UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA

MÉTODO DA PROPAGAÇÃO DE FEIXE DE
ÂNGULO LARGO PARA ANÁLISE DE
GUIAS DE ONDAS ÓPTICOS NÃO-
LINEARES

Reinaldo de Sales Flamino

Dissertação apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Serviço de Pós-Graduação EESC/USP
EXEMPLAR REVISADO
Data de entrada no Serviço: 14 / 11 / 01
Ass.: *Guilherme*

DEDALUS - Acervo - EESC

31100036806

ORIENTADOR: Prof. Dr. Ben-Hur Viana Borges

SÃO CARLOS
2001

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **REINALDO DE SALES FLAMINO**

Dissertação defendida e julgada em 21-09-2001 perante a Comissão Julgadora:

Prof. Dr. **BEN-HUR VIANA BORGES** (Orientador)
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

APROVADO

Prof. Livre-Doc. **HUGO ENRIQUE HERNÁNDEZ FIGUEROA**
(Universidade Estadual de Campinas/UNICAMP)

Aprovado

Prof. Adj. **JOÃO CRISÓSTOMO W. ALBUQUERQUE COSTA**
(Universidade Federal do Pará/UFPA)

Aprovado

Prof. Doutor **MURILO ARAUJO ROMERO**
Coordenador do Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Elétrica

JOSÉ CARLOS A. CINTRA
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

*Aos meus amados pais
Reinaldo Flamino e Marlene de Sales
Flamino. E à minha adorável irmã
Kenya.*

AGRADECIMENTOS

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP, pela bolsa concedida.

Ao professor Ben-Hur Viana Borges pela precisa e dedicada orientação deste trabalho.

Ao professor Amílcar Careli César por suas valiosas sugestões e importantes contribuições para elaboração deste trabalho.

Ao professor Murilo Araújo Romero pelas trocas de idéias e comentários.

Ao professor João Crisóstomo Weyl Albuquerque Costa pelo companheirismo e importantes sugestões como membro da banca examinadora.

Ao professor Hugo Enrique Hernández-Figueroa pelas importantes sugestões como membro da banca examinadora.

Ao Grupo de Telecomunicações da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo pela colaboração.

Aos funcionários das bibliotecas da Escola de Engenharia e Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo pela disposição no atendimento.

Aos amigos do curso de mestrado e doutorado da EESC/USP, Evandro, Licinius, Pizolato (Zê), Fernando, Marcos, Fabio, Valtémir, João Marcelo, Juliano, Raiciano, Fernanda, Regiane, Patricia, Carlos, Betiol, Belini e Stilante pelo compartilhamento de conhecimentos, amizade e bom humor.

"All theory, dear friend, is grey, but the golden tree of actual life springs ever green."
Johann Wolfgang von Goethe

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.	iii
LISTA DE TABELAS.	vi
LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS.	vii
RESUMO.	viii
ABSTRACT.	ix
1- INTRODUÇÃO.	1
2- O MEIO ÓPTICO NÃO-LINEAR.	4
2.1- Equação de onda para guias não-lineares caracterizados pelo efeito óptico <i>Kerr</i>	5
2.2- Solução analítica para guias não-lineares.	7
2.2.1- Equações de campo e dispersão.	7
2.3- Estudo analítico de guias não-lineares.	9
3- SOLUÇÃO NUMÉRICA DE GUIAS NÃO-LINEARES.	13
3.1- Método da propagação de feixe (BPM) para meios não-lineares.	14
3.2- Convergência dos Aproximantes de Padé.	16
3.3- Aproximantes Complexos de Padé.	18
3.4- Aplicação de diferenças finitas na equação de onda não-linear.	22
3.4.1- Discretização da equação de onda para o Padé(1,0) utilizando o esquema Crank-Nicholson.	23
3.4.1.1- O Algoritmo Iterativo.	24
3.4.2- O Esquema Douglas Generalizado.	25
3.4.2.1- Discretização da equação de onda para o Padé(1,0) utilizando o esquema Douglas Generalizado.	27

3.4.3- Discretização da equação de onda para o Padé(1,1) utilizando o esquema Crank-Nicholson.	28
3.4.4- Discretização da equação de onda para o Padé(1,1) utilizando o esquema Douglas Generalizado.	30
3.4.5- Discretização da equação de onda para o Padé(2,2) utilizando o esquema Crank-Nicholson.	32
3.4.6- Discretização da equação de onda para o Padé(3,3) utilizando o esquema Crank-Nicholson.	34
3.5- Aproximação por diferenças finitas da equação de onda através dos coeficientes complexos de Padé.	38
3.5.1- Discretização da equação de onda para o Padé(2,2) complexo utilizando o esquema Crank-Nicholson.	38
3.5.2- Discretização da equação de onda para o Padé(3,3) complexo utilizando o esquema Crank-Nicholson.	40
4- RESULTADOS NUMÉRICOS.	42
4.1- Guia linear inclinado.	42
4.2- Influência do algoritmo iterativo.	47
4.3- Acoplador não-linear inclinado.	52
4.4- Acoplador não-linear em forma de X.	60
5- CONCLUSÕES.	65
6- REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.	67
APÊNDICE A– DESENVOLVIMENTO ANALÍTICO PARA GUIAS NÃO-LINEARES.	74
APÊNDICE B– OPERADORES DIFERENCIAIS UTILIZADOS NAS DISCRETIZAÇÕES.	82
APÊNDICE C– FLUXOGRAMA DO ALGORITMO ITERATIVO.	85
APÊNDICE D– EQUAÇÕES RELATIVAS AO ACOPLADOR ÓPTICO DO TIPO X.	86

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1 - Relação entre o vetor polarizabilidade $\overline{P}$ e o vetor campo elétrico $\overline{E}$, para um meio linear (linha sólida) e um meio não-linear (linha pontilhada).	4
FIGURA 2.2- Guia óptico planar não-linear de 3 camadas	7
FIGURA 2.3- Curva de dispersão para a estrutura sugerida por Yokota <i>et al</i> [23]. ..	10
FIGURA 2.4- Distribuição de campo para o ponto I.....	11
FIGURA 2.5- Distribuição de campo para o ponto II.....	11
FIGURA 2.6- Distribuição de campo para o ponto III.	12
FIGURA 2.7- Curva de dispersão para a estrutura sugerida por Yasui <i>et al</i> [21].	12
FIGURA 3.1- Diferença $\Delta R(X)= S(X)-R(X) $, no intervalo $[-1,+7]$, para os aproximantes de Padé de ordem (1,0) ou paraxial, (1,1), (2,2), (3,3) e para expansão de Taylor de ordem 15.	17
FIGURA 3.2- Diferença Real $[\Delta R(X)]$, no intervalo $[-6,-1]$, para os aproximantes de Padé de ordem (1,0) ou paraxial, (1,1), (2,2) e (3,3).....	18
FIGURA 3.3- Diagrama esquemático da rotação dos coeficientes de Padé.	19
FIGURA 3.4- Diferença $S(X)-R(X)$ no intervalo $[-3,+3]$, para os aproximantes de Padé de ordem (2,2) e (3,3). As funções Real $[\Delta R(X)]$ e Imag $[\Delta R(X)]$ são ilustradas para os seguintes ângulos de rotação no plano complexo: (a) e (b) com $\varphi=15^\circ$, (c) e (d) com $\varphi=30^\circ$, (e) e (f) com $\varphi=90^\circ$	21
FIGURA 4.1 - Estrutura inclinada analisada no limite linear.	42
FIGURA 4.2- Eficiência de acoplamento em função da discretização transversal. ..	44
FIGURA 4.3 - Eficiência de acoplamento em função do ângulo de inclinação.....	45
FIGURA 4.4 - Tempo de processamento na resolução de um sistema linear para matrizes com 3, 5 e 7 diagonais, através da rotina TRIDAG e decomposição LU. Este tempo equivale a um passo de propagação na direção z.	46
FIGURA 4.5 - Guia óptico planar com filme linear, cobertura linear e substrato não-linear.....	47

FIGURA 4.6- Propagação de sóliton calculada pelo método convencional para $\Delta z = \lambda$.	49
FIGURA 4.7 - Propagação de sóliton calculada pelo método convencional para $\Delta z = \lambda/5$.	49
FIGURA 4.8- Propagação de sóliton calculada pelo método convencional para $\Delta z = \lambda/10$.	50
FIGURA 4.9- Propagação de sóliton calculada pelo método iterativo para $\Delta z = \lambda$.	51
FIGURA 4.10 - Propagação de sóliton calculada pelo método iterativo para $\Delta z = 2\lambda$.	51
FIGURA 4.11 - Acoplador direcional não-linear inclinado.	52
FIGURA 4.12 - Distribuições de campos após a propagação de 150 μm no acoplador não-linear com ângulo de inclinação $\theta=0^\circ$, demonstrando o efeito do meio linear (L) e não-linear (NL) no acoplamento de potência entre os guias.	53
FIGURA 4.13 - Distribuições de campos após a propagação de 150 μm no acoplador não-linear com ângulo de inclinação $\theta=35^\circ$, demonstrando as perdas não físicas na formulação paraxial e de ângulo largo CN.	54
FIGURA 4.14 - Perda de potência no acoplador não-linear em função do ângulo de inclinação θ .	56
FIGURA 4.15 - Erro de potência acoplada para o guia B em função do ângulo de inclinação θ .	56
FIGURA 4.16 - Perda de potência no acoplador não-linear para uma inclinação de $\theta=35^\circ$ em função do passo de discretização transversal Δx .	57
FIGURA 4.17 - Erro de potência acoplada para o guia B numa inclinação de $\theta=35^\circ$ em função do passo de discretização transversal Δx .	57
FIGURA 4.18 - Distribuições de campos em $z=150 \mu\text{m}$ no acoplador não-linear sem inclinação ($\theta=0^\circ$) para o aproximante Padé (3,3) rotacionado nos seguintes ângulos no plano complexo: $\varphi = 0,75^\circ$; $0,76^\circ$ e $0,8^\circ$.	58
FIGURA 4.19 - Erro de potência acoplada para o guia B em função do ângulo de rotação no plano complexo. As condições de contorno transparente (TBC) e absorvente, foram utilizadas como parâmetro de comparação.	59

FIGURA 4.20 - Erro potência na região de campo evanescente n_5 em função do ângulo de rotação no plano complexo. As condições de contorno transparente (TBC) e absorvente, foram utilizadas como parâmetro de comparação.	60
FIGURA 4.21- Geometria do acoplador tipo X com região não-linear [14] analisado.	61
FIGURA 4.22- Propagação do sinal ($P_{Is}=1$ mW/mm) para potência de controle $P_{3c}=0$ mW/mm. O efeito não-linear não é acentuado e o sinal que penetra na porta 1 emerge na porta 4.	62
FIGURA 4.23- Propagação do sinal ($P_{Is}=1$ mW/mm) para potência de controle $P_{3c}=25,6$ mW/mm. O efeito não-linear é acentuado e o sinal que penetra na porta 1 emerge na porta 2.....	63
FIGURA 4.24- Características de transmissão do sinal em função da potência de controle, P_{3c} , para os resultados obtidos em [14] e por Padé(1,1).....	64
FIGURA A.1- Guia óptico planar não-linear de 3 camadas	74
FIGURA B.1- Fluxograma do algoritmo iterativo utilizado.....	85

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1- Aproximantes de Padé em termos do operador diferencial P [24]....	16
TABELA 3.2– Coeficientes complexos referentes aos aproximantes (2,2) e (3,3) ..	20
TABELA 4.1- Dados relativos à estrutura da FIGURA 4.1	43
TABELA 4.2 - Tipos de sistemas e rotinas utilizadas em sua solução.....	46
TABELA 4.3- Parâmetros físicos e geométricos do guia não-linear da FIGURA 4.5.	47
TABELA 4.4- Dados relativos ao acoplador direcional não-linear.....	53
TABELA 4.5- Parâmetros físicos e geométricos do acoplador em X da FIGURA 4.21.....	61

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BPM	- Beam propagation method.
CN	- Crank-Nicholson.
CPU	- Central processing unit.
EEH	- Equação escalar de helmholtz.
FD	- Finite diffence.
FE	- Finite element.
GD	- Generalized douglas.
LU	- Lower and upper decomposition.
RAM	- Random access memory.
TAB	- Transparent boundary absorber.
TBC	- Transparent boundary condicions.
TE	- Transverse electric.
TRIDAG	- Tridiagonal linear system solver.

RESUMO

Este trabalho propõe uma extensão do método de propagação de feixe (BPM-*beam propagation method*) para a análise de guias de ondas ópticos e acopladores baseados em materiais não-lineares do tipo *Kerr*. Este método se destina à investigação de estruturas onde a utilização da equação escalar de Helmholtz (EEH) em seu limite paraxial não mais se aplica. Os métodos desenvolvidos para este fim são denominados na literatura como métodos de propagação de feixe de ângulo largo. O formalismo aqui desenvolvido é baseado na técnica das diferenças finitas e nos esquemas de Crank-Nicholson (CN) e Douglas generalizado (GD). Estes esquemas apresentam como característica o fato de apresentarem um erro de truncamento em relação ao passo de discretização transversal, Δx , proporcional a $O(\Delta x^2)$ para o primeiro e $O(\Delta x^4)$ para o segundo. A convergência do método em ambos esquemas é otimizada pela utilização de um algoritmo iterativo para a correção do campo no meio não-linear. O formalismo de ângulo largo é obtido pela expansão da EEH para os esquemas CN e GD em termos de polinômios aproximantes de Padé. As expansões abordadas neste trabalho utilizam aproximantes de Padé de ordem (1,0) e (1,1) para CN e GD, e (2,2) e (3,3) para CN. Os aproximantes de ordem superior a (1,1) apresentam sérios problemas de estabilidade. Este problema é eliminado pela rotação dos aproximantes no plano complexo. Duas condições de contorno nos extremos da janela computacional são também investigadas: 1) condição de contorno transparente (TBC-*transparent boundary condition*) e 2) condição de contorno absorvente (TAB-*transparent absorbing boundary*). Estas condições de contorno possuem a finalidade de evitar que reflexões indesejáveis sejam transmitidas para dentro da janela computacional. Um estudo comparativo da influência destas condições de contorno na solução de guias de ondas ópticos não-lineares é também abordada neste trabalho.

Palavras-chave: método de propagação de feixe de ângulo largo; diferenças finitas; aproximantes de Padé; guias de ondas ópticos não-lineares.

ABSTRACT

This work introduces an extension of the beam propagation method (BPM) for the analysis of optical waveguides and couplers based on *Kerr*-type nonlinear materials. This method is intended for the investigation of structures where the paraxial scalar Helmholtz equation (EEH) no longer holds. The numerical methods developed for this situation are known in the literature as wide-angle beam propagation methods. The formulation developed in this work is based on finite differences and on the Crank-Nicholson (CN) and Generalized Douglas (GD) schemes. These schemes are characterized by a truncation error with respect to the transverse discretization step, Δx , proportional to $O(\Delta x^2)$ for the CN and to $O(\Delta x^4)$ for the GD scheme. The convergence of the method for both schemes is optimized by the application of an iterative algorithm for the correction of the field in the nonlinear medium. The wide-angle formalism is obtained by the expansion of the EEH for the CN and GD schemes in terms of Padé approximant polynomials. The expansions addressed in this work utilize Padé approximants of order (1,0) and (1,1) for the CN and GD scheme, and (2,2) and (3,3) for the CN scheme. Approximants orders higher than (1,1) show serious stability problems. This problem is circumvented by rotating the approximants in the complex plane. Two boundary conditions on the edge of the computational window are also investigated: 1) transparent boundary condition (TBC) and 2) transparent absorbing boundary (TAB). These boundary conditions are necessary in order to avoid unwanted reflections back to computational domain. A comparative study of the influence of these boundary conditions on the solution of nonlinear optical waveguides is also addressed in this work.

Keywords: beam propagation method; finite differences; Padé approximants; nonlinear optical waveguides.

1- INTRODUÇÃO.

O estudo de efeitos ópticos não-lineares em fibras e guias de ondas ópticos integrados tem recebido atenção especial nos últimos anos devido ao seu grande potencial em aplicações de processamento puramente óptico de sinais. O chaveamento puramente óptico é possível de ser realizado com a utilização de guias de ondas ópticos constituídos de materiais não-lineares. Estes dispositivos podem ser utilizados não só em sistemas de comunicações ópticas como também em computação óptica. O termo computação óptica refere-se ao processamento de informações utilizando luz para representar os dados. Este pode incluir sistemas de fibras ópticas para comunicações digitais de alta velocidade, assim como novas arquiteturas de chaveamento óptico com finalidade de substituir os circuitos eletrônicos convencionais, ou sistemas ópticos que realizem funções similares à estes circuitos, tais como: lógica booleana e dispositivos de memória [1].

A propriedade exibida pelos materiais não-lineares que apresentam dependência do índice de refração com a potência óptica aplicada, é conhecida como efeito óptico Kerr [2] devido à sua similaridade ao efeito eletro-óptico *Kerr* (onde a variação de índice de refração é proporcional ao quadrado de um campo elétrico externamente aplicado) [1]. O efeito óptico *Kerr* é produzido pelo aumento da intensidade do campo propagante em um determinado meio, resultando no aumento de índice de refração (meio focalizante) ou diminuição do mesmo (meio desfocalizante). Uma extensa variedade de dispositivos utilizando este efeito tem sido proposta na literatura, tais como portas lógicas, chaves ópticas, divisores e acopladores de potência, junções Y e interferômetros Mach-Zehnder [3]-[18].

A demanda por estruturas guiantes onde a constante de propagação varia em função da potência óptica aplicada tem estimulado o desenvolvimento de técnicas de modelagem cada vez mais robustas, baseadas tanto em elementos finitos (FE-*finite element*) [15], [19]-[22] quanto em diferenças finitas (FD-*finite difference*) [6], [13]-[14], [16]-[17], [23]. Entretanto, a análise da maioria destas estruturas tem se restringido à solução da equação de Helmholtz em seu limite paraxial, ou seja, a

propagação no dispositivo é considerada como sendo praticamente paralela ao eixo longitudinal z . Esta suposição limita o grau de liberdade no desenvolvimento de dispositivos, principalmente quando há estruturas que exigem a propagação em ângulos largos. A solução paraxial não admite um grande valor do ângulo de abertura, como por exemplo de junções Y e acopladores com geometria do tipo X. Várias técnicas foram propostas para a superação desta limitação, como o método baseado em polinômios aproximantes de Padé, sugerido por Hadley [24] e o método sugerido por Hernández-Figueroa [25], que consiste na discretização direta da equação de Helmholtz pelo método de Galerkin/FE. Objetivando maior abrangência de seu método, Hernández-Figueroa o estendeu para a análise de materiais não-lineares [20]. Tsuji *et al.* [26] propuseram a análise de guias ópticos utilizando a técnica de Hadley combinada com a de elementos finitos, e recentemente, Yasui *et al.* [21] estenderam este método para incluir materiais não-lineares. No entanto, suas análises restringiram-se apenas ao aproximante de Padé de ordem (1,1). A extensão desta técnica de ângulo largo para aproximantes de mais alta ordem combinada com a simplicidade da formulação por meio de diferenças finitas ainda não foi relatada na literatura para meios não-lineares.

Com a finalidade de evitar soluções imprecisas no cálculo do campo no meio não-linear, será incluído na formulação um algoritmo iterativo a cada passo de propagação longitudinal [22]-[23], [27]-[28]. Este algoritmo foi introduzido na literatura originalmente por Hernández-Figueroa [22] onde foi aplicado na solução de dispositivos ópticos por elementos finitos. Este mesmo algoritmo foi utilizado mais tarde na solução numérica por diferenças finitas por Yokota *et al.* [23].

Neste trabalho, os aproximantes de Padé serão combinados com diferenças finitas para a solução da equação de onda em meios não-lineares do tipo *Kerr*. A expansão desta equação na forma discreta será implementada utilizando os esquemas implícitos de Crank-Nicholson (CN) [23]-[24], [27]-[31] e Douglas generalizado (GD) [32]-[34]. O esquema de CN é mais freqüentemente utilizado devido à sua maior facilidade de implementação. No entanto, apesar de apresentar maior grau de dificuldade em sua implementação, o esquema GD apresenta menor erro de truncamento. Para prevenção de instabilidades numéricas apresentadas nas formulações envolvendo os aproximantes de Padé de alta ordem, serão utilizados os

aproximantes rotacionados no plano complexo [35]-[40]. Os aproximantes com coeficientes complexos utilizados neste trabalho foram inicialmente propostos por Milinazzo *et al.* [35] na solução da propagação de ondas acústicas [42]-[44] e atualmente estão sendo utilizados com grande sucesso em óptica integrada [36]-[39]. As condições de contorno transparente (TBC-*transparent boundary condition*) [41]-[45] e absorvente (TAB-*transparent absorbing boundary*) [46]-[47] aplicadas nas bordas da janela computacional serão utilizadas com a finalidade de evitar reflexões que podem causar interferências indesejáveis na região de solução.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: o Capítulo 2 apresenta os conceitos principais que governam a propagação de onda em meios não-lineares. É também apresentada uma análise detalhada da propagação em um guia óptico de três camadas onde uma de suas camadas externas é constituída de material não-linear do tipo *Kerr*. O Capítulo 3 apresenta o formalismo utilizado na solução de guias não-lineares baseada no método de propagação de feixe (BPM-*beam propagation method*) discretizado por diferenças finitas e aproximantes de Padé. O Capítulo 4, por sua vez, apresenta os resultados numéricos obtidos com os formalismos de ângulo largo para diversas estruturas de interesse. Finalmente, o Capítulo 5 apresenta as principais conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

2- O MEIO ÓPTICO NÃO-LINEAR.

Óptica não-linear é descrita em termos do efeito de um campo elétrico na polarização de um material. Esse efeito é linear se o meio é caracterizado por uma relação linear entre o vetor polarizabilidade e o vetor campo elétrico, $\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}$, onde ϵ_0 é a permissividade no espaço livre, χ é a susceptibilidade elétrica do meio e $\vec{E}$ é o campo elétrico. Por outro lado, o meio é considerado não-linear quando o mesmo possui uma relação não-linear entre $\vec{P}$ e $\vec{E}$, como ilustrado na FIGURA 2.1.

FIGURA 2.1 - Relação entre o vetor polarizabilidade $\vec{P}$ e o vetor campo elétrico $\vec{E}$, para um meio linear (linha sólida) e um meio não-linear (linha pontilhada).

A resposta de um dielétrico à luz torna-se não-linear para campos elétricos intensos. Em um nível fundamental, a origem da resposta não-linear está relacionada com o movimento não-harmônico dos dipolos através da influência de um campo elétrico. Como resultado, a polarizabilidade no meio não é linear com o campo elétrico mas satisfaz uma relação mais geral [48]

$$\vec{P} = \epsilon_0 \left[\chi^{(1)} + \chi^{(2)} \vec{E} + \chi^{(3)} \vec{E}^2 + \dots \right] \vec{E}, \quad (2.1)$$

onde $\chi^{(1)}$ é a susceptibilidade linear, $\chi^{(2)}$ é a susceptibilidade de segunda ordem que é responsável por fenômenos como geração de segundo harmônico, soma e diferença de frequências e mistura de três ondas. $\chi^{(3)}$ é a susceptibilidade de terceira ordem a qual inclui efeitos como mistura de quatro ondas, geração de terceiro harmônico e a refração não-linear (efeito óptico *Kerr*) [1].

2.1- Equação de onda para guias não-lineares caracterizados pelo efeito óptico *Kerr*.

O objetivo principal desta seção é a obtenção da equação de onda para meios não-lineares. Como todo fenômeno eletromagnético, a propagação de campos ópticos em guias de ondas dielétricos é governada pelas equações de Maxwell. Considerando meios sem cargas e não magnéticos, essas equações podem ser escritas como:

$$\nabla \times \bar{E} = -\frac{\partial \bar{B}}{\partial t}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \bar{H} = \frac{\partial \bar{D}}{\partial t}, \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \bar{D} = 0, \quad (2.4)$$

$$\nabla \cdot \bar{B} = 0, \quad (2.5)$$

onde $\bar{E}$ e $\bar{H}$ são os vetores de campo elétrico e magnético, respectivamente. $\bar{D}$ é o vetor deslocamento elétrico e $\bar{B}$ é o vetor densidade de fluxo magnético. As relações constitutivas são:

$$\bar{D} = \epsilon_0 \bar{E} + \bar{P}, \quad (2.6)$$

$$\bar{B} = \mu_0 \bar{H}. \quad (2.7)$$

As equações de Maxwell podem ser usadas para obter a equação de onda que descreve a propagação do campo elétrico em guias de ondas. Aplicando em (2.2) o operador rotacional $\nabla \times$, utilizando a relação (2.7) e a equação de Maxwell (2.3), tem-se:

$$\nabla \times (\nabla \times \bar{E}) = -\mu_0 \frac{\partial^2 \bar{D}}{\partial t^2}. \quad (2.8)$$

Através da relação (2.6), da identidade vetorial $\nabla \times (\nabla \times \bar{E}) = \nabla(\nabla \cdot \bar{E}) - \nabla^2 \bar{E}$ e considerando o modo TE em um guia planar como o da FIGURA 2.2, a partir de (2.4) é obtido que $\nabla \cdot \bar{E} = 0$ e com isso (2.8) torna-se:

$$\nabla^2 \bar{E} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 \bar{P}}{\partial t^2}. \quad (2.9)$$

Para o modo TE de um guia com não-linearidade do tipo *Kerr*, o vetor polarizabilidade é [3]:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ P_y \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \epsilon_0 \left(\chi^{(1)} + c \epsilon_0 n_2 |E_y|^2 \right) E_y \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{Sendo } \chi^{(1)} \text{ e } n_2 \text{ não-lineares} \quad (2.10)$$

onde n é o índice de refração, n_2 é o coeficiente não-linear, c é a velocidade da luz no vácuo e ϵ_0 é a permissividade no vácuo. O formalismo desenvolvido a seguir supõe a propagação em um guia de onda planar uniforme ($\partial/\partial y = 0$), onde o campo é confinado na direção x e se propaga na direção z . O campo elétrico apresenta a seguinte dependência harmônica no tempo:

$$E_y(x, z, t) = \frac{1}{2} E_y \exp(j\omega t) + c.c.. \quad (2.11)$$

onde ω é a frequência angular, $c.c.$ é o complexo conjugado da função e $j=\sqrt{-1}$.

A partir de (2.9) e com o auxílio de (2.10) e (2.11), pode-se obter a equação de onda que governa a propagação do campo elétrico TE em um guia bidimensional:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + k_0^2 \left(n^2 + \alpha |E_y|^2 \right) E_y = 0. \quad (2.12)$$

onde $\alpha = n^2 n_2 c \epsilon_0$, $k_0 = \frac{\omega}{c}$ e $c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}$.

2.2- Solução analítica para guias não-lineares.

Esta seção apresenta a formulação matemática necessária para o entendimento do efeito do meio não-linear sobre o campo eletromagnético. São ainda apresentadas as equações de campo e de dispersão para este meio juntamente com alguns exemplos ilustrativos.

2.2.1- Equações de campo e dispersão.

Considere o guia óptico planar não-linear mostrado na FIGURA 2.2, o qual possui cobertura linear, filme linear e substrato não-linear. A propagação é suposta ao longo de z e o guia não apresenta variação na direção y ($\partial/\partial y = 0$).

FIGURA 2.2- Guia óptico planar não-linear de 3 camadas

Suponha que o campo elétrico apresenta a seguinte dependência: $E_y = 1/2 E_y \exp j(\omega t - k_0 n_{eff} z) + c.c.$, onde ω é a frequência angular, $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ é o número de onda, λ_0 é o comprimento de onda e n_{eff} é o índice efetivo do guia (solução). As equações de onda para o modo TE nas regiões 1, 2 e 3 tornam-se, respectivamente [49]-[51]:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k_0^2 (n_1^2 - n_{eff}^2) E_y = 0, \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k_0^2 (n_2^2 - n_{eff}^2) E_y = 0, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k_0^2 (n_3^2 - n_{eff}^2 + \alpha |E_y|^2) E_y = 0, \quad (2.15)$$

onde $\alpha = n_3^2 n_{2s} c \epsilon_0$ é uma constante relacionada à não-linearidade, n_3 é o índice de refração na região 3, n_{2s} é o coeficiente não-linear, c é a velocidade da luz no vácuo e ϵ_0 é a permissividade no vácuo. As soluções analíticas dessas equações são do tipo (detalhes sobre a dedução encontram-se no APÊNDICE A):

$$E_y = \begin{cases} \frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha \cosh[(x-x_0)k_3]}} & x \geq d_2 \\ \frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha \cosh[(w-x_0)k_3]}} \frac{\cos[k_2(x-d_1)] + \frac{k_1}{k_2} \sin[k_2(x-d_1)]}{\cos(k_2 w) + \frac{k_1}{k_2} \sin(k_2 w)}, & d_1 \leq x < d_2 \\ \frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha \cosh[(w-x_0)k_3]}} \frac{e^{k_1(x-d_1)}}{\cos(k_2 w) + \frac{k_1}{k_2} \sin(k_2 w)}, & x < d_1 \end{cases} \quad (2.16)$$

onde x_0 é uma constante de integração, $k_1 = \sqrt{k_0^2 n_1^2 - \beta^2}$, $k_2 = \sqrt{\beta^2 - k_0^2 n_2^2}$, $k_3 = \sqrt{k_0^2 n_3^2 - \beta^2}$ e $\beta = k_0 n_{eff}$. O índice efetivo (n_{eff}) é calculado a partir da seguinte equação transcendental:

$$k_2 w = \arctg\left(\frac{k'_3}{k_2}\right) + \arctg\left(\frac{k_1}{k_2}\right) + m\pi, \quad (2.17)$$

onde m é um número inteiro ($m=0,1,2,3,\dots$) e $k'_3 = k_3 \tanh[(w-x_0)k_3]$ para meios focalizantes ($\alpha > 0$). A equação para meios desfocalizantes ($\alpha < 0$) é similar à eq. (2.17) exceto que: $k'_3 = k_3 \coth[(w-x_0)k_3]$ [3]. A eq. (2.17) é conhecida como relação de dispersão para meios não-lineares [3].

2.3- Estudo analítico de guias não-lineares.

Considere o guia não-linear de 3 camadas FIGURA 2.2, o qual possui filme linear com $n_2 = 1,555$, espessura $w=2,06 \mu\text{m}$, a casca linear com $n_1=1,55$, substrato não-linear com $n_3=1,55$ e $n_{2s}=10^{-9} \text{ m}^2/\text{W}$ (meio focalizante) [23]. O comprimento de onda é $\lambda=0,515 \mu\text{m}$. A curva de dispersão deste guia de onda é obtida fazendo $m=0$ na eq. (2.17). O resultado é mostrado na FIGURA 2.3.

FIGURA 2.3- Curva de dispersão para a estrutura sugerida por Yokota *et al* [23].

Esta curva de dispersão ilustra a dependência do índice efetivo com a densidade de potência óptica guiada (neste caso, potência transportada pelo modo TE_0), indicando o deslocamento do campo para a região não-linear devido ao aumento do índice de refração nesta região. Este efeito pode ser melhor entendido através da visualização das distribuições de campo para diferentes pontos na curva de dispersão. A distribuição do campo elétrico é obtida via eq. (2.16). Serão ilustradas as distribuições de campo para os pontos I, II e III da FIGURA 2.3, nas FIGURAS 2.4 a 2.6, respectivamente. O decaimento de potência na região II, ilustrado na FIGURA 2.3, ocorre devido à maior penetração do campo em direção ao meio não-linear, como pode ser constatado na FIGURA 2.5, diminuindo por sua vez a potência guiada (mW/mm).

FIGURA 2.4- Distribuição de campo para o ponto I.

FIGURA 2.5- Distribuição de campo para o ponto II.

FIGURA 2.6- Distribuição de campo para o ponto III.

Considere, novamente, a estrutura da FIGURA 2.2 supondo agora que $n_2 = 1,57$ e $w = 5 \mu\text{m}$ (filme), $n_3 = 1,55$ e $n_{2s} = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{W}$ (substrato), $n_1 = 1,55$ (casca), $\lambda = 1,3 \mu\text{m}$ [21]. A curva de dispersão para esta estrutura é mostrada na FIGURA 2.7.

FIGURA 2.7- Curva de dispersão para a estrutura sugerida por Yasui *et al* [21].

Neste caso pode ser observado que é preciso uma densidade de potência bem maior que no caso anterior para deslocar o campo para a região não-linear. Isso ocorre principalmente devido à maior diferença entre os índices de refração do filme e do substrato, gerando um maior confinamento do campo no filme.

3- SOLUÇÃO NUMÉRICA DE GUIAS NÃO-LINEARES.

Soluções analíticas limitam-se a estruturas que não apresentam variação na direção de propagação, restringindo a análise de ondas eletromagnéticas que se propagam longitudinalmente em guias ópticos. Esta limitação sugere a utilização de métodos mais eficazes para o projeto de tais estruturas.

O método de propagação de feixe por diferenças finitas (FD-BPM) é uma ferramenta eficiente para a modelagem da propagação em estruturas que possuem variação longitudinal [29]. No entanto, o método convencional possui várias desvantagens devido à aproximação paraxial da equação de Helmholtz. A desvantagem mais significativa vem da limitação do ângulo de propagação [24]. Esta limitação deu origem a várias técnicas voltadas para a correção desse problema, e entre elas destaca-se o método baseado em aproximantes de Padé proposto por Hadley [21], [24], [26], [29]-[30], [32].

Este capítulo tratará exatamente deste problema, propondo uma nova formulação baseada em diferenças finitas para a propagação de ondas em guias não-lineares. A equação de onda será aproximada por meio dos polinômios de Padé de ordem (1,0), (1,1), (2,2) e (3,3). Dois esquemas serão utilizados: Crank-Nicholson (CN) e Douglas generalizado (GD). O primeiro foi utilizado na expansão de todos os aproximantes mencionados acima, enquanto que o segundo foi expandido até o aproximante de ordem (1,1). Todavia, formulações de alta ordem como (2,2) e (3,3) podem se tornar extremamente instáveis para alguns casos, impossibilitando a solução por diferenças finitas. Este problema foi contornado com a utilização dos aproximantes de Padé com coeficientes complexos [35]-[40]. Adicionalmente, um algoritmo iterativo será utilizado em cada passo de propagação afim de otimizar a convergência do método [22]-[23], [27]-[28]. Este algoritmo será utilizado em ambos esquemas.

3.1- Método da propagação de feixe (BPM) para meios não-lineares.

A expressão para o campo elétrico de uma onda TE propagante na direção z em um meio não-linear do tipo *Kerr*, supondo que o guia se estende para o infinito na direção y , obedece a equação de onda (2.12):

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + k_0^2 \left(n^2(x, z) + \alpha |E|^2 \right) E = 0. \quad (3.1)$$

Por conveniência, suponha que o campo elétrico seja definido como o produto de duas componentes distintas, uma de variação rápida $e^{-jk_0 n_0 z}$, e outra de variação lenta $\psi(x, z)$, como segue:

$$E(x, z) = \psi(x, z) e^{-jk_0 n_0 z}. \quad (3.2)$$

Substituindo (3.2) em (3.1) resulta em:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - 2jk_0 \frac{\partial \psi}{\partial z} + P\psi = 0, \quad (3.3)$$

onde $k = k_0 n_0$, n_0 é o índice de refração de referência e P é o operador diferencial transversal que é dado por:

$$P = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2 (n^2 - n_0^2 + \alpha |\psi|^2), \quad (3.4)$$

A eq. (3.3) pode ser separada em dois termos,

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} + j(\sqrt{P+k^2} - k) \right] \left[\frac{\partial}{\partial z} - j(\sqrt{P+k^2} + k) \right] \psi = 0, \quad (3.5)$$

Comparando a eq. (3.5) com a solução clássica de polinômios da forma $(x-a)(x-b)=0$, e considerando apenas um sentido de propagação, a mesma pode ser rescrita na forma unidirecional dada por [29], [31]:

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = -j(\sqrt{P+k^2} - k)\psi. \quad (3.6)$$

A eq. (3.6) é equivalente à equação de Helmholtz, porém sem aproximações. Entretanto, a mesma não pode ser resolvida diretamente devido à presença da raiz quadrada. Para contornar este problema, utilizou-se os polinômios aproximantes de Padé. O termo envolvendo a raiz quadrada de (3.6) pode ser expresso da seguinte forma [29]:

$$\sqrt{P+k^2} - k \approx \frac{N_m(P)}{D_n(P)}, \quad (3.7)$$

onde $N_m(P)$ e $D_n(P)$ são polinômios em P de ordem m e n para o numerador e o denominador, respectivamente. Esses polinômios são denominados aproximantes de Padé [24]. Utilizando-se da aproximação que contém as séries de Padé para a expansão da eq. (3.7) [35]:

$$\sqrt{P+k^2} - k \approx \sum_{i=1}^n \frac{A_{i,n} P/k}{1+B_{i,n} P/k^2}, \quad (3.8)$$

onde n é o número de termos nas séries de Padé cujos coeficientes são dados por:

$$A_{i,n} = \frac{2}{2n+1} \sin^2\left(\frac{i\pi}{2n+1}\right),$$

e

$$B_{i,n} = \cos^2\left(\frac{i\pi}{2n+1}\right).$$

Com isso, obtém-se os aproximantes de Padé para a raiz quadrada, os quais são listados na TABELA 3.1.

TABELA 3.1- Aproximantes de Padé em termos do operador diferencial P [24]

Ordem	$\frac{N_m(P)}{D_n(P)}$
(1,0) ou Paraxial	$\frac{P}{2k}$
(1,1)	$\frac{\frac{P}{2k}}{1 + \frac{P}{4k^2}}$
(2,2)	$\frac{\frac{P}{2k} + \frac{P^2}{4k^3}}{1 + \frac{3P}{4k^2} + \frac{P^2}{16k^4}}$
(3,3)	$\frac{\frac{P}{2k} + \frac{P^2}{2k^3} + \frac{3P^3}{32k^5}}{1 + \frac{5P}{4k^2} + \frac{3P^2}{8k^4} + \frac{P^3}{64k^6}}$

3.2- Convergência dos Aproximantes de Padé

Os aproximantes de Padé são expressões não-lineares na forma de razão de polinômios utilizados na aproximação de funções [29]. Esse tipo de aproximação tem sido utilizada em inúmeros problemas físicos em acústica [35], [42]-[44] e óptica integrada [21], [24]-[30], [36]-[39]. Os principais motivos para utilização desses aproximantes são: convergência acelerada [30] (são necessários poucos termos para se obter uma melhor precisão) e boa aproximação em uma ampla faixa de valores no domínio da função em questão [35], [40]. Para ilustrar essas características foi feita uma análise comparativa desses aproximantes com a série de Taylor através da aproximação do termo raiz quadrada utilizado na equação de onda unidirecional definida por:

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = -jkS(X)\psi \approx -jkR(X)\psi \quad (3.9)$$

onde $S(X) = \sqrt{X+1} - 1$, $X = P/k^2$, $k=k_0n_0$, n_0 é o índice de refração de referência, P é o operador diferencial transversal definido na eq. (3.4) e α é o coeficiente do meio não-linear. As aproximações, tanto de Padé quanto de Taylor, relativas à função $S(X)$ serão relacionadas no texto como $R(X)$, ou seja, em um caso ideal tem-se: $R(X)=S(X)$. A precisão dessas aproximações está ilustrada na FIGURA 3.1 que mostra a diferença absoluta do valor exato $S(X)$ e o valor aproximado $R(X)$, ou seja, $\Delta R(X)=|S(X)-R(X)|$ em função do parâmetro X .

FIGURA 3.1- Diferença $\Delta R(X)=|S(X)-R(X)|$, no intervalo $[-1,+7]$, para os aproximantes de Padé de ordem (1,0) ou paraxial, (1,1), (2,2), (3,3) e para expansão de Taylor de ordem 15.

Essas diferenças são consideradas no segmento $[-1,+7]$ no domínio de X . Vale salientar que neste caso as imagens das funções $S(X)$ e $R(X)$ são estritamente reais. Pode ser observado na FIGURA 3.1 uma rápida convergência dos aproximantes de Padé com poucos termos envolvidos e a sua maior faixa de atuação, mesmo com relação a expansões em séries de Taylor de ordem bem superior (15ª ordem). Como pode ser observado, o aproximante de Padé de ordem 3 atua sobre o

segmento $[-1,+7]$ com boa precisão e, no entanto, a expansão de Taylor de ordem 15 atua com precisão apenas no intervalo $[-1,+1]$.

3.3- Aproximantes Complexos de Padé

Embora os aproximantes de Padé convencionais (com coeficientes reais) sejam muito precisos para valores de $X > -1$, na região $X < -1$ esses aproximantes possuem singularidades que podem desviar consideravelmente os resultados, como pode ser constatado na FIGURA 3.2 que mostra a diferença $\text{Real}[\Delta R(X)]$ em função do parâmetro X . Esses desvios na aproximação de $S(X)$ podem gerar instabilidades impossibilitando a solução por diferenças finitas.

FIGURA 3.2- Diferença $\text{Real}[\Delta R(X)]$, no intervalo $[-6,-1]$, para os aproximantes de Padé de ordem (1,0) ou paraxial, (1,1), (2,2) e (3,3).

A localização do maior pólo de cada aproximante determina o quanto o formalismo será sensível à instabilidade. No caso da aproximação (3,3), por exemplo, o pólo localizado em $X \approx -1,232$ (marcado com a flecha 3 na FIGURA 3.2) deixa uma região estável menor ($X > -1,232$) do que nas aproximações (2,2) e (1,1), $X > -1,528$ (flecha 2) e $X > -4$ (flecha 1), respectivamente.

Considerando esses fatos, é desejável uma aproximação que descreva corretamente a função $S(X)$ no domínio $X < -1$ sem perder precisão no domínio positivo de X . Para isto, utilizou-se os aproximantes complexos [35]-[40]. Os coeficientes complexos são obtidos através da seguinte mudança de variável:

$$\sqrt{1+X} = \exp\left(j\frac{\varphi}{2}\right)\sqrt{1+[(1+X)\exp(-j\varphi)-1]} \quad (3.10)$$

Definindo $Y = [(1+X)\exp(-j\varphi)-1]$, os coeficientes podem ser obtidos aplicando-se os aproximantes convencionais de Padé sobre a nova variável Y em (3.10). Esta troca de variável é equivalente a rotacionar de φ graus o eixo original no ponto -1 para o plano complexo [35], como mostra a FIGURA 3.3.

FIGURA 3.3- Diagrama esquemático da rotação dos coeficientes de Padé.

Os principais coeficientes complexos de Padé são listados na TABELA 3.2 e aproximam a função $S(X)$ através da seguinte relação:

$$R(X) = \frac{N(X)}{D(X)} = \frac{N_1 + N_2 X + \dots + N_{p+1} X^{p-1}}{D_1 + D_2 X + \dots + D_{p+1} X^{p-1}}, \quad (3.11)$$

onde p é a ordem do aproximante, N e D são os coeficientes do numerador e denominador, respectivamente. O efeito da rotação no plano complexo é ilustrado na FIGURA 3.4, que mostra a parte real e imaginária de $\Delta R(X)$ em função do parâmetro X .

TABELA 3.2– Coeficientes complexos referentes aos aproximantes (2,2) e (3,3)

(2,2)	
$N_1 = \exp(\frac{5}{2}j\varphi) + 10\exp(\frac{3}{2}j\varphi) - 10\exp(j\varphi) + 5\exp(\frac{1}{2}j\varphi) - 5\exp(2j\varphi) - 1$ $N_2 = 10\exp(\frac{3}{2}j\varphi) - 10\exp(j\varphi) + 10\exp(\frac{1}{2}j\varphi) - 2$ $N_3 = 5\exp(\frac{1}{2}j\varphi) - 1$	Numerador
$D_1 = 5\exp(2j\varphi) + 10\exp(j\varphi) + 1$ $D_2 = 10\exp(j\varphi) + 2$ $D_3 = 1$	Denominador
(3,3)	
$N_1 = \exp(\frac{7}{2}j\varphi) + 21\exp(\frac{5}{2}j\varphi) + 35\exp(\frac{3}{2}j\varphi) + 7\exp(\frac{1}{2}j\varphi) - 35\exp(2j\varphi) - 21\exp(j\varphi) - 7\exp(3j\varphi) - 1$ $N_2 = 21\exp(\frac{5}{2}j\varphi) + 21\exp(\frac{1}{2}j\varphi) + 70\exp(\frac{3}{2}j\varphi) - 35\exp(2j\varphi) - 42\exp(j\varphi) - 3$ $N_3 = 21\exp(\frac{1}{2}j\varphi) + 35\exp(\frac{3}{2}j\varphi) - 21\exp(j\varphi) - 3$ $N_4 = 7\exp(\frac{1}{2}j\varphi) - 1$	Numerador
$D_1 = 7\exp(3j\varphi) + 35\exp(2j\varphi) + 21\exp(j\varphi) + 1$ $D_2 = 35\exp(2j\varphi) + 42\exp(j\varphi) + 3$ $D_3 = 21\exp(j\varphi) + 3$ $D_4 = 1$	Denominador

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

FIGURA 3.4- Diferença $S(X)-R(X)$ no intervalo $[-3,+3]$, para os aproximantes de Padé de ordem (2,2) e (3,3). As funções $\text{Real}[\Delta R(X)]$ e $\text{Imag}[\Delta R(X)]$ são ilustradas para os seguintes ângulos de rotação no plano complexo: (a) e (b) com $\varphi=15^\circ$, (c) e (d) com $\varphi=30^\circ$, (e) e (f) com $\varphi=90^\circ$.

Pode ser notado nesta seqüência de figuras que o aumento do ângulo de rotação resulta em uma diminuição do erro na região de $X < -1$ e um conseqüente aumento do erro na região positiva. Para um valor fixo de ângulo de rotação, por exemplo $\varphi = 90^\circ$, observa-se a melhor aproximação de $S(X)$ pelo aproximante de maior ordem. Baseando-se nesses fatos, nota-se que existe um compromisso entre a estabilidade do método controlada pela região $X < -1$ (devido à presença de pólos) e a precisão da aproximação na região positiva. O sinal de X pode indicar a região do campo elétrico ψ em questão. A região do campo será evanescente se X for negativo ou será oscilatória se X for positivo. Este fato pode ser explicado da seguinte forma: Admita um meio linear no qual o operador X aplicado ao campo ψ torna-se:

$$X\psi = \frac{1}{k^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left(\frac{n^2}{n_0^2} - 1 \right) \psi . \quad (3.12)$$

Pode ser facilmente mostrado que na região de campo evanescente (região onde o campo varia muito lentamente na direção transversal) o índice de refração de referência é maior que o índice de refração do meio em questão ($n_0 > n$). Isto faz com que o valor de $X\psi$ se torne negativo, uma vez que a segunda derivada do campo com respeito a x é aproximadamente zero ($\partial^2 \psi / \partial x^2 \approx 0$). De maneira análoga, pode-se concluir que a região positiva de X representa a parte oscilatória.

3.4- Aplicação de diferenças finitas na equação de onda não-linear.

Esta seção apresenta a expansão da equação de onda não-linear utilizando tanto os aproximantes de Padé com coeficientes reais quanto os aproximantes com coeficientes complexos.

3.4.1- Discretização da equação de onda para o Padé(1,0) utilizando o esquema Crank-Nicholson.

A partir da eq. (3.6), juntamente com o termo $\frac{N_m(P)}{D_n(P)}$ da TABELA 3.1 para aproximação de ordem (1,0), obtém-se :

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = -\frac{j}{2k} P \psi. \quad (3.13)$$

Rescrevendo (3.13) em diferenças finitas, resulta:

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta z} = -\frac{j}{2k} P \left(\frac{\psi_i^{n+1} + \psi_i^n}{2} \right). \quad (3.14)$$

onde o termo $\psi_i^n = \psi(i\Delta x, n\Delta z)$ em (3.14) é identificado como a notação simplificada para diferenças finitas. Os passos de discretização Δz e Δx são relativos às direções longitudinal e transversal, respectivamente. Considerando a eq. (3.4) para o termo de $P\psi$ centrado em i , pode-se expandir (3.14) em termos do operador diferencial definido em (B.1) no APÊNDICE B, obtendo-se:

$$\psi_i^{n+1} - \psi_i^n = -\frac{j\Delta z}{4k} \left(\psi_i^{n+1} \nu_i^{n+1} + \psi_{i+1}^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1} + \psi_i^n \nu_i^n + \psi_{i+1}^n + \psi_{i-1}^n \right),$$

onde

$$\nu_i = k_0^2 \Delta x^2 (n_i^2 - n_0^2 + \alpha_i |\psi_i|^2) - 2.$$

Agrupando os termos em $n+1$ do lado esquerdo da equação e em n do direito, tem-se:

$$\psi_{i-1}^{n+1} + (\nu_i^{n+1} - \gamma) \psi_i^{n+1} + \psi_{i+1}^{n+1} = -\psi_{i-1}^n + (-\nu_i^n - \gamma) \psi_i^n - \psi_{i+1}^n, \quad (3.15)$$

onde

$$v_i^t = -2 + k_0^2 \Delta x^2 \left[(n^2)_i^t - n_0^2 + \alpha_i^t |\psi_i^t|^2 \right],$$

$$\alpha_i^t = c \varepsilon_0 (n^2 n_{2s})_i^t,$$

$$t = n \text{ ou } n+1,$$

$$|\psi_i^{n+1}|^2 \cong |\psi_i^n|^2,$$

$$\gamma = -\frac{4k\Delta x^2}{j\Delta z}.$$

Note que o que a aproximação de Padé(1,0) é equivalente à aproximação paraxial [23], onde o termo de segunda derivada em relação ao eixo de propagação z é desprezado. A eq. (3.15) consiste de um sistema do tipo $A\psi = B\psi_0$, onde as matrizes A e B são tridiagonais. Neste caso, o vetor ψ_0 representa o campo inicial na posição n e ψ a solução na posição $n+1$. Observe que o quadrado do módulo do campo no passo $n+1$ foi aproximado para o valor do campo em n por causa do desconhecimento do estado do campo no passo seguinte, ou seja, $(|\psi_i^{n+1}|^2 \cong |\psi_i^n|^2)$.

3.4.1.1- O Algoritmo Iterativo.

Quando a densidade de potência incidente aumenta, o efeito não-linear também aumenta, deixando cada vez mais pobre a aproximação do módulo da média dos campos $(|\psi_i^{n+1}|^2 \cong |\psi_i^n|^2)$ utilizada no BPM convencional. Para contornar este problema, incluiu-se na formulação um algoritmo iterativo [22]-[27]. A idéia principal do algoritmo iterativo é aproximar o termo que inclui o campo no passo seguinte ψ^{n+1} do termo não-linear $|\psi^{n+1}|^2$ através de iterações sucessivas. Isto é realizável por meio da comparação entre os máximos das amplitudes dos campos nas iterações s e $s+1$. Para isso, a eq. (3.15) deve ser rescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \psi_{i-1}^{n+1,s+1} + (\xi_i^{n+1} - \gamma) \psi_i^{n+1,s+1} + \zeta_i^{n+1} |\psi_i^{n+1,s}|^2 \psi_i^{n+1,s} + \psi_{i+1}^{n+1,s+1} = \\ -\psi_{i-1}^n + (-v_i^n - \gamma) \psi_i^n - \psi, \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde

$$\xi_i^{n+1} = -2 + k_0^2 \Delta x^2 \left[(n^2)_i^{n+1} - n_0^2 \right],$$

$$\zeta_i^{n+1} = \alpha_i^{n+1} k_0^2 \Delta x^2,$$

$$v_i^n = -2 + k_0^2 \Delta x^2 \left[(n^2)_i^n - n_0^2 + \alpha_i^n |\psi_i^n|^2 \right],$$

e o sobrescrito s representa o número da iteração. Admitindo que o valor inicial de $\psi_i^{n+1,s}$ seja igual a ψ_i^n , a eq. (3.16) pode ser iterada até que o limiar de convergência, τ , dado por [23]

$$\max \left[\frac{|\psi_i^{n+1,s+1} - \psi_i^{n+1,s}|}{|\psi_i^{n+1,s}|} \right] < \tau, \quad (3.17)$$

seja satisfeito. Dessa forma, pode-se obter ψ_i^{n+1} de forma mais precisa. Este processo é repetido dentro de cada passo Δz na direção longitudinal. O fluxograma deste algoritmo encontra-se no APÊNDICE C.

3.4.2- O Esquema Douglas Generalizado.

É bem conhecido o fato de que o método implícito de Crank-Nicholson (CN) permite o uso de passos de discretização longitudinal maiores que no esquema explícito, além de apresentar estabilidade incondicional [52]. Entretanto, o esquema de CN possui o erro de truncamento na série de Taylor em $O(\Delta x^2)$ na direção transversal. O esquema GD, por sua vez, garante um erro de truncamento de $O(\Delta x^4)$ [32], [33]. Por este motivo, foi decidido utilizar este esquema na solução por

aproximantes de Padé. Vale salientar que nenhum dos dois esquemas abordados neste trabalho, CN e GD, foram utilizados na literatura com o propósito de resolver o formalismo de ângulo largo para guias não-lineares em diferenças finitas.

O termo da segunda derivada da equação de Helmholtz pode ser expandido por séries de Taylor, obtendo-se a seguinte expressão aproximada [52]:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\delta^2 \psi}{\Delta x^2} - \frac{1}{12} \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} \Delta x^2 + O(\Delta x^4). \quad (3.18)$$

Escrevendo (3.18) na forma de diferenças finitas e desprezando-se os termos de ordem superiores, resulta

$$\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_i = \frac{\delta^2 \psi}{\Delta x^2} - \frac{1}{12} \frac{\delta^2}{\Delta x^2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_i \Delta x^2,$$

que pode ser rescrita da seguinte forma,

$$\frac{\delta^2 \psi}{\Delta x^2} = \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{1}{12} \left[\frac{\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_{i+1} - 2 \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_i + \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_{i-1}}{\Delta x^2} \right] \Delta x^2,$$

resultando em:

$$\frac{\delta^2 \psi}{\Delta x^2} = \frac{1}{12} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_{i+1} + \frac{5}{6} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{1}{12} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_{i-1}. \quad (3.19)$$

O termo da segunda derivada $(\partial^2 \psi / \partial x^2)$ deve ser substituído por seu equivalente da eq. (3.6), como será mostrado no caso a seguir.

3.4.2.1- Discretização da equação de onda para o Padé(1,0) utilizando o esquema Douglas Generalizado.

A equação paraxial (3.13) pode ser rescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \sigma \frac{\partial \psi}{\partial z} - \theta \psi, \quad (3.20)$$

onde

$$\theta = k_0^2 (n^2 - n_0^2 + \alpha |\psi|^2),$$

$$\sigma = 2jk.$$

Substituindo (3.20) em (3.19), tem-se:

$$\frac{\delta^2 \psi}{\Delta x^2} = \frac{1}{12} \left(\sigma \frac{\partial \psi}{\partial z} - \theta \psi \right)_{i+1} + \frac{5}{6} \left(\sigma \frac{\partial \psi}{\partial z} - \theta \psi \right)_i + \frac{1}{12} \left(\sigma \frac{\partial \psi}{\partial z} - \theta \psi \right)_{i-1}.$$

Expandindo a relação acima, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\Delta z}{2\Delta x^2} (\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n) &= \frac{1}{12} \left[\sigma (\psi_{i+1}^{n+1} - \psi_{i+1}^n) - \Delta z \theta_{i+1} \left(\frac{\psi_{i+1}^{n+1} + \psi_{i+1}^n}{2} \right) \right] + \\ &+ \frac{5}{6} \left[\sigma (\psi_i^{n+1} - \psi_i^n) - \Delta z \theta_i \left(\frac{\psi_i^{n+1} + \psi_i^n}{2} \right) \right] + \frac{1}{12} \left[\sigma (\psi_{i-1}^{n+1} - \psi_{i-1}^n) - \Delta z \theta_{i-1} \left(\frac{\psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i-1}^n}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Agrupando os termos em n do lado direito (LD) e $n+1$ do lado esquerdo (LE), resulta:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\Delta z}{2\Delta x^2} - \frac{\sigma}{12} + \frac{\Delta z \theta_{i+1}^{n+1}}{24} \right) \psi_{i+1}^{n+1} + \left(-\frac{\Delta z}{\Delta x^2} - \frac{5\sigma}{12} + \frac{5\Delta z \theta_i^{n+1}}{12} \right) \psi_i^{n+1} + \left(\frac{\Delta z}{2\Delta x^2} - \frac{\sigma}{12} + \frac{\Delta z \theta_{i-1}^{n+1}}{24} \right) \psi_{i-1}^{n+1} = \\ \left(\frac{\Delta z}{2\Delta x^2} - \frac{\sigma}{12} - \frac{\Delta z \theta_{i+1}^n}{24} \right) \psi_{i+1}^n + \left(\frac{\Delta z}{\Delta x^2} - \frac{5\sigma}{12} - \frac{5\Delta z \theta_i^n}{12} \right) \psi_i^n - \left(\frac{\Delta z}{2\Delta x^2} + \frac{\sigma}{12} + \frac{\Delta z \theta_{i-1}^n}{24} \right) \psi_{i-1}^n, \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde

$$\theta_i^t = k_0^2 \left[(n^2)_i^t - n_0^2 + \alpha_i^t |\psi_i^t|^2 \right].$$

$$t = n \text{ ou } n+1,$$

Em seguida, rescrevendo (3.21) de forma a incluir os índices do algoritmo iterativo, resulta na seguinte equação:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\Delta z}{2\Delta x^2} - \frac{\sigma}{12} \right) \psi_{i+1}^{n+1,s+1} + \left(-\frac{\Delta z}{\Delta x^2} - \frac{5\sigma}{12} \right) \psi_i^{n+1,s+1} + \left(\frac{\Delta z}{2\Delta x^2} - \frac{\sigma}{12} \right) \psi_{i-1}^{n+1,s+1} + \frac{\Delta z \theta_{i+1}^{n+1,s}}{24} \psi_{i+1}^{n+1,s} + \\ & \frac{5\Delta z \theta_i^{n+1,s}}{12} \psi_i^{n+1,s} + \frac{\Delta z \theta_{i-1}^{n+1,s}}{24} \psi_{i-1}^{n+1,s} = \left(\frac{\Delta z}{2\Delta x^2} - \frac{\sigma}{12} - \frac{\Delta z \theta_{i+1}^n}{24} \right) \psi_{i+1}^n + \\ & \left(\frac{\Delta z}{\Delta x^2} - \frac{5\sigma}{12} - \frac{5\Delta z \theta_i^n}{12} \right) \psi_i^n - \left(\frac{\Delta z}{2\Delta x^2} + \frac{\sigma}{12} + \frac{\Delta z \theta_{i-1}^n}{24} \right) \psi_{i-1}^n, \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde

$$\theta_i^{n+1,k} = k_0^2 \left[(n^2)_i^{n+1} - n_0^2 + \alpha_i^{n+1} |\psi_i^{n+1,s}|^2 \right].$$

Observe que a eq. (3.22) deve respeitar o critério de convergência estabelecido na eq. (3.17).

3.4.3- Discretização da equação de onda para o Padé(1,1) utilizando o esquema Crank-Nicholson.

A partir de (3.6), juntamente com o termo $\frac{N_m(P)}{D_n(P)}$ da TABELA 3.1 para aproximação de ordem (1,1), obtém-se :

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = -j \frac{\frac{P}{2k}}{1 + \frac{P}{4k^2}} \psi,$$

Em diferenças finitas, temos:

$$\left(1 + \frac{P}{4k^2}\right)(\psi_i^{n+1} - \psi_i^n) = -\frac{j\Delta z}{2k} P \left(\frac{\psi_i^{n+1} + \psi_i^n}{2}\right),$$

separando os termos em n no LD e $n+1$ no LE, tem-se:

$$\psi_i^{n+1} + \left(\frac{1}{4k^2} + \frac{j\Delta z}{4k}\right) P \psi_i^{n+1} = \psi_i^n + \left(\frac{1}{4k^2} - \frac{j\Delta z}{4k}\right) P \psi_i^n,$$

A equação acima pode ser expandida com o auxílio de (B.1) definido no APÊNDICE B, o que resulta em:

$$\psi_i^{n+1} + \left(\frac{1}{4k^2} + \frac{j\Delta z}{4k}\right) \frac{(\psi_i^{n+1} \psi_i^{n+1} + \psi_{i+1}^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1})}{\Delta x^2} = \psi_i^n + \left(\frac{1}{4k^2} - \frac{j\Delta z}{4k}\right) \frac{(\psi_i^n \psi_i^n + \psi_{i+1}^n + \psi_{i-1}^n)}{\Delta x^2}$$

Agrupando os termos em n e $n+1$, obtém-se:

$$\phi \psi_{i-1}^{n+1} + (\phi \psi_i^{n+1} + 1) \psi_i^{n+1} + \phi \psi_{i+1}^{n+1} = \bar{\phi} \psi_{i-1}^n + (\bar{\phi} \psi_i^n + 1) \psi_i^n + \phi \psi_{i+1}^n, \quad (3.23)$$

onde

$$\phi = \frac{1}{4k^2 \Delta x^2} + \frac{j\Delta z}{4k \Delta x^2},$$

$$\bar{\phi} = \frac{1}{4k^2 \Delta x^2} - \frac{j\Delta z}{4k \Delta x^2}.$$

Rescrevendo (3.23) de forma a incluir os índices do algoritmo iterativo, resulta em:

$$\begin{aligned} & \phi \psi_{i-1}^{n+1,s+1} + (\phi \xi_i^{n+1} + 1) \psi_i^{n+1,s+1} + \phi \psi_{i+1}^{n+1,s+1} + \phi \zeta_i^{n+1} \left| \psi_i^{n+1,s} \right|^2 \psi_i^{n+1,s} = \\ & \bar{\phi} \psi_{i-1}^n + (\bar{\phi} v_i^n + 1) \psi_i^n + \phi \psi_{i+1}^n, \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde

$$\xi_i^{n+1} = -2 + k_0^2 \Delta x^2 \left[(n^2)_i^{n+1} - n_0^2 \right],$$

$$\zeta_i^{n+1} = \alpha_i^{n+1} k_0^2 \Delta x^2.$$

3.4.4- Discretização da equação de onda para o Padé(1,1) utilizando o esquema Douglas Generalizado.

Considere a equação de onda aproximada para Padé(1,1):

$$\left(1 + \frac{P}{4k^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{1}{2jk} P \psi.$$

A equação acima pode ser rescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \sigma \left(1 + \frac{P}{4k^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial z} - \theta \psi, \quad (3.25)$$

Substituindo (3.25) em (3.19), resulta:

$$\frac{\delta^2 \psi}{\Delta x^2} = \frac{1}{12} \left[\sigma \left(1 + \frac{P}{4k^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial z} - \theta \psi \right]_{i+1} + \frac{5}{6} \left[\sigma \left(1 + \frac{P}{4k^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial z} - \theta \psi \right]_i + \frac{1}{12} \left[\sigma \left(1 + \frac{P}{4k^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial z} - \theta \psi \right]_{i-1},$$

Aplicando diferenças finitas na relação acima, obtém-se

$$\frac{1}{\Delta x^2} (\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n) = \frac{1}{6} \left[\sigma \left(1 + \frac{P}{4k^2} \right) \left(\frac{\psi_{i+1}^{n+1} - \psi_{i+1}^n}{\Delta z} \right) - \theta_{i+1} \left(\frac{\psi_{i+1}^{n+1} + \psi_{i+1}^n}{2} \right) \right] +$$

$$\frac{5}{3} \left[\sigma \left(1 + \frac{P}{4k^2} \right) \left(\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta z} \right) - \theta_i \left(\frac{\psi_i^{n+1} + \psi_i^n}{2} \right) \right] + \frac{1}{6} \left[\sigma \left(1 + \frac{P}{4k^2} \right) \left(\frac{\psi_{i-1}^{n+1} - \psi_{i-1}^n}{\Delta z} \right) - \theta_{i-1} \left(\frac{\psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i-1}^n}{2} \right) \right],$$

Separando os termos em n no LD e $n+1$ no LE, tem-se:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\sigma}{6\Delta z} - \frac{\theta_{i+1}^{n+1}}{12} - \frac{1}{\Delta x^2} \right) \psi_{i+1}^{n+1} + \frac{\sigma}{24k^2 \Delta z} P \psi_{i+1}^{n+1} + \left(\frac{5\sigma}{3\Delta z} - \frac{5\theta_i^{n+1}}{6} + \frac{2}{\Delta x^2} \right) \psi_i^{n+1} + \frac{5\sigma}{12k^2 \Delta z} P \psi_i^{n+1} \\ & + \left(\frac{\sigma}{6\Delta z} - \frac{\theta_{i-1}^{n+1}}{12} - \frac{1}{\Delta x^2} \right) \psi_{i-1}^{n+1} + \frac{\sigma}{24k^2 \Delta z} P \psi_{i-1}^{n+1} = \left(\frac{\sigma}{6\Delta z} + \frac{\theta_{i+1}^n}{12} + \frac{1}{\Delta x^2} \right) \psi_{i+1}^n + \frac{\sigma}{24k^2 \Delta z} P \psi_{i+1}^n + \\ & + \left(\frac{5\sigma}{3\Delta z} + \frac{5\theta_i^n}{6} - \frac{2}{\Delta x^2} \right) \psi_i^n + \frac{5\sigma}{12k^2 \Delta z} P \psi_i^n + \left(\frac{\sigma}{6\Delta z} + \frac{\theta_{i-1}^n}{12} + \frac{1}{\Delta x^2} \right) \psi_{i-1}^n + \frac{\sigma}{24k^2 \Delta z} P \psi_{i-1}^n, \end{aligned}$$

Em seguida, os operadores diferenciais são expandidos e os termos semelhantes agrupados, resultando em:

$$\begin{aligned} & \gamma \psi_{i+2}^{n+1} + \left[\frac{\sigma \Delta x^2}{6\Delta z} - \frac{\theta_{i+1}^{n+1} \Delta x^2}{12} - 1 + \gamma(v_{i+1}^{n+1} + 10) \right] \psi_{i+1}^{n+1} + \left[\frac{5\sigma \Delta x^2}{3\Delta z} - \frac{5\theta_i^{n+1} \Delta x^2}{6} + 2 + \gamma(10v_i^{n+1} + 2) \right] \psi_i^{n+1} \\ & + \left[\frac{\sigma \Delta x^2}{6\Delta z} - \frac{\theta_{i-1}^{n+1} \Delta x^2}{12} - 1 + \gamma(v_{i-1}^{n+1} + 10) \right] \psi_{i-1}^{n+1} + \gamma \psi_{i-2}^{n+1} = \\ & \gamma \psi_{i+2}^n + \left[\frac{\sigma \Delta x^2}{6\Delta z} + \frac{\theta_{i+1}^n \Delta x^2}{12} + 1 + \gamma(v_{i+1}^n + 10) \right] \psi_{i+1}^n + \left[\frac{5\sigma \Delta x^2}{3\Delta z} + \frac{5\theta_i^n \Delta x^2}{6} - 2 + \gamma(10v_i^n + 2) \right] \psi_i^n \\ & + \left[\frac{\sigma \Delta x^2}{6\Delta z} + \frac{\theta_{i-1}^n \Delta x^2}{12} + 1 + \gamma(v_{i-1}^n + 10) \right] \psi_{i-1}^n + \gamma \psi_{i-2}^n, \end{aligned} \tag{3.26}$$

onde

$$\sigma = 2jk,$$

$$\gamma = \frac{\sigma}{24k^2 \Delta z}.$$

Da mesma forma, (3.26) pode ser rescrita de forma a incluir os índices do algoritmo iterativo, ou seja:

$$\begin{aligned}
& \gamma \psi_{i+2}^{n+1,s+1} + \left(\frac{\sigma \Delta x^2}{6 \Delta z} - 1 + 10\gamma \right) \psi_{i+1}^{n+1,s+1} + \left(\frac{5\sigma \Delta x^2}{3 \Delta z} + 2 + 2\gamma \right) \psi_i^{n+1,s+1} + \left(\gamma v_{i+1}^{n+1,k} - \frac{\theta_{i+1}^{n+1,s} \Delta x^2}{12} \right) \psi_{i+1}^{n+1,s} \\
& + \left(10\gamma v_i^{n+1,s} - \frac{5\theta_i^{n+1,s} \Delta x^2}{6} \right) \psi_i^{n+1,s} + \left(\gamma v_{i-1}^{n+1,s} - \frac{\theta_{i-1}^{n+1,s} \Delta x^2}{12} \right) \psi_{i-1}^{n+1,s} + \gamma \psi_{i-2}^{n+1,s+1} = \\
& \gamma \psi_{i+2}^n + \left[\frac{\sigma \Delta x^2}{6 \Delta z} + \frac{\theta_{i+1}^n \Delta x^2}{12} + 1 + \gamma(v_{i+1}^n + 10) \right] \psi_{i+1}^n + \left[\frac{5\sigma \Delta x^2}{3 \Delta z} + \frac{5\theta_i^n \Delta x^2}{6} - 2 + \gamma(10v_i^n + 2) \right] \psi_i^n + \\
& \left[\frac{\sigma \Delta x^2}{6 \Delta z} + \frac{\theta_{i-1}^n \Delta x^2}{12} + 1 + \gamma(v_{i-1}^n + 10) \right] \psi_{i-1}^n + \gamma \psi_{i-2}^n, \tag{3.27}
\end{aligned}$$

Atente para o fato de que as equações (3.26) e (3.27) resultam em um sistema onde a matriz é pentadiagonal.

3.4.5- Discretização da equação de onda para o Padé(2,2) utilizando o esquema Crank-Nicholson.

A partir de (3.6), juntamente com o termo $\frac{N_m(P)}{D_n(P)}$ da TABELA 3.1 para aproximação de ordem (2,2), obtém-se :

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = -j \frac{\frac{P}{2k} + \frac{P^2}{4k^3}}{1 + \frac{3P}{4k^2} + \frac{P^2}{16k^4}} \psi.$$

Rescrevendo a equação acima em diferenças finitas, resulta:

$$\left(1 + \frac{3P}{4k^2} + \frac{P^2}{16k^4} \right) (\psi_i^{n+1} - \psi_i^n) = -j \Delta z \left(\frac{P}{2k} + \frac{P^2}{4k^3} \right) \left(\frac{\psi_i^{n+1} + \psi_i^n}{2} \right),$$

Separando os termos em n no LD e $n+1$ no LE, tem-se:

$$\begin{aligned}
& \psi_i^{n+1} + \left(\frac{3}{4k^2} + \frac{j\Delta z}{4k} \right) P \psi_i^{n+1} + \left(\frac{1}{16k^4} + \frac{j\Delta z}{8k^3} \right) P^2 \psi_i^{n+1} = \psi_i^n + \left(\frac{3}{4k^2} - \frac{j\Delta z}{4k} \right) P \psi_i^n \\
& + \left(\frac{1}{16k^4} - \frac{j\Delta z}{8k^3} \right) P^2 \psi_i^n.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

A eq. (3.28) pode ser agora expandida com o auxílio de (B.1) e (B.2) definidos no APÊNDICE B:

$$\begin{aligned}
& \psi_i^{n+1} + \left(\frac{3}{4k^2} + \frac{j\Delta z}{4k} \right) \frac{(\psi_i^{n+1} \nu_i^{n+1/2} + \psi_{i+1}^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1})}{\Delta x^2} \\
& + \left(\frac{1}{16k^4} + \frac{j\Delta z}{8k^3} \right) \frac{\psi_{i+2}^{n+1} + (\nu_{i+1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) \psi_{i+1}^{n+1} + \left[(\nu^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] \psi_i^{n+1} + (\nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) \psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i-2}^{n+1}}{\Delta x^4} = \\
& \psi_i^n + \left(\frac{3}{4k^2} - \frac{j\Delta z}{4k} \right) \frac{(\psi_i^n \nu_i^{n+1/2} + \psi_{i+1}^n + \psi_{i-1}^n)}{\Delta x^2} \\
& + \left(\frac{1}{16k^4} - \frac{j\Delta z}{8k^3} \right) \frac{\psi_{i+2}^n + (\nu_{i+1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) \psi_{i+1}^n + \left[(\nu^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] \psi_i^n + (\nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) \psi_{i-1}^n + \psi_{i-2}^n}{\Delta x^4}.
\end{aligned}$$

onde

$$\nu_i = \Delta x^2 \theta_i - 2,$$

Agrupando-se os termos em n e $n+1$, obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \phi_2 \psi_{i-2}^{n+1} + \left[\phi_2 (\nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) + \phi_1 \right] \psi_{i-1}^{n+1} + \left\{ \phi_1 \nu_i^{n+1/2} + \phi_2 \left[(\nu^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] + 1 \right\} \psi_i^{n+1} \\
& + \left[\phi_2 (\nu_{i+1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) + \phi_1 \right] \psi_{i+1}^{n+1} + \phi_2 \psi_{i+2}^{n+1} = \\
& \overline{\phi}_2 \psi_{i-2}^n + \left[\overline{\phi}_2 (\nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) + \overline{\phi}_1 \right] \psi_{i-1}^n + \left\{ \overline{\phi}_1 \nu_i^{n+1/2} + \overline{\phi}_2 \left[(\nu^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] + 1 \right\} \psi_i^n \\
& + \left[\overline{\phi}_2 (\nu_{i+1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) + \overline{\phi}_1 \right] \psi_{i+1}^n + \overline{\phi}_2 \psi_{i+2}^n
\end{aligned} \tag{3.29}$$

onde

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= \frac{3}{4k^2 \Delta x^2} + \frac{j\Delta z}{4k \Delta x^2}, \\
\phi_2 &= \frac{1}{16k^4 \Delta x^4} + \frac{j\Delta z}{8k^3 \Delta x^4},
\end{aligned}$$

$$\overline{\phi}_1 = \frac{3}{4k^2 \Delta x^2} - \frac{j\Delta z}{4k\Delta x^2},$$

$$\overline{\phi}_2 = \frac{1}{16k^4 \Delta x^4} - \frac{j\Delta z}{8k^3 \Delta x^4}.$$

Rescrevendo (3.29) de forma a incluir os índices do algoritmo iterativo, resulta em:

$$\begin{aligned} & \phi_2 \psi_{i-2}^{n+1,s+1} + [\phi_2 (v_{i-1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s}) + \phi_1] \psi_{i-1}^{n+1,s+1} + \left\{ \phi_1 v_i^{n+1/2,s} + \phi_2 \left[(v^2)_i^{n+1/2,s} + 2 \right] + 1 \right\} \psi_i^{n+1,s+1} \\ & + [\phi_2 (v_{i+1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s}) + \phi_1] \psi_{i+1}^{n+1,s+1} + \phi_2 \psi_{i+2}^{n+1,s+1} = \\ & \overline{\phi}_2 \psi_{i-2}^n + [\overline{\phi}_2 (v_{i-1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s}) + \overline{\phi}_1] \psi_{i-1}^n + \left\{ \overline{\phi}_1 v_i^{n+1/2,s} + \overline{\phi}_2 \left[(v^2)_i^{n+1/2,s} + 2 \right] + 1 \right\} \psi_i^n \\ & + [\overline{\phi}_2 (v_{i+1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s}) + \overline{\phi}_1] \psi_{i+1}^n + \overline{\phi}_2 \psi_{i+2}^n \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde

$$v_i^{n+1/2,s} = -2 + k_0^2 \Delta x^2 \left[(n^2)_i^{n+1/2} - n_0^2 + \alpha_i^{n+1/2} (\psi^2)_i^{n+1/2,s} \right],$$

$$(\psi^2)_i^{n+1/2,s} = \frac{(\psi^2)_i^{n+1,s} + (\psi^2)_i^n}{2}.$$

Observe que o termo $\psi^{n+1,s}$, relacionado com a condição de convergência da eq. (3.17), está embutido no termo $v^{n+1/2,s}$ da eq. (3.30).

Como no caso desenvolvido na Seção 3.1.4, a matriz do sistema linear resultante, para o aproximante de ordem (2,2) utilizando o esquema de Crank-Nicholson, é pentadiagonal. Esse fato sugere as seguintes relações para o número de diagonais resultantes da expansão dos aproximantes de ordem (m,m) para os esquemas CN e GD, respectivamente: $2m+1$ e $2m+3$.

3.4.6- Discretização da equação de onda para o Padé(3,3) utilizando o esquema Crank-Nicholson.

A partir de (3.6), juntamente com o termo $\frac{N_m(P)}{D_n(P)}$ da TABELA 3.1 para aproximação de ordem (3,3), obtém-se :

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = -j \frac{\frac{P}{2k} + \frac{P^2}{2k^3} + \frac{3P^3}{32k^5}}{1 + \frac{5P}{4k^2} + \frac{3P^2}{8k^4} + \frac{P^3}{64k^6}} \psi.$$

Rescrevendo a equação acima em diferenças finitas, resulta:

$$\left(1 + \frac{5P}{4k^2} + \frac{3P^2}{8k^4} + \frac{P^3}{64k^6}\right) (\psi_i^{n+1} - \psi_i^n) = -j\Delta z \left(\frac{P}{2k} + \frac{P^2}{2k^3} + \frac{3P^3}{32k^5}\right) \left(\frac{\psi_i^{n+1} + \psi_i^n}{2}\right).$$

Separando os termos em n no LD e $n+1$ no LE, tem-se:

$$\begin{aligned} \psi_i^{n+1} + \left(\frac{5}{4k^2} + \frac{j\Delta z}{4k}\right) P \psi_i^{n+1} + \left(\frac{3}{8k^4} + \frac{j\Delta z}{4k^3}\right) P^2 \psi_i^{n+1} + \left(\frac{1}{64k^6} + \frac{3j\Delta z}{64k^5}\right) P^3 \psi_i^{n+1} = \\ \psi_i^n + \left(\frac{5}{4k^2} - \frac{j\Delta z}{4k}\right) P \psi_i^n + \left(\frac{3}{8k^4} - \frac{j\Delta z}{4k^3}\right) P^2 \psi_i^n + \left(\frac{1}{64k^6} - \frac{3j\Delta z}{64k^5}\right) P^3 \psi_i^n. \end{aligned} \quad (3.31)$$

A eq. (3.31) pode ser agora expandida com o auxílio de (B.1), (B.2) e (B.3) definidos no APÊNDICE B:

$$\begin{aligned}
& \psi_i^{n+1} + \left(\frac{5}{4k^2} + \frac{j\Delta z}{4k} \right) \frac{(\psi_i^{n+1} v_i^{n+1/2} + \psi_{i+1}^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1})}{\Delta x^2} \\
& + \left(\frac{3}{8k^4} + \frac{j\Delta z}{4k^3} \right) \frac{\psi_{i+2}^{n+1} + (v_{i+1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) \psi_{i+1}^{n+1} + \left[(v^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] \psi_i^{n+1} + (v_{i-1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) \psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i-2}^{n+1}}{\Delta x^4} \\
& + \left(\frac{1}{64k^6} + \frac{3j\Delta z}{64k^5} \right) \frac{1}{\Delta x^6} \left\{ \begin{aligned} & \psi_{i+3}^{n+1} + \psi_{i+2}^{n+1} (v_{i+2}^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) + \psi_{i+1}^{n+1} \left[(v^2)_{i+1}^{n+1/2} + (v^2)_i^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} v_i^{n+1/2} + 3 \right] \\ & + \psi_i^{n+1} \left[4v_i^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} + (v^3)_i^{n+1/2} \right] \\ & + \psi_{i-1}^{n+1} \left[(v^2)_{i-1}^{n+1/2} + (v^2)_i^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} v_i^{n+1/2} + 3 \right] + \psi_{i-2}^{n+1} (v_{i-2}^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) + \psi_{i-3}^{n+1} \end{aligned} \right\} \\
& = \psi_i^n + \left(\frac{5}{4k^2} - \frac{j\Delta z}{4k} \right) \frac{(\psi_i^n v_i^{n+1/2} + \psi_{i+1}^n + \psi_{i-1}^n)}{\Delta x^2} \\
& + \left(\frac{3}{8k^4} - \frac{j\Delta z}{4k^3} \right) \frac{\psi_{i+2}^n + (v_{i+1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) \psi_{i+1}^n + \left[(v^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] \psi_i^n + (v_{i-1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) \psi_{i-1}^n + \psi_{i-2}^n}{\Delta x^4} \\
& + \left(\frac{1}{64k^6} - \frac{3j\Delta z}{64k^5} \right) \frac{1}{\Delta x^6} \left\{ \begin{aligned} & \psi_{i+3}^n + \psi_{i+2}^n (v_{i+2}^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) + \psi_{i+1}^n \left[(v^2)_{i+1}^{n+1/2} + (v^2)_i^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} v_i^{n+1/2} + 3 \right] \\ & + \psi_i^n \left[4v_i^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} + (v^3)_i^{n+1/2} \right] \\ & + \psi_{i-1}^n \left[(v^2)_{i-1}^{n+1/2} + (v^2)_i^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} v_i^{n+1/2} + 3 \right] + \psi_{i-2}^n (v_{i-2}^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) + \psi_{i-3}^n \end{aligned} \right\}.
\end{aligned}$$

Agrupando-se os termos em n e $n+1$, obtém-se:

$$\begin{aligned}
& o_3 \psi_{i-3}^{n+1} + [o_2 + o_3 (v_{i-2}^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2})] \psi_{i-2}^{n+1} \\
& + \left\{ o_1 + o_2 (v_{i-1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) + o_3 \left[(v^2)_{i-1}^{n+1/2} + (v^2)_i^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} v_i^{n+1/2} + 3 \right] \right\} \psi_{i-1}^{n+1} \\
& + \left\{ 1 + o_1 v_i^{n+1/2} + o_2 \left[(v^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] + o_3 \left[4v_i^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} + (v^3)_i^{n+1/2} \right] \right\} \psi_i^{n+1} \\
& + \left\{ o_1 + o_2 (v_{i+1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) + o_3 \left[(v^2)_{i+1}^{n+1/2} + (v^2)_i^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} v_i^{n+1/2} + 3 \right] \right\} \psi_{i+1}^{n+1} \\
& + [o_2 + o_3 (v_{i+2}^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2})] \psi_{i+2}^{n+1} + o_3 \psi_{i+3}^{n+1} = \\
& \overline{o}_3 \psi_{i-3}^n + [\overline{o}_2 + \overline{o}_3 (v_{i-2}^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2})] \psi_{i-2}^n \\
& + \left\{ \overline{o}_1 + \overline{o}_2 (v_{i-1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) + \overline{o}_3 \left[(v^2)_{i-1}^{n+1/2} + (v^2)_i^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} v_i^{n+1/2} + 3 \right] \right\} \psi_{i-1}^n \\
& + \left\{ 1 + \overline{o}_1 v_i^{n+1/2} + \overline{o}_2 \left[(v^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] + \overline{o}_3 \left[4v_i^{n+1/2} + v_{i-1}^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} + (v^3)_i^{n+1/2} \right] \right\} \psi_i^n \\
& + \left\{ \overline{o}_1 + \overline{o}_2 (v_{i+1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2}) + \overline{o}_3 \left[(v^2)_{i+1}^{n+1/2} + (v^2)_i^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} v_i^{n+1/2} + 3 \right] \right\} \psi_{i+1}^n \\
& + [\overline{o}_2 + \overline{o}_3 (v_{i+2}^{n+1/2} + v_{i+1}^{n+1/2} + v_i^{n+1/2})] \psi_{i+2}^n + \overline{o}_3 \psi_{i+3}^n
\end{aligned} \tag{3.32}$$

onde

$$\begin{aligned}
o_1 &= \frac{5}{4k^2 \Delta x^2} + \frac{j\Delta z}{4k \Delta x^2}, \\
o_2 &= \frac{3}{8k^4 \Delta x^4} + \frac{j\Delta z}{4k^3 \Delta x^4}, \\
o_3 &= \frac{1}{64k^6 \Delta x^6} + \frac{3j\Delta z}{64k^5 \Delta x^6}, \\
\overline{o_1} &= \frac{5}{4k^2 \Delta x^2} - \frac{j\Delta z}{4k \Delta x^2}, \\
\overline{o_2} &= \frac{3}{8k^4 \Delta x^4} - \frac{j\Delta z}{4k^3 \Delta x^4}, \\
\overline{o_3} &= \frac{1}{64k^6 \Delta x^6} - \frac{3j\Delta z}{64k^5 \Delta x^6}.
\end{aligned}$$

Rescrevendo (3.32) de forma a incluir os índices do algoritmo iterativo, resulta em:

$$\begin{aligned}
& o_3 \psi_{i-3}^{n+1,s+1} + \left[o_2 + o_3 \left(v_{i-2}^{n+1/2,s} + v_{i-1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s} \right) \right] \psi_{i-2}^{n+1,s+1} \\
& + \left\{ o_1 + o_2 \left(v_{i-1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s} \right) + o_3 \left[\left(v^2 \right)_{i-1}^{n+1/2,s} + \left(v^2 \right)_i^{n+1/2,s} + v_{i-1}^{n+1/2,s} v_i^{n+1/2,s} + 3 \right] \right\} \psi_{i-1}^{n+1,s+1} \\
& + \left\{ 1 + o_1 v_i^{n+1/2,s} + o_2 \left[\left(v^2 \right)_i^{n+1/2,s} + 2 \right] + o_3 \left[4v_i^{n+1/2,s} + v_{i-1}^{n+1/2,s} + v_{i+1}^{n+1/2,s} + \left(v^3 \right)_i^{n+1/2,s} \right] \right\} \psi_i^{n+1,s+1} \\
& + \left\{ o_1 + o_2 \left(v_{i+1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s} \right) + o_3 \left[\left(v^2 \right)_{i+1}^{n+1/2,s} + \left(v^2 \right)_i^{n+1/2,s} + v_{i+1}^{n+1/2,s} v_i^{n+1/2,s} + 3 \right] \right\} \psi_{i+1}^{n+1,s+1} \\
& + \left[o_2 + o_3 \left(v_{i+2}^{n+1/2,s} + v_{i+1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s} \right) \right] \psi_{i+2}^{n+1,s+1} + o_3 \psi_{i+3}^{n+1,s+1} = \\
& \overline{o_3} \psi_{i-3}^n + \left[\overline{o_2} + \overline{o_3} \left(v_{i-2}^{n+1/2,s} + v_{i-1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s} \right) \right] \psi_{i-2}^n \\
& + \left\{ \overline{o_1} + \overline{o_2} \left(v_{i-1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s} \right) + \overline{o_3} \left[\left(v^2 \right)_{i-1}^{n+1/2,s} + \left(v^2 \right)_i^{n+1/2,s} + v_{i-1}^{n+1/2,s} v_i^{n+1/2,s} + 3 \right] \right\} \psi_{i-1}^n \\
& + \left\{ 1 + \overline{o_1} v_i^{n+1/2,s} + \overline{o_2} \left[\left(v^2 \right)_i^{n+1/2,s} + 2 \right] + \overline{o_3} \left[4v_i^{n+1/2,s} + v_{i-1}^{n+1/2,s} + v_{i+1}^{n+1/2,s} + \left(v^3 \right)_i^{n+1/2,s} \right] \right\} \psi_i^n \\
& + \left\{ \overline{o_1} + \overline{o_2} \left(v_{i+1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s} \right) + \overline{o_3} \left[\left(v^2 \right)_{i+1}^{n+1/2,s} + \left(v^2 \right)_i^{n+1/2,s} + v_{i+1}^{n+1/2,s} v_i^{n+1/2,s} + 3 \right] \right\} \psi_{i+1}^n \\
& + \left[\overline{o_2} + \overline{o_3} \left(v_{i+2}^{n+1/2,s} + v_{i+1}^{n+1/2,s} + v_i^{n+1/2,s} \right) \right] \psi_{i+2}^n + \overline{o_3} \psi_{i+3}^n
\end{aligned} \tag{3.33}$$

onde

$$v_i^{n+1/2,s} = -2 + k_0^2 \Delta x^2 \left[(n^2)_i^{n+1/2} - n_0^2 + \alpha_i^{n+1/2} \left(|\psi|^2 \right)_i^{n+1/2,s} \right],$$

$$\left(|\psi|^2 \right)_i^{n+1/2,s} = \frac{\left(|\psi|^2 \right)_i^{n+1,s} + \left(|\psi|^2 \right)_i^n}{2}.$$

Neste caso, a matriz do sistema linear resultante para o aproximante de ordem (3,3) utilizando o esquema de Crank-Nicholson contém sete diagonais.

3.5- Aproximação por diferenças finitas da equação de onda através dos coeficientes complexos de Padé.

Partindo da equação de onda (3.9) e utilizando o esquema CN, temos em diferenças finitas:

$$\frac{(\psi_i^{n+1} - \psi_i^n)}{\Delta z} = -jk \frac{N(X)}{D(X)} \frac{(\psi_i^{n+1} + \psi_i^n)}{2}. \quad (3.34)$$

Agrupando os termos em n e $n+1$, obtém-se:

$$(D(X) + \delta N(X))\psi_i^{n+1} = (D(X) + \bar{\delta} N(X))\psi_i^n, \quad (3.35)$$

onde $\delta = \frac{jk\Delta z}{2}$ e $\bar{\delta} = -\frac{jk\Delta z}{2}$. $N(X)$ e $D(X)$ são o numerador e o denominador de $R(X)$ definido anteriormente em (3.11), respectivamente.

Nas próximas seções serão aproximados os termos $N(X)$ e $D(X)$ através dos aproximantes complexos de Padé de ordem (2,2) e (3,3).

3.5.1- Discretização da equação de onda para o Padé(2,2) complexo utilizando o esquema Crank-Nicholson.

Substituindo os termos de (3.11) para $p=2$ em (3.35), resulta:

$$\begin{aligned} & \left(D_1 + D_2 X + D_3 X^2 + N_1 + \delta N_2 X + \delta N_3 X^2 \right) \psi_i^{n+1} = \\ & \left(D_1 + D_2 X + D_3 X^2 + N_1 + \bar{\delta} N_2 X + \bar{\delta} N_3 X^2 \right) \psi_i^n. \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde os coeficientes D_1, D_2, D_3, N_1, N_2 e N_3 são definidos na TABELA 3.2 para o aproximante (2,2). Sabendo que $X = P/k^2$, é possível expandir (3.36) em termos dos operadores diferenciais definidos em (B.1) e (B.2), de modo que:

$$T_1 \psi_i^{n+1} + T_2 (\psi_i^{n+1/2} \psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i+1}^{n+1}) + T_3 \left\{ \psi_{i+2}^{n+1} + (\psi_{i+1}^{n+1/2} + \psi_i^{n+1/2}) \psi_{i+1}^{n+1} + \left[(\psi^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] \psi_i^{n+1} \right. \\ \left. + (\psi_{i-1}^{n+1/2} + \psi_i^{n+1/2}) \psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i-2}^{n+1} \right\} = \\ T_1' \psi_i^n + T_2' (\psi_i^{n+1/2} \psi_i^n + \psi_{i-1}^n + \psi_{i+1}^n) + T_3' \left\{ \psi_{i+2}^n + (\psi_{i+1}^{n+1/2} + \psi_i^{n+1/2}) \psi_{i+1}^n + \left[(\psi^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] \psi_i^n \right. \\ \left. + (\psi_{i-1}^{n+1/2} + \psi_i^{n+1/2}) \psi_{i-1}^n + \psi_{i-2}^n \right\},$$

onde

$$T_l = \frac{D_l + \delta N_l}{(\Delta x k)^{2l-2}},$$

$$T_l' = \frac{D_l + \bar{\delta} N_l}{(\Delta x k)^{2l-2}},$$

com $l = 1, 2$ e 3 . Agrupando os termos semelhantes e incluindo os índices relativos ao algoritmo iterativo é possível chegar a esta forma estável para a discretização da equação de onda para Padé (2,2):

$$T_3 \psi_{i-2}^{n+1,s+1} + \psi_{i-1}^{n+1,s+1} \left[T_2 + T_3 (\psi_{i-1}^{n+1/2,s} + \psi_i^{n+1/2,s}) \right] + \left\{ T_1 + \psi_i^{n+1/2,s} T_2 + T_3 \left[(\psi^2)_i^{n+1/2,s} + 2 \right] \right\} \psi_i^{n+1,s+1} \\ + \psi_{i+1}^{n+1,s+1} \left[T_2 + T_3 (\psi_{i+1}^{n+1/2,s} + \psi_i^{n+1/2,s}) \right] + T_3 \psi_{i+2}^{n+1,s+1} = \\ T_3' \psi_{i-2}^n + \psi_{i-1}^n \left[T_2' + T_3' (\psi_{i-1}^{n+1/2,s} + \psi_i^{n+1/2,s}) \right] + \left\{ T_1' + \psi_i^{n+1/2,s} T_2' + T_3' \left[(\psi^2)_i^{n+1/2,s} + 2 \right] \right\} \psi_i^n \\ + \psi_{i+1}^n \left[T_2' + T_3' (\psi_{i+1}^{n+1/2,s} + \psi_i^{n+1/2,s}) \right] + T_3' \psi_{i+2}^n, \quad (3.37)$$

onde

$$\psi_i^{n+1/2,s} = -2 + k_0^2 \Delta x^2 \left[(n^2)_i^{n+1/2} - n_0^2 + \alpha_i^{n+1/2} (\psi^2)_i^{n+1/2,s} \right],$$

$$(\psi^2)_i^{n+1/2,s} = \frac{(\psi^2)_i^{n+1,s} + (\psi^2)_i^n}{2}.$$

3.5.2- Discretização da equação de onda para o Padé(3,3) complexo utilizando o esquema Crank-Nicholson.

Substituindo-se os termos de (3.11) para $p=3$ em (3.35), resulta:

$$\begin{aligned} & (D_1 + D_2 X + D_3 X^2 + N_1 + \delta N_2 X + \delta N_3 X^2 + \delta N_4 X^3) \psi_i^{n+1} = \\ & (D_1 + D_2 X + D_3 X^2 + N_1 + \bar{\delta} N_2 X + \bar{\delta} N_3 X^2 + \bar{\delta} N_4 X^3) \psi_i^n \end{aligned} \quad (3.38)$$

onde os coeficientes $D_1, D_2, D_3, D_4, N_1, N_2, N_3$ e N_4 são definidos na TABELA 3.2 para o aproximante de ordem 3. Sabendo que $X = P/k^2$, pode-se expandir a eq. (3.38) em termos dos operadores diferenciais definidos em (B.1), (B.2) e (B.3), obtendo-se:

$$\begin{aligned} & T_1 \psi_i^{n+1} + T_2 (\nu_i^{n+1/2} \psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i+1}^{n+1}) \\ & + T_3 \left\{ \psi_{i+2}^{n+1} + (\nu_{i+1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) \psi_{i+1}^{n+1} + \left[(\nu^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] \psi_i^{n+1} + (\nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) \psi_{i-1}^{n+1} + \psi_{i-2}^{n+1} \right\} \\ & + T_4 \left\{ \psi_{i+3}^{n+1} + \psi_{i+2}^{n+1} (\nu_{i+2}^{n+1/2} + \nu_{i+1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) + \psi_{i+1}^{n+1} \left[(\nu^2)_{i+1}^{n+1/2} + (\nu^2)_i^{n+1/2} + \nu_{i+1}^{n+1/2} \nu_i^{n+1/2} + 3 \right] \right. \\ & \left. + \psi_i^{n+1} \left[4\nu_i^{n+1/2} + \nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_{i+1}^{n+1/2} + (\nu^3)_i^{n+1/2} \right] \right. \\ & \left. + \psi_{i-1}^{n+1} \left[(\nu^2)_{i-1}^{n+1/2} + (\nu^2)_i^{n+1/2} + \nu_{i-1}^{n+1/2} \nu_i^{n+1/2} + 3 \right] + \psi_{i-2}^{n+1} (\nu_{i-2}^{n+1/2} + \nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) + \psi_{i-3}^{n+1} \right\} = \\ & T_1' \psi_i^n + T_2' (\nu_i^{n+1/2} \psi_i^n + \psi_{i-1}^n + \psi_{i+1}^n) \\ & + T_3' \left\{ \psi_{i+2}^n + (\nu_{i+1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) \psi_{i+1}^n + \left[(\nu^2)_i^{n+1/2} + 2 \right] \psi_i^n + (\nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) \psi_{i-1}^n + \psi_{i-2}^n \right\} \\ & + T_4' \left\{ \psi_{i+3}^n + \psi_{i+2}^n (\nu_{i+2}^{n+1/2} + \nu_{i+1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) + \psi_{i+1}^n \left[(\nu^2)_{i+1}^{n+1/2} + (\nu^2)_i^{n+1/2} + \nu_{i+1}^{n+1/2} \nu_i^{n+1/2} + 3 \right] \right. \\ & \left. + \psi_i^n \left[4\nu_i^{n+1/2} + \nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_{i+1}^{n+1/2} + (\nu^3)_i^{n+1/2} \right] \right. \\ & \left. + \psi_{i-1}^n \left[(\nu^2)_{i-1}^{n+1/2} + (\nu^2)_i^{n+1/2} + \nu_{i-1}^{n+1/2} \nu_i^{n+1/2} + 3 \right] + \psi_{i-2}^n (\nu_{i-2}^{n+1/2} + \nu_{i-1}^{n+1/2} + \nu_i^{n+1/2}) + \psi_{i-3}^n \right\}, \end{aligned}$$

onde

$$T_l = \frac{D_l + \delta N_l}{(\Delta x k)^{2l-2}},$$

$$T_l' = \frac{D_l + \delta N_l}{(\Delta x k)^{2l-2}},$$

com $l = 1, 2, 3$ e 4 .

Agrupando os termos semelhantes e incluindo os índices relativos ao algoritmo iterativo, resulta:

$$\begin{aligned}
& T_4 \psi_{i-3}^{n+1,s+1} + [T_3 + T_4 (\nu_{i-2}^{n+1/2,s} + \nu_{i-1}^{n+1/2,s} + \nu_i^{n+1/2,s})] \psi_{i-2}^{n+1,s+1} \\
& + \left\{ T_2 + T_3 (\nu_{i-1}^{n+1/2,s} + \nu_i^{n+1/2,s}) + T_4 \left[(\nu^2)_{i-1}^{n+1/2,s} + (\nu^2)_i^{n+1/2,s} + \nu_{i-1}^{n+1/2,s} \nu_i^{n+1/2,s} + 3 \right] \right\} \psi_{i-1}^{n+1,s+1} \\
& + \left\{ T_1 + T_2 \nu_i^{n+1/2,s} + T_3 \left[(\nu^2)_i^{n+1/2,s} + 2 \right] + T_4 \left[4 \nu_i^{n+1/2,s} + \nu_{i-1}^{n+1/2,s} + \nu_{i+1}^{n+1/2,s} + (\nu^3)_i^{n+1/2,s} \right] \right\} \psi_i^{n+1,s+1} \\
& + \left\{ T_2 + T_3 (\nu_{i+1}^{n+1/2,s} + \nu_i^{n+1/2,s}) + T_4 \left[(\nu^2)_{i+1}^{n+1/2,s} + (\nu^2)_i^{n+1/2,s} + \nu_{i+1}^{n+1/2,s} \nu_i^{n+1/2,s} + 3 \right] \right\} \psi_{i+1}^{n+1,s+1} \\
& + [T_3 + T_4 (\nu_{i+2}^{n+1/2,s} + \nu_{i+1}^{n+1/2,s} + \nu_i^{n+1/2,s})] \psi_{i+2}^{n+1,s+1} + T_4 \psi_{i+3}^{n+1,s+1} = \\
& T_4' \psi_{i-3}^n + [T_3' + T_4' (\nu_{i-2}^{n+1/2,k} + \nu_{i-1}^{n+1/2,k} + \nu_i^{n+1/2,k})] \psi_{i-2}^n \\
& + \left\{ T_2' + T_3' (\nu_{i-1}^{n+1/2,s} + \nu_i^{n+1/2,s}) + T_4' \left[(\nu^2)_{i-1}^{n+1/2,s} + (\nu^2)_i^{n+1/2,s} + \nu_{i-1}^{n+1/2,s} \nu_i^{n+1/2,s} + 3 \right] \right\} \psi_{i-1}^n \\
& + \left\{ T_1' + T_2' \nu_i^{n+1/2,s} + T_3' \left[(\nu^2)_i^{n+1/2,s} + 2 \right] + T_4' \left[4 \nu_i^{n+1/2,s} + \nu_{i-1}^{n+1/2,s} + \nu_{i+1}^{n+1/2,s} + (\nu^3)_i^{n+1/2,s} \right] \right\} \psi_i^n \\
& + \left\{ T_2' + T_3' (\nu_{i+1}^{n+1/2,s} + \nu_i^{n+1/2,s}) + T_4' \left[(\nu^2)_{i+1}^{n+1/2,s} + (\nu^2)_i^{n+1/2,s} + \nu_{i+1}^{n+1/2,s} \nu_i^{n+1/2,s} + 3 \right] \right\} \psi_{i+1}^n \\
& + [T_3' + T_4' (\nu_{i+2}^{n+1/2,s} + \nu_{i+1}^{n+1/2,s} + \nu_i^{n+1/2,s})] \psi_{i+2}^n + T_4 \psi_{i+3}^n
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Observe que a eq. (3.39) deve respeitar o critério de convergência estabelecido na eq. (3.17).

4- RESULTADOS NUMÉRICOS.

Neste Capítulo, o formalismo será inicialmente validado para o caso linear, logo após, será analisada a influência da utilização do algoritmo iterativo em um guia não-linear de 3 camadas. Finalmente serão estudados o acoplador direcional não-linear inclinado e o acoplador não-linear com geometria tipo X.

4.1- Guia linear inclinado.

Considere, inicialmente, a estrutura da FIGURA 4.1 no limite linear ($n_2=1$, ou seja, $\alpha=0$). L_x é o tamanho da janela computacional, L_z é o comprimento da estrutura, θ é o ângulo de inclinação do guia, w é a espessura do guia, e n_1 e n_2 são os índices de refração da casca e do núcleo, respectivamente.

FIGURA 4.1 - Estrutura inclinada analisada no limite linear.

Esta análise tem a finalidade de estimar a relação entre o formato do campo incidente (solução analítica) com o formato do campo no final do guia inclinado. Quanto menor for a relação entre esses campos, maiores serão as perdas devido ao erro de aproximação. Essa relação é medida através da eficiência de acoplamento, que é definida pela integral de sobreposição dada pela eq. (4.1),

$$\eta = \left[\frac{\int \psi_0 \psi^* dx}{\int \psi_0^2 dx} \right]^2, \quad (4.1)$$

onde ψ_0 e ψ^* são os campos de entrada e seu equivalente na outra extremidade da estrutura, respectivamente. Em condições ideais o campo no final do guia inclinado tem exatamente o mesmo formato que o campo de incidência (solução analítica), logo $\eta=1$. O feixe de incidência deve conter a componente de fase de acordo com o ângulo de inclinação. Isto é feito inclinando o feixe de entrada com o mesmo ângulo θ da estrutura. Os dados relativos à estrutura da FIGURA 4.1 estão listados na TABELA 4.1 [32]:

TABELA 4.1- Dados relativos à estrutura da FIGURA 4.1

Índice da casca: $n_1 = 1,000$
Índice do núcleo: $n_2 = 1,002$
Índice de referência: $n_0 = 1,000663$
Espessura do guia: $w = 3,773 \mu\text{m}$
Discretização longitudinal: $\Delta z = 0,25 \mu\text{m}$
Comprimento de onda: $\lambda = 1,0 \mu\text{m}$

A FIGURA 4.2 mostra a eficiência de acoplamento η em função do passo de discretização Δx para um guia com inclinação $\theta = 40^\circ$ e comprimento $L_z = 100 \mu\text{m}$. Observe a superioridade do esquema GD sobre o esquema CN. Isto ocorre em virtude do

esquema GD apresentar um erro proporcional a $O(\Delta x^4)$ enquanto que no CN o erro é proporcional a $O(\Delta x^2)$. Isto garante uma maior robustez ao esquema GD. Observe ainda que o esquema Padé(1,1) GD é superado pelos esquemas Padé(2,2) e (3,3) CN a partir de $\Delta x \approx 0,14 \mu\text{m}$. Isto ocorre em virtude destes aproximantes serem de ordem superior ao esquema Padé(1,1). Pode ser notado também que na faixa de $0,5 > \Delta x > 0,14 \mu\text{m}$, o esquema Padé(1,1) GD apresenta melhores resultados que todos os outros esquemas, tornando-se a melhor alternativa de utilização nessa faixa de discretização. Outro aspecto importante a ser observado diz respeito à melhor precisão do esquema Padé(3,3) em relação aos demais, para o caso de melhor definição na malha transversal ($\Delta x \rightarrow 0$), como é de se esperar.

FIGURA 4.2- Eficiência de acoplamento em função da discretização transversal.

A FIGURA 4.3 mostra a eficiência de acoplamento em função do ângulo de inclinação para uma discretização transversal $\Delta x = 0,15 \mu\text{m}$ e $L_z = 100 \mu\text{m}$. Como pode ser observado, para essa discretização não existe diferença entre o Padé(2,2) e Padé(3,3) no esquema CN. Isto pode ser explicado através da FIGURA 4.2, que mostra a necessidade de uma discretização menor que $\Delta x = 0,15 \mu\text{m}$ para que a diferença entre estes esquemas seja perceptível. No entanto, esses esquemas superam as aproximações (1,1) e (1,0)

como esperado. Os resultados obtidos para o esquema GD, por sua vez, são os que apresentam maior estabilidade em virtude do seu menor erro de truncamento.

FIGURA 4.3 - Eficiência de acoplamento em função do ângulo de inclinação.

Apesar dos aproximantes de alta ordem serem mais precisos, os mesmos se tornam mais lentos pelo fato de suas matrizes serem menos esparsas. A FIGURA 4.4 ilustra esta característica para os três tipos de matrizes utilizadas por estes aproximantes. Nesta simulação foi utilizado um Pentium III® com uma CPU de 1GHz e 512 megabytes de memória RAM. Em cada ponto do gráfico foi resolvido um sistema linear do tipo $Ax=B$ (equivalente a um passo de propagação na direção longitudinal z), característico do algoritmo BPM, utilizando a rotina TRIDAG (exclusiva para sistemas tridiagonais) [53] e a decomposição LU do pacote IMSL® (LFTZG/LFSZG) [54]. Os aproximantes e seus respectivos tipos de sistemas matriciais estão listados na TABELA 4.2.

TABELA 4.2 - Tipos de sistemas e rotinas utilizadas em sua solução.

Esquema	Tipo de matriz		
	Tridiagonal	Pentadiagonal	Heptadiagonal
Paraxial ou Padé(1,0) CN	TRIDAG/LU	-	-
Padé(1,1) CN	TRIDAG/LU	-	-
Padé(1,1) GD	-	LU	-
Padé(2,2) CN	-	LU	-
Padé(3,3) CN	-	-	LU

FIGURA 4.4 - Tempo de processamento na resolução de um sistema linear para matrizes com 3, 5 e 7 diagonais, através da rotina TRIDAG e decomposição LU. Este tempo equivale a um passo de propagação na direção z .

É importante enfatizar a influência do tipo de rotina utilizada para resolver o sistema linear. Como pode ser observado na FIGURA 4.4, a rotina TRIDAG (utilizada na solução de sistemas tridiagonais) é bem mais eficiente do que o método que envolve decomposição LU, que foi utilizado com as demais matrizes. Isto sugere a necessidade do emprego de métodos que aproveitem melhor a esparsidade destas matrizes na resolução dos sistemas lineares. Outros métodos que poderiam também ser utilizados para este fim são: bifatoração de Zollenkopf [55] e SuperLU [56].

4.2- Influência do algoritmo iterativo.

Com a finalidade de ilustrar a eficácia do algoritmo iterativo utilizado [22]-[27], considere o guia óptico planar não-linear mostrado na FIGURA 4.5, com as seguintes características listadas na TABELA 4.3 [23]. A amplitude de campo de entrada, ψ_0 , refere-se ao modo linear TE₀.

TABELA 4.3- Parâmetros físicos e geométricos do guia não-linear da FIGURA 4.5.

Índice da casca linear: $n_1 = 1,55$
Índice do filme linear: $n_2 = 1,555$
Índice do substrato não-linear: $n_l = 1,55$
Espessura do guia: $w = 2,06 \mu\text{m}$
Constante não-linear: $n_{2s} = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{W}$
Comprimento de onda: $\lambda = 0,515 \mu\text{m}$
Comprimento do guia: $L_z = 257,5 \mu\text{m}$
Limiar de convergência: $\tau = 10^{-4}$
Domínio computacional transversal: $L_x = 35 \mu\text{m}$

FIGURA 4.5 - Guia óptico planar com filme linear, cobertura linear e substrato não-linear.

$$\alpha_i^L = c \epsilon_0 (n_1^2 \times n_{2s}) \frac{t}{l}$$

Quando um feixe óptico intenso se propaga ao longo de um meio não-linear, o perfil de índice de refração é alterado não uniformemente de tal forma que o meio pode agir como um guia de índice gradual. Dessa forma, o feixe pode induzir um canal na camada não-linear. Se a intensidade do feixe tem a mesma distribuição espacial no plano transversal que um dos modos do guia de onda que o próprio feixe criou, então o mesmo se propaga consistentemente sem alterar sua distribuição espacial. Nestas condições, a difração é compensada pelo efeito da refração não-linear, e o feixe é confinado em seu guia auto-induzido. Tais feixes auto-guiados são chamados de sólitons espaciais [1]. Vale a pena salientar que é característica física do sóliton propagar-se no meio não-linear sem alterar seu percurso [1]. Esta característica foi o principal indicador para a validação do algoritmo iterativo.

Como mencionado no Capítulo 3, tanto o esquema CN quanto o esquema GD implementados neste trabalho utilizam algoritmo iterativo. A utilização de algoritmos convencionais (não iterativos) implica em erros substanciais na obtenção do ângulo de propagação do sóliton. Este erro torna-se ainda mais grave à medida que o passo longitudinal Δz é aumentado. Este efeito pode ser visualizado nas FIGURAS 4.6 a 4.8, para $\Delta z = \lambda$, $\lambda/5$, e $\lambda/10$, respectivamente. A densidade de potência óptica é de 30 mW/mm. Note que o algoritmo convencional requer uma discretização longitudinal bastante elevada (Δz pequeno) para que o sóliton se propague sem alteração de trajetória.

FIGURA 4.6- Propagação de sóliton calculada pelo método convencional para $\Delta z = \lambda$.

FIGURA 4.7 - Propagação de sóliton calculada pelo método convencional para $\Delta z = \lambda/5$.

FIGURA 4.8- Propagação de s3l3iton calculada pelo m3todo convencional para $\Delta z = \lambda/10$.

O m3todo iterativo, por sua vez, permite que o s3l3iton se propague em um determinado 3ngulo sem altera33es como mostram as FIGURAS 4.9 e 4.10 , t3mb3m para uma pot3ncia 3ptica de 30 mW/mm. Isso ocorre porque o m3todo iterativo faz uma estimativa do campo do passo seguinte ($n+1$) e utiliza o mesmo no termo n3o-linear referente a este passo ($|\psi^{n+1}|^2$). O esquema convencional, por sua vez, sup3e que o campo no passo seguinte 3 aproximadamente o campo no passo atual ($|\psi^{n+1}|^2 \cong |\psi^n|^2$). Assim, a utiliza33o do m3todo iterativo permite maior robustez nos formalismos utilizados.

FIGURA 4.9- Propagação de sóliton calculada pelo método iterativo para $\Delta z = \lambda$.

FIGURA 4.10 - Propagação de sóliton calculada pelo método iterativo para $\Delta z = 2\lambda$.

4.3- Acoplador não-linear inclinado.

A eficiência dos métodos foi também testada para o acoplador direcional não-linear ilustrado na FIGURA 4.11. L_x é o tamanho da janela computacional, L_z é o comprimento da estrutura e θ é o ângulo de inclinação. O guia A é não-linear com índice de refração n_1 , parâmetro não-linear α e espessura w_a . O guia B é linear com índice de refração n_2 e espessura w_b . Esses guias são envolvidos por índices lineares n_3 , n_4 e n_5 . Os dados relativos à estrutura da FIGURA 4.11 estão listados na TABELA 4.4. O modo TE_0 linear do guia A é lançado neste mesmo guia não-linear com uma densidade de potência P_{ina} e propagado ao longo de uma distância L_z .

FIGURA 4.11 - Acoplador direcional não-linear inclinado.

A FIGURA 4.12 ilustra o efeito do meio não-linear no acoplamento entre os guias. A formulação paraxial CN foi utilizada neste caso para ângulo baixo de inclinação. Como pode ser observado para o caso linear ($\alpha=0 \text{ m}^2/\text{V}^2$) e ângulo de inclinação igual a zero ($\theta=0^\circ$), ocorre acoplamento de aproximadamente 50% da potência do guia A para o B na distância propagada ($L_z=150 \text{ }\mu\text{m}$). No caso linear, os

guias A e B estão em fase e 100% de transferência poderá ocorrer. No entanto, ocorre acoplamento de apenas 40% quando é considerado o efeito não-linear para um nível de potência de 5 mW/mm.

TABELA 4.4- Dados relativos ao acoplador direcional não-linear

	Índice do núcleo	Coefficiente Não-linear	Espessura do Guia	Potência de Entrada
Guia A	$N_1 = 1,55$	$\alpha = 6,377 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{V}^2$	$w_a = 3,27 \text{ }\mu\text{m}$	$P_{\text{ina}} = 5 \text{ mW/mm}$
Guia B	$N_2 = 1,55$	-	$w_b = 3,4 \text{ }\mu\text{m}$	-
Dados Gerais	Separação entre os guias: $S=0,6 \text{ }\mu\text{m}$		$n_3 = n_4 = n_5 = 1,546$	
	Comprimento de onda: $\lambda = 1,0 \text{ }\mu\text{m}$		Limiar de convergência: $\tau = 10^{-4}$	
	Discretização longitudinal: $\Delta z=0,05$		$L_z = 150 \text{ }\mu\text{m}$	

Isso ocorre devido ao aumento do índice de refração na região não-linear, gerando um descasamento de fase nos modos suportados em ambos os guias de onda, alterando dessa forma a quantidade de potência acoplada.

FIGURA 4.12 - Distribuições de campos após a propagação de 150 μm no acoplador não-linear com ângulo de inclinação $\theta=0^\circ$, demonstrando o efeito do meio linear (L) e não-linear (NL) no acoplamento de potência entre os guias.

Quando a estrutura é inclinada em um determinado ângulo θ , sob condições ideais, é esperado que o campo se propague de maneira similar ao caso com $\theta=0^\circ$. Estas condições referem-se tanto à discretização da estrutura por diferenças finitas quanto ao aproximante utilizado para descrever a equação de onda. Sob condições não ideais, parte da potência é perdida para o meio linear indicado com índice n_5 na FIGURA 4.11. Essa perda não física de potência para o meio n_5 está ilustrada na FIGURA 4.13 para um ângulo de inclinação $\theta=35^\circ$. Pode-se notar, ainda nesta figura, a diminuição das perdas nessa região com o aumento da ordem do aproximante de Padé. A quantidade de potência nessa camada é utilizada para quantificar a precisão da formulação em ângulos largos.

FIGURA 4.13 - Distribuições de campos após a propagação de 150 μm no acoplador não-linear com ângulo de inclinação $\theta=35^\circ$, demonstrando as perdas não físicas na formulação paraxial e de ângulo largo CN.

A perda (em dB) para a região n_5 é calculada da seguinte maneira:

$$P_p[\text{dB}] = -10 \log \left(\frac{P(\theta=0^\circ)|_{z=L_z/\cos(\theta)}}{P(\theta)|_{z=L_z}} \right), \quad (4.2)$$

onde $P(\theta)$ é a quantidade de potência na região com índice n_5 no final do guia para um determinado ângulo de inclinação θ . Quanto maior o ângulo θ , maior será a distância propagada pelo campo, $L_z/\cos(\theta)$. Baseado nesse fato, o aumento de L_z deve ser considerado quando for calculada a perda na propagação com $\theta=0^\circ$ de tal forma que o termo $P(\theta=0^\circ)$ e o termo de ângulo largo $P(\theta)$ sejam calculados a uma distância equivalente no eixo z . A perda de potência e o erro de potência acoplada para o guia B em função do ângulo de inclinação θ , estão ilustrados nas FIGURAS 4.14 e 4.15, respectivamente. Neste caso, utilizou-se a seguinte discretização transversal e longitudinal: $\Delta x=0,1 \mu\text{m}$ e $\Delta z=0,05 \mu\text{m}$, respectivamente. Da mesma forma, o erro de potência acoplada para o guia B é calculado baseado na propagação paraxial em distância equivalente àquela do guia inclinado ($L_z/\cos(\theta)$), resultando:

$$E_{PB} [\%] = \frac{\left| P_B(\theta) \Big|_{z=L_z} - P_B(\theta=0^\circ) \Big|_{z=\frac{L_z}{\cos(\theta)}} \right|}{P_B(\theta=0^\circ) \Big|_{z=\frac{L_z}{\cos(\theta)}}} \quad (4.3)$$

Como era esperado, a perda de potência e o erro de potência acoplada para o guia B aumentam significativamente para ângulos largos em formulações de baixa ordem, como Padé(1,0). Os resultados obtidos para o esquema GD são os que apresentam as menores perdas e erro de potência acoplada devido à sua maior precisão nesta discretização. A influência do passo de discretização transversal sobre a perda de potência bem como no erro de acoplamento de potência do guia A para o guia B é ilustrada nas FIGURAS 4.16 e 4.17, respectivamente. Em ambos os casos adotou-se ângulo de inclinação $\theta=35^\circ$, comprimento da estrutura $L_z=150 \mu\text{m}$ e o passo de discretização longitudinal $\Delta z=0,05 \mu\text{m}$. Observe, novamente, a superioridade do esquema GD sobre o CN e a superação do esquema (1,1) GD pelos esquemas (2,2) e (3,3) CN nos pontos $\Delta x=0,075 \mu\text{m}$ e $\Delta x=0,09 \mu\text{m}$ das FIGURAS 4.16 e 4.17, respectivamente. Outra característica marcante diz respeito ao melhor desempenho dos esquemas de ordens mais altas sobre a formulação (1,0) (ou paraxial). Como pode ser

observado, a formulação paraxial é extremamente inadequada para a propagação em ângulo largo, não mostrando melhora alguma com a diminuição do passo transversal Δx .

FIGURA 4.14 - Perda de potência no acoplador não-linear em função do ângulo de inclinação θ .

FIGURA 4.15 - Erro de potência acoplada para o guia B em função do ângulo de inclinação θ .

FIGURA 4.16 - Perda de potência no acoplador não-linear para uma inclinação de $\theta=35^\circ$ em função do passo de discretização transversal Δx .

FIGURA 4.17 - Erro de potência acoplada para o guia B numa inclinação de $\theta=35^\circ$ em função do passo de discretização transversal Δx .

Como foi discutido anteriormente, os aproximantes de Padé de ordens mais altas podem se tornar criticamente instáveis. Para a estrutura em questão, apenas o

aproximante de ordem (3,3) mostrou ser instável. Com a finalidade de eliminar essa instabilidade, foi necessário rotacioná-lo no plano complexo para estabilizar o método, como pode ser observado na FIGURA 4.18. Nesta figura, pode-se observar que com o aumento do ângulo de rotação, φ , no plano complexo ocorre estabilização do método e por sua vez a concordância do aproximante de ordem (3,3) com a formulação paraxial. O ângulo de rotação adequado foi escolhido para a estrutura sem inclinação ($\theta=0^\circ$) para que a formulação paraxial pudesse ser utilizada como comparação.

FIGURA 4.18 - Distribuições de campos em $z=150 \mu\text{m}$ no acoplador não-linear sem inclinação ($\theta=0^\circ$) para o aproximante Padé (3,3) rotacionado nos seguintes ângulos no plano complexo: $\varphi = 0,75^\circ$; $0,76^\circ$ e $0,8^\circ$.

No entanto, o valor do ângulo de rotação φ no plano complexo não deve ser demasiadamente alto devido a desvios na aproximação da equação de onda. Esse fato pode ser constatado nas FIGURAS 4.19 e 4.20, que mostram o erro de potência acoplada para o guia B e o erro de potência na região de campo evanescente n_5 , ambos após a propagação de $150 \mu\text{m}$ no acoplador não-linear sem inclinação ($\theta=0^\circ$). O erro de potência na região de campo evanescente n_5 é calculado considerando novamente que a formulação paraxial é uma boa aproximação para ângulos baixos:

$$E_{pn_5} [\%] = \frac{\left| P_{n_5} \Big|_{z=150 \mu m} - P_{n_5} (paraxial) \Big|_{z=150 \mu m} \right|}{P_{n_5} (paraxial) \Big|_{z=150 \mu m}} \quad (4.4)$$

Os resultados foram obtidos considerando duas condições de contorno distintas: transparente (TBC) e absorvente (TAB). Pode-se notar nestes gráficos que os aproximantes de ordens mais altas são mais sensíveis à instabilidades, principalmente quando utiliza-se a condição de contorno transparente (TBC), e menos susceptíveis ao efeito de rotação no plano complexo. Com base nesses fatos, constata-se a existência de um compromisso entre a estabilidade do método e a precisão da aproximação, ou seja, quanto maior a ordem de aproximação, maior a precisão, no entanto, maior a sensibilidade à instabilidades. A condição de contorno transparente (TBC) torna-se bastante ineficiente para aproximantes de ordens superiores a (2,2), podendo arruinar com a solução de campo, nestes casos é preferível a utilização de condições de contorno absorventes como TAB.

FIGURA 4.19 - Erro de potência acoplada para o guia B em função do ângulo de rotação no plano complexo. As condições de contorno transparente (TBC) e absorvente, foram utilizadas como parâmetro de comparação.

FIGURA 4.20 - Erro potência na região de campo evanescente n_3 em função do ângulo de rotação no plano complexo. As condições de contorno transparente (TBC) e absorvente, foram utilizadas como parâmetro de comparação.

4.4- Acoplador não-linear em forma de X.

Para exemplificar uma das aplicações do método numérico proposto, será analisada a estrutura mostrada na FIGURA 4.21. Esta estrutura é um acoplador óptico tipo “X” [14] que pode ser utilizado como chave opticamente controlada em sistemas de comunicações. Os parâmetros físicos e geométricos estão listados na TABELA 4.5. Dois guias de materiais lineares são acoplados por meio de um trecho de material dielétrico não-linear exibindo não-linearidade do tipo *Kerr*. Supondo que o sinal óptico seja lançado na estrutura pela porta 1, então sua operação básica pode ser resumida como segue. Quando a densidade de potência de entrada é pequena, a dimensão da região de acoplamento é tal que permite que a luz acople-se uma única vez (devido à natureza periódica do acoplamento), e a luz emerge pela porta 4. À medida que a densidade de potência de entrada aumenta, o acoplamento torna-se maior, e a luz acopla-se duas vezes

(transfere-se totalmente para o outro guia e acopla-se novamente ao guia de origem),
emergindo pela porta 2.

FIGURA 4.21- Geometria do acoplador tipo X com região não-linear [14] analisado.

TABELA 4.5- Parâmetros físicos e geométricos do acoplador em X da FIGURA 4.21.

Comprimento de onda		Espessura	Coeficiente não-linear
Sinal (porta 1)	Controle (porta 3)		
$\lambda_{0a}=0,6328 \mu\text{m}$	$\lambda_{0b}=0,515 \mu\text{m}$	$w=2,5312 \mu\text{m}$	$n_{2c}=10^{-9} \text{ m}^2/\text{W}$
Índice da casca	Índice do filme	Dimensões da camada não-linear	Ângulo entre os guias
$n_c=1,55$	$n_f=1,555$	$a = g = \lambda_{0a}$	$\theta=1^\circ$
Comprimento da estrutura	Discretização transversal	Discretização longitudinal	Limiar de convergência
$L_z=1000 \mu\text{m}$	$\Delta x=0,05 \mu\text{m}$	$\Delta z=0,5 \mu\text{m}$	$\tau=10^{-4}$

A simulação do acoplador é realizada para um sinal de densidade de potência P_{1s} lançado na porta 1 e um sinal de controle com densidade de potência P_{3c} lançado na

porta 3. Em ambos, o modo excitado é o TE_0 . Por simplicidade, o índice de refração e o coeficiente não-linear do material são os mesmos tanto para o comprimento de onda do sinal quanto para o de controle [14]. A FIGURA 4.22 mostra a distribuição de campo para $P_{Is}=1$ mW/mm e $P_{3c}=0$ mW/mm. As dimensões a e g foram determinadas de forma que boa parte da potência do sinal de entrada na porta 1 seja transferida para a porta 4, como mostra a FIGURA 4.22. Neste caso, a potência que penetra pela porta 1 emerge na porta 4 (estado cruzado). A FIGURA 4.23 mostra a distribuição de campo quando a potência do sinal de controle é $P_{3c}=25,6$ mW/mm. Para este nível elevado de potência o efeito não-linear é acentuado e o sinal que penetra na porta 1 emerge na porta 2 (estado direto).

FIGURA 4.22- Propagação do sinal ($P_{Is}=1$ mW/mm) para potência de controle $P_{3c}=0$ mW/mm. O efeito não-linear não é acentuado e o sinal que penetra na porta 1 emerge na porta 4.

FIGURA 4.23- Propagação do sinal ($P_{1s}=1$ mW/mm) para potência de controle $P_{3c}=25,6$ mW/mm. O efeito não-linear é acentuado e o sinal que penetra na porta 1 emerge na porta 2.

A FIGURA 4.24 mostra os coeficientes de transmissão para diferentes níveis de potência de controle, P_{3c} , calculados por Padé(1,1) (teoria encontra-se no APÊNDICE D) e comparados com os resultados obtidos por [14]. As potências dos sinais nas portas 2 (P_{2s}) e 4 (P_{4s}) são calculadas por meio da integral de sobreposição. Os coeficientes de transmissão são dados por $T_{12s}=P_{2s}/P_{1s}$ e $T_{14s}=P_{4s}/P_{1s}$. Como pode ser observado, quando P_{3c} é baixo, T_{14s} é aproximadamente 1, ou seja, o acoplador encontra-se em estado cruzado. Na medida em que P_{3c} aumenta, T_{14s} diminui e T_{12s} aumenta. Para a potência de controle de $P_{3c}=25,6$ mW/mm ocorre o chaveamento, com a maior parte da potência do sinal surgindo na porta 2, ou seja, o acoplador encontra-se em estado direto.

FIGURA 4.24- Características de transmissão do sinal em função da potência de controle, P_{3c} , para os resultados obtidos em [14] e por Padé(1,1).

5- CONCLUSÕES.

Este trabalho abordou a implementação de formalismos analíticos e numéricos para a solução de guias de ondas não-lineares. O formalismo analítico teve como objetivo principal a familiarização com a física do problema, além de ter sido utilizado posteriormente para fornecer soluções iniciais para a solução numérica. A solução numérica, por sua vez, foi baseada em diferenças finitas e discretizada em termos de aproximantes de Padé de ordem (1,0), ou paraxial, (1,1), (2,2) e (3,3). Dois esquemas foram utilizados: Crank-Nicholson (CN) e Douglas Generalizado (GD). O primeiro foi utilizado na expansão de todos os aproximantes e apresenta o erro de truncamento da ordem de $O(\Delta x^2)$, enquanto que o segundo foi expandido até o aproximante de ordem (1,1) e apresenta o erro proporcional a $O(\Delta x^4)$. Isto possibilitou a utilização de passos de discretização maiores, permitindo a diminuição da carga computacional.

O algoritmo iterativo, utilizado em ambos os esquemas, propicia economia de tempo computacional em comparação com o método convencional (não iterativo), tendo em vista que este algoritmo permite o uso de passos maiores na discretização longitudinal.

A utilização da formulação complexa foi necessária devido às instabilidades apresentadas pelos aproximantes de Padé de alta ordem com coeficientes reais, impossibilitando sua aplicação em diferenças finitas.

Os resultados numéricos obtidos foram validados para guias lineares (casos limites) e para guias não-lineares, com ótima concordância em relação aos dados disponíveis na literatura. É importante salientar que formulações de ângulo largo para guias não-lineares são encontradas na literatura apenas para elementos finitos utilizando Padé(1,1). O formalismo proposto (baseado em diferenças finitas) além de apresentar maior simplicidade em sua implementação do que métodos baseados em elementos finitos, oferece também uma melhor precisão em ângulos mais elevados, pois o método proposto é expandido em termos de aproximantes de ordens superiores à Padé(1,1).

Finalmente, deixamos como proposta para trabalhos futuros a extensão do formalismo aqui desenvolvido para a análise de estruturas apresentando propagação no sentido direto (+z) e reverso (-z), simultaneamente. Este tipo de estrutura normalmente utiliza redes de difração de Bragg, que nada mais são do que perturbações periódicas na constante dielétrica do material ao longo de seu eixo longitudinal. Este tipo de propagação bidirecional sugere também o estudo de estruturas cujos ângulos de curvatura são maiores que 90° .

Devido à dependência do tempo de processamento com a ordem do aproximante e principalmente com o tamanho da matriz envolvida, métodos otimizados (como: bifatoração de Zollenkopf e SuperLU) que aproveitem melhor a esparsidade destas matrizes podem ser utilizados com a finalidade de reduzir o tempo de processamento. Como uma última sugestão, propomos a expansão dos aproximantes de ordem superior a (2,2) através do esquema Douglas Generalizado (GD). Este esquema provou ser de enorme utilidade em virtude de sua menor dependência do passo de discretização se comparado ao esquema Crank-Nicholson.

6- REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.

- [1] SALEH, B. E. A.; TEICH, M. C. (1991). *Fundamentals of Photonics*. New York, John Wiley & Sons.
- [2] HUNSPERGER, R. G. (1985). *Integrated optics: Theory and Technology*. 2.ed. Berlin, Springer-Verlag.
- [3] SEGEMAN, G. I.; SEATON, C. T. (1985). Nonlinear Integrated Optics. *J. Appl. Phys.*, v.58 , n.12, p.R57-78, Dec.
- [4] YASUMOTO, K.; MAEDA, H.; MAEKAWA, N. (1996). Coupled-Mode Analysis of an Asymmetric Nonlinear Directional Coupler. *J. Lightwave Technol.*, v.14, n.4, p. 628-33, Apr.
- [5] DI PASQUALE, F.; HERNÁNDEZ-FIGUEROA, H. E. (1994). Improved All-Optical Switching in a Three-Slab Nonlinear Directional Coupler with Gain. *IEEE J. Quantum Electron.*, v.30, n.5, p.1254-58, May.
- [6] LIU, H.-Y.; WANG, W.-S. (1995). Beam Propagation Analysis of the Nonlinear Tapered Optical Waveguide. *IEEE Microwave and Guided Wave Lett.*, v.5, n.2, p.42-44, Feb.
- [7] MAN, W. S.; DEMOKAN M. S.; TAM, H. (1996). All-Optical Routing Switch Using a Fiber Nonlinear Directional Coupler and Controlling Solitons. *J. Lightwave Technol.*, v.14, n.12, p.2793-98, Dec.
- [8] LANGBEIN, U.; LEDERER, F.; PONATH, H. -E. (1983). A New Type of Nonlinear Slab-Guided Waves. *Opt. Commun.*, v.46, n.3-4, p.167-9, July.

- [9] CHROSTOWSKI, J.; CHELKOWSKY, S. (1987). Analysis of an Optical Rib Waveguide with a Nonlinear Substrate. *Opt. Lett.*, v.12, n.7, p.528-30, July.
- [10] COTTER, D. et al. (1999). Nonlinear optics for high-speed digital information processing. *Science*, v.286, n.5444, p.1523-8, Nov.
- [11] KIM, C. K.; JEONG, J. M.; CHANG, H. S. (1998). All-Optical Logic Functions in a Bent Nonlinear Y-Junction Waveguide. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1*, v.37, n.3a, p.832-6, Mar.
- [12] NIYAMA, A.; KOSHIBA, M. (1998). Three-Dimensional Beam Propagation Analysis of Nonlinear Optical Fibers and Optical Logic Gates. *J. Lightwave Technol.*, v.16, n.1, p. 162-8, Jan.
- [13] MURATA, H.; IZUTSU, M.; SUETA, T. (1998). Optical Bistability and All-Optical Switching in Novel Waveguide Junctions with Localized Optical Nonlinearity. *IEEE J. Lightwave Technol.*, v.16, n.5, p.833-40, May.
- [14] YOKOTA, H.; KIMURA, K.; KURAZONO, S. (1995). Numerical Analysis of an Optical X Coupler with a Nonlinear Dielectric Region. *IEICE Trans. Electron.*, v.E78-C, n.1, p.61-6, Jan.
- [15] HERNÁNDEZ-FIGUEROA, H. E. (1994). Controlled Spatial Bright Soliton Emission from a Nonlinear Waveguide. *Optics Lett.*, v.19, n.5, p.326-8, Mar.
- [16] PRAMONO, Y. et al. (1999). Self-Switching in Crossing Waveguides with Three Channels Consisting of Nonlinear Material. *IEICE Trans. Electron.*, v. E82-C, n.1, p.61-6, Jan.
- [17] MURATA, H.; IZUTSU, M.; SUETA, T. (1999). All-Optical Switching in Novel Waveguide X Junctions with Localized Nonlinearity. *IEICE Trans. Commun.*, vol. E82-B, no. 2, p.373-8, Jan.

- [18] AITCHISON, J. S.; VILLENEUVE, A.; STEGEMAN, I. (1993). All-Optical Switching in a Nonlinear GaAlAs X Junction. *Optics Lett.* v.18, n.14, p.1153-55, July.
- [19] YASUI, T. et al. (1999). Finite Element Beam Propagation Method for Nonlinear Optical Waveguides. *Electron. and Commun. in Japan, Part 2*, v.82, n.4, p.47-53, July.
- [20] HERNÁNDEZ-FIGUEROA, H. E. (1994). Nonlinear Nonparaxial Beam Propagation Method. *Electronics Lett.*, v.30, n.4, p.352-3, Feb.
- [21] YASUI, T.; KOSHIBA, M.; TSUJI, Y. (1999). A Wide-Angle Finite Element Beam Propagation Method with Perfectly Matched Layers for Nonlinear Optical Waveguides. *IEEE J. Lightwave Technol.*, v.17, n.10, p.1909-15, Oct.
- [22] HERNÁNDEZ-FIGUEROA, H. E. (1991). A New Finite Element Scheme for Optical Temporal Soliton Analysis. *International Conference on Computation in Electromagnetics*, p.167-9, Nov.
- [23] YOKOTA, H.; HIRA, M.; KURAZONO, S. (1995). Iterative Finite Difference Beam Propagation Method Analysis of Nonlinear Optical Waveguides Excitation Problem. *Electron. and Commun. in Japan, Part 2*, v.78, n.1, p.73-80, Oct.
- [24] HADLEY, G. R. (1992). Wide-Angle Beam Propagating using Padé Approximants Operators. *Opt. Lett.*, v.17, n.20, p.1426-8, Oct.
- [25] HERNÁNDEZ-FIGUEROA, H. E. (1994). Simple Nonparaxial Beam Propagation Method for Integrated Optics. *IEEE J. Lightwave Technol.*, v.12, n.4, p.644-9, Apr.

- [26] TSUJI, Y.; KOSHIBA, M.; TANABE, T. (1997). A Wide-Angle Beam Propagation Method Using a Finite Element Scheme. *Electron. and Commun. in Japan, Part 2*, v.80, n.1, p.18-26, Oct.
- [27] CHOU, H. -F.; LIN, C. -F.; WANG, G. -C. (1998). An Iterative Finite Difference Beam Propagation Method for Modeling Second-Order Nonlinear Effects in Optical Waveguides. *IEEE J. Lightwave Technol.*, v.16, n.9, p.1686-93, Sept.
- [28] CHOU, H. -F.; LIN, C. -F.; MOU, S. (1999). Comparisons of Finite Difference Beam Propagation Methods for Modeling Second-Order Nonlinear Effects. *IEEE J. Lightwave Technol.*, v.17, n.8, p.1481-6, Aug.
- [29] SCARMOZZINO, R.; OSGOOD, R. M. (1996). Investigation of Padé Approximant-Based Wide-Angle Beam Propagation Method for Accurate Modeling of Waveguiding Circuits. *IEEE J. Lightwave Technol.*, v.14, n.12, p.2813-22, Dec.
- [30] ANADA, T. et al. (1999). Very-Wide-Angle Beam Propagation Methods for Integrated Optical Circuits. *IEICE Trans. Electron.*, v.E82-C, n.7, p.1154-8, July.
- [31] YEVIK, D.; GLASNER, M. (1990). Forward Wide-Angle Light Propagation in Semiconductor Rib Waveguides. *Opt. Lett.*, v.15, n.3, p.173-6, Feb.
- [32] YAMAUCHI, J.; SHIBAYAMA, J.; NAKANO, H. (1995). Wide-Angle Propagating Beam Analysis Based on the Generalized Douglas Scheme for Variable Coefficients. *Opt. Lett.*, v.20, n.1, p.7-9, Jan.
- [33] YAMAUCHI, J.; SHIBAYAMA, J.; NAKANO, H. (1995). Modified Finite-Difference Beam Propagation Method Based on the Generalized Douglas Scheme for Variable Coefficients", *IEEE Photon. Technol. Lett.*, v.7, n.6, p.661-3, June.

- [34] YAMAUCHI, J. et al. (1996). Improved Finite-Difference Beam Propagation Method Based on the Generalized Douglas Scheme and Its Application to Semivectorial Analysis. *IEEE J. Lightwave Technol.*, v.14, n.10, p.2401-6, Oct.
- [35] MILINAZZO, F. A.; ZALA, C. A.; BROOKE, G. H. (1997). Rational Square-root Approximations for Parabolic Equation Algorithms. *J. Acoust. Soc. Amer.*, v. 101, n.2, p.760-6, Feb.
- [36] EL-REFAEI, H.; BETTY, I.; YEVICK, D. (2000). The Application of Complex Padé Approximants to Reflection at Optical Waveguide Facets. *IEEE Photon. Technol. Lett.*, v.7, n.6, p. 661-3, Feb.
- [37] YEVICK, D. (2000). The Application of Complex Padé Approximants to Vector Field Propagation. *IEEE Photon. Technol. Lett.*, v.12, n.12, p. 1636-8, Dec.
- [38] RAO, H. et al. (2000). Complex Propagators for Evanescent Waves in Bidirectional Beam Propagation Method. *IEEE J. Lightwave Technol.*, v.18, n.8, p.1155-60, Aug.
- [39] EL-REFAEI, H.; BETTY, I.; YEVICK, D. (2000). Stable and Noniterative Bidirectional Beam Propagation Method. *IEEE Photon. Technol. Lett.*, v.12, n.4, p.389-91, Apr.
- [40] LU, Y. Y. (1998). A Complex Coefficient Rational approximation of $\sqrt{1+x}$. *Appl. Numer. Math.*, v.27, p.141-54, June.
- [41] HADLEY, G. R. (1991). Transparent Boundary Condition for Beam Propagation. *Opt. Lett.*, v.16, n.9, p.624-26, May.

- [42] ANADA, T. et al. (1997). Numerical Analysis of Long Range Acoustic Propagation Based on Wide Angle Parabolic Wave Equation. *Jnp. J. Appl. Phys., Part 1*, v.36, n.5B, May. *Jnp. J. Appl. Phys., Part 1*, v.36, n.5B, p. 3336-9, May.
- [43] TSUCHIYA, T. et al. (1999). Numerical Analysis of Acoustical Propagation in Ocean with Warm and Cold Water Mass Used by The Three-Dimensional Wide-Angle Parabolic Equation Method. *Jnp. J. Appl. Phys., Part 1*, v.38, n.5B, p.3351-5, May.
- [44] HADA, M. et al. (1999). Wide-Angle Parabolic Equation Solution of Ocean Acoustic Propagation with Lossy Penetrable Bottom. *Jnp. J. Appl. Phys., Part 1*, v.38, n.5B, p.3361-5, May.
- [45] HADLEY, G. R. (1992). Transparent Boudary Condition for Beam Propagation. *IEEE J. Quantum Electron.*, v.28, n.1, p.363-70, Jan.
- [46] PENG, J.; BALANIS, C. A. (1997). Transparent absorbing boundary (TAB) for the truncation of the computational domain. *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, v.7, n.10, p.347-49, Oct.
- [47] PENG, J.; BALANIS, C. A. (1998). A Generalized Reflection-Free Domain-Truncation Method: Transparent Absorbing Boundary. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, v.46, n.7, p.1015-22, July.
- [48] AGRAWAL, G. P. (1995). *Nonlinear Fiber Optics*. 2.ed. London, Academic Press.
- [49] SEATON, C. T. et al. (1985). Calculations of Nonlinear TE Waves Guided by Thin Dielectric Films Bounded by Nonlinear Media. *IEEE J. Quantum Electron.*, v.QE-21, n.7, p.774-83, July.

- [50] JEONG, J. -S. et al. (1995). Optical Properties of TE Nonlinear Waves in Planar Waveguides with Two Nonlinear Bounding Layers. *Opt. Commun.*, v.116, n.4-6, p.351-7, May.
- [51] MA, J. -G.; WOLFF, I. (1995). Propagation Characteristics of TE-Waves Guided by Thin Films Bounded by Nonlinear Media. *IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques*. v.43, n.4, p.790-4, Apr.
- [52] SMITH, G. D. (1984). Numerical Solution of Partial Differential Equations. 3.ed. *Claredon Press – Oxford*.
- [53] PRESS, W. H. et al. (1994). *Numerical Recipes in Fortran*. 2.ed. Nova York, Cambrigde University Press.
- [54] Inc. Visual Numerics (1995). *IMSL[®] Numerical Library*. www.vni.com/products/imsi (Jan. 2001).
- [55] ZOLLENKOPF, K. (1971). Bi-Factorisation - Basic Computational Algorithm and Programming Techniques. In: *Large sparse sets of linear equations*, New York, J.K. Reid. Academic Press.
- [56] DEMMEL, J. W. et al. (1999). A Supernodal Approach to Sparse Partial Pivoting. *SIAM Journal of Matrix Analysis and Applications*, v.20, p.720-55, July.

APÊNDICE A- DESENVOLVIMENTO ANALÍTICO PARA GUIAS NÃO-LINEARES.

Considere o guia óptico planar não-linear mostrado na FIGURA A.1, o qual possui cobertura linear, filme linear e substrato não-linear. A propagação é suposta ao longo de z e o guia não apresenta variação na direção y ($\partial/\partial y=0$).

FIGURA A.1- Guia óptico planar não-linear de 3 camadas

Suponha que o campo elétrico apresenta a seguinte dependência: $E_y = 1/2 E_y \exp[j(\omega t - k_0 n_{eff} z)] + c.c.$, onde ω é a frequência angular, $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ é o número de onda, λ_0 é o comprimento de onda e n_{eff} é o índice efetivo do guia (solução). As equações de onda para o modo TE nas regiões 1, 2 e 3 tornam-se, respectivamente [49]-[51]:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k_0^2 (n_1^2 - n_{eff}^2) E_y = 0, \quad (A.1)$$

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k_0^2 (n_2^2 - n_{eff}^2) E_y = 0, \quad (A.2)$$

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k_0^2 (n_3^2 - n_{eff}^2 + \alpha |E_y|^2) E_y = 0, \quad (A.3)$$

onde $\alpha = n_3^2 n_{2s} c \varepsilon_0$ é uma constante relacionada à não-linearidade, n_3 é o índice de refração na região 3, n_{2s} é o coeficiente não-linear, c é a velocidade da luz no vácuo e ε_0 é a permissividade no vácuo. As soluções analíticas dessas equações são do tipo:

Para a região 1 ($x < d_1$):

$$E_y^{região1} = A_1 e^{k_1(x-d_1)} + B_1 e^{-k_1(x-d_1)},$$

onde $k_1 = \sqrt{k_0^2 n_1^2 - \beta^2}$. Considerando $\beta = k_0 n_{eff}$.

O campo nessa região deve ser evanescente, então B_1 deve ser zero e, conseqüentemente, tem-se:

$$E_y^{região1} = A_1 e^{k_1(x-d_1)} \quad (A.4)$$

Para a região 2 ($d_1 \leq x < d_2$):

$$E_y^{região2} = A_2 e^{jk_2(x-d_1)} + B_2 e^{-jk_2(x-d_1)}.$$

O campo deve ser oscilatório. Logo,

$$E_y^{região2} = A'_2 \cos[k_2(x-d_1)] + B'_2 \sin[k_2(x-d_1)], \quad (A.5)$$

onde $k_2 = \sqrt{\beta^2 - k_0^2 n_2^2}$.

Para a região 3 ($x > d_2$) a equação de onda é não-linear. Sabendo que o campo é uma função real, (A.3) reduz-se a:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + (k_0^2 n_3^2 - \beta^2) E_y + k_0^2 \alpha E_y^2 E_y = 0. \quad (A.6)$$

Integrando (A.6) em E_y , obtém-se:

$$\int \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} dE_y + \left(k_0^2 n_3^2 - \beta^2 \right) \frac{E_y^2}{2} + k_0^2 \alpha \frac{E_y^4}{4} = C_1. \quad (\text{A.7})$$

onde C_1 é uma constante de integração.

O primeiro termo de (A.7) pode ser desenvolvido com a ajuda da seguinte mudança de variáveis:

$$g = \frac{\partial E_y}{\partial x} \text{ e } g' = \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2},$$

Assim,

$$\int g g' dx \equiv \int \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} dE_y. \quad (\text{A.8})$$

Integrando (A.8) por partes, obtém-se

$$\int g g' dx = \frac{1}{2} g^2. \quad (\text{A.9})$$

Substituindo (A.9) em (A.8):

$$\int \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} dE_y = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} \right)^2 + C_2, \quad (\text{A.10})$$

onde C_2 é uma constante de integração. Substituindo (A.10) em (A.7), resulta:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} \right)^2 + \left(k_0^2 n_3^2 - \beta^2 \right) \frac{E_y^2}{2} + k_0^2 \alpha \frac{E_y^4}{4} = C. \quad (\text{A.11})$$

Por conveniência, o valor da constante de integração é definido como zero ($C=0$). Colocando em evidência o termo derivativo em (A.11), resulta:

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = \sqrt{(\beta^2 - k_0^2 n_3^2) E_y^2 - k_0^2 \alpha \frac{E_y^4}{2}}. \quad (\text{A.12})$$

Uma vez que a região não-linear está localizada na camada de campo evanescente, a constante de propagação deve ser positiva ($k_3^2 = \beta^2 - k_0^2 n_3^2 > 0$), logo:

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = \sqrt{k_3^2 E_y^2 - \gamma E_y^4}, \quad (\text{A.13})$$

onde $\gamma = \frac{k_0^2 \alpha}{2}$. Integrando (A.13) em E_y , resulta a seguinte expressão:

$$\int \frac{1}{\sqrt{k_3^2 E_y^2 - \gamma E_y^4}} dE_y = \int dx. \quad (\text{A.14})$$

A eq. (A.14) possui duas soluções, uma para $\alpha > 0$ (meio focalizante) e outra para $\alpha < 0$ (meio desfocalizante). Para $\alpha > 0$, (A.14) tem solução da forma:

$$\frac{1}{2k} \ln \left(\frac{k_3 - \sqrt{k_3^2 - \gamma E_y^2}}{k_3 + \sqrt{k_3^2 - \gamma E_y^2}} \right) + C_3 = x + C_4. \quad (\text{A.15})$$

A eq. (A.15) pode ser reduzida para:

$$\frac{1}{2k} \ln \left(\frac{k_3 - \sqrt{k_3^2 - \gamma E_y^2}}{k_3 + \sqrt{k_3^2 - \gamma E_y^2}} \right) = x - x_0, \quad (\text{A.16})$$

onde x_0 é uma constante de integração. Resolvendo (A.16) para o campo elétrico, E_y , resulta:

$$E_y = \frac{k_3}{\sqrt{\gamma}} \frac{2e^{(x-x_0)k_3}}{1+e^{2(x-x_0)k_3}}. \quad (\text{A.17})$$

Multiplicando o numerador e o denominador de (A.17) por $e^{-(x-x_0)k_3}$:

$$E_y = \frac{k_3}{\sqrt{\gamma}} \frac{2}{e^{(x-x_0)k_3} + e^{-(x-x_0)k_3}}. \quad (\text{A.18})$$

Como $\cosh = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$, (A.18) torna-se:

$$E_y = \frac{k_3}{\sqrt{\gamma}} \frac{1}{\cosh[(x-x_0)k_3]}. \quad (\text{A.19})$$

Substituindo a variável γ em (A.19), tem-se:

$$E_y^{\text{região 3}} \Big|_{\alpha > 0} = \frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{1}{\cosh[(x-x_0)k_3]}. \quad (\text{A.20})$$

Para $\alpha < 0$, (A.14) tem solução da forma:

$$\frac{1}{2k_3} \ln \left(\frac{k_3 + \sqrt{k_3^2 - \gamma E_y^2}}{k_3 - \sqrt{k_3^2 - \gamma E_y^2}} \right) = x - x_0, \quad (\text{A.21})$$

onde $\gamma_1 = \frac{k_0^2 |\alpha|}{2}$. Resolvendo (A.21) para o campo elétrico, E_y , resulta:

$$E_y = \frac{k_3}{\sqrt{\gamma}} \frac{2e^{(x-x_0)k_3}}{e^{2(x-x_0)k_3} - 1}. \quad (\text{A.22})$$

Multiplicando o numerador e o denominador de (A.22) por $e^{-(x-x_0)k_3}$:

$$E_y = \frac{k_3}{\sqrt{\gamma}} \frac{2}{e^{(x-x_0)k_3} + e^{-(x-x_0)k_3}}. \quad (\text{A.23})$$

Como $\sinh = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$, (A.23) torna-se:

$$E_y = \frac{k_3}{\sqrt{\gamma_1}} \frac{1}{\sinh[(x-x_0)k_3]}, \quad (\text{A.24})$$

Substituindo a variável γ_1 em (A.24) e adaptando a mesma ao problema, resulta:

$$E_y^{\text{região3}} \Big|_{\alpha < 0} = \frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{|\alpha|}} \frac{1}{\sinh[(x-x_0)k_3]}, \quad (\text{A.25})$$

onde $k_3 = \sqrt{k_0^2 n_3^2 - \beta^2}$.

As equações (A.20) e (A.25) constituem as soluções possíveis para o campo elétrico em meio não-linear focalizante ($\alpha > 0$) e desfocalizante ($\alpha < 0$), respectivamente. Então, para se obter a expressão para o campo elétrico, resta apenas determinar as constantes A_1 , A'_2 e B'_2 através do *casamento* das condições de contorno nas fronteiras em $x = d_1$ e $x = d_2$.

Condições de Contorno:

Considerando-se, inicialmente, o meio focalizante ($\alpha > 0$), temos as seguintes relações:

Em $x = d_1$:

Para $E_{y1}=E_{y2}$, tem-se que:

$$A_1 = A'_2, \quad (\text{A.26})$$

Para $\frac{\partial E_{y1}}{\partial x} = \frac{\partial E_{y2}}{\partial x}$, tem-se que:

$$B'_2 = \frac{k_1}{k_2} A_1, \quad (\text{A.27})$$

Em $x = d_2$:

Para $E_{y2}=E_{y3}$, tem-se que:

$$\cos(k_2 w) A'_2 + \sin(k_2 w) B'_2 = \frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{1}{\cosh[(w-x_0)k_3]}, \quad (\text{A.28})$$

onde $w = d_2 - d_1$.

Para $\frac{\partial E_{y1}}{\partial x} = \frac{\partial E_{y2}}{\partial x}$, tem-se que:

$$-k_2 A'_2 \sin(k_2 w) + k_2 B'_2 \cos(k_2 w) = -\frac{k_3^2}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{\sinh[(w-x_0)k_3]}{\cosh^2[(w-x_0)k_3]}, \quad (\text{A.29})$$

Substituindo (A.26) e (A.27) em (A.28), obtém-se:

$$A_1 = \frac{\frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{1}{\cosh[(w-x_0)k_3]}}{\cos(k_2 w) + \sin(k_2 w) \frac{k_1}{k_2}}, \quad (\text{A.30})$$

Com o auxílio de (A.30) é possível obter as constantes de integração restantes substituindo-a em (A.26) e (A.27). Da mesma forma, substituindo (A.26) e (A.27) em (A.29), resulta

$$A_1 = \frac{-\frac{k_3^2}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \operatorname{tgh}[(w-x_0)k_3]}{\cos(k_2 w)k_1 - \operatorname{sen}(k_2 w)k_2}, \quad (\text{A.31})$$

Igualando as equações (A.30) e (A.31), tem-se:

$$k_2 w = \operatorname{arctg}\left(\frac{k'_3}{k_2}\right) + \operatorname{arctg}\left(\frac{k_1}{k_2}\right) + m\pi, \quad (\text{A.32})$$

onde m é um número inteiro ($m=0,1,2,3,\dots$) e $k'_3 = k_3 \operatorname{tgh}[(w-x_0)k_3]$.

A equação para meios desfocalizantes ($\alpha < 0$) é obtida de maneira análoga. A expressão resultante é similar à eq. (A.32) exceto que: $k'_3 = k_3 \operatorname{cotgh}[(w-x_0)k_3]$ [3]. A eq. (A.32) é conhecida como relação de dispersão para meios não-lineares [3]. Substituindo as constantes obtidas através das condições de contorno nas equações de campo (A.4) e (A.5), obtém-se:

$$E_y = \begin{cases} \frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{1}{\cosh[(x-x_0)k_3]}, & x \geq d_2 \\ \frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{1}{\cosh[(w-x_0)k_3]} \frac{\left(\cos[k_2(x-d_1)] + \frac{k_1}{k_2} \operatorname{sen}[k_2(x-d_1)] \right)}{\left(\cos(k_2 w) + \frac{k_1}{k_2} \operatorname{sen}(k_2 w) \right)}, & d_1 \leq x < d_2 \\ \frac{k_3}{k_0} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{1}{\cosh[(w-x_0)k_3]} \frac{e^{k_1(x-d_1)}}{\left(\cos(k_2 w) + \frac{k_1}{k_2} \operatorname{sen}(k_2 w) \right)}, & x < d_1 \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

APÊNDICE B– OPERADORES DIFERENCIAIS UTILIZADOS NAS DISCRETIZAÇÕES.

1) Operador P de primeira ordem.

Partindo da definição do operador P, temos em diferenças finitas:

$$P\psi|_i = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2} + k_0^2(n_i^2 - n_0^2 + \alpha_i|\psi_i|^2)\psi_i,$$

onde

$$P = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2(n^2 - n_0^2 + \alpha|\psi|^2).$$

Agrupando os termos, tem-se:

$$P\psi_i = \frac{1}{\Delta x^2}(\psi_i v_i + \psi_{i+1} + \psi_{i-1}), \quad (\text{B.1})$$

onde

$$v_i = k_0^2(n_i^2 - n_0^2 + \alpha_i|\psi_i|^2) - 2.$$

2) Operador P de segunda ordem.

$$P^2\psi|_i = P(P\psi)|_i = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2(n_i^2 - n_0^2 + \alpha_i|\psi_i|^2) \right) \left(\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2} + k_0^2(n_i^2 - n_0^2 + \alpha_i|\psi_i|^2)\psi_i \right).$$

Por conveniência, a equação acima pode ser rescrita da seguinte forma:

$$P^2\psi_i = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \theta_i \right) \left(\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2} + \theta_i \psi_i \right).$$

Em diferenças finitas, tem-se:

$$\begin{aligned} P^2\psi_i = & \frac{1}{\Delta x^2} \left(\frac{\psi_{i+2} - 2\psi_{i+1} + \psi_i}{\Delta x^2} - 2 \left(\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2} \right) + \frac{\psi_i - 2\psi_{i-1} + \psi_{i-2}}{\Delta x^2} \right) \\ & + \frac{\theta_i \psi_{i+1} - 2\theta_i \psi_i + \theta_i \psi_{i-1}}{\Delta x^2} + \frac{\theta_{i+1} \psi_{i+1} - 2\theta_i \psi_i + \theta_{i-1} \psi_{i-1}}{\Delta x^2} + \theta_i^2 \psi_i. \end{aligned}$$

Agrupando os termos semelhantes, obtém-se:

$$P^2\psi_i = \frac{1}{\Delta x^4} \left[\psi_{i+2} + (\nu_{i+1} + \nu_i) \psi_{i+1} + (\nu_i^2 + 2) \psi_i + (\nu_{i-1} + \nu_i) \psi_{i-1} + \psi_{i-2} \right], \quad (\text{B.2})$$

onde

$$\nu_i = \Delta x^2 \theta_i - 2$$

3) Operador P de terceira ordem.

$$P^3\psi_i = P(P^2\psi)_i = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \theta_i \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \theta_i \right) \left(\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2} + \theta_i \psi_i \right).$$

Substituindo (B.2) no termo de segunda ordem em P da equação acima, encontra-se:

$$P^3\psi_i = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \theta_i \right) \left[\frac{1}{\Delta x^4} (\psi_{i+2} + (\nu_{i+1} + \nu_i) \psi_{i+1} + (\nu_i^2 + 2) \psi_i + (\nu_{i-1} + \nu_i) \psi_{i-1} + \psi_{i-2}) \right].$$

Aplicando diferenças finitas nos termos restantes, temos:

$$\begin{aligned}
P^3 \psi_i = & \frac{1}{\Delta x^2} \left[\frac{1}{\Delta x^4} (\psi_{i+3} + (\nu_{i+2} + \nu_{i+1}) \psi_{i+2} + (\nu_{i+1}^2 + 2) \psi_{i+1} + (\nu_i + \nu_{i+1}) \psi_i + \psi_{i-1}) \right. \\
& - \frac{2}{\Delta x^4} (\psi_{i+2} + (\nu_{i+1} + \nu_i) \psi_{i+1} + (\nu_i^2 + 2) \psi_i + (\nu_{i-1} + \nu_i) \psi_{i-1} + \psi_{i-2}) \\
& \left. + \frac{1}{\Delta x^4} (\psi_{i+1} + (\nu_i + \nu_{i-1}) \psi_i + (\nu_{i-1}^2 + 2) \psi_{i-1} + (\nu_{i-2} + \nu_{i-1}) \psi_{i-2} + \psi_{i-3}) \right] \\
& + \frac{\theta_i}{\Delta x^4} (\psi_{i+2} + (\nu_{i+1} + \nu_i) \psi_{i+1} + (\nu_i^2 + 2) \psi_i + (\nu_{i-1} + \nu_i) \psi_{i-1} + \psi_{i-2})
\end{aligned}$$

Agrupando os termos semelhantes e considerando que $\theta_i = (\nu_i + 2)/\Delta x^2$, obtém-se:

$$P^3 \psi_i = \frac{1}{\Delta x^6} \left[\begin{aligned} & \psi_{i+3} + \psi_{i+2} (\nu_{i+2} + \nu_{i+1} + \nu_i) + \psi_{i+1} (\nu_{i+1}^2 + \nu_i^2 + \nu_{i+1} \nu_i + 3) \\ & + \psi_i (4\nu_i + \nu_{i-1} + \nu_{i+1} + \nu_i^3) \\ & + \psi_{i-1} (\nu_{i-1}^2 + \nu_i^2 + \nu_{i-1} \nu_i + 3) + \psi_{i-2} (\nu_{i-2} + \nu_{i-1} + \nu_i) + \psi_{i-3} \end{aligned} \right]. \quad (B.3)$$

APÊNDICE C- FLUXOGRAMA DO ALGORITMO ITERATIVO.

A FIGURA C.1 apresenta o fluxograma que descreve a seqüência do cálculo do campo elétrico Ψ através do método iterativo.

FIGURA B.1- Fluxograma do algoritmo iterativo utilizado.

Neste algoritmo, z representa a posição longitudinal de propagação, Δz é o passo de discretização na direção z e L_z é o comprimento longitudinal do guia em questão. O termo $\Psi^n = \Psi(n\Delta z)$ é identificado como a notação simplificada para diferenças finitas. O sobrescrito s representa o número da iteração e τ é o limiar de convergência.

APÊNDICE D— EQUAÇÕES RELATIVAS AO ACOPLADOR ÓPTICO DO TIPO X.

Supondo duas ondas com frequências angulares ω_a e ω_b , e adotando a forma periódica no tempo para o campo elétrico:

$$E_y(x, z, t) = \frac{1}{2} [E_a(x, z) \exp(j\omega_a t) + E_b(x, z) \exp(j\omega_b t)] + c.c.,$$

resulta nas seguintes equações de onda acopladas para o modo TE em um guia planar para meios não-lineares do tipo *Kerr*, [14]:

$$\frac{\partial^2 E_a}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 E_a}{\partial x^2} + k_{0a}^2 [n_a^2(x, z) + \alpha_a(x, z)|E_a|^2 + 2\alpha_b(x, z)|E_b|^2] E_a = 0 \quad (D.1)$$

e

$$\frac{\partial^2 E_b}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 E_b}{\partial x^2} + k_{0b}^2 [n_b^2(x, z) + \alpha_b(x, z)|E_b|^2 + 2\alpha_a(x, z)|E_a|^2] E_b = 0, \quad (D.2)$$

onde

$$\alpha_a(x, z) = c\epsilon_0 n_a^2(x, z) n_{2ca}(x, z),$$

$$\alpha_b(x, z) = c\epsilon_0 n_b^2(x, z) n_{2cb}(x, z),$$

$n_{a,b}(x, z)$ é o perfil de índice de refração e $n_{2ca,b}(x, z)$ é a distribuição do coeficiente de não-linearidade. $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ é o número de onda, λ_0 o comprimento de onda, c a velocidade da luz e ϵ_0 a permissividade, todos relativos ao vácuo. Os índices a e b subscritos referem-se às duas ondas consideradas. Cujos comprimentos de onda são λ_a e λ_b , respectivamente.

As soluções de (D.1) e (D.2) são do tipo:

$$E_a(x, z) = \psi(x, z) e^{-jk_{0a} n_{0a} z} \quad (D.3)$$

e

$$E_b(x, z) = \Phi(x, z) e^{-jk_{0b} n_{0b} z}. \quad (D.4)$$

Substituindo (D.3) e (D.4) em (D.1) e (D.2), respectivamente, resulta em:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - 2jk_a \frac{\partial \psi}{\partial z} + P_a \psi = 0 \quad (\text{D.5})$$

e

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - 2jk_b \frac{\partial \Phi}{\partial z} + P_b \Phi = 0, \quad (\text{D.6})$$

onde $k_a = k_{0a}n_{0a}$ e $k_b = k_{0b}n_{0b}$. n_{0a} e n_{0b} são constantes que representam os índices de refração de referência. P_a e P_b são os operadores diferenciais transversais dados por:

$$P_a = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_{0a}^2 (n_a^2 - n_{0a}^2 + \alpha_a |\psi|^2 + 2\alpha_b |\Phi|^2) \quad (\text{D.7})$$

e

$$P_b = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_{0b}^2 (n_b^2 - n_{0b}^2 + \alpha_b |\Phi|^2 + 2\alpha_a |\psi|^2). \quad (\text{D.8})$$

Considerando apenas um sentido de propagação, (D.5) e (D.6) podem ser rescritas na forma unidirecional dadas por [14], [29] e [31]:

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = -j(\sqrt{P_a + k_a^2} - k_a)\psi \quad (\text{D.9})$$

e

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z} = -j(\sqrt{P_b + k_b^2} - k_b)\Phi. \quad (\text{D.10})$$

Os termos envolvendo a raiz quadrada de (D.9) e (D.10) podem ser expressos da seguinte forma [24]:

$$\sqrt{P+k^2} - k \approx \frac{N_m(P)}{D_n(P)}, \quad (\text{D.11})$$

onde $N_m(P)$ e $D_n(P)$ são polinômios em P de ordens m e n para o numerador e o denominador, respectivamente. O aproximante de ordem (1,1) utilizado, é dado por:

$$\frac{N_m(P)}{D_n(P)} = \frac{\frac{P}{2k}}{1 + \frac{P}{4k^2}}.$$

Diferenças finitas

As equações (D.9) e (D.10) podem ser expressas em termos de diferenças finitas para a aproximação de Padé (1,1) por meio do esquema Crank-Nicholson [52]. Aplicando o esquema CN em (D.9) e (D.10), resulta:

$$\begin{aligned} (\alpha' - 1)\psi_{i-1}^{n+1,s+1} + [\nu + \nu_i^{n+1,s}(\alpha' - 1)]\psi_i^{n+1,s+1} + (\alpha' - 1)\psi_{i+1}^{n+1,s+1} = \\ (\alpha' + 1)\psi_{i-1}^n + [\nu + \nu_i^n(\alpha' + 1)]\psi_i^n + (\alpha' + 1)\psi_{i+1}^n \end{aligned} \quad (D.12)$$

e

$$\begin{aligned} (\alpha' - 1)\Phi_{i-1}^{n+1,s+1} + [\nu + \kappa_i^{n+1,s}(\alpha' - 1)]\Phi_i^{n+1,s+1} + (\alpha' - 1)\Phi_{i+1}^{n+1,s+1} = \\ (\alpha' + 1)\Phi_{i-1}^n + [\nu + \kappa_i^n(\alpha' + 1)]\Phi_i^n + (\alpha' + 1)\Phi_{i+1}^n \end{aligned} \quad (D.13)$$

onde

$$\nu_i^{n+1,s} = \Delta x^2 k_{0a}^2 \left[(n_a^2)_i^{n+1} - n_{0a}^2 + (\alpha_a)_i^{n+1} |\psi_i^{n+1,s}|^2 + 2(\alpha_b)_i^{n+1/2} |\Phi_i^{n+1,s}|^2 \right] - 2;$$

$$\kappa_i^{n+1,s} = \Delta x^2 k_{0b}^2 \left[(n_b^2)_i^{n+1} - n_{0b}^2 + (\alpha_b)_i^{n+1} |\Phi_i^{n+1,s}|^2 + 2(\alpha_a)_i^{n+1/2} |\psi_i^{n+1,s}|^2 \right] - 2;$$

$$\alpha' = \frac{j}{k\Delta z}; \quad \nu = \frac{4k\Delta x^2 j}{\Delta z}; \quad (\alpha_a)_i^{n+1} = c\varepsilon_0 (n_a^2)_i^{n+1} n_{2ca};$$

$$(\alpha_b)_i^{n+1} = c\varepsilon_0 (n_b^2)_i^{n+1} n_{2cb};$$

Δx e Δz são os passos de discretização transversal e longitudinal, respectivamente. Os termos $\psi_i^n = \psi(i\Delta x, n\Delta z)$ e $\Phi_i^n = \Phi(i\Delta x, n\Delta z)$ em (D.12) e (D.13) são identificados como a notação simplificada para diferenças finitas. O sobrescrito s representa o número da iteração. As equações (D.12) e (D.13) resultarão em dois sistemas lineares de equações com duas matrizes tridiagonais que podem ser resolvidas de forma rápida. Admitindo que o valor inicial de $\psi_i^{n+1,s}$ e $\Phi_i^{n+1,s}$ sejam iguais a ψ_i^n e Φ_i^n ,

respectivamente, (D.12) e (D.13) podem ser iteradas até que os limiares de convergência, τ , dados por [14]:

$$\max \left[\frac{|\psi_i^{n+1,s+1} - \psi_i^{n+1,s}|}{|\psi_i^{n+1,s}|} \right] < \tau \quad (\text{D.14})$$

e

$$\max \left[\frac{|\Phi_i^{n+1,s+1} - \Phi_i^{n+1,s}|}{|\Phi_i^{n+1,s}|} \right] < \tau \quad (\text{D.15})$$

sejam satisfeitos simultaneamente. Dessa forma, ψ_i^{n+1} e Φ_i^{n+1} podem ser obtidos.