

## 光学 Bloch 方程的数值解法\*

郭莹莹, 余向阳

(中山大学光电材料与技术国家重点实验室, 广东 广州 510275)

**摘 要:** 用常微分方程的经典数值解法 Euler 法、Heun 法、标准四阶 Runge-Kutta 法和修正四阶预报-校正法求解光学 Bloch 方程, 并与一定条件下的解析解进行了比较, 分析了四种算法, 尤其是修正四阶预报-校正算法的误差与可靠性。计算的结果表明, 四种数值算法在合适步长下, 对光学 Bloch 方程的求解都可以收敛, 并能保持算法所具有的相应误差阶数。验证了四阶预报-校正算法的可靠性以及在光学 Bloch 方程分析光学瞬态相干过程中的应用。该方法对求解光学 Bloch 方程具有普适意义。

**关键词:** 光学 Bloch 方程; 二能级体系; 光学瞬态过程; 微分方程数值解法

**中图分类号:** O175 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2005) 05-0108-03

光学 Bloch 方程是描述光(尤其是超短激光脉冲)与物质相互作用的基本方程。是研究光学瞬态过程、光脉冲传播、光学孤子的等重要量子光学现象的基础。在薄样品近似下, 光学 Bloch 方程是一组含时的常微分方程组, 在一些特定条件下, 可以得到解析解<sup>[1,2]</sup>。而在一般情况下, 尤其是修正后的光学 Bloch, 如近偶极-偶极近似<sup>[3]</sup>, 或与波动方程耦合<sup>[4]</sup>, 都主要依靠数值方法才能求解。本工作在前解析解工作的基础上<sup>[2]</sup>, 详细研究了光学 Bloch 方程的数值解法, 分析与比较了经典微分方程数值求解方法, 即 Euler 法、Heun 法和四阶 Runge-Kutta (RK4) 法<sup>[5]</sup>, 以及修正四阶预报-校正(PC4)求解方法, 数值计算的结果表明, 四种算法在合适步长下, 对光学 Bloch 方程的求解都可以收敛, 并能保持算法所具有的相应误差阶数。验证了 PC4 算法的可靠性以及在光学 Bloch 方程分析光学瞬态相干过程中的应用。PC4 算法不仅可以高精度、快速的求解光学 Bloch 方程, 也是我们后续工作, 即求解光学 Maxwell-Bloch、耦合波方程的基本方法。

### 1 光学 Bloch 方程及其解析解

研究光与物质近共振相互作用的半经典理论的基本方案是量子化的二能级体系在经典光场作用下, 耦合量子化体系的演化过程, 从含时薛定谔方程出发, 可得到光学 Bloch 方程<sup>[6]</sup>,

$$\begin{aligned}\dot{u} &= -\Gamma_2 u - \Delta v, \dot{v} = -\Gamma_2 v + \Delta u + \Omega w, \\ \dot{w} &= -\Gamma_1(w+1) - \Omega v\end{aligned}\quad (1)$$

式中,  $u, v, w$  为 Bloch 矢量的分量,  $\Omega$  为拉比频率。如果光场振幅恒定, 则为常数, 在几种特定的参数条件下, 用 Laplace 变换法, 微分方程组 (1) 可以得到解析解<sup>[2]</sup>。在初始条件为:  $u(0) = v(0) = w(0) = 0$  时, 常见的四种情形的解析表达式如下。

I. 共振且忽略弛豫时间, 即,  $\Gamma_2 = 0, \Gamma_1 = 0, \Delta = 0$ , (1) 式的解为:

$$\begin{aligned}u(t) &= 0, v(t) = \sin(\Omega t), \\ w(t) &= -\cos(\Omega t)\end{aligned}\quad (2)$$

II. 非共振, 并忽略弛豫时间, 即,  $\Gamma_2 = 0, \Gamma_1 = 0$ , (1) 式的解为:

$$\begin{aligned}u(t) &= \frac{\Delta\Omega}{s^2} [1 - \cos(st)], v(t) = -\frac{\Omega}{s} \sin(st), \\ w(t) &= \frac{\Omega^2}{s^2} [1 - \cos(st)] - 1\end{aligned}\quad (3)$$

式中,  $s = \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$ 。

III. 共振但不忽略弛豫时间, 即,  $\Delta = 0$ , (1) 式的解为:

$$\begin{aligned}u(t) &= 0, v(t) = s' [e^{-(\Gamma_2 + \Gamma_1)t/2} \cos(st) - 1] + \\ &\quad \frac{s'(\Gamma_2 + \Gamma_1) - 2\Omega}{2s} e^{-(\Gamma_2 + \Gamma_1)t/2} \sin(st) \\ w(t) &= (s'' - 1)e^{-(\Gamma_2 + \Gamma_1)t/2} \cdot \\ &\quad \left[ \cos(st) + \frac{\Gamma_2 + \Gamma_1}{2s} \sin(st) \right] - s''\end{aligned}\quad (4)$$

式中:  $s = \sqrt{\Omega^2 - (\Gamma_2 + \Gamma_1)^2/4}$ ,  $s' = \frac{\Gamma_1\Omega}{\Gamma_2\Gamma_1 + \Omega^2}$ ,

\* 收稿日期: 2005-01-07

基金项目: 国家重点基础研究专项经费资助项目 (G1999075200)

作者简介: 郭莹莹 (1980 年生), 女, 研究生; 通讯联系人: 余向阳; E-mail: cesyxy@zsu.edu.cn

$$s'' = \frac{\Gamma_2 \Gamma_1}{\Gamma_2 \Gamma_1 + \Omega^2}.$$

IV. 强碰撞, 即,  $T_1 = T_2$ , (1) 式的解为:

$$u(t) = \frac{\Delta\Omega}{s'^2} \left[ 1 - e^{-\Gamma t} \cos(st) - \frac{\Gamma}{s'} e^{-\Gamma t} \sin(st) \right],$$

$$v(t) = \frac{\Gamma\Omega}{s'^2} [e^{-\Gamma t} \cos(st) - 1] - \frac{s\Omega}{s'^2} e^{-\Gamma t} \sin(st)$$

$$w(t) = \frac{\Omega}{s'^2} \left[ 1 - e^{-\Gamma t} \cos(st) - \frac{\Gamma}{s'} e^{-\Gamma t} \sin(st) \right] - 1 \quad (5)$$

式中:  $s = \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$ ,  $s' = \sqrt{\Gamma^2 + \Delta^2 + \Omega^2}$ .

## 2 光学 Bloch 方程的数值解法

常微分方程的数值求解有多种方法<sup>[5]</sup>, 基于有限差分原理的经典算法主要有: Euler 法、Heun 法和标准四阶 RK4 法。Euler 法是最简单的有限差分法, 误差为一阶, Heun 法是 Euler 法的改进, 是最简单的预报-校正法, 误差为二阶, RK4 是最常用的方法, 通常使用的是其标准格式<sup>[7]</sup>。但对于不同性质的数学物理方程, 标准 RK4 法由于其格式和效率的限制, 常不方便直接使用, 而且标准 RK4 法对于较小的步长, 需要大量的计算, 并且当结果不够好时, 必须重新计算。这样就需要在标准格式的基础上进行修正。对标准 RK4 法, 已有了多种修正的方法<sup>[5]</sup>。这里, 针对我们的问题与需要, 在基于文献 [8] 的基础上, 建立了修正四阶校正-预报法 PC4, 该方法是以 Euler 法、Heun 法为初始猜测, 通过预报、校正二步来实现数值求解<sup>[8]</sup>, 其计算步骤为如下。

第一步, 用 Heun 法和中点规则<sup>[9]</sup>, 得到初始预报所需的初始点。

第二步, 用下面预报计算公式, 计算预报点,

$$y_{k+1/2}^{(0)} = y_k + \frac{h}{8} [3f(t_{k-1}, y_{k-1}) + 9f(t_k, y_k)] \quad (6)$$

$$y_{k+1}^{(0)} = y_{k-1} + \frac{h}{3} [4f(t_{k-1}, y_{k-1}) - 8f(t_{k-1/2}, y_{k-1/2}) + 10f(t_k, y_k)] \quad (7)$$

第三步, 用下面校正计算公式, 计算得到结果,

$$y_{k+1/2}^{(p+1)} = y_k + \frac{h}{24} [5f(t_k, y_k) + 8f(t_{k+1}, y_{k+1/2}^{(p)}) - f(t_{k+1}, y_{k+1}^{(p)})] \quad (8)$$

$$y_{k+1}^{(p+1)} = y_k + \frac{h}{6} [5f(t_k, y_k) + 4f(t_{k+1}, y_{k+1/2}^{(p)}) + f(t_{k+1}, y_{k+1}^{(p)})] \quad (9)$$

## 3 数值结果与分析

我们首先对解析解 I-IV 与四种数值计算方法的结果进行了比较, 计算结果表明四种数值方法都可以有效地用于求解光学 Bloch 方程, 但 Euler 法

有相对较大的误差。为了分析四种数值算法的误差, 图 1 显示了四种算法的与解析解的绝对误差。从图中可以看出, Euler 法的误差是步长一阶的, Heun 法是步长二阶的, RK4 法和 PC4 法都是步长四阶的。RK4 以及 PC4, 步长变为原来十分之一, 误差就变成原来的万分之一, 变小的幅度远高于 Euler 法与 Heun 法。这与这些算法的误差理论分析是一样的。四种算法的误差都显示出一个规则的变化, 但都随着积分时间的增长而变大。不过, 依然在误差的阶数量级内。这直接验证了这四种算法在求解光学 Bloch 方程时, 是可以保证收敛以及结果的可靠性。计算参数如下: 光场的归一化面积均为  $3.2\pi$ , 脉宽为 50 fs。步长为 0.01 fs。

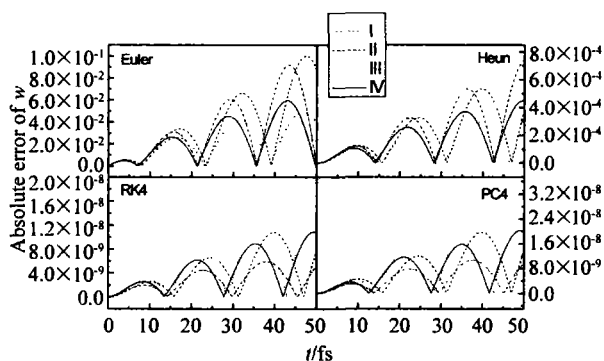


图 1  $w$  分量四种数值解的相对误差

Fig.1 The  $w$ 's relative errors for the four numerical results

矩形脉冲只是一种理想的近似, 而与物质相互作用的超短脉冲都是具有一定形状的, 通常是高斯与双曲正割型的。对于具有一定形状的脉冲, 只有第 I 种情形, 才能得到解析解, 表达为,

$$v(t) = -\sin\theta(t), u(t) = 0, w = -\cos(\theta) \quad (10)$$

式中,  $\theta(t) = \int_{-\infty}^t \Omega(t') dt'$ , 称为 Bloch 矢量角, 对时间的全积分, 即为光场的脉冲面积。图 2 是四

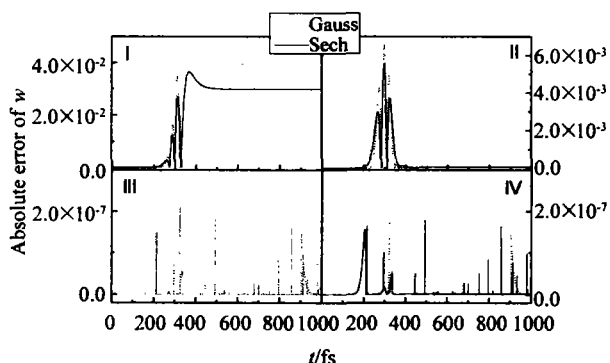


图 2 高斯型和双曲正割脉冲作用下, 光学 Bloch 方程四种数值方法与解析解的绝对误差

Fig.2 With the the Gauss and Sech pulse, the absolute errors for the numerical results and the analytical results

种算法与解析解 (10) 的绝对误差, 虚线是高斯脉冲入射, 实线是双曲正割脉冲入射。从图中可以看出, Euler 与 Heun 法的误差变换类似矩形脉冲, 逐步累积。但 RK4 法和 PC4 的不再显示规则的变化, 而是变的随机。从以上计算结果表明, PC4 法在求解微分方程上是可靠, 可以应用这种算法来研究光学 Bloch 方程。

#### 参考文献:

- [1] TORREY H C. Transient nutations in nuclear magnetic resonance [J]. Phys Rev, 1949, 76: 1059 – 1068.
- [2] 余向阳, 周建英. 飞秒相干瞬态过程的 Bloch 方程描述 [J]. 中山大学学报 (自然科学版), 1999, 38: 24 – 27.
- [3] BOWDEN C M, DOWLING J P. Near-dipole-dipole effects in dense media: Generalized Maxwell-Bloch equation [J]. Phys Rev (A), 1993, 47: 1247 – 1251.
- [4] NEWELL A C, MOLOEY V J. Nonlinear optics [M]. Addison-Wesley Publishing Company, 1992.
- [5] 胡健伟, 汤怀民. 微分方程数值方法 [M]. 北京: 科学出版社, 1999.
- [6] ALLEN J, EBERLY J H. Optical resonance and two-level atoms [M]. New York: Dover Publications, Inc, 1987.
- [7] MATHEWS J H, FINK K D. Numerical methods using MATLAB [M]. Prentice Hall International, Inc, 1999.
- [8] BRODERICK G R, STERKE C M, JACKSON K R. Coupled mode equations with free carrier effects: a numerical solution [J]. Opt Quantum Electron, 1994, 26: S219 – 234.
- [9] YOUNG D M, GREGORY R T. A survey of numerical mathematics [M]. Vol. 1. Addison-Vesley, Reading, MA, 1972.

## Numerical Methods for Optical Bloch Equations

GUO Ying-ying, YU Xiang-yang

(State Key Laboratory of Optoelectronic Materials and Technologies, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

**Abstract:** The classical numerical treatments of ordinary differential equations, including Euler, Heun, fourth-order Runge-Kutta and a new fourth-order predictor-corrector methods, are used to solve the optical Bloch equations. By comparing the numerical results and with analytical results, the four numerical methods, especially for the new method's errors and reliability are analyzed. The numerical results prove that, if the steps are suitable, the four numerical methods for the Bloch equations are possible convergence and can keep the numerical method's corresponding errors. The new method is reliable, can be used to optical transient coherent process, and is significant for solving the optical Bloch equations.

**Key words:** optical bloch equations; two-level system; optical transient process; ordinary differential numerical method