

Численное моделирование переноса нелинейных волн в системах с локальной неоднородностью на основе квантовых графов

А. Р. Преображенская

Аннотация—В данной работе представлено численное моделирование процесса переноса сигналов, описываемых волновыми пакетами нелинейного уравнения Шредингера, по разветвленному графу с локальной неоднородностью на одном из центральных ребер. Для получения численного решения используется явная конечно-разностная схема с граничными условиями Дирихле и условиями Кирхгофа в вершинах с разветвлением (узлах конвергенции и дивергенции сигнала). Локальная неоднородность задается с помощью параметра контраста сред χ , характеризующего степень неоднородности среды и варьируемого в диапазоне от 1 до 8. Проведено исследование зависимости коэффициента прохождения сигнала от χ . Установлено, что даже в однородной среде наблюдается эффект топологического отражения энергии: из-за сложной разветвленной топологии графа примерно 50% энергии волны отражается в узлах разветвления. С ростом χ коэффициент прохождения сигнала монотонно убывает. При этом при значении $\chi > 6$ возникает барьерный эффект: участок локальной неоднородности становится барьером, пропускающим лишь около 10% начальной энергии. Анализ распределения энергии по зонам графа в конечный момент времени демонстрирует интерференционное усиление плотности волновой функции в области перед барьером с ростом параметра контраста сред. Корректность наблюдаемых физических эффектов подтверждена сравнением с линейным случаем и тестами сходимости по временному шагу.

Обоснована численная устойчивость схемы для выбранных параметров моделирования. Сделан вывод об ограничениях предложенного метода решения и предложены рекомендации по дальнейшему развитию подхода исследования. Полученные результаты могут быть использованы для управления пропускной способностью разветвленных волноводов путем варьирования параметров неоднородности.

Ключевые слова—барьерный эффект, геометрический граф, нелинейное уравнение Шредингера, неоднородная среда, условия Кирхгофа.

I. ВВЕДЕНИЕ

Нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных на геометрических графах представляют

собой активно развивающееся направление математического моделирования. Актуальность данной тематики объясняется универсальностью геометрических графов как инструмента моделирования разных процессов: от распространения нервных импульсов по нервным волокнам до описания транспортных потоков на городских улицах.

Фундаментальные основы теории дифференциальных уравнений на геометрических графах были заложены в работах Ю. В. Покорного и его соавторов [1], которые впервые систематически изложили основы теории дифференциальных уравнений в сетеподобных системах. В последующие десятилетия теория квантовых графов, то есть геометрических графов с заданными на них дифференциальными операторами и условиями склейки ребер, получила развитие в многочисленных исследованиях П. Кучмента [2]-[3], Г. Берколайко [4]-[5], Дж. Харрисона [6], П. Курасова [7] и П. Экснера [8]-[9].

Самым распространенным уравнением, решаемым на квантовых графах, является нелинейное уравнение Шредингера (НУШ) с кубической нелинейностью, позволяющее описать распространение волновых пакетов в средах с дисперсией. Например, в [10] рассмотрена квазиклассическая динамика локализованных пакетов НУШ на графах и декорированных графах. В [11] исследованы нормализованные решения нелинейного уравнения Шредингера на квантовых графах. А в [12] рассмотрены интегрируемые обобщения НУШ и показано, что такие уравнения обладают точными солитонными решениями. В [13] приведены аналитические результаты исследования динамики солитонов НУШ с учетом нелинейности, а в [14]-[15] также рассмотрено нелокальное нелинейное уравнение Шредингера на графах топологии "звезда".

Отдельное внимание уделяется решению задач на графах с помощью численных методов. В работе [16] предложен символьный метод решения начально-краевой задачи для уравнения переноса на графе-дереве. В [17] рассмотрен метод анализа структур на графах с применением Бете-аппроксимации энергии. В [18] на примере моделирования транспортных потоков исследуются свойства нелинейных дифференциальных уравнений на графах с учетом условий устойчивости и неустойчивости такого движения. В работе [19]

Статья получена 8 апреля 2026.

А. Р. Преображенская - аспирант, сотрудник кафедры Прикладной математики ФГАОУ ВО "МГТУ "СТАНКИН", Москва, Россия (e-mail: alpreobra@yandex.ru).

приводятся численные решения на графах для различных задач, включающие моделирование передачи потоков данных в компьютерных сетях, движение транспортных потоков и распространение газовых смесей в системе вентиляции.

Следует отметить актуальность задач моделирования процессов переноса в сложных неоднородных средах, например, в пористых средах [20], нелинейных электромагнитных полях [21] и других. В частности, в монографии Э. Скотта [22] подробно рассмотрены процессы переноса импульсов в неоднородных средах, включая нервные волокна и оптические волноводы. Установлено, что при прохождении сигналов по участкам с измененными параметрами среды происходит частичное блокирование волны, приводящее к формированию когерентных структур.

Однако, несмотря на многочисленные исследования нелинейных уравнений на графах, вопрос о совместном влиянии топологии сети и локальной неоднородности среды остается малоизученным. В частности, отсутствуют численные исследования количественных оценок прохождения волновых пакетов по разветвленным сетевым структурам с локальными неоднородностями.

Целью данной работы является численное моделирование процесса переноса сигнала в неоднородной сети на основе квантовых графов и исследование влияния локальной неоднородности на распространение сигнала по графу. Сигнал моделируется с помощью волновых пакетов, описываемых нелинейным уравнением Шредингера с кубической нелинейностью, на разветвленном графе. Неоднородность задается на одном из центральных ребер путем варьирования параметра контраста сред. Для численного решения задачи применяется явная конечно-разностная схема с условиями Кирхгофа в узлах соединения ребер и граничными условиями Дирихле. Проведено исследование распространения волнового пакета по ребрам графа в зависимости от коэффициента контраста сред, задающего локальную неоднородность.

Новизна работы заключается в исследовании влияния топологии разветвленного графа на распространение сигнала, получении количественной зависимости между коэффициентом прохождения сигнала и коэффициентом контраста сред, а также в обнаружении барьерного эффекта при сильной неоднородности среды.

II. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

A. Модель передачи сигнала

В основу математической модели переноса сигнала положено нелинейное уравнение Шредингера (1):

$$i \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -D(x) \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + \gamma(x) |\psi(x,t)|^2 \psi(x,t) \quad (1)$$

где:

i - мнимая единица;

$\psi(x,t)$ - комплекснозначная волновая функция,

характеризующая перенос сигнала в среде;

$|\psi(x,t)|^2$ - плотность распределения сигнала в среде;

$D(x)$ - коэффициент дисперсии, зависящий от проводящей среды;

$\gamma(x)$ - коэффициент нелинейности.

Для удобства использования модели все величины приведены к безразмерному виду путем замены переменных:

$$\tilde{x} = \frac{x}{L_0}; \tilde{t} = \frac{t}{T_0}; \tilde{\psi} = \frac{\psi}{\Psi_0}$$

Характерные масштабы L_0, T_0, Ψ_0 выбираются с учетом условия нормировки коэффициентов в базовой среде:

$$L_0 = 1; T_0 = \frac{L_0^2}{D_0}; \Psi_0 = \sqrt{\frac{D_0}{\gamma_0 L_0^2}}$$

Далее для краткости все тильды над безразмерными параметрами будут опущены. Итоговое уравнение в безразмерном виде приведено в (2).

$$i \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\chi(x) \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + |\psi(x,t)|^2 \psi(x,t) \quad (2)$$

Здесь коэффициент нелинейности $\gamma(x)$ принят равным единице для всех сред, что является стандартным подходом в численных исследованиях волновых процессов на графах [1]. Данное упрощение позволит изолировать влияние дисперсионного параметра на перенос сигнала.

Параметр $\chi(x)$ является безразмерным параметром контраста проводимости разных сред (3):

$$\chi(x) = \frac{D(x)}{D_0} \quad (3)$$

где:

D_0 - коэффициент дисперсии для базовой среды,

$D(x)$ - коэффициент дисперсии в точке x .

Введенный параметр $\chi(x)$ служит для учета неоднородности системы. При прохождении сигнала в базовой среде $\chi(x) = \frac{D_0}{D_0} = 1$, при прохождении через

проводящее включение $\chi(x) = \frac{D(x)}{D_0} > 1$.

При рассмотрении процессов переноса, описываемых нелинейным уравнением Шредингера, безразмерный параметр $\chi(x)$ может определяться как отношение разных величин. Например: отношение эффективных проводимостей (для электромагнитных систем); отношение показателей преломления (для оптических волноводов); отношение скоростей распространения волны и т.д. Добавление данного безразмерного параметра позволит исследовать, как контраст свойств неоднородной среды влияет на перенос сигналов.

В. Модель неоднородной системы:

Неоднородная система моделируется при помощи квантового графа - геометрического графа, для которого задается определенный дифференциальный оператор и условия склейки ребер. В рамках настоящей работы предлагается рассмотреть граф топологии, представленной на рис. 1.

Граф включает 12 вершин (обозначены как v1, v2, v3, v4 и т.д.) и 11 ребер (обозначены как e1, e2, e3, e4 и т.д.).

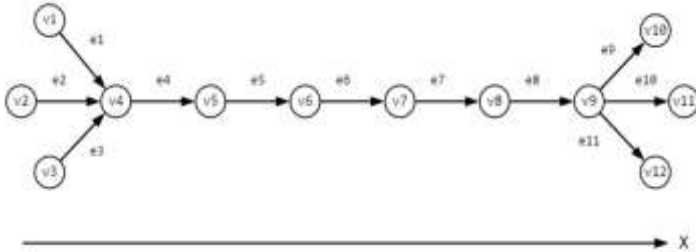


Рис. 1. Рассматриваемая топология разветвленного графа.

Выбор представленной топологии объясняется тем, что неоднородные системы, которые могут быть довольно сложными по своей структуре, строятся на основе простых элементов, таких как узел конвергенции, узел дивергенции, последовательные цепочки и т.д. Граф на рис. 1 отражает базовую ячейку возможной сложной неоднородной системы: сигнал, проходящий по трем ребрам, собирается в одном узле (узел конвергенции сигнала v4), далее передается по цепочке последовательных ребер и снова расходится по трем ребрам (узел дивергенции сигнала v9).

Использование квантового графа предполагает наличие условий склейки ребер, что в свою очередь накладывает граничные и начальные условия на задачу. Условия склейки ребер включают:

1) Условие непрерывности: если одной вершине v инцидентно множество ребер E_v , то значения искомой функции ψ на всех ребрах в этой вершине должны совпадать:

$$\psi_{e_i}(v) = \psi_{e_j}(v), e_i, e_j \in E_v$$

2) Условие Кирхгофа: сумма нормальных производных функций ψ_i , пересекающихся в одной вершине, равна 0. Причем производные берутся в направлении "от конца внутрь ребра": если вершина является началом ребра, то производная со знаком "+"; если вершина является концом ребра, то производная со знаком "-":

$$\sum_{e \in E_v^{in}} \left(-\frac{\partial \psi_e}{\partial x} \right) + \sum_{e \in E_v^{out}} \left(+\frac{\partial \psi_e}{\partial x} \right) = 0$$

Здесь E_v^{in}, E_v^{out} - множества входящих и выходящих из вершины v ребер.

3) Условие Дирихле: в граничных вершинах v_{edge} значения волновых функций ψ_i равны 0. Так обозначается поглощение сигнала соседними

элементами за рамками графа.

$$\psi(v_{edge}) = 0$$

Для выбранной топологии графа условия склейки имеют вид:

1. Условия непрерывности:

$$\psi_1(v_4) = \psi_2(v_4) = \psi_3(v_4) = \psi_4(v_4)$$

$$\psi_8(v_9) = \psi_9(v_9) = \psi_{10}(v_9) = \psi_{11}(v_9)$$

Здесь индекс i при ψ_i означает ребро e_i , на котором задана волновая функция ψ_i .

2. Условия Кирхгофа:

$$-\psi_1'(v_4) - \psi_2'(v_4) - \psi_3'(v_4) + \psi_4'(v_4) = 0$$

$$-\psi_8'(v_9) + \psi_9'(v_9) + \psi_{10}'(v_9) + \psi_{11}'(v_9) = 0$$

3. Условия Дирихле:

$$\psi_1(v_1) = \psi_2(v_2) = \psi_3(v_3) = 0$$

$$\psi_9(v_{10}) = \psi_{10}(v_{11}) = \psi_{11}(v_{12}) = 0$$

Уравнение (2) решается на каждом ребре графа с учетом граничных и начальных условий. Неоднородность среды, то есть включение в систему элементов с иной проводимостью, моделируется изменением значений параметра $\chi(x)$ в уравнении на конкретном участке графа, представляющем собой это неоднородное включение.

III. ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ

Решение поставленной задачи будет осуществляться при помощи численной явной конечно-разностной схемы. Выбор метода обусловлен двумя факторами. Во-первых, явная схема позволяет эффективно обрабатывать кубическую нелинейность, считая значения напрямую через значения на предыдущем слое. Во-вторых, в случае разветвленной структуры, как в рамках данной работы, значения в вершинах с условиями Кирхгофа обрабатываются локально через соседние узлы сетки, что ускоряет процесс расчетов.

Численное решение находится для каждого ребра графа на пространственно-временной сетке, где по горизонтали отмечаются координаты X вдоль ребра, а по вертикали - значения моментов времени, так называемые временные слои. Таким образом численное решение задачи сводится к расчету значений волновой функции ψ во всех точках ребер графа на каждом временном слое. При этом следует отметить, что обработка вершин графа не влияет на сохранение устойчивости явной схемы, что подтверждено численными компьютерными экспериментами.

Для расчетов по явной схеме на пространственно-временную сетку накладывается четырехточечный шаблон (рис. 2).

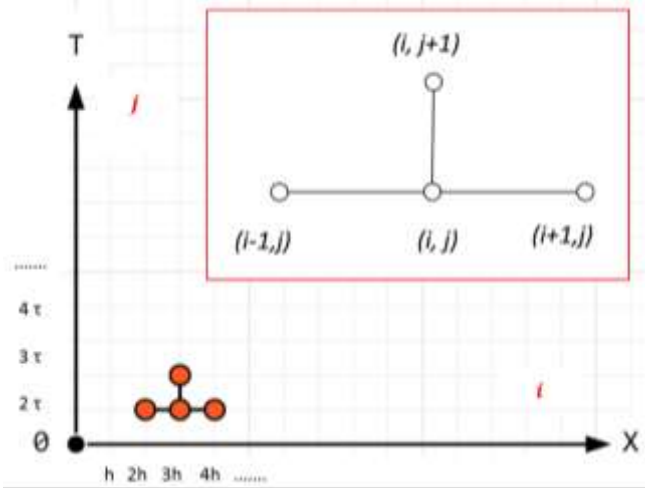


Рис. 2. Сетка и шаблон явной конечно-разностной схемы.

Устойчивость решения обеспечивается за счет выбора шагов по пространству h и по времени τ с учетом условия Куранта:

$$\tau \leq \frac{h^2}{2\chi}$$

Однако стоит отметить, что данное условие устойчивости получено для линейного уравнения Шредингера. В присутствии члена кубической нелинейности предел устойчивости решения уменьшается из-за возможного экспоненциального роста локальных амплитуд $|\psi|^2$. Поэтому в рамках настоящей работы для расчетов были взяты шаги $\tau=0,0002$ и $h=0,4$ для диапазона параметра χ от 1 до 8. Такие значения параметров дают достаточный запас устойчивости решения.

В явной схеме по значениям волновой функции в трех точках предыдущего временного слоя можно рассчитать значения функции в точке следующего слоя. Начальные значения волновой функции в нулевой момент времени будут задаваться с помощью гауссовой функции вида (4):

$$\psi_0 = Ae^{\frac{-(x-x_0)^2}{2\sigma^2} + ik_0(x-x_0)} \quad (4)$$

где параметры A, x_0, σ, k_0 задаются как вещественные числа.

Для аппроксимации производных волновой функции на последующих временных слоях вводятся следующие выражения:

$$\frac{\partial \psi(x_i, t_j)}{\partial t} = \frac{\psi_i^{j+1} - \psi_i^j}{\tau}$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x_i, t_j)}{\partial x^2} = \frac{\psi_{i-1}^j - 2\psi_i^j + \psi_{i+1}^j}{h^2}$$

Формулы аппроксимации подставляются в (2), затем выражается неизвестное значение волновой функции:

$$\psi_i^{j+1} = \frac{\left(-\chi \frac{\psi_{i-1}^j - 2\psi_i^j + \psi_{i+1}^j}{h^2} + |\psi_i^j|^2 \psi_i^j \right) * \tau}{i} + \psi_i^j$$

По приведенной формуле рассчитываются числовые значения волновой функции во всех точках сетки на каждом ребре. Затем находится квадрат модуля волновой функции $|\psi(x, t)|^2$, который позволяет определить плотность энергии сигнала вдоль ребра.

Подобным образом проводятся расчеты для каждого ребра исследуемого квантового графа. Следует отметить, что в рамках настоящей работы предполагается отсутствие зависимости переноса сигнала по графу от геометрической ориентации ребер, поэтому расположение некоторых ребер под углом друг к другу никак не влияет на численное решение уравнения. Каждое ребро рассматривается как отдельный отрезок $[0;L]$, где L - длина ребра, и решение уравнения находится для локальной системы координат, связанной с конкретным ребром. Связанность же всех решений в рамках графа обеспечивается за счет учета накладываемых граничных условий.

При нахождении численного решения на неоднородных участках графа весь процесс решения выполняется в соответствии с описанным выше алгоритмом, но учитывается изменение параметра χ в нелинейном уравнении Шредингера.

Отдельно стоит учитывать граничные условия на квантовом графе, которые выражаются в условиях непрерывности и условиях Кирхгофа. Такие граничные условия задаются в вершинах $v4$ и $v9$.

Граничные условия так же можно выразить через формулы аппроксимации, используемые в явной конечно-разностной схеме.

Пусть каждое ребро содержит N точек сетки по пространству, причем точка с номером 1 соответствует начальной вершине ребра, а последняя точка с номером N - конечной вершине ребра. Шаг по пространству равен h . Тогда для узла конвергенции $v4$ граничные условия можно записать в виде:

$$\psi_{1,N} = \psi_{2,N} = \psi_{3,N} = \psi_{4,1}$$

$$-\frac{\psi_{1,N} - \psi_{1,N-1}}{h} - \frac{\psi_{2,N} - \psi_{2,N-1}}{h} - \frac{\psi_{3,N} - \psi_{3,N-1}}{h} + \frac{\psi_{4,2} - \psi_{4,1}}{h} = 0$$

Здесь первый индекс при ψ обозначает номер ребра, а второй индекс - номер точки соответствующего ребра по сетке.

Аналогично переписываются граничные условия для узла дивергенции $v9$:

$$\psi_{8,N} = \psi_{9,1} = \psi_{10,1} = \psi_{11,1}$$

$$-\frac{\psi_{8,N} - \psi_{8,N-1}}{h} + \frac{\psi_{9,2} - \psi_{9,1}}{h} + \frac{\psi_{10,2} - \psi_{10,1}}{h} + \frac{\psi_{11,2} - \psi_{11,1}}{h} = 0$$

Таким образом, граничные условия могут вычисляться и задаваться непосредственно в процессе расчетов по явной конечно-разностной схеме. После получения на каждом ребре для одного временного слоя численных значений волновой функции во внутренних точках сетки можно составить уравнение с одним неизвестным - этим неизвестным будет граничное значение волновой функции.

Уравнение для вершины v4:

$$\psi_{1,N} = \psi_{2,N} = \psi_{3,N} = \psi_{4,1} = Y$$

$$\frac{Y - \psi_{1,N-1}}{h} - \frac{Y - \psi_{2,N-1}}{h} - \frac{Y - \psi_{3,N-1}}{h} + \frac{\psi_{4,2} - Y}{h} = 0$$

$$Y = \frac{\psi_{1,N-1} + \psi_{2,N-1} + \psi_{3,N-1} + \psi_{4,2}}{4}$$

И уравнение для вершины v9:

$$\psi_{8,N} = \psi_{9,1} = \psi_{10,1} = \psi_{11,1} = Z$$

$$-\frac{Z - \psi_{8,N-1}}{h} + \frac{\psi_{9,2} - Z}{h} + \frac{\psi_{10,2} - Z}{h} + \frac{\psi_{11,2} - Z}{h} = 0$$

$$Z = \frac{\psi_{8,N-1} + \psi_{9,2} + \psi_{10,2} + \psi_{11,2}}{4}$$

Найденные значения Y и Z будут соответствовать на текущем временном слое граничным значениям волновой функции в вершинах конвергенции и дивергенции сигнала.

IV. ПРИМЕРЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

Для вычисления и визуализации численного решения создана программная реализация на языке программирования Python с применением библиотек Numpy и Matplotlib.

Начальные значения волновой функции задаются с помощью гауссовой функции. Далее с учетом шагов по сетке - h по пространству и τ по времени - производится численный расчет значений волновой функции на остальных временных слоях на всех ребрах графа. Для количественной оценки эволюции сигнала при прохождении по графу введен коэффициент прохождения сигнала T_χ , вычисляемый по формуле (5):

$$T_\chi = \frac{E_{out}}{E_{in}} \quad (5)$$

где: E_{in} - энергия на входных ребрах графа в начальный момент времени; E_{out} - энергия на выходных ребрах графа в конечный момент времени.

Энергия для ребра e_j в момент времени t рассчитывается по формуле (6):

$$E_{e_j}(t) = h \sum_{i=1}^N |\psi_j(x_i, t)|^2 \quad (6)$$

где: h - шаг по пространству; N - число точек сетки.

Безразмерные параметры, используемые при расчетах, приведены в таблице I.

Таблица I-Параметры моделирования

| № | Параметр | Название | Значение |
|---|----------|--------------------------|---------------|
| 1 | χ | Параметр контраста среды | 1, 2, 4, 6, 8 |
| 2 | γ | Коэффициент нелинейности | 1 |
| 3 | L | Длина ребра | 7 |
| 4 | h | Шаг по пространству | 0,4 |

| | | | |
|----|-----------|-------------------------------------|--------|
| 5 | τ | Шаг по времени | 0,0002 |
| 6 | T_{max} | Время моделирования | 10-15 |
| 7 | x_0 | Центр гауссова пакета | 3,5 |
| 8 | σ | Ширина гауссова пакета | 1,5 |
| 9 | A | Амплитуда гауссовой функции | 0,8 |
| 10 | k_0 | Скорость движения гауссовой функции | 2 |

Пример 1: Для проверки устойчивости численной схемы проведен расчет на линейном простом графе, состоящем из последовательно соединенных ребер и моделирующем однородную среду ($\chi = 1$), с граничными условиями Дирихле. Результаты моделирования представлены на рис. 3.

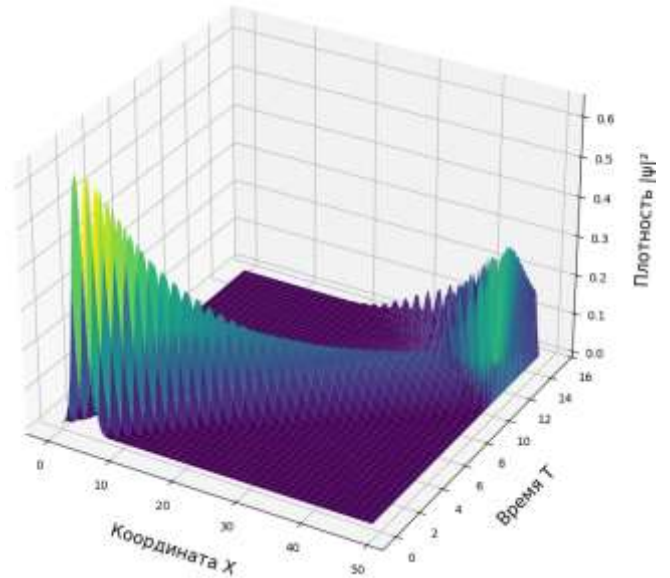


Рис. 3. Распространение сигнала по простому однородному графу.

Для графа на рис. 3 коэффициент прохождения составил $T_\chi = 1,06$, то есть энергия на входе и выходе из графа практически совпадает, что говорит о полном прохождении волны по графу без отражений. Небольшое отклонение от 1 объясняется погрешностью явной схемы и находится в допустимых пределах.

Пример 2: Далее получено численное решение для разветвленного графа, топология которого представлена на рис. 1. Для случая однородной среды ($\chi = 1$) результаты моделирования приведены на рис. 4. Для компактности визуализации будем использовать графики, отображающие перенос волнового пакета по центральным ребрам графа e2-e4-e5-e6-e7-e8-e10, исключая боковые ребра e1, e3, e9, e11. Это оправдано тем, что прохождение сигнала по входным ребрам e1-e3 идентично, как и по выходным e9-e11. При этом вклад всех ребер полностью учитывается в расчетах и влияет на итоговые значения коэффициента прохождения.

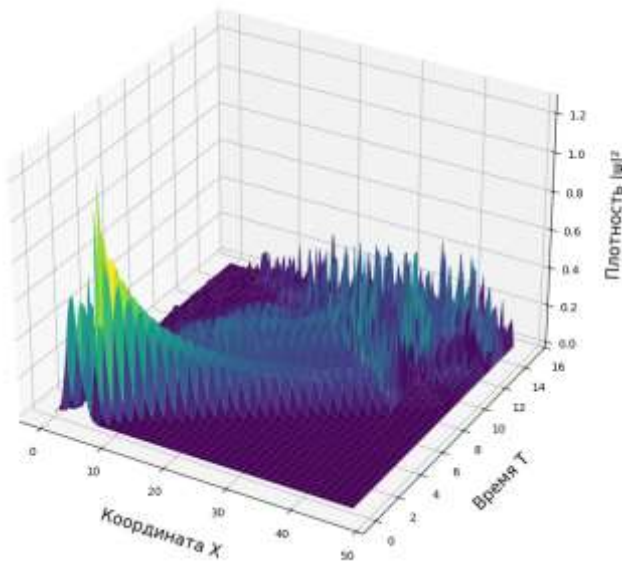


Рис. 4. Распространение сигнала по центральным ребрам разветвленного однородного графа ($\chi=1$).

Для случая, представленного на рис. 4, коэффициент прохождения за то же время моделирования, что и в примере 1, составил $T_\chi = 0,49$. Такое снижение проходимости сигнала можно объяснить сложной топологией графа. Наличие узлов конвергенции (v4) и дивергенции (v9) приводит к возникновению эффекта отражения волны, что хорошо заметно по характерным осцилляциям плотности $|\psi|^2$ на рис. 4 в окрестности $X=7$ (соответствует узлу конвергенции v4) и в окрестности $X=42$ (соответствует узлу дивергенции v9). Эти осцилляции возникают вследствие интерференции падающей и отражённой волн. В результате частичного отражения в вершинах графа энергия, достигающая выходных рёбер, составляет лишь 49% от начальной, что подтверждает существенное влияние топологии на распространение нелинейных волн.

Пример 3: Теперь в систему введена неоднородность путем задания коэффициента контраста сред $\chi > 1$ на одном из центральных ребер графа еб. Остальные ребра остаются однородными ($\chi = 1$). Добавление неоднородности на одном ребре позволяет изолировать ее влияние от других факторов и четко проследить зависимость прохождения сигнала от степени неоднородности среды.

Результаты моделирования для разных значений χ представлены на рис. 5.

Следует отметить, что коэффициент контраста сред $\chi = 8$ потребовал уменьшения времени моделирования T_{\max} с 15 до 10 для сохранения устойчивости схемы. Объяснение этого шага изложено далее в разделе обсуждений.

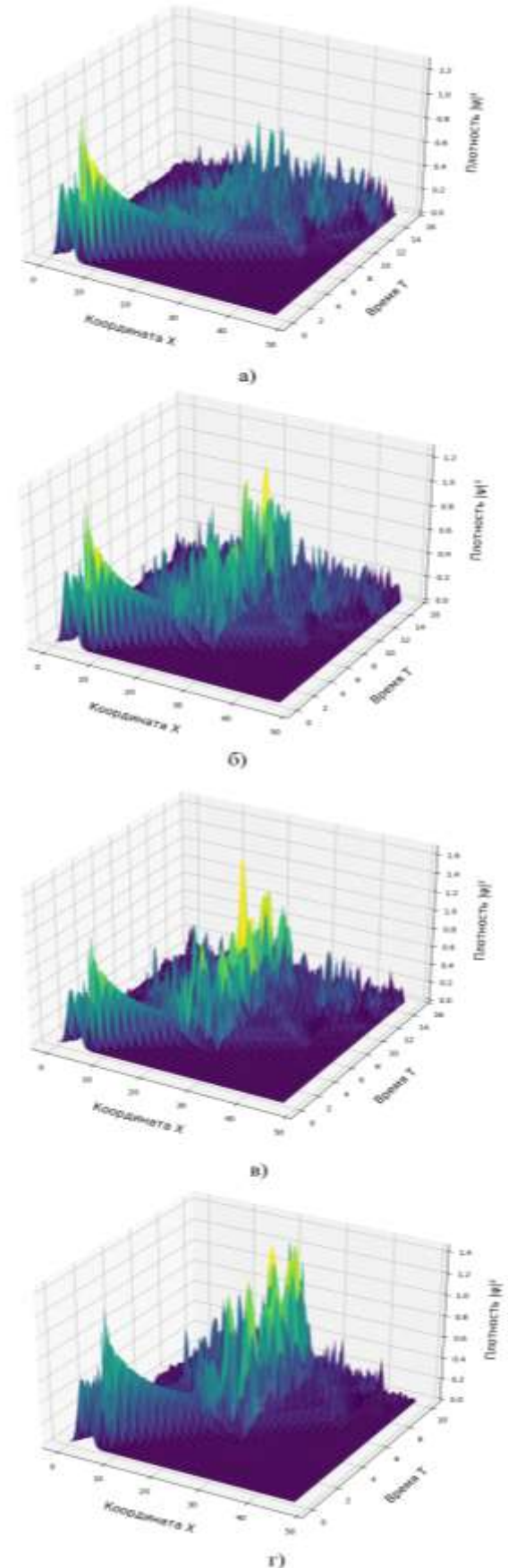


Рис. 5. Распространение сигнала по центральным ребрам разветвленного неоднородного графа: а) $\chi=2$; б) $\chi=4$; в) $\chi=6$; г) $\chi=8$.

Рассчитанные значения коэффициентов прохождения сигнала и требуемого времени моделирования для

разных χ в случае разветвленного графа представлены в таблице II.

Таблица II-Коэффициент прохождения сигнала по разветвленному графу в зависимости от степени неоднородности среды

| № эксперимента | χ | T_χ | T_{max} |
|----------------|--------|----------|-----------|
| 1 | 1 | 0,490 | 15 |
| 2 | 2 | 0,465 | 15 |
| 3 | 4 | 0,413 | 15 |
| 4 | 6 | 0,338 | 15 |
| 5 | 8 | 0,098 | 10 |

С ростом χ коэффициент прохождения сигнала T_χ монотонно убывает, что свидетельствует о снижении энергии, достигающей выходных рёбер (e9-e11). При контрасте сред $\chi = 8$ наблюдается возникновение барьерного эффекта ($T_\chi = 0,098$), из-за чего происходит практически полное отражение волны от неоднородного участка eб. При этом на графиках рис. 5 видно, что с ростом χ амплитуда осцилляций плотности $|\psi|^2$ на центральных рёбрах (e4-e8) увеличивается. Это объясняется усилением интерференции между падающей и отражённой волнами: при увеличении коэффициента контраста сред усиливается эффект отражения от неоднородного участка eб, что приводит к формированию более выраженной стоячей волны перед барьером.

Важно отметить, что рост локальных амплитуд на центральных рёбрах не противоречит уменьшению дошедшей до выходных ребер энергии: осцилляции обусловлены именно отражённой от барьера волной, при этом амплитуда прошедшей волны на выходных рёбрах монотонно снижается.

V. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

На основе рассмотренных выше примеров можно выделить следующие основные результаты исследования:

1) Влияние топологии: численное моделирование процесса распространения сигнала показало, что топология графа влияет на прохождение сигнала даже в однородной среде. При усложнении структуры графа (добавление узлов конвергенции и дивергенции сигнала) коэффициент прохождения снизился почти вдвое (до 0,49) по сравнению с простым неразветвленным графом эквивалентной длины. Это связано с условиями Кирхгофа, которые в узлах соединения ребер требуют непрерывности волновой функции, из-за чего происходит частичное отражение волны в узлах конвергенции и дивергенции.

Данный результат качественно согласуется с результатами в [10], где показано, что учет условий Кирхгофа в вершинах n-й валентности приводит к разделению волны: часть энергии отражается, а часть проходит далее на инцидентные ребра.

2) Влияние неоднородности: анализ зависимости T_χ от χ показывает существование нелинейной зависимости между проходимостью сигнала и степенью неоднородности среды (таблица III).

Таблица III-Нелинейная зависимость между χ и T_χ

| Увеличение χ | Падение T_χ | Эффект |
|-------------------|------------------|-----------|
| 1 \rightarrow 2 | $\approx 5\%$ | слабый |
| 1 \rightarrow 4 | $\approx 16\%$ | умеренный |
| 1 \rightarrow 6 | $\approx 31\%$ | умеренный |
| 1 \rightarrow 8 | $\approx 80\%$ | барьерный |

При разнице параметров сред в 2, 4 и 6 раз коэффициент прохождения сигнала монотонно убывает, но в целом влияние неоднородности можно считать умеренным. С увеличением χ усиливается интерференция волн перед неоднородным участком, что выражается в формировании высокоамплитудных стоячих волн в центре графа.

При значении параметра контраста сред $\chi > 6$ наблюдается пороговый эффект: коэффициент прохождения резко убывает, таким образом неоднородный участок становится эффективным барьером, практически не пропускающим энергию ($T_\chi = 0,098$).

3) Барьерный эффект: на рис. 6 наглядно представлено резкое падение коэффициента прохождения сигнала при контрасте сред $\chi > 6$, что соответствует переходу системы в барьерный режим.

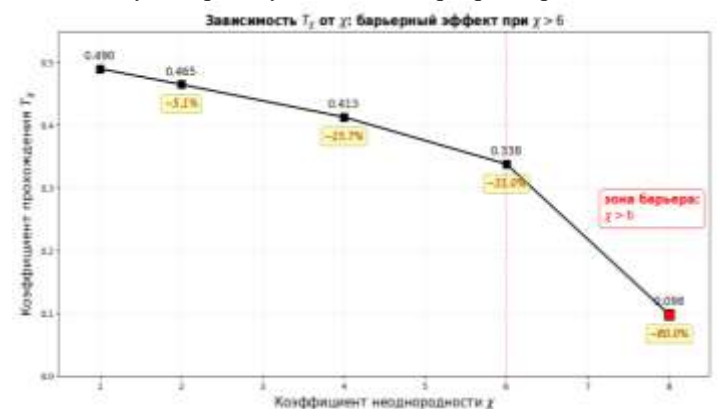


Рис. 6. Возникновение барьерного эффекта при сильном контрасте сред.

При этом с ростом контраста сред энергия, достигающая выходных ребер, монотонно снижается, в то время как на центральных ребрах перед локальной неоднородностью на ребре eб наблюдается, наоборот, увеличение плотности сигнала из-за интерференции падающей и отраженной волн. В зоне барьера при $\chi > 6$ наблюдается резкий скачок энергии на центральных ребрах. Распределение энергии по зонам графа (входные ребра (e1-e3), центральные ребра (e4-e8) и выходные ребра (e9-e11)) представлено на рис. 7.

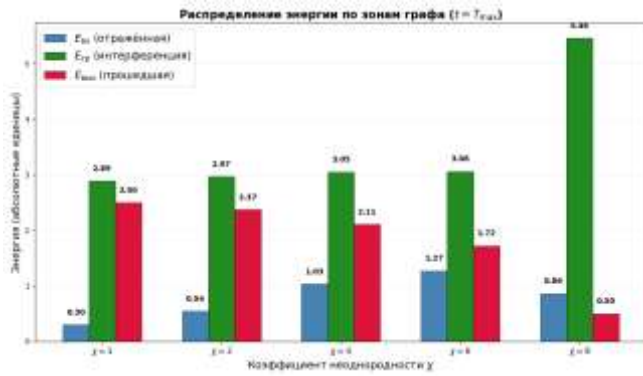


Рис. 7. Распределение энергии в конечный момент времени по зонам графа.

Сумма энергий по зонам графа ($E_{общ} = E_{отр} + E_{инт} + E_{прох}$) незначительно отличается для разных χ и также превышает энергию в начальный момент времени. Это обусловлено тремя факторами: открытыми граничными условиями, что позволяет части энергии уходить из графа через границы с условиями Дирихле; численной погрешностью явной схемы; интерференционным усилением локальной плотности сигнала в центральной части графа, зависящим от контраста сред. Несмотря на влияние этих факторов на количественные значения энергии для разных χ качественно картина распределения энергии по зонам графа остается физически корректной.

Для валидации модели следовало бы провести прямое сравнение с аналитическим решением для НУШ на графах. Однако точного аналитического решения для описанной в рамках работы модели, сочетающей в себе локальную неоднородность, кубическую нелинейность и разветвления графа, не существует. Известны аналитические решения лишь для простейших конфигураций графа, без неоднородности [14]-[15]. Таким образом, численное моделирование остается основным доступным инструментом исследования в рамках данной модели.

Для подтверждения физической корректности полученных результатов и исключения численных артефактов были проведены дополнительные исследования.

Во-первых, следует отметить, что при $\chi \leq 6$ рассматривалось единое время моделирования $T_{max} = 15$, достаточное для полного прохождения волны через весь граф и стабилизации энергии на выходных ребрах. Для случая $\chi > 6$ потребовалось уменьшение времени моделирования с 15 до 10, чтобы обеспечить сохранение устойчивости схемы. Выбор именно $T_{max} = 10$ обусловлен тем, что энергия на выходных ребрах $E_{вых}$ уже стабилизировалась к моменту времени $t \approx 8-10$ и дальнейшее моделирование не изменяло коэффициент прохождения T_χ более чем на 2-3%. Напротив, при $T_{max} > 10$ из-за длительного моделирования сильного отражения наблюдался экспоненциальный рост осцилляций

волновой функции в области перед барьером, что приводило к переполнению численных переменных. Таким образом, выбранное время для случая $\chi > 6$ вполне достаточно, чтобы получить качественно верную картину распространения сигнала в неоднородной системе, при этом сохранив устойчивость схемы.

Во-вторых, для проверки физической природы барьерного эффекта и исключения влияния нелинейной неустойчивости на результат было проведено дополнительное моделирование для линейного случая (с коэффициентом нелинейности $\gamma = 0$) при максимальном контрасте сред $\chi = 8$. Результаты показали, что в линейном случае энергия на центральной части графа так же резко возрастает ($E_{cp} \approx 5,77$) даже при отсутствии нелинейности. То есть наблюдаемый скачок энергии перед локальной неоднородностью обусловлен именно линейной интерференцией падающей и отраженной волн, формирующей перед барьером стоячую волну с высокими амплитудами. Это свидетельствует об отсутствии численной неустойчивости из-за кубической нелинейности в уравнении. Более того, сравнение с нелинейным случаем ($\gamma = 1$) показало, что кубическая нелинейность количественно усиливает барьерный эффект: коэффициент прохождения сигнала T_χ снижается с 0,135 в линейном случае до 0,098 в нелинейном случае. Полученные результаты согласуются с фокусирующим характером нелинейности, способствующим дополнительному отражению в зоне перед барьером.

В-третьих, для проверки устойчивости численного решения проведены тесты сходимости шага по времени. Уменьшение шага по времени τ с 0,0002 до 0,00005 показало, что значения коэффициента прохождения T_χ изменяются незначительно: с 0,098 до 0,092. Данные значения находятся в пределах допустимой погрешности для явной схемы с кубической нелинейностью. При этом сохраняется скачок энергии в центральной части графа перед барьером, что подтверждает физическую природу барьерного эффекта.

Таким образом, проведенные дополнительные исследования вполне подтверждают вывод о существовании барьерного эффекта. Необходимость сокращения времени моделирования при больших значениях параметра контраста сред лишь свидетельствует об ограничениях явной конечно-разностной схемы, что, однако, не влияет на качественно верную картину и физическую корректность полученных результатов.

VI. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках данной работы проведено численное моделирование процесса распространения сигнала, описываемого нелинейным уравнением Шредингера, на разветвленном графе с локальной неоднородностью. Для решения задачи использовалась явная конечно-

разностная схема с условиями Кирхгофа в узлах конвергенции и дивергенции сигнала. Проведена валидация численного метода, включающая тесты на сходимость по временному шагу, а также сравнение нелинейного случая с линейным для проверки физической природы наблюдаемых эффектов.

Основные результаты работы:

1) Обнаружен топологический эффект отражения: даже в однородной среде ($\chi = 1$) коэффициент прохождения сигнала составляет ($T_\chi = 0,49$), то есть почти 50% энергии отражается в узлах разветвления графа.

2) Установлена нелинейная зависимость между коэффициентом прохождения сигнала и параметром контраста сред: с ростом χ от 1 до 8 коэффициент прохождения сигнала T_χ монотонно падает с 0,49 до 0,098.

3) Обнаружен барьерный эффект: при параметре контраста сред ($\chi > 6$) локальная неоднородность действует как барьер, пропуская лишь около 10% начальной энергии. Показано, что скопление энергии перед барьером в центральной части графа связано именно с интерференцией падающей и отраженной от барьера волн, усиливающейся с ростом χ .

4) Установлено ограничение явного метода для длительного моделирования при больших значениях параметра контраста сред ($\chi > 6$).

Также ограничением данной работы является предположение о постоянстве нелинейного коэффициента $\gamma(x)$. В реальных неоднородных структурах параметры дисперсии и нелинейности взаимосвязаны. Однако такое упрощение модели позволило изолировать влияние параметра контраста сред на распространение сигнала.

Практическая значимость работы заключается в возможном применении результатов исследования для управления пропускной способностью волноводов путем изменения локальной неоднородности среды. Это может быть полезно при проектировании оптических разветвителей, волноводных фильтров и квантовых сетей.

Перспективами дальнейших исследований могут быть: учет взаимосвязи между нелинейностью и дисперсией; применение неявных схем для длительного моделирования при сильной неоднородности среды; рассмотрение процесса переноса сигнала по графам других топологий (решеткам, случайным графам и т.д.); изучение влияния на распространение сигнала протяженности неоднородного участка, а также множественных неоднородностей на разных ребрах графа.

БИБЛИОГРАФИЯ

- [1] Покорный Ю.В., Пенкин О.М., Прядиев В.Л., Боровских А.В., Лазарев К.П., Шабров С.А. Дифференциальные уравнения на геометрических графах. Москва, Физматлит, 2004, 272 с.
- [2] Kuchment P. Quantum graphs: an introduction and a brief survey, 2008, arXiv:0802.3442v1. Available: <https://arxiv.org/abs/0802.3442>
- [3] Do N. T., Kuchment P., Ong B. On resonant spectral gaps in quantum graphs, 2016, arXiv:1601.04774v2. Available: <https://arxiv.org/pdf/1601.04774>
- [4] Berkolaiko G., Kuchment P. Introduction to Quantum Graphs. AMS, Providence, R.I., 2013.
- [5] Berkolaiko G. An elementary introduction to quantum graphs, 2016, arXiv:1603.07356v2. Available: <https://arxiv.org/pdf/1603.07356>
- [6] Harrison J.M. Quantum graphs with spin Hamiltonians, 2008, arXiv:0712.0869v2. Available: <https://arxiv.org/pdf/0712.0869>
- [7] Kurasov P. Understanding Quantum Graphs. Acta Physica Polonica A, Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, 2019, pp. 797–802.
- [8] Exner P., Jex M. On the ground state of quantum graphs with attractive δ -coupling, 2011, arXiv:1110.1800v2. Available: <https://arxiv.org/pdf/1110.1800>
- [9] Exner P., Turek O. Quantum graphs with the Bethe-Sommerfeld property. Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics, 2017, 8 (3), pp. 305–309.
- [10] Толченников А.А., Чернышев В.Л., Шафаревич А.И. Уравнения Шрёдингера на графах и сингулярных пространствах: спектральные свойства и квазиклассическая динамика локализованных пакетов, 2014, том 11, № 2, с. 75–104.
- [11] Yang Y., Zhao L. Normalized solutions for nonlinear Schrödinger equations on graphs, 2023, arXiv:2302.12585v1. Available: <https://arxiv.org/abs/2302.12585>
- [12] Ablowitz M., Musslimani Z. Inverse scattering transform for the integrable nonlocal nonlinear Schrödinger equation. Nonlinearity, 2016, 29, pp. 915–946.
- [13] Асеева Н.В., Громов Е.М., Подчищаева О.В., Тютин В.В. Динамика солитонов в рамках расширенного неоднородного нелинейного уравнения Шрёдингера с учетом нелокальности нелинейности. Труды Нижегородского государственного технического университета им. Р.Е. Алексеева № 1(98), 2013, с. 51–64.
- [14] Sabirova K., Matrasulov D., Akramov M., Susanto H. Nonlocal Nonlinear Schrödinger Equation on Metric Graphs, 2021, arXiv:2111.03271v1. Available: <https://arxiv.org/pdf/2111.03271>
- [15] Гавриков А.М. Исследование изменения квантового графа в зависимости от времени. Политехнический молодежный журнал, 2017, № 11, с. 1–13.
- [16] Рыбаков М.А. Символьный метод решения начально-краевой задачи для неоднородного уравнения переноса сплошной среды на графе. Моделирование, оптимизация и информационные технологии. 2024;12(2).
- [17] Егоров С.И., Сапожников Д.А., Усатюк В.С. Применение аппроксимации энергии Бете для определения числовых характеристик кодов на графе. Математическое моделирование и численные методы, 2025, № 1, с. 104–115.
- [18] Буслаев А. П., Таташев А. Г., Яшина М. В. О свойствах решений одного класса систем нелинейных дифференциальных уравнений на графах. Владикавказский математический журнал, Октябрь-декабрь, 2004, Том 6, Выпуск 4, с. 17–24.
- [19] Холодов Я. А. Разработка сетевых вычислительных моделей для исследования нелинейных волновых процессов на графах. Компьютерные исследования и моделирование, 2019, том 11, выпуск 5, с. 777–814.
- [20] Димитриенко Ю. И., Иванов М. Ю. Моделирование нелинейных динамических процессов переноса в пористых средах. Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана, Сер. “Естественные науки”, 2008, № 1, с. 24–38.
- [21] Уварова Л. А., Лин П. В. Моделирование процесса переноса «реакция–диффузия» в нелинейном электромагнитном поле. Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, 2021, том 25, номер 4, с. 663–675.
- [22] Скотт Э. Нелинейная наука. Рождение и развитие когерентных структур / Э. Скотт ; пер. с англ. И. А. Макарова под ред. А. Л. Фрадкова. - 2-е изд. - Москва: Физматлит, 2007. - 559 с.

Numerical Modeling of Nonlinear Wave Transport in Branched Quantum Graphs with Local Inhomogeneity

A. R. Preobrazhenskaya

Abstract—This paper presents numerical modeling of signal transport described by wave packets of the nonlinear Schrödinger equation through a branched quantum graph with local inhomogeneity on one of the central edges. An explicit finite-difference scheme is employed to obtain the numerical solution, with Dirichlet boundary conditions and Kirchhoff conditions at branching vertices (signal convergence and divergence nodes). The local inhomogeneity is defined by the medium contrast parameter χ , characterizing the degree of environmental heterogeneity and varied in the range from 1 to 8. The dependence of the signal transmission coefficient on χ is investigated.

It is established that even in a homogeneous medium ($\chi = 1$), a topological energy reflection effect occurs: due to the complex branched topology of the graph, approximately 50% of the wave energy is reflected at the branching nodes. With increasing χ , the signal transmission coefficient monotonically decreases. A barrier effect emerges at $\chi > 6$: the local inhomogeneity region becomes a barrier, transmitting only about 10% of the initial energy. Analysis of energy distribution across graph zones at the final time demonstrates interference-enhanced wave function density in the region before the barrier with increasing contrast parameter. The correctness of the observed physical effects is confirmed by comparison with the linear case and convergence tests on the time step. Numerical stability of the scheme is substantiated for the selected modeling parameters. Limitations of the proposed solution method are discussed, and recommendations for further development of the research approach are provided. The obtained results can be applied to control the bandwidth of branched waveguides by varying inhomogeneity parameters.

Keywords—barrier effect, quantum graph, nonlinear Schrödinger equation, inhomogeneous media, Kirchhoff conditions.

REFERENCES

- [1] Pokorny Yu.V., Penkin O.M., Pryadiev V.L., Borovskikh A.V., Lazarev K.P., Shabrov S.A. Differential Equations on Geometric Graphs. Moscow: Fizmatlit, 2004, 272 p.
- [2] Kuchment P. Quantum graphs: an introduction and a brief survey, 2008, arXiv:0802.3442v1. Available: <https://arxiv.org/abs/0802.3442>
- [3] Do N. T., Kuchment P., Ong B. On resonant spectral gaps in quantum graphs, 2016, arXiv:1601.04774v2. Available: <https://arxiv.org/pdf/1601.04774>
- [4] Berkolaiko G., Kuchment P. Introduction to Quantum Graphs. AMS, Providence, R.I., 2013.
- [5] Berkolaiko G. An elementary introduction to quantum graphs, 2016, arXiv:1603.07356v2. Available: <https://arxiv.org/pdf/1603.07356>
- [6] Harrison J.M. Quantum graphs with spin Hamiltonians, 2008, arXiv:0712.0869v2. Available: <https://arxiv.org/pdf/0712.0869>
- [7] Kurasov P. Understanding Quantum Graphs. Acta Physica Polonica A, Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, 2019, pp. 797–802.
- [8] Exner P., Jex M. On the ground state of quantum graphs with attractive δ -coupling, 2011, arXiv:1110.1800v2. Available: <https://arxiv.org/pdf/1110.1800>
- [9] Exner P., Turek O. Quantum graphs with the Bethe-Sommerfeld property. Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics, 2017, 8 (3), pp. 305–309.
- [10] Tolchennikov A.A., Chernyshev V.L., Shafarevich A.I. Schrödinger equation on graphs and singular spaces: spectral properties and semiclassical dynamics of localized packets, 2014, № 2, p. 75–104.
- [11] Yang Y., Zhao L. Normalized solutions for nonlinear Schrödinger equations on graphs, 2023, arXiv:2302.12585v1. Available: <https://arxiv.org/abs/2302.12585>
- [12] Ablowitz M., Musslimani Z. Inverse scattering transform for the integrable nonlocal nonlinear Schrödinger equation. Nonlinearity, 2016, 29, pp. 915–946.
- [13] Aseeva N.V., Gromov E.M., Podchishaeva O.V., Tyutin V.V. Soliton dynamics in the frame of extended inhomogeneous nonlinear Schrödinger equation with taking into account nonlocal nonlinearity. Proceedings of R.E. Alekseev Nizhny Novgorod State Technical University, 2013, No. 1(98), pp. 51–64.
- [14] Sabirova K., Matrasulov D., Akramov M., Susanto H. Nonlocal Nonlinear Schrödinger Equation on Metric Graphs, 2021, arXiv:2111.03271v1. Available: <https://arxiv.org/pdf/2111.03271>
- [15] Gavrikov A.M. Investigating quantum graph variations as functions of time. Polytechnic Youth Journal, 2017, No. 11, pp. 1–13.
- [16] Rybakov M.A. A symbolic method for solving the initial boundary value problem for an inhomogeneous continuum transfer equation on a graph. Modeling, Optimization and Information Technology. 2024;12(2).
- [17] Egorov S.I., Sapozhnikov D.A., Usatyuk V.S. Application of Bethe energy approximation to determine the numerical characteristics of codes on a graph structures. Mathematical Modeling and Computational Methods, 2025, No. 1, pp. 104–115.
- [18] Buslaev A.P., Tatashev A.G., Yashina M.V. On Properties of Solutions of a Class of Systems of Nonlinear Differential Equations on Graphs. Vladikavkaz Mathematical Journal, 2004, Vol. 6, No. 4, pp. 17–24.
- [19] Kholodov Ya. A. Development of network computational models for the study of nonlinear wave processes on graphs. COMPUTER RESEARCH AND MODELING, 2019 VOL. 11 NO. 5 P. 777–814.
- [20] Dimitrienko Yu.I., Ivanov M.Yu. Modeling of Nonlinear Dynamic Transport Processes in Porous Media. Herald of Bauman Moscow State Technical University, Series "Natural Sciences", 2008, No. 1, pp. 24–38.
- [21] Uvarova L. A., Linn P. W. Modeling of the "reaction–diffusion" transfer process in a nonlinear electromagnetic field, Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2021, vol. 25, no. 4, pp. 663–675. (In Russian).
- [22] Scott A. Nonlinear Science: Emergence and Dynamics of Coherent Structures. 2nd ed. Oxford: Oxford University Press, 2003, 559 p.

About the author:

Manuscript received 8 April 2026.

Preobrazhenskaya A. R. - PhD Student, Department of Applied Mathematics, Moscow State Technical University "STANKIN", Moscow, Russia (e-mail: alpreobra@yandex.ru).