E_{exakt} - E_{split} &= \Delta t (NL_0 - NL_*) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} [(NL_0 - \dot{NL}_*) + (L + NL_0)^2 - (L + NL_*)^2] \\ &\quad + O(\Delta t^3) . \end{aligned} \quad (3.17)$$

Da $E_* = E_0 + \frac{\Delta t}{2} \dot{E}_0 + O(\Delta t^2)$ gilt:

$$NL_* = |E_*|^2 = |E_0|^2 + \frac{\Delta t}{2} (\dot{E}_0 E_0^* + \dot{E}_0^* E) + O(\Delta t^2) , \quad (3.18)$$

$$NL_0 = |E_0|^2 , \quad (3.19)$$

$$\dot{NL}_* = 0 , \quad (3.20)$$

$$\dot{NL}_0 = \frac{d}{dt} |E|^2|_0 = \dot{E}_0 E_0^* + \dot{E}_0^* E . \quad (3.21)$$

Setzt man dies nun in (3.17) ein, so kürzt sich der Fehler erster Ordnung (hervorgerufen durch Berechnung der Nichtlinearität zur falschen Zeit) gegen den Fehler zweiter Ordnung (hervorgerufen durch Annahme eines konstanten E während der Integration) und man erhält:

$$E_{exakt} - E_{split} = O(\Delta t^3) . \quad (3.22)$$

3.3 Verfahren auf den verfeinerten Gittern

Auf den verfeinerten Gittern wurden zur Berechnung der räumlichen Ableitungen finite Differenzen benutzt. Eine pseudo-spektrale Behandlung war aufgrund der erforderlichen Fouriertransformationen von Gittern mit willkürlichen Größen zu ineffektiv.

Die zeitliche Diskretisierung der nichtlinearen Schrödingergleichung erfolgt in einem semi-impliziten Verfahren zweiter Ordnung vom Crank-Nicholson Typ [31, 2], das in ähnlicher Form von Pietsch *et al.* benutzt wurde [30]:

$$\frac{E_{ijkl}^{n+1} - E_{ijk}^n}{\Delta t} = iX^{n+1/2} \frac{E_{ijk}^{n+1} + E_{ijk}^n}{2} . \quad (3.23)$$

Hierbei ist $X^n \equiv \Delta_\perp + s\partial_z^2 + |E_{ijk}^n|^2$, E das in Zeit (n) und Ort (ijk) diskretisierte Feld. Da $E_{ijk}^{n+1/2}$ nicht bekannt ist, wird $X_{ijk}^{n+1/2}$ durch $X_{ijk}^n + \frac{\Delta t}{2}(\partial_t |E|^2)_{ijk}^n$ approximiert, das Verfahren bleibt hierdurch zweiter Ordnung.

Es ergibt sich folgende semi-implizite Gleichung:

$$\begin{aligned} \left[1 - \frac{i\Delta t}{2} \left(X_{ijk}^n + \frac{\Delta t}{2}(\partial_t |E|^2)_{ijk}^n \right) \right] E_{ijk}^{n+1} = \\ \left[1 + \frac{i\Delta t}{2} \left(X_{ijk}^n + \frac{\Delta t}{2}(\partial_t |E|^2)_{ijk}^n \right) \right] E_{ijk}^n . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Um den Operator auf der linken Seite zu invertieren, ist eine Helmholtz-artige Gleichung zu lösen. Da der Operator für kleine Zeitschritte nahe der Eins liegt, benutzen wir die Gauss-Seidel Relaxationsmethode mit red/black Ordering [31, 39] zur numerischen Lösung.

Detailliert sieht die Iteration wie folgt aus: Zuerst wird mit Hilfe eines Euler-Schritts der Startwert der Iteration, eine Näherung für das gesuchte E_{ijk}^{n+1} , vorgegeben. Der Operator auf der linken Seite von (3.24) wird in Diagonal- und Nichtdiagonalanteil zerlegt, auf der rechten Seite stehen nur bekannte Größen. Die Näherung besteht nun darin, den Nichtdiagonalanteil des Operators auf die letzte berechnete Näherung anzuwenden und so nach Auflösen nach dem Diagonalanteil eine neue, bessere Näherung für das gesuchte Feld zu finden. Dieses Verfahren wird iterativ fortgesetzt, bis der relative Fehler unterhalb einer vorgegebenen Schwelle liegt. Durch abwechselnde Benutzung von Feldern mit geraden/ungeraden Ortsindizes (red/black ordering) konvergiert dieses Verfahren um den Faktor zwei schneller.

Bezeichnet man die l . Näherung für E_{ijk}^{n+1} mit $E_{ijk}^{n+1,l}$, so sieht das Verfahren folgendermaßen aus: Der Startwert der Iteration $E_{ijk}^{n+1,0}$ ist

$$E_{ijk}^{n+1,0} = E_{ijk}^n + \Delta t \cdot X_{ijk}^n E_{ijk}^n . \quad (3.25)$$

Die Iteration berechnet $E_{ijk}^{n+1,l+1}$ aus $E_{ijk}^{n+1,l}$ gemäß

$$\begin{aligned} & \left[1 - \frac{i\Delta t}{2} \left(X_{ijk,diag}^n + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t |E|^2)_{ijk}^n \right) \right] E_{ijk}^{n+1,l+1} = \\ & \frac{i\Delta t}{2} X_{ijk,ndiag}^n E_{ijk}^{n+1,l} + \left[1 + \frac{i\Delta t}{2} \left(X_{ijk}^n + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t |E|^2)_{ijk}^n \right) \right] E_{ijk}^n . \end{aligned} \quad (3.26)$$

Wie oben erwähnt, funktioniert dieses Verfahren dann gut, wenn der zu invertierende Operator nahe der Eins liegt. Um dies zu gewährleisten, wird die Konvergenzrate der Iteration kontrolliert. Halbiert sich der relative Fehler nicht mindestens einmal pro Iteration, so wird der Zeitschritt Δt verkleinert, so daß stets eine schnelle Konvergenz gewährleistet ist.

3.4 Adaptive Gitterverfeinerung

Häufig benutzt man zur Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung im Ort ein äquidistantes Gitter, so daß die Werte an den Stützstellen den Werten des Feldes an diesen Stellen, oder dem über eine Zelle gemittelten Wert des Feldes entsprechen. Eine solche Diskretisierung hat den Vorteil, daß man Ableitungen leicht durch schnelle Fouriertransformation bzw. alternativ finite Differenzen finden kann. Auch kompliziertere Geometrien werden durch Wahl eines geeigneten Koordinatensystems auf ein äquidistantes Gitter transformiert (z. B. durch Benutzung von Zylinderkoordinaten).

Verständlicherweise muß die Diskretisierung so fein gewählt werden, daß der Gitterabstand Δx kleiner als die typischen Längen von feinen räumlichen Strukturen liegt, da diese sonst nicht aufgelöst werden könnten. Das Problem hierbei ist ganz klar, daß bei einer äquidistanten Diskretisierung die Auflösung in räumlichen Bereichen ohne feine Strukturen nun eigentlich viel zu groß ist, d. h. sie verbraucht unnötigerweise eine große Menge Rechnerressourcen, nämlich Speicherplatz und Rechenzeit.

Wenn man also Probleme behandelt, bei denen in unterschiedlichen räumlichen Bereichen unterschiedliche Längenskalen auftreten, insbesondere bei Problemen mit singular werdenen Lösungen, so ist es äußerst sinnvoll, die Methode der adaptiven Gitterverfeinerung zugrunde zu legen. Es ist einfach, auch sich zu bewegend Strukturen zu verfolgen, indem man die verfeinerten Gitter aufgrund der bekannten lokalen Geschwindigkeiten mit der Struktur mitbewegt. Im Gegensatz zum Verfahren der finiten Elemente kann man Methoden, die für äquidistante Gitter entwickelt wurden, so zum Beispiel schnelle Löser für die Poisson-Gleichung, weiterhin effektiv nutzen. Auch ist eine nicht nur räumliche, sondern auch zeitliche Adaption möglich. Vorteil der finite-Elemente-Methode ist die einfachere Handhabung von komplexen Randbedingungen, was für das hier untersuchte Problem aber nicht von Bedeutung ist.

Die grundsätzliche Idee dieses Verfahrens ist einfach: Man diskretisiert nur die Teile des Integrationsbereiches hochauflösend, wo die Struktur dieses Feldes dies auch verlangt. Das Wort *adaptiv* drückt hier noch aus, daß die Auflösung des Verfahrens sich automatisch dynamisch den Erfordernissen des Problems anpaßt. Unser Algorithmus ist ähnlich dem von Bell, Berger *et al.* benutzten Verfahren [3]. Da das Verfahren der adaptiven Gitterverfeinerung vom tatsächlich behandelten Problem weitgehend unabhängig gehalten wurde, konnte die Rahmenimplementation auch schon für andere Probleme [16, 18] genutzt werden.

Ein weiterer Vorteil des Verfahrens ist, daß sich neben der räumlichen Diskretisierung auch die zeitliche Diskretisierung, d.h. die Größe eines Zeitschritts anpassen läßt. Bei typischen Problemen aus der Fluidodynamik wird beispielweise die Größe des Zeitschritts durch eine Courant-Friedrichs-Levy Bedingung (siehe z. B. [37, 31]) der Form $\Delta t / \Delta x \leq \text{const}$ begrenzt. Adaptive Gitterverfeinerung ermöglicht es hier, nur auf hochaufgelösten Gittern, d.h. kleinem Δx , auch mit einem entsprechend kleinen Zeitschritt Δt zu arbeiten, während auf den weniger aufgelösten Gittern die Integration schneller erfolgen kann. Auch komplexere Szenarien sind möglich. So lassen sich die Verfeinerungsfaktoren für räumliche und zeitliche Verfeinerung unabhängig voneinander und abhängig von der momentanten Auflösung wählen, um

zum Beispiel eine auf niedrigen Skalen quadratische und auf feinen Skalen linear sättigende CFL-Bedingung optimal behandeln zu können, wie sie in der Hall-Magnetohydrodynamik auftritt.

3.4.1 Ablauf der numerischen Integration

Ausgehend von einer bestehenden Hierarchie von verfeinerten Gittern, wird im folgenden der Integrationsalgorithmus beschrieben:

Gegeben sei eine Situation wie in Abbildung 3.1.

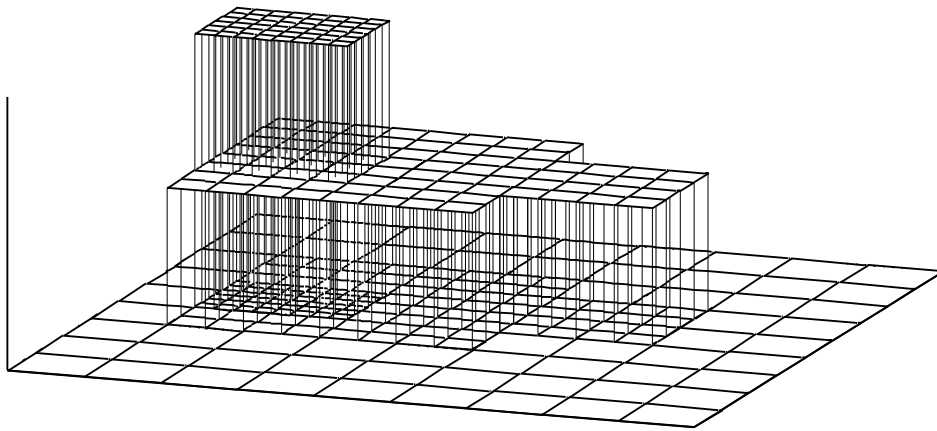


Abbildung 3.1: Beispielshierarchie für adaptive Gitterverfeinerung

Unten erkennt man das Basisgitter mit dem größten Gitterabstand. In einem bestimmten (durch das Problem bestimmten) Bereich wurde die Auflösung als nicht ausreichend empfunden und deshalb jede Zelle in mehrere kleinere unterteilt. In der Mitte der Abbildung sieht man nur dieses sogenannte 1. Level (das Basisgitter wird als 0. Level bezeichnet). Es ist dadurch ausgezeichnet, daß der Gitterabstand hier nur $1/r_s$ des Gitterabstandes auf dem nächstgrößeren Gitter beträgt. Der sogenannte Refinement (Verfeinerungs-) Faktor r_s ist eine ganze Zahl, die angibt, wie stark die Auflösung von einem Gitter zum nächstfeineren erhöht wird, in der Abbildung ist $r_s = 2$, was i.a. auch während der tatsächlichen Simulationen der Fall war. An einigen Stellen war auch doppelte Auflösung nicht ausreichend, deshalb wurde noch einmal verfeinert, oben in der Abbildung sieht man also das 2. Level für sich alleine.

In Abbildung 3.2 sieht man nun die entstandene örtliche Diskretisierung, nur in lokalisierten Bereichen ist die erwünschte hohe Auflösung vorhanden, während außerhalb die Diskretisierung recht grob ist.

Man spricht allgemein von einer *effektiven Auflösung*, die der Auflösung der feinsten Gitter, umgerechnet auf das ganze Integrationsgebiet entspricht. Hat man z. B. eine anfängliche Diskretisierung von 128^3 Gitterpunkten und eine Verfeinerung um drei Level, so nennt man dies

eine effektive Auflösung von 1024^3 , da die Genauigkeit mit der einer vollen Simulation von ebenfalls 1024^3 vergleichbar ist, bloß daß diese Auflösung nur dort zur Verfügung steht, wo auch Bedarf ist.

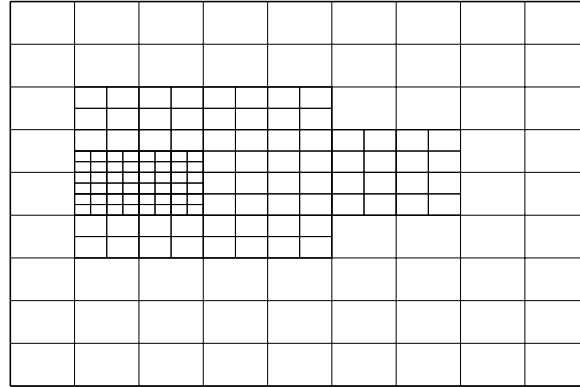


Abbildung 3.2:

Ein Zeitschritt erfolgt nun folgendermaßen: Als Ausgangssituation sind die diskretisierten Felder auf allen Levels zur Zeit t bekannt.

Zunächst erfolgt nun ein normaler Zeitschritt auf dem 0. Level, die Randbedingungen des vollen Integrationsbereiches sind durch das Problem bestimmt. Damit erhält man auf dem 0. Level die Lösung zur Zeit $t + \Delta t$.

Auf dem nächstfeineren Level, hier also Level 1, werden kleinere Zeitschritte $\Delta t/r_t$ gemacht, wobei r_t der zeitliche Refinementfaktor ist. Im Beispiel $r_t = 2$ erfolgt also zunächst ein Schritt von der Zeit t zur Zeit $t + \Delta t/2$, und dann ein zweiter Schritt von $t + \Delta t/2$ zu $t + \Delta t$.

Auch für die Integrationsschritte auf dem feineren Level braucht man natürlich Randbedingungen. Diese werden durch räumliche und zeitliche Interpolation aus dem Feld auf dem nächstgrößeren Gitter zu den Zeiten t und $t + \Delta t$ gewonnen. Natürlich stellt sich hier die Frage, ob man durch diese Interpolation nicht wieder die höhere Auflösung zunichte macht. Dies ist aber nicht der Fall, da ja per Wahl der Gitter das Feld an den Rändern so glatt ist, daß die Auflösung des gröberen Gitters zur Repräsentation ausreicht. Man interpoliert also nur an den Stellen, an denen schon die grobe Auflösung ausreicht. Die höhere Auflösung wird tatsächlich erst im Inneren eines Levels benötigt, da sich hier die entsprechend feineren Strukturen befinden, und dort findet keine Interpolation statt.

Ebenso wichtig ist natürlich, daß die Randbedingungen für die feineren Level, die man ja auf den gröberen Leveln mit Hilfe unvollständiger (da nicht aufgelöster) gemittelter Information gewinnt, im Rahmen der durch die Auflösung des groben Levels gegebenen Genauigkeit exakt sind. Da hier Poisson- bzw. Helmholtzgleichungen gelöst werden, ist dies jedoch kein Problem, auch andere Verfahren wie z. B. Multigrid basieren auf dieser Eigenschaft der Gleichungen.

Nachdem das nächstfeinere Level, im Beispiel hier das 1. Level, nun auch bis zur Zeit $t + \Delta t$ avanciert wurde (dies gilt ebenfalls für alle noch feineren Level, da jeder Integrationsstep rekursiv eine Integration des nächstfeineren Levels aufruft), erfolgt dann noch die Rückprojektion der gewonnenen höher aufgelösten Daten auf das gröbere Level. (Dies geschieht natürlich nur in den Bereichen, die vom 1. Level erfaßt werden, in den anderen Bereichen ist ja ohnehin die Auflösung des gröberen Levels ausreichend).

Dieser *update* genannte Schritt erfolgt, indem einfach die Daten des feineren Levels gemittelt über eine Zelle des gröberen Gitters gemittelt werden und die Werte des gröberen Gitters an den entsprechenden Stellen ersetzen.

3.4.2 Levels und Gitter

Nachdem nun das Prinzip der Integration erklärt ist, muß noch eine Umsetzung auf computer-gerechte Datenstrukturen erfolgen. Während für die Beschreibung der Methode die Levels die grundlegende Struktur sind, muß diese für den Computer weiter verfeinert werden. Da Levels ein Integrationsgebiet beschreiben, in dem die Daten zwar auf äquidistanten Gitterpunkten gegeben sind, das Gebiet selbst aber eine unregelmäßige, dem Problem angepaßte Form hat, wird es aus einer Anzahl von rechteckigen Gittern aufgebaut.

Die Generierung eines neuen Levels läuft wie folgt ab: Zunächst wird anhand eines Kriteriums entschieden, an welchen Gitterpunkten des aktuellen Levels die lokale Auflösung nicht mehr hinreichend ist, so daß an diesen Stellen ein überdeckendes feineres Gitter notwendig ist.

Das Kriterium kann und muß dem Problem angepaßt werden. Eine Methode ist beispielsweise eine Variante der Richardson-Extrapolation. Die gesamte rechte Seite der zu integrierenden Gleichung wird mit Hilfe der Diskretisierung des aktuellen Levels berechnet. Nun wird derselbe Wert noch einmal, unter Benutzung der halben Diskretisierung berechnet, d.h. es wird nur jeder zweite Gitterpunkt benutzt. Ist die Auflösung gut, so sollten diese beiden Werte natürlich möglichst gleich sein, ist die Differenz größer als ein bestimmter Schwellwert, so markiert man den Gitterpunkt als lokal unteraufgelöst. Alternativ kann man dem Problem angepaßte Kriterien verwenden, so z. B. starke Gradienten eines Feldes als Anlaß nehmen, die entsprechende Stelle zu verfeinern, um diese Gradienten gut aufzulösen.

Ein Nachteil dieser Methode ist, daß nicht a-priori klar ist, welchen Wert man als Schwellwert im Kriterium wählen soll. Da es keine geeigneten mathematischen Abschätzungen gibt, bleibt als einzige Methode, die Läufe mit verschiedenen Schwellwerten zu wiederholen, bis man Konvergenz erhält, d.h. eine weitere Erhöhung der Auflösung ändert den Verlauf der Simulation nicht mehr. In der Praxis ist es im allgemeinen recht schnell möglich, diese Konvergenz zu erreichen, da unteraufgelöste Simulationen schnell zu erkennen sind, so daß nur wenige Läufe erforderlich sind.

Als Ergebnis des Markierungsschrittes hat man nun eine Menge von unteraufgelösten Punkten, die mit einem neuen Level mit höherer Auflösung überdeckt werden sollen. Die Methoden

hierzu stammen aus der Bildverarbeitung und sind in [16] genauer beschrieben. Ohne daß auf diese Zerschneidungsalgorithmen näher eingegangen werden soll, zeigt Abbildung 3.3 das Ergebnis dieses Verfahrens:

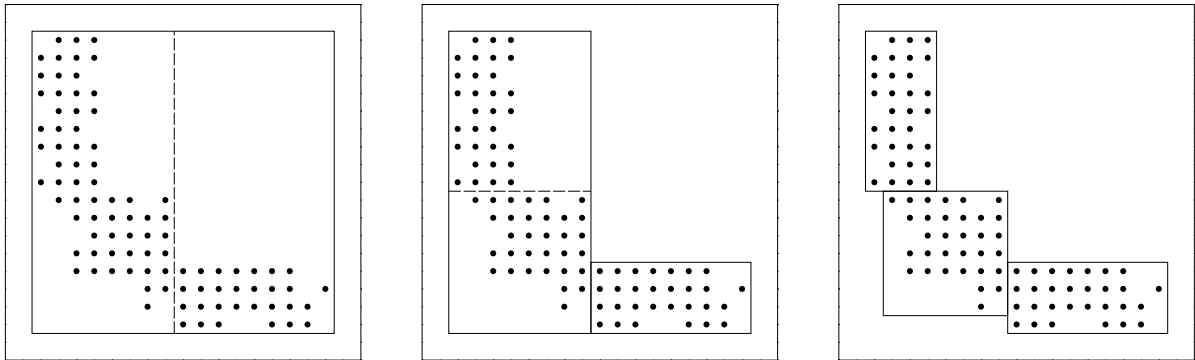


Abbildung 3.3: Überdeckung von unteraufgelösten Gitterpunkten

Wie man sieht, besteht im gezeigten Beispiel das neue Level aus drei rechteckigen Gittern. Dabei werden im allgemeinen auch nicht unteraufgelöste Punkte mitüberdeckt, da die Zerschneidung in immer kleinere Rechtecke nach Erreichen des Maximums einer Kostenfunktion abgebrochen wird. Kleine Gitter sind besser insofern, als daß sie nur wenige Punkte *unnötig* überdecken (die eigentlich nicht aufgelöst werden müssen), aber dafür haben viele kleine Gitter einen hohen Verwaltungs- und Kommunikationsaufwand, da ja globale Probleme gelöst werden. Mit Hilfe einer richtig gewählten Kostenfunktion kann stets eine nahezu optimale Überdeckung erreicht werden.

Da die genutzten Algorithmen als Voraussetzung haben, daß jedes Tochtergitter überall einen direkten Vater hat (also nicht beispielsweise nur einen „Großvater“, der zwei Level größer ist), ist nach der Überdeckung mit neuen Gittern noch ein weiterer Durchlauf nötig, der sicherstellt, daß es diese Bedingung erfüllt wird.

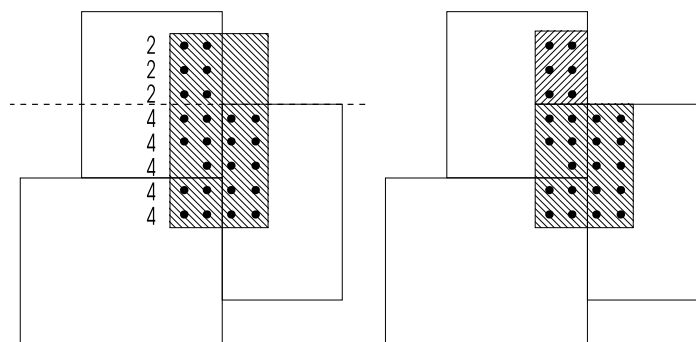


Abbildung 3.4: Einbettung eines Gitters in die Vatergitter

Die Abbildung 3.4 zeigt, wie durch Zerschneiden eines Tochtergitters die entsprechende Konsistenz erzeugt wird.

Es werden zusätzlich weitere Optimierungen verwendet. So wird das zeitaufwendige Suchen nach unteraufgelösten Punkten und Überdecken nicht nach jedem Zeitschritt, sondern nur nach einer gegebenen Anzahl Zeitschritte durchgeführt. Ein zusätzliche Pufferzone um die unteraufgelösten Punkte sorgt dafür, daß auch sich verbreiternde Strukturen hinreichend aufgelöst werden, und die Berechnung der lokalen Geschwindigkeiten ermöglicht das vorsorgliche Überdecken des Bereiches, in das sich die Struktur in der Zeit bis zum nächsten Regridding bewegen wird.

Weiterhin sei angemerkt, daß die Erklärung des Verfahrens hier aufgrund der Klarheit in zwei Dimensionen gegeben wird. In der Implementation ist das Verfahren jedoch für Probleme in ein, zwei und drei Dimensionen geeignet.

3.4.3 Kommunikation

Während der numerischen Integration müssen natürlich Daten zwischen den verschiedenen Gittern kommuniziert werden, um sicherzustellen, daß man letztendlich eine globale Lösung erhält. Zu unterscheiden sind grundsätzlich zwei Probleme: Kommunikation zwischen den (rechteckigen) Gittern eines Levels und Kommunikation zwischen den verschiedenen Levels.

Beide Probleme werden dadurch stark vereinfacht, daß die Gitter zusätzlich zu den gültigen Daten im Inneren noch einen Randbereich von *ghost cells* bekommen. In diesem Randbereich werden gültige Daten von Nachbargittern bzw., falls nicht vorhanden, interpolierte Daten des darunterliegenden Vaters gespeichert. So müssen Differenzenverfahren am Rand keine Sonderfälle beachten, sondern benutzen die gleiche Diskretisierung wie im Inneren. Um auch größere Stencils benutzen zu können und eine gute Konvergenz der Schwarz-Iteration zu erreichen, wurde im allgemeinen jedes Gitter um 4 Punkte in jede Richtung vergrößert.

Terme, deren Diskretisierung lokal ist, wie z. B. die rechte Seite der Gleichung (3.24) sind somit direkt bestimmbar. Zusätzlich sind jedoch noch immer globale Probleme zu lösen, in der Fluidodynamik bzw. Plasmaphysik i.a. Poisson- bzw. Helmholtz-Gleichungen, hier im Falle der nichtlinearen Schrödingergleichung die Invertierung des Operators auf der linken Seite von Gleichung (3.24). Es wurde schon beschrieben, wie diese Invertierung für ein Feld mit Hilfe eines Iterationsverfahrens realisiert wurde, vergleiche Gleichung (3.26).

Dieses Verfahren läßt sich nun auf alle rechteckigen Gitter innerhalb eines Levels anwenden, doch haben wir nur Randbedingungen für den Rand des überdeckten Gebietes (vom Vater). Es werden jedoch natürlich auch Randbedingungen für die Berührungsstellen der einzelnen Gitter untereinander benötigt. Da man den Wert für letztere Randbedingungen erst weiß, nachdem das Problem gelöst wurde, bietet sich auch hier ein Iterationsverfahren an, die sogenannte additive Schwarz-Iteration [19]. Zunächst startet man mit einem Versuch für die richtigen Randbedingungen an den Berührungsstellen, beispielsweise durch Interpolation von Daten

vom Vater. Nun löst man in jedem Gitter das Problem und benutzt die erhaltene Lösung als Randbedingung für die Nachbarkästchen im nächsten Iterationsschritt. Auf diese Weise erhält man schließlich die Lösung des Problems auf dem ganzen Gebiet, die nur durch die Randbedingungen auf dem Rand des Gebiets bestimmt ist.

Für die Schwarz-Iteration ist noch eine Optimierung möglich, die auch implementiert wurde: Sind einige Gitter schon konvergiert, so braucht für diese kein Austausch der Randwerte und weiteres Lösen des Problems mehr durchgeführt werden, so daß hier in den weiteren Iterationsschritten Rechenzeit gespart werden kann.

Wie im gerade Beschriebenen schon angedeutet ist, braucht man für die Lösung des Problems auf einem Level natürlich Randwerte vom nächstgrößeren Level. Da auf dem größeren Level die Daten nur in einer schlechteren Auflösung vorliegen, müssen die Randwerte räumlich interpoliert werden. Dies ist jedoch kein Problem, da ja definitionsgemäß am Rande des verfeinerten Gebiets die Auflösung des Vaterlevels noch ausreichend ist, so daß die Daten hinreichend glatt sind, um eine Interpolation zu rechtfertigen.

Weiterhin muß bedacht werden, daß auf dem Vaterlevel ja mit einem größeren Zeitschritt gerechnet wird, so daß nicht für alle diskreten Zeitpunkte des Tochterlevels die genauen Daten bekannt sind. Doch auch hier läßt sich genau wie oben argumentieren, die zeitliche Auflösung auf dem Vaterlevel ist dem Problem am Rand angepaßt, so daß hier eine zeitliche Interpolation zur Gewinnung von Randdaten zu den benötigten Zeiten auf dem Tochterlevel möglich ist.

Schließlich ist noch zu beachten, daß nicht nur der Transfer von Daten in Richtung vom Vater zu den Randbedingungen für Tochterlevel wichtig ist, sondern daß natürlich auch ein Transfer in umgekehrter Richtung stattfinden muß, damit auch der Vater von den mit höherer Auflösung gewonnen Daten profitieren kann. Dies geschieht im *update*-Schritt, der das Vaterlevel an den überdeckten Stellen mit gemittelten Werten des Tochterlevels aktualisiert, nachdem die Integration des Tochterlevels die gleiche Zeit wie das Vaterlevel erreicht hat.

3.4.4 Umsetzung in C++

Wie aus der obigen Beschreibung ersichtlich, benötigt man innerhalb eines Gitters neben dem tatsächlichen Datenfeld zahlreiche weitere Größen wie die Position des Gitters innerhalb des Integrationsbereiches, die Verfeinerungsstufe, Zeitschritt und Gitterabstand, eine Liste von Nachbar- und Vatergittern und vieles mehr. Durch objektorientierte Programmierung unter C++ war es möglich, solche Daten innerhalb eines *Gitter*-Objektes zu speichern und Features, die z. B. eine einfache Verwaltung von Listen aller Art ermöglichen, zu nutzen.

Der Code wurde so strukturiert, daß ein generischer Teil die allgemeinen Voraussetzungen für adaptive Gitterverfeinerung schafft, während die tatsächlichen numerischen Verfahren, die zur Behandlung einer speziellen Gleichung gebraucht werden, unabhängig ausgewechselt werden können.

Die Benutzung einer modernen, objektorientierten Sprache wie C++ [40, 1], die auch Vererbung unterstützt, erleichtert das Erstellen eines solchen Programms enorm.

Im folgenden werden einige Algorithmen und Datenstrukturen genauer beschrieben:

Hauptprogramm

Das Hauptprogramm sieht, wie bei objektorientierter Programmierung häufig, sehr einfach aus. Nicht dargestellt ist die Funktionalität zum Restarten eines bereits vorhanden Laufes.

```
int main()
{
    Idlist<Level> levels;

    init(levels);
    outputHDF(levels);

    Idlist_iter<Level> levels_iter(levels);

    for (;;) {
        levels_iter.set_first();
        integrate(levels_iter, levels);
    }
}
```

Die grundlegende Datenstruktur ist eine Liste von Instanzen der Klasse *Level*, jede Instanz verwaltet die Daten einer bestimmten Verfeinerungsebene. `levels` ist deklariert als eine (intrusive, doppelt gelinkte, deshalb „Id“) Liste von Instanzen der Klasse *Level*.

Diese Datenstruktur wird mit einer vorgegebenen Anfangsbedingung initialisiert (`init`), danach werden die Daten zur Kontrolle in Dateien ausgegeben (`outputHDF`).

Weiterhin wird ein Iterator zur Liste `levels` deklariert, mit dessen Hilfe man die einzelnen Elemente ansprechen kann.

Der Iterator wird auf das erste Element der Liste gesetzt, das Basislevel, und auf diesem wird nun ein Zeitschritt ausgeführt. (Intern, innerhalb von `integrate` werden dabei auch die Zeitschritte aller verfeinerten Level ausgeführt). Dieser Vorgang, die eigentliche numerische Integration, wird nun endlos wiederholt.

Zeitschritt

Der Zeitschritt auf einem Level erfolgt in der oben bereits angesprochenen Routine `integrate`:

```

void integrate(Idlist_iter<Level> &lev, Idlist<Level> &levels)
{
    // Ausgabe der Felder nach einer gewissen Anzahl Zeitschritte
    // (hier weggelassen)

    // Ausgabe von Kenngrößen (Energie, Maximum, ...) nach einer
    // gewissen Anzahl Zeitschritte (hier weggelassen)

    // Kontrolle der CFL-Bedingung: Bei Ueberschreiten eines Schwellwerts
    // Halbierung des Zeitschritts auf allen Leveln (hier weggelassen)

    for (int n = 0; n < RK_STEPS; n++) {
        cout << "RKSTEP = " << n+1 << endl;
        lev->singlestep(n);
        lev->better_om_boundary();    // be carefull
        lev->schwarz_iteration();    // with order
    }

    if (lev.next() != NULL) {
        lev++;
        lev->calc_default_boundary();
        while (behind(lev())) integrate(lev, levels);
        lev->update();
        lev--;
    }
    lev->check_it(levels);
}

```

Nach administrativen Aufgaben (im Code nur durch Kommentare angedeutet) erfolgt die eigentliche Integration. Da hier Runge-Kutta-Verfahren 3. und 4. Ordnung verwendet wurden, erfolgt ein Zeitschritt in mehreren Stufen. Zunächst wird jeweils in `singlestep` die rechte Seite der Gleichung (3.26) berechnet. In `better_om_boundary()` werden dann an den Rändern von benachbarten Gittern genauere Werte von den Nachbargittern eingesetzt (statt der interpolierten Werte vom Vater) und schließlich in `schwarz_iteration()` der Operator aus Gleichung (3.26) invertiert. Somit sind nun die Größen für den nächsten Runge-Kutta-Teilschritt bekannt und nach Ende der Schleife ist ein kompletter Zeitschritt auf diesem Level ausgeführt.

Der zweite Teil der Funktion `integrate` sorgt nun dafür, daß nun die Integration auf dem nächst feineren Level erfolgt (und rekursiv dann auf dem übernächsten usw.).

Gibt es ein feineres Level, so wird der Iterator `lev` auf dieses feinere Level gesetzt (`lev++`). Auf diesem Level werden nun die Randbedingungen defaultmäßig erst einmal vom Vater in-

terpoliert (`calc_default_boundary()`). Solange das Tochterlevel noch nicht auf dem aktuellen Stand ist, d.h. solange die Daten dort zu einer früheren Zeit gehören, wird rekursiv `integrate` aufgerufen, welches einen Zeitschritt ausführt und so dafür sorgt, daß am Ende der while-Schleife Tochter und Vater Daten zur gleichen Zeit haben.

Abschließend können nun, eben da die Daten zur gleichen Zeit existieren, die überdeckten Bereiche des Vaterlevels mit den gemittelten genaueren Werten des Tochterlevels aktualisiert werden, was in `update` auch geschieht.

Zum Ende eines Zeitschritts wird nun in `check_it` überprüft, ob die Auflösung auch noch überall hinreichend ist. Ist dies nicht der Fall, so wird die Überdeckung dem aktuellen Bedarf angepasst.

Schwarz-Iteration

Die Methode `schwarz_iteration` löst, wie der Name schon sagt, die Operator-Inversion mit Hilfe der Schwarz-Iteration.

```
void Level::schwarz_iteration()
{
    REAL error;
    REAL rg;
    REAL dx = knots->grid->dx[0];

    range(1,rg);
    REAL grid_error=eps_iop*rg;

    Idlist_iter<PDE_Knot> k_i(knots);
    for (; k_i; k_i++) k_i->grid->schwarz_done = false;

    do {
        invert_op();
        error = 0.;
        better_psi_boundary(grid_error,&error);
        cout << "invert_op:    error = " << error/rg << " range = " << rg
              << " level = " << level << endl;
    } while (level > 0 && error > grid_error);
}
```

Zunächst wird aus der vorgegebenen absoluten Schwelle `eps_iop` für das Abbrechen der Iteration ein normalisierter Wert `grid_error` berechnet.

Vor Beginn der eigentlichen Iteration wird noch für alle Gitter innerhalb dieses Levels das Flag `schwarz_done` auf falsch gesetzt, d.h. alle Gitter nehmen an der Iteration teil.

Nun wird zunächst innerhalb von `invert_op()` auf jedem Gitter der Operator invertiert. Danach werden die Ränder mit besseren Werten aus dem Inneren eines Nachbarn, so vorhanden, aktualisiert. Ist die Konvergenz für ein Gitter schon erreicht, d. h. die Differenz zwischen eigenen Werten und denen des Nachbargitters kleiner als `grid_error`, so wird innerhalb von `better_psi_boundary` das Flag `schwarz_done` gesetzt, so daß die Iteration dieses Gitter zukünftig nicht mehr berücksichtigt.

Der Vorgang wird solange wiederholt, bis Konvergenz erreicht ist.

3.4.5 Parallelisierung

Der Code wurde auf PCs erstellt, die unter dem Betriebssystem Linux laufen. Die tatsächlichen großen Produktionsläufe wurden dann jedoch auf einer SGI Origin 2000 gemacht, auf der 6 Prozessoren für unsere Arbeitsgruppe zur Verfügung standen. Als Parallelisierung wurde eine *coarse grained* Variante gewählt: Auf den verfeinerten Leveln, auf den der Großteil der Rechenzeit verbraucht wird, müssen eine große Anzahl ($\gg 10$) von rechteckigen Gittern integriert werden. Diese einzelnen Integrationen wurden mit Hilfe von POSIX Threads auf die einzelnen Prozessoren verteilt und dort durchgeführt. Da jedoch immer wieder ein globales Problem, die Invertierung eines Operators mit Hilfe der Schwarz-Iteration, zu lösen war, ist natürlich auch immer wieder Kommunikation zwischen den Gittern notwendig. Aufgrund der ccNUMA (cache coherent non-uniform memory access) Architektur der SGI Origin 2000 ist dies jedoch keine Problem, da auch auf Daten, die bei einem anderen Prozessor liegen, von allen Prozessoren jederzeit zugegriffen werden kann. Auf dem Basislevel, auf dem es nur ein Gitter gibt, so daß eine solche Art der Parallisierung nicht arbeiten kann, wurde stattdessen eine *fine grained* Parallisierung der einzelnen Schleifen verwendet.

Die eben dargestellte Methode funktioniert für eine kleine Anzahl Prozessoren, wie die 6, die zur Verfügung standen, sehr gut. Es wurde mit 6 Prozessoren ein Speed-Up von ca. 5 im Vergleich zur Benutzung nur eines Prozessors erreicht.

4 Splitting von Gaußschen Pulsen

4.1 Einleitung

Im folgenden wird die Evolution von Wellenpaketen, beschrieben durch die dreidimensionale nichtlineare Schrödingergleichung (2.1) mit anisotroper Dispersion, untersucht.

Als Anfangsbedingung wird ein achsensymmetrischer Gaußscher Puls benutzt (Symmetrieachse ist die z -Richtung),

$$E(x, y, z, t = 0) = E_0 \exp \left(-\frac{x^2 + y^2}{2R_0^2} - \frac{z^2}{2Z_0^2} \right). \quad (4.1)$$

R_0 und Z_0 geben die mittlere Ausdehnung in radialer bzw. axialer Richtung an. Aus E_0 und R_0 ergibt sich auch die maximale transversale Masse $N_{\perp}(0) = \int |E(x, y, 0, 0)|^2 d^2x = \pi R_0^2 E_0^2$.

Die anfängliche transversale Masse liegt bei allen Simulationen über der kritischen Masse für den zweidimensionalen Kollaps $N_c \approx 11.68$. Es werden Werte zwischen 2.3 und 4 für die anfängliche Wellenamplitude E_0 und verschiedene Aspektverhältnisse R_0/Z_0 des Pulses betrachtet, was Werten von $1.4N_c$ bis $4.75N_c$ für $N_{\perp}$ entspricht.

Wie erwartet, beobachtet man für eine hinreichend große Anfangsenergie ein Splitting des Pulses nach anfänglicher Kontraktion. Für höhere Energien wurde jedoch nicht, wie früher vermutet, ein weiteres symmetrisches Aufsplitten der beiden entstandenen Pulse beobachtet, stattdessen lösen sich kleine Zellen an den Außenseiten ab.

Es wurde untersucht, wie die Grenzmasse, ab der ein Aufsplitten des Pulses beobachtet wird, vom Dispersionskoeffizienten s abhängt. Eine Veränderung von s ist dabei äquivalent zu einer Reskalierung der Anfangsbedingung in z -Richtung, so daß hiermit gleichzeitig die Frage beantwortet wurde, wie eine Elongation in longitudinaler Richtung die Dynamik beeinflusst.

Um zu klären, welcher Mechanismus ein zweites symmetrisches Aufsplitten auch bei hinreichend großer anfänglicher transversaler Masse verhindert, wurden zwei weitere numerische Experimente durchgeführt.

Zum einen wurde eine Anfangsbedingung von zwei Gaußschen Pulsen entlang der longitudinalen Achse untersucht, um den Einfluß von Amplitude und Abstand auf die gegenseitige Wechselwirkung zu beobachten.

Außerdem wurde die Reaktion eines einzelnen Pulses auf eine Beeinflussung der Phase, einen sogenannten *Chirp*, getestet.

4.2 Evolution von Wellenpaketen mit überkritischer transversaler Masse

In der Abbildung 4.1 ist die Evolution eines Gaußschen Wellenpaketes dargestellt. Es wird der Betrag der Feldamplitude auf der Symmetrieachse $|E(x=0, y=0, z, t)|$ zu verschiedenen Zeiten t gezeigt.

Zunächst betrachten wir den Fall relativ niedriger Amplitude $E_0 = 2.4$, die Ausdehnung des Pulses wurde zu $R_0 = 1$ und $Z_0 = 2$ gewählt. Dies entspricht einer maximalen transversalen Masse von $N_{\perp}(0) = 18.1 \approx 1.5N_c$. Die Größe der Simulationsbox wurde im folgenden immer so gewählt, daß das Feld an den Rändern praktisch verschwindet, hier zu $[-6; 6] \times [-6; 6] \times [-9; 9]$.

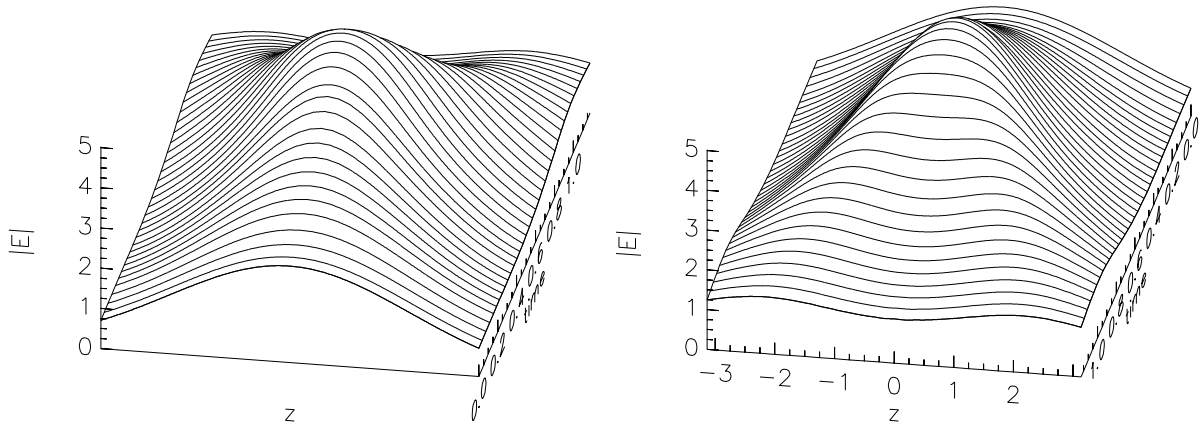


Abbildung 4.1: Gaußscher Puls, $E_0 = 2.4$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$. Gezeigt ist der Ausschnitt $z \in [-3; 3]$, der Integrationsbereich umfaßte $[-9; 9]$

Im linken Plot sieht man vorne die Zeit $t = 0$ und kann somit das Aufsteilen des Pulses verfolgen. Wie man sieht, wird die Form zunächst etwas schmäler und höher. Auf der rechten Seite sieht man denselben Plot um 180 Grad gedreht, hier ist also die Zeitentwicklung nach dem maximalen Anwachsen besser zu erkennen. Es wird deutlich, daß der Puls sich wieder verbreitert und nun zwei auseinanderlaufende Maxima hat. Wir befinden uns also offensichtlich gerade am Grenzfall, ab dem ein Aufsplitten der Struktur stattfindet.

Erhöht man die anfängliche transversale Masse, so ist das Splitting nun klar erkennbar. Abbildung 4.2 zeigt die Evolution eines Pulses mit ebenfalls $R_0 = 1$ und $Z_0 = 2$, aber einem höheren Wert für E_0 , nämlich 2.9. Die transversale Masse ist nun deutlich überkritisch mit einem Wert von $N_{\perp}(0) = 26.4 \approx 2.3N_c$. Wiederum ist links die Dynamik vor dem Splitting gut zu erkennen, rechts der Zeitraum nachher. Auf der Zeitachse ist nur der interessante Bereich $0.29 \leq t \leq 0.35$ ausgewählt.

Die Aufteilung der anfänglichen Verteilung in zwei Strukturen, die sich mit fortlaufender Zeit voneinander wegbewegen, ist klar zu sehen. Mit Blick auf die Werte von $|E|$ zeigt sich hier ein deutlich stärker kollabierendes Verhalten während der ersten Phase der Zeitentwicklung.

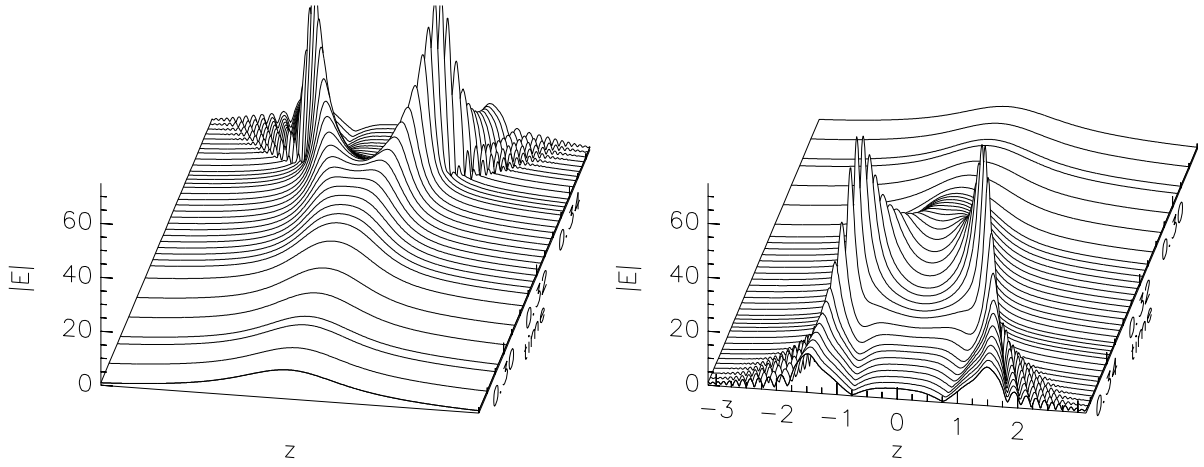


Abbildung 4.2: Gaußscher Puls, $E_0 = 2.9$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$.

Der Betrag des Feldes nimmt Werte bis ca. 60 an, also mehr als das 20fache des Anfangswertes. Für den nur schwach überkritischen zuerst betrachteten Fall werden nur Werte bis ca. 5 angenommen, also gerade mal das Doppelte im Vergleich zur Anfangsverteilung.

Natürlich stellt ein stark kontrahierendes Verhalten auch höhere Ansprüche an die Numerik. Während im ersten Fall $E_0 = 2.4$ nur $128 \times 128 \times 192$ Gitterpunkte für die Integration der Gleichung erforderlich waren, mußte für den Fall $E_0 = 2.9$ eine Verfeinerung bis zu 7 Leveln genutzt werden, was einer effektiven Auflösung von $8192 \times 8192 \times 12288$ Gitterpunkten entspricht.

Für das untersuchte Aspektverhältnis $R_0/Z_0 = \frac{1}{2}$, zeigt sich also klar, daß ein einzelnes Splitting-Ereignis für hinreichend hohe anfängliche transversale Masse entsteht. Der Schwellwert für dieses Ereignis liegt mit ca. $N_{\perp}(0) \approx 1.4 \dots 1.5N_c$ (also $E_0 = 2.3 \dots 2.4$) höher als die kritische Masse des zweidimensionalen Kollapses N_c .

Natürlich stellt sich die Frage, inwieweit das Aspektverhältnis der Anfangsbedingung die Evolution des Pulses beeinflußt. Untersucht man in z -Richtung noch mehr gestreckte Wellenpakete, beispielsweise $Z_0 = 4$, also $R_0/Z_0 = \frac{1}{4}$, so findet man eine geringere Schwelle von ca. $N_{\perp}(0) \approx 1.3 \dots 1.4N_c$ ($E_0 = 2.3 \dots 2.4$). Im Gegensatz dazu liegt bei einem zusammen-gestauchten Anfangspuls eine stark erhöhte Schwelle für das Auftreten eines Splittings. In Abbildung 4.3 ist der Fall $R_0 = 2$, $Z_0 = 1$ gezeigt, also $R_0/Z_0 = 2$. Für solche pfannkuchenartige Strukturen liegt die Grenze bei ca. $N_{\perp}(0) \approx 4.3 \dots 4.75N_c$ ($E_0 = 2.0 \dots 2.1$) und somit bei einem Vielfachen der kritischen Masse für den zweidimensionalen Kollaps.

Solche flachen Anfangsbedingungen wurden auch schon in [9] untersucht. Die Erklärung für die hohen Schwellwerte liegt in einer longitudinalen Streckung, die die transversale Masse deutlich verkleinert.

Zu Beginn der Evolution eines solchen pfannkuchenartigen Pulses wird dieser zunächst einmal stark in z -Richtung gestreckt, da ja starke z -Gradienten bereits vorhanden sind, und erreicht

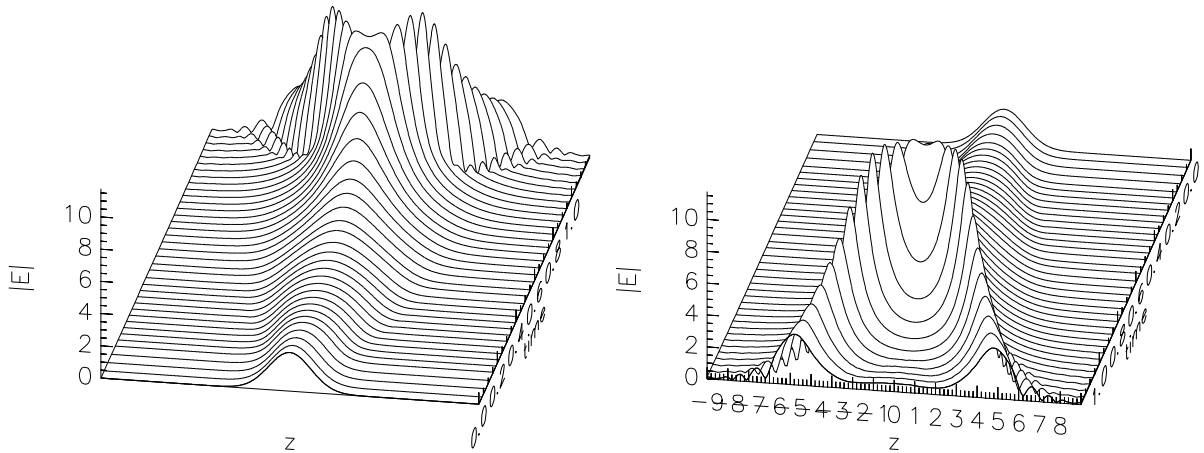


Abbildung 4.3: Gaußscher Puls, $E_0 = 2.4$, $R_0 = 2$, $Z_0 = 1$.

dann ebenfalls ein Aspektverhältnis kleiner als 1. Durch diese Streckung wird die Gesamtmasse auf einen wesentlich größeren Bereich in longitudinaler Richtung verteilt, so daß aufgrund der Erhaltung der Gesamtmasse die transversale Masse deutlich abnimmt. Wir sehen also, daß sich Wellenpakete mit $N_{\perp}(0) \gg N_c$ vor der starken Kontraktion und dem Splitting in elongierte Strukturen umwandeln können, deren weitere Evolution aufgrund der dann stark verringerten transversalen Masse den anfangs besprochenen Fällen ähnlich ist.

Betrachtet man die Abbildungen 4.2 und 4.3, so sieht man qualitativ ein gleichartiges Verhalten für beide gezeigten Aspektverhältnisse von $\frac{1}{2}$ bzw. 2: Die Pulse wachsen zunächst stark an und dehnen sich danach wieder aus, indem sie sich in zwei Pulse symmetrisch zu $z = 0$ umbilden. Trotz des anfänglich kollapsartigen Verhaltens ändert sich die Situation nachher vollständig, die beiden entstandenen Spitzen entfernen sich voneinander und dispersieren schließlich, wobei sekundäre Strukturen an den äußeren Seiten der Pulse entstehen.

Abbildung 4.4 zeigt noch einmal Ausschnitte aus der Zeitentwicklung des Falles $E_0 = 2.9$, $R_0/Z_0 = \frac{1}{2}$, der bereits in Abbildung 4.2 vorgestellt wurde. Man sieht einen Schnitt in der x - z -Ebene zu drei verschiedenen Zeiten. Dargestellt ist farblich kodiert der Absolutbetrag des Feldes $|E|$, wobei blau einem verschwindenden Feld entspricht und rot das Maximum beschreibt.

Gezeigt ist eine Ausschnittsvergrößerung aus dem vollen Integrationsgebiet. In jeder Raumrichtung ist nur ein Achtel der vollen Ausdehnung dargestellt, da der ursprüngliche Puls bis zur Zeit $t = 0.302$ bereits sehr stark kollabiert ist.

Der linke Plot zeigt eben diesen stark fokussierten Puls. Zu erkennen ist auch, daß die transversale Selbstfokussierung, die ja umso stärker ist, je größer die Masse in der transversalen Ebene ist, zu einer Elongation des Pulses geführt hat, der ursprünglich ein Aspektverhältnis von 1 : 2 hatte. Qualitativ ist die Form jedoch der Gaußschen Ursprungsform noch sehr nahe. Dies ändert sich nun sehr schnell, das mittlere Bild zeigt kurze Zeit später schon klar den gesplitteten Puls, wobei hier die Form der Einzelpulse noch grob symmetrisch bzgl. der z -Achse

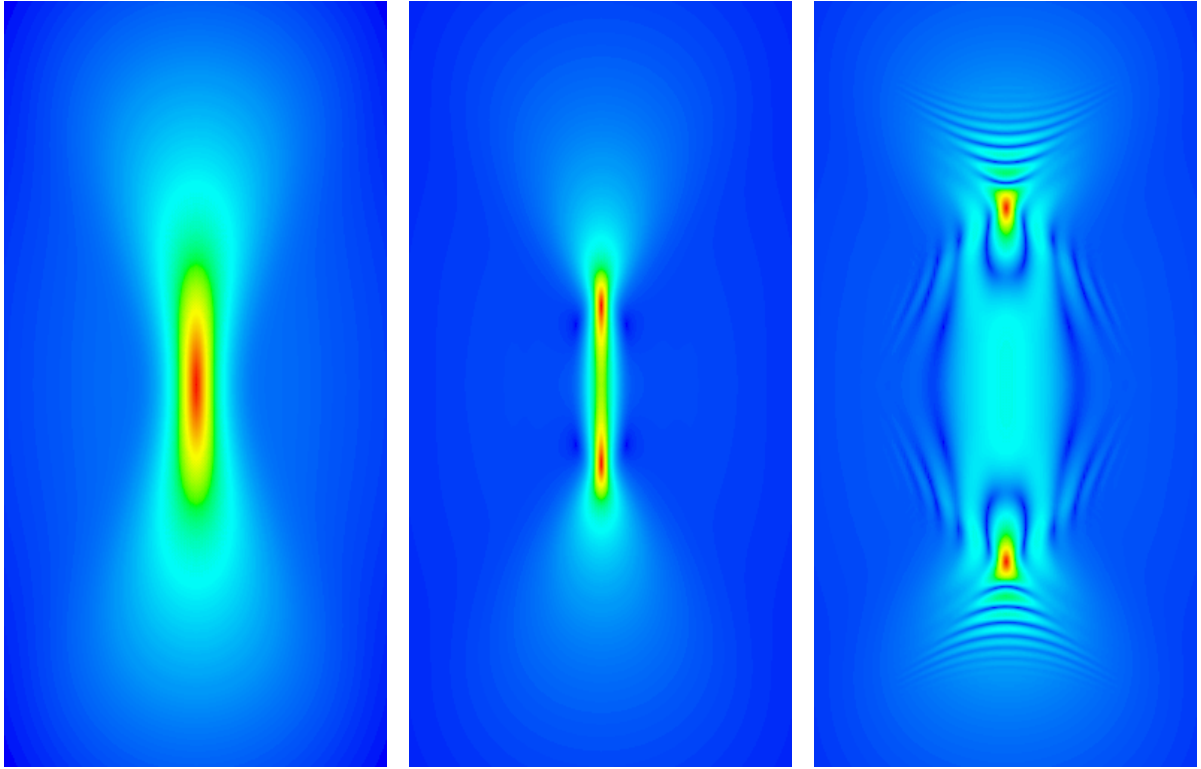


Abbildung 4.4: Gaußscher Puls, $E_0 = 2.9$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$. Schnitt durch die x - z -Ebene für $t = 0.302$, $t = 0.330$ und $t = 0.345$.

ist.

Diese Symmetrie bleibt in der weiteren Zeitevolution nicht bestehen. Der rechte Plot zeigt, wie sich die beiden Spitzen weiter voneinander entfernen und nun eine stark unsymmetrische Form angenommen haben. An den äußeren Enden bildet sich eine starke Front und davor sekundäre Strukturen, von denen wir verifizieren konnten, daß sie wirklich durch die nichtlineare Schrödingergleichung produziert wurden und nicht nur ein numerisches Artefakt sind. An den inneren Seiten bleibt die Struktur hingegen recht glatt.

Abbildung 4.5 zeigt detaillierte Bilder der Zeitevolution nach dem ersten Splitting, Grundlage ist wiederum die Simulation mit $E_0 = 2.9$ und $R_0/Z_0 = \frac{1}{2}$. Von oben nach unten werden der Absolutbetrag des Feldes $|E|$ und die Phase des Feldes $\arg E$ entlang der Symmetrieachse, sowie die transversale Masse $N_\perp$ entlang der z -Achse gezeigt. Der Zeitpunkt ist links 0.335, in der Mitte 0.340 und rechts 0.345. Man sieht, wie sich innerhalb dieser kurzen Zeit die beiden Pulse schnell voneinander entfernen. Zu Beginn ist die Struktur noch sehr glatt, doch dann bildet sich an den äußeren Seiten schnell eine starke Front. Dieser steile Gradient führt dann dazu, daß sich vor dieser Front neue, sekundäre Strukturen bilden, die einen Teil der Masse aufnehmen.

4 Splitting von Gaußschen Pulsen

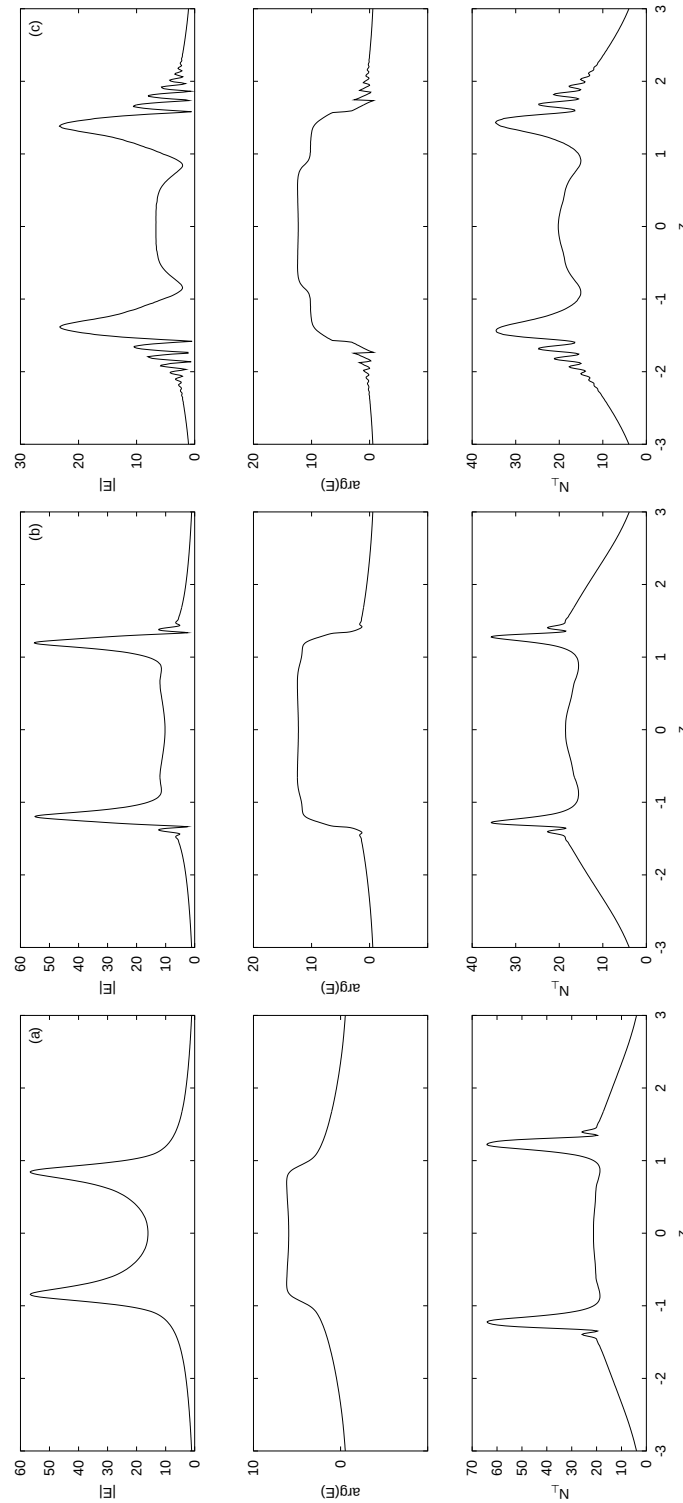


Abbildung 4.5: Absolutbetrag des Feldes $|E|$, Phase des Feldes $\arg E$ und transversale Masse $N_{\perp}$ entlang der z -Achse, zu den Zeiten 0.335, 0.340, 0.345 (v.l.n.r.).

Wir beobachten, daß die Phase an den Stellen, an denen die transversale Masse noch überkritisch ist, ungefähr parabolisch anwächst. Eine negative Krümmung in der Phase führt zu einer lokalen Verbreiterung ($Z_t > 0$), eine positive Krümmung hingegen zu einer lokalen Fokussierung ($Z_t < 0$), was mit dem selbstähnlichen Modell (2.43) übereinstimmt. Außerhalb des mittleren Bereiches um $z = 0$ kontrahieren die beiden entstandenen Peaks und entfernen sich voneinander. Im mittleren Bereich ist die Krümmung der Phase zunächst wie erwartet negativ, d.h. verbreiternd, wächst später allerdings wieder an. Zu dieser Zeit ($t = 0.345$) ist die transversale Masse nur noch ca. $1.5N_c$ groß, was offensichtlich nicht für die Anregung eines weiteren Splittings ausreicht.

Wichtiger sind nun die beiden Peaks, deren transversale Masse noch deutlich höher ist. Statt eines weiteren Splittings in zwei symmetrische Pulse lösen sich hier an der Außenseite kleinere Strukturen ab. Obwohl die beiden Peaks prinzipiell als Ganzes überleben, bilden sich dennoch, wie in Ref. [7] erwartet, zusätzliche Zellen.

Der Hauptunterschied zwischen dem vorhergesagten Multi-Splitting-Szenario in der genannten Arbeit und den hier durchgeführten numerischen Simulationen liegt darin, daß im Falle von gesplitteten Peaks, deren transversale Masse groß genug für weiteres Aufsplitten ist, ein solcher Peak nicht symmetrisch in kleinere Strukturen geringerer Amplitude zerfällt. Stattdessen bilden sich sekundäre Zellen an den entfernten Enden, gleichzeitig beginnt die gesamte Welle zu dispergieren. Die Nummer der Zellen verhält sich ungefähr wie das Verhältnis $N_\perp(z_0, t_0)/N_c$ um den Fokuspunkt, an dem die Größe

$$N_\perp(z_0, t_0) = \int |E(x, y, z_0, t_0)|^2 dx dy \quad (4.2)$$

für einen Puls an der Position $z = z_0$ ausgewertet werden kann. Die Abschätzung aus Ref. [7] kann somit bestätigt werden.

In der unteren Reihe der Abbildung 4.5 sieht man, welche transversale Masse die einzelnen Schnitte entlang der z -Achse haben. Jede Scheibe mit einer Masse oberhalb der kritischen Masse fokussiert weiterhin, während gleichzeitig die Welle als ganzes dispergiert. Um diese selbstfokussierende Dynamik zu zeigen, ist in Abbildung 4.6 die Variation der Phase in transversaler und longitudinaler Richtung zu sehen.

In der transversalen Richtung fällt die Phase parabolisch ab, was mit der Selbstfokussierung in der transversalen Ebene in Übereinstimmung steht. Es ist wichtig herauszustellen, daß die sekundären Zellen nicht einfach durch lineare Strahlung entstehen, sie bilden sich nur an den äußeren Kanten der Peaks. Sie wurden auch in Systemen entdeckt, die durch eine Mischung von defokussierenden Multiphoton-Quellen und normaler Gruppengeschwindigkeitsdispersion beschrieben werden [5]. Mit Hilfe numerischer Simulationen wurde beobachtet, daß solche Strukturen nur in Gegenwart von normaler Gruppengeschwindigkeitsdispersion auftreten, im anderen Fall nicht - die anfängliche Masse lag dort bei ca. dem 10fachen der kritischen Masse.

Es wurde kein transversaler Kollaps beobachtet, der zu einer Singularität in endlicher Zeit führen würde, wie es im Zweidimensionalen der Fall ist. Stattdessen wird die Welle schließlich

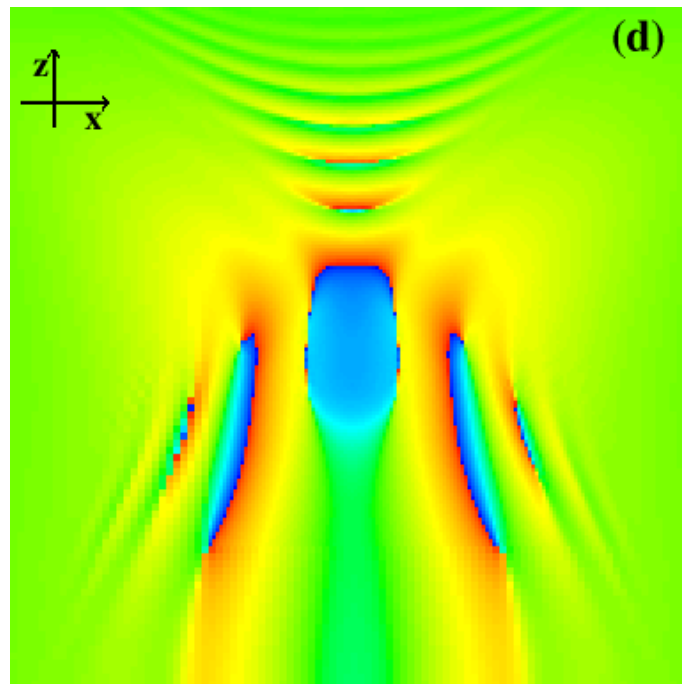


Abbildung 4.6: Transversale (horizontal dargestellt) und longitudinale (vertikal) Variationen der Phase in der Nähe eines Peaks zur Zeit $t + 0.340$. Die Farben von blau bis rot entsprechen einer Phase von 0 bis 2π .

breit und dispergiert. Dieses Verhalten wurde gerade für den Fall $E_0 = 2.9$, $R_0 = 1$ und $Z_0 = 2$ detailliert dargestellt. Für die anderen anfänglich beschriebenen Parameter $E_0 = 2.4$, $R_0 = 2$ und $Z_0 = 1$ zeigt sich qualitativ genau dasselbe Bild.

Zum Abschluß dieses Teils sollen hier noch Ergebnisse für Simulationen zu einer anderen Anfangsbedingung vorgestellt werden.

Zharova *et al.* beschrieben in [45] die numerische Simulation der nichtlinearen Schrödingergleichung mit anisotroper Dispersion mit folgenden Anfangsbedingungen: Gaußscher Puls mit $E_0 = 4$, $R_0 = 1$ und $Z_0 = 4$. Dieser entspricht einer anfänglichen maximalen transversalen Masse von $N_{\perp}(0) = 50.3 = 4.3N_c$, also ca. dem doppelten der transversalen Masse der oben im Detail beschriebenen Simulation.

Wie zu erwarten, beginnt die Zeitentwicklung mit einem enorm starken kollapsartigen Verhalten, der Puls kontrahiert zu einer sowohl in transversaler als auch longitudinaler Richtung extrem dünnen Struktur und splittet dann in zwei Pulse. Abbildung 4.7 zeigt einen Zoom von $|E|$ während der schnellen Phase der Entwicklung, die innerhalb eines sehr kleinen Zeitfensters geschieht. Dieser Schnitt von $|E|$ in der x - z -Ebene ist um den Faktor 64 pro Raumrichtung gezoomt, die vergleichbaren Bilder in Abbildung 4.4 wurden dagegen nur um den Faktor 8 gezoomt, es findet also eine wesentlich stärkere Kontraktion statt.

In Abbildung 4.8 ist der Betrag des Feldes $|E|$ auf der Symmetrieachse zu den drei auch in Abbildung 4.7 benutzten Zeiten dargestellt. $|E|$ hat sich um einen Faktor 300 gegenüber der Anfangsbedingung verstärkt, doch schließlich zeigt sich auch hier das generische Verhalten: Die Welle selbstfokussiert sehr stark, doch dann splittet sie sich in zwei Peaks auf. Das weitere Verhalten konnte hier leider nicht mehr verfolgt werden, denn nach den gezeigten Zeiten war es auch mit der Hilfe der adaptiven Gitterverfeinerung nicht mehr möglich, eine ausreichende numerische Auflösung zu gewährleisten.

Interessant ist noch die Entstehung von extrem starken Gradienten von $|E|$ in z -Richtung. Während die zuerst vorgestellten Simulationen die Existenz eines Kollapses mit hoher Wahrscheinlichkeit verneinen, muß dies hier noch einmal überdacht werden. Es scheint nicht ausgeschlossen, daß eine singuläre Dynamik in Form eines Schockes entlang der longitudinalen Richtung möglich sein könnte, eine divergierende Amplitude wie im zweidimensionalen Fall ist jedoch auch hier nicht zu beobachten. Eine absolute Gewissheit ist aufgrund numerische Simulationen leider nie zu erreichen, so daß diese Fragestellung weiterhin offen bleiben muß. Die von Zharova *et al.* durchgeführten Simulationen hatten eine deutlich geringere Auflösung als hier erreicht wurde, von daher müssen wir davon ausgehen, daß diese Simulationen, die auch ein Mehrfachsplitting zeigten, unteraufgelöst waren und es sich um numerische Artefakte handelte.

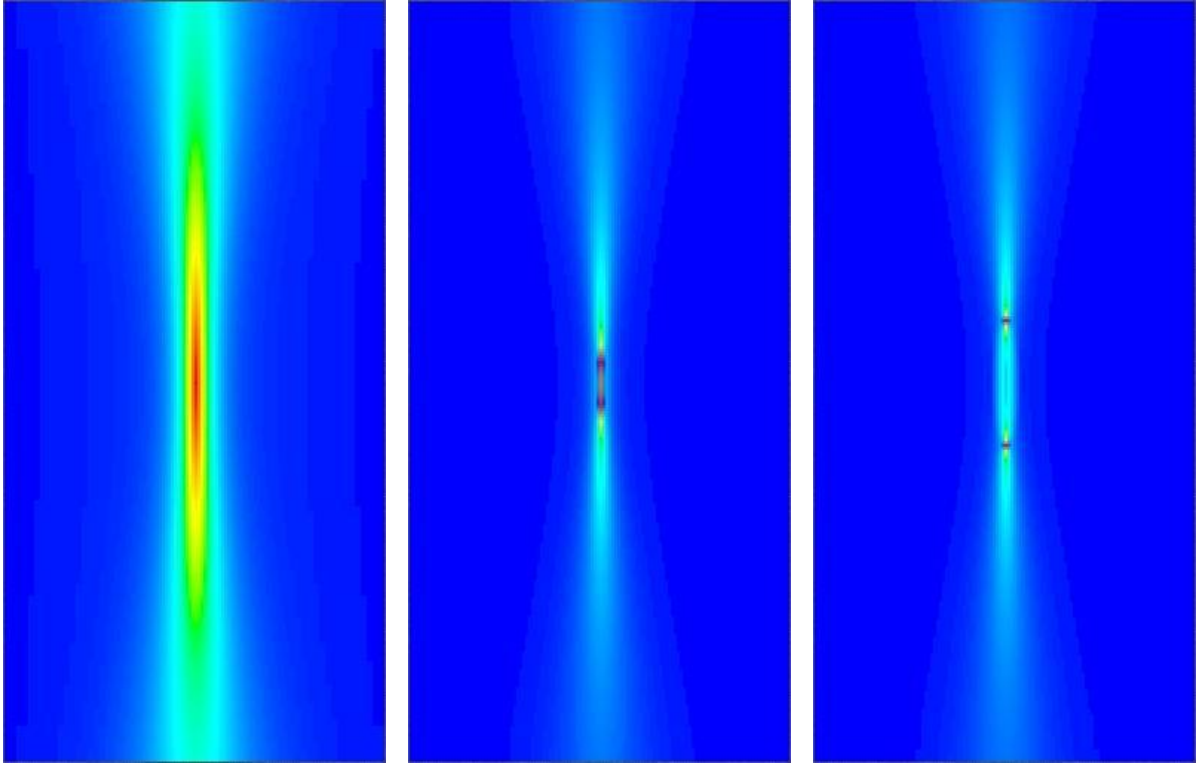


Abbildung 4.7: Gaußscher Puls, $E_0 = 4$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 4$ (Anfangsbedingung von Zharova *et al.*). Schnitt durch die x - z -Ebene für $t = 0.150234$, $t = 0.150343$ und $t = 0.150355$.

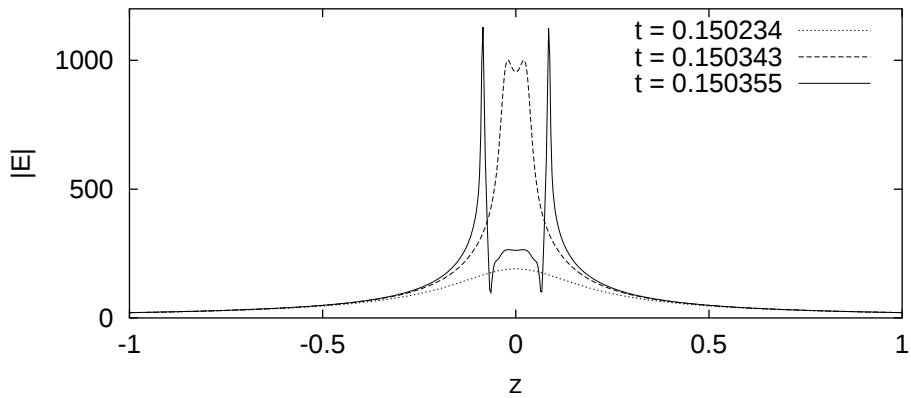


Abbildung 4.8: Absolutbetrag des Feldes $|E|$ auf der z -Achse, dargestellt zu den Zeiten $t = 0.150234$, $t = 0.150343$ und $t = 0.150355$.

4.3 Grenzmassen für Splitting-Ereignisse in Abhängigkeit vom Dispersionskoeffizienten s

Eine wichtige Frage [11, 10] ist die nach der Abhängigkeit des Massenschwellwertes, ab dem ein Aufsplitten eines Pulses stattfindet, vom Dispersionskoeffizienten s . In der Referenz [11] wurde erwartet, daß $|s|$ einen minimalen Wert überschreiten muß, um einen Kollaps zu verhindern. Gegeben sei ein Verhältnis der anfänglichen Masse zur kritischen Masse $p \equiv N_{\perp}(0)/N_c$. Im Fall $p \gg 1$ wird als Bedingung für das Verbot des Kollapses angegeben, daß $|s|$ oberhalb eines Wertes der Ordnung $0.1p^{2/3}$ liegen muss. Leider blieben in dieser Veröffentlichung Werte der anfänglichen transversalen Masse größer als $1.6N_c$ numerisch unzugänglich.

Andererseits betrieben Cerullo *et al.* [10] eine Multiskalen-Variationstheorie, deren Ergebnisse sie direkt mit den Daten in [11] verglichen. Sie beobachteten, daß die Schwelle für einen Kollaps in einem kurzen Intervall für $|s|$ fast linear mit $|s|$ variierte. Das Auftreten eines Kollapses folgt hier aus der Tatsache, daß der Variationsansatz für einen Gaußschen Puls prinzipiell nicht in der Lage ist, ein Aufsplitten in der longitudinalen Richtung zu beschreiben, da die Testfunktion nur ein Maximum in z -Richtung hat, während eine gesplitteter Gaußscher Puls nun einmal zwei Maxima hat.

Trotz dieser Diskrepanz kann der von Cerullo *et al.* verfolgte Ansatz nützlich für die Vorhersage der Variation der Grenzmasse für das Splitting sein, denn vor dem Splitting-Ereignis steht bekanntlich ein selbstfokussierendes Verhalten.

Um den Einfluß des Dispersionskoeffizienten s auf den Splitting-Schwellwert zu untersuchen, benutzen wir noch einmal den zweiskaligen selbstähnlichen Ansatz (2.43), bei dem angenommen wird, daß $\tilde{\phi}$ exakt selbstähnlich ist, d.h. $\partial_{\tau}\tilde{\phi} = 0$. Diese Funktion als $\tilde{\phi}(\xi, \zeta) = \phi_{\perp}(\xi) \exp(-\zeta^2/2)$ kann modelliert werden, wobei für $\phi_{\perp}$ die Grundzustandslösung ϕ_0 gewählt wird. Setzt man dann Gleichung (2.43) in die Virialausdrücke (2.40) und (2.42) ein, erhält man direkt dynamische Gleichungen, die die Entwicklung der Skalen $R(t)$ und $Z(t)$ beschreiben:

$$\frac{1}{4}d_t^2 R(t) = \frac{\alpha}{R^3(t)} \left(1 - \frac{pZ(0)}{\sqrt{2}Z(t)} \right), \quad (4.3)$$

$$\frac{1}{4}d_t^2 Z(t) = \frac{s^2}{Z^3(t)} - \frac{spZ(0)}{\sqrt{2}R^2(t)Z^2(t)} \quad (4.4)$$

mit

$$\alpha \equiv \frac{\int |\phi_0|^2 d^2\xi}{\int \xi^2 |\phi_0|^2 d^2\xi} \approx 0.845, \quad (4.5)$$

$$p = N_{\perp}(0)/N_c, \quad N_{\perp}(0) = A/Z(0) \int |\phi_0|^2 d^2\xi. \quad (4.6)$$

Wertet man Gleichung (4.3) für die Anfangsbedingung aus, so ist leicht zu erkennen, daß ein Gaußscher Puls ohne Chirp selbstfokussieren kann, wenn seine anfängliche transversale

Masse einen Wert von $\sqrt{2}N_c$ überschreitet. Nimmt man an, daß ein Splitting erfolgt, falls die Welle anfänglich selbstfokussiert, so liegt dieser Schwellwert in guter Übereinstimmung mit den Werten von $1.3 \dots 1.5N_c$, die numerisch für kugelförmige Anfangsbedingungen gefunden wurden [11]. Auch für elongierte Wellen ($Z_0 > R_0$) wurden ähnliche Ergebnisse gefunden [8]. Tatsächlich ist ein solches Splitting aber natürlich ein dynamisches Ereignis, daß aus den gegeneinander wirkenden Einflüssen von transversalem Kollaps und longitudinaler Defokussierung entsteht. Untersucht man Gleichung (4.3) genauer, so findet man, daß die Bedingung für ein selbstfokussierendes Verhalten durch

$$N_{\perp}(0) > \sqrt{2}N_c \frac{Z(t)}{Z(0)} \quad (4.7)$$

gegeben wird. Da Gleichung (4.4) nun gleichzeitig zeigt, daß $Z(t)$ mit negativem s wächst, ist klar, daß damit auch die Schwellenergie $N_{\perp}(0)$ für das Splitting in gewissem Maße erhöht wird, was auch durch die Beobachtungen in [10] bestätigt wird. Für große Werte von $|s|$ setzt eine longitudinale Verbreiterung ein und der transversale Kollaps ist unterdrückt. Dies ist der Mechanismus, der die Schwellmasse erhöht, für kleine $|s|$ geschieht das Gegenteil.

Unsere numerischen Untersuchungen bestätigen diese Ergebnisse. In den Abbildungen 4.9 bis 4.12 wird die Evolution eines Gaußschen Pulses für verschiedene Werte des Dispersionskoeffizienten s gezeigt. Es ist klar zu sehen, daß für einen kleinen Wert von $|s|$, $s = -0.5$ (Abbildung 4.9) eine starke Kompression mit abschließendem Splitting stattfindet. Wird $|s|$ nun erhöht, so zeigt sich in Abbildung 4.10 bei $s = -1$ ebenfalls noch das Aufsplitten des Pulses, die vorherige Kontraktion fällt jedoch deutlich geringer aus. Für noch größere Werte von $|s|$, $s = -2$ bzw. $s = -4$ (Abbildung 4.11 bzw. 4.12) gewinnt der verbreiternde Effekt in longitudinaler Richtung die Überhand und verhindert das Auftreten eines Splittings.

Es ist natürlich erwähnenswert, daß dieses Ergebnis auch durch Reskalierungsergebnisse erreicht werden kann. Mit Hilfe einer einfachen Umskalierung sieht man, daß für eine gegebene Anfangsbedingung die Evolution der Welle dieselbe bleiben wird, wenn man das Paar (s, Z_0) zu $(-1, Z_0/\sqrt{|s|})$ ändert. Untersucht man beispielsweise eine kugelförmige Anfangsbedingung ($R_0 = Z_0$) bei $|s| \ll 1$, so ist dies formal äquivalent zu einem stark elongierten Wellenpaket mit $Z_0 \gg R_0$ bei $s = -1$, d.h. die Stärke der longitudinalen Verbreiterung ist in beiden Fällen gleich groß. Die sehr langgezogene Struktur ist dann also praktisch zweidimensional und man erwartet als transversale Grenzmasse für ein Splitting fast die kritische Masse für den zweidimensionalen Kollaps N_c .

Dies wird in Abbildung 4.13 auch bestätigt. Hier wurde eine nahezu kugelförmige Anfangsbedingung mit $R_0/Z_0 = 1/\sqrt{2}$ bei einem sehr kleinen Dispersionskoeffizienten $s = -0.01$ untersucht. Es stellt sich heraus, daß auch eine nur leicht über der zweidimensionalen kritischen Masse liegende anfängliche transversale Masse von $N_{\perp}(0) = 1.1N_c$ klar zu einem Splitting führt. Die entstandenen zwei Zellen dispergieren danach wie bekannt in longitudinaler Richtung.

In Abbildung 4.13 sieht es so aus, als würde sich das Paar Zellen, daß bei dem ersten Splitting entstanden ist, einfach ausbreiten. Wie man erkennt, kollabieren diese beiden Zellen nicht wie

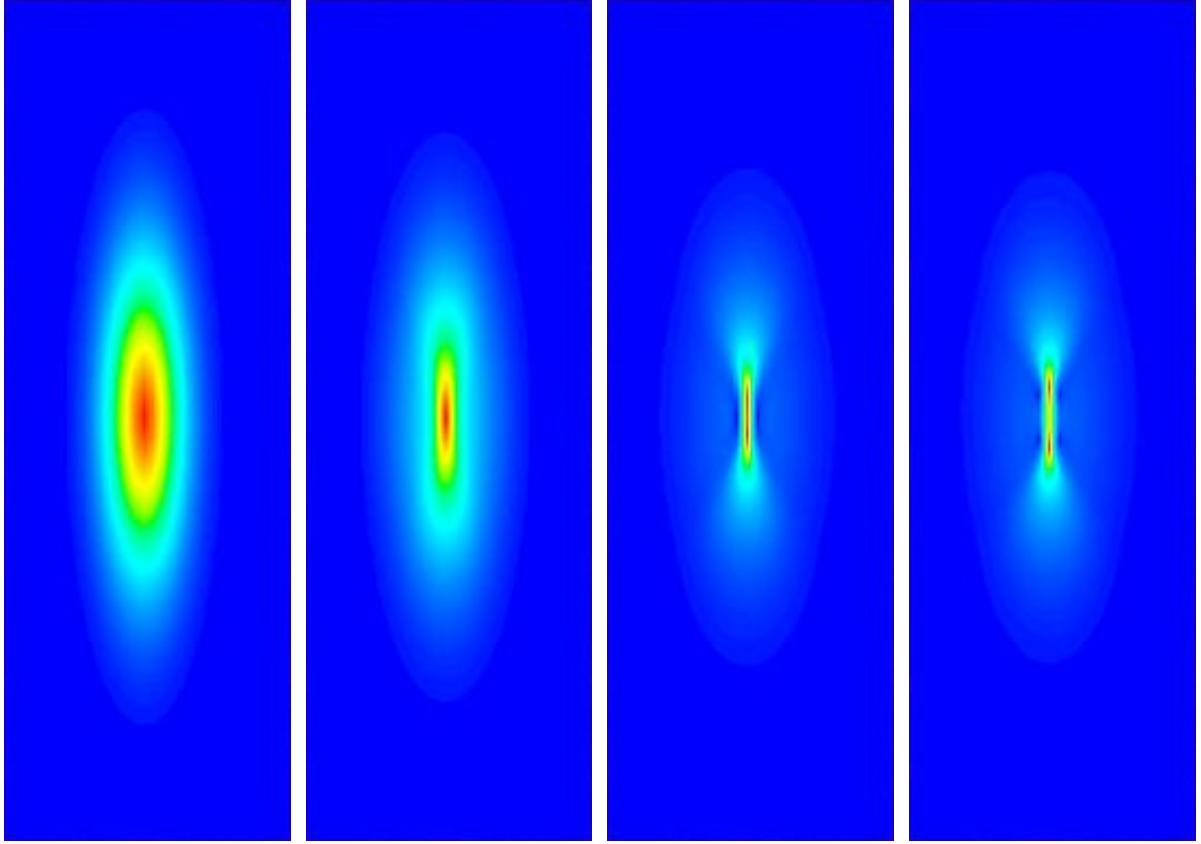


Abbildung 4.9: Evolution eines Gaußschen Pulses mit dem Dispersionskoeffizienten $s = -0.5$ zu den Zeiten $t = 0, 0.3, 0.5, 0.505$. Anfangsbedingungen waren $E_0 = 2.5$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Größe der Simulationsbox $[-6; 6] \times [-6; 6] \times [-18; 18]$. Dargestellt ist ein Schnitt in der x - z -Ebene ($y = 0$), $(x, z) \in [-6; 6] \times [-9; 9]$.

das Modell aus [14] vorhergesagt hatte. Stattdessen bleiben sie über eine lange Zeit ziemlich stabil, bevor sie schließlich dispergieren. Da sie ihre Form behalten, stellt sich die Frage ob eine Erhöhung der anfänglichen Masse nicht dafür sorgen könnte, daß die beiden entstandenen Pulse wiederum symmetrisch aufsplitten.

Deshalb wurde die gleiche Anfangsbedingung für ein erhöhtes E_0 von 3 untersucht. Da hier die Kontraktion zu stark war, um mit dem dreidimensionalen Code hinreichend aufgelöst werden zu können, wurde eine zweidimensionaler zylindersymmetrischer Code entwickelt, in dem der Term $\Delta_{\perp}$ durch $\partial_r^2 + (1/r)\partial_r$ ersetzt wurde, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Mit Hilfe von adaptiver Gitterverfeinerung konnte eine Auflösung von 24576^2 erreicht werden. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.14 dargestellt, wobei hier nur einer der zwei gesplitteten Pulse gezeigt wird. Die Stärke des Feldes $|E|$ ist hier als Höhe in vertikaler Richtung visualisiert. Diese Simulation beweist die Existenz von sequentiell erfolgenden Splitting-Ereignissen. Zu Beginn (siehe die beiden linken Plots in Abbildung 4.14) erkennt man die Tendenz des einmal gesplitteten Pulses, sich

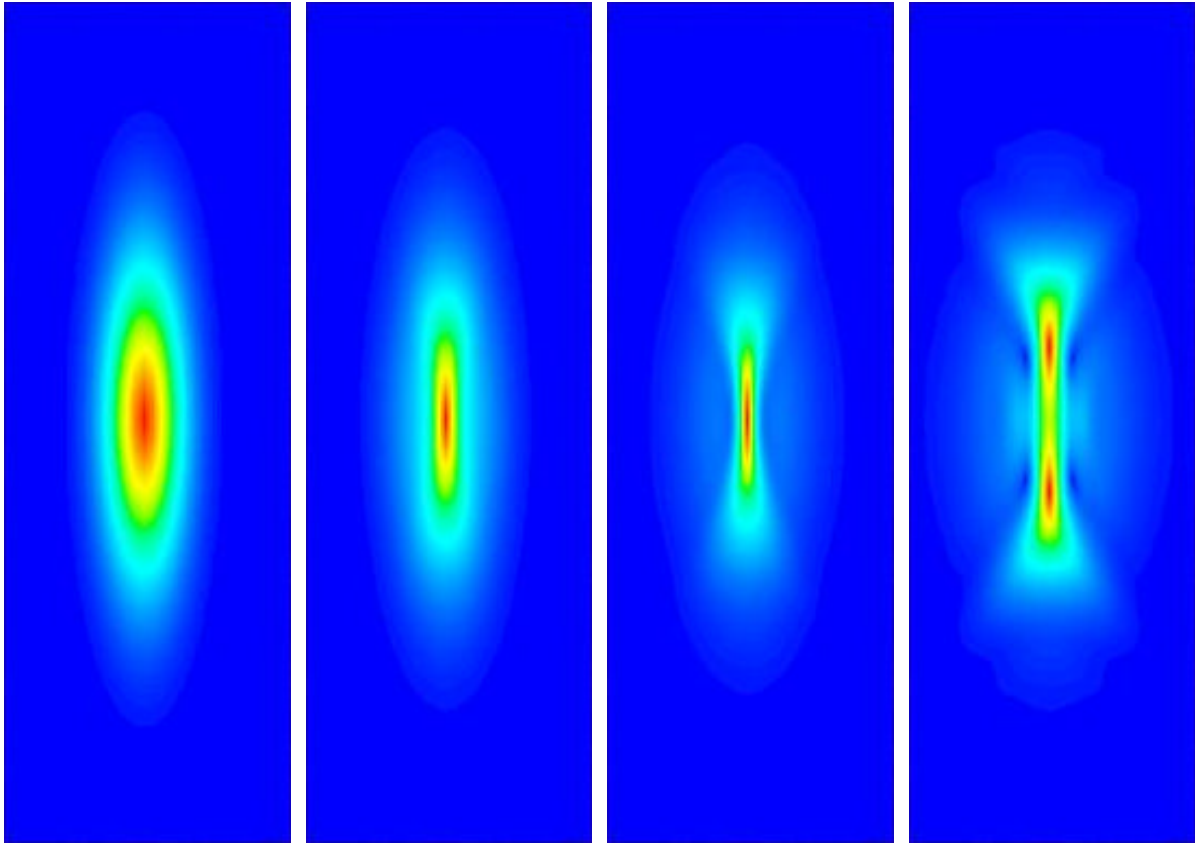


Abbildung 4.10: Evolution eines Gaußschen Pulses mit dem Dispersionskoeffizienten $s = -1$ zu den Zeiten $t = 0, 0.3, 0.5, 0.7$. Anfangsbedingungen waren $E_0 = 2.5$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Größe der Simulationsbox $[-6; 6] \times [-6; 6] \times [-18; 18]$. Dargestellt ist ein Schnitt in der x - z -Ebene ($y = 0$), $(x, z) \in [-6; 6] \times [-9; 9]$.

in der Mitte einzuschnüren. Trotzdem sieht man später nicht ein symmetrisches Aufsplitten, sondern es bildet sich eine starke Front an der Außenseite, von der aus wiederholt kleine Zellen abgesplittet werden, qualitativ genau das Bild, was wir schon aus den früher vorgestellten Simulationen kennen. Obwohl die Amplitude $|E|$ das 30fache ihres anfänglichen Wertes erreicht, finden wir auch hier kein kollapsartiges Verhalten, sondern schließlich wiederum eine Verbreiterung und Dispersion der entstandenen Zellen.

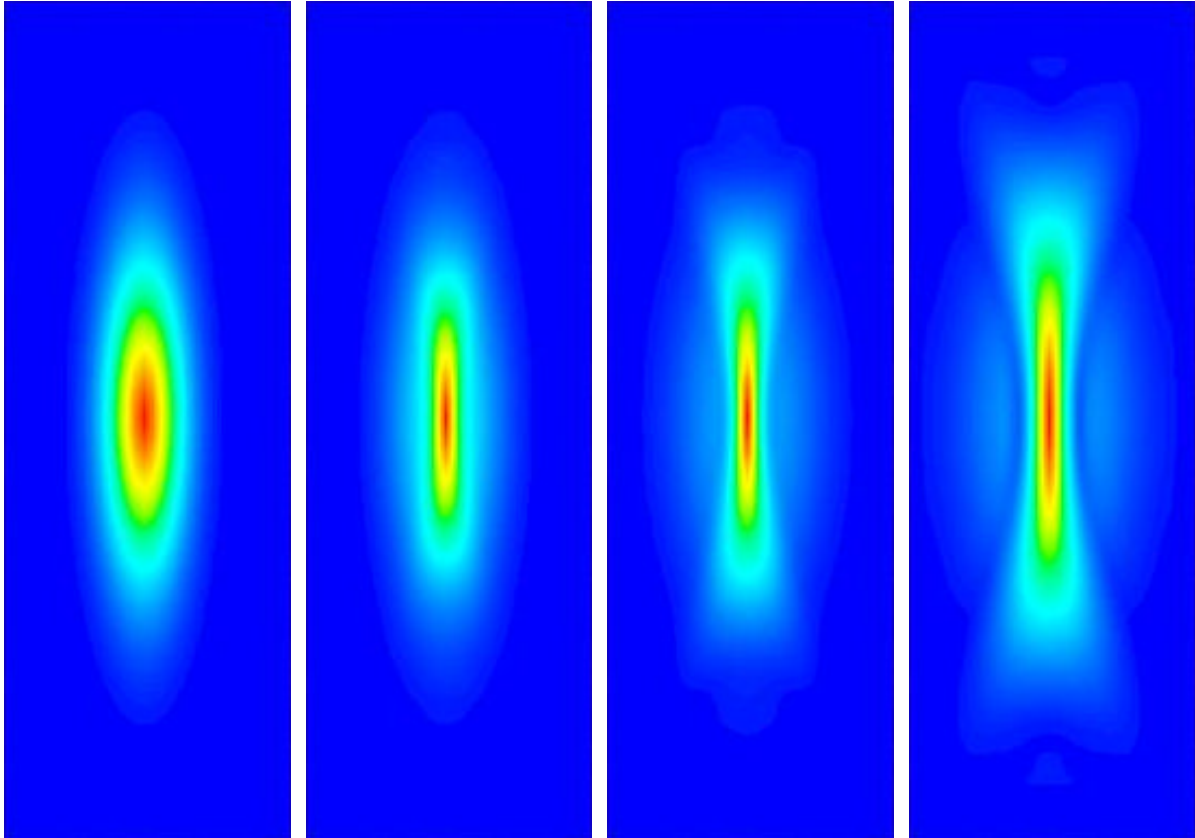


Abbildung 4.11: Evolution eines Gaußschen Pulses mit dem Dispersionskoeffizienten $s = -2$ zu den Zeiten $t = 0, 0.3, 0.5, 0.7$. Anfangsbedingungen waren $E_0 = 2.5$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Größe der Simulationsbox $[-6; 6] \times [-6; 6] \times [-18; 18]$. Dargestellt ist ein Schnitt in der x - z -Ebene ($y = 0$), $(x, z) \in [-6; 6] \times [-9; 9]$.

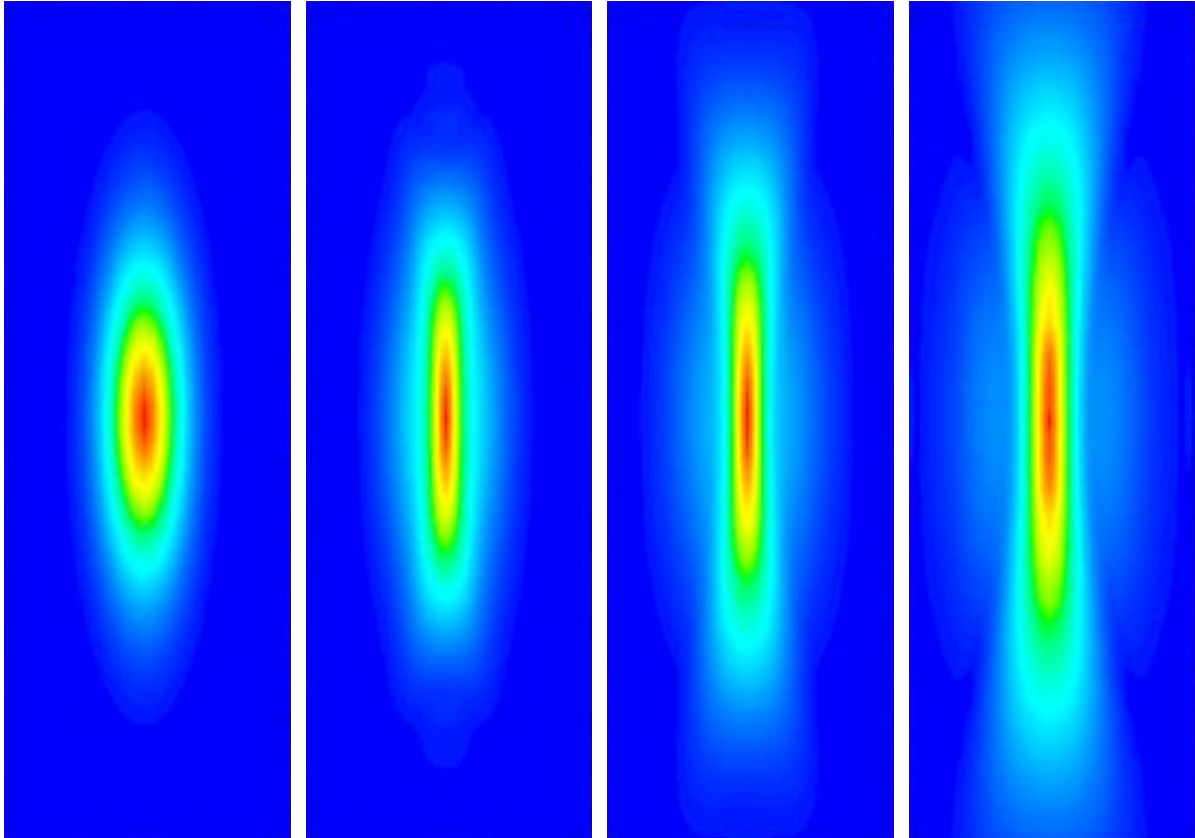


Abbildung 4.12: Evolution eines Gaußschen Pulses mit dem Dispersionskoeffizienten $s = -4$ zu den Zeiten $t = 0, 0.3, 0.5, 0.7$. Anfangsbedingungen waren $E_0 = 2.5$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Größe der Simulationsbox $[-6; 6] \times [-6; 6] \times [-18; 18]$. Dargestellt ist ein Schnitt in der x - z -Ebene ($y = 0$), $(x, z) \in [-6; 6] \times [-9; 9]$.

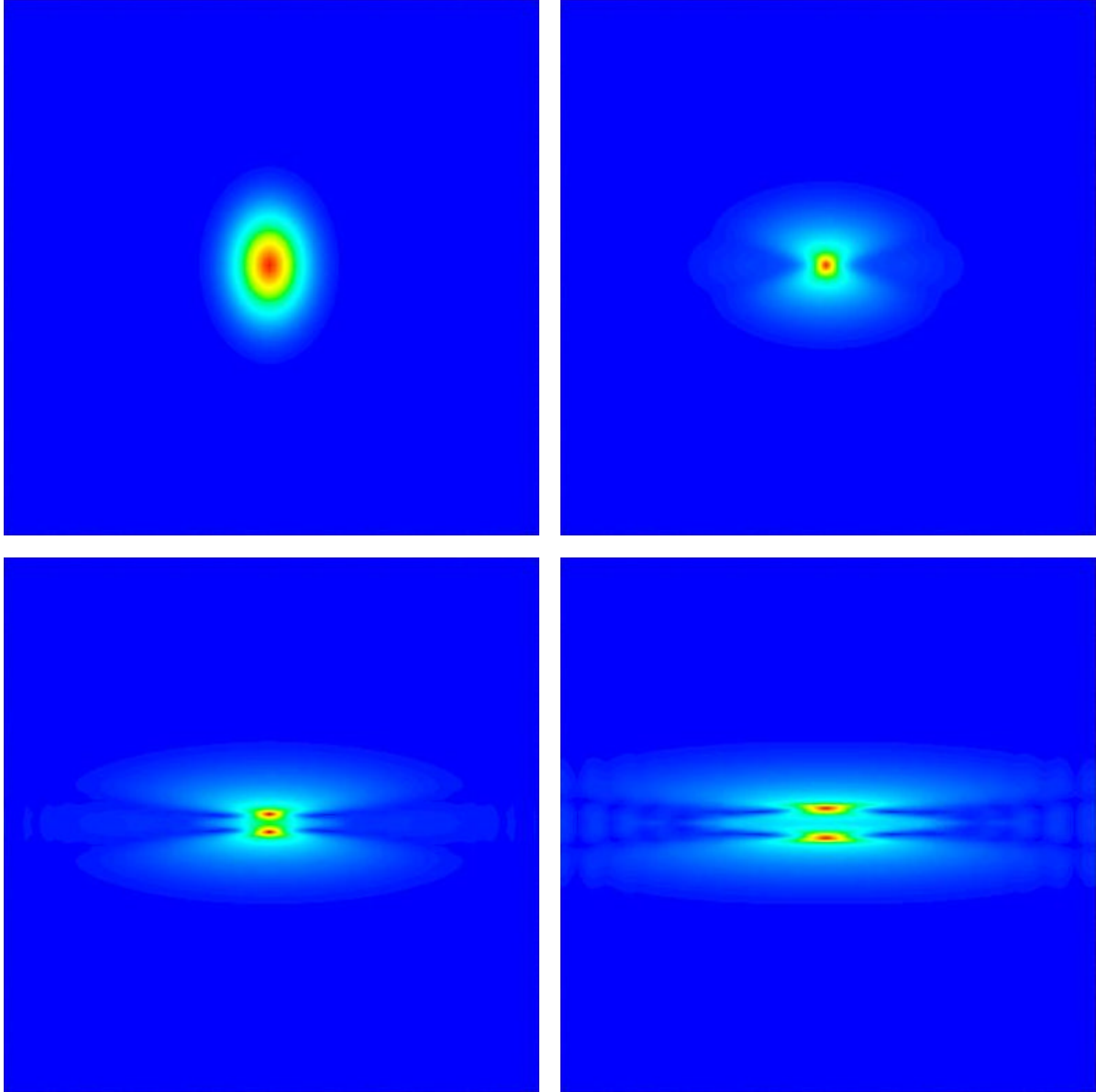


Abbildung 4.13: Evolution eines Gaußschen Pulses mit dem Dispersionskoeffizienten $s = -0.01$ zu den Zeiten $t = 0, 0.5, 1.0, 1.5$. Anfangsbedingungen waren $E_0 = 2.86$, $R_0 = 0.707$, $Z_0 = 2$ (aus [14]), Größe der Simulationsbox $[-9;9] \times [-9;9] \times [-9;9]$. Dargestellt ist ein Schnitt in der x - z -Ebene ($y = 0$).

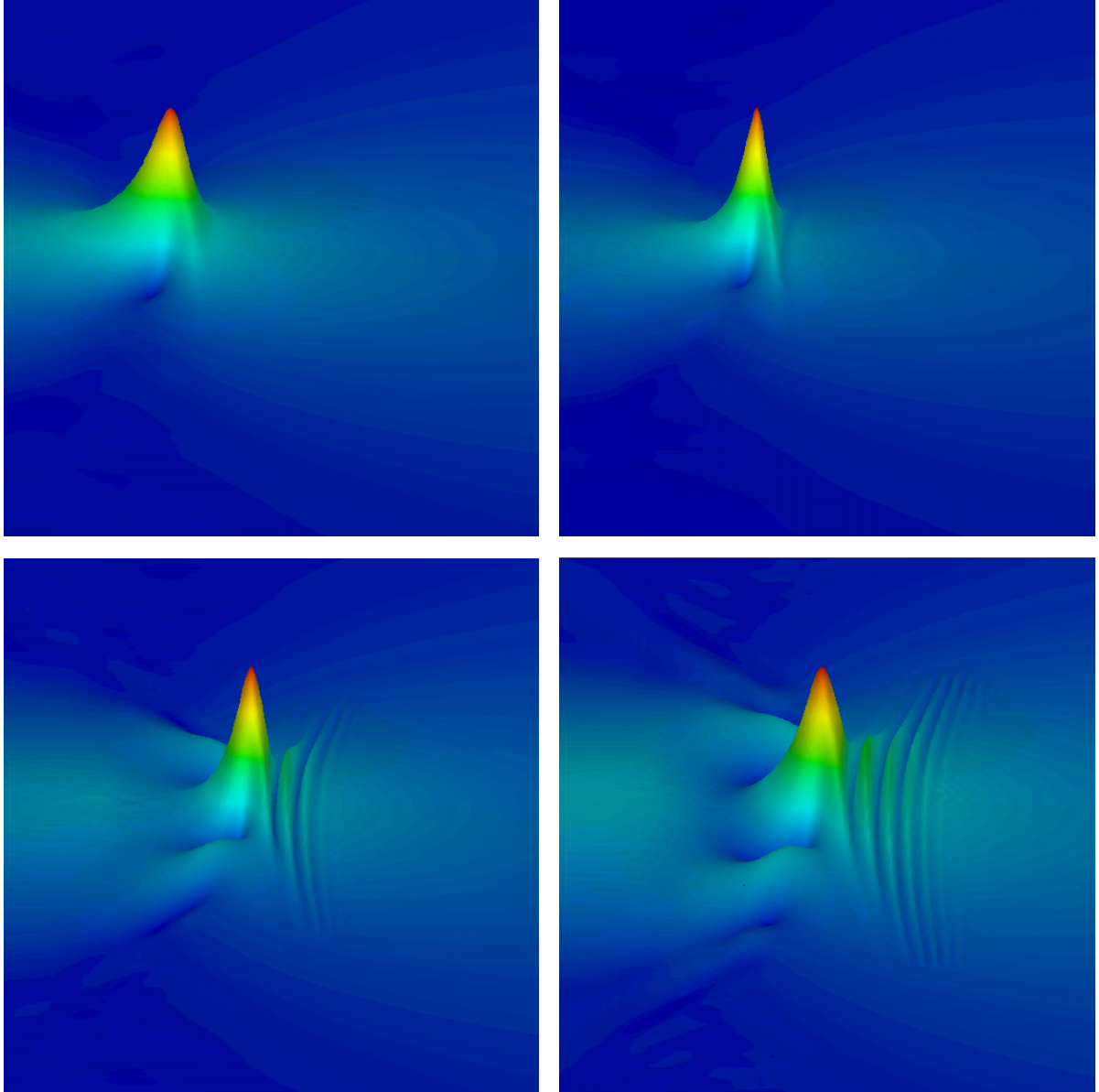


Abbildung 4.14: Evolution eines Gaußschen Pulses mit dem Dispersionskoeffizienten $s = -0.01$ zu den Zeiten $t = 0.4557, 0.4583, 0.4624, 0.4647$. Anfangsbedingungen waren $E_0 = 3$, $R_0 = 0.707$, $Z_0 = 2$, Größe der Simulationsbox $[-9;9] \times [-9;9] \times [-9;9]$. Dargestellt ist ein Schnitt in der x - z -Ebene ($y = 0$), der Betrag des Feldes $|E|$ ist durch Farbe und Erhöhung der Ebene visualisiert.

4.4 Einfach- und Mehrfachsplittings

Aus den oben präsentierten Ergebnissen kann man offensichtlich ableiten, daß das frühere Bild von sequentiell fortgesetzten symmetrischen Splittings des Anfangspulses keineswegs generisch auftritt, bei allen hier untersuchten Anfangsbedingungen war es nicht zu beobachten. Stattdessen bilden sich kleinskalige Zellen an den entfernten Rändern der gesplitteten Pulse, die schließlich dispergieren.

Es wäre von daher interessant herauszufinden, welche Mechanismen das Auftreten von weiteren symmetrischen Splittings nach dem ersten Aufsplitten verhindern können. Aus diesem Grund beobachten wir die Evolution, indem wir Phase und Amplitude der anfänglichen Lösung entsprechend anpassen.

4.4.1 Doppel-Gauß Anfangsbedingung, Abhängigkeit von der Distanz

Zuerst benutzen wir eine doppelt Gauß-förmige Anfangsbedingung

$$E(x, y, z, t = 0) = E_0(G_+ + G_-) \quad (4.8)$$

mit den beiden Gaußschen Bestandteilen

$$G_{\pm}(x, y, z) = \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2R_0^2} - \frac{(z \pm \Delta z)^2}{2Z_0^2}\right). \quad (4.9)$$

Ausgehend von diesem Ansatz ist es möglich, für eine gegebene Anfangsamplitude E_0 die Abhängigkeit vom Abstand $\delta = 2\Delta z$ zu untersuchen. Gesucht wird ein kritischer Wert δ_c , oberhalb dessen die beiden Gaußschen Komponenten unabhängig voneinander in jeweils zwei Pulse symmetrisch aufsplitten, während unterhalb dieser Schwelle ein Splitting nicht mehr auftritt.

Im folgenden werden Ergebnisse für die Wahl der Anfangsamplitude zu $E_0 = 2.5$ vorgestellt. In Abbildung 4.15 sieht man die Zeitentwicklung im Fall $\delta = 8$. Man sieht klar, daß die Wechselwirkung zwischen den beiden Pulsen vernachlässigbar ist, beide Pulse splitten unabhängig voneinander in zwei symmetrische Strukturen.

Befinden sich die Pulse anfänglich etwas näher beieinander ($\delta = 7$), so zeigt Abbildung 4.16 einen qualitativ ähnlichen Verlauf, das symmetrische Splitting findet nahezu ungestört statt.

Interessant ist hier allerdings noch, die spätere Zeitentwicklung zu beobachten. Wie man sieht, bewegen sich die beiden innen gelegenen Pulse aufeinander zu und treffen zu einer späten Zeit ($t = 0.75$) aufeinander. Daraufhin verschmelzen sie zu wiederum einer größeren Zelle. Während die transversale Masse eines einzelnen der vier Pulse nicht ausreicht, um ein weiteres Splitting zu verursachen (zu erkennen an den äußeren Pulsen, die zu späten Zeiten dispergieren), enthält der neu entstandene Puls in der Mitte wiederum eine größere transversale Masse. Zur Zeit $t = 1.2$ (links unten) hat sich dieser mittlere Puls deshalb selbstfokussiert und zu der

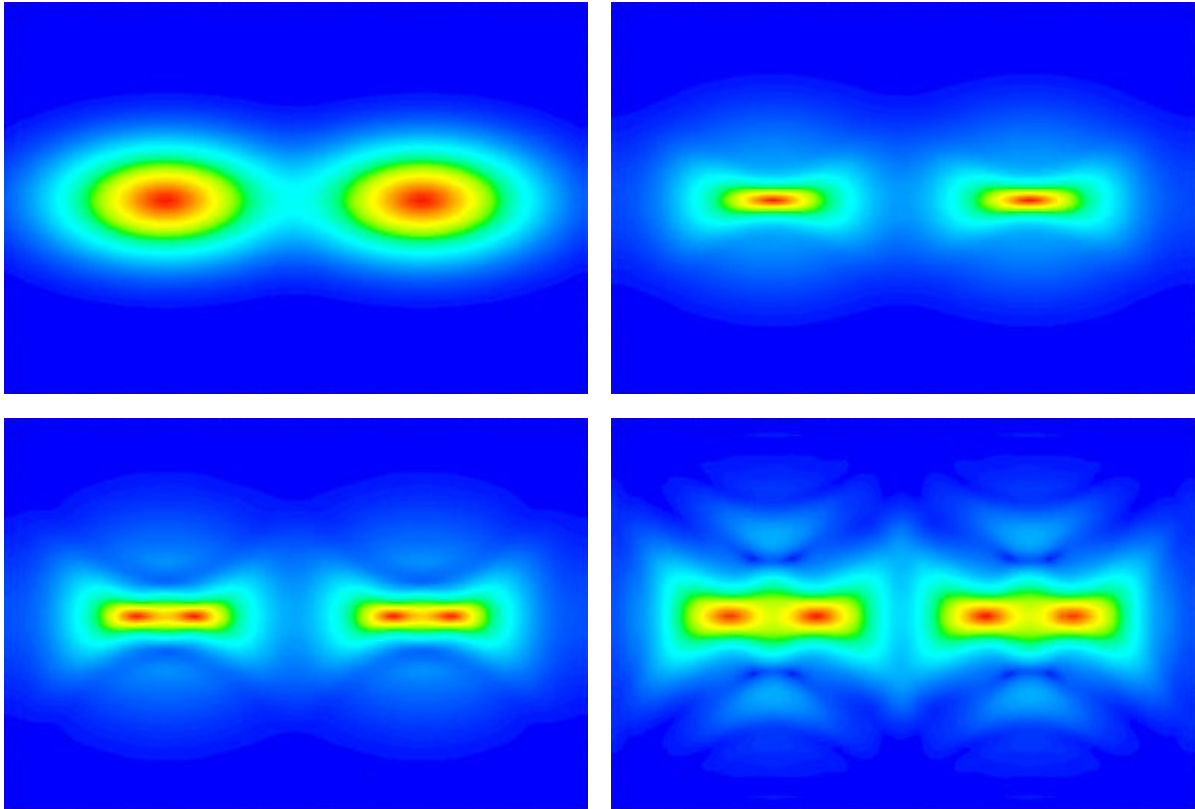


Abbildung 4.15: zwei Gaußsche Pulse, $E_0 = 2.5$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Abstand der Mittelpunkte $\delta = 8$, $t = 0.0, 0.4, 0.62, 0.875$, Vergrößerung um den Faktor 4 pro Raumrichtung.

letzten dargestellten Zeit $t = 1.4$ (rechts unten) erkennt man, daß der durch Verschmelzung entstandene Puls beginnt, sich wieder in seine zwei Bestandteile zu zerlegen. Zu einer solch späten Zeit sieht man auch die Folgen der periodischen Randbedingungen, denn inzwischen haben die äußeren Pulse die Wand erreicht und produzieren daher die sichtbaren Oszillationen im Hintergrund.

Verringert man den Abstand in der Anfangsbedingung weiter auf $\delta = 6$, so kann man beginnend in Abbildung 4.17 die Interaktion zwischen den beiden Pulsen erkennen. Die gesplitteten Pulse sind zur Mitte hin deutlich stärker ausgebildet als die weit voneinander entfernten Produkte.

Abbildung 4.18 zeigt, daß für den schon recht nahen Abstand $\delta = 5$ stark elongierte Formen der Pulse produziert werden. Dies bedeutet, daß die Situation dem zweidimensionalen Fall ähnlicher wird. Man erwartet also eine stärkere Selbstfokussierung, die wir dann tatsächlich auch beobachten. Es ist zu beachten, daß die Bilder zu den Zeiten $t \geq 0.4$ um den Faktor 16 statt wie vorher Faktor 4 vergrößert sind, so daß man die stark kontrahierten Strukturen noch erkennen kann. Bis hin zur Zeit $t = 0.41675$ sieht man eine Fortsetzung dieses Effekts, weshalb in Abbildung 4.19 nur noch einer der beiden Pulse in jetzt 64facher Vergrößerung

gezeigt wird. Deutlich zu erkennen ist die nun starke Unsymmetrie in longitudinaler Richtung, die durch Wechselwirkung mit dem nicht gezeigten Partnerpuls zustande gekommen ist.

Zum Abschluß dieser Simulationsreihe sei noch eine anfängliche Entfernung von $\delta = 4$ vorgestellt (Abbildung 4.20). Bei dieser Entfernung können die beiden Pulse nicht mehr getrennt werden, es ist nur ein länglicher Puls vorhanden. Aufgrund der elongierten Struktur wird auch hier ein nahezu zweidimensionaler Kollaps erwartet und auch in der Numerik beobachtet. Zu erkennen ist eine starke selbstähnliche Kontraktion, die nur aufgrund der zunehmenden Vergrößerung (von 4 über 16 auf 64-fach pro Raumrichtung) dargestellt werden kann. Diese Simulation wurde bis zu 10 Verfeinerungsleveln, also eine Erhöhung der Auflösung um den Faktor 1024^3 fortgesetzt, doch bis zur Erschöpfung der uns zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten konnte kein Aufsplitten beobachtet werden. Trotzdem ist davon auszugehen, daß die Dispersion in z -Richtung irgendwann an Bedeutung gewinnt und den zweidimensionalen Kollaps stoppt.

Zusammenfassend sind in Abbildung 4.21 noch einmal die Fälle $\delta = 8, 7, 5, 4$ in Form von Plots des Betrags des Feldes auf der z -Achse zu verschiedenen Zeiten dargestellt. Hier kann man deutlich die auftretende Wechselwirkung mit dem Nachbarpuls und die infolge dessen unsymmetrische Evolution der beiden Pulse beobachten, wenn sich die Pulse hinreichend nahekommen.

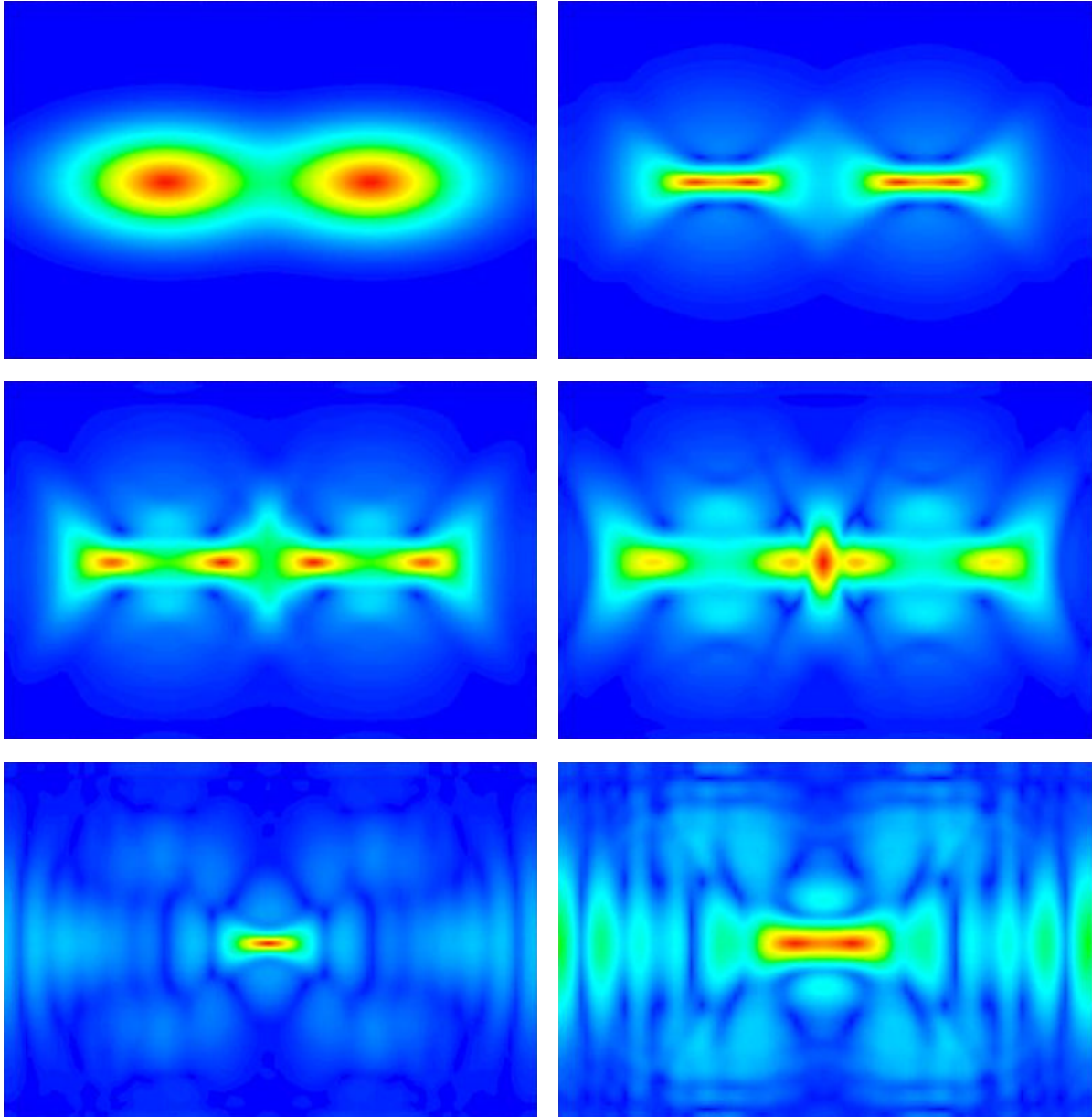


Abbildung 4.16: zwei Gaußsche Pulse, $E_0 = 2.5$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Abstand der Mittelpunkte $\delta = 7$, $t = 0.0, 0.6, 0.75, 0.85, 1.2, 1.4$, Vergrößerung um den Faktor 4 pro Raumrichtung.

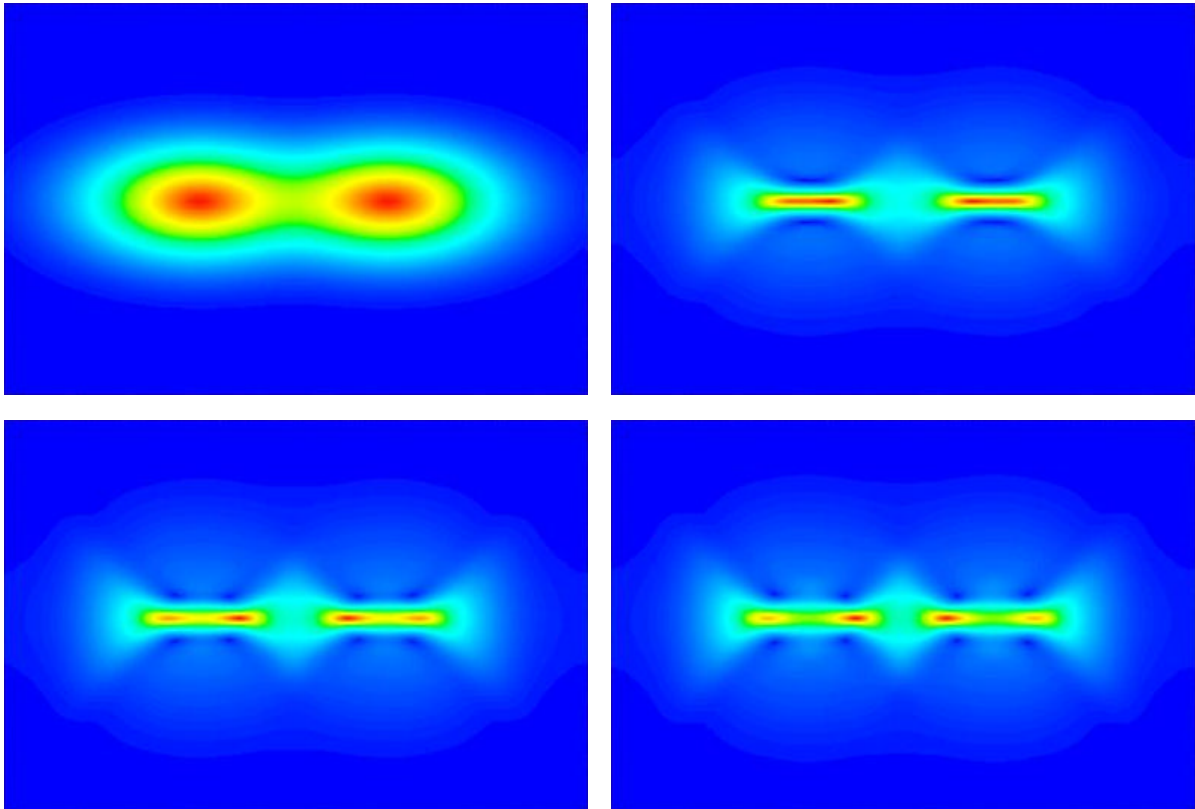


Abbildung 4.17: zwei Gaußsche Pulse, $E_0 = 2.5$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Abstand der Mittelpunkte $\delta = 6$, $t = 0.0, 0.52, 0.57, 0.60$, Vergrößerung um den Faktor 4 pro Raumrichtung.

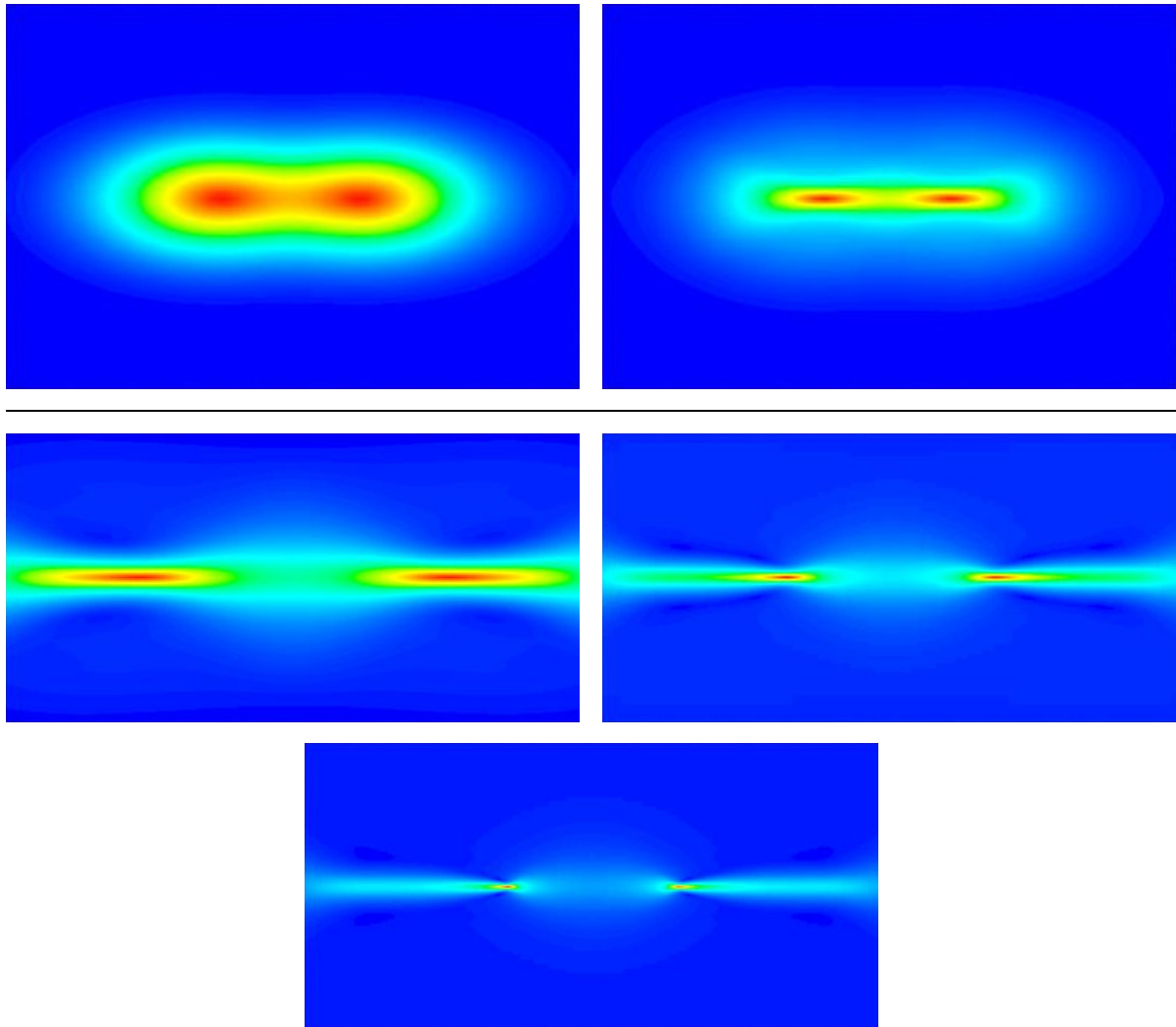


Abbildung 4.18: zwei Gaußsche Pulse, $E_0 = 2.5$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Abstand der Mittelpunkte $\delta = 5$, $t = 0.0, 0.3, 0.4, 0.4143, 0.41675$, Vergrößerung um den Faktor 4 pro Raumrichtung (obere Reihe) bzw. Faktor 16 (Mitte/unten).

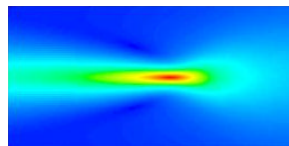


Abbildung 4.19: Zoom des linken Pulses im letzten Plot der Abbildung 4.18.

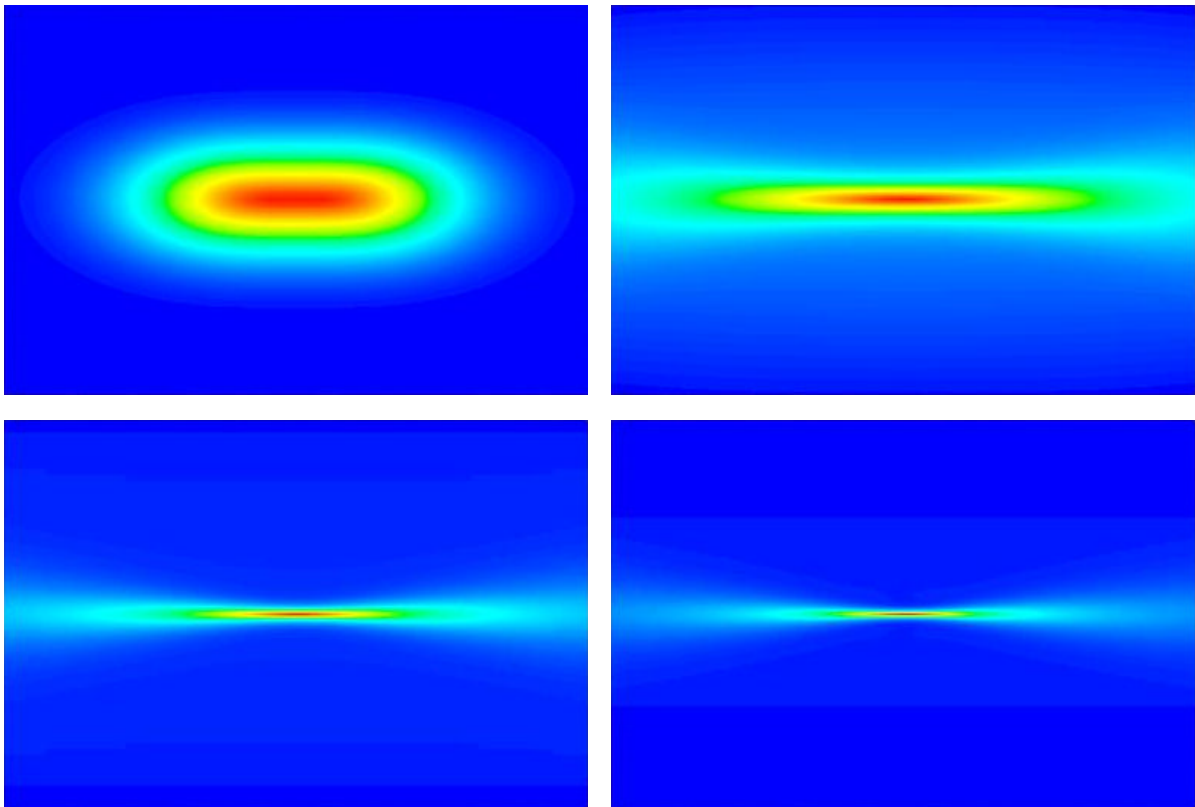


Abbildung 4.20: zwei Gaußsche Pulse, $E_0 = 2.5$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Abstand der Mittelpunkte $\delta = 4$, $t = 0.0, 0.24, 0.24849, 0.24855$, Vergrößerung um den Faktor 4 pro Raumrichtung (links oben), Faktor 16 (rechts oben), Faktor 64 (unten).

4 Splitting von Gaußschen Pulsen

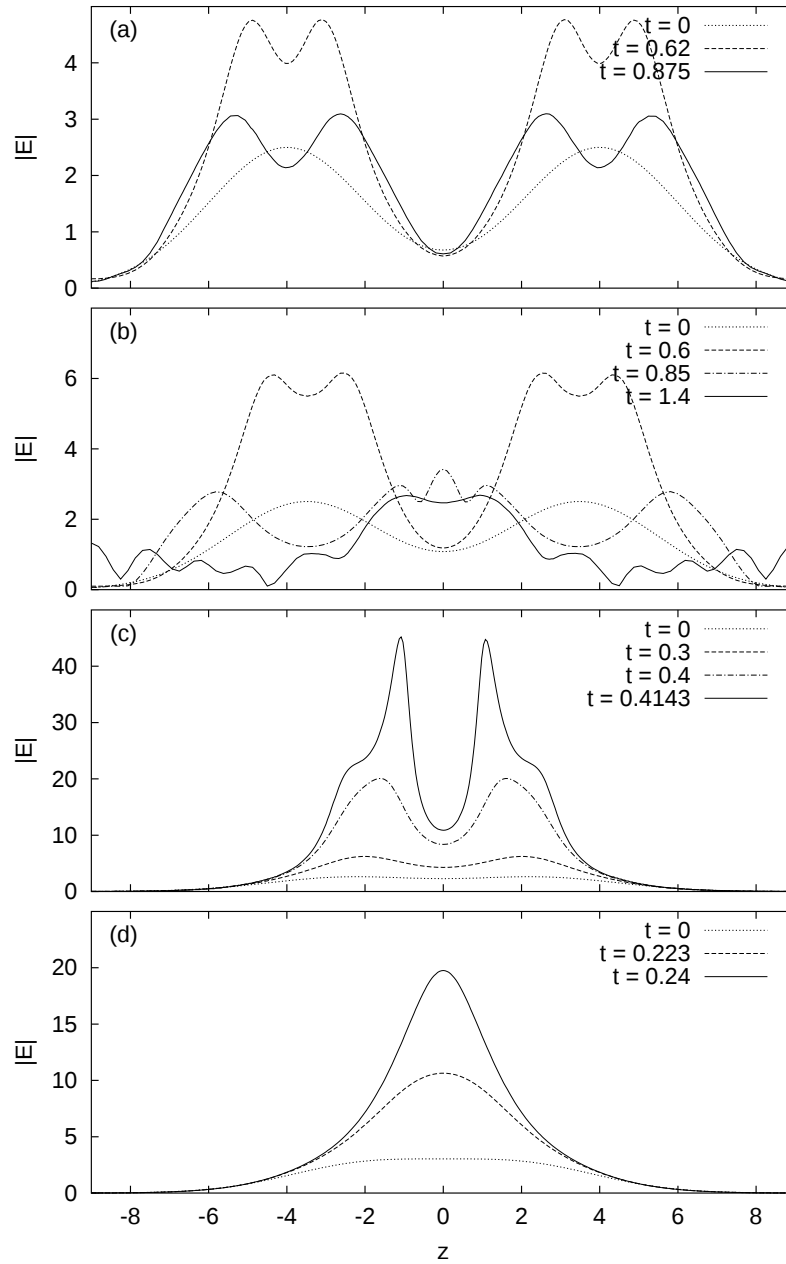


Abbildung 4.21: $|E|$ zu verschiedenen Zeiten, anfangend mit zwei Gaußschen Pulsen im anfänglichen Abstand δ und $E_0 = 0$. (a) $\delta = 8$, die beiden Pulse splitten unabhängig voneinander; (b) $\delta = 7$, die beiden inneren Pulse verschmelzen in eine zentrale Zelle, die sich bei $t = 1.4$ wiederum aufteilt; (c) $\delta = 5$, die beiden Komponenten selbstfokussieren in zwei getrennten Strukturen; (d) $\delta = 4$, die beiden nicht trennbaren Pulse koaleszieren und zeigen eine kollapsartige Dynamik.

4.4.2 Doppel-Gauß Anfangsbedingung, Abhängigkeit von der Amplitude

Nachdem nun die Abhängigkeit der zeitlichen Entwicklung von zwei Gaußschen Pulsen von der Entfernung untereinander untersucht wurde, stellt sich noch die Frage, inwieweit diese Ergebnisse von der Anfangsamplitude der Pulse abhängen.

Hierzu wurden für einen festgelegten Abstand $\delta = 5$ Werte für die Anfangsamplitude E_0 im Bereich von 1.8 bis 2.5 simuliert.

Der Fall $E_0 = 1.8$ ist in Abbildung 4.22 dargestellt. Bei dieser relativ kleinen Anfangsenergie findet nur eine geringe Selbstfokussierung der beiden Pulse statt. Die beiden Strukturen verschmelzen zu einem großen Puls, der dann langsam dispergiert. Es wird keinerlei Aufsplitten beobachtet.

Wird die Anfangsmasse erhöht ($E_0 = 2.1$), Abbildung 4.23, so findet auch hier anfangs eine Koaleszenz der beiden Pulse statt. Das Result dieses Verschmelzen kontrahiert jedoch weiter und splittet sich wieder symmetrisch in zwei Strukturen auf.

Der Fall einer noch höheren Anfangsamplitude ($E_0 = 2.5$) ist bereits aus Abbildung 4.18 bekannt. Hier ist die Selbstfokussierung schon anfangs so stark, daß es nicht mehr zu einem Verschmelzen kommt, sondern beide Pulse einzeln kontrahieren.

Deutlich zu sehen ist das Verschmelzen im Feld $|E|$ entlang der Symmetrieachse in Abbildung 4.24, unterer Plot ($E_0 = 1.8$). Bei der höheren Energie $E_0 = 2.1$ sieht man im oberen Plot, wie aus dem einen verschmolzenen Puls wieder zwei Peaks entstehen.

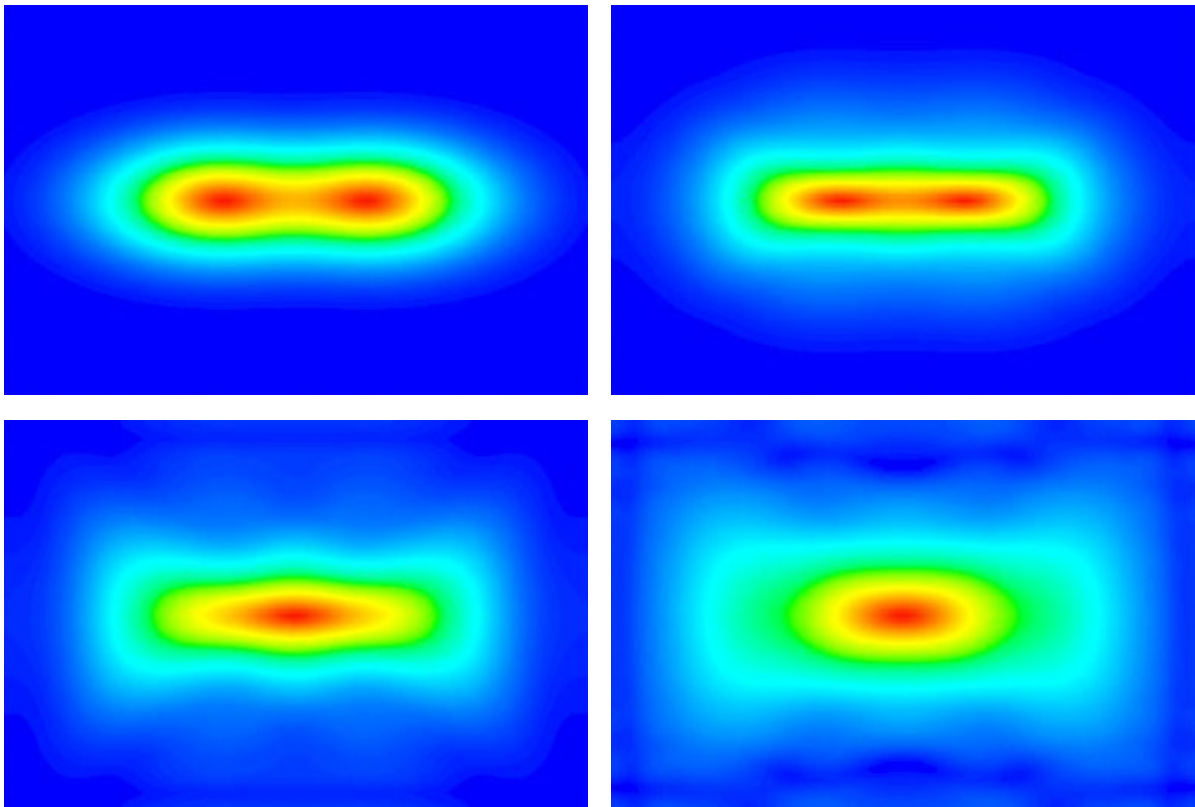


Abbildung 4.22: zwei Gaußsche Pulse, $E_0 = 1.8$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Abstand der Mittelpunkte $\delta = 5$, $t = 0.0, 0.5, 0.9, 1.5$, Vergrößerung um den Faktor 4 pro Raumrichtung.

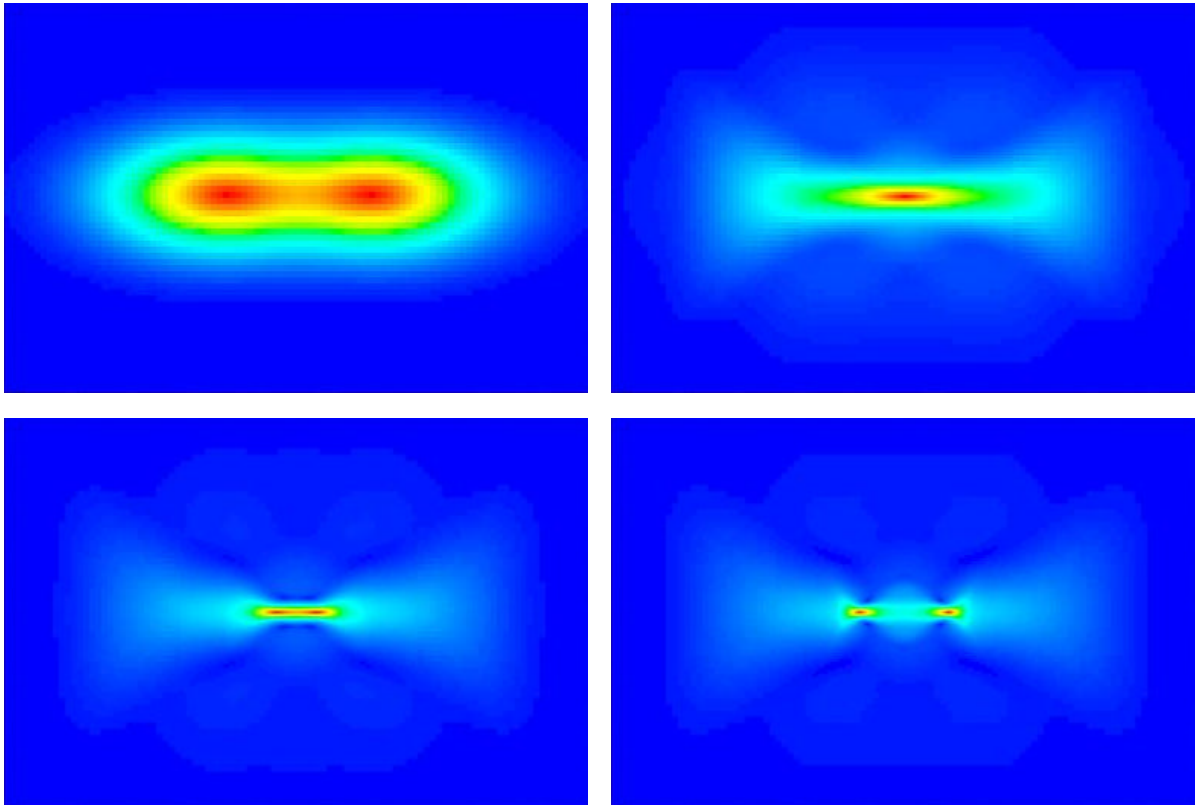


Abbildung 4.23: zwei Gaußsche Pulse, $E_0 = 2.1$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Abstand der Mittelpunkte $\delta = 5$, $t = 0.0, 0.78, 0.915, 0.97$, Vergrößerung um den Faktor 4 pro Raumrichtung.

4 Splitting von Gaußschen Pulsen

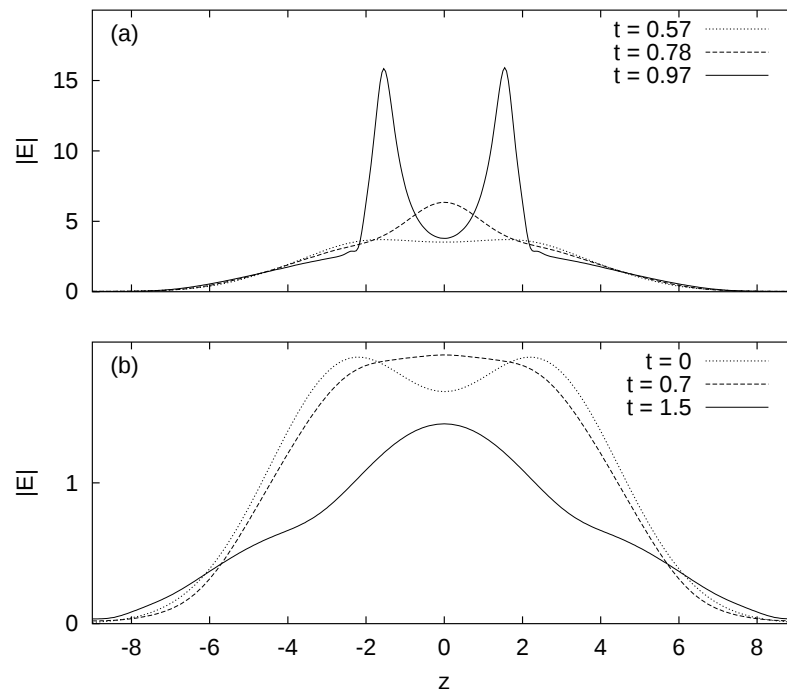


Abbildung 4.24: $|E|$ aufgetragen gegen z zu verschiedenen Zeiten für den Anfangsabstand $\delta = 5$: (a) $E_0 = 2.1$, die beiden Gaußschen Pulse verschmelzen und splitten wieder, (b) $E_0 = 1.8$, die beiden Gaußschen Pulse verschmelzen und dispergieren dann.

4.4.3 Einfluß eines Chirps

Wie in den anfänglichen Simulationen festgestellt und bereits ausführlich beschrieben, geschieht nach dem ersten Splitting kein symmetrisches weiteres Aufsplitten der entstandenen Pulse mehr, stattdessen lösen sich Zellen an den entfernten Seiten der Pulse ab. Ein Erklärungsansatz dafür ist, wie gerade untersucht und bestätigt, daß die beiden nicht allzu weit voneinander entfernten Pulse eine gegenseitige Wechselwirkung aufeinander ausüben, die die Symmetrie bricht.

Eine weitere Idee besteht darin zu untersuchen, welchen Einfluß die Phasenverteilung, die durch das erste Splitting produziert wurde, auf die weitere Zeitentwicklung hat. Zum Vergleich wurde eine Simulation mit den Parametern $E_0 = 2.9$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$ nach dem ersten Splitting unterbrochen und die Phasen im ganzen Integrationsbereich wieder auf Null gesetzt. Danach wurde die numerische Integration fortgesetzt. Man konnte beobachten, daß die Lösung sich wieder reorganisierte. Es wurde systematisch wieder die aus Abbildung 4.5 bekannte Lösung reproduziert, es formierten sich wiederum die kleinen Zellen am Rand. Offensichtlich ist also das Ausbilden von Fronten und Ablösen von Zellen eine generische Eigenschaft der untersuchten hochenergetischen Pulse und nicht durch eine spezielle Phasenverteilung vorausbestimmt.

Andererseits ist bekannt, daß die Einführung eines sogenannten Chirps in der Phase der Anfangsbedingung Auswirkungen auf die Dynamik eines Gaußschen Pulses in der nichtlinearen Schrödingergleichung hat. Darunter versteht man eine Anfangsbedingung der Form

$$E(x, y, z, t = 0) = E_0 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2R_0^2} - \frac{z^2}{2Z_0^2}\right) \exp(iCz^2) . \quad (4.10)$$

Da ein Term der Form $\exp(iVz)$ einer lokalen Bewegung mit Geschwindigkeit V entspricht, sorgt ein Chirp für eine komprimierende ($C > 0$) bzw. verbreiternde Wirkung ($C < 0$) in longitudinaler Richtung um den Koordinatenursprung. Es ist von daher nicht weiter verwunderlich, daß wir eine deutliche Abhängigkeit der kritischen Masse für ein Splitting-Ereignis vom anfänglichen Chirp gefunden haben.

Abbildung 4.25 zeigt die Evolution eines Gaußschen Anfangspulses mit den Parametern $E_0 = 2.3$, $R_0 = 1$ und $Z_0 = 2$. Von links nach rechts ist die Zeitevolution zu erkennen, von oben nach unten sind die Fälle mit Chirpparameter $C = 0$, $C = 0.2$, $C = 1.0$ aufgetragen.

Im Referenzfall $C = 0$ erkennt man oben zunächst, daß die transversale Masse nicht ausreicht, um ein Splitting-Ereignis zu provozieren. Der Puls komprimiert leicht und bleibt dann relativ stabil bei einer solitonenartigen Lösung.

Führt man nun den zusätzlichen komprimierenden Chirp $C = 0.2$ in die Anfangsbedingung ein, so sieht man in der mittleren Reihe im zweiten Bild, daß wie erwartet eine Kompression in longitudinaler (im Bild vertikaler) Richtung stattfindet. Hierdurch wird aufgrund der Gesamtmassenerhaltung auch die transversale Masse im Bereich um $z = 0$ erhöht und somit eine stärkere Selbstfokussierung angeregt. Diese stärkere Kontraktion, die sich im nächsten

Bild zeigt, führt dann schließlich auch zu einem Splitting-Ereignis, was den Einfluß auf die kritische transversale Masse beweist.

Verstärkt man den Chirp weiter zu $C = 1.0$, so verstärkt sich auch der oben beschriebene Effekt. Eine stärkere Kompression in longitudinaler Richtung führt zu einer starken Kontraktion in transversaler Richtung und wiederum zu einem Aufsplitten des Pulses. Auch hier erfolgt kein abschließender Kollaps, sondern stattdessen läßt sich in der Vergrößerung in Abbildung 4.26 wiederum das Ablösen von Zellen an der Außenfront der gesplitteten Pulse finden.

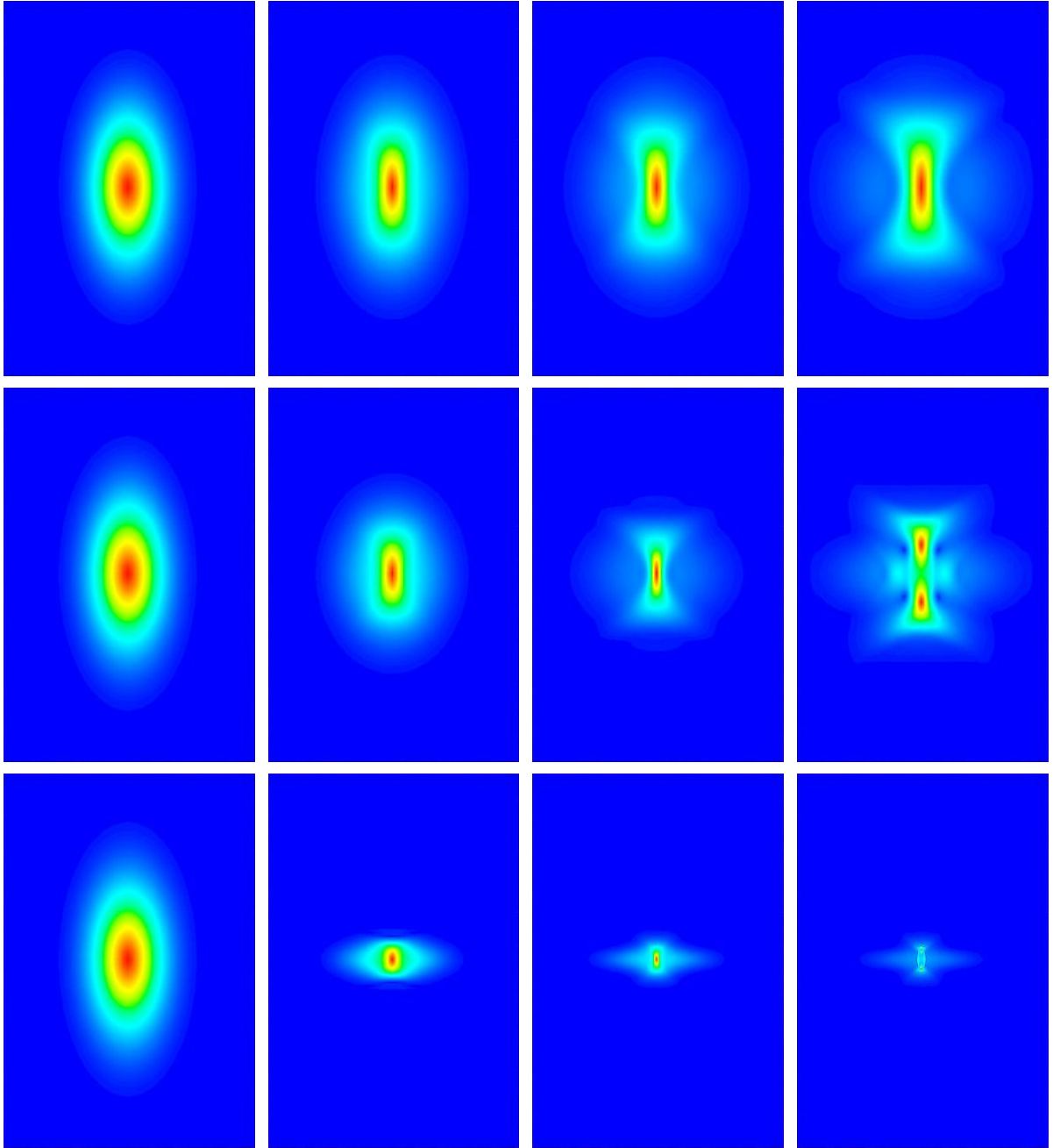


Abbildung 4.25: Evolution eines Gaußschen Pulses mit dem Dispersionskoeffizienten $s = -1$ zu den Zeiten $t = 0, 0.3, 0.5, 0.7$ (v.l.n.r.). Anfangsbedingungen waren $E_0 = 2.3$, $R_0 = 1$, $Z_0 = 2$, Größe der Simulationsbox $[-6; 6] \times [-6; 6] \times [-18; 18]$. Dargestellt ist ein Schnitt in der x - z -Ebene ($y = 0$), $(x, z) \in [-6; 6] \times [-9; 9]$. In den drei Reihen ist die Anfangsbedingung mit einem komprimierenden Chirp von 0 (oben), 0.2 (mitte) und 1 (unten) versehen.

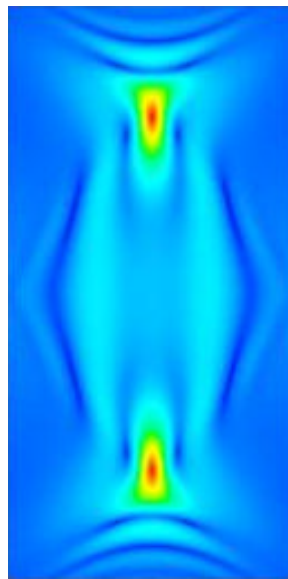


Abbildung 4.26: Vergrößerung des letzten Bildes (rechts unten) aus Abbildung 4.24 um den Faktor 8 (pro Raumrichtung).

5 Modulationsinstabilitäten von zylindrischen Wellenleitern

5.1 Einleitung

Die nichtlineare Schrödingergleichung (2.1) hat spezielle Lösungen, die *zylindrische Wellenleiterlösungen* genannt werden. Es handelt sich um Lösungen der Form

$$\psi(x, y, z, t) = \phi(r) \exp(i\lambda^2 t) , \quad (5.1)$$

d. h. die Welle bewegt sich trotz Dispersion und Nichtlinearität mit unveränderter Form in Propagationsrichtung.

Verändert man solche Lösungen leicht durch Störung in z -Richtung, so treten Modulationsinstabilitäten auf, die sich in zwei Mustern darstellen:

Einmal findet man die sogenannte Bunch-Instabilität, verursacht durch ein periodisches Aufbrechen eines solitären Wellenleiters ϕ_0 durch gerade Störungen. Andererseits entstehen sogenannte *Snakes* als Folge des Einknickens durch ungerade Moden.

Aus Abschnitt 2.5 wissen wir, daß die Grundzustandsfunktion ϕ_0 gerade in der transversalen Variable ist, während $\frac{\partial}{\partial r}\phi_0$ ungerade ist, so daß man erwartet, daß folgende Anfangsbedingung

$$E(x, y, z, t = 0) = (1 + \varepsilon \cos(kz)(i + \partial_x)) \phi_0(x, y) , \quad (5.2)$$

mit einer kleinen Störung $\varepsilon \ll 1$, die solitäre Lösung ϕ_0 effektiv destabilisieren wird.

Um die numerische Behandlung zu vereinfachen, wurden als Anfangsbedingung gestörte Gaußsche Wellenleiter gewählt. Da die wahre Grundzustandslösung ϕ_0 sehr nahe an einer Gaußschen Form ist, hat dieser Unterschied keinen großen Einfluß auf die untersuchte Dynamik.

Somit haben wir eine Gaußsche Lösung mit kleinskaligen Modulationen als Anfangsbedingung statt Gleichung (5.2) gewählt:

$$E(x, y, z, t = 0) = (1 + \cos(kz)(i\varepsilon_b + \varepsilon_s \partial_x)) E_{ini}(x, y) , \quad (5.3)$$

$$E_{ini}(x, y) \equiv E_0 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2R_0^2}\right) . \quad (5.4)$$

Hierbei sind $\varepsilon_b \ll 1$ und $\varepsilon_s \ll 1$ die kleinen Parameter, welche die Amplituden von Bunch- und Snake-artigen Störungen einzeln wählbar bestimmen. In Gleichung (5.3) bestimmt k die Wellenzahl der Instabilität. Um vergleichbare Ergebnisse zu anderen Arbeiten [44, 20, 35] zu erhalten, wurde diese Zahl in der Größenordnung von Eins gewählt ($k = 1 \dots 5$).

Nebenbei bemerkt läßt sich hiermit nachweisen, daß der von uns entwickelte adaptive numerische Code sehr gut funktioniert. Wie man sieht, ist die Gleichung instabil gegenüber einer Vielzahl von Störungen. Auch das Aufeinandertreffen von verfeinerten und gröberen Gittern sowie verfeinerten Gittern untereinander stellt natürlich grundsätzlich bei nicht hinreichender

Auflösung eine kleine Störung da, die sich so verstärken könnte und ungewollte numerische Artefakte hervorruft. Doch unsere Untersuchungen von zweidimensionalen rotationssymmetrischen Pulsen mit einem dreidimensionalen Code zeigen, daß die Strukturen die Rotations-symmetrie exakt beibehalten, die Auflösung ist also tatsächlich hoch genug, um numerische Probleme zu vermeiden.

5.2 Bunch-Instabilität

Im ersten Beispiel, Abbildung 5.1, sieht man einen typischen Fall für die Bildung von Bunches und deren zeitlicher Entwicklung. Als Anfangsbedingung wurde $E_0 = 1.95$, $R_0 = 1$, $\varepsilon_b = 0.1$ und $\varepsilon_s = 0$ benutzt. Die Bunch-Instabilität bildet sich aus, man erhält zwei Bunches mit entgegengesetzter Geschwindigkeit, die schließlich mit ihrem periodische Nachbar kollidieren und verschmelzen. Das durch die Verschmelzung entstandene Gebilde zerfällt dann wieder in mehrfach gesplittete Strukturen mit regelmäßigem Abstand.

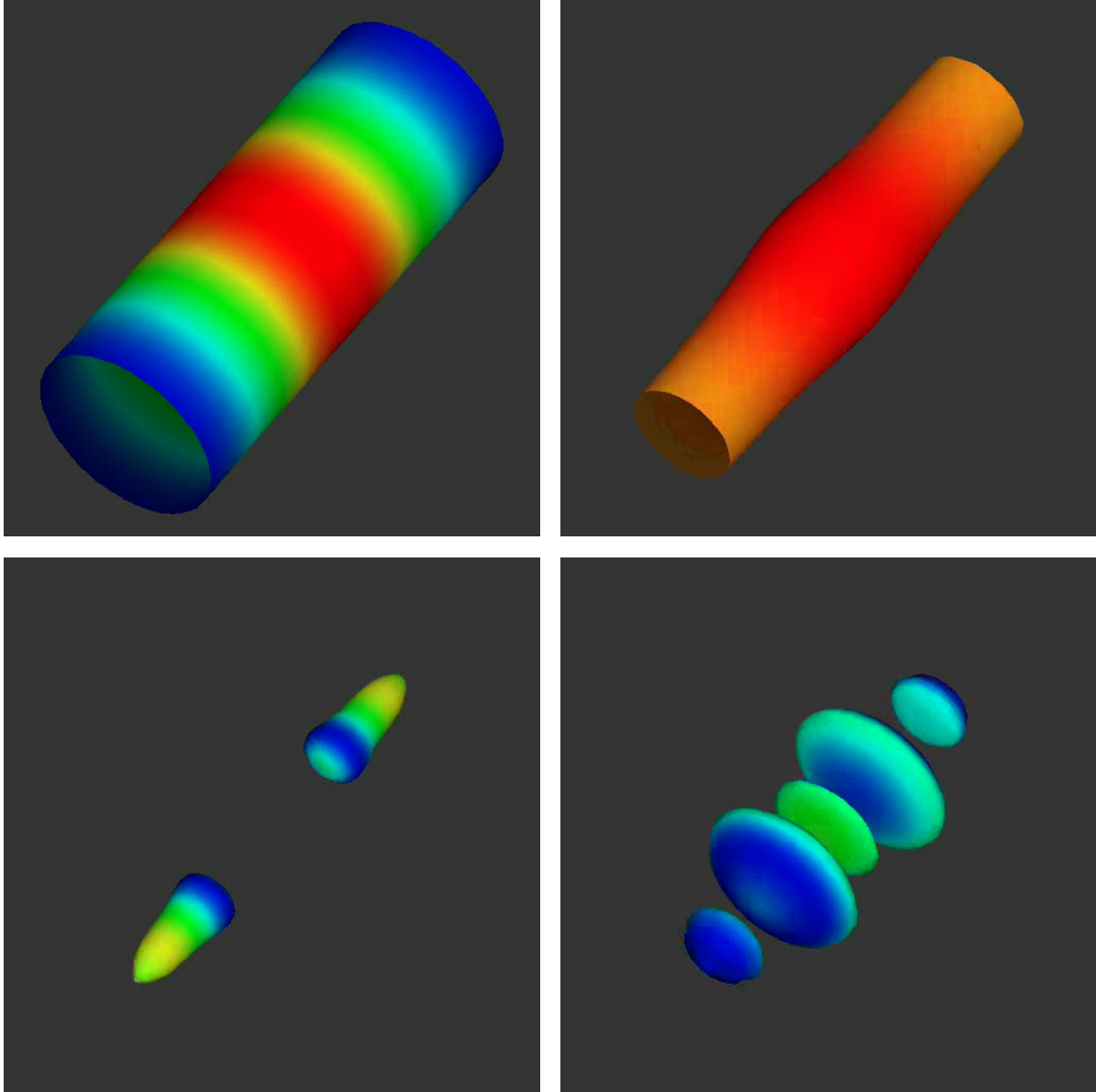


Abbildung 5.1: 3D Plots von Isoflächen bei 50% der Maximalamplitude für einen gestörten Gaußschen Wellenleiter mit $E_0 = 1.95$, $R_0 = 1$, $\varepsilon_b = 0.1$, $\varepsilon_s = 0$. Zu sehen ist die Formierung und weitere Evolution von Bunches zu verschiedenen Zeiten. Die Farbe der Fläche wird durch die Phase des Feldes bestimmt.

5.3 Snake-Instabilität

In Abbildung 5.2 ist der andere Fall dargestellt: die Snake-Instabilität. Ausgehend von der Anfangsbedingung mit $E_0 = 1.95$, $R_0 = 1$, $\varepsilon_b = 0$ und $\varepsilon_s = 0.1$ wächst die anfänglich kleine Störung stark an. Die Isoflächen des Wellenleiters werden während der Evolution stark verformt. Die eingeknickte Struktur beginnt transversal selbstzufokussieren und zerfällt dadurch schließlich in mehrere Teilstücke. Somit sieht das Endresultat ähnlich dem Zerfall in Bunches aus, obwohl der Mechanismus hier, wie gerade dargestellt, ein ganz anderer ist.

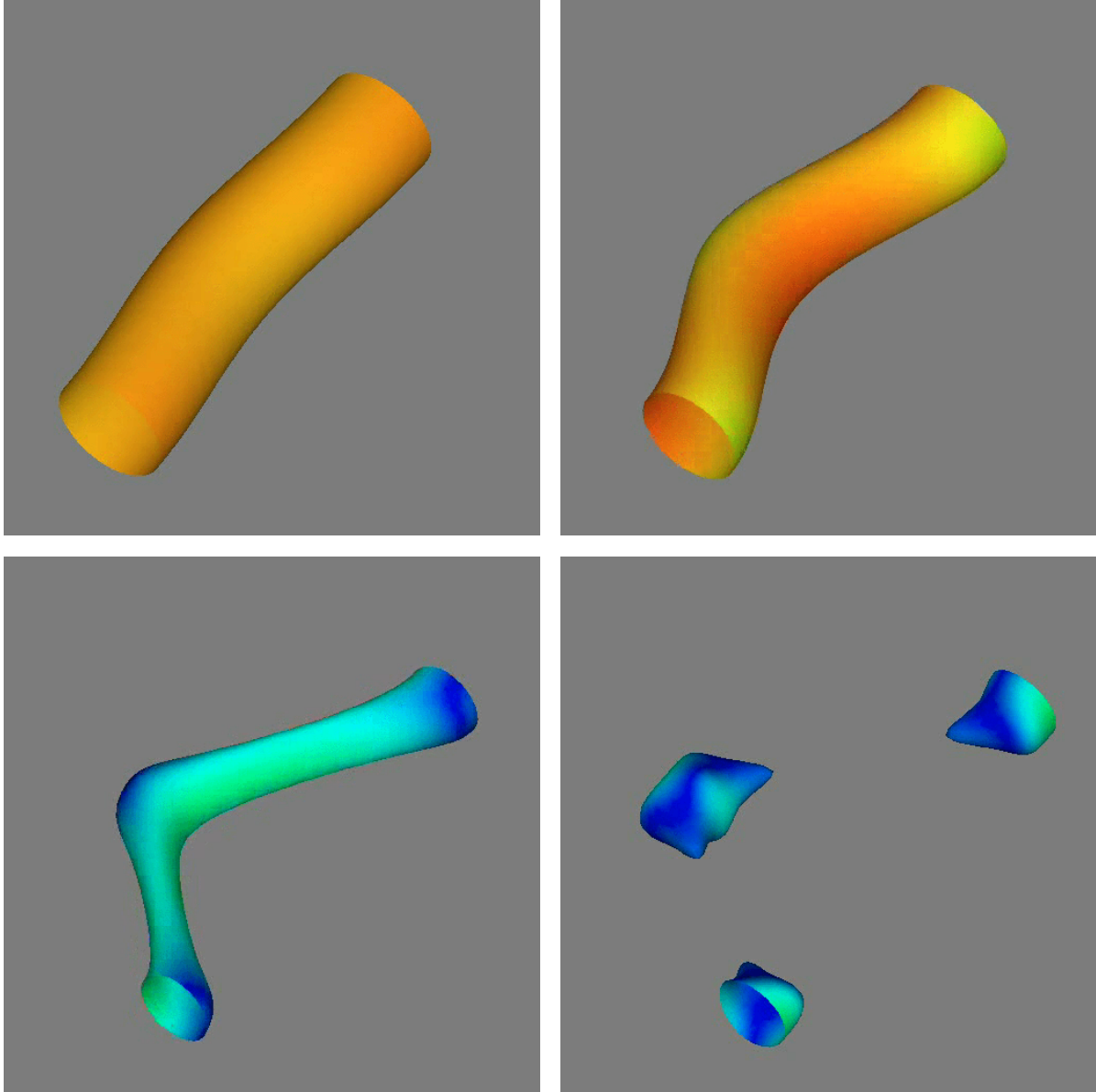


Abbildung 5.2: 3D Plots von Isoflächen bei 50% der Maximalamplitude für einen gestörten Gaußschen Wellenleiter mit $E_0 = 1.95$, $R_0 = 1$, $\epsilon_b = 0$, $\epsilon_s = 0.1$. Zu sehen ist die Ausbildung der Snake-Instabilität.

5.4 Konkurrenz der beiden Instabilitäten

Um die Stärke der beiden Arten von Instabilität zu vergleichen, wurden als nächstes die Evolution von Anfangsbedingungen untersucht, die sowohl Snake- als auch Bunch-artige Störungen enthielten, d. h. Gleichung (5.3) mit $\varepsilon_b \neq 0$ und $\varepsilon_s \neq 0$.

Die Ergebnisse sind in den folgenden Abbildungen 5.3 – 5.6 dargestellt. Die erste Abbildung zeigt die Evolution als longitudinaler Schnitt für die Parameter $E_0 = 1.95$, $R_0 = 1$, $\varepsilon_b = \varepsilon_s = 0.1$ und $k = 1$. Für die nächste Abbildung, 5.4, wurde die Anfangsamplitude auf $E_0 = 2.05$ erhöht. Ein Fall höherer Wellenzahl $k = 5$ ist in Abbildung 5.5 zu sehen, E_0 war hier wieder 1.95. Schließlich wurde noch einmal die Evolution bei sehr kleiner Störungsamplitude $\varepsilon_b = \varepsilon_s = 0.001$ in Abbildung 5.6 untersucht.

Aus diesen Bildern ist ersichtlich, daß in den meisten Fällen die Bunch-Instabilität gewinnt: Obwohl der Wellenleiter anfänglich gebogen wird, bilden sich dann kleinskalige Bunches in der Struktur, die Dynamik ist vergleichbar mit der aus Abbildung 5.1 bekannten Evolution. Die Bunches überleben oder verschmelzen nach dem anfänglichen Einknicken in ein zentrales Gebilde. Diese Struktur wird dann durch das Verbiegen noch etwas verschoben. Bei hoher anfänglicher Energie kann die Bildung der kleinskaligen Bunches durch die bekannte Splitting-Dynamik unterstützt werden, bei kleinerer Energie bzw. kleinerer Störung ist hingegen die Bildung der Snake-Instabilität zu Beginn der Zeitentwicklung deutlicher zu beobachten.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß schon kleine Störungen eines anfänglich Gaußschen Wellenleiters komplizierte Prozesse anregen, die wesentliche Abweichungen von dem bekannten primären Splittingszenario zur Folge haben. Damit ist klar, daß einfache analytische Ansätze wie z. B. in [13] nur einen begrenzten Gültigkeitsbereich haben können. Die nichtlineare Schrödingergleichung mit anisotroper Dispersion (2.1) enthält eine reiche Dynamik, viel weitreichender als nur ein einfaches Splitting. Stört man die Anfangsbedingungen leicht, so erhält man beispielsweise vielfach gesplittete Pulse, zeitliche und räumliche Verformungen und Koaleszenzeffekte.

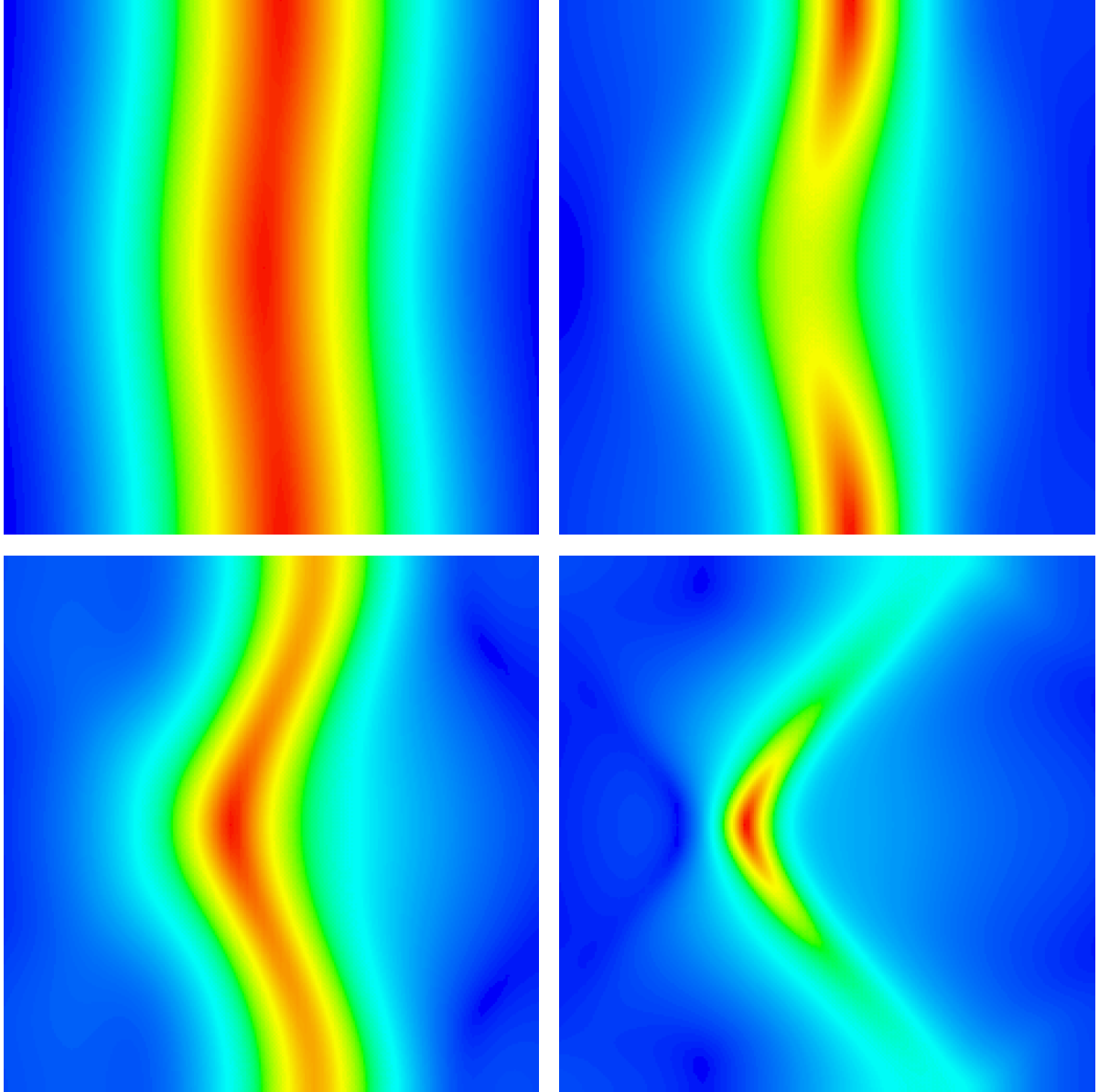


Abbildung 5.3: Longitudinale Schnitte zu verschiedenen Zeiten, Anfangsbedingung war eine Gaußscher Wellenleiter (Gleichung 5.3), $E_0 = 1.95$, $R_0 = 1$, $\varepsilon_b = \varepsilon_s = 0.1$, $k = 1$.

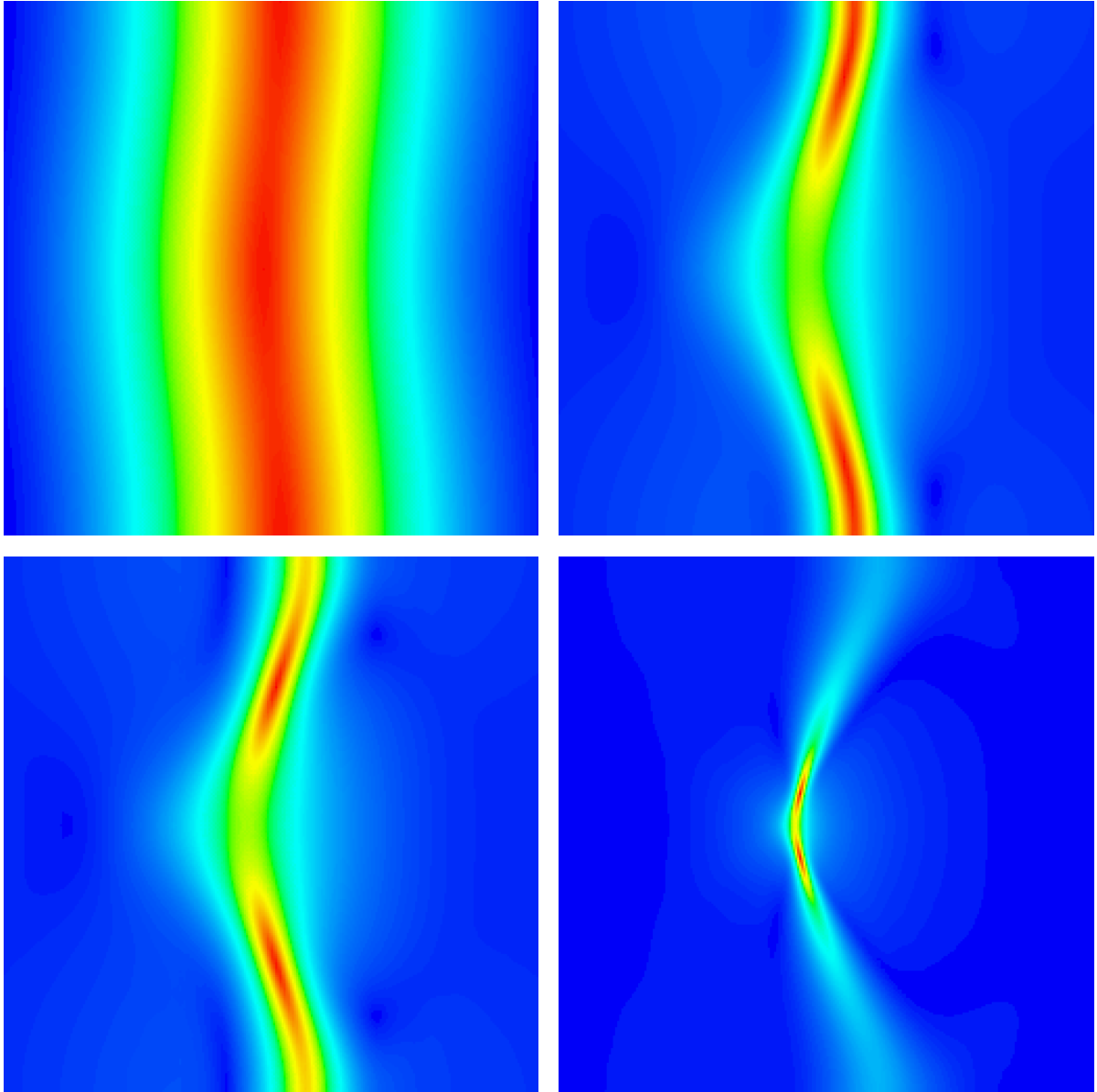


Abbildung 5.4: Longitudinale Schnitte zu verschiedenen Zeiten, Anfangsbedingung war eine Gaußscher Wellenleiter (Gleichung 5.3), $E_0 = 2.05$, $R_0 = 1$, $\varepsilon_b = \varepsilon_s = 0.1$, $k = 1$.

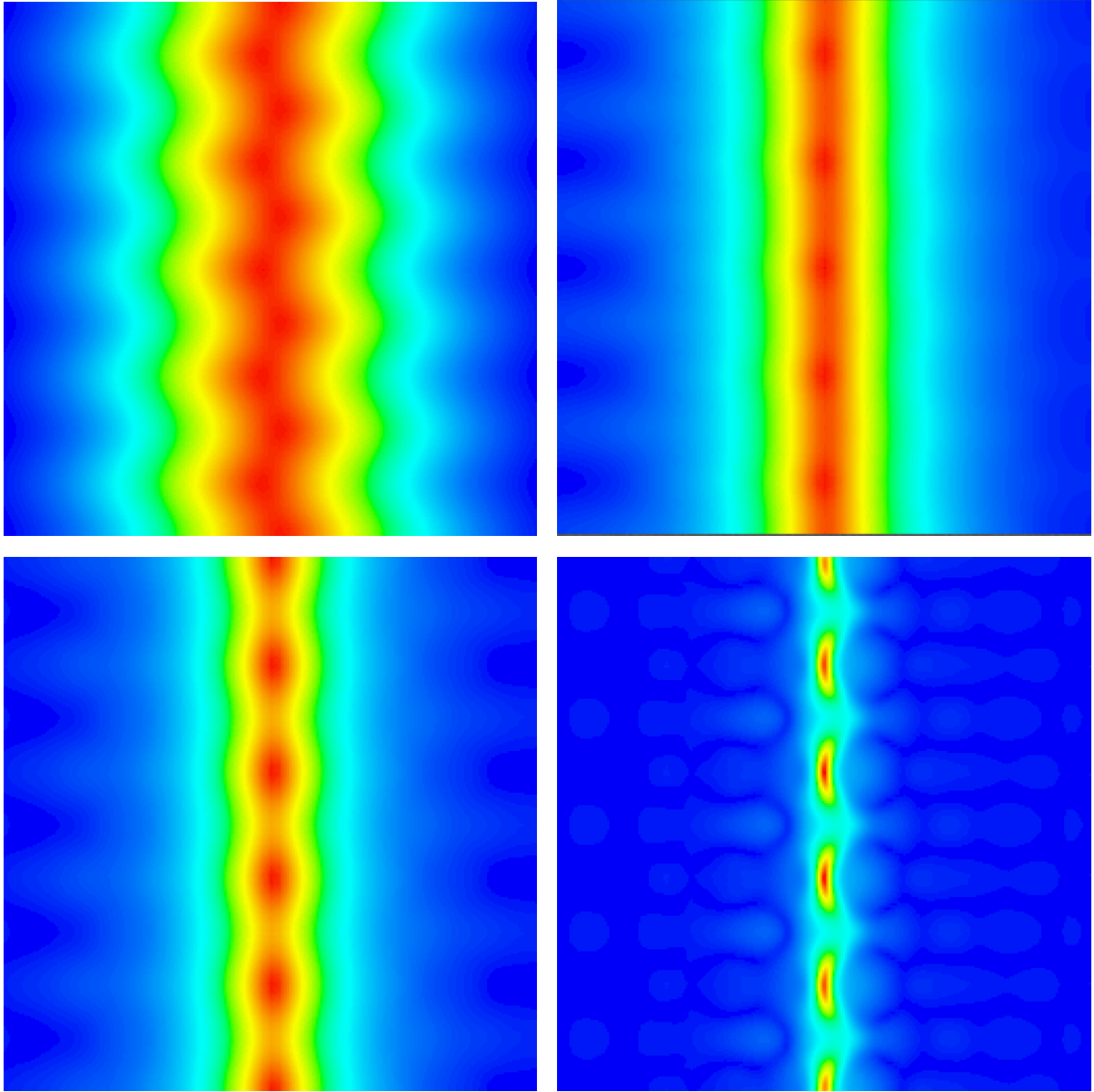


Abbildung 5.5: Longitudinale Schnitte zu verschiedenen Zeiten, Anfangsbedingung war eine Gaußscher Wellenleiter (Gleichung 5.3), $E_0 = 1.95$, $R_0 = 1$, $\epsilon_b = \epsilon_s = 0.1$, $k = 5$.

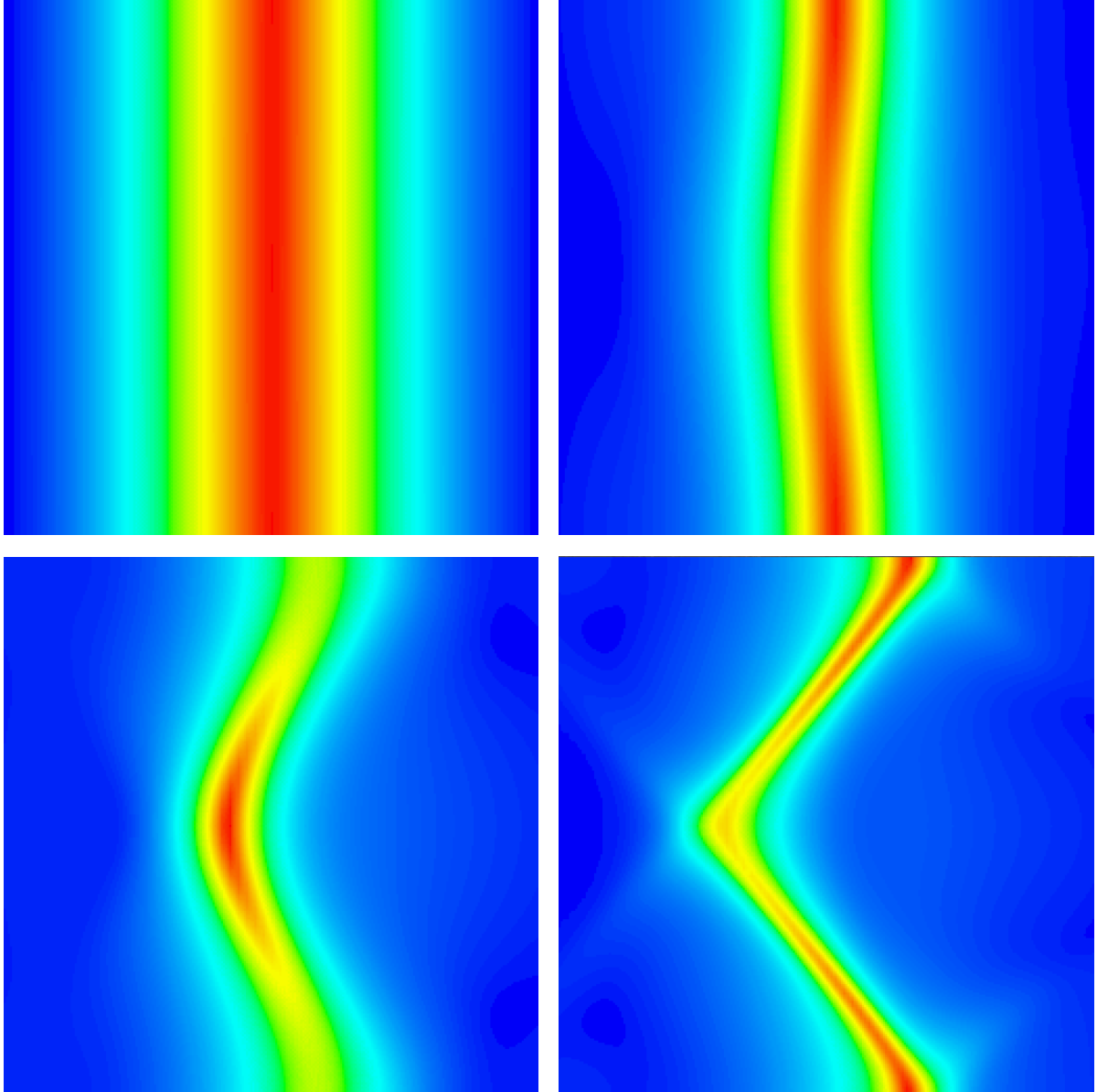


Abbildung 5.6: Longitudinale Schnitte zu verschiedenen Zeiten, Anfangsbedingung war eine Gaußscher Wellenleiter (Gleichung 5.3), $E_0 = 1.95$, $R_0 = 1$, $\epsilon_b = \epsilon_s = 0.001$, $k = 1$.

6 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde die Dynamik von Lösungen der dreidimensionalen kubisch nichtlinearen Schrödingergleichung mit anisotroper Dispersion (2.1) untersucht.

Begonnen wurde mit einer Einführung in dieses Arbeitsgebiet und einer Zusammenfassung der bisher bekannten theoretischen Ergebnisse und den daraus abgeleiteten Erwartungen.

Die Hauptergebnisse dieser Arbeit wurden mit Hilfe von numerischen Simulationen gewonnen. Es wurde ein numerischer Code entwickelt, der kollapsartige Phänomene mit Hilfe der Methode der blockstrukturierten adaptiven Gitterverfeinerung sehr gut und effektiv auflösen kann. Sowohl die verwendeten Integrationsschemata als auch die grundlegende Arbeitsweise der adaptiven Gitterverfeinerung wurden vorgestellt.

Die Untersuchung von Gaußschen Pulsen als Anfangsbedingung zeigte, daß in Medien mit anisotroper Dispersion tatsächlich ein Aufsplitten des anfänglichen Pulses stattfindet, und daß die hierdurch erzeugten Pulse dann in weitere Strukturen mit kleinerer Amplitude zerfallen, solange ihre Masse noch überkritisch ist. Für mäßig überkritische Anfangsmassen weicht dieses Verhalten von dem ursprünglich in [7, 8] erwarteten Verhalten ab, wo mit einem wiederholten symmetrischen Aufsplitten der entstandenen Pulse gerechnet wurde. In den Simulationen zeigte sich jedoch, daß sich stattdessen nach dem ersten Splitting an den entfernten Enden der Pulse ein schockartiges Profil bildet und sich nur von dort aus sekundäre Strukturen ablösen. Wir haben somit eine, offensichtlich generische, Dynamik gefunden, den asymmetrischen Zerfall der Pulse in sekundär gesplittete Strukturen, der den Kollaps, welcher im zweidimensionalen Fall auftreten würde, verhindert und für die Dispersion der Pulsenergie verantwortlich ist.

Dieses Szenario wurde für einen weiten Bereich von Parametern gefunden, für mehrere Werte des Dispersionskoeffizienten ($-2 \leq s \leq -0.01$), verschiedene Aspektverhältnisse R_0/Z_0 sowie unterschiedliche anfängliche Amplituden ($2 < E_0 < 4$).

Ein weiteres generisches Ergebnis ist, daß ein Kollaps und damit eine Singularität in der Zeitentwicklung auch in Lösungen mit hoher Energie in Gleichung (2.1) nie beobachtet wurde. Die Kontraktion in der transversalen Ebene wurde immer nach endlicher Zeit gestoppt. Obwohl sich in longitudinaler Richtung zeitweise extrem starke Gradienten bildeten, führten auch diese schließlich immer zu einer longitudinalen Verbreiterung statt einer lokalen Singularität. Wir haben Lösungen mit hoher Energie bis zu $N_\perp < 6N_c$ betrachtet, aber es wäre natürlich wünschenswert, dies zu noch höheren Amplituden auszudehnen, was im Moment aber selbst mit Hilfe der hochentwickelten numerischen Methode nicht möglich war.

Schließlich wurden noch Instabilitäten von zylindrischen gaußartigen Wellenleitern unter harmonischen Störungen in der dritten Koordinate untersucht. Man findet *Bunch*- und *Snake*-Instabilitäten. Für Wellenleiter mit hinreichend großer Masse bestimmt die Bunch-Instabilität die Dynamik nach der anfänglichen Fokussierung. Obwohl die Biegung durch die Snake-Instabilität anfänglich gut zu erkennen ist, bewirkt zu späten Zeiten die Bunchinstabilität, unterstützt durch die Selbstfokussierung, immer ein Zerfallen in einzelne Zellen.

7 Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. R. Grauer für die umfassende Betreuung und sehr gute Zusammenarbeit bedanken.

Herrn Prof. Dr. K. H. Spatschek danke ich für die Gelegenheit, diese Arbeit an seinem Institut anzufertigen und seine Unterstützung in den vergangenen Jahren.

Allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts für Theoretische Physik I an der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf danke ich für die angenehme Arbeitsatmosphäre und stetige Hilfsbereitschaft. Insbesondere zum Dank verpflichtet bin ich Herrn Dr. H. Wenk für die Betreuung der Rechner und Tobias Schäfer für interessante Diskussionen und Hilfe bei der Korrektur des Manuscripts.

Weiterhin möchte ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden bedanken, die mich immer unterstützt haben.

Literatur

- [1] *ISO/IEC FDIS 14882 – Programming Language C++*, ANSI, 1998.
- [2] W. F. Ames, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Academic Press, second edition, 1977.
- [3] J. Bell, M. Berger, J. Saltzman, and M. Welcome, *Three-dimensional adaptive mesh refinement for hyperbolic conservation laws*, SIAM J. Sci. Comput. **15**(1) (1994) 127–138.
- [4] L. Bergé, *Wave collapse in physics: principles and applications to light and plasma waves*, Phys. Rep. **303** (1998) 259.
- [5] L. Bergé and A. Couairon, Phys. Plasmas **7** (2000) 210.
- [6] L. Bergé, E. A. Kuznetsov, and J. J. Rasmussen, *Defocusing regimes of nonlinear waves in media with negative dispersion*, Phys. Rev. E **53** (1996).
- [7] L. Bergé and J. J. Rasmussen, *Multisplitting and collapse of self-focusing anisotropic beams in normal/anomalous dispersive media*, Phys. Plasmas **3** (1996) 824.
- [8] L. Bergé, J. J. Rasmussen, E. A. Kuznetsov, E. G. Shapiro, and S. K. Turitsyn, *Self-focusing of chirped optical pulses in media with normal dispersion*, J. Opt. Soc. Am. B **13** (1996) 1879.
- [9] L. Bergé, J. J. Rasmussen, and M. R. Schmidt, Physica Scripta **T75** (1998) 18.
- [10] G. Cerullo, A. Dienes, and V. Magni, Opt. Lett. **21** (1996) 65.
- [11] P. Chernev and V. Petrov, *Self-focusing of short light pulses in dispersive media*, Opt. Commun. **87** (1992) 28.
- [12] S. A. Diddams, H. K. Eaton, A. A. Zozulya, and T. S. Clement, *Amplitude and phase measurements of femtosecond pulse splitting in nonlinear dispersive media*, Opt. Lett. **23** (1998) 379.
- [13] G. Fibich and G. C. Papanicolaou, *Beam self-focusing in the presence of small normal time dispersion*, Phys. Rev. A **52** (1995) 4218.
- [14] G. Fibich and G. C. Papanicolaou, SIAM J. Appl. Math. **60** (1999) 183.
- [15] G. M. Fraiman, *Asymptotic stability of manifold of self-similar solutions in self-focusing*, Sov. Phys. JETP **61** (1985) 228.

- [16] H. Friedel, R. Grauer, and C. Marliani, *Adaptive Mesh Refinement for Singular Current Sheets in Incompressible Magnetohydrodynamic Flows*, J. Comput. Phys. **134** (1997) 190–198.
- [17] R. T. Glassey, *On the blowing up of solutions to the Cauchy problem for nonlinear Schrödinger equations*, J. Math. Phys. **18** (1977) 1794.
- [18] R. Grauer, C. Marliani, and K. Germaschewski, *Adaptive mesh refinement for singular solutions of the incompressible Euler equations*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 4177–4180.
- [19] W. Hackbusch, *Iterative solution of large sparse systems of equations*, Applied mathematical sciences, Springer, New York, 1994.
- [20] E. A. Kuznetsov, A. M. Rubenchik, and V. E. Zakharov, *Soliton stability in plasmas and hydrodynamics*, Phys. Rep. **142** (1986) 103.
- [21] M. Landman, G. C. Papanicolaou, C. Sulem, and P. L. Sulem, *Rate of blow-up for solutions of the nonlinear Schrödinger equation*, Phys. Rev. A **38** (1988) 3837.
- [22] A. G. Litvak, T. A. Petrova, A. M. Sergeev, and A. D. Yunakovskii, *A nonlinear wave effect in plasmas*, Sov. J. Plasma Phys. **9** (1983) 287.
- [23] G. G. Luther, A. C. Newell, and J. V. Moloney, *The effects of normal dispersion on collapse events*, Physica D **74** (1994) 59.
- [24] V. M. Malkin, *Dynamics of wave collapse in the critical phase*, Phys. Lett. A **151** (1990) 285.
- [25] J. R. Myra and C. S. Liu, Phys. Fluids **23** (1980) 2258.
- [26] A. C. Newell, *Solitons in mathematics and physics*, 1995.
- [27] A. C. Newell and J. V. Moloney, *Nonlinear optics*, Addison-Wesley, Redwood City, California, 1991.
- [28] E. Noether, *Invariante Variationsprobleme*, Nachr. König. Gesell. Wissen. Göttingen, Math.-Phys. Kl. (1918).
- [29] P. J. Olver, *Applications of lie groups to differential equations*, Springer-Verlag, 1986.
- [30] H. Pietsch, E. W. Laedke, and K. H. Spatschek, *Nonlinear Mode Conversion with Chaotic Soliton Generation at Plasma Resonance*, Phys. Rev. E **47** (1993) 1977.
- [31] W. H. Press, S. A. Teucholsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, second edition, 1992.

- [32] J. K. Ranka, R. W. Schirmer, and A. L. Gaeta, *Observation of pulse splitting in nonlinear dispersive media*, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 3783.
- [33] J. J. Rasmussen and K. Rypdal, *Blow-up in nonlinear Schroedinger equations*, Physica Scripta **33** (1986) 481.
- [34] J. E. Rothenberg, *Pulse splitting during self-focusing in normally dispersive media*, Opt. Lett. **17** (1992) 584.
- [35] K. Rypdal and J. J. Rasmussen, *Stability of solitary structures in the Nonlinear Schrödinger Equation*, Phys. Scr. **40** (1989) 192.
- [36] J. W. Schumer and J. P. Holloway, *Vlasov Simulations Using Velocity-Scaled Hermite Representations*, J. Comput. Phys. **144** (1998) 626.
- [37] G. D. Smith, *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*, Claredon Press.
- [38] J. Spanier, *Mathematical Methods for Digital Computers*, volume 2 of *Applied Math. Sci.*, John Wiley, 1967.
- [39] J. Stoer and R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer, 1980.
- [40] B. Stroustrup, *Die C++ Programmiersprache*, Addison Wesley.
- [41] C. Sulem and P. L. Sulem, *The Nonlinear Schrödinger Equation: Self-focusing and wave-collapse*, volume 139 of *Applied Math. Sci.*, Springer, 1999.
- [42] S. N. Vlasov, V. A. Petrishchec, and V. I. Talanov, *Averaged description of wave beams in linear and nonlinear media (the method of moments)*, Radiophys. and Quantum Electronics **14** (1974) 1062.
- [43] M. I. Weinstein, *Nonlinear Schrödinger equations and sharp interpolation estimates*, Commun. Math. Phys. **87** (1983) 567.
- [44] V. E. Zakharov and A. M. Rubenchik, *Instability of waveguides and solitons in nonlinear media*, Sov. Phys. JETP **38** (1986) 494.
- [45] N. A. Zharova, A. G. Litvak, T. A. Petrova, A. M. Sergeev, and A. D. Yunakovskii, JETP Lett. **44** (1986) 13.