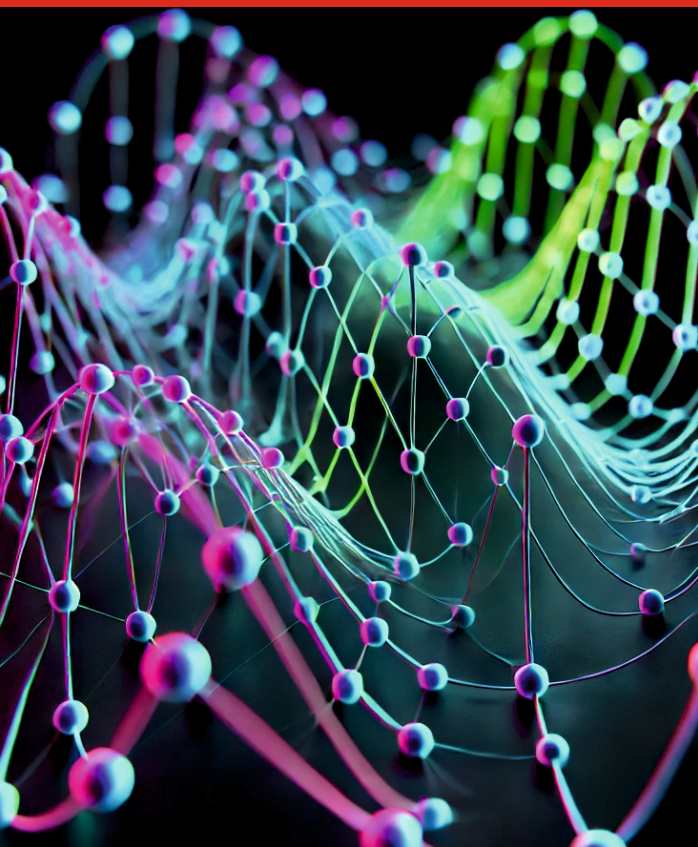


Ж. Р. ЮСУПОВ



МЕТРИЧЕСКИЕ ГРАФЫ С ПРОЗРАЧНЫМИ УЗЛАМИ: МОДЕЛЬ БЕЗОТРАЖАТЕЛЬНОГО ТРАНСПОРТА ЧАСТИЦ И ВОЛН В КВАНТОВЫХ СЕТЯХ



DIZAYN MARKET

**ТАШКЕНТСКИЙ
МЕЖДУНАРОДНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ КИМЁ**

Ж. Р. ЮСУПОВ

**МЕТРИЧЕСКИЕ ГРАФЫ
С ПРОЗРАЧНЫМИ УЗЛАМИ:
МОДЕЛЬ БЕЗОТРАЖАТЕЛЬНОГО
ТРАНСПОРТА ЧАСТИЦ И ВОЛН
В КВАНТОВЫХ СЕТЯХ**

«DIZAYN MARKET»

Ташкент – 2024

УДК 530.145.81
КБК 22.31
Ю 91

Юсупов, Ж.Р.

Метрические графы с прозрачными узлами: Модель безотражательного транспорта частиц и волн в квантовых сетях [Текст] / Ж.Р. Юсупов . – Ташкент: Dizayn market, 2024. – 168 с.

Рецензенты:

З.А. Собиров

– Университет точных и социальных наук, заведующий кафедрой Точных наук, д.ф.-м.н., доцент;

А.С. Матякубов

– Национальный университет Узбекистана, заведующий кафедрой Прикладной информатики и компьютерного анализа, д.ф.-м.н., доцент.

Монография посвящена исследованию искусственных граничных условий, задаваемых на узлах разветвленных сетеподобных структур, которые обеспечивают безотражательный переход волн через такие узлы. В исследовании разветвленные структуры моделируются при помощи метрического графа, а для вывода безотражательных граничных условий используются так называемые прозрачные граничные условия.

В основу монографии легла серия работ, выполненных под руководством д.ф.-м.н. Д.У. Матрасулова в сотрудничестве с проф. М. Эрхардтом из Вуппертальского университета.

Работа выполнена в рамках фундаментального гранта, финансируемого Агентством инновационного развития при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан (№ Ф-2021-440).

ISBN 978-9910-9246-2-0

© Ж.Р.Юсупов, 2024.

© «DIZAYN MARKET», 2024.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
ГЛАВА I. ДИНАМИКА ВОЛН И КВАЗИЧАСТИЦ В РАЗВЕТВЛЕННЫХ СТРУКТУРАХ.....	10
§1.1. Современное состояние исследований в области моделирования динамики волн на графах.....	10
§1.2. Основные понятия и обозначения в теории графов	12
§1.3. Прозрачные граничные условия для квантовых эволюционных уравнений.....	27
ГЛАВА II. ПРОЗРАЧНЫЕ КВАНТОВЫЕ ГРАФЫ.....	34
§2.1. Прозрачные граничные условия в квантовой механике.....	36
§2.2. Прозрачные квантовые графы.....	41
§2.3. Релятивистские квазичастицы в прозрачных квантовых графах.....	51
§2.4. Прозрачные граничные условия для уравнения Дирака на прямой.....	53
§2.5. Частицы Дирака в прозрачных квантовых графах	58
Вывод по главе.....	70
ГЛАВА III. МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ СОЛИТОНОВ В ПРОЗРАЧНЫХ СЕТЕПОДОБНЫХ СТРУКТУРАХ.....	72
§3.1. Прозрачные граничные условия для НЛУШ на прямой.....	74
§3.2. Прозрачные граничные условия для НЛУШ на метрических графах.....	78
§3.3. Моделирование векторных солитонов Манакова в прозрачных средах.....	86
§3.4. Прозрачные граничные условия для системы Манакова.....	89

§3.5. ПГУ для системы Манакова в разветвленных структурах.....	103
Вывод по главе	114
ГЛАВА IV. МОДЕЛЬ БЕЗОТРАЖАТЕЛЬНОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ $\mathcal{PT}$-СИММЕТРИЧНЫХ СОЛИТОНОВ В СЕТЕПОДОБНЫХ СТРУКТУРАХ.....	117
§4.1. Солитонные решения нелокального нелинейного уравнения Шрёдингера.....	119
§4.2. Прозрачные граничные условия для нелокального нелинейного уравнения Шрёдингера.....	121
§4.3. Нелокальное нелинейное уравнение Шредингера на звездообразном графе	134
Вывод по главе	145
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	147
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	149

ВВЕДЕНИЕ

Проводимые в мире за последние три десятилетия многочисленные научные и практические исследования направлены на разработку квантовых функциональных материалов низкой размерности и создание ресурсосберегающих электронных устройств на их основе. В связи с этим использование эффективных и реалистических моделей подобных материалов на основе квантово-механических волновых уравнений Шредингера, Дирака и Клейна-Гордона являются объектом интенсивных исследований в квантовой физике, квантовой информатике, оптике и физике конденсированных сред. В этой связи одной из важнейших в практическом плане задач математического моделирования является создание и применение к конкретным проблемам квантовых и оптоэлектронных технологий, эффективных алгоритмов для численного решения подобных квантово-механических волновых уравнений.

В настоящее время в мире изучение динамики квазичастиц, описываемых уравнениями Шредингера, Дирака и другими квантово-механическими волновыми уравнениями является одной из актуальных проблем современной квантовой оптики, квантовой информатики и физики конденсированных сред. При этом решение подобных уравнений на квантовых графах, особенно, в случае наличия $\mathcal{PT}$ -симметрии, играют важную роль в решении задач по моделированию динамики квазичастиц, возникающих в нанофизике, квантовой информатике и квантовых технологиях. В этом отношении нахождение аналитических и численных решений волновых уравнений на графах и изучение их свойств, а также математическое моделирование квантовых процессов эффективной передачи информации, заряда, энергии и спина, создание эффективных алгоритмов

численного вычисления и программного обеспечения представляют собой важный этап современных исследований.

В нашей стране особое внимание уделяется прикладной математике и теоретической физике, имеющим научное и практическое значение в таких фундаментальных науках, как физика систем низкой размерности, квантовая механика и нанофизика. В частности, особое внимание уделяется теоретическим исследованиям, и практическим разработкам с использованием математического моделирования и вычислительно-математических методов при решении задач квантовой физики систем низкой размерности, конденсированных сред и нанофизики. Важное значение имеет развитие теории аналитического и численного решения дифференциальных уравнений на графах.

В результате исследований, проведенных в мире по изучению динамики квазичастиц, описываемых при помощи уравнений Шрёдингера, Дирака и других квантово-механических волновых уравнений на метрических графах, получены ряд научных результатов, в том числе: были разработаны основы математической теории дифференциальных уравнений в частных производных на графах, представлено расширение теории для случая квантово-механических волновых уравнений, в результате исследований, проведенных в мире по изучению свойств квантовых графов, были обнаружены возможность явления квантового хаоса в них, переход решений волновых уравнений для двумерных (планарных) графов в решения для метрических графов, изучены также свойства релятивистских волновых уравнений на графах, были развиты различные аспекты теории квантовых графов, изучались свойства периодических квантовых графов, изучались различные математические свойства волновых уравнений на графах.

Понятие квантовых графов как сетеподобная структура квантовых нитей было введено в работах Экснера, Себы и Стовичек (P.Exner, P.Seba, P.Stovicek). Однако, первое применение графов для моделирования свободного

электрона в молекулах восходит к работам Паулинга (L.Pauling), Рюденберга (K.Ruedenberg), Шеппа (C.W.Scherr) и Александра (S.Alexander). Позже, Кострыкин (V.Kostykin) и Шрадер (R.Schrader) представили общий вид граничных условий, обеспечивающих само-сопряженность оператора Шрёдингера на графах. Недавно, такими авторами как Болте (J.Bolte), Харрисон (J.Harrison), Сабиров (K.K.Sabirov), Юсупов (J.R.Yusupov), Джуманазаров (D.Jumanazarov) и Матрасулов (D.U.Matrasulov), была изучена релятивистская квантовая механика, описываемая при помощи операторов Дирака и Боголюбова де Жена, на метрических графах. Хул (O.Hul), Баух (S.Bauch), Паконьски (P.Pakoński), Савытски (N.Savitsky), Зыжковски (K.Życzkowski) и Широ (L.Sirko) экспериментально реализовали квантовые графы при помощи оптических микроволновых сетей. Квантовые графы в контексте теории квантового хаоса и спектральной статистики были изучены Коттосом (T.Kottos), Смиланским (U.Smilansky), Гнутцманном (S.Gnutzmann), Болте (J.Bolte) и Харрисоном (J.Harrison). Спектральные свойства и сетеподобная структура периодических квантовых графов была изучена Экснером (P.Exner), Ковариком (H.Kovarik), Берколайко (G.Berkolaiko) и Кучментом (P.Kuchment).

Исследование прозрачных граничных условий впервые началось с решения задачи акустического волнового уравнения Энquistом (B.Engquist) и Майдой (A.Majda). Позже, понятие прозрачных граничных условий для других дифференциальных уравнений в частных производных параболического и гиперболического типа применялись Халперном (L.Halpern) и Софроновым (I.L.Sofronov). Прозрачные граничные условия для уравнения Шрёдингера и других волновых уравнений были ещё более глубоко изучены Арнольдом (A.Arnold), Эрхардтом (M.Ehrhardt), Антуаном (X.Antoine), Бессе (C.Besse), Шедле (A.Schädle), Клайном (P.Klein), Сумикрастом (L.Sumichrast), Фешченко (R.M.Feshchenko), Поповым (A.V.Popov), Петровым (P.Petrov), Джиангом (S.Jiang), Грингардом (L.Greengard). Ранее,

приближенные прозрачные граничные условия для линейного уравнения Шредингера были рассмотрены Шибатой (T.Shibata) и Куской (J.-P.Kuska).

Целью настоящего исследования является моделирование динамики квазичастиц в разветвленных квантовых структурах и выявление условий безотражательного транспорта. В частности, решаются такие задачи как моделирование управляемого квантового транспорта в разветвленных структурах низкой размерности, выявление условий для безотражательного транспорта квазичастиц в квантовых сетеподобных структурах, решение уравнений Шрёдингера и Дирака на квантовых графах с прозрачными граничными условиями, построение численных схем для моделирования процесса безотражательного транспорта частиц в сетеподобных структурах и разработка численных схем, алгоритмов для решения уравнений Шредингера и Дирака на графах с прозрачными граничными условиями. Для решения таких задач были использованы методы аналитического и численного решения уравнений Дирака и Шрёдингера на квантовых графах с прозрачными граничными условиями, заданными на узлах графа.

Нужно отметить, что использованный в работе подход является достаточно универсальным и вносит свой вклад в теорию нелинейных эволюционных уравнений на метрических графах. А практическая значимость полученных результатов следует из возможности их применения в моделировании оптических солитонов и эффективной передачи сигнала в разветвленных структурах, возникающих в современной оптоэлектронике, ИКТ, квантовых технологиях, и квантовых функциональных материалах низкой размерности, имеющих разветвленную структуру. Также, результаты могут иметь прямое применение к проблеме уменьшения потерь при передаче сигнала, информации и энергии в различных квантовых наноразмерных устройствах.

Монография состоит из вводной части, четырех глав и заключения. В первой главе приводятся основные понятия теории квантовых графов, а также прозрачных граничных условий. Вторая глава посвящена изучению квантовых графов с прозрачными граничными условиями на его узлах. Выводятся условия для безотражательного перехода волн, описываемых уравнением Шредингера, через узлы графа. В третьей главе рассматривается динамика солитонов в прозрачных нелинейных сетях, описываемых нелинейным уравнением Шрёдингера, а также динамика векторных солитонов, описываемых системой Манакова в таких сетях. В последней главе приводится результат исследования динамики $\mathcal{PT}$ -симметричных солитонов в сетеподобных структурах с прозрачными узлами, которая описывается нелокальным нелинейным уравнением Шредингера. И наконец, монография заканчивается заключительными выводами проведенных исследований.

ГЛАВА I

ДИНАМИКА ВОЛН И КВАЗИЧАСТИЦ В РАЗВЕТВЛЕННЫХ СТРУКТУРАХ

§1.1. Современное состояние исследований в области моделирования динамики волн на графах

Бурное развитие опто- и нано-электронных технологий в течение последних 10–12 лет сделало актуальной проблему моделирования динамики волн и квазичастиц в структурах низкой размерности, которые возникают в конденсированных и оптических средах. Поскольку во многих случаях подобные материалы имеют разветвлённые и сетеподобные структуры, то на первый план выходит вопрос о моделировании динамики волн и квантового транспорта в таких системах. Наиболее эффективным стал метод, основанный на использовании волновых уравнений на метрических графах [1-7], для описания динамики волн и квантового транспорта в разветвленных структурах низкой размерности. Под «графом» подразумевают систему (конечных или полу-бесконечных) отрезков (ребер), которые соединены друг с другом согласно некоторому правилу, которое называется «топологией» графа. Когда ребрам графа приписана длина, граф называется метрическим графом [1-4]. В рамках такого подхода описание динамики волн и частиц в разветвленных структурах сводится к решению того или иного волнового уравнения на графах, накладывая граничные условия на узлах графа, а также на концах ребер [1, 2, 8-10]. Если для квантово-механических волновых уравнений главным требованием при получении таких граничных условий является самосопряженность оператора Гамильтона [9, 10], то для нелинейных волновых уравнений подобные граничные условия на узлах выводятся на основе фундаментальных законов сохранения, таких как закон

сохранения энергии, импульса, потока и топологического заряда [11-20].

За последнюю декаду существенно возрос интерес к различным аспектам дифференциальных уравнений в частных производных на графах (см, например, статьи [11-17, 21-41] для обзора состояния в данной области и последних достижений). Очень важным, как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения вопросом в данном контексте является проблема перехода волн и частиц через узлы графа. Ряд попыток решить данную проблему в рамках подхода, основанного на использовании матрицы рассеяния, приводят к усложнениям, и не позволяют решить задачу об управляемом переходе через узлы. Например, выявление условий безотражательного перехода волн через узлы графа не представляется возможным в рамках подхода, основанного на матрице рассеяния. Поэтому разумным решением было бы сформулировать условия безотражательного перехода с помощью граничных условий на узлах. При таком подходе очень мощным инструментом для обеспечения безотражательного перехода через узлы графа могли бы служить так называемые «прозрачные граничные условия». Данное направление теории дифференциальных уравнений в частных производных получило свое начало еще в 70-х годах прошлого столетия в пионерских статьях [42-44], а позже стало одним из бурно развивающихся направлений современной математической физики и теории дифференциальных уравнений (см. работы [45-81]). Центральной идеей данного подхода является формулировка неких (искусственных) граничных условий для заданного дифференциального уравнения в частных производных таким образом, чтобы его решение в заданной области не отличалось от такового для всего пространства [49-53]. Явный вид получаемых таким образом граничных условий намного сложнее (по сравнению со стандартными граничными условиями типа Дирихле, Неймана или Робина) и имеет вид интегро-дифференциального уравнения, что

сильно усложняет их численную имплементацию при численном решении самого уравнения [50,64]. Следует отметить, что, в силу таких факторов, данная узкая тематика теории дифференциальных уравнений и математического моделирования оставалась абстрактной темой, далекой от практических применений. Однако, недавние работы, где прозрачные граничные условия комбинировались с теорией квантовых графов [82-84], показали эффективность данного подхода для решения задачи об управляемом квантовом транспорте в разветвленных структурах. Примечательная сторона данного подхода состоит в том, что в случае его применения к квантовым графам удастся выявить некие условия в терминах параметров задачи, которые обеспечивают эквивалентность обычных граничных условий на узлах графа, таких как непрерывности решения с весовыми коэффициентами и правила Кирхгофа, к прозрачным граничным условиям, благодаря чему становится возможным избежать вышеупомянутые трудности при численном решении.

§1.2. Основные понятия и обозначения в теории графов

Прежде чем изложить детали волновых уравнений на графах, необходимо представить основы теории графов. В этом параграфе мы изложим это следуя монографии [1].

Согласно общепринятому определению, граф Γ состоит из конечного или счётно-бесконечного множества вершин $\mathcal{V} = \{v_i\}$ и множества ребер $\mathcal{E} = \{e_j\}$, соединяющих эти вершины. Ребра не имеют направления. Как мы увидим далее, в случае квантового графа обычно их можно рассматривать без петель и многократных ребер, поскольку, если они и имеются, их можно разбить на части, введя новые промежуточные вершины. Таким образом, мы будем предполагать, что петли и многократные ребра между вершинами отсутствуют. Мы будем использовать обозначения $E := |\mathcal{E}|$ и $V := |\mathcal{V}|$ для количества ребер и вершин соответственно. Обозначение $v \in$

e будет означать, что v – вершина ребра e . Две вершины u и v назовем смежными (обозначим как $u \sim v$), если существует соединяющее их ребро. Граф Γ полностью определяется матрицей смежности A_Γ размера $|V| \times |V|$. В простейшем случае, когда нет петель или многократных ребер, элементы матрицы смежности имеют вид [1]

$$A_{u,v} = \begin{cases} 1, & \text{если } u \sim v, \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (1.1)$$

В более общем виде можно записать

$$A_{u,v} = |\{e \in E: u \in e, v \in e\}|. \quad (1.2)$$

Валентность d_u вершины u – это количество исходящих из нее ребер, $d_u = \sum_{v \in V} A_{u,v}$. Предполагается, что все валентности конечны (локальная ограниченность графа).

Обозначим через D_Γ матрицу валентностей, т.е. диагональная $|V| \times |V|$ матрица с диагональными элементами d_v :

$$D_{u,v} = d_v \delta_{u,v}, \quad (1.3)$$

где $\delta_{u,v}$ – символ Кронекера

$$\delta_{u,v} = \begin{cases} 1, & \text{если } u = v, \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Иногда возникает необходимость рассмотреть направленные ребра. Граф называется направленным графом или диграфом, если каждому его ребру задано направление. Другими словами, каждое ребро имеет одно начало и одну конечную вершину. Направленные ребра будем называть связями. Множество всех связей обозначается через $\mathcal{B}$. Мы будем использовать сокращенное обозначение $B := |\mathcal{B}|$ для общего числа связей в направленном графе Γ . Начало и

конечные точки связи задаются через функции $o: \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{V}$ и $t: \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{V}$, то есть связь b начинается в вершине $o(b)$ и заканчивается в $t(b)$.

Определим набор входящих связей в вершине v как набор связей, удовлетворяющих $t(b) = v$. Если $o(b) = v$, связь b называется исходящей в вершине v . Количество входящих (соответственно исходящих) связей в вершине v называется входящей (соответственно исходящей) валентностью v и обозначается d_v^i (соотв. d_v^o). Ясно, что $d_v^o + d_v^i = d_v$.

Чаще всего в наших соображениях ненаправленный граф будет рассматриваться как диграф, если каждому ребру e присвоить две связи b и $\bar{b}$ с противоположными направлениями, как показано на Рис. 1.1. Полученный направленный граф обозначим через $\tilde{\Gamma}$.

Граф $\tilde{\Gamma}$ удовлетворяет условию равенства количества входящих и исходящих связей в каждой вершине v : $d_v^o = d_v^i = d_v/2$ (в этом случае будет использоваться обозначение $\bar{d}_v := d_v/2$). Множество связей $\tilde{\Gamma}$ симметрично в том смысле, что $b \in \mathcal{B}$ тогда и только тогда, когда существует другая связь $\bar{b} \in \mathcal{B}$ такая, что $o(b) = t(\bar{b})$ и $t(b) = o(\bar{b})$. Связь $\bar{b}$ называется обратной b . Операция обратной рефлексивна: $\bar{\bar{b}} = b$.



Рис. 1.1. Ненаправленный граф Γ (слева) и соответствующий направленный граф $\tilde{\Gamma}$, полученный дублированием связей (справа). (Рис.2 в [1])

Будем рассматривать графы с двух разных точек зрения. В первом, стандартном в теории графов и комбинаторике, ребра рассматриваются как отношения между вершинами, а не какие-либо физические или геометрические связи. Чтобы подчеркнуть это, мы будем использовать термин дискретный или комбинаторный граф в таких случаях. С другой стороны, в большинстве случаев графы будут рассматриваться как одномерные комплексы, и, таким образом, ребра будут рассматриваться как одномерные сегменты (или их можно рассматривать как физические «провода»). Такие графы будут снабжены дополнительными структурами, которые сделают их метрическими или квантовыми графами.

Если рассматривать графы как одномерные комплексы, что мы часто и будем делать, существует естественная проекция $\pi: \tilde{\Gamma} \rightarrow \Gamma$, которая отображает точки x_1 и x_2 двух связей, возникающих из одной и той же точки x ребра, в точку x (см. Рис. 1.2.).

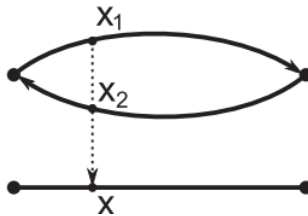


Рис. 1.2. Проекция $\pi: \tilde{\Gamma} \rightarrow \Gamma$, изображенная на одном ребре.
(Рис.3 в [1])

Метрические графы

Выше мы имели дело с графами, рассматриваемыми как дискретные (комбинаторные) объекты. Здесь мы добавляем структуру, которая снабжает Γ топологией и метрикой. Грубо говоря, теперь нужно будет представить ребра Γ не как абстрактные отношения между вершинами, а как физические «провода», соединяющие их.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1.1. Граф Γ называется метрическим графом, если каждой связи (т.е. направленному ребру) b присваивается положительная длина $L_b \in (0, \infty)$. Нам часто нужно будет рассматривать рёбра бесконечной длины. Такое ребро имеет только одну вершину (другой конец уходит в «бесконечность») и оно будет называться отводом (выходом);

1) длины связей, которые являются обратными друг друга, считаются равными: $L_b = L_{\bar{b}}$, и, таким образом, длина L_e ребра e также определяется;

2) каждой связи присваивается координата $x_b \in [0, L_b]$, возрастающая в направлении связи;

3) соотношение $x_{\bar{b}} = L_b - x_b$ выполняется между координатами на взаимно обратных связях (другими словами, $x_{\bar{b}}$ и $L_b - x_b$ отображаются в одну и ту же точку на e посредством проекции π , см. Рис. 1.2.).

В большинстве случаев, когда это не приводит к путанице, мы будем опускать индекс в координате x_b и обозначим его через x .

Часто важно рассматривать соотношение между длинами разных ребер. В некоторых обсуждаемых проблемах (например, квантовый хаос или обратные задачи) помогает, когда длины рационально независимы. В некоторых других случаях, например, при попытке связать спектры квантовых и дискретных графов, происходит обратное, и можно выиграть от предположения, что все длины одинаковы. Это подтверждает следующее определение:

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1.2. Метрический граф Γ называется равносторонним, если длины всех его связей (то есть ребер) равны: $L_b \equiv L$.

Представленная структура метрического графа позволяет интерпретировать граф Γ как топологическое пространство, которое представляет собой объединение всех ребер, причем концы ребер соответствуют одной и той же вершине v .

Заметим, что мы не предполагаем, что граф каким-либо образом вложен в евклидово пространство или риманово многообразие. В некоторых приложениях такое естественное

встраивание действительно существует (например, при моделировании цепей из квантовых проводов, углеродных нанотрубок или фотонных кристаллов), и в таких случаях координата вдоль ребра обычно является длиной индуцированной дуги. В некоторых других приложениях (например, в квантовом хаосе) граф не нужно никуда встраивать, и его можно рассматривать как абстрактный комплекс.

Как следует из названия, любой метрический граф Γ можно снабдить естественной метрикой. Если последовательность ребер $\{e_j\}_j^M = 1$ образует путь, его длина определяется как $\sum L_j$. Для двух вершин v и w расстояние $\rho(v, w)$ определяется как минимальная длина пути, соединяющего их. Поскольку вдоль каждого ребра расстояние определяется координатой x , легко определить расстояние $\rho(x, y)$ между двумя точками x и y графа, которые не обязательно являются вершинами.

В установке метрического или квантового графа мы всегда будем предполагать, что валентность каждой вершины конечна и положительна. В частности, не рассматриваются вершины, не смежные ни одному ребру.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.3. Если метрический граф имеет несколько ребер, соединяющих две вершины, или петлю в вершине, то можно ввести дополнительные вершины внутри параллельных ребер и внутри петли. Эти вершины разбивают соответствующие ребра на более мелкие части и устраняют петли и многократность (см. Рис. 1.3.). Таким образом, в ситуациях метрического (и квантового) графа обычно можно предполагать без ограничения общности отсутствие кратных ребер и петель.



Рис. 1.3. Разбивка многократных ребер и петель: граф с многократными ребрами и петлей (слева) и тот же граф после их разбивки (справа). (Рис.4 в [1])

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1.4. Мы будем называть метрический граф бесконечным, если у него бесконечно много вершин (то есть бесконечно много ребер). В противном случае граф назовем конечным. Конечный граф, все ребра которого имеют конечную длину, назовем компактным.

Компактный граф так же компактен как топологическое пространство. Следует заметить, что не всякий конечный граф компактен. В самом деле, конечный граф, хотя и имеет конечное число ребер, может иметь некоторые ребра бесконечной длины и, следовательно, быть некомпактным.

Как мы уже упоминали, небольшая особенность возникает при наличии ребер бесконечной длины. В этом случае обычно предполагается, что каждое из этих ребер имеет только одну вершину и продолжается до бесконечности в другом направлении. Таким образом, такой граф можно представить себе, как граф с ребрами конечной длины, с одним или несколькими дополнительными бесконечными «отводами», прикрепленными к некоторым вершинам. Такие графы возникают естественным образом, например, в теории рассеяния.

Следует заметить, что точки метрического графа Γ являются не только его вершинами, но и всеми промежуточными точками x на ребрах. Таким образом, когда мы говорим о функциях $f(x)$ на Γ , мы считаем их определенными вдоль ребер (а не только на вершинах, как в дискретных моделях). В частности, можно говорить о непрерывных функциях и, таким образом, определить стандартное пространство непрерывных функций $C(\Gamma)$. Наличие координаты x вдоль ребер позволяет естественным образом определить меру Лебега dx на графе. Имея эту меру, можно определить некоторые другие стандартные функциональные пространства на Γ . Напомним сначала обозначение $H^k(e)$ для пространства Соболева функций на отрезке e , у которых все производные по распределению до порядка k принадлежат $L^2(e)$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1.5.

(1) Пространство $L^2(\Gamma)$ на Γ состоит из измеримых и квадратно интегрируемых функций на каждом ребре e таких, что

$$\|f\|_{L^2(\Gamma)}^2 := \sum_{e \in \mathcal{E}} \|f\|_{L^2(e)}^2 < \infty. \quad (1.4)$$

Другими словами, $L^2(\Gamma)$ – ортогональная прямая сумма пространств $L^2(e)$.

(2) Пространство Соболева $H^1(\Gamma)$ состоит из всех непрерывных функций на Γ , принадлежащих $H^1(e)$ для каждого ребра e и таких, что

$$\|f\|_{H^1(\Gamma)}^2 := \sum_{e \in \mathcal{E}} \|f\|_{H^1(e)}^2 < \infty. \quad (1.5)$$

Заметим, что условия конечности сумм в этом определении относятся только для бесконечных графов.

Условие непрерывности, наложенное на функции из пространства Соболева $H^1(\Gamma)$, означает, что любая функция f из этого пространства принимает одно и то же значение в вершине v на всех ребрах, смежных с v , и, таким образом, $f(v)$ определена однозначно. Это естественное условие для одномерных H^1 -функций, которые, как известно, непрерывны в стандартной одномерной постановке.

Дифференциальные операторы на метрических графах Квантовые графы

Метрический граф становится квантовым после снабжения дополнительной структурой: назначением дифференциального (или иногда более общего) оператора на Γ . Этот оператор часто называют гамильтонианом. В большинстве случаев, но не всегда, требуется, чтобы гамильтониан был самосопряженным. При изучении квантовых графов наиболее часто используемым оператором

является отрицательная вторая производная, действующая на каждом ребре:

$$f(x) \mapsto -\frac{d^2 f}{dx^2}. \quad (1.6)$$

Здесь, как и раньше, x – это координата вдоль ребра. Более общий оператор Шрёдингера

$$f(x) \mapsto -\frac{d^2 f}{dx^2} + V(x)f(x), \quad (1.7)$$

где $V(x)$ – электрический потенциал, тоже очень распространен.

Обратите внимание, что для обоих этих операторов направление ребра не имеет значения. Но это утверждение уже будет не верным, если кто-то хочет включить производные члены первого порядка, например магнитные потенциалы, или рассмотреть операторы первого порядка, такие как d/dx . В таких случаях нужно считать граф направленным и рассматривать связи b (направленные ребра) и соответствующие координаты x_b . Тогда оператор Шрёдингера с электрическим потенциалом V и магнитным потенциалом A можно определить как

$$f(x_b) \mapsto \left(\frac{1}{i} \frac{d}{dx_b} - A_b(x_b) \right)^2 f(x_b) + V(x_b)f(x_b). \quad (1.8)$$

Обратите внимание, что A – векторное поле (в одном измерении); другими словами, он меняет знак при изменении направления ребра: $A_b(x_b) = -A_b(x_b)$ (припомним, что $x_b = L_b - x_b$).

Прежде чем обсуждать общие условия вершин, мы опишем наиболее часто используемый пример. Они называются «условиями Неймана» или «Кирхгофа» или даже «стандартными» условиями:

$$\left\{ \begin{array}{l} f(x) \text{ непрерывна на } \Gamma \\ \text{и} \\ \text{в каждой вершине } v \text{ имеем } \sum_{e \in E_v} \frac{df}{dx_e}(v) = 0. \end{array} \right. \quad (1.9)$$

Здесь сумма берется по множеству E_v всех ребер e , инцидентных вершине v , и предполагается, что производные взяты в направлениях от вершины (т.е. в ребро), которые мы будем называть исходящими направлениями. Мы будем придерживаться этого предположения всякий раз, когда будут применены такие условия. Первое условие в (1.9) называется условием непрерывности, а второе – условием сохранения тока.

Более подходящим названием для (1.9) является условие Неймана (иногда используется название условия Неймана-Кирхгофа). Действительно, на «свободных концах» (вершинах с валентностью равной 1) оно фактически превращается в условие Неймана. Более того, как граничное условие Неймана для оператора Лапласа – это естественно. Это означает, что область определения квадратичной формы соответствующего оператора не требует каких-либо условий на функцию, кроме того, что она находится в $H^1(\Gamma)$.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.6. Когда граничные условия (1.9) выполняются на вершине с валентностью 2, вершину можно исключить, объединив два смежных ребра в одно непрерывное ребро. Тогда (1.9) в точности гарантирует совпадение смежных H^2 -частей функции в одну H^2 -функцию на полученном длинном ребре: условие непрерывности обеспечивает непрерывность, а условие сохранения тока обеспечивает непрерывность первой производной.

ПРИМЕР 1.7. (Спектр компактного звездообразного графа Неймана). Рассмотрим простейший нетривиальный граф – звездообразный граф. Зададим условия Неймана на каждой вершине графа и изучим спектр лапласиана (1.6). В следующих разделах будет показано, что при этих условиях

оператор является самосопряженным и неотрицательным, а его спектр дискретен.

Принимая эти свойства как заданные, уравнение для нахождения собственных значений можно записать в виде

$$-\frac{d^2 f}{dx_b^2} = k^2 f(x_b), \quad k \in \mathbb{R}. \quad (1.10)$$

Рассмотрим функцию f на связи b , идущую от периферии к центральной вершине. В периферийной вершине выполняется условие Неймана $f'(0) = 0$; вместе с уравнением (1.10) это означает, что на связи b собственная функция f должна иметь вид $f(x_b) = A_b \cos(kx_b)$. Исходящая производная функции $f(x_b)$ в центральной вершине $x_b = L_b$ равна $A_b k \sin(kL_b)$. В целом условия (1.9) в центральной вершине принимают вид

$$\begin{cases} A_1 \cos(kL_1) = A_2 \cos(kL_2) = \dots = C, \\ \sum_{b=1}^E A_b k \sin(kL_b) = 0. \end{cases} \quad (1.11)$$

Разделив второе уравнение на C , мы получим, что k^2 является собственным значением, если

$$F(k) := \sum_{b=1}^E \tan(kL_b) = 0. \quad (1.12)$$

Случай, когда $C = 0$ требует отдельного рассмотрения, которое приводит к выводу, что если значение k является полюсом для n из E слагаемых в $F(k)$, то k^2 является собственным значением кратности $n - 1$. В частности, если L_b несоизмеримы (т.е. $L_b/L_{b'} \notin \mathbb{Q}$), тогда все собственные значения звездообразного графа однозначны и k^2 является собственным значением тогда и только тогда, когда $F(k) = 0$.

Вершинные условия. Конечные графы

Теперь рассмотрим, какие граничные условия можно добавить к дифференциальному выражению (1.6), чтобы

создать самосопряженный оператор. Все, что мы здесь сделаем, без изменений применимо к случаю оператора (1.7) с соответствующими условиями на электрический потенциал V (например, непрерывный или локально L_2).

Как упоминалось выше, функции из области определения оператора принадлежат пространству Соболева $H^2(e)$ на каждом ребре e . Тогда из стандартной теоремы Соболева о следе (см., например, [85]) следует, что $f \in H^2(e)$ и ее первая производная имеют правильно определенные значения на концах ребра e . Следовательно, условия вершины могут включать только значения f и df/dx в вершине v . Можно рассматривать вершинные условия принимающие значения в разных вершинах. Например, условие периодичности для функции f на отрезке $[0, 1]$ делает именно это: $f(0) = f(1)$, в котором участвуют две вершины. Однако в данный момент мы будем иметь дело только с локальными условиями вершины, то есть с теми, которые принимают значения функций и их производных в одной вершине одновременно.

Для простоты рассмотрения мы начнем со случая конечных графов и будем иметь дело с бесконечными графами в разделе ниже. То есть мы предполагаем, что количество ребер $E = |E|$ и количество вершин $V = |V|$ конечны. Ребра по-прежнему могут иметь бесконечную длину.

Если нас интересуют условия локальных вершин, когда разные вершины не взаимодействуют, достаточно сконцентрироваться на одном соединении d ребер в вершине v . Произвольный граф локально (то есть около вершины) выглядит как звездообразный граф. Вот почему квантовые звездообразные графы часто становятся предметом изучения.

Сначала введем некоторые обозначения. Для H^2 -функции f , определенной вдоль ребер звездообразного графа, обозначим через $F(v)$ вектор-столбец

$$F(v) := (f_1(v), \dots, f_d(v))^t = \begin{pmatrix} f_1(v) \\ \dots \\ f_d(v) \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

значений в вершине v , которые функция f принимает на ребрах, инцидентных v (например, если f непрерывна, все эти значения будут одинаковыми).

Аналогично,

$$F'(v) := (f_1'(v), \dots, f_d'(v))^t = \begin{pmatrix} f_1'(v) \\ \dots \\ f_d(v) \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

– вектор-столбец значений производных функции f , взятых вдоль этих ребер в исходящих направлениях в точке v .

Поскольку $\mathcal{H}$ действует как оператор второго порядка на каждом ребре, необходимо установить два условия для каждого ребра. Следовательно, в каждой вершине v количество условий совпадает с валентностью вершины d_v . Поскольку для функций из H^2 на каждом ребре условия могут включать только граничные значения функции и ее производной, наиболее общая форма такого (однородного) условия будет

$$A_v F(v) + B_v F'(v) = 0. \quad (1.15)$$

Здесь A_v и B_v – $(d_v \times d_v)$ – матрицы. Чтобы гарантировать достаточное количество независимых условий (равное валентности вершины d_v), ранг $d_v \times 2d_v$ -матрицы (A_v, B_v) должен быть равен d_v , т.е. быть максимальным.

В следующей теореме даются различные эквивалентные описания всех возможных условий самосопряженных вершин, которые могут быть полезны в различных обстоятельствах.

ТЕОРЕМА 1.8. Пусть Γ – метрический граф с конечным числом ребер. Рассмотрим оператор $\mathcal{H}$, действующий как $-\frac{d^2}{dx_e^2}$ на каждом ребре e , с областью определения, состоящей из функций, принадлежащих $\tilde{H}^2(\Gamma)$, и удовлетворяющих некоторым локальным условиям вершин, включающим значения функций и их производных на вершинах. Оператор

является самосопряженным тогда и только тогда, когда условия вершины могут быть записаны в одной (и, следовательно, любой) из следующих трех форм:

А: Для каждой вершины v с валентностью d_v существуют $d_v \times d_v$ -матрицы A_v и B_v такие, что

(1.16) $d_v \times 2d_v$ -матрица $(A_v \ B_v)$ имеет максимальный ранг,

(1.17) матрица $A_v B_v^*$ самосопряженная, а граничные значения f удовлетворяют

$$(1.18) \ A_v F(v) + B_v F(v) = 0.$$

В: для каждой вершины v с валентностью d_v существует унитарная $d_v \times d_v$ -матрица U_v такая, что граничные значения f удовлетворяют

$$(1.19) \ i(U_v - \mathbb{I})F(v) + (U_v + \mathbb{I})F'(v) = 0,$$

где $\mathbb{I}$ – единичная матрица размера $d_v \times d_v$.

С: для каждой вершины v с валентностью d_v существует три ортогональных (и взаимно ортогональных) проектора $P_{D,v}, P_{N,v}$ и $P_{R,v}$: $\mathbb{I} = P_{D,v} + P_{N,v}$ (один или два проектора могут быть нулевыми), действующий в $\mathbb{C}^{d_v}$, и обратимый самосопряженный оператор Λ_v , действующий в подпространстве $P_{R,v}\mathbb{C}^{d_v}$, такой, что граничные значения f удовлетворяют

$$\begin{aligned} P_{D,v}F(v) &= 0 && \text{«Часть Дирихле»,} \\ P_{N,v}F(v) &= 0 && \text{«Часть Неймана»,} \\ P_{R,v}F(v) &= \Lambda_v P_{R,v}F(v) && \text{«Робиновская часть».} \end{aligned} \tag{1.20}$$

Неограниченные графы

Теперь мы позволим количеству вершин и ребер метрического графа Γ быть (счетно) бесконечным (необходимо помнить, что каждая степень вершины предполагается конечной). Наша цель – определить самосопряженный оператор $\mathcal{H}$ на Γ аналогично тому, как это используется для конечных графов. Другими словами, $\mathcal{H}$

должна действовать как (отрицательная) вторая производная вдоль каждого ребра, а функции из его области определения должны удовлетворять (теперь бесконечно много) вершинным условиям (1.15) или эквивалентно (1.20). Это превратило бы метрический граф Γ в квантовый граф. Однако, если не наложены дополнительные ограничения на условия графа и вершины, ситуация может стать более сложной, чем в случае конечного графа. Другими словами, оператор, определенный на $D(\Gamma)$, не является по существу самосопряженным. С другой стороны, если посмотреть на естественно возникающие бесконечные графы, можно заметить, что во многих случаях существует группа автоморфизмов, действующая на граф, такая, что пространство орбит (которое само по себе является графом) компактно. Так обстоит дело, например, с периодическими графами. Нам не нужна именно однородность, а скорее, чтобы геометрия не менялась кардинально по всему графу. Предположения, которые мы вводим ниже, отражают эту идею и охватывают все случаи, упомянутые выше. Это также позволяет установить хорошие свойства соответствующих гамильтонианов.

Нелокальные вершинные условия

Обсуждение условий разделения приводит к пониманию того, что вся топология квантового графа фактически закодирована только в условиях вершин. В частности, можно отождествить все вершины квантового графа в одну «супервершину» v_0 , так что граф станет просто «розой» (или «букетом») из нескольких лепестков (каждое ребро изгибается в петлю, см. Рис. 1.4), и все условия вершины записываются в этой единственной вершине. Если начать с некоторого особого типа условий вершины, например условий Неймана-Кирхгофа, эта процедура может не сохранить тип. С другой стороны, если нужно работать с наиболее общими условиями вершин, то можно также предположить, что граф – это просто букет из нескольких

петель в одной вершине. Это также показывает, что нелокальные условия можно превратить в локальные в этой единственной «супервершине», и, таким образом, описание самосопряженных локальных условий распространяется и на нелокальные условия.

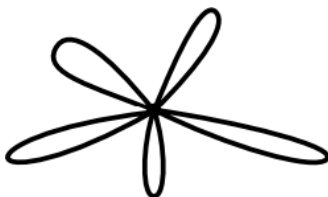


Рис. 1.4. Граф Γ превратился в единую «розу». (Рис.7 в [1])

§1.3. Прозрачные граничные условия для квантовых эволюционных уравнений

Рассмотрим уравнение Шредингера, заданное в виде [65]

$$i\partial_t u = -\partial_x^2 u + V(x, t)u, \quad x \in \mathbb{R}, t > 0, \quad (1.21)$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x, t) = 0,$$

$$u(x, 0) = u^I(x),$$

где V обозначает данный вещественный потенциал. Мы предполагаем, что начальные данные имеют компактный носитель, т.е. $\text{supp}(u^I) \subset [x_l, x_r]$. Кроме того, мы предполагаем, что V постоянна вне интервала $[x_l, x_r]$, т.е. $V(x) = V_l$ для $x < x_l$, $V(x) = V_r$ для $x > x_r$.

Уравнение Шредингера также является односторонним приближением низшего порядка (параксиальное волновое уравнение) к уравнению Гельмгольца и называется уравнением Френеля в оптике [87].

Решение уравнения (1.21) определено на неограниченной области $\Omega = \{(x, t) \in \mathcal{R} \times \mathcal{R}^+\}$. Если кто-то хочет решить такую задачу эволюции для всего пространства численно, то необходимо ограничить вычислительную (внутреннюю) область $\Omega_{\text{int}} = \{(x, t) \in]x_l, x_r[\times \mathcal{R}^+\}$, введя искусственные граничные условия или поглощающие слои [47].

Отметим, что в некоторых случаях исходная задача во всем пространстве может быть преобразована в дифференциальное уравнение в конечной области. Однако этот метод преобразования координат ограничен частными случаями и приводит к довольно сложным дифференциальным уравнениям. Этот метод был введен Грошем и Орзагом в [88] и применен к уравнению Шрёдингера Ладусером в [89].

Искусственные граничные условия строятся с целью аппроксимировать точное решение задачи для всего пространства, ограниченное областью Ω_{int} . Такие граничные условия называются поглощающими граничными условиями, если они приводят к корректной начально-краевой задаче (НКЗ), в которой некоторая «энергия» поглощается на границе. Если это приближенное решение действительно совпадает на Ω_{int} с точным решением задачи на всем пространстве, эти граничные условия (ГУ) называют прозрачными граничными условиями (ПГУ). Хотя ПГУ для уравнения Шрёдингера нелокальны во времени (и пространстве для многомерных случаев), часто желательно построить ПГУ, которые являются локальными в пространстве и/или времени, чтобы обеспечить эффективную численную реализацию [48, 51].

Отметим, что ключевые идеи, представленные здесь для уравнения Шрёдингера, также могут быть обобщены на другие типы дифференциальных уравнений в частных производных, такие как параболические задачи, где ПГУ имеют аналогичную форму [61].

Прозрачные граничные условия для уравнения Шрёдингера

Положим $\mathcal{R}^\pm = \{\pm x > 0\}$ и $\mathcal{R}_0^+ = \{x \geq 0\}$. Хорошо известно, что (1.21) корректно в $L^2(\mathcal{R})$ (см., например, [91]):

ТЕОРЕМА 1.9. Пусть $u^I \in L^2(\mathcal{R})$ и $V \in C([0, \infty[, L^\infty(\mathcal{R}))$. Тогда система (1.21) имеет единственное решение $u \in C(\mathcal{R}_0^+, L^2(\mathcal{R}))$. Причем сохраняется «масса», т.е.

$$\|u(t)\|_{L^2(\mathcal{R})} = \|u^I\|_{L^2(\mathcal{R})}, \forall t \geq 0.$$

Далее приведем различные способы получения прозрачных граничных условий (ПГУ). Начнем с классического вывода непрерывных ПГУ для начально-краевой задачи (НКЗ) (1.21) и дадим переформулировку условия полюса. Во-вторых, мы имитируем эту процедуру для дискретного по времени уравнения Шрёдингера. Таким образом, получаем дискретные по времени ПГУ. В-третьих, мы рассмотрим пространственно-дискретные ПГУ и, наконец, рассмотрим полностью дискретные ПГУ.

Непрерывные прозрачные граничные условия

Непрерывные ПГУ для уравнения Шредингера (1.21) были независимо получены несколькими авторами из различных областей приложений и такие ПГУ нелокальны по t и связывают $\partial_x v(x_{l,r}, t)$ с $v(x_{l,r}, t)$ [65]. В качестве отображения Дирихле-Неймана (Д-Н) они имеют вид

$$\partial_n v(x, t) = -\frac{e^{-\frac{\pi i}{4}}}{\sqrt{\pi}} e^{-iV_{l,r}t} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{v(x, \tau) e^{iV_{l,r}\tau}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau \text{ при } x = x_l, x_r, \quad (1.22)$$

где n обозначает внешне единичный вектор нормали в точках x_l, x_r .

ЗАМЕЧАНИЕ 1.10. Поскольку уравнение Шредингера имеет (формально) аналогичную структуру, что и уравнение теплопроводности, аналогичные отображения «Дирихле-

Неймана» – отображения для уравнения теплопроводности были уже получены Карславом и Джегером в 1959 г. [91].

Эти граничные условия могут быть получены из уравнения (1.21) следующим образом: с разложением $L^2(\mathcal{R}) = L^2(\Omega) \oplus L^2(\Omega_r \cup \Omega_l)$ при $\Omega =]x_l, x_r[, \Omega_l =]\infty, x_l]$ и $\Omega_r = [x_r, \infty[$, уравнение (1.21) эквивалентно связанной системе

$$\begin{cases} (i\partial_t + \partial_x^2)v = V(x,t)v, & (x,t) \in \Omega \times \mathcal{R}^+, \\ \partial_x v(x,t) = \partial_x w(x,t), & x = x_{l,r}, t > 0, \\ v(x,0) = u^l(x), & x \in \Omega, \end{cases} \quad (1.23)$$

$$\begin{cases} (i\partial_t + \partial_x^2)w = V_{l,r}w, & (x,t) \in (\Omega_l \cup \Omega_r) \times \mathcal{R}^+, \\ w(x,t) = v(x,t), & x = x_{l,r}, t > 0, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} w(x,t) = 0, & t > 0, \\ w(x,0) = 0, & x \in \Omega_l \cup \Omega_r. \end{cases} \quad (1.24)$$

Рис. 1.5. объясняет это разделение пространственной области $\mathcal{R}$ на внутренние и внешние задачи и показывает основную идею построения ПГУ.



Рис. 1.5. Основная идея построения ПГУ: разделение пространственной области на внутренние и внешние задачи.
(Рис.1 в [65])

Затем применим преобразование Лапласа по t к внешним задачам (1.24). Преобразование Лапласа по временной переменной t определяется выражением

$$\widehat{w}(s) := \mathcal{L}(w)(s) := \int_{\mathcal{R}^+} w(t) e^{-st} dt, \quad (1.25)$$

где s – частотная переменная.

Далее мы сосредоточимся на выводе правого ПГУ в точке x_r . Преобразование Лапласа для (1.24) (на Ω_r) имеет вид

$$is\widehat{w} + \partial_x^2 \widehat{w} = V_r \widehat{w}, \quad x \in \Omega_r.$$

Решение этого обыкновенного дифференциального уравнения можно записать как

$$\widehat{w}(x, s) = A^+(s) e^{+\sqrt{-is+V_r}x} + A^-(s) e^{-\sqrt{-is+V_r}x}, \quad x > x_r,$$

где ветвь квадратного корня $+\sqrt{}$ взята так, что действительная часть положительна. Однако, поскольку решение должно находиться в $L^2(\Omega_r)$, коэффициент A^+ должен обращаться в нуль. Использование данных Дирихле на искусственной границе дает

$$\widehat{w}(x, s) = e^{-\sqrt{-is+V_r}(x-x_r)} \mathcal{L}(v(x_r, \cdot))(s),$$

и поэтому

$$\partial_x \widehat{w}(x, s)|_{x=x_r} = -\sqrt{-is+V_r} \widehat{w}(x, s)|_{x=x_r}.$$

Аналогичное условие на левой границе имеет вид

$$-\partial_x \widehat{w}(x, s)|_{x=x_l} = -\sqrt{-is+V_l} \widehat{w}(x, s)|_{x=x_l}.$$

Подставляя его обратное преобразование Лапласа в (2.2), получаем

$$(i\partial_t + \partial_x^2) v = V(x, t)v, \quad (x, t) \in \Omega \times \mathcal{R}^+,$$

$$\begin{aligned}
\partial_n v(x, t) &= \mathcal{L}^{-1} \left(-\sqrt{-i \cdot + V_{l,r}} \hat{v}(x, \cdot) \right) (t) \\
&= \int_0^t f(t - \tau) v(x, \tau) d\tau, \quad x = x_{l,r}, \quad t > 0, \\
v(x, 0) &= u^I(x), \quad x \in \Omega,
\end{aligned}$$

где

$$\mathcal{L}(f)(s) = F(s) = -\sqrt{-is + V_{l,r}}$$

и ∂_n – направленная наружу нормальная производная. По построению u совпадает с v на Ω .

Для постоянного потенциала $V = V_r$ уравнение Шрёдингера можно формально разложить на левую и правую бегущие волны (см. [65]):

$$\left(\partial_x - e^{-i\frac{\pi}{4} + \sqrt{\partial_t + iV_r}} \right) \left(\partial_x + e^{-i\frac{\pi}{4} + \sqrt{\partial_t + iV_r}} \right) u = 0, \quad x > x_r.$$

В беспотенциальном случае ($V_r = 0$) член $\sqrt{\partial_t} = \partial_t^{1/2}$ можно интерпретировать как дробную $1/2$ -производную по времени. Допуская при $x = x_r$ только уходящие волны, формально восстанавливаются правые ПГУ (1.22).

ЗАМЕЧАНИЕ 1.11 (Граничное условие импеданса). Простой расчет показывает, что (2.22) эквивалентно граничному условию импеданса [92]

$$u(x, t) = -\frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\partial_n u(x, \tau) e^{-iV_{l,r}(t-\tau)}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau, \quad \text{при } x = x_{l,r}, \quad (1.26)$$

в виде отображения Неймана-Дирихле.

Подведем итог процедуры получения непрерывного ПГУ:

1. Разбейте исходную задачу на связанные уравнения: внутренние и внешние задачи.

2. Примените преобразование Лапласа (1.25) по времени t .

3. Решите обыкновенные дифференциальные уравнения относительно x .

4. Разрешить только «уходящие» волны, выбрав затухающее решение при $x \rightarrow \pm\infty$.

5. Сопоставьте значения Дирихле и Неймана при $x = x_l, x = x_r$.

6. Примените обратное преобразование Лапласа.

Хотя непрерывные ПГУ (1.22) полностью решают проблему ограничения пространственной области ограниченным интервалом, их численная дискретизация вовсе не является тривиальной и привлекает большое внимание. Существуют различные подходы к получению (полу-) дискретных ПГУ и ПГУ для одномерного уравнения Шредингера (1.21). На Рис. 1.6 приведена структура различных стратегий вывода ПГУ.

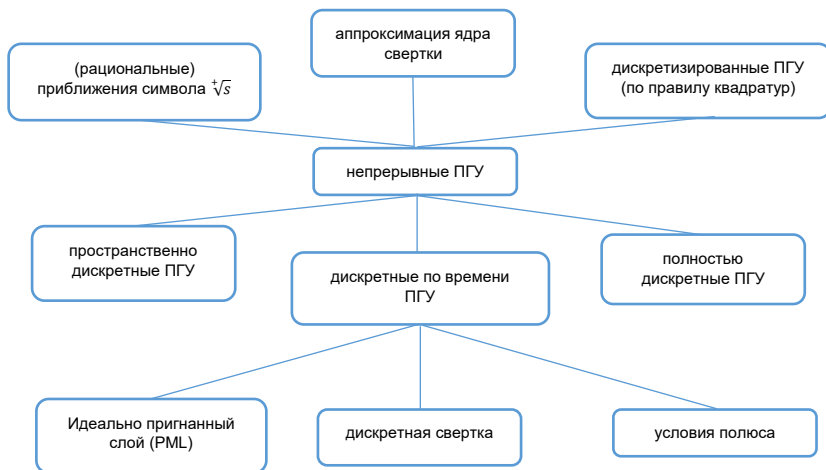


Рис. 1.6. Структура различных стратегий вывода ПГУ.

ГЛАВА II

ПРОЗРАЧНЫЕ КВАНТОВЫЕ ГРАФЫ

Изучение транспорта волн в разветвленных структурах и сетях актуально во многих областях современной физики, таких как оптика, динамика жидкости, конденсированная среда и полимеры. Оптическое и квантово-механическое распространение волн в таких системах проявляется, например, в различных разветвленных волноводах [4, 96–100]. Эффективная передача света, заряда, тепла, спина и сигнала в сетях требует решения задачи настраиваемой волновой динамики. Это может быть достигнуто с помощью моделей, которые обеспечивают реалистичное описание транспорта частиц и волн в разветвленных структурах.

Важной особенностью динамики частиц и волн в сетях является их прохождение через точки ветвления, обычно сопровождаемое отражением (обратным рассеянием) волны в этих точках. Доминирование отражения по сравнению с переходом подразумевает большое «удельное сопротивление» сети по отношению к распространению волны. Следовательно, с точки зрения практического применения, важно уменьшить такое удельное сопротивление путем обеспечения минимума отражения или его отсутствия. Эта задача приводит к проблеме о настраиваемом транспорте в разветвленных структурах, идеальным результатом которого должен стать безотражательный переход волн через точки ветвления структуры. С точки зрения практического применения в физике конденсированных сред такой переход подразумевает баллистический транспорт заряда, спина, тепла и других носителей в низкоразмерных разветвленных материалах. Последнее особенно важно для эффективного использования различных функциональных материалов.

Безотражательный транспорт волн в волоконно-оптических сетях является одной из центральных задач

волоконной оптики, поскольку многие информационно-коммуникационные устройства (например, компьютеры, компьютерные сети, телефоны и т.д.) используют оптоволоконные сети для передачи информации (сигнала). Такие сети также используются в различных оптоэлектронных устройствах. Высокая скорость передачи данных без потерь в таких устройствах требует минимального обратного рассеяния или его отсутствия. Важными областями, где требуется безотражательный или баллистический транспорт в разветвленных структурах, являются молекулярная электроника и проводящие полимеры, где одной из задач является моделирование безотражательного транспорта волн в сетях и где требуется выявление условий, обеспечивающих такой режим. Различные квантовые проволоочные сети, появляющиеся в физике твердого тела, также являются потенциальными структурами, где транспорт волн может быть настроен с диффузионного на баллистический режим с использованием прозрачных граничных условий.

Рассмотрим задачу безотражательного транспорта в квантовых сетях, которые моделируются с помощью линейного уравнения Шредингера на метрических графах. Чтобы описать режим, когда в точках разветвления сети нет обратного рассеяния, мы используем понятие прозрачных граничных условий для нестационарного уравнения Шредингера, подробно рассмотренного ранее в [42, 52, 53, 55, 58-60, 64, 65, 67-70]. Объединяя понятие прозрачных граничных условий с понятием граничных условий вершин для линейного уравнения Шредингера на метрических графах, мы выводим условие, обеспечивающее режим безотражательного транспорта волн через точки ветвления графа (вершины).

Точнее, мы раскрываем условие для режима, при котором граничные условия типа Кирхгофа в точке ветвления становятся эквивалентными прозрачным граничным условиям. Условие получается в виде правила сумм по

отношению к коэффициентам, которые могут характеризовать физические свойства ветвей сети. Отметим, что линейные и нелинейные волновые уравнения на метрических графах изучались ранее в контексте квантовых графов [2, 5, 7, 101].

Результаты, представленные в данной главе, могут рассматриваться как первый шаг на пути к формулировке четких, физически обоснованных, строгих математических условий для безотражательного прохождения волны через точки ветвления сети в квантовом режиме. Глава организована следующим образом. В следующем разделе мы кратко напомним о понятии прозрачных граничных условий для линейного уравнения Шредингера на прямой. В §2.2 покажем развитие концепции прозрачных граничных условий для квантовых сетей, описываемых линейным уравнением Шредингера на метрических графах, и представим некоторые численные результаты. Далее, в §2.3 рассматриваются релятивистские квазичастицы в прозрачных квантовых графах. В §2.4 дается краткое описание прозрачных граничных условий для уравнения Дирака на вещественной прямой. §2.5 включает в себя исследование дираковских частиц в прозрачных квантовых графах.

§2.1. Прозрачные граничные условия в квантовой механике

В квантовой механике обычно способом описания рассеяния и перехода частиц является подход, основанный на матрице рассеяния, которая в свою очередь не использует явные решения уравнения Шредингера. Элементы S -матрицы представляют вероятности отражения и перехода. Такой метод менее эффективен в тех случаях, когда необходимо описать прохождение волн через границу двух областей, особенно когда переход осуществляется без отражения и динамика описывается задачей Коши. Кроме того, S -

матричный подход может применяться только для квантово-механических волновых уравнений.

Поэтому несколько десятилетий назад возник существенный интерес к описанию безотражательного транспорта волны через границу области, описанной прозрачными граничными условиями, заданными для задачи Коши. Явная форма таких граничных условий гораздо сложнее, чем условия Дирихле, Неймана и Робина. Следовательно, их дискретизация вызывает серьезную потерю точности в численных расчетах, а также часто снижает свойства устойчивости всей схемы.

Первое изучение этой сложной задачи прозрачных граничных условий относится к Энгквисту и Майде, которые изучали задачу для уравнения акустической волны [42, 43]. Позднее понятие прозрачных граничных условий (ПГУ) было успешно применено к другим параболическим и гиперболическим дифференциальным уравнениям в частных производных (ДУЧП) в [45, 48]. Более полное исследование ПГУ для уравнения Шредингера и других волновых уравнений может быть найдено, например, в работах [49, 52–75]. Ранее, приближенные значения ПГУ для линейного уравнения Шредингера были сформулированы Шибатой [46] и Куской [47], где дисперсионные соотношения для плоских волн аппроксимируются для получения ПГУ. Строгий математический анализ ПГУ для различных волновых уравнений, включая квантово-механическое уравнение Шредингера, можно найти в работах [54, 55, 64, 73, 75]. Здесь мы кратко остановимся на формулировке ПГУ на естественной прямой, исходя из [52–55].

Рассмотрим движение волны (частицы) в одномерной области $(-\infty, +\infty)$, описанное следующим нестационарным уравнением Шредингера ($\hbar = m = 1$):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi, \quad (2.1)$$

с начальным условием, заданным в виде

$$\Psi(x, 0) = \Psi^I(x),$$

где $\Psi^I \in L^2(R)$.

Наша цель состоит в том, чтобы сформулировать граничные условия для уравнения (2.1), которые обеспечивают безотражательный переход волны через заданные точки 0 и L . Одно из предписаний для расчета таких граничных условий было разработано в работах [52-54], где используется основное предположение, что исходные данные (начальное условие) Ψ^I компактно расположены в вычислительной области $0 < x < L$.

Тогда мы можем разделить всю задачу на так называемые «внутренние» и «внешние» подзадачи. «Внутренняя» задача задается в виде

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi, \quad 0 < x < L, t > 0, \quad (2.2)$$

$$\Psi(x, 0) = \Psi^I(x),$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(0, t) = (T_0 \Psi)(0, t),$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(L, t) = (T_L \Psi)(L, t),$$

где $T_{0,L}$ обозначает отображения Дирихле-Неймана (Д-Н) на границах, которые могут быть получены путем решения двух "внешних" задач, заданных в виде

$$i \frac{\partial}{\partial t} v = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} v, \quad x > L, t > 0, \quad (2.3)$$

$$v(x, 0) = 0,$$

$$v(L, t) = \Phi(t), \quad t > 0, \Phi(0) = 0,$$

$$v(\infty, t) = 0,$$

$$(T_L \Phi)(t) = \frac{\partial}{\partial x} v(L, t),$$

и аналогично это можно сделать для T_0 .

Используя преобразование Лапласа

$$\hat{v}(x, s) = \int_0^\infty v(x, t) e^{-st} dt, \quad (2.4)$$

"внешняя" задача преобразуется в

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{v} + 2is \hat{v} = 0, \quad x > L, \quad (2.5)$$

$$\hat{v}(L, s) = \hat{\Phi}(s).$$

Общее решение уравнения (2.5) можно записать в виде

$$\hat{v}(x, s) = C_1 e^{+\sqrt{-2is}(x-L)} + C_2 e^{-\sqrt{-2is}(x-L)}.$$

Поскольку его решения должны стремиться к нулю при $x \rightarrow +\infty$, получаем

$$\hat{v}(x, s) = e^{-\sqrt{-2is}(x-L)} \hat{\Phi}(s), \quad (2.6)$$

где $^+\sqrt{}$ обозначает квадратный корень с неотрицательной вещественной частью.

Следовательно, преобразованный Лапласом оператор Дирихле-Неймана T_L примет вид

$$\widehat{T_L \Phi}(s) = \frac{\partial}{\partial x} \hat{v}(L, s) = -\sqrt{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} ^+\sqrt{s} \hat{\Phi}(s), \quad (2.7)$$

и T_0 вычисляется аналогично.

Применив обратное преобразование Лапласа правой части ПГУ получаем при $x = L$:

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x = L, t) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\Psi(L, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau. \quad (2.8)$$

Левая часть ПГУ при $x = 0$ получается аналогично в виде

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x = 0, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\Psi(0, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau. \quad (2.9)$$

Из использованной до сих пор конструкции очевидно, что одномерное уравнение Шредингера с ПГУ (2.8) и (2.9) имеет решение. Для достаточно гладких начальных данных, например, $\Psi^I \in H_0^1(0, L)$, все пространственное решение $\Psi(x, t)$ удовлетворяет ПГУ, по крайней мере, в слабом смысле. Однако единственность решения не является тривиальной, поскольку в результирующей начально-краевой задаче (НКЗ) могут появиться ложные решения. Чтобы доказать равномерную ограниченность $\|\Psi(\cdot, t)\|_{L_2(0, L)}$ во времени t , мы будем использовать следующую лемму Арнольда [14], показывающую, что ядро ПГУ (2.8) и (2.9) имеет положительный тип.

ЛЕММА 2.1. (Лемма 2.1 в [13]). Для любого $T > 0$ пусть $u \in H^{\frac{1}{4}}(0, T)$ с расширением $u(t) = 0$ для $t > T$. Тогда

$$\operatorname{Re} \left\{ e^{-i\frac{\pi}{4}} \int_0^\infty \bar{u} \frac{d}{dt} \left[\int_0^t \frac{u(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau \right] dt \right\} \geq 0. \quad (2.10)$$

С этим ключевым свойством ПГУ легко показать разложение массы (в граничной области $(0, L)$)

$$\|\Psi(\cdot, t)\|_{L^2(0, L)} \leq \|\Psi^I\|_{L^2(0, L)} \quad (2.11)$$

И это подразумевает единственность решения одномерного уравнения Шредингера начальной краевой задачи. Отметим, что уравнение (2.11) отражает тот факт, что некоторая начальная масса $n(x, t) := |\Psi(x, t)|^2$ покидает

область вычислений $(0, L)$ в ходе эволюции. Для задачи всего пространства $\|\Psi(\cdot, t)\|_{L^2(R)}$ определено сохраняется.

В данной работе мы применяем эту процедуру к квантовым графам. Следует отметить, что практическое применение ПГУ в физических системах до сих пор не рассматривалось. Здесь мы сделаем это для квантовых сетей, которые появляются в разных областях оптики, физики конденсированных сред и полимеров.

§2.2. Прозрачные квантовые графы

Задача движения волн без отражений в метрических графах была рассмотрена ранее с использованием различных подходов в работах [103-108]. В [103] используется подход, основанный на матрицах рассеивания, и представляется метод построения матриц рассеяния, обеспечивающий отсутствие обратного рассеяния в квантовых графах. В частности, в работе [105], где изучаются свойства взвешенного лапласиана на метрических графах. Возможность свести исследование однородного древовидного графа с использованием его симметрии к семейству одномерных задач с точечными взаимодействиями рассматривается в [106]. Если вместо обычных условий Кирхгофа принять правильно взвешенные условия, то движение на полупрямых будет безотражательным. Безотражательные и равнопропускающие связи вершин также изучались в [107, 108].

Однако во всех этих исследованиях не использовалось понятие прозрачных граничных условий для уравнения Шредингера. Такие условия были рассмотрены в [104] для волнового уравнения на метрическом древообразном графе с самоподобной структурой на бесконечности, где свойства безотражательного транспорта изучены численно. Последнее становится очень сложной численной работой, точность которой нельзя легко проконтролировать. Точнее говоря, прямое использование прозрачных граничных условий для

квантовых графов превращает задачу в очень сложную численную задачу с почти неконтролируемой точностью. Поэтому необходимо разработать некоторый подход, чтобы избежать непосредственного использования ПГУ в вершине, превращая при этом граничные условия вершины в эквивалентные ПГУ.

Здесь мы объединяем вышеизложенные понятия прозрачных граничных условий и квантовых графов для построения граничных условий на вершинах, обеспечивающих безотражательный переход волн через точки ветвления графа. В дальнейшем такие графы будут называться *«прозрачными квантовыми графами»*. Таким образом, в рамках нашего подхода мы определяем ПГУ по тому факту, что они должны приводить к начально-краевой задаче с единственным решением в некотором подходящем пространстве L^2 , которое совпадает с соответствующим решением на неограниченном/бесконечном графе. Используя такой подход, ниже мы покажем, что граничные условия типа Кирхгофа (взвешенная непрерывность и сохранение тока) могут стать эквивалентными прозрачным граничным условиям вершины при условиях в виде простого правила сумм, которое выполняется для весовых коэффициентов.

Впоследствии такая эквивалентность "отображает" квантовый граф в вещественную прямую, где частица (волна) не "чувствует" никакой вершины и обратное рассеяние не происходит во время движения частицы.

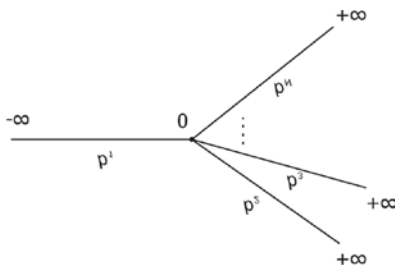


Рис. 2.1. Звездообразный граф с N полубесконечными ребрами.

Для упрощения (без потери общности) рассмотрим сначала звездообразный граф (см. Рис. 2.1) с тремя ребрами (т.е. $N = 3$). Мы присваиваем каждому ребру B_j координату x_j , которая указывает на положение вдоль ребра: для ребра B_1 это $x_1 \in (-\infty, 0]$ и для $B_{1,2}$ они есть $x_{2,3} \in [0, +\infty)$. Далее, мы используем сокращенное обозначение $\Psi_j(x)$ для $\Psi_j(x_j)$, где подразумевается, что x – это координата ребра j , к которой относится компонент Ψ_j . Тогда для волновой динамики в таком графе можно записать нестационарное уравнение Шредингера, выраженное в единицах $\hbar = m = 1$:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_j(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_j(x, t), \quad j = 1, 2, 3 \quad (2.12)$$

В точке ветвления (вершине) мы задаем граничные условия в виде взвешенной непрерывности волновой функции, определяемой как

$$\alpha_1 \Psi_1(0, t) = \alpha_2 \Psi_2(0, t) = \alpha_3 \Psi_3(0, t), \quad (2.13)$$

и условие типа Кирхгофа, который задается в виде

$$\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_1(x = 0, t) = \frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2(x = 0, t) + \frac{1}{\alpha_3} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_3(x = 0, t). \quad (2.14)$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2.2. Пусть задан набор чисел $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$, $\alpha_j \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, $j = 1, 2, \dots, N$. Если верно равенство

$$\alpha_1^{-2} = \sum_{j=2}^N \alpha_j^{-2}$$

для заданного набора, то это равенство назовем *правилом сумм*.

ТЕОРЕМА 2.3. Граничные условия вершин (2.13) и (2.14) являются эквивалентными ПГУ на вершине, при условии выполнения правила сумм.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим волну, идущую от первого ко второму и третьему ребрам, то есть начальное условие компактно расположено в первом ребре. Тогда «внутренняя» подзадача для первого ребра B_1 может быть записана в виде

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_1, \quad x < 0, \quad t > 0, \quad (2.15)$$

$$\Psi_1(x, 0) = \Psi^I(x),$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1(0, t) = (T_0 \Psi_1)(0, t).$$

Соответственно "внешние" подзадачи для $B_{2,3}$ определяются как

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{2,3} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_{2,3}, \quad x > 0, \quad t > 0, \quad (2.16)$$

$$\Psi_{2,3}(x, 0) = 0,$$

$$\Psi_{2,3}(0, t) = \Phi(t), \quad t > 0, \quad \Phi(0) = 0,$$

$$(T_0 \Phi)(t) = \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{2,3}(0, t).$$

Наконец, используя преобразование Лапласа (2.4), две "внешние" подзадачи преобразуются в

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{\Psi}_{2,3} + 2is \hat{\Psi}_{2,3} = 0, \quad x > 0, \quad (2.17)$$

$$\hat{\Psi}_{2,3}(0, s) = \hat{\Phi}(s). \quad (2.18)$$

Общее решение внешних задач можно записать в виде

$$\hat{\Psi}_{2,3}(x, s) = C_1 e^{+\sqrt{-2is}x} + C_2 e^{-\sqrt{-2is}x}. \quad (2.19)$$

Так как $\hat{\Psi}_{2,3} \in L^2(0, \infty)$, мы получаем

$$\hat{\Psi}_{2,3}(x, s) = e^{-\sqrt{-2is}x}. \quad (2.20)$$

Тогда

$$\frac{\partial}{\partial x} \hat{\Psi}_{2,3}(x, s) = -\sqrt{-2is} \hat{\Psi}_{2,3}(x, s), \quad x \geq 0. \quad (2.21)$$

В вершине ($x = 0$) для ребер $B_{2,3}$, используя граничные условия непрерывности (2.13), получаем

$$\frac{\partial}{\partial x} \hat{\Psi}_{2,3}(x = 0, s) = -\sqrt{-2is} \frac{\alpha_1}{\alpha_{2,3}} \hat{\Psi}_{2,3}(x = 0, s). \quad (2.22)$$

Сохранение тока, преобразованное Лапласом (при $x = 0$), принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial x} \hat{\Psi}_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \frac{\partial}{\partial x} \hat{\Psi}_2 + \frac{\alpha_1}{\alpha_3} \frac{\partial}{\partial x} \hat{\Psi}_3 = -\sqrt{-2is} \alpha_1^2 \left(\frac{1}{\alpha_2^2} + \frac{1}{\alpha_3^2} \right) \hat{\Psi}_1. \quad (2.23)$$

Используя обратное преобразование, мы имеем

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1(x = 0, t) = A_1 \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\Psi_1(0, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} \tau, \quad (2.24)$$

где $A_1 = \alpha_1^2(\alpha_2^{-2} + \alpha_3^{-2})$.

Граничное условие, заданное уравнением (2.24), совпадает с (2.9) и, таким образом, обеспечивает переход без отражения для ребра B_1 , когда $A_1 = 1$, т.е. когда выполняется следующее правило сумм:

$$\frac{1}{\alpha_1^2} = \frac{1}{\alpha_2^2} + \frac{1}{\alpha_3^2}. \quad (2.25)$$

Следовательно, граничные условия вершин, заданные уравнениями (2.13) и (2.14), становятся эквивалентными ПГУ на вершине, при условии выполнения правила сумм в уравнении (2.25). Теорема доказана.

Пример численного решения показан на Рис. 2.2 при помощи моделирования движущегося направо гауссовского волнового пакета

$$\Psi^I(x) = (2\pi)^{-\frac{1}{4}} \exp(5ix - (x + 5)^2/4)$$

для четырех последовательных временных шагов. При решении использовалась конечно-разностная схема Кранка-Николсона с дискретизацией пространства $\Delta x = 0,016$ и шагом по времени $\Delta t = 5 \cdot 10^{-5}$. Из этого рисунка видно, что волна полностью переходит на второе и третье ребро при истечении достаточного времени. Отметим, что приведенные выше граничные условия обеспечивают сохранение полной нормы, которая определяется как сумма частных норм для каждого ребра.

Приведем вывод сохранения нормы. Для квантового звездообразного графа с тремя ребрами полная норма задается в виде

$$N(t) = \sum_{j=1}^3 \int_{B_j} |\Psi_j(x, t)|^2 dx, \quad (2.26)$$

где B_j – область j -го ребра.

Для уравнения (2.12) простое вычисление показывает, что производная от нормы относительно t будет

$$\dot{N}(t) = \sum_{j=1}^3 \int_{B_j} \left[-\frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi_j^*}{\partial x^2} \Psi_j + \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi_j}{\partial x^2} \Psi_j^* \right] dx. \quad (2.27)$$

Принимая во внимание, что Ψ_1 исчезает при $x \rightarrow -\infty$, $\Psi_{2,3}$ исчезает при $x \rightarrow +\infty$, получаем

$$\dot{N}(t) = \Im m \left[\Psi_1 \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \right]_{x=0} - \Im m \left[\Psi_2 \frac{\partial \Psi_2^*}{\partial x} \right]_{x=0} - \Im m \left[\Psi_3 \frac{\partial \Psi_3^*}{\partial x} \right]_{x=0}, \quad (2.28)$$

и используя граничные условия (2.13) и (2.14), получим

$$\dot{N}(t) = 0, \quad (2.29)$$

которое означает сохранение нормы по времени.

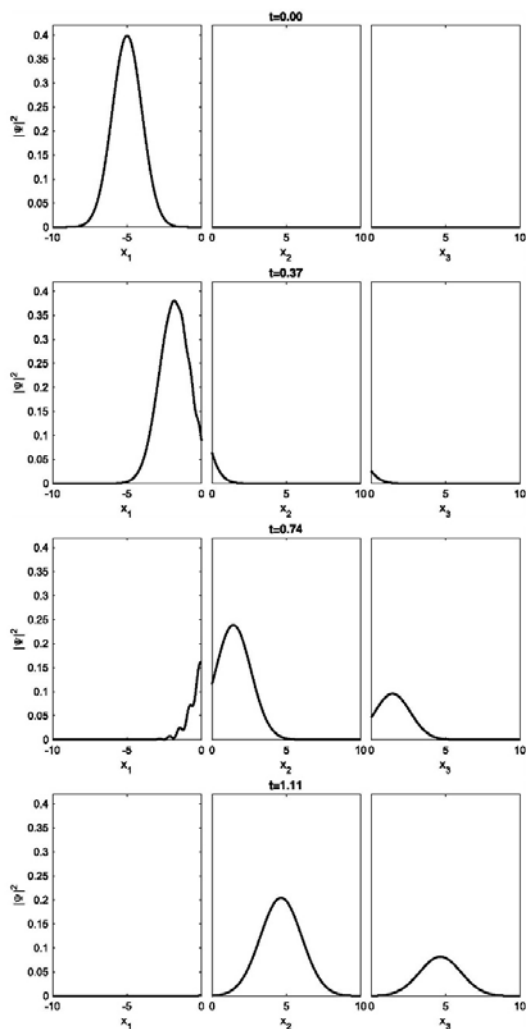


Рис. 2.2. Профиль волновой функции, построенный в разные моменты времени для режима, когда выполняется правило сумм (отражение не происходит): $\alpha_1 = 1/\sqrt{1/20 + 1/50}$, $\alpha_2 = \sqrt{20}$ и $\alpha_3 = \sqrt{50}$. Каждый номер столбца (слева направо) соответствует номеру ребра.

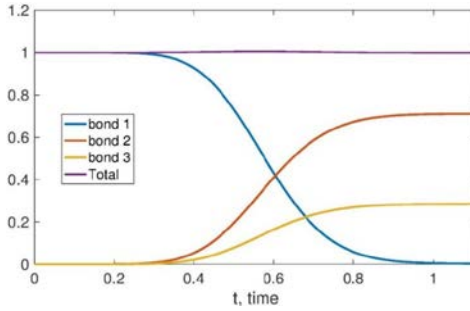


Рис. 2.3. Временная зависимость частичной и суммарной норм для случая, показанного на Рис. 2.2

На Рис. 2.3 приведены графики частичных и суммарных норм для этого случая. На Рис. 2.4 приведен график коэффициента отражения, определенный как отношение частичной нормы для первого ребра к общей норме в виде

$$R = \frac{N_1}{N_1 + N_2 + N_3}$$

и как функция от α_1 для фиксированных значений α_2 и α_3 . Как показывает этот график, при значении α_1 , которое обеспечивает выполнение правила сумм (2.25), коэффициент отражения становится равным нулю. Это еще раз подтверждает, что правило сумм в уравнении (2.25) делает граничные условия вершин в уравнениях (2.13) и (2.14) эквивалентными прозрачным.

Отметим, что описанный выше подход может быть развит для других топологий ветвления сети, например, для древообразного графа, представленного на Рис. 2.5. Граф состоит из трех «слоев» B_1 , (B_{1i}) , (B_{1ij}) , где i, j пробегает по всем индексам ребер. Для каждого ребра B_1, B_{1i}, B_{1ij} мы имеем зависящее от времени уравнение Шредингера, определенное уравнением (2.12), для которого заданы граничные условия вершины типа Кирхгофа. Прозрачные граничные условия

могут быть заданы аналогично условиям для звездообразного графа. Тогда для всех i, j α_{1i} и $\alpha_{(1ij)}$ должны быть определены из правила сумм, например, (2.25) в каждой вершине.

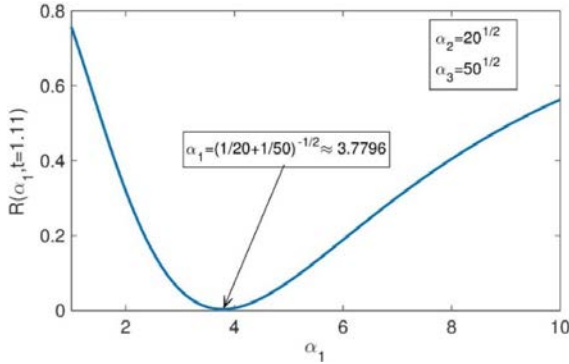


Рис. 2.4. Зависимость коэффициента отражения вершины R от параметра α_1 по истечении времени ($t = 1.1$).

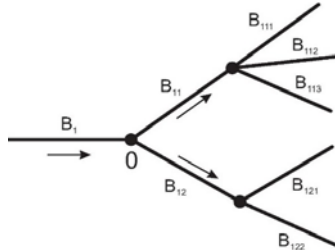


Рис. 2.5. Древообразный граф с тремя слоями, $B_1 \sim (-\infty, 0]$, B_{11} , $B_{12} \sim [0, L_k)$, $k = 1, 2$, и $B_{1ij} \sim [0, +\infty)$ где $i, j = 1, 2, 3$.

Например, в трех вершинах на Рис. 2.4 мы имеем

- в конечной точке B_1 : $\alpha_1^{-2} = \alpha_{11}^{-2} + \alpha_{12}^{-2}$,
- в конечной точке B_{11} : $\alpha_{11}^{-2} = \alpha_{111}^{-2} + \alpha_{112}^{-2} + \alpha_{113}^{-2}$,
- в конечной точке B_{12} : $\alpha_{12}^{-2} = \alpha_{121}^{-2} + \alpha_{122}^{-2}$.

Выполнение этих правил сумм превращает граничные условия типа Кирхгофа в эквивалентные прозрачным в

каждой вершине древообразного графа. Константы α_j в уравнении (2.25) характеризуют физические свойства материала, который используется для построения сети, и могут иметь различное значение для каждой конкретной рассматриваемой системы.

§2.3. Релятивистские квазичастицы в прозрачных квантовых графах

В связи с недавними достижениями в физике конденсированного состояния моделирование динамики релятивистских частиц в низкоразмерных системах привлекло большое внимание. Было обнаружено, что такие материалы, как графен [109–111], углеродные нанотрубки (УНТ) [112], топологические изоляторы [113, 114] и некоторые типы сверхпроводников [115, 116] могут создавать квазичастичные возбуждения, которые могут имитировать релятивистскую динамику. Такие квазичастицы описываются уравнениями Дирака, Вейля и Боголюбова-де Жена. Низкоразмерные функциональные материалы, в которых встречаются такие квазичастицы, могут быть использованы для создания различных электронных и оптоэлектронных устройств наномасштабного уровня в развивающихся квантовых технологиях.

Эффективная функционализация и оптимизация устройств в таких технологиях требует решения проблемы управляемого транспорта частиц в низкоразмерных структурах. Это в дальнейшем потребует разработки эффективных и реалистичных моделей релятивистского транспорта квазичастиц в низкоразмерных системах. Поскольку большинство низкоразмерных систем, возникающих в конденсированных средах, обладают разветвленной структурой, указанная выше задача может быть сведена к задаче моделирования релятивистской динамики квазичастиц в разветвленных квантовых системах. Обычно они моделируются при помощи квантовых графов,

которые привлекли большое внимание в течение последних трех десятилетий (для обзора последних достижений в этой области исследований см. [2, 5, 7, 101, 102]).

В этой главе мы также рассматриваем проблему прозрачных квантовых графов для релятивистских (полуспинных) квазичастиц, описываемых уравнением Дирака на метрических графах. Предлагаемая нами модель может быть непосредственно применена к задаче управляемого транспорта релятивистских квазичастиц в разветвленных графеновых нанолентах, сетях углеродных нанолент, сетях топологических изоляторов и разветвленных оптических волокнах, где появляются квазичастицы Дирака. Комбинируя понятия квантового графа и прозрачных граничных условий, мы выводим явные граничные условия для вершин, обеспечивающие безотражательный транспорт квазичастиц через точки ветвления. Выявлены простые ограничения для режима, когда движение релятивистских квазичастиц с полуспином в квантовых графах становится безотражательным; т.е. квантовый граф становится прозрачным по отношению к транспорту частиц.

Мотивация к изучению прозрачных квантовых графов происходит из широкого спектра практических приложений в оптоэлектронике и физике конденсированного состояния. Эффективная передача сигнала в оптоэлектронных сетях требует снижения потерь до минимума. Перенос спина, заряда и энергии в разветвленных наноматериалах, используемых в устройствах наноэлектроники, также требует минимизации потерь, вызванных обратным рассеянием квазичастиц. В контексте релятивистской квантовой динамики с безотражательным переносом эта проблема возникает в низкоразмерных функциональных материалах (например, графене, УНТ, топологических изоляторах, одномерных разветвленных квазимолекулах и т.д.). Различные сети из квантовых проводов, встречающиеся в физике твердого тела, также являются потенциальными структурами, где транспорт волн может быть настроен от диффузионного к

баллистическому режиму с использованием прозрачных граничных условий.

§2.4. Прозрачные граничные условия для уравнения Дирака на прямой

Стандартным способом описания рассеяния частиц и волн в квантовой механике является подход, основанный на матрице рассеяния. Однако в рамках такого подхода не используются явные решения уравнения Шредингера и, следовательно, он менее эффективен для случаев, когда необходимо описать прохождение волны через границу двух областей. Более того, он не дает никакого решения проблемы управляемого рассеяния и пропускания частиц для данной точки и/или области с использованием начальных условий для уравнения Шредингера.

Эффективный подход, обеспечивающий решение проблемы безотражательного прохождения волн и частиц через данную точку и границу в терминах задачи Коши, привлекает большое внимание в течение последних трех десятилетий. В рамках такого подхода можно сформулировать граничные условия отсутствия обратного рассеяния в заданной точке или границе области, хотя явный вид таких граничных условий намного сложнее, чем условия Дирихле, Неймана и Робина. Такие граничные условия называются прозрачными граничными условиями.

ПГУ – это граничное условие для волнового уравнения, которое приводит к решению, обеспечивающему минимум (или отсутствие) отражений. В ранних работах (см., например, [42–47]) ПГУ определялось как граничные условия, обеспечивающие минимум обратного рассеяния с точки зрения коэффициента отражения. Однако позже было дано более строгое математическое определение ПГУ [49, 50, 52–55, 59–64]. Для данной конечной области Ω ПГУ задаются таким образом, что решение УЧП в Ω соответствует решению во всем пространстве, т.е. волна или частица, движущиеся внутри или

вне области, не «замечают» границу. Построение ПГУ основано на сочетании начальных краевых задач (НКЗ) во внутренней и внешней областях [49, 50, 52–55].

Общая процедура построения прозрачных граничных условий на вещественной прямой здесь выглядит следующим образом (см. [65]):

(1) Разделить исходную задачу эволюции, описываемую УЧП на связанные уравнения: внутреннюю и внешнюю задачи.

(2) Применить преобразование Лапласа к внешним задачам в $\Omega^{\text{внеш}}$.

(3) Решить (явно, численно) обыкновенные дифференциальные уравнения с пространственной неизвестной x .

(4) Учитывать только уходящие волны, выбрав затухающее решение при $x \rightarrow \pm \infty$.

(5) «Сшивание» граничных условий Дирихле и Неймана на «искусственной» границе.

(6) Применить (явно численно) обратное преобразование Лапласа.

Для уравнения Дирака эта процедура была применена Хаммером и соавторами [74] для получения (непрерывных) ПГУ.

Напомним, что первоначальное исследование проблемы прозрачных граничных условий для уравнения акустической волны восходит к исследовательской работе Энkvиста и Майды [42, 43]. Дальнейшее развитие концепции ПГУ для некоторых параболических и гиперболических УЧП было представлено Халперном [45] и Софроновым [48]. Более подробное исследование ПГУ для уравнения Шредингера и других волновых уравнений можно найти в работах [49, 50, 52–55, 75]. До этого, приближенные ПГУ для линейного уравнения Шредингера были сформулированы Шибатой [46] и Куской [47], где дисперсионные соотношения для плоских волн аппроксимированы с целью получения приближенных ПГУ. Строгий математический анализ ПГУ для различных

волновых уравнений, включая квантово-механическое уравнение Шредингера, можно найти в [54, 55, 64, 73, 75]. Ниже мы кратко напомним формулировку ПГУ на прямой, следуя [52–55].

Прежде чем перейти к прозрачным квантовым графам, следуя [74] мы кратко приведем вывод ПГУ для уравнения Дирака. Рассмотрим следующее уравнение Дирака (в единицах $\hbar = c = 1$), заданное на интервале $[0, L] \subset \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} i\partial_x \phi &= -i\partial_x \chi + m\phi, \\ i\partial_x \chi &= -i\partial_x \phi - m\chi. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Начальные условия для уравнения (2.31) задаются в виде

$$\phi(x, 0) = \phi^I(x), \quad \chi(x, 0) = \chi^I(x), \quad x \in [0, L]. \quad (2.32)$$

Далее мы разделим все пространство на внутреннюю ($0 < x < L$) и две внешние ($x \leq 0$ и $x \geq L$) области. Тогда внутренняя задача ($x \in (0, L)$, $t > 0$) будет иметь вид

$$\begin{aligned} i\partial_t \phi &= -i\partial_x \chi + m\phi, \\ i\partial_t \chi &= -i\partial_x \phi - m\chi, \\ \phi(x, 0) &= \phi^I(x), \\ \chi(x, 0) &= \chi^I(x), \\ (T_0 \phi)(0, t) &= \chi(0, t), \\ (T_L \phi)(L, t) &= \chi(L, t), \end{aligned} \quad (2.33)$$

где T_0 и T_L обозначают отображения Дирихле-Неймана (Д-Н) на границах, и они находятся путем решения внешних задач ($x \leq 0$ и $x \geq L$, $t > 0$), заданных в виде

$$\begin{aligned}
i\partial_t\phi &= -i\partial_x\chi + m\phi, \\
i\partial_t\chi &= -i\partial_x\phi - m\chi, \\
\phi(x, 0) &= 0, \\
\chi(x, 0) &= 0, \\
\phi(0, t) &= \Phi_1(t), \\
\chi(0, t) &= (T_0\phi)(0, t), \\
\phi(L, t) &= \Phi_2(t), \\
\chi(L, t) &= (T_L\phi)(L, t).
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Вводя следующие преобразования Лапласа,

$$\tilde{\phi}(x, s) = \int_0^{+\infty} \phi(x, t) e^{-st} dt, \tag{2.35}$$

$$\tilde{\chi}(x, s) = \int_0^{+\infty} \chi(x, t) e^{-st} dt, \tag{2.36}$$

можно переписать уравнение (2.31) в виде обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}
-i\partial_x\tilde{\chi}(x, s) &= (is - m)\tilde{\phi}(x, s), \\
-i\partial_x\tilde{\phi}(x, s) &= (is + m)\tilde{\chi}(x, s).
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Общее решение системы (2.37) можно записать как

$$\begin{aligned}
\tilde{\phi}(x, s) &= c_1 e^{-\sqrt{s^2+m^2}x} + c_2 e^{+\sqrt{s^2+m^2}x}, \\
\tilde{\chi}(x, s) &= -c_1 \kappa e^{-\sqrt{s^2+m^2}x} + c_2 \kappa e^{+\sqrt{s^2+m^2}x},
\end{aligned} \tag{2.38}$$

где $\kappa = \frac{\sqrt[+]{is-m}}{\sqrt[+]{is+m}}$. Поскольку мы требуем $\tilde{\phi}, \tilde{\chi} \in L_2(0, +\infty)$, то получаем для $x \geq L$ (правая внешняя область) условие $c_1 = 0$, а значит,

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}(x, s) &= c_2 e^{+\sqrt{s^2+m^2}x}, \\ \tilde{\chi}(x, s) &= c_2 \kappa e^{+\sqrt{s^2+m^2}x}.\end{aligned}\quad (2.39)$$

Из начального условия задачи (2.34) получаем

$$c_2 = \tilde{\phi}(L, s) e^{-\sqrt{s^2+m^2}L} = \tilde{\Phi}_2(s) e^{-\sqrt{s^2+m^2}L},$$

и, следовательно

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}(x, s) &= \tilde{\Phi}_2(s) e^{+\sqrt{s^2+m^2}(x-L)}, \\ \tilde{\chi}(x, s) &= \tilde{\Phi}_2(s) \kappa e^{+\sqrt{s^2+m^2}(x-L)} = \kappa \tilde{\phi}(x, s).\end{aligned}\quad (2.40)$$

Таким образом, в итоге получается

$$\tilde{\chi}(L, s) = \kappa \tilde{\phi}(L, s). \quad (2.41)$$

Используя обратное преобразование Лапласа, имеем

$$\chi(L, t) = \frac{d}{dt} \int_0^t I_0(m(t-\tau)) \phi(L, \tau) d\tau + im \int_0^t I_0(m(t-\tau)) \phi(L, \tau) d\tau, \quad (2.42)$$

где $I_0(z)$ обозначает модифицированную функцию Бесселя. Аналогично можно получить ПГУ для $x = 0$ [34]:

$$\chi(0, t) = \frac{d}{dt} \int_0^t I_0(m(t-\tau)) \phi(0, \tau) d\tau + im \int_0^t I_0(m(t-\tau)) \phi(0, \tau) d\tau, \quad (2.43)$$

Далее мы применяем описанную выше процедуру на случай движения дираковской частицы в квантовых графах.

Отметим, что до сих пор практическое применение концепции ПГУ для физических систем было весьма ограничено, за исключением, возможно, работ [82,83], где рассмотрена линейная и нелинейная (солитонная) волновая динамика на прозрачных графах.

§2.5. Частицы Дирака в прозрачных квантовых графах

Уравнение Дирака на квантовых графах рассматривалось в [117]. Позже строгая трактовка задачи с выводом общих самосопряженных вершинных граничных условий и подхода рассеяния была представлена в [10].

В этой работе, следуя [10], мы кратко приведем моделирование релятивистских дираковских частиц в квантовых графах. Для нерелятивистских частиц концепция квантового графа была введена Экснером и др. [8] для описания свободного квантового движения на разветвленных проволоках. Фактически, квантово-механическое движение в разветвленных молекулярных структурах впервые было рассмотрено в [118–120], где оно изучается в контексте органических молекул. Позже Кострыкин и Шредер [9] вывели общие граничные условия, обеспечивающие самосопряженность оператора Шредингера на графах. В последнее время изучалась релятивистская квантовая механика, описанная Дираком [10] и операторами Боголюбова – де Жена [121] на графах. Симметричные квантовые графы с РТ рассмотрены в [122]. Хул и др. в [102] рассматривали экспериментальную реализацию квантовых графов в оптических микроволновых сетях. Немаловажная задача, связанная с квантовыми графами, изучалась в контексте теории квантового хаоса и спектральной статистики [7, 10, 101]. Спектральные свойства и зонная структура периодических квантовых графов также вызвали большой интерес [1,2]. Возможность настройки направленного транспорта в квантово-управляемых звездообразных графах

изучалась также в [123], где обсуждалось отражение в центральной вершине.

Таким образом, как мы отмечали в предыдущих главах, метрический граф представляет собой набор ребер с заданной длиной, которые соединены друг с другом в вершинах в соответствии с правилом, называемым топологией графа, которое задается при помощи матрицы смежности [7, 101]:

$$C_{ij} = C_{ji} = \begin{cases} 1 & \text{если } i \text{ и } j \text{ связаны,} \\ 0 & \text{в других случаях,} \end{cases}$$

для $j = 1, 2, \dots, N$.

Начнем с простейшего, фундаментального звездообразного графа, показанного на Рис. 2.1. Звездообразные графы можно рассматривать как наименьшие строительные блоки для любых более сложных графов. Уравнение Дирака (в единицах $\hbar = c = 1$) для каждой связи (b_j) звездообразного графа может быть записано в виде

$$\begin{aligned} i\partial_t \phi_j &= -i\partial_x \chi_j + m\phi_j, \\ i\partial_t \chi_j &= -i\partial_x \phi_j - m\chi_j, \end{aligned} \quad (2.44)$$

При помощи оператора Дирака D систему уравнений (2.44) можно записать в виде

$$i\partial_t \psi_j = D\psi_j, \quad (2.45)$$

где $\psi_j = (\phi_j, \chi_j)^T$, и

$$D := -i\sigma_x \partial_x + m\sigma_z, \quad (2.46)$$

с матрицами Паули $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Чтобы решить уравнение (2.44) необходимо задать самосопряженные граничные условия в вершине (точке

ветвления). Для этого введем следующее скалярное произведение на звездообразном графе

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \sum_{j=1}^N \int_{b_j} (\phi_j u_j^* + \chi_j v_j^*) dx, \quad (2.47)$$

где $\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N)$, $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N)$, и $\psi_j = (\phi_j, \chi_j)^T$, $\varphi_j = (u_j, v_j)^T$.

Определение следующего косоэрмитова скалярного произведения на графе дает

$$\begin{aligned} \Omega(\psi, \varphi) &= \langle D\psi, \varphi \rangle - \langle \psi, D\varphi \rangle \\ &= i \sum_{j=1}^N [\varphi_j(0)v_j^*(0) - \varphi_j(L_j)v_j^*(L_j) + \chi_j(0)u_j^*(0) - \chi_j(L_j)u_j^*(L_j)] \end{aligned} \quad (2.48)$$

Можно доказать (см. [40]), что самосопряженность оператора Дирака на графе обеспечивается условием $\Omega(\psi, \varphi) = 0$. Набор вершинных граничных условий, удовлетворяющих этому условию, можно записать в виде

$$\begin{aligned} \phi_1(0) &= \phi_2(0) = \dots = \phi_N(0), \\ \chi_1(0) + \chi_2(0) + \dots + \chi_N(0) &= 0, \\ \phi_j(L_j) &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Первое условие представляет собой непрерывность в вершине, а второе обеспечивает правило Кирхгофа в этой вершине.

Далее воспользуемся методом, представленным в §2.4, для вывода прозрачных граничных условий на вершине для уравнения Дирака на квантовых графах. Следует отметить, что безотражательное движение волн и частиц в сетях было рассмотрено ранее в рамках различных подходов [103-108]. В

[108] S-матричный подход используется для построения матрицы рассеяния, обеспечивающая отсутствие обратного рассеяния. Косвенные наблюдения возможности прохождения волны через вершину графа были представлены ранее в нескольких исследованиях, в частности Наймарком и Соломяком [105], с использованием некоторых свойств взвешенного лапласиана на метрических графах. Исследование возможности сведения однородного древовидного графа, используя его симметрию, к семейству одномерных задач с точечными взаимодействиями была рассмотрена Экснером и Липовским [106].

Существование безотражательных и равнопроводимых вершин было изучено в [107,108]. Несмотря на определенное количество публикаций, содержащих исследование прохождения волн без отражений через вершины графа, во всех этих исследованиях не использовалось понятие прозрачных граничных условий для уравнения Шредингера. В [104] прозрачные граничные условия рассматриваются для волнового уравнения на метрическом древовидном графе с самоподобной структурой на бесконечности, где свойства безотражательного переноса изучаются численно. Однако последнее упомянутое приводит к очень сложной численной работе, точность которой контролировать не так просто. Следует отметить, что непосредственное применение ПГУ для квантовых графов превращает задачу в очень сложную численную задачу с почти неконтролируемой точностью.

Следовательно, необходимо разработать методы, позволяющие избегать прямого использования ПГУ в точке ветвления, и вместо этого сделать граничные условия вершины, эквивалентными ПГУ. В этой работе мы объединяем вышеупомянутые понятия ПГУ и квантовые графы, чтобы определить граничные условия для вершин, обеспечивающих безотражательную передачу волн через точки ветвления графа. В дальнейшем такие графы будут называться «прозрачными квантовыми графами». Такой подход был недавно предложен для квантовых графов,

описываемых (линейным) уравнением Шредингера на метрических графах [82]. Условия, выводимые из обычного условия непрерывности и правила Кирхгофа к ПГУ в вершине, были найдены в виде простого правила сумм. Развитие метода на случай солитонов, описываемых нелинейным уравнением Шредингера на метрических графах, представлено в [83]. Здесь мы будем использовать аналогичный подход для релятивистских квазичастиц в сетях, моделируемых уравнением Дирака на квантовых графах. Такие квазичастицы встречаются, например, в разветвленных графеновых нанолентах (см. [124-127]).

Рассмотрим звездообразный граф, показанный на Рис. 2.1. Для простоты (без потери общности) сначала рассмотрим звездообразный граф с тремя ребрами. Каждому ребру b_j графа мы назначаем координату x_j , которая указывает положение вдоль ребра: для b_1 это $x_1 \in (-\infty, 0]$, а для $b_{1,2}$ они $x_{2,3} \in [0, +\infty)$. Далее, мы используем сокращенную запись $\Psi_j(x)$ для $\Psi_j(x_j)$, и подразумевается, что x – это координата j -го ребра, к которой относится компонент Ψ_j . Уравнение Дирака (в единицах $\hbar = c = 1$) для каждого ребра b_j ($b_1 \sim (-\infty; 0]$, $b_{2,3} \sim [0; +\infty)$) такого графа можно записать в виде

$$\begin{aligned} i\partial_t \phi_j &= -i \partial_x \chi_j + m \phi_j, \\ i\partial_t \chi_j &= -i \partial_x \phi_j - m \chi_j. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Наложим граничные условия на вершине следующим образом

$$\alpha_1 \phi_1(0) = \alpha_2 \phi_2(0) = \alpha_3 \phi_3(0), \quad (2.51)$$

$$\frac{1}{\alpha_1} \chi_1(0) = \frac{1}{\alpha_2} \chi_2(0) + \frac{1}{\alpha_3} \chi_3(0). \quad (2.52)$$

Наша задача – вывести условия, которые обеспечивают безотражательную передачу квазичастиц Дирака в вершине.

ТЕОРЕМА 2.4. Граничные условия вершин (2.51) и (2.52) являются эквивалентными ПГУ на вершине, при условии выполнения правила сумм:

$$\frac{1}{\alpha_1^2} = \frac{1}{\alpha_2^2} + \frac{1}{\alpha_3^2}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. По аналогии с процедурой, описанной в §2.4, «внутренняя» задача задается в b_1 и может быть записана в виде

$$\begin{aligned} i\partial_t \phi_1 &= -i\partial_x \chi_1 + m\phi_1, \\ i\partial_t \chi_1 &= -i\partial_x \phi_1 - m\chi_1, \\ \phi_1(x, 0) &= \phi_1^I(x), \\ \chi_1(x, 0) &= \chi_1^I(x), \\ (T\phi_1)(0, t) &= \chi_1(0, t). \end{aligned} \tag{2.53}$$

Две "внешние" задачи на $b_{2,3}$ имеют вид

$$\begin{aligned} i\partial_t \phi_{-(2,3)} &= -i\partial_x \chi_{2,3} + m\phi_{2,3}, \\ i\partial_t \chi_{-(2,3)} &= -i\partial_x \phi_{2,3} - m\chi_{-(2,3)}, \\ \phi_{2,3}(x, 0) &= 0, \\ \chi_{2,3}(x, 0) &= 0, \\ \phi_{2,3}(0, t) &= \Phi_{2,3}(t), \\ \chi_{2,3}(0, t) &= (T\phi_{2,3})(0, t). \end{aligned} \tag{2.54}$$

Далее введем следующее преобразование Лапласа:

$$\hat{\phi}_{2,3}(x, s) = \int_0^{+\infty} \phi_{2,3}(x, t) e^{-st} dt, \quad (2.55)$$

$$\hat{\chi}_{2,3}(x, s) = \int_0^{+\infty} \chi_{2,3}(x, t) e^{-st} dt. \quad (2.56)$$

Тогда две “внешние” проблемы (24) записываются в виде

$$\begin{aligned} -i\partial_x \hat{\chi}_{2,3}(x, s) &= (is - m)\hat{\phi}_{2,3}(x, s), \\ -i\partial_x \hat{\phi}_{2,3}(x, s) &= (is + m)\hat{\chi}_{2,3}(x, s). \end{aligned} \quad (2.57)$$

Общее решение системы (3.27) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{2,3}(x, s) &= c_{2,3}^{(1)} e^{-\sqrt[+]{s^2+m^2}x} + c_{2,3}^{(2)} e^{\sqrt[+]{s^2+m^2}x}, \\ \hat{\chi}_{2,3}(x, s) &= -c_{2,3}^{(1)} \kappa e^{-\sqrt[+]{s^2+m^2}x} + c_{2,3}^{(2)} \kappa e^{\sqrt[+]{s^2+m^2}x}. \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$\text{где } \kappa = \frac{\sqrt[+]{s^2-m^2}}{\sqrt[+]{s^2+m^2}}$$

Поскольку $\hat{\phi}_{2,3}, \hat{\chi}_{2,3} \in L_2(0; +\infty)$, мы получаем для “внешних” задач на $b_{2,3}$

$$c_{2,3}^{(1)} = 0,$$

следовательно, внешнее решение

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{2,3}(x, s) &= c_{2,3}^{(2)} e^{\sqrt[+]{s^2+m^2}x}, \\ \hat{\chi}_{2,3}(x, s) &= c_{2,3}^{(2)} \kappa e^{\sqrt[+]{s^2+m^2}x}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Тогда начальные условия задачи (2.54) дают

$$c_{2,3}^{(2)} = \hat{\phi}_{2,3}(0, s) = \hat{\Phi}_{2,3}(s),$$

и следовательно

$$\begin{aligned}\hat{\phi}_{2,3}(x, s) &= \hat{\Phi}_{2,3}(s)e^{+\sqrt{s^2+m^2}x}, \\ \hat{\chi}_{2,3}(x, s) &= \hat{\Phi}_{2,3}(s)\kappa e^{+\sqrt{s^2+m^2}x} = \kappa \hat{\phi}_{2,3}(x, s).\end{aligned}\quad (2.60)$$

Из граничных условий вершины (2.51)-(2.52) получаем

$$\begin{aligned}\hat{\phi}_{2,3}|_{x=0} &= \frac{\alpha_1}{\alpha_{2,3}}\hat{\phi}_1|_{x=0}, \\ \hat{\chi}_{2,3}|_{x=0} &= \kappa \frac{\alpha_1}{\alpha_{2,3}}\hat{\phi}_1|_{x=0}, \\ \hat{\chi}_1|_{x=0} &= \frac{\alpha_1}{\alpha_2}\hat{\chi}_2|_{x=0} + \frac{\alpha_1}{\alpha_3}\hat{\chi}_3|_{x=0}, \\ &= \frac{\alpha_1}{\alpha_2}\left(\kappa \frac{\alpha_1}{\alpha_2}\hat{\phi}_1|_{x=0}\right) + \frac{\alpha_1}{\alpha_3}\left(\kappa \frac{\alpha_1}{\alpha_3}\hat{\phi}_1|_{x=0}\right) \\ &= \alpha_1^2\left(\frac{1}{\alpha_2^2} + \frac{1}{\alpha_3^2}\right)\kappa \hat{\phi}_1|_{x=0}\end{aligned}\quad (2.61)$$

Преобразованное Лапласом правило Кирхгофа в уравнении (2.52) дает

$$\begin{aligned}\chi_1(0, t) &= A\left[\frac{d}{dt}\int_0^t I_0(m(t-\tau))\phi_1(0, \tau)d\tau + \right. \\ &\quad \left. im\int_0^t I_0(m(t-\tau))\phi_1(0, \tau)d\tau\right],\end{aligned}\quad (2.62)$$

где $A = \alpha_1^2\left(\frac{1}{\alpha_2^2} + \frac{1}{\alpha_3^2}\right)$ и $I_0(z)$ обозначает модифицированную функцию Бесселя.

Понятно, что граничное условие в уравнении (2.62) совпадает с условием в уравнении (2.42) и, следовательно, обеспечивает безотражательный транспорт квазичастиц Дирака для ребра b_1 , когда $A = 1$, т.е. выполняется следующее правило сумм:

$$\frac{1}{\alpha_1^2} = \frac{1}{\alpha_2^2} + \frac{1}{\alpha_3^2}. \quad (2.63)$$

Таким образом, граничные условия для вершин, заданные уравнениями (2.51) – (2.52), становятся эквивалентными граничным условиям для прозрачных вершин, при условии выполнения правила сумм в уравнении (2.63).

Прозрачные граничные условия, заданные уравнением (2.62), не нарушают условие самосопряженности задачи, поскольку они выводятся из граничных условий вершин (2.51) и (2.52), обеспечивающих самосопряженность оператора Дирака на графе.

Отметим, что все приведенные выше результаты верны и для специального безмассового случая, т.е. когда $m = 0$. Такой случай, например, соответствует квазичастицам Дирака в графене.

Кроме того, полученное правило сумм легко обобщается для любого звездообразного графа с N ребрами. Для этого общего случая, когда ребро b_1 рассматривается как входящее, правило сумм принимает форму

$$\alpha_1^{-2} = \sum_{j=2}^N \alpha_j^{-2} \quad (2.64)$$

и прохождение волны (квазичастицы) в остальные $N - 1$ ребер становится безотражательным. Кроме того, подход может быть развит для произвольной топологии графа, имеющей произвольное число вершин, т.е. ПГУ может быть получен для произвольного метрического графа. Это можно легко сделать аналогичным образом, как это было показано в

работе [82], где, например, подход был развит для древовидного графа.

Приведем численное подтверждение полученных нами результатов. Конфигурация экспериментальной установки состоит из звездообразного графа с тремя ребрами. Изучается временная эволюция гауссова дираковского спинора

$$G(x) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

компактно расположенная в первом ребре. Это делается с учетом следующих начальных условий:

$$\begin{pmatrix} \phi_1(x, 0) \\ \chi_1(x, 0) \end{pmatrix} = G(x),$$

с $x_0 = -5$, $\sigma = 0.9$, и

$$\begin{pmatrix} \phi_{2,3}(x, 0) \\ \chi_{2,3}(x, 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Выбираем $m = 0,01$ таким образом, чтобы процесс передачи был довольно наглядным, то есть волновой пакет сохраняет свою форму в течение рассматриваемого периода времени. Схема «leap-frog» (см., [75] для подробностей) с дискретизацией пространства $\Delta x = 0,0125$ и шагом по времени $\Delta t = 0,01$ используется для численного эксперимента. Графики, приведенные на Рис. 2.6 показывают плотность вероятности $|\phi_j(x, t)|^2 + |\chi_j(x, t)|^2$, $j = 1, 2, 3$ в четырех последовательных временных шагах. Из Рис. 2.6 видно, что волна полностью переходит на второе и третье ребро по истечении времени без каких-либо отражений. Отметим, что приведенные выше граничные условия обеспечивают сохранение полной нормы, которая определяется как сумма частичных норм для каждого ребра.

Зависимость частичных и полного норм от времени для этого случая показана на Рис. 2.7.

Коэффициент отражения R определенный как соотношение частичной нормы для первого ребра к полной норме

$$R = \frac{N_1}{N_1 + N_2 + N_3}$$

приводится как функция от α_1 для фиксированных значений α_2 и α_3 на Рис. 2.8. Из этого графика можно сделать вывод, что коэффициент отражения равняется нулю только при таком значении α_1 , для которого обеспечивается выполнение правила сумм (2.63).

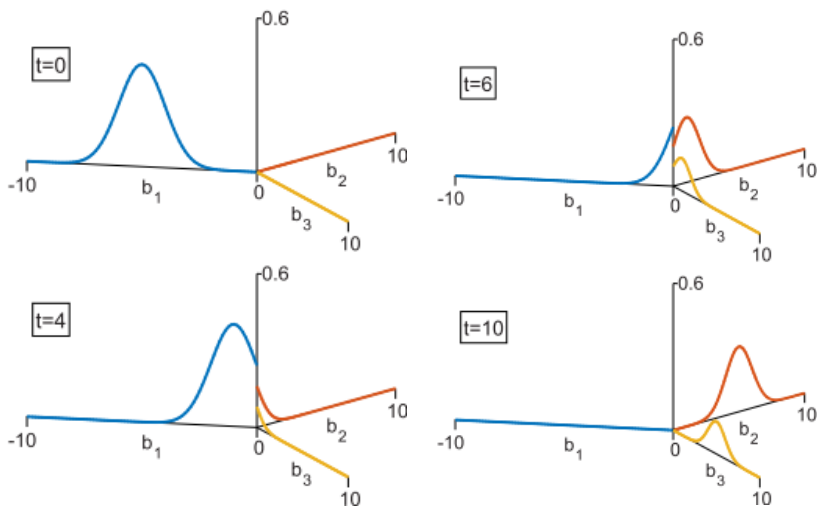


Рис. 2.6. Плотность вероятности $|\phi_j(x, t)|^2 + |\chi_j(x, t)|^2$, $j = 1, 2, 3$ в четырех последовательных временных шагах для режима, когда выполняется правило сумм (отражение не наблюдается):

$$\alpha_1 = \sqrt{2/3}, \alpha_2 = 1, \text{ и } \alpha_3 = \sqrt{2}.$$

Это наблюдение еще раз подтверждает, что правило сумм в уравнение (2.63) делает граничные условия вершин (2.51) – (2.52) эквивалентными прозрачным.

Также следует отметить, что возможность управления переходом волнового пакета через вершину заключается в выборе подходящих параметров α_2 и α_3 таким образом, чтобы «массы» разделенных частей составляли $N_2 = 1 - \frac{\alpha_2^2}{\alpha_2^2 + \alpha_3^2}$ и $N_3 = 1 - \frac{\alpha_3^2}{\alpha_2^2 + \alpha_3^2}$ соответственно.

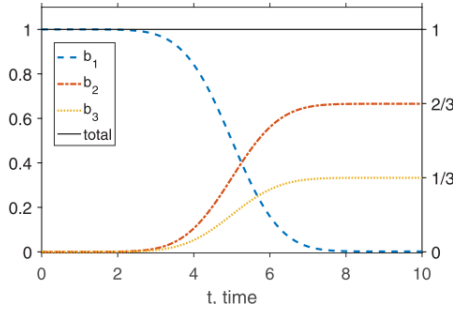


Рис. 2.7. Зависимость частичных и полного норм от времени для случая, показанного на Рис. 2.6.

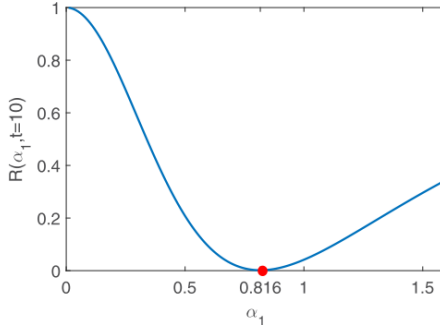


Рис. 2.8. Зависимость коэффициента отражения вершины R от параметра α_1 по истечении времени разделения волнового пакета ($t = 10$). Для фиксированного $\alpha_2 = 1$ и $\alpha_3 = \sqrt{2}$, $R = 0$, когда $\alpha_1 = \sqrt{2/3} \approx 0,816$ (красная точка).

Вывод по главе

В этой главе мы изучили задачу прозрачных квантовых графов, определив их как разветвленные квантовые провода, обеспечивающие безотражательную передачу волн в точках ветвления. Граничные условия для нестационарного уравнения Шредингера на графах, обеспечивающих такую передачу, сформулированы в явном виде. Получено простое условие, делающее обычные граничные условия типа Кирхгофа в вершине эквивалентными условиям прозрачных границ.

Для звездообразного графа численно показана безотражательная передача гауссова волнового пакета через вершины, если выполняются эти ограничения. Данный метод может быть легко обобщен для произвольных топологий графов, которые содержат любой подграф, связанный с двумя или более исходящими полубесконечными связями.

Мотивацией для изучения прозрачных квантовых графов служит их различное практическое использование в важных проблемах оптики, конденсированных сред и полимеров. Одной из проблем, позволяющих непосредственно применить вышеуказанную модель, является перенос носителей заряда в проводящих полимерах, которые представляют собой сильно разветвленные наноразмерные структуры. Безотражательная передача носителей заряда в этих структурах обуславливает высокую проводимость и оптимальное функционирование различных электронных устройств. Одна из таких структур недавно обсуждалась в контексте нелинейных носителей заряда в разветвленных проводящих полимерах [18]. Более привлекательные приложения возможно также в линейных волоконно-оптических сетях, где динамика волн описывается при помощи уравнения Гельмгольца.

Наконец, отметим, что применение вышеуказанного подхода для других линейных волновых уравнений, таких как уравнения теплопроводности, диффузии, уравнения Дирака и Клейна-Гордона, должно быть довольно простым. Кроме того,

метод можно модифицировать и применять для нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, широко используемых в физике.

Далее, также была рассмотрена проблема динамики дираковской частицы в прозрачных квантовых графах. Граничные условия для нестационарного уравнения Дирака на графах, обеспечивающего отсутствие обратного рассеяния в вершине, сформулированы в явном виде.

Безотражательная передача гауссовского волнового пакета через вершины, при условии, что эти ограничения выполнены, численно показана для звездообразного графа. Этот подход может быть непосредственно обобщен для произвольных топологий графов, которые содержат любой подграф, связанный с двумя или более исходящими полубесконечными связями.

Условие, которое делает обычное граничное условие типа Кирхгофа в вершине эквивалентным прозрачным, получено в виде простого правила сумм.

Предложенная модель может быть применена для широкого круга практически важных задач физики конденсированных сред, где квазичастицы Дирака появляются в разветвленных нанолентах графена, сетках УНТ и разветвленных топологических изоляторах. Кроме того, этот подход можно использовать для моделирования динамики поляронов [128] в разветвленных проводящих полимерах, где может происходить безотражательная передача носителей заряда через точки ветвления.

ГЛАВА III

МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ СОЛИТОНОВ В ПРОЗРАЧНЫХ СЕТЕПОДОБНЫХ СТРУКТУРАХ

Моделирование динамики солитонов в разветвленных структурах и сетях является актуальной проблемой для множества важных задач в оптике, гидродинамике, физике конденсированных сред, биофизике и полимерах. Мотивацией к решению подобных задач является тот факт, что для высокоэффективной передачи информации, заряда, тепла, спинов и оптических сигналов в форме солитонов требуется разработка эффективных моделей, обеспечивающих возможность управления транспортом волн в данных низкоразмерных материалах. Изучение транспорта солитонов в разветвленных структурах привлекает большое внимание [11–41].

Эффективная модель, которая может быть использована для моделирования динамики солитонов в сетях, основана на решении нелинейных волновых уравнений на метрических графах. Такие метрические графы представляют собой набор связей (каждой из которых назначена длина), связанных друг с другом в соответствии с правилом, которое называется топологией графа. Решение волнового уравнения в такой области требует задания граничных условий как в точках ветвления (вершинах), так и на концах каждой ветви. В течение последнего десятилетия различные нелинейные волновые уравнения в сетях стали одной из быстро развивающихся тем в теоретической и математической физике. Начало изучения нелинейного уравнения Шредингера (НЛУШ) и динамики солитонов в сетях относится к работам [11, 12], где показана интегрируемость НЛУШ при определенных условиях. Позже такое исследование было распространено на НЛУШ на плоских графах [129] и на уравнение синус-Гордона на графах [15], на нелинейное уравнение Дирака [17]. Подробнее о соответствующей

стационарной задаче можно узнать из [13, 16, 22, 23]. Отметим, что линейный аналог этих задач, которые называются квантовыми графами, ранее изучался в различных контекстах (см., например, [7, 130]). Развитие метода на случай нелинейного рассеяния обсуждалось в [131, 132].

Очень важной особенностью волнового транспорта в сетях является прохождение солитонов через точки ветвления сети, что обычно сопровождается отражением (обратным рассеянием) волны в этих точках. Если отражение превосходит по сравнению с переходом, то «удельное сопротивление» сети по отношению к распространению солитонов становится большим, что делает такую сеть менее эффективной для использования передачи сигнала. Поэтому, с точки зрения практического применения, очень важно уменьшить такое удельное сопротивление путем обеспечения минимума отражения или его отсутствия. Эта задача приводит к задаче настраиваемого транспорта солитонов в сетях, идеальным результатом которого должна стать безотражательная передача волн через точки ветвления структуры. Для практического применения в физике конденсированных сред такая передача подразумевает баллистический транспорт заряда, спина, тепла и других носителей в низкоразмерных разветвленных материалах. А такие материалы необходимы для функционализации низкоразмерных материалов, имеющих разветвленную структуру.

Безотражательный транспорт солитонов в оптоволоконных сетях является еще одной немаловажной задачей для волоконной оптики, поскольку многие информационно-коммуникационные устройства (например, компьютеры, компьютерные сети, телефоны и т.д.) используют солитоны для передачи информации (сигнала). Такие сети также используются в различных оптоэлектронных устройствах. Высокая скорость передачи данных без потерь в таких устройствах требует

минимального отражения или его отсутствия. Важными областями, где требуется безотражательный или баллистический транспорт оптических солитонов в сетях, являются молекулярная электроника и проводящие полимеры [18].

Ранее возможность безотражательной передачи солитонов в сетях рассматривалась в нескольких исследованиях. В частности, в работах [11, 12] было найдено, что транспорт солитонов через точку ветвления сети может быть безотражательной, при условии выполнения определенных ограничений. Также было показано, что эти ограничения обеспечивают интегрируемость НЛУШ в сетях. Позднее аналогичный эффект наблюдался и для других нелинейных уравнений в частных производных (УЧП), таких как уравнение синус-Гордона [15] и нелинейное уравнение Дирака [17]. Другими словами, вышеприведенные исследования выявили гипотезу (по крайней мере, для немногих УЧП), которая гласит, что если нелинейное волновое уравнение на сети является интегрируемым, то передача солитонов через точки ветвления становится безотражательной.

В этой главе мы приводим доказательство вышеизложенной гипотезы, показывая, что условие, обеспечивающее такую безотражательную передачу и интегрируемость НЛУШ в сетях, делают обычные граничные условия типа Кирхгофа на вершине эквивалентными так называемым прозрачным граничным условиям (ПГУ).

§3.1. Прозрачные граничные условия для НЛУШ на прямой

Задача прозрачных граничных условий (ПГУ) для линейных дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП) является хорошо изученной темой в математической и теоретической физике (см., например, [49, 50, 52–55, 59–64] для обзора). ПГУ позволяют формулировать задачи ДУЧП в ограниченной области, первоначально

поставленную в неограниченной области, делая ее решаемой для соответствующего численного решения.

Тем не менее, несмотря на такой прогресс в последние десятилетия, для нелинейных уравнений в частных производных тема еще недостаточно изучена из-за отсутствия интегральных преобразований (Лапласа, Фурье, z-преобразования) в нелинейном случае. Одним из наиболее эффективных подходов для нелинейного случая является рассмотрение нелинейного члена как потенциала в линейном ДУЧП, который называется «потенциальный подход». Ниже мы кратко приведем этот метод, основываясь на [60, 62].

Рассмотрим волновое движение (частиц) на прямой $(-\infty, +\infty)$, описываемое следующим нестационарным нелинейным уравнением Шрёдингера (НЛУШ):

$$i\partial_t\psi + \partial_x^2\psi + \beta|\psi|^2\psi = 0, \quad x \in R, \quad t > 0, \quad (3.1)$$

с начальным условием

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x), \quad x \in R, \quad (3.2)$$

В новаторских работах [42, 44], где были получены явные формы ПГУ для линейных волновых уравнений, основным физическим условием, которое должно выполняться бегущими волнами, было отсутствие волн, идущих в левом направлении на правой границе ($x = L$) и отсутствие проходящих справа волн на левой границе ($x=0$). Однако вывод ПГУ для нелинейного случая гораздо сложнее, чем для линейного. Тем не менее, можно использовать так называемый потенциальный подход [67] и рассмотреть формально уравнение (3.1) как линейное уравнение Шрёдингера с потенциалом $V = V(x, t) = \beta |\psi(x, t)|^2$.

Тогда можно переписать уравнение (3.1) в «линейной форме» в виде

$$i\partial_t\psi + \partial_x^2\psi + V\psi = 0, \quad x \in R, \quad t > 0. \quad (3.3)$$

Обозначим через ψ решение уравнения (3.3), а через v – новое неизвестное, определяемое соотношением

$$v(x, t) = e^{-iv(x, t)} \psi(x, t), \quad (3.4)$$

где

$$v(x, t) = \int_0^t V(x, s) ds. \quad (3.5)$$

Получаем для производных по времени и пространству ψ в формуле (3.3) следующее

$$i\partial_t \psi = e^{iv} (i\partial_t - V)v, \quad (3.6)$$

$$\partial_x^2 \psi = ie^{iv} (\partial_x^2 v + 2i\partial_x v \cdot \partial_x v + i\partial_x^2 v \cdot v - (\partial_x v)^2 v), \quad (3.7)$$

и таким образом v удовлетворяет уравнению типа Шредингера

$$L_{SE}(x, t, \partial_x, \partial_t)v := i\partial_t v + \partial_x^2 v + A\partial_x v + Bv = 0, \quad (3.8)$$

с $A = 2i\partial_x v$ и $B = i\partial_x^2 v - (\partial_x v)^2$.

Теперь, разложив факторизацию (3.8), получим

$$\begin{aligned} L_{SE} &= (\partial_x + i\Lambda^-)(\partial_x + i\Lambda^+) \\ &= \partial_x^2 + i(\Lambda^- + \Lambda^+)\partial_x + iOp(\partial_x \lambda^+) - \Lambda^- \Lambda^+, \end{aligned} \quad (3.9)$$

где $\Lambda^\pm = \Lambda^\pm(x, t, \partial_t)$ является классическим псевдодифференциальным оператором [45], а $\lambda_{1/2}^\pm$ являются основными символами операторов $\Lambda^\pm$, заданных в виде $\lambda_{1/2}^\pm = \mp \sqrt{-\tau}$ с некоторой функцией τ . Полный символ $\lambda^\pm = \sigma(\Lambda^\pm)$ от $\Lambda^\pm$ допускает разложение асимптотики в неоднородных символах в виде

$$\lambda^\pm = \sigma(\Lambda^\pm) \sim \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \lambda_{1/2-\alpha/2}^\pm. \quad (3.10)$$

Из выражения (3.9) выводим систему операторов

$$i(\Lambda^- + \Lambda^+) = A, \quad (3.11)$$

$$iOp(\partial_x \lambda^+) - \Lambda^- \Lambda^+ = i\partial_t + B, \quad (3.12)$$

которая позволяет получить следующую символическую систему уравнений:

$$i(\lambda^- + \lambda^+) = A, \quad (3.13)$$

$$i\partial_x \lambda^+ - \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_t^\alpha \lambda^- \partial_t^\alpha \lambda^+ = -\tau + B. \quad (3.14)$$

Если мы идентифицируем члены порядка $1/2$ в формуле (3.13), то получаем $\lambda_{1/2}^- = -\lambda_{1/2}^+$. Затем из уравнения (3.14) получаем

$$\lambda_{1/2}^\pm = \mp \sqrt{-\tau}. \quad (3.15)$$

Оператор Дирихле-Неймана соответствует выбору $\lambda_{1/2}^\pm = -\sqrt{-\tau}$. Из факторизации (3.8) мы имеем следующий ПГУ, примененный к неизвестной волновой функции v на искусственных границах при $x = 0$ и $x = L$

$$(-\partial_x + i\Lambda^+)v(0, t) = 0, \quad (3.16)$$

$$(\partial_x + i\Lambda^+)v(L, t) = 0. \quad (3.17)$$

Затем с помощью уравнения (3.4) формальные ПГУ для ψ при $x = 0$ и $x = L$ можно записать в виде [60]

$$-\partial_x \psi(0, t) + e^{-i\pi/4} e^{iv(0,t)} \partial_t^{1/2} (e^{-iv(0,t)} \psi(0, t)) = 0, \quad (3.18)$$

$$\partial_x \psi(L, t) + e^{-i\pi/4} e^{iv(L,t)} \partial_t^{1/2} (e^{-iv(L,t)} \psi(L, t)) = 0, \quad (3.19)$$

где дробная $1/2$ -производная определяется как

$$\partial_t^{1/2} f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_t \int_0^t f(s) / \sqrt{t-s} ds. \quad (3.20)$$

Отметим, что в (3.20) производная может быть выполнена непосредственно, но это увеличило бы сингулярность в ядре конволюции. Кроме того, формула (3.20) лучше подходит для последующих дискретизаций. Простые вычисления показывают, что уравнения (3.18) и (3.19) эквивалентны так называемому граничному условию импеданса, [53, 65], которое имеет вид оператора Неймана-Дирихле.

Формально, уравнения (3.18) и (3.19) аналогичны таковым для линейного случая. Отметим, что детальное изучение уравнений (3.1), (3.2), (3.18) и (3.19) можно найти в работах [60, 62], где также представлены схема дискретизации и численный метод для этой задачи. Граничные условия (3.18) и (3.19) выполняются как для случая фокусировки ($\beta > 0$), так и для случая дефокусировки ($\beta < 0$). В следующем разделе мы выводим такие граничные условия для НЛУШ на метрических графах.

§3.2. Прозрачные граничные условия для НЛУШ на метрических графах

Динамика солитонов в сетях является одним из быстро развивающихся направлений за последнее десятилетие. Первое изучение подобной задачи рассматривалось в [11], где были получены солитонные решения НЛУШ на метрических графах, и интегрируемость задачи при определенных ограничениях была показана через доказательство существования бесконечного числа сохраняющихся величин.

Интересной особенностью, обнаруженной в [34], является тот факт, что для интегрируемых случаев прохождение солитонов через вершины графа безотражательное, т.е. в точке ветвления графа, обратное рассеяние солитонов отсутствует. Объяснение такого эффекта было приведено в недавних работах [34, 133], где было указано, что, если параметры обобщенных граничных условий Кирхгофа на звездообразном графе связаны с параметрами нелинейного эволюционного уравнения и удовлетворяют некоему ограничению, то нелинейное эволюционное уравнение на звездообразном графе можно привести к однородному уравнению на бесконечной прямой.

В данной работе мы приводим доказательство этой гипотезы, показывая, что граничные условия вершин в виде непрерывности с весовыми коэффициентами и обобщенное правило Кирхгофа, становятся эквивалентными прозрачным граничным условиям, если параметры задачи удовлетворяют условию интегрируемости, заданному в виде правила сумм. Для этого мы применим вышеописанный метод, чтобы задать ПГУ для НЛУШ на метрических графах. Перед тем, как сделать это, давайте кратко вспомним трактовку НЛУШ на метрических графах, см. [11]. Рассмотрим звездообразный граф с тремя ребрами B_j (см. Рис. 3.1), для которых определена координата x_j . Выбирая начало координат в вершине 0, для ребра B_1 мы определяем $x_1 \in (-\infty, 0]$, а для $B_{1,2}$ фиксируем $x_{2,3} \in [0, +\infty)$. В дальнейшем мы будем использовать сокращенное обозначение $\Psi_j(x)$ для $\Psi_j(x_j)$, где x – координата ребра j , к которой относится компонента Ψ_j . Нелинейное уравнение Шрёдингера на каждом ребре B_j такого графа можно записать в виде

$$i\partial_t \psi_j + \partial_x^2 \psi_j + \beta_j |\psi_j|^2 \psi_j = 0, \quad x \in B_j, \quad t > 0. \quad (3.21)$$

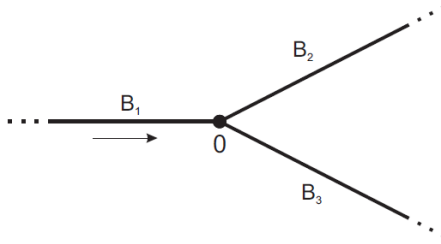


Рис. 3.1: Эскиз звездообразного графа с тремя полубесконечными ребрами.

Решение уравнения (3.21) требует задания начальных и граничных условий в точке ветвления. Последнее может быть получено из фундаментальных физических законов, таких как норма и сохранение энергии, которые даны в виде

$$\frac{dN}{dt} = 0, \quad \frac{dE}{dt} = 0, \quad (3.22)$$

где

$$N(t) = \int_{-\infty}^0 |\psi_1|^2 dx + \int_0^{\infty} |\psi_2|^2 dx + \int_0^{\infty} |\psi_3|^2 dx$$

и

$$E = E_1 + E_2 + E_3,$$

где

$$E_j = \int_{B_j} \left[\left| \frac{\partial \psi_j}{\partial x} \right|^2 - \frac{\beta_j}{2} |\psi_j|^4 \right] dx.$$

В работе [11] было показано, что законы сохранения (3.22) приводят к следующим условиям в вершине

$$\alpha_1 \psi_1(0) = \alpha_2 \psi_2(0) = \alpha_3 \psi_3(0) \quad (3.23)$$

и обобщенному правилу Кирхгофа

$$\left. \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=0} + \left. \frac{1}{\alpha_3} \frac{\partial \psi_3}{\partial x} \right|_{x=0}, \quad (3.24)$$

где α_j – ненулевые вещественные постоянные. Асимптотические условия для уравнения (3.21) задаются в виде

$$\lim_{|x| \rightarrow +\infty} \psi_j = 0. \quad (3.25)$$

Односолитонные решения уравнения (3.21), удовлетворяющее граничным условиям вершины в (3.23) и (3.24), и асимптотическое условие (3.25) можно записать в виде [11]

$$\psi_j(x, t) = a \sqrt{\frac{2}{\beta_j}} \frac{\exp\left[i\frac{vx}{2} - i\left(\frac{v^2}{4} - a^2\right)t\right]}{\cosh[a(x-l-vt)]}, \quad (3.26)$$

где параметры β_j удовлетворяют правилу сумм

$$\frac{1}{\beta_1} = \frac{1}{\beta_2} + \frac{1}{\beta_3}. \quad (3.27)$$

Здесь v, l и a – независимые от ветвей (связей) параметры, характеризующие соответственно скорость, начальный центр масс и амплитуду солитона.

Уравнение (3.27) представляет условие интегрируемости задачи, заданной уравнениями (3.21), (3.23), (3.24) и (3.25), т.е. интегрируемость НЛУШ на метрическом звездообразном графе, изображенном на Рис. 3.1. В [11] показано, что при

условии (3.27) задача имеет бесконечное число констант движения. Ниже мы покажем дополнительный вывод уравнения (3.27), который можно сформулировать следующим образом: если параметры β_j в уравнении (3.21) удовлетворяют условию (ограничению) (3.27), то граничные условия вершины (3.23) и (3.24) становятся эквивалентными ПГУ в точке 0.

ТЕОРЕМА 3.1. Если выполняется условие правила сумм (3.27), то граничные условия на вершине (3.23) и (3.24) становятся эквивалентными ПГУ на вершине графа.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Без потери общности можно положить $\alpha_j = \sqrt{\beta_j}$. Чтобы задать ПГУ для НЛУШ на метрическом графе, показанном на Рис. 3.1, мы разбиваем всю область (граф) на две области, называемые «внутренняя» ($-\infty < x < 0$) и «внешняя» ($0 < x < \infty$) (подробности см., например, в [52–54, 82]). Соответственно, у нас появляются внутренние и внешние задачи. Внутренняя задача задается на B_1 следующими уравнениями

$$i\partial\psi_1 + \partial_x^2\psi_1 + \beta_1|\psi_1|^2\psi_1 = 0, \quad x < 0, t > 0$$

$$\psi_1|_{t=0} = \Psi^I(x),$$

$$\partial_x\psi_1|_{x=0} = T_+\psi_1|_{x=0}.$$

Внешние задачи для $B_{2,3}$ можно записать в виде

$$i\partial\psi_{2,3} + \partial_x^2\psi_{2,3} + \beta_{2,3}|\psi_{2,3}|^2\psi_{2,3} = 0,$$

$$\psi_{2,3}|_{t=0} = 0,$$

$$\psi_{2,3}|_{x=0} = \Phi_{2,3}(t), \quad \Phi_{2,3}(0) = 0,$$

$$T_+\Phi_{2,3}|_{x=0} = \partial_x\psi_{2,3}|_{x=0}.$$

Перепишем НЛУШ внешних задач для $B_{2,3}$ в виде

$$i\partial\psi_{2,3} + \partial_x^2\psi_{2,3} + V_{2,3}\psi_{2,3} = 0, \quad (3.28)$$

с потенциалами $V_{2,3} = \beta_{2,3}|\psi_{2,3}|^2$.

Далее, мы вводим новые функции $v_{2,3}$, заданные в виде

$$v_{2,3}(x, t) = e^{-iv_{2,3}(x,t)}\psi_{2,3}(x, t), \quad (3.29)$$

где

$$v_{2,3}(x, t) = \int_0^t V_{2,3}(x, s) ds. \quad (3.30)$$

Тогда из факторизации в уравнении (3.9) мы имеем следующие ПГУ для волновых функций $v_{2,3}$:

$$(-\partial_x + i\Lambda^+)v_{2,3}(0, t) = 0. \quad (3.31)$$

Используя формулу (3.29), мы можем записать формальные ПГУ для $\psi_{2,3}$ при $x = 0$ в виде

$$-\partial_x\psi_{2,3}(0, t) + e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{iv_{2,3}(0,t)} \partial_t^{\frac{1}{2}} \left(e^{-iv_{2,3}(0,t)} \psi_{2,3}(0, t) \right) = 0. \quad (3.32)$$

Используя граничное условие вершины (3.23), получим

$$\begin{aligned} \partial_x\psi_{2,3}|_{x=0} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}+i\beta_{2,3}\int_0^t|\psi_{2,3}(0,s)|^2 ds} . \\ \partial_t \int_0^t \frac{\psi_{2,3}(0,\tau) e^{-i\beta_{2,3}\int_0^\tau|\psi_{2,3}(0,s)|^2 ds}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\beta_1}{\beta_{2,3}}} e^{-i\frac{\pi}{4}+i\beta_1\int_0^t|\psi_1(0,s)|^2 ds} . \\ &\quad \partial_t \int_0^t \frac{\psi_1(0,\tau) e^{-i\beta_1\int_0^\tau|\psi_1(0,s)|^2 ds}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Из граничного условия вершины (3.24) и (3.33) получаем

$$\begin{aligned}
\partial_x \psi_1|_{x=0} &= \frac{\sqrt{\beta_1}}{\sqrt{\beta_2}} \partial_x \psi_2|_{x=0} + \frac{\sqrt{\beta_1}}{\sqrt{\beta_3}} \partial_x \psi_3|_{x=0} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \beta_1 \left(\frac{1}{\beta_2} + \frac{1}{\beta_3} \right) e^{-i\frac{\pi}{4} + i\beta_1 \int_0^t |\psi_1(0,s)|^2 ds} \cdot \\
&\quad \partial_t \int_0^t \frac{\psi_1(0,\tau) e^{-i\beta_1 \int_0^\tau |\psi_1(0,s)|^2 ds}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau. \quad (3.34)
\end{aligned}$$

Понятно, что, если правило сумм, заданное уравнением (3.27), выполняется, т.е.

$$\beta_1 \left(\frac{1}{\beta_2} + \frac{1}{\beta_3} \right) = 1,$$

тогда граничное условие, заданное уравнением (3.34), совпадает с уравнением (3.19). Таким образом, выполнение правила сумм (3.27) означает, что граничные условия на вершине (3.23) и (3.24) становятся эквивалентными ПГУ на вершине графа. Теорема доказана.

Численное решение уравнения (3.21) для граничных условий (3.23) и (3.24) подтверждают теорему. На Рис. 3.2 представлен профиль полученного численно солитона $|\psi_j|^2$ в разные моменты времени для режима, когда выполняется правило сумм (3.27). Численное моделирование выполнено для бегущего гауссова волнового пакета, направленного вправо и заданного в виде

$$\Psi^I(x) = (2\pi)^{-\frac{1}{4}} \exp(2.5ix - (x+5)^2/4)$$

для четырех последовательных временных шагов.

Чтобы показать, что для случая, когда нарушается правило сумм, передача солитона сопровождается отражениями, мы рассмотрим коэффициент отражения, который определяется как отношение частичной нормы для первой ветки к полной норме:

$$R = \frac{N_1}{N_1 + N_2 + N_3},$$

как функция от α_1 для фиксированных значений α_2 и α_3 . Из этого графика (Рис.3.3) видно, что коэффициент отражения становится равным нулю при значении α_1 , когда обеспечивается выполнение правила сумм (3.27). Это можно рассматривать как дополнительное подтверждение того, что граничные условия на вершине в уравнениях (3.23) и (3.24) становятся эквивалентными прозрачным. Понятно, что такую гипотезу можно вывести для звездообразного графа с произвольным числом ребер. Наконец, отметим, что вышеупомянутое условие для ПГУ, данное уравнением (3.27) применимо не только для солитонов, но и для произвольных решений НЛУШ на графах.

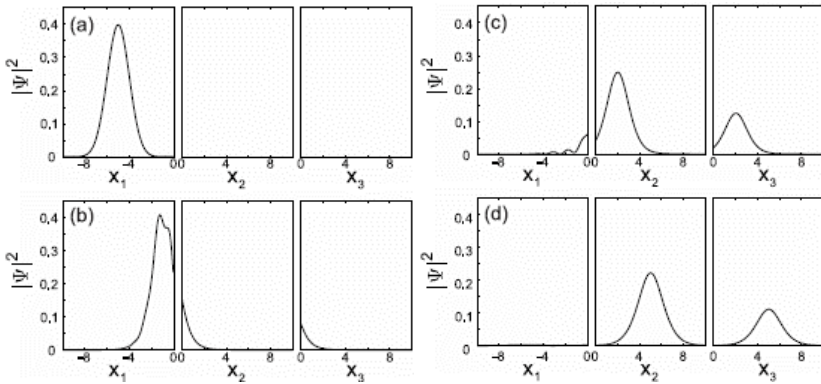


Рис. 3.2: Профиль волновой функции, построенный в разные моменты времени (a) $t = 0$, (b) $t = 1.6$, (c) $t = 2.8$ и (d) $t = 4$ для режима, когда выполняется правило сумм (отражения не происходит): $\alpha_1 = \sqrt{\beta_1} = 1/\sqrt{1/2 + 1/4}$, $\alpha_2 = \sqrt{\beta_2} = \sqrt{2}$ и $\alpha_3 = \sqrt{\beta_3} = \sqrt{4}$. Каждый номер столбца (слева направо) соответствует номеру ребра.

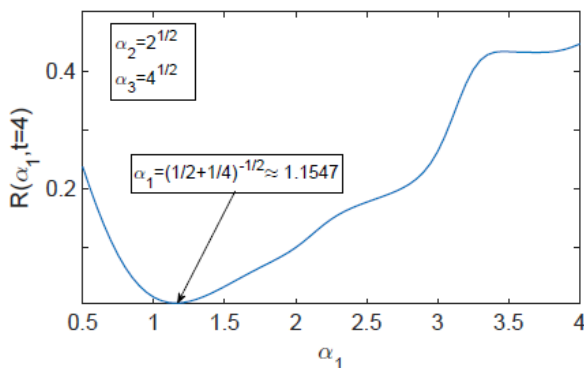


Рис. 3.3. Зависимость коэффициента отражения вершины R от параметра α_1 по истечении времени ($t = 4$).

§3.3. Моделирование векторных солитонов Манакова в прозрачных средах

Система Манакова представляет собой интегрируемую систему связанных нелинейных уравнений Шредингера (НЛУШ), которая допускает различные солитонные решения. Основное применение системы Манакова исходит из нелинейной оптики, где она описывает оптические векторные солитоны, распространяющиеся в средах Керра [134, 135]. Векторные солитоны типа Манакова также появляются в оптических волокнах, при конденсации Бозе-Эйнштейна и в других областях физики (см., например, обзор [134, 135]). К настоящему времени изучены различные аспекты векторных солитонов, описываемых системой Манакова [136–145]. В [146] изучалась экспериментальная реализация таких солитонов в кристаллах. Влияние малых возмущений на столкновение векторных солитонов и его применение в сверхбыстрых устройствах переключения солитонов исследовалось в [147]. Реализация логических вентилей и вычислительных операций с использованием векторных солитонов Манакова обсуждалась в [148]. Подавление солитонной интерференции Манакова в

оптических волокнах, вызванной взаимодействием двух векторных солитонов в уравнениях Манакова, которые управляют передачей импульсов в случайно-двулучепреломляющих световодах, исследовалось в [149]. В [150] изучались блуждающие волны, описываемые системой Манакова с переменными коэффициентами и внешним потенциалом.

В большинстве случаев векторные солитоны используются как носители сигналов в оптике и оптоэлектронике. Для эффективной передачи сигнала в таких устройствах и оптимизации их функциональных свойств необходимо избегать или минимизировать потери сигнала за счет достижения минимума обратного рассеяния солитонов, т.е. путем распространения солитонов без отражений. Успешное решение такой задачи требует построения математических моделей, описывающих безотражательный перенос солитонов в данной среде. Одним из эффективных математических инструментов для решения задачи безотражательного распространения солитонов является наложение так называемых прозрачных граничных условий (ПГУ) на волновое уравнение, описывающее перенос солитонов. Для частных случаев НЛУШ можно сформулировать точное ПГУ в замкнутой форме (см. [151]). Для нелинейных волновых уравнений концепция ПГУ часто опирается на так называемый унифицированный подход [152], который основан на процедуре разделения линейной и нелинейной частей. Однако в целом для уравнений типа НЛУШ оказалось, что так называемый потенциальный подход [60] является наиболее приемлемым. Здесь мы применяем эту многообещающую концепцию на интегрируемую систему Манакова, которая представляет собой связанную систему НУШ с векторными солитонными решениями.

Систему Манакова можно явно записать как

$$\begin{aligned} i\partial_t \Psi_1 + \frac{1}{2} \partial_x^2 \Psi_1 + (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2) \Psi_1 &= 0, \\ i\partial_t \Psi_2 + \frac{1}{2} \partial_x^2 \Psi_2 + (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2) \Psi_2 &= 0, \end{aligned} \quad (3.35)$$

где $(\Psi_1, \Psi_2) = (\Psi_1(x, t), \Psi_2(x, t))$, $x \in \mathbb{R}$, $t > 0$. Впервые она была введена Манаковым [153] для описания стационарных самофокусирующихся электромагнитных волн в однородных волноводных каналах. Односолитонное решение системы Манакова можно записать в виде

$$(\Psi_1^*, \Psi_2^*) = \frac{i\left(\frac{c}{|c|}\right)\eta \exp[2i(\eta^2 - \xi^2)t - 2ix\xi]}{\cosh[2\eta(x + x_0 + 2\xi t)]}, \quad (3.36)$$

где начальное положение солитона задается формулой $x_0 = \ln(2\eta/|c|)/2\eta$, а единичный вектор $[c \equiv (c_{11}, c_{21})]$ определяет поляризацию солитона. Параметры ξ и η обозначают скорость и амплитуду солитона соответственно. Многосолитонные решения системы Манакова могут быть получены с использованием метода билинеаризации Хироты [154, 155]. Уравнение (3.35) утверждает две сохраняющиеся величины, например, норму, определяемую как

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2) dx$$

и энергию, которая задается в виде (см. [162])

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{m=1}^2 \frac{1}{2} \left| \frac{\partial \Psi_m}{\partial x} \right|^2 - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^2 |\Psi_m|^4 - |\Psi_1|^2 |\Psi_2|^2 \right) dx. \quad (3.37)$$

В дальнейшем мы будем использовать эти величины для проверки и подтверждения безотражательного прохождения солитонов Манакова через заданную границу.

§3.4. Прозрачные граничные условия для системы Манакова

Отражение нелинейных волн на границах заданной области является практически важной задачей, решение которой требует использования явного решения волнового уравнения, описывающего эти волны. Математическое описание отсутствия отражения на границе представляет собой довольно сложную задачу, поскольку, в отличие от квантовой механики, для нелинейных волн не существует S-матричной теории. Один из эффективных подходов к решению такой задачи может быть реализован в рамках концепции прозрачных граничных условий. Такие прозрачные граничные условия для эволюционных уравнений могут быть построены путем объединения решений начальных краевых задач во внутренней и внешней областях [49, 52–56, 62–71].

Чтобы построить ПГУ для данного уравнения в частных производных, необходимо сначала разделить исходное волновое уравнение на связанные уравнения, определенные во внутренней (Ω^{int}) и внешней (Ω^{ext}) областях. Затем применяют преобразование Лапласа по времени к внешним задачам и получают решение обыкновенных дифференциальных уравнений в пространственной переменной x . Более того, если можно разрешить только исходящие волны, выбрав асимптотически убывающее решение при $x \rightarrow \pm \infty$ и «сшивая» значения Дирихле и Неймана на искусственных границах внутренней области, необходимо применить обратное преобразование Лапласа, чтобы получить ПГУ [65].

Здесь мы применим изложенные выше концепцию и процедуру вывода ПГУ для системы Манакова (3.35) и их численной реализации в искусственных граничных точках $x = 0$ и $x = L$. Для этого воспользуемся так называемым потенциальным подходом, который ранее использовался для вывода ПГУ для нелинейного уравнения Шредингера [60, 83].

В [82, 83, 157] концепция ПГУ была использована для разработки модели прозрачного квантового графа, которая позже была реализована для описания безотражательного транспорта носителей заряда в разветвленных проводящих полимерах [158]. В рамках такого подхода система Манакова (3.35) формально сводится к системе линейных уравнений в частных производных

$$\begin{aligned} i\partial_t\Psi_1 + \frac{1}{2}\partial_x^2\Psi_1 + V(x,t)\Psi_1 &= 0, \\ i\partial_t\Psi_2 + \frac{1}{2}\partial_x^2\Psi_2 + V(x,t)\Psi_2 &= 0, \end{aligned} \quad (3.38)$$

где потенциал $V(x, t)$ задается как

$$V(x, t) = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2.$$

Мы также вводим новую векторную функцию

$$\begin{aligned} v(x, t) &= e^{-iv(x,t)}\Psi(x, t), \\ \Psi(x, t) &= \begin{pmatrix} \Psi_1(x, t) \\ \Psi_2(x, t) \end{pmatrix}, \quad v(x, t) = \begin{pmatrix} v_1(x, t) \\ v_2(x, t) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

где

$$v(x, t) = \int_0^t V(x, \tau) d\tau = \int_0^t [|\Psi_1(x, \tau)|^2 + |\Psi_2(x, \tau)|^2] d\tau. \quad (3.40)$$

Взяв здесь частные производные, получим

$$\begin{aligned} \partial_t\Psi &= e^{iv}(\partial_t + iV)v, \\ \partial_x^2\Psi &= e^{iv}(\partial_x^2 + 2i\partial_x v\partial_x + i\partial_x^2 v - (\partial_x v)^2)v. \end{aligned}$$

Подставляя эти уравнения в (3.38), получаем

$$L(x, t, \partial_x, \partial_t)v = i\partial_tv + \frac{1}{2}\partial_x^2v + A\partial_xv + Bv = 0, \quad (3.41)$$

где $A = i\partial_xv$ и $B = \frac{1}{2}[i\partial_x^2v - (\partial_xv)^2]$. Линеаризируем уравнение (3.41), используя исчисление псевдо-дифференциальных операторов (см., например, [159, 160]), получим

$$\begin{aligned} L &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\partial_x + i\Lambda^-\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\partial_x + i\Lambda^+\right) \\ &= \frac{1}{2}\partial_x^2 + \frac{i}{\sqrt{2}}(\Lambda^+ + \Lambda^-)\partial_x + \frac{i}{\sqrt{2}}Op(\partial_x\lambda^+) - \Lambda^-\Lambda^+, \end{aligned} \quad (3.42)$$

где λ^+ – главный символ оператора Λ^+ , а $Op(p)$ обозначает ассоциированный оператор символа p . Из уравнений (3.41) и (3.42) получаем систему операторов

$$\begin{aligned} \frac{i}{\sqrt{2}}(\Lambda^+ + \Lambda^-) &= A, \\ \frac{i}{\sqrt{2}}Op(\partial_x\lambda^+) - \Lambda^-\Lambda^+ &= i\partial_t + B, \end{aligned} \quad (3.43)$$

что дает символическую систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{i}{\sqrt{2}}(\lambda^+ + \lambda^-) &= a, \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\partial_x\lambda^+ - \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_t^\alpha \lambda^- \partial_t^\alpha \lambda^+ &= -\tau + b, \end{aligned} \quad (3.44)$$

где $Op(a) = A$ и $Op(b) = B$ могут быть установлены как $a = A$ и $b = B$, так-как эти две функции соответствуют операторам нулевого порядка. Асимптотическое разложение по неоднородным символам определяется как

$$\lambda^\pm \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \lambda_{1/2-j/2}^\pm \quad (3.45)$$

Подставляя разложение (3.45) в уравнение (3.44), можно отождествить слагаемые порядка $1/2$ в первом уравнении системы (3.43):

$$\lambda_{1/2}^- = -\lambda_{1/2}^+, \quad \lambda_{1/2}^+ = \pm\sqrt{-\tau}. \quad (3.46)$$

Оператор Дирихле – Неймана соответствует выбору $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau}$. Для членов нулевого порядка получаем

$$\begin{aligned} \lambda_0^- &= -\lambda_0^+ - i\sqrt{2}a, \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\partial_x \lambda_{1/2}^+ - (\lambda_0^- \lambda_{1/2}^+ + \lambda_0^+ \lambda_{1/2}^-) &= 0. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Из уравнения (3.47) получаем

$$\begin{aligned} \lambda_0^+ &= -i\frac{\sqrt{2}}{2}a = \frac{\sqrt{2}}{2}\partial_x v, \\ \lambda_0^- &= -\lambda_0^+ - i\sqrt{2}a = \frac{\sqrt{2}}{2}\partial_x v. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Для членов порядка $-1/2$ имеем

$$\frac{i}{\sqrt{2}}(\lambda_{-1/2}^+ + \lambda_{-1/2}^-) = 0, \quad (3.49)$$

$$\frac{i}{\sqrt{2}}\partial_x \lambda_0^+ - (\lambda_{1/2}^- \lambda_{-1/2}^+ + \lambda_0^- \lambda_0^+ + \lambda_{-1/2}^- \lambda_{1/2}^+) = b,$$

так как $\partial_t^\alpha \lambda_{-1/2}^\pm = \partial_t^\alpha \lambda_0^\pm = 0$, $\alpha \in N$. Из (3.49) получаем

$$\lambda_{-1/2}^\pm = 0. \quad (3.50)$$

Далее, можно получить члены следующего порядка в виде

$$\lambda_{-1}^- = -\lambda_{-1}^+, \quad \lambda_{-1}^+ = i\frac{\sqrt{2}}{8\tau}\partial_x V. \quad (3.51)$$

Тогда приближение первого порядка имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \Psi_1 \Big|_{x=0} - e^{-i\pi/4} e^{iv} \partial_t^{1/2} (e^{-iv} \Psi_1) \Big|_{x=0} &= 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \Psi_2 \Big|_{x=0} - e^{-i\pi/4} e^{iv} \partial_t^{1/2} (e^{-iv} \Psi_2) \Big|_{x=0} &= 0, \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \Psi_1 \Big|_{x=L} + e^{-i\pi/4} e^{iv} \partial_t^{1/2} (e^{-iv} \Psi_1) \Big|_{x=L} &= 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \Psi_2 \Big|_{x=L} + e^{-i\pi/4} e^{iv} \partial_t^{1/2} (e^{-iv} \Psi_2) \Big|_{x=L} &= 0, \end{aligned} \quad (3.53)$$

Приближение второго порядка:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \Psi_1 \Big|_{x=0} - e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{iv} \partial_t^{\frac{1}{2}} (e^{-iv} \Psi_1) \Big|_{x=0} - \\ i \frac{\sqrt{2}}{8} \partial_x V e^{iv} I_t (e^{-iv} \Psi_1) \Big|_{x=0} &= 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \Psi_2 \Big|_{x=0} - e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{iv} \partial_t^{\frac{1}{2}} (e^{-iv} \Psi_2) \Big|_{x=0} - \\ i \frac{\sqrt{2}}{8} \partial_x V e^{iv} I_t (e^{-iv} \Psi_2) \Big|_{x=0} &= 0, \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \Psi_1 \Big|_{x=L} + e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{iv} \partial_t^{\frac{1}{2}} (e^{-iv} \Psi_1) \Big|_{x=L} + \\ i \frac{\sqrt{2}}{8} \partial_x V e^{iv} I_t (e^{-iv} \Psi_1) \Big|_{x=L} &= 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \Psi_2 \Big|_{x=L} + e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{iv} \partial_t^{\frac{1}{2}} (e^{-iv} \Psi_2) \Big|_{x=L} + \\ i \frac{\sqrt{2}}{8} \partial_x V e^{iv} I_t (e^{-iv} \Psi_2) \Big|_{x=L} &= 0, \end{aligned} \quad (3.55)$$

где $I_t(f) = \int_0^t f(\tau) d\tau$. В отличие от стандартных граничных условий Дирихле, Неймана или Робина, граничные условия, заданные уравнениями (3.53) и (3.55) довольно сложны и могут быть реализованы только численно. Поэтому в следующем разделе мы представим их численную реализацию для системы Манакова (3.35).

Для численного решения системы (3.35) путем наложения прозрачных граничных условий, заданных уравнениями (3.53) и (3.55) необходимо использовать эффективную схему дискретизации как для уравнения (3.35), так и для граничных условий. В случае прозрачных граничных условий точность и устойчивость численного решения очень чувствительны к выбору схемы дискретизации. Далее мы приводим численную схему для уравнения (3.35) и методику реализации прозрачных граничных условий.

Дискретизация уравнения

Численное решение связанных уравнений Шредингера является хорошо изученной задачей, и к настоящему времени в литературе разработаны различные высокоточные численные методы (см., например, [161–165]). Здесь мы используем метод явной средней точки [166], так называемый метод конечных разностей "leapfrog", который задается как

$$i \frac{\Psi_{1,j}^{n+1} - \Psi_{1,j}^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{1}{2} D_x^2 \Psi_{1,j}^n + V_j^n \Psi_{1,j}^n = 0,$$

$$i \frac{\Psi_{2,j}^{n+1} - \Psi_{2,j}^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{1}{2} D_x^2 \Psi_{2,j}^n + V_j^n \Psi_{2,j}^n = 0, \quad (3.56)$$

со стандартным разностным фактором второго порядка

$$D_x^2 \Psi_j^n = \frac{1}{\Delta x^2} (\Psi_{j+1}^n - 2\Psi_j^n + \Psi_{j-1}^n)$$

и дискретным потенциалом

$$V_j^n = |\Psi_{1,j}^n|^2 + |\Psi_{2,j}^n|^2,$$

где Δt и Δx – шаги дискретизации по времени и по пространству, соответственно. Отметим, что существуют другие неявные или полуявные методы с более высокой точностью [164–169]; однако сложность ПГУ заставляет нас выбирать между точностью и вычислительными затратами. Этот метод был выбран из-за его простой реализации и низкой ресурсоёмкости шага. Это приводит к явной конечно-разностной схеме

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^{n-1} + i\Delta t D_x^2 \mathbf{U}_j^n + 2i\Delta t V_j^n \mathbf{U}_j^n, \quad (3.57)$$

где

$$\mathbf{U}_j^n = \begin{pmatrix} \Psi_{1,j}^n \\ \Psi_{2,j}^n \end{pmatrix}.$$

Кроме того, мы должны реализовать прозрачные граничные условия, заданные уравнениями (3.52) и (3.53) или уравнения (3.54) и (3.55) в приведенных выше численных методах.

Реализация ПГУ

Дискретизация ПГУ, заданная уравнениями (3.52) и (3.53), его последующая реализация в численной схеме для уравнения (3.35), и обеспечение устойчивости всей численной схемы – довольно сложная задача. Наличие дробной производной также делает схему дискретизации очень сложной и нестабильной. Следовательно, необходимо найти подходящую численную схему, которая будет устойчивой в сочетании с прозрачными граничными условиями. Для этого необходимо выполнить анализ устойчивости выбранной схемы дискретизации, чтобы изучить ее устойчивость. Здесь мы даем эффективную схему дискретизации для ПГУ, которая

может быть реализована с высокой точностью и стабильностью в сочетании со схемой дискретизации для уравнения (3.35). Мы формулируем схему только для $x = L$, учитывая, что для левой границы (при $x = 0$) реализация может быть проделана аналогичным образом.

Аппроксимация дробно-дифференциального оператора задается численной квадратурной формулой [60]

$$\partial_t^{1/2} f(t_n) \approx \frac{2}{\sqrt{2\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_k f^{n-k},$$

где $\{f^n\}_{n \in N}$ – последовательность комплексных значений, аппроксимирующая $\{f(t_n)\}_{n \in N}$, а $(\beta_k)_{k \in N}$ – последовательности, определяемые формулой

$$(\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5, \dots) = \left(1, -1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}, -\frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}, \dots\right).$$

Функция $v(x, t)$ заданная уравнением (6.6) может быть дискретизирована с помощью правила трапеций:

$$v_j^n = \Delta t \left[\sum_{k=1}^{n-1} V_j^k + \frac{1}{2} V_j^n \right] \text{ для } n \geq 2,$$

с $v_j^0 = 0$ и $v_j^1 = \frac{\Delta t}{2} V_j^1$. Отметим, что член $\frac{1}{2} V_0^n$ был опущен, поскольку предполагается, что исходные данные расположены компактно, следовательно, V_0^n равно нулю. Затем дискретизируем функцию $e^{iv(x,t)}$ из (3.39) в виде

$$\begin{aligned} E_j^n &= \exp(iv_j^n) = \exp\left(i\Delta t \sum_{k=1}^{n-1} V_j^k\right) \exp\left(i\Delta t \frac{1}{2} V_j^n\right) \\ &= \widetilde{E_j^{n-1}} \exp\left(i\Delta t \frac{1}{2} V_j^n\right), \end{aligned}$$

где $\widetilde{E_j^{n-1}} = \exp(i\Delta t \sum_{k=1}^{n-1} V_j^k)$. Таким образом, приближение первого порядка оператора ПГУ на правой границе $j = J$ (3.52) может быть аппроксимировано дискретными свертками

$$(\Lambda_1^n)_I = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} E_J^n \sum_{k=0}^n \beta_k \overline{E_J^{n-k}} \Psi_{1,J}^{n-k},$$

$$(\Lambda_2^n)_I = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} E_J^n \sum_{k=0}^n \beta_k \overline{E_J^{n-k}} \Psi_{2,J}^{n-k},$$

где $\overline{E_J^n}$ обозначает комплексное сопряжение E_J^n . Тогда значения волновой функции на правой границе могут быть получены путем решения системы нелинейных уравнений относительно $(\Psi_{1,J}^n, \Psi_{2,J}^n)^T$, заданных в виде

$$\frac{\Psi_{1,J}^n - \Psi_{1,J-1}^n}{\Delta x} + e^{-i\pi/4} \frac{2}{\sqrt{\Delta t}} \left[\Psi_{1,J}^n + \widetilde{E_J^{n-1}} \exp\left(i \frac{\Delta t}{2} (|\Psi_{1,J}^n|^2 + |\Psi_{2,J}^n|^2)\right) \sum_{k=1}^n \beta_k \overline{E_J^{n-k}} \Psi_{1,J}^{n-k} \right] = 0,$$

$$\frac{\Psi_{2,J}^n - \Psi_{2,J-1}^n}{\Delta x} + e^{-i\pi/4} \frac{2}{\sqrt{\Delta t}} \left[\Psi_{2,J}^n + \widetilde{E_J^{n-1}} \exp\left(i \frac{\Delta t}{2} (|\Psi_{1,J}^n|^2 + |\Psi_{2,J}^n|^2)\right) \sum_{k=1}^n \beta_k \overline{E_J^{n-k}} \Psi_{2,J}^{n-k} \right] = 0,$$

Используя тот же подход, мы можем продолжить дискретизацию второго приближения. Напомним, что $V(x, t) = \bar{\Psi}_1 \Psi_1 + \bar{\Psi}_2 \Psi_2$, и аппроксимируем $\partial_x V(x, t)$ на правой границе $x = L$ (т.е. $j = J$) с помощью

$$dV_J^n = \frac{1}{\Delta x} \left(2|\Psi_{1,J}^n|^2 - \overline{\Psi_{1,J-1}^n} \Psi_{1,J}^n - \Psi_{1,J-1}^n \overline{\Psi_{1,J}^n} + 2|\Psi_{2,J}^n|^2 - \overline{\Psi_{2,J-1}^n} \Psi_{2,J}^n - \Psi_{2,J-1}^n \overline{\Psi_{2,J}^n} \right),$$

где $\bar{\Psi}$ – комплексное сопряжение Ψ . Затем, снова используя метод трапеций, аппроксимируем интегральный член $I_t(\cdot)$ в (3.55) с помощью

$$I_{m,t}^n = \Delta t \left(\sum_{k=1}^{n-1} \overline{E_J^k} \Psi_{m,J}^k + \frac{1}{2} \overline{E_J^n} \Psi_{m,J}^n \right), \quad m = 1, 2.$$

Таким образом, приближение второго порядка оператора ПГУ (3.55) может быть аппроксимировано в виде

$$(\Lambda_1^n)_{II} = (\Lambda_1^n)_I + i \frac{\sqrt{2}}{8} dV_J^n E_J^n I_{1,t}^n,$$

$$(\Lambda_2^n)_{II} = (\Lambda_2^n)_I + i \frac{\sqrt{2}}{8} dV_J^n E_J^n I_{2,t}^n,$$

Опять же, значения волновой функции на правой границе могут быть получены путем решения системы нелинейных уравнений относительно $(\Psi_{1,J}^n, \Psi_{2,J}^n)^T$, заданных в виде

$$\begin{aligned}
& \frac{\Psi_{1,J}^n - \Psi_{1,J-1}^n}{\Delta x} + e^{-i\pi/4} \frac{2}{\sqrt{\Delta t}} \left[\Psi_{1,J}^n \right. \\
& \quad + \widetilde{E_j^{n-1}} \exp\left(i \frac{\Delta t}{2} (|\Psi_{1,J}^n|^2 \right. \\
& \quad \left. + |\Psi_{2,J}^n|^2)\right) \sum_{k=1}^n \beta_k \overline{E_j^{n-k}} \Psi_{1,J}^{n-k} \left. \right] \\
& \quad + \frac{i\Delta t}{4\Delta x} \left(2|\Psi_{1,J}^n|^2 - \overline{\Psi_{1,J-1}^n} \Psi_{1,J}^n - \Psi_{1,J-1}^n \overline{\Psi_{1,J}^n} \right. \\
& \quad \left. + 2|\Psi_{2,J}^n|^2 - \overline{\Psi_{2,J-1}^n} \Psi_{2,J}^n - \Psi_{2,J-1}^n \overline{\Psi_{2,J}^n} \right) \\
& \quad \times \widetilde{E_j^{n-1}} \exp\left(i \frac{\Delta t}{2} (|\Psi_{1,J}^n|^2 + |\Psi_{2,J}^n|^2)\right) \left(\sum_{k=1}^{n-1} \overline{E_j^k} \Psi_{1,J}^k \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{2} \overline{E_j^n} \Psi_{1,J}^n \right) = 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\Psi_{2,J}^n - \Psi_{2,J-1}^n}{\Delta x} + e^{-i\pi/4} \frac{2}{\sqrt{\Delta t}} \left[\Psi_{2,J}^n \right. \\
& \quad + \widetilde{E_j^{n-1}} \exp\left(i \frac{\Delta t}{2} (|\Psi_{1,J}^n|^2 \right. \\
& \quad \left. + |\Psi_{2,J}^n|^2)\right) \sum_{k=1}^n \beta_k \overline{E_j^{n-k}} \Psi_{2,J}^{n-k} \left. \right] \\
& \quad + \frac{i\Delta t}{4\Delta x} \left(2|\Psi_{1,J}^n|^2 - \overline{\Psi_{1,J-1}^n} \Psi_{1,J}^n - \Psi_{1,J-1}^n \overline{\Psi_{1,J}^n} \right. \\
& \quad \left. + 2|\Psi_{2,J}^n|^2 - \overline{\Psi_{2,J-1}^n} \Psi_{2,J}^n - \Psi_{2,J-1}^n \overline{\Psi_{2,J}^n} \right) \\
& \quad \times \widetilde{E_j^{n-1}} \exp\left(i \frac{\Delta t}{2} (|\Psi_{1,J}^n|^2 + |\Psi_{2,J}^n|^2)\right) \left(\sum_{k=1}^{n-1} \overline{E_j^k} \Psi_{2,J}^k \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{2} \overline{E_j^n} \Psi_{2,J}^n \right) = 0.
\end{aligned}$$

Численный эксперимент

Решим систему связанных нелинейных уравнений Шредингера, заданную уравнением (3.35) на конечном интервале $[0, L]$ и зададим ПГУ на правой границе (при $x = L$). В качестве начального условия выбираем одиночный солитон из точного решения, задаваемого формулой

$$\Psi_1(x, 0) = \sqrt{\alpha} \operatorname{sech}[\sqrt{2\alpha}(x - x_0)] \exp[i\sqrt{2}p(x - x_0)],$$

$$\Psi_2(x, 0) = \sqrt{\alpha} \operatorname{sech}[\sqrt{2\alpha}(x - x_0)] \exp[i\sqrt{2}p(x - x_0)].$$

В наших экспериментах были выбраны следующие параметры системы: $L = 0$; параметры начального условия $\alpha = 1, p = 1, x_0 = 20$; и параметры дискретизации $\Delta x = 0,05$ и $\Delta t = 0,00125$. Эволюция движущегося вправо одиночного солитона показана на Рис. 6.1.

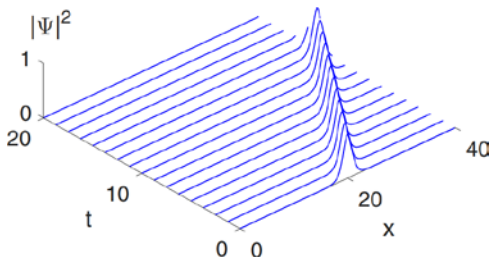


Рис. 3.4. Эволюция бегущего вправо одиночного солитона, моделируемого по разностной схеме (3.57). На правой границе ($x = 40$) заданы ПГУ аппроксимации первого порядка.

Чтобы проверить отсутствие обратного рассеяния, мы численно рассчитаем и построим временную зависимость энергии, заданной формулой (3.37). Тот факт, что энергия становится равной нулю по прошествии времени, можно рассматривать как показатель ПГУ. Предполагая, что волновая функция, определяемая начальными условиями,

пренебрежимо мала вне вычислительной области $[0, L]$, уравнение (3.37) можно переписать как

$$E = \frac{1}{2} \int_0^L \left(\sum_{m=1}^2 \left| \frac{\partial \Psi_m}{\partial x} \right|^2 - (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2)^2 \right) dx. \quad (3.58)$$

В наших расчетах мы используем дискретный аналог энергии $[E(t_n) = E_n]$, задаваемый формулой (3.58):

$$E_n = \frac{1}{4\Delta x} \sum_{j=1}^{J-1} \left[|\Psi_{1,j+1}^n - \Psi_{1,j-1}^n|^2 + |\Psi_{2,j+1}^n - \Psi_{2,j-1}^n|^2 - 2\Delta x^2 (|\Psi_{1,j}^n|^2 + |\Psi_{2,j}^n|^2)^2 \right].$$

Временная эволюция энергии солитона в пределах вычислительного интервала показана на Рис. 3.5. Видно, что энергия исчезает при пересечении солитоном границы, т.е. при отсутствии обратного рассеяния.

В конце, чтобы показать, что численное решение является достоверным, вычислим абсолютную ошибку $\mathcal{E}$, то есть разность численного решения с точным аналитическим решением, измеренным с помощью L^2 -нормы (дискретизированной по правилу трапеций).

$$\begin{aligned} \|\mathcal{E}(t_n)\|_2^2 &= \Delta x \sum_{j=1}^{J-1} \left(|\Delta \Psi_{1,j}^n|^2 + |\Delta \Psi_{2,j}^n|^2 \right) \\ &\quad + \frac{\Delta x}{2} \left(|\Delta \Psi_{1,0}^n|^2 + |\Delta \Psi_{2,0}^n|^2 + |\Delta \Psi_{1,J}^n|^2 + |\Delta \Psi_{2,J}^n|^2 \right), \end{aligned}$$

где $\Delta \Psi_{k,j}^n = \Psi_{k,j}^n - \Psi_k^{\text{exact}}(x_j, t_n)$. График изменения этой ошибки во времени представлен на Рис. 3.6. (красная линия). Поскольку эта ошибка состоит из двух составляющих ошибок, вызванных аппроксимацией и дискретизацией ПГУ и ошибкой дискретизации конечно-разностной схемы, для

сравнения построим график ошибки с пометкой «без ПГУ», где вычисляем решение для расширенного интервала $[0, 2L]$ (таким образом, чтобы правая граница не была достигнута в течение рассматриваемого периода времени). Другими словами, синяя кривая на Рис. 3.6 показывает неизбежную ошибку из-за внутренней схемы, и мы видим, что дополнительная ошибка из-за аппроксимированного ПГУ находится в пределах той же величины 10^{-3} .

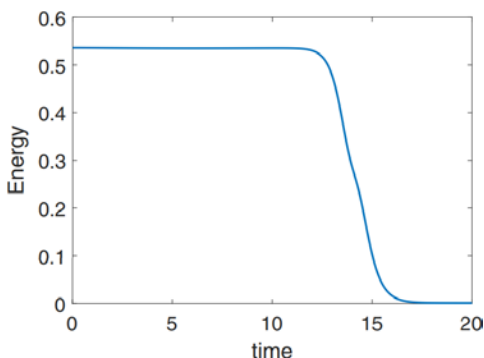


Рис. 3.5. Временная эволюция энергии солитона во внутренней (вычислительной) области $[0, L]$.

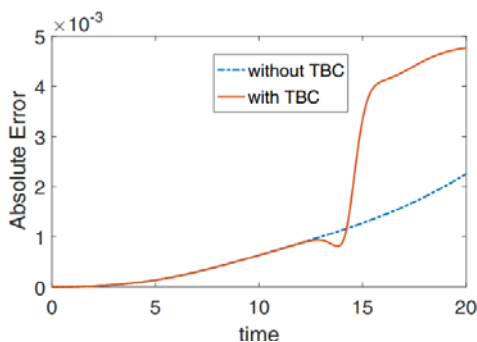


Рис. 3.6. График абсолютной ошибки в L^2 -норме.

§3.5. ПГУ для системы Манакова в разветвленных структурах

Как мы уже говорили в предыдущих параграфах, система Манакова представляет собой интегрируемую систему связанных нелинейных уравнений Шрёдингера (НУШ), которая допускает различные солитонные решения. Она широко используется при моделировании векторных солитонов, распространяющихся в керровских средах (нелинейная оптика), при описании волн материи (физика конденсата Бозе-Эйнштейна (БЭК)) и при описании распространения волн материи, при распространении ортогонально поляризованных пучков в планарных *AlGaAs* – волноводах [146], в устройствах сверхбыстрой солитонной коммутации [147] и при моделировании волн-убийц [150]. Логические вентили и вычислительные операции на основе сталкивающихся векторных солитонов Манакова изучались в [148]. Динамика векторных солитонов Манакова в оптических волокнах изучался в работах [134,135]. Различные математические аспекты системы Манакова и свойств векторных солитонов Манакова изучались в работах [136–145].

В оптических и оптоэлектронных приложениях в качестве носителей сигнала используются векторные солитоны, при этом передача сигнала обычно происходит по разветвленным волокнам и сетям. Для оптимального функционирования таких устройств необходимо избегать или минимизировать потери сигнала за счет достижения минимума обратного рассеяния солитонов, т.е. распространения солитонов без отражений. Успешное решение такой задачи требует построения математических моделей, описывающих настраиваемый перенос солитонов в заданной структуре. Поскольку большинство потерь в сетях происходит в точках разветвления (вершинах), обеспечение отсутствия отражения или поглощения в этих точках является ключевой проблемой во избежание потери сигнала. Для решения таких задач

необходимы эффективные математические модели, описывающие безотражательное распространение солитонов в сетях и разветвленных структурах.

Мощным математическим аппаратом для решения проблемы безотражательного распространения солитонов является наложение так называемых прозрачных граничных условий (ПГУ) на волновое уравнение, описывающее транспорт солитонов. При проектировании задачи на сети в вершинах (узлах) сети необходимо задавать прозрачные граничные условия. Таким образом, проблема оптимизации передачи сигналов в оптоэлектронных сетях приводит к разработке моделей нелинейных сетей с прозрачными узлами. Помимо оптоэлектронных сетей, система Манакова в разветвленных областях находит применение при моделировании динамики векторных солитонов в БЭК на разветвленных ловушках, при реализации солитонных логических элементов в сетях и при транспорте векторных солитонов в разветвленных сетях.

В отличие от линейных эволюционных уравнений, для нелинейных уравнений задача синтеза ПГУ не может быть решена простой факторизацией дифференциального оператора или прямым использованием псевдодифференциальных операторов. Однако для частных случаев нелинейного уравнения Шредингера можно сформулировать точные ПГУ в замкнутом виде, используя так называемый потенциальный подход [87, 88], использованный для моделирования безотражательного распространения солитона Манакова на линии [34], который приводится в предыдущих параграфах монографии.

В этой главе мы развиваем эту многообещающую концепцию для системы Манакова на сетях, моделируя последние в виде метрических графов. Напомним, что метрические графы – это области, состоящие из одномерных проводов, соединенных в узлах. Правило связи называется топологией графа и задается для любого графа так называемой матрицей смежности [37, 33]. Отметим, что

нелинейные эволюционные уравнения на разветвленных областях и сетях привлекли большое внимание в литературе в последнее десятилетие (см. [21-34]).

Система Манакова на метрическом звездообразном графе

В этом разделе мы рассмотрим динамику солитонов Манакова на метрическом звездном графе (см. рис. 3.1), ориентируясь на безотражательное прохождение солитонов через вершину графа. Система Манакова на графах уже рассматривалась в [170], где была показана интегрируемость задачи при определенных условиях и получены явные солитонные решения. С точки зрения формулировки и решения эволюционных уравнений метрический граф представляет собой область, состоящую из разветвленных проводов, соединенных в узлах. На каждой связи (ребре) графа динамика векторных солитонов определяется системой интегрируемых двухкомпонентных связанных нелинейных уравнений Шрёдингера типа Манакова [170]

$$i\partial_t u_j + \frac{1}{2}\partial_x^2 u_j + \beta_j (|u_j|^2 + |v_j|^2) u_j = 0, \quad (3.59a)$$

$$i\partial_t v_j + \frac{1}{2}\partial_x^2 v_j + \beta_j (|u_j|^2 + |v_j|^2) v_j = 0, \quad (3.59b)$$

где $u_j, v_j, j = 1, 2, 3$ – компоненты солитона Манакова, j представляет собой номер ребра, а β_j – коэффициент нелинейности на ребре j .

Обозначим $\Psi_j = (u_j, v_j)^\top$ и зададим граничные условия для вершины, получающиеся из непрерывности веса

$$\alpha_1 \Psi_1(0, t) = \alpha_2 \Psi_2(0, t) = \alpha_3 \Psi_3(0, t) \quad (3.60)$$

и обобщенных правил Кирхгофа

$$\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} \Big|_{x=0} + \frac{1}{\alpha_3} \frac{\partial \Psi_3}{\partial x} \Big|_{x=0}, \quad (3.61)$$

где $\alpha_j (j = 1, 2, 3)$ – ненулевые вещественные константы.

Без ограничения общности подхода можно считать, что $\alpha_j = \sqrt{\beta_j}$. Такой выбор позволяет придать параметрам α_j физический смысл, поскольку β_j являются физическими параметрами, связанными, например, в случае оптических солитонов, с нелинейно-оптическими свойствами среды/материала. Тогда мы предполагаем, что выполнено следующее условие

$$\frac{1}{\beta_1} = \frac{1}{\beta_2} + \frac{1}{\beta_3}. \quad (3.62)$$

Солитонные решения системы Манакова на метрическом звездном графе можно записать в виде [105]

$$\Psi_j(x) = \frac{1}{\sqrt{\beta_j}} \Phi_j(x), \quad (3.63)$$

где $\Phi_j(x)$ – солитонные решения уравнения системы (3.35) Манакова на прямой.

ПГУ для системы Манакова на метрическом звездообразном графе

В этом разделе мы выводим ПГУ для системы Манакова на графах и доказываем, что они эквивалентны вершинным граничным условиям, заданным уравнениями (3.60) и (3.61) при условии, что удовлетворяется правило сумм в уравнении (3.62). Систему (3.59a) – (3.59b) можно формально свести к системе линейных ДУЧП и записать в следующем виде

$$i\partial_t \Psi_j + \frac{1}{2} \partial_x^2 \Psi_j + V_j(x, t) \Psi_j = 0, \quad (3.64)$$

где $\Psi_j = (u_j, v_j)^T$, а потенциал $V_j(x, t)$ задается как

$$V_j(x, t) = \beta_j \left(|u_j|^2 + |v_j|^2 \right).$$

Чтобы задать ПГУ для уравнения (3.64), мы разделяем всю область (граф) на две области, которые мы называем «внутренняя» ($-1 < x < 0$) и «внешняя» ($0 < x < 1$) области. Эти термины были заимствованы из оригинальных работ [52-53], в которых была предложена основная идея построения ПГУ. Соответственно, у нас есть внутренние и внешние задачи. Внутренняя задача для B_1 может быть записана как

$$i\partial_t \Psi_1 + \frac{1}{2} \partial_x^2 \Psi_1 + V_1(x, t) \Psi_1 = 0, \quad (3.65)$$

$$\Psi_1|_{t=0} = \psi^I(x),$$

$$\partial_x \Psi_1|_{x=0} = T_0 \Psi_1|_{x=0}.$$

Внешние задачи для $B_{2,3}$ имеют вид

$$i\partial_t \Psi_{2,3} + \frac{1}{2} \partial_x^2 \Psi_{2,3} + V_{2,3}(x, t) \Psi_{2,3} = 0, \quad (3.66)$$

$$\Psi_{2,3}|_{t=0} = 0,$$

$$\partial_x \Psi_{2,3}|_{x=0} = \Phi_{2,3}(t), \quad \Phi_{2,3}(0) = 0,$$

$$T_0 \Phi_{2,3}|_{x=0} = \partial_x \Psi_{2,3}|_{x=0}$$

Введем следующую новую векторную функцию

$$w(x, t) = e^{-iv_{2,3}(x,t)} \Psi_{2,3}(x, t), \quad (3.67)$$

$$\Psi_{2,3}(x, t) = \begin{pmatrix} u_{2,3}(x, t) \\ v_{2,3}(x, t) \end{pmatrix}, \quad w(x, t) = \begin{pmatrix} \omega_1(x, t) \\ \omega_2(x, t) \end{pmatrix},$$

где

$$v_{2,3}(x, t) = \int_0^t V_{2,3}(x, \tau) d\tau =$$

$$\beta_{2,3} \int_0^t \left(|u_{2,3}(x, \tau)|^2 + |v_{2,3}(x, \tau)|^2 \right) d\tau. \quad (3.67)$$

Используя результаты недавней работы [171], формальные ПГУ для $\Psi_{2,3}$ при $x = 0$ можно записать как

$$\partial_x \Psi_{2,3}|_{x=0} = \sqrt{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{iv_{2,3}} \cdot \partial_t^{\frac{1}{2}} e^{-iv_{2,3}} \Psi_{2,3}|_{x=0}$$

$$+ i \frac{1}{4} \partial_x V_{2,3} e^{iv_{2,3}} I_t e^{-iv_{2,3}} \Psi_{2,3}|_{x=0} = 0,$$

где дробная производная $1/2$ определяется выражением

$$\partial_t^{\frac{1}{2}} f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_t \int_0^t \frac{f(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau,$$

и

$$I_t(f) = \int_0^t f(\tau) d\tau.$$

Используя вершинные граничные условия (3.60) и (3.61), имеем

$$v_{2,3}(0, t) = v_1(0, t), \quad (3.68)$$

$$\frac{1}{\beta_1} \partial_x V_1|_{(x=0)} = \frac{1}{\beta_2} \partial_x V_2|_{x=0} + \frac{1}{\beta_3} \partial_x V_3|_{x=0}, \quad (3.69)$$

что приводит к

$$\begin{aligned}\partial_x \Psi_{2,3}|_{x=0} &= \sqrt{2} \sqrt{\frac{\beta_1}{\beta_{2,3}}} e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{iv_1} \cdot \partial_t^{\frac{1}{2}} e^{-iv_1} \Psi_1|_{x=0} \\ &+ i \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta_1}{\beta_{2,3}}} \partial_x V_{2,3} e^{iv_1} I_t e^{-iv_1} \Psi_1|_{x=0} = 0,\end{aligned}$$

Теперь из граничных условий (3.60) и (3.61) получаем

$$\begin{aligned}\partial_x \Psi_1|_{x=0} &= \frac{\sqrt{\beta_1}}{\sqrt{\beta_2}} \partial_x \Psi_2|_{x=0} + \frac{\sqrt{\beta_1}}{\sqrt{\beta_3}} \partial_x \Psi_3|_{x=0} \quad (3.70) \\ &= \beta_1 \left(\frac{1}{\beta_2} + \frac{1}{\beta_3} \right) \left[\sqrt{2} e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{iv_1} \cdot \partial_t^{\frac{1}{2}} (e^{-iv_1} \Psi_1) \right]_{x=0} \\ &+ i \frac{1}{4} \partial_x V_1 e^{iv_1} I_t (e^{-iv_1} \Psi_1)|_{x=0} = 0.\end{aligned}$$

Граничное условие (3.70) совпадает с граничным условием (3.54) и, таким образом, обеспечивает безотражательную передачу для связи B_1 , если выполняется следующее правило сумм:

$$\beta_1 \left(\frac{1}{\beta_2} + \frac{1}{\beta_3} \right) = 1. \quad (3.71)$$

Таким образом, выполнение правила сумм (3.71) означает, что вершинные граничные условия (3.60) и (3.61) становятся эквивалентными ПГУ в вершине графа.

Хотя приведенная выше трактовка касается простейшей звездообразной топологии с тремя ребрами, она напрямую применима к звездообразному графу с произвольным количеством ребер. Так, для звездообразного графа с N ребрами можно написать

$$\frac{1}{\beta_1} = \sum_{j=2}^N \frac{1}{\beta_j}.$$

Численный эксперимент

В этом разделе мы численно показываем, что выполнение условия (3.71) допускает безотражательное прохождение солитона через вершину графа с граничными условиями в виде (3.60) и (3.61). Экспериментальная установка состоит из звездообразного графа с тремя связями (см. рис. 3.1). Мы рассматриваем солитон, идущий от первого ребра ко второму и третьему, т.е. начальное условие компактно расположено в первом ребре. В качестве начального условия выбираем односолитонное точное решение, задаваемое уравнением

$$G(x) = \sqrt{\sigma} \operatorname{sech}[\sqrt{2\sigma}(x - x_0)] \exp[i\sqrt{2}p(x - x_0)],$$

так, что

$$\Psi_1(x, 0) = G(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\Psi_2(x, 0) = (0, 0)^\top,$$

$$\Psi_3(x, 0) = (0, 0)^\top.$$

В наших численных экспериментах мы использовали явное правило средней точки [166], так называемый метод конечных разностей (leapfrog finite-difference method), который также использовался в предыдущем параграфе для случая на прямой. Были выбраны следующие параметры системы: длины ребер B_1, B_2, B_3 равны $L_1 = L_2 = L_3 = 40$, согласно параметрам начального условия $\sigma = 1, p = 1, x_0 = -20$, дискретизация по пространству $x = 0,05$, шаг по времени $t = 0,00125$. Эволюция движущегося вправо одиночного

солитона показана на Рис. 3.7 для четырех последовательных временных шага. Из этого графика очевидна безотражательная передача солитона.

Наконец, чтобы показать, что в случае нарушения правила сумм прохождение солитона сопровождается отражениями, на Рис. 3.8 коэффициент отражения, который определяется как отношение частной нормы по первой связи к полной норме, т.е.

$$R = \frac{N_1}{N_1 + N_2 + N_3},$$

как функция от β_1 при фиксированных значениях β_2 и β_3 . Здесь частичные нормы для каждого ребра звездообразного графа, определяемые как $N_j = \int (|u_j|^2 + |v_j|^2) dx$, где u_j и v_j – решения системы Манакова на звездообразном графе и интегрирование ведется по j -му ребру.

Из этого графика видно, что коэффициент отражения становится равным нулю при значении β_1 , которое удовлетворяет правилу сумм (3.71).

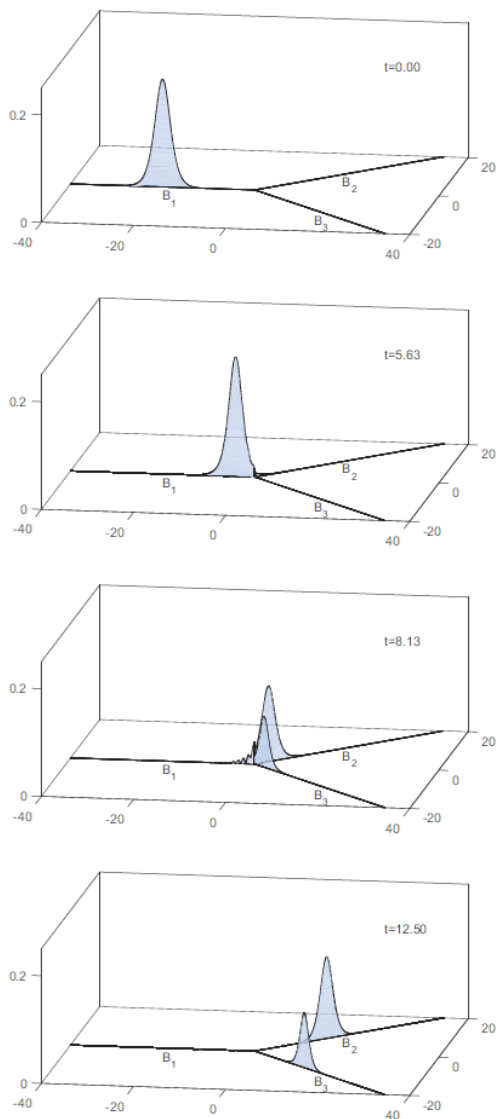


Рис.3.7. Динамика солитона в разные моменты времени для режима, когда выполняется правило сумм (отсутствие отражения): $\beta_1 = 1.2$, $\beta_2 = 2$, $\beta_3 = 3$.

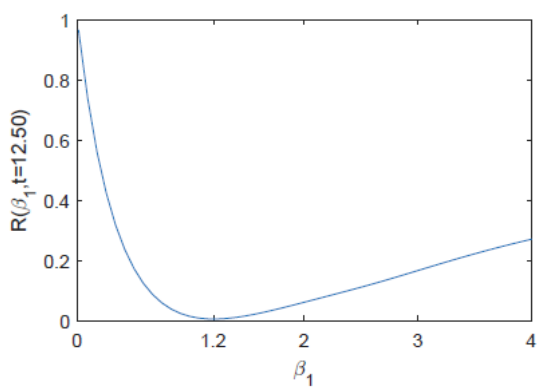


Рис. 3.8: Зависимость коэффициента отражения вершины R от параметра β_1 по истечении времени ($t = 12.50$). Для фиксированных $\beta_2 = 2$ и $\beta_3 = 3$, $R = 0$, когда $\beta_1 = 1.2$.

Вывод по главе

В этой главе была исследована проблема безотражательного транспорта солитонов в точках ветвления сетей путем моделирования динамики солитонов в сетях при помощи нелинейного уравнения Шредингера на метрических графах. Комбинируя понятия прозрачных граничных условий с граничными условиями типа Кирхгофа в вершине, мы вывели условие, которое делает ее эквивалентной прозрачным. Это дает четкое объяснение ранее наблюдавшейся (см. [11]) гипотезы об отсутствии обратного рассеяния солитонов, когда НЛУШ на метрических графах интегрируемо и интегрируемость обеспечивается вышеуказанными ограничениями.

Также, посредством численного решения задачи для звездообразного графа показан безотражательный переход солитонов через вершину в случае, когда параметры удовлетворяют правилу сумм. Заметим, что этот подход может быть напрямую применен к произвольным топологиям графа, которые содержат любой подграф, связанный с двумя или более исходящими, полубесконечными ребрами. Более того, мы полагаем, что наш подход может быть развит и для других уравнений в частных производных, где наблюдается аналогичный режим безотражательного транспорта солитонов синус-Гордона [15] и Дирака [17] через вершину. Отметим, что данный подход может быть применен к другим топологиям графов, таких как древообразный, петлеобразный, в виде треугольника и т.д., при условии, что граф состоит из конечного подграфа и двух или более полубесконечных исходящих ребер.

Вышеуказанная модель для безотражательного транспорта солитонов через точки ветвления сети может иметь непосредственное и важное применение для различных практически важных задач оптики, физики конденсированного состояния и полимеров. Среди таких приложений можно назвать оптоволоконные сети, широко

используемые в вычислительных и коммуникационных технологиях, где передача сигнала осуществляется в форме солитонного транспорта.

В данной работе также изучалось безотражательное прохождение солитонов Манакова, описываемых системой Манакова, на прямой с прозрачными граничными условиями. Эти прозрачные граничные условия были получены аналитически, и была представлена эффективная дискретизация для ПГУ и ее реализация в численном методе для системы Манакова. Отсутствие обратного рассеяния для солитонов Манакова при задании ПГУ было продемонстрировано численным экспериментом. Результаты работы могут быть использованы для моделирования управляемого транспорта солитонов Манакова в оптических средах и для задач оптимизации оптических устройств, в которых такие солитоны выступают в качестве носителей сигнала. Отметим, что наложение прозрачных граничных условий на реальные физические системы – довольно сложная задача, вызванная очень сложной формой ПГУ. Однако в некоторых случаях можно найти физически реалистичные граничные условия, эквивалентные прозрачным. Понятно, что такая эквивалентность не является общей и может предполагаться только при определенных ограничениях. Ранее такие эквивалентные и физически приемлемые граничные условия были найдены, например, для нелинейного (однокомпонентного) уравнения Шредингера на метрических графах в [83] и для некоторых линейных волновых уравнений в [84, 158].

Наконец, мы обнаружили, что вышеупомянутая модель может быть развита для моделирования безотражательного распространения векторных солитонов Манакова в многомерных и разветвленных областях. В этой задаче концепция прозрачных граничных условий применяется к системе Манакова на метрических графах для моделирования безотражательного прохождения векторных солитонов через вершину графа. Показано, что для случая, когда

коэффициенты нелинейности удовлетворяют правилу сумм в уравнении (3.71), вершинные граничные условия в терминах непрерывности с весовыми коэффициентами и обобщенного правила Кирхгофа становятся эквивалентными прозрачным граничным условиям. Хотя приведенное выше исследование сосредоточено на звездообразных разветвленных графах, предложенный нами подход может быть непосредственно применен для широкого класса топологий графов, таких как, например, древовидный граф или H-граф и т.д.

Полученные в данной главе результаты имеют прямое применение при моделировании безотражательного (без потерь) распространения сигналов в оптоэлектронных сетях, оптических волноводах, перестраиваемом транспорте БЭК в разветвленных ловушках и т. д.

ГЛАВА IV

МОДЕЛЬ БЕЗОТРАЖАТЕЛЬНОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ $\mathcal{PT}$ -СИММЕТРИЧНЫХ СОЛИТОНОВ В СЕТЕПОДОБНЫХ СТРУКТУРАХ

Моделирование волновой динамики в различных средах имеет практическое значение в области оптики, оптоэлектроники, гидродинамики, акустики и техники связи. Важной проблемой, которую предстоит решить с помощью таких моделей, является управляемое распространение волн, что означает достижение баллистического и диффузионного состояний или отсутствия обратного рассеяния и отражения в определенных подобластях. В квантовой механике такой цели можно достичь, построив подходящую матрицу рассеяния, обеспечивающую отсутствие отражения.

Однако в случае нелинейного распространения волн невозможно использовать матрицу рассеяния и необходимо разработать эффективные математические инструменты для описания безотражательного распространения. Один из таких инструментов может быть основан на использовании понятия так называемых «прозрачных граничных условий (ПГУ)» (другие названия – «искусственные граничные условия» и «поглощающие граничные условия»). В предыдущих главах данной монографии эта концепция применялась к линейным и нелинейным уравнениям Шрёдингера, уравнению Дирака и системе Манакова.

Напомним основную идею концепции ПГУ, которую можно сформулировать следующим образом: для данного уравнения в частных производных, сформулированного как начальная задача в конечной области, требуется, чтобы решение в одной области совпадало с решением во всем пространстве, ограниченном конечной областью. Этого можно добиться с помощью искусственных граничных условий, имеющих достаточно сложный вид (например, для

уравнений Шрёдингера или Дирака, заданных через дробные производные).

В данной главе монографии мы развиваем концепцию ПГУ для нелокального нелинейного уравнения Шредингера (ННУШ), описывающего динамику РТ-симметричных солитонов. ННУШ было впервые введено Абловицем и Муслимани [172], которые показали интегрируемость задачи и получили свои солитонные решения. Позже оно использовалось в различных контекстах в работах. [172-186]. ННУШ описывает динамику солитонов в средах с самоиндуцированной РТ-симметричной нелинейностью (такая нелинейность может присутствовать, например, в оптическом волноводе с самоиндуцированной потерей усиления). Предложенная нами модель объясняет безотражательное распространение солитонов в таких средах. Полученные здесь прозрачные граничные условия обеспечивают математические условия, гарантирующие отсутствие обратного рассеяния. В практических приложениях граничных условий, например, для разветвленных волноводов, они могут обеспечить физически приемлемые условия на эквивалентность обычной весовой непрерывности и правил Кирхгофа с прозрачными граничными условиями в точке ветвления (см., например, [157] для подробности). Отметим, что безотражательное волновое движение в нелинейных системах рассматривалось ранее в различных контекстах (см., например, [187]).

Мотивация к изучению безотражательного распространения солитонов в низкоразмерных системах обусловлена важностью практического применения такой задачи в различных структурах, встречающихся в оптике, физике конденсированных состояний и гидродинамике. В частности, модель, разработанная в этой работе, может быть использована для описания генерации и распространения солитонов в волоконно-оптических сетях, где каждая ветвь имеет самоиндуцированные коэффициенты усиления-потери, а другие разветвленные волноводы генерируют

самоиндуцированный РТ-симметричный потенциал. Кроме того, экспериментальная реализация такой модели важна для разработки и практической реализации различных РТ-симметричных волоконно-оптических сетей, способных генерировать солитонные импульсы и настраивать распространение сигналов. С помощью эффективного инструмента для безотражательного распространения солитона можно управлять потерями сигнала, обратным рассеянием и модуляцией путем настройки генерации сигнала.

§4.1. Солитонные решения нелокального нелинейного уравнения Шрёдингера

Здесь мы кратко напомним основные результаты по ННУШ на прямой, следуя подходу в работе [172]. Нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера имеет вид

$$i\partial_t q(x, t) + \partial_x^2 q(x, t) + 2 q(x, t) q^*(-x, t) q(x, t) = 0, \quad (4.1)$$

где q^* обозначает комплексное сопряжение q и потенциала, который можно определить как $V(x, t) = 2q(x, t)q^*(-x, t)$, обладает свойством РТ-симметричности, т.е. $V(x, t) = V^*(-x, t)$. Отметим, что нелокальность уравнения (4.1) является результатом того, что эволюция поля $q(x, t)$ в координате x всегда требует информации из противоположной точки $-x$. Для приведенного выше ННУШ существует множество различных типов солитонных решений, а именно дышащие, периодические, рациональные и другие. Односолитонное решение может быть найдено методом обратной задачи рассеяния, как описано в [172]:

$$q(x, t) = -\frac{(2(\eta_1 + \bar{\eta}_1)e^{i\bar{\theta}_1}e^{4i\bar{\eta}_1^2 t}e^{-2\bar{\eta}_1 x})}{1 + e^{i(\theta_1 + \bar{\theta}_1)}e^{-4i(\eta_1^2 - \bar{\eta}_1^2)t}e^{-2(\eta_1 + \bar{\eta}_1)x}}, \quad (4.2)$$

причем η_1 , $\bar{\eta}_1$, θ_1 и $\bar{\theta}_1$ являются действительными константами. Бегущее солитонное решение уравнения (4.1) можно записать в виде [173]

$$q(x, t) = \frac{\alpha_1 e^{-\frac{\Delta}{2}} e^{(\bar{\xi}_{1R} - \xi_{1R}) + i(\bar{\xi}_{1I} - \xi_{1I})}}{2[\cosh(\chi_1)\cos(\chi_2) + i \sinh(\chi_1)\sin(\chi_2)]}, \quad (4.3)$$

где $\xi_{1R} = -k_{1I}(x + 2k_{1R}t)$, $\xi_{1I} = k_{1R}x - (k_{1I}^2 - k_{1R}^2)t$, $\bar{\xi}_{1R} = -\bar{k}_{1I}(x + 2\bar{k}_{1R}t)$, $\bar{\xi}_{1I} = \bar{k}_{1R}x - (\bar{k}_{1I}^2 - \bar{k}_{1R}^2)t$, $\Delta_R = \log\left(\frac{|\alpha_1|^2|\beta_1|^2}{|k_1 + \bar{k}_1|^2}\right)$,
 $\Delta_I = -\frac{i}{2} \log\left(\frac{\alpha_1\beta_1(k_1^* + \bar{k}_1^*)^2}{\alpha_1^*\beta_1^*(k_1 + \bar{k}_1)^2}\right)$, $e^\Delta = -\frac{\alpha_1\beta_1}{(k_1 + \bar{k}_1)^2}$, $\chi_1 = \frac{(\xi_{1R} + \bar{\xi}_{1R} + \Delta_R)}{2}$ и
 $\chi_2 = \frac{(\xi_{1I} + \bar{\xi}_{1I} + \Delta_I)}{2}$.

Интегрируемость задачи доказана в [172], а это означает, что ННУШ имеет множество законов сохранения. В частности, две важные величины сохранения – норма и энергия – были выведены в [172] и могут быть записаны в виде

$$N(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} q(x, t) q^*(-x, t) dx,$$

$$E(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\partial}{\partial x} q(x, t) \cdot \frac{\partial}{\partial x} q^*(-x, t) + q^2(x, t) \cdot q^{*2}(-x, t) \right] dx. \quad (4.4)$$

Приведенные выше солитонные решения уравнения (4.1) получены в предположении асимптотических граничных условий на бесконечности, т.е. $q(x, t) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$. В следующем разделе мы поставим дополнительные (искусственные) граничные условия для заданного конечного интервала $[-L, L]$, позволяющие почти без отражения пройти солитону через точки $\pm L$.

§4.2. Прозрачные граничные условия для нелокального нелинейного уравнения Шрёдингера

Здесь мы рассмотрим задачу о прозрачных граничных условиях для ННУШ (4.1). Для вывода ПГУ для нелокального нелинейного уравнения Шрёдингера воспользуемся так называемым потенциальным подходом, который был предложен ранее в [60] и использован для вывода ПГУ для связанных нелинейных уравнений Шрёдингера [171]. В рамках такого подхода ННУШ формально можно свести к линейному уравнению Шрёдингера

$$i\partial_t q(x, t) + \partial_x^2 q(x, t) + V(x, t)q(x, t) = 0, \quad (4.5)$$

с потенциалом $V(x, t) = 2 q(x, t)q^*(-x, t)$. В оставшейся части этого раздела мы используем ту же процедуру и в конце выводим ПГУ.

Для этого введем новое неизвестное $Q(x, t)$, которое задается соотношением

$$Q(x, t) = e^{-i \mathcal{V}(x, t)} q(x, t), \quad (4.6)$$

где

$$\mathcal{V}(x, t) = \int_0^t V(x, s) ds. \quad (4.7)$$

Временные и пространственные производные от q можно записать при помощи производных от Q как

$$\partial_t q = e^{i\mathcal{V}} (\partial_t + iV) Q, \quad (4.8)$$

и

$$\partial_x^2 q = i e^{i\mathcal{V}} (\partial_x^2 Q + 2i\partial_x \mathcal{V} \partial_x Q + iQ \partial_x^2 \mathcal{V} - (\partial_x \mathcal{V})^2 Q). \quad (4.9)$$

В результате получим уравнение Шрёдингера в терминах $Q(x, t)$ вида

$$L(x, t, \partial_x, \partial_t)Q = i\partial_t Q + \partial_x^2 Q + A\partial_x Q + BQ = 0, \quad (4.10)$$

где $A = 2i\partial_x \mathcal{V}$ и $B = (i\partial_x^2 \mathcal{V} - (\partial_x \mathcal{V})^2)$. Используя псевдодифференциальное операторное исчисление, можно линеаризовать уравнение (4.10) в виде

$$\begin{aligned} L &= (\partial_x + i\Lambda^-)(\partial_x + i\Lambda^+) \\ &= \partial_x^2 + i(\Lambda^+ + \Lambda^-)\partial_x + i\text{Op}(\partial_x \lambda^+) - \Lambda^+ \Lambda^-, \end{aligned} \quad (4.11)$$

где λ^+ – главный символ оператора Λ^+ , а $\text{Op}(p)$ – ассоциированный оператор символа p . Уравнения (4.10) и (4.11) приводят к системе операторов

$$\begin{aligned} i(\Lambda^+ + \Lambda^-) &= A \\ i\text{Op}(\partial_x \lambda^+) - \Lambda^+ \Lambda^- &= i\partial_t + B. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Так как две функции A и B соответствуют операторам нулевого порядка ($\text{Op}(a) = A$ и $\text{Op}(b) = B$), то получается символическая система уравнений вида

$$\begin{aligned} i(\lambda^+ + \lambda^-) &= a \\ i\partial_x \lambda^+ - \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-1)^\alpha}{\alpha!} \partial_\tau^\alpha \lambda^- \partial_t^\alpha \lambda^+ &= -\tau + b. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Асимптотическую эволюцию неоднородных символов можно записать как

$$\lambda^\pm \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \lambda_{\frac{1}{2}-\frac{j}{2}}^\pm. \quad (4.14)$$

Члены порядка $1/2$ в первом соотношении системы (4.13) можно определить, подставив разложение (4.14) в уравнение (4.13):

$$\lambda_{\frac{1}{2}}^- = -\lambda_{\frac{1}{2}}^+, \quad \lambda_{\frac{1}{2}}^+ = \pm\sqrt{-\tau}. \quad (4.15)$$

Здесь выбор $\lambda_{\frac{1}{2}}^+ = \pm\sqrt{-\tau}$ соответствует оператору Дирихле-Неймана. Систему уравнений для членов нулевого порядка можно записать в виде

$$\begin{aligned} \lambda_0^- &= -\lambda_0^+ - ia, \\ i\partial_x \lambda_{\frac{1}{2}}^+ - \left(\lambda_0^- \lambda_{\frac{1}{2}}^+ + \lambda_0^+ \lambda_{\frac{1}{2}}^- \right) &= 0. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Тогда из уравнения (4.16) получаем

$$\begin{aligned} \lambda_0^+ &= -\frac{ia}{2} = \frac{1}{2}\partial_x \mathcal{V}, \\ \lambda_0^- &= -\lambda_0^+ - ia = \frac{1}{2}\partial_x \mathcal{V}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Поскольку $\partial_t^\alpha \lambda_{-\frac{1}{2}}^\pm = \partial_\tau^\alpha \lambda_0^\pm = 0$, $\alpha \in N$, для порядка $-1/2$ получаем

$$\begin{aligned} i\left(\lambda_{-\frac{1}{2}}^+ + \lambda_{-\frac{1}{2}}^-\right) &= 0, \\ i\partial_x \lambda_0^+ - \left(\lambda_{-\frac{1}{2}}^- \lambda_{\frac{1}{2}}^+ + \lambda_0^+ \lambda_0^- + \lambda_{-\frac{1}{2}}^+ \lambda_{\frac{1}{2}}^- \right) &= b. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Из уравнения (4.18) получаем

$$\lambda_{-\frac{1}{2}}^\pm = 0. \quad (4.19)$$

Аналогично можно получить члены следующего порядка:

$$\begin{aligned}\lambda_{-1}^{-} &= -\lambda_{-1}^{+}, \\ \lambda_{-1}^{+} &= \frac{i\partial_x V}{4\tau}.\end{aligned}\quad (4.20)$$

В результате приближение первого порядка имеет вид

$$\partial_x q|_{x=-L} - e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{i\nu} \partial_t^{\frac{1}{2}}(e^{-i\nu} q)|_{x=-L} = 0, \quad (4.21a)$$

$$\partial_x q|_{x=L} + e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{i\nu} \partial_t^{\frac{1}{2}}(e^{-i\nu} q)|_{x=L} = 0. \quad (4.21b)$$

Приближение второго порядка:

$$\begin{aligned}\partial_x q|_{x=-L} - e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{i\nu} \partial_t^{\frac{1}{2}}(e^{-i\nu} q)|_{x=-L} \\ - i \frac{\partial_x V}{4} e^{i\nu} I_t(e^{-i\nu} q)|_{x=-L} = 0,\end{aligned}\quad (4.22a)$$

$$\begin{aligned}\partial_x q|_{x=L} + e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{i\nu} \partial_t^{\frac{1}{2}}(e^{-i\nu} q)|_{x=L} \\ + i \frac{\partial_x V}{4} e^{i\nu} I_t(e^{-i\nu} q)|_{x=L} = 0.\end{aligned}\quad (4.22b)$$

Оператор $\partial_t^{\frac{1}{2}}$, обозначающий оператор дробной производной по времени половинного порядка, определяется как

$$\partial_t^{\frac{1}{2}} f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_t \int_0^t \frac{f(s)}{\sqrt{t-s}} ds,$$

и оператор $I_t(f)$

$$I_t f(t) = \int_0^t f(s) ds.$$

Схема дискретизации прозрачных граничных условий

Далее приведем численную схему для уравнения (4.1) и численную реализацию прозрачных граничных условий (4.21) и (4.22). Мы выбрали конечно-разностную схему Дюрана – Санца-Серны [188], схему второго порядка, основанную на неявном правиле средней точки

$$i \frac{q_j^n - q_j^{n-1}}{\Delta t} + D_x^2 \frac{q_j^n + q_j^{n-1}}{2} + 2 \left(\frac{q_j^n + q_j^{n-1}}{2} \right)^2 \left(\frac{\overline{q_{j-J}^n} + \overline{q_{j-J}^{n-1}}}{2} \right) = 0, \quad (4.23)$$

со стандартным разностным фактором второго порядка

$$D_x^2 q_j^n = \frac{1}{\Delta x^2} (q_{j-1}^n - 2q_j^n + q_{j+1}^n), \quad (4.24)$$

где Δx и Δt являются шагами дискретизации пространства и времени. Здесь $\overline{q_j^n}$ обозначает комплексно-сопряженное числа q_j^n , J – количество дискретизированных пространственных шагов, а q_j^n обозначает приближенное значение q в пространственной координате x_j и время t_n .

Теперь мы приведем эффективную схему дискретизации для ПГУ, которая реализуется вместе с (4.23). Мы приводим схему только для границы $x = L$, учитывая, что реализацию для левой границы (при $x = -L$) можно выполнить таким же образом. Аппроксимируем дробный дифференциальный оператор с помощью численной квадратурной формулы, приведенной в [60]

$$\partial_t^{\frac{1}{2}} f(t_n) \approx \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_k f^{n-k}. \quad (4.25)$$

Здесь членами последовательности $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ являются комплексные числа, приближающие $\{f(t_n)\}_{n \in \mathbb{N}}$ и последовательность $(\beta_k)_{k \in \mathbb{N}}$ определяется формулой

$$(\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5, \dots) = \left(1, -1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}, -\frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}, \dots\right) \quad (4.26)$$

Функция $\mathcal{V}(x, t)$, определенная в (1.7), может быть аппроксимирована правилом трапеций как

$$\mathcal{V}_j^n = \Delta t \left[\sum_{k=1}^{n-1} V_j^k + \frac{1}{2}(V_j^0 + V_j^n) \right] \text{ для } n \geq 2, \quad (4.27)$$

с $\mathcal{V}_j^0 = 0$ и $\mathcal{V}_j^1 = \frac{1}{2}(V_j^0 + V_j^1)$, где V_j^n – определяется как

$$V_j^n = 2 q_j^n \overline{q_{j-j}^n}. \quad (4.28)$$

Далее, член $e^{i\mathcal{V}}$ записывается как

$$P_j^n := \exp(i\mathcal{V}_j^n) = \exp \left\{ i\Delta t \left[\sum_{k=1}^{n-1} V_j^k + \frac{1}{2}(V_j^0 + V_j^n) \right] \right\}.$$

Это уравнение можно переписать в виде рекуррентной формулы

$$P_j^n = P_j^{n-1} \exp \left(i \frac{\Delta t}{2} (V_j^{n-1} + V_j^n) \right). \quad (4.29)$$

Приближение первого порядка для оператора ПГУ (4.21) на левой ($j = 0$) и правой ($j = J$) границах аппроксимируется с помощью дискретных сверток

$$\Lambda_1^n = e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} P_j^n \sum_{k=0}^n \left(\beta_k \frac{q_j^{n-k}}{P_j^{n-k}} \right) \quad (4.30)$$

Тогда все значения решения (на границах и других промежуточных значениях) можно вычислить путем решения системы нелинейных уравнений в виде

$$\frac{q_1^n - q_0^n}{\Delta x} - e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} P_0^n \sum_{k=0}^n \left(\beta_k \frac{q_0^{n-k}}{P_0^{n-k}} \right) = 0, \quad (4.31a)$$

$$\frac{q_j^n - q_{j-1}^n}{\Delta x} + e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} P_j^n \sum_{k=0}^n \left(\beta_k \frac{q_j^{n-k}}{P_j^{n-k}} \right) = 0, \quad (4.31b)$$

и уравнение (4.23) относительно q_j^n . Обратите внимание, что значения q_j^n , которые необходимо найти, также существуют в P_j^n , и здесь мы записали уравнения (4.31) в краткой форме. Применяя тот же подход, можно продолжить дискретизацию аппроксимации второго порядка. Таким образом, интегральный член можно аппроксимировать в виде

$$I_j^n = \Delta t \left[\sum_{k=1}^{n-1} \frac{q_j^k}{P_j^k} + \frac{1}{2} \left(\frac{q_j^0}{P_j^0} + \frac{q_j^n}{P_j^n} \right) \right]. \quad (4.32)$$

Аналогично строим рекуррентную формулу для I_j^n

$$I_j^n = I_j^{n-1} + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{q_j^{n-1}}{P_j^{n-1}} + \frac{q_j^n}{P_j^n} \right), \quad (4.33)$$

с $I_j^0 = 0$. Тогда второе приближение оператора ПГУ (4.22) можно записать в виде

$$\Lambda_2^n = \Lambda_1^n + i \frac{dV_j^n}{4} P_j^n I_j^n, \quad (4.34)$$

где

$$dV_j^n = \frac{2}{\Delta x} (q_{j+1}^n \overline{q_{j-j}^n} - 2 q_j^n \overline{q_{j-j}^n} + q_j^n \overline{q_{j-j-1}^n}).$$

Опять же, можно вычислить значения волновой функции на границах, решив систему нелинейных уравнений относительно q_j^n , заданную выражением

$$\frac{q_1^n - q_0^n}{\Delta x} - e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} P_0^n \sum_{k=0}^n \left(\beta_k \frac{q_0^{n-k}}{P_0^{n-k}} \right) - i \frac{dV_0^n}{4} P_0^n I_0^n, \quad (4.35a)$$

$$\frac{q_J^n - q_{J-1}^n}{\Delta x} + e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} P_J^n \sum_{k=0}^n \left(\beta_k \frac{q_J^{n-k}}{P_J^{n-k}} \right) + i \frac{dV_J^n}{4} P_J^n I_J^n. \quad (4.35b)$$

Численный эксперимент

В этом численном эксперименте мы решаем нелокальное нелинейное уравнение Шрёдингера, заданное уравнением (4.1) на конечном интервале $[-L, L]$. На левой ($x = -L$) и правой ($x = L$) границах накладываем аппроксимацию ПГУ первого порядка (4.21). В качестве начального условия выберем сумму двух аналитических решений (4.3), симметричных относительно начала пространственной координаты ($x = 0$)

$$q(x, 0) = \frac{\alpha_1}{2} \sqrt{\frac{3i}{\alpha_1 \beta_1}} (G_+(x) + G_-(x)), \quad (4.36)$$

где

$$G_{\pm}(x) = \frac{e^{\mp 5i(x \pm \frac{L}{2})}}{g_r^{\pm} + i g_i^{\pm}},$$

$$g_r^{\pm}(x) = \cosh\left(\frac{-3\left(x \pm \frac{L}{2}\right) - \Delta_R}{2}\right) \cos\left(\frac{\Delta_I}{2}\right),$$

$$g_i^{\pm}(x) = \sinh\left(\frac{-3\left(x \pm \frac{L}{2}\right) - \Delta_R}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta_I}{2}\right)$$

с параметрами $\alpha_1 = 1.13 + 1.13i$, $\beta_1 = 1.13 - 1.13i$, $\Delta_R = \log\left(\frac{|\alpha_1|^2 |\beta_1|^2}{9}\right)$ и $\Delta_I = -\frac{i}{2} \log\left(\frac{\alpha_1 \beta_1}{\alpha_1^* \beta_1^*}\right)$. Этот выбор двойных солитонов сделан для того, чтобы избежать обращения в нуль

нормальных и энергетических величин, заданных уравнением (4.4).

Выберем длину равную $L = 6$, а параметры дискретизации $\Delta x = 0,014$ и $\Delta t = 0,002$. Эволюция солитонов, движущихся влево и вправо, представлена на Рис. 4.1, из которого видно, что солитоны покидают вычислительную область практически без отражения.

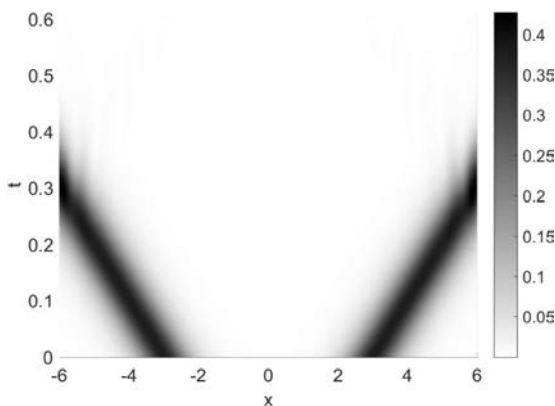


Рис.4.1. Эволюция профиля солитона с наложением ПГУ в обеих (левых и правых) конечных точках.

Для аналитической количественной оценки отсутствия отражения на границе интервала можно использовать физически наблюдаемые величины в интервале $[-L, L]$. Это может быть, например, отношение энергии или нормы в интервале $[-L, L]$ к таковым во всем пространстве. Такие отношения в интервале $[-L, L]$ по истечении времени должны стать равными нулю. Здесь мы вычисляем зависимость энергии от времени. Как видно из графика на Рис. 4.2, энергия становится равной нулю по истечении определенного времени. Это означает, что отношение энергий в интервале $[-L, L]$ также становится равным нулю. Следуя нашему моделированию, мы построим временную зависимость энергии солитонов, ограниченных вычисляемой областью.

Для этого мы дискретизируем энергию в уравнении (4.4) по формуле

$$E_n = \frac{1}{2\Delta x} \sum_{j=1}^{J-1} \left[(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n)(\overline{q_{j-j-1}^n} - \overline{q_{j-j+1}^n}) + \Delta x^2 (q_j^n \overline{q_{j-j}^n})^2 \right]. (1.37)$$

Временная зависимость энергии в вычисляемой области показана на Рис. 4.2. Этот график показывает, что энергия исчезает, а это означает, что с течением времени (отраженных) волн нет.

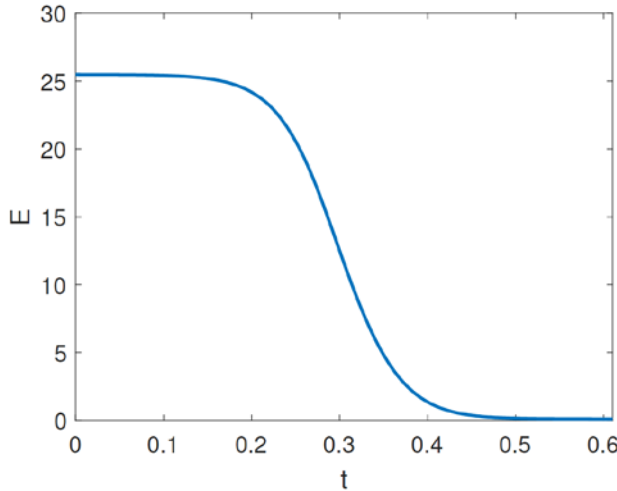


Рис.4.2. График зависимости энергии от времени в конечной области $x \in [-L, L]$.

Наконец, покажем, что включение члена аппроксимации второго порядка в ПГУ может немного улучшить результаты. Для этого вычисляем абсолютную погрешность $\mathcal{E}$, т.е. разницу между численным решением с заданным ПГУ в $x = \pm L$ и численным решением на расширенном интервале $[-2L, 2L]$ (такой, что границы не достигаются за рассматриваемый

период времени), ограниченные $[-L, L]$, измеренные по норме L^2 (дискретизированные по правилу трапеций)

$$\|\varepsilon\|_2^2 = \Delta x \left[\sum_{j=1}^{J-1} \Delta q_j^n \Delta \overline{q_{j-j}^n} + \frac{1}{2} (\Delta q_0^n \Delta \overline{q_j^n} + \Delta q_j^n \Delta \overline{q_0^n}) \right], \quad (4.38)$$

где $\Delta q_j^n = q_j^n - Q_j^n$ и Q_j^n – численное решение для расширенного интервала. Это сделано для того, чтобы исключить ошибку дискретизации, вызванную конечно-разностной схемой, и сравнить только ошибки, вызванные аппроксимацией ПГУ. График зависимости этой ошибки от времени за период времени ухода солитонов показан на Рис. 4.3.

Далее мы также рассматриваем асимметричный случай, т.е. случай несимметричных солитонов. Для этого воспользуемся вариационными решениями при численном решении ННУШ с ПГУ в качестве начальных условий, которые описаны в [183].

$$q(x, 0) = \sum_{j=1}^2 q_j(x, 0),$$

$$q_j(x, 0) = A_j e^{iB_j} \operatorname{sech}[C_j(x - X_j)] e^{iD_j(x - X_j)^2 + iE_j(x - X_j)}, \quad (4.39)$$

где $A_1 = A_2 = 1$, $B_1 = 0$, $B_2 = 0.1$, $C_1 = C_2 = 1$, $D_1 = D_2 = 0$, $E_1 = -E_2 = 2$, $X_1 = -X_2 = 5$.

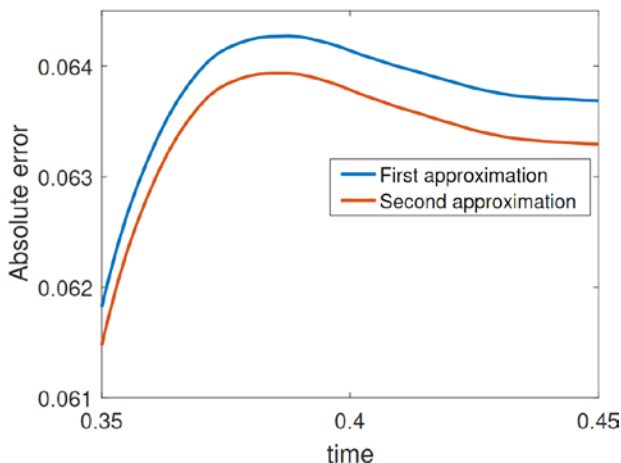


Рис.4.3. График зависимости абсолютной ошибки $\|\varepsilon\|_2^2$ от времени. Рассматриваемый интервал времени представляет собой интересующий нас период, когда солитоны сталкиваются с границами.

Эволюция бегущего асимметричного солитона показана на Рис. 4.4. Он показывает аналогичную динамику, что и симметричный аналог, т.е. никакого отражения не видно. В качестве дополнительного подтверждения безотражательного распространения асимметричного солитона на Рис. 4.5 мы построили временную зависимость энергии, ограниченную конечным интервалом $[-L, L]$. График показывает, что ПГУ работает и в этих случаях.

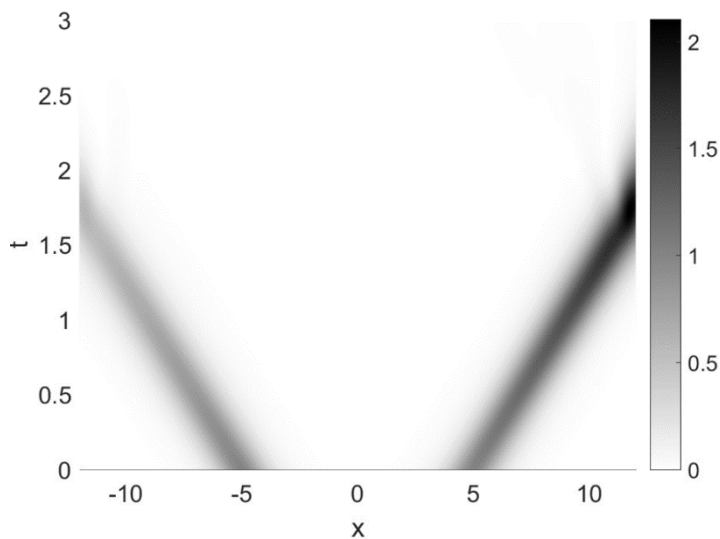


Рис.4.4. Эволюция асимметричного профиля солитона, определяемая уравнением (4.39) с ПГУ, наложенными в обеих (левых и правых) конечных точках.

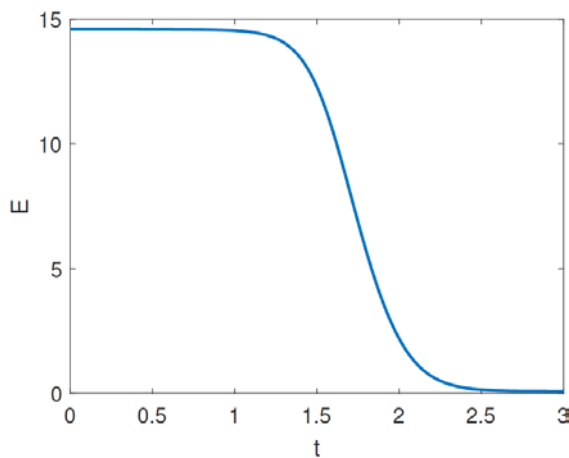


Рис.4.5. Зависимость энергии от времени в конечной области $x \in [-L, L]$ для случая эволюции асимметричного солитона.

§4.3. Нелокальное нелинейное уравнение Шредингера на звездообразном графе

Здесь мы рассматриваем задачу уравнения ННУШ на метрических графах с акцентом на прозрачные вершинные граничные условия. Последнее, как и в предыдущих главах, означает граничные условия, обеспечивающие отсутствие обратного рассеяния в вершине графа. Для этого мы используем тот же «потенциальный подход», примененный ранее для нелинейного уравнения Шредингера. Мотивацией к исследованию прозрачных граничных условий в сетях является их применение в различных технологически важных задачах, таких как распространение перестраиваемых солитонов в разветвленных оптических волокнах и оптоэлектронных сетях, а также управление транспортом квазичастиц в низкоразмерных разветвленных функциональных материалах. Во всех этих случаях необходимо уменьшить потери сигнала, тепла и переноса заряда по структуре путем построения правильной архитектуры сети.

Одним из ограничений для класса начальных условий для нелокального нелинейного уравнения Шредингера является то, что они должны быть четными (по x), что делает начальные данные симметричными относительно оси y . Учитывая это свойство, рассмотрим простейший возможный звездообразный граф с четным числом ребер (см. Рис. 4.6). Нелокальное нелинейное уравнение Шредингера пишется на каждом ребре звездообразного графа с ребрами $b_{\pm j}$, которым сопоставлена координата $x_{\pm j}$. Начало координат в вершине выбираем так, чтобы связь b_{-j} принимала значения $x_{-j} \in (-\infty, 0)$, а для b_j фиксируем $x_j \in [0, +\infty)$:

$$i\partial_t q_{\pm j}(x, t) + \partial_x^2 q_{\pm j}(x, t) + \sqrt{\beta_j \beta_{-j}} q_{\pm j}^2(x, t) q_{\mp j}^*(-x, t) = 0, \quad (4.40)$$

где $q_{\pm j}(x, t)$ определены в $x \in b_{\pm j}$, $j = 1, 2$.

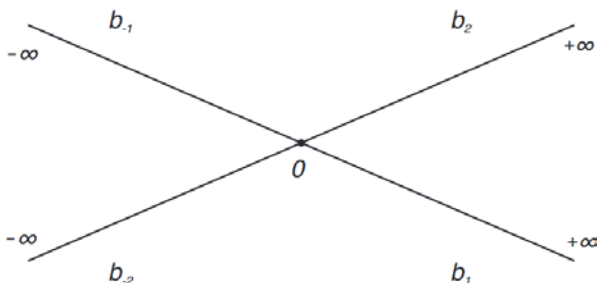


Рис.4.6. Простейший симметричный звездообразный граф с четырьмя ребрами.

Уравнение (4.40) представляет собой систему ННУШ, в которой компоненты $q_{\pm j}$ смешиваются в нелинейном члене из-за присутствия множителя $\sqrt{\beta_j \beta_{-j}}$.

Для решения этого уравнения необходимо задать граничные условия в точке ветвления графа (вершине). Здесь мы выбираем граничные условия, полученные в [186], которые обеспечивают интегрируемость рассматриваемой системы, и они получены путем демонстрации существования бесконечного числа законов сохранения. В рамках этого подхода для вышеуказанного ННУШ норма определяется как, (см. [172])

$$N(t) = \sum_{j=1}^2 \left[\int_{b_j} q_j(x, t) q_{-j}^*(-x, t) dx + \int_{b_{-j}} q_{-j}(x, t) q_j^*(-x, t) dx \right] \quad (4.41)$$

Другая сохраняющаяся величина, т.е. энергия, определяется выражением

$$E(t) = \sum_{j=1}^2 \left[\int_{b_j} \left(\partial_x q_j(x, t) \cdot \partial_x q_{-j}^*(-x, t) + \frac{\sqrt{\beta_j \beta_{-j}}}{2} q_j^2(x, t) \cdot q_{-j}^{*2}(-x, t) \right) dx \right. \\ \left. + \int_{b_{-j}} \left(\partial_x q_{-j}(x, t) \cdot \partial_x q_j^*(-x, t) + \frac{\sqrt{\beta_j \beta_{-j}}}{2} q_{-j}^2(x, t) \cdot q_j^{*2}(-x, t) \right) dx \right]. \quad (4.42)$$

Требую сохранения этих величин, производные нормы и энергии по времени приводят к следующим вершинным граничным условиям [186]:

$$\begin{aligned}
 \gamma_1 q_1(x, t)|_{x=0} &= \gamma_{-1} q_{-1}(x, t)|_{x=0} \\
 &= \gamma_2 q_2(x, t)|_{x=0} = \gamma_{-2} q_{-2}(x, t)|_{x=0}, \\
 \frac{1}{\gamma_1} \partial_x q_1(x, t)|_{x=0} + \frac{1}{\gamma_2} \partial_x q_2(x, t)|_{x=0} &= \\
 \frac{1}{\gamma_{-1}} \partial_x q_{-1}(x, t)|_{x=0} + \frac{1}{\gamma_{-2}} \partial_x q_{-2}(x, t)|_{x=0}, \quad (4.43)
 \end{aligned}$$

где параметры $\gamma_{\pm j}$ – ненулевые положительные действительные числа.

Тогда решение задачи, заданное уравнениями (4.41) и (4.43), можно выразить через решение уравнения (4.1) как $q_{\pm j}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\beta_{\pm j}}} q(x, t)$ и оно удовлетворяет граничным условиям (4.43) при условии, что следующие ограничения справедливы:

$$\begin{aligned}
 \frac{\gamma_{\pm j}}{\gamma_{-1}} &= \sqrt{\frac{\beta_{\pm j}}{\beta_{-1}}}, \\
 \frac{1}{\beta_1} + \frac{1}{\beta_2} &= \frac{1}{\beta_{-1}} + \frac{1}{\beta_{-2}}. \quad (4.44)
 \end{aligned}$$

Бегущее солитонное решение уравнения (4.3), заданное на графе, можно записать в виде

$$q_{\pm j}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\beta_{\pm j}}} \cdot \frac{\alpha_1 e^{-\frac{\Delta}{2}} e^{(\bar{\xi}_{1R} - \xi_{1R}) + i(\bar{\xi}_{1I} - \xi_{1I})}}{2[\cosh(\chi_1) \cos(\chi_2) + i \sinh(\chi_1) \sin(\chi_2)]}. \quad (4.45)$$

Правило сумм (4.44) выводится на основе требования интегрируемости к системе, и когда оно выполняется, существует аналитическое решение, которое можно выразить в виде уравнение (4.45)

Вывод прозрачных вершинных граничных условий

В этом подразделе мы выводим ПГУ для нелокального нелинейного уравнения Шрёдингера на графах, применяя потенциальный подход, использованный при выводе ПГУ на прямой.

Далее, ННУШ можно формально записать в виде линейного уравнения в частных производных

$$i\partial_t q_{\pm j}(x, t) + \partial_x^2 q_{\pm j}(x, t) + V_{\pm j}(x, t)q_{\pm j}(x, t) = 0, \quad (4.46)$$

где $V_{\pm j}(x, t) = \sqrt{\beta_j \beta_{-j}} q_{\pm j}(x, t) q_{\mp j}^*(-x, t)$.

Теперь разобьем всю область (граф) на две подобласти, которые назовем «внутренними» (ребра $b_{\pm 1}$) и «внешними» (ребра $b_{\pm 2}$). Мы используем здесь эту терминологию, чтобы она соответствовала той, которая использовалась для рассматриваемой задачи на прямой. При этом терминология заимствована из оригинальных работ [52, 53], в которых была предложена основная идея построения ПГУ. Соответственно, сформулируем внутренние и внешние задачи.

Внутреннюю задачу для $b_{\pm 1}$ можно записать как

$$i\partial_t q_{\pm 1} + \partial_x^2 q_{\pm 1} + V_{\pm 1}(x, t)q_{\pm 1} = 0, \quad (4.47)$$

$$q_{\pm 1}|_{t=0} = Q^I(x),$$

$$\partial_x q_{\pm 1}|_{x=0} = (T_0 q_{\pm 1})|_{x=0},$$

где $Q^I(x)$ – начальное условие, а T_0 – пока неизвестный оператор, определяющий ПГУ.

Внешние задачи для $b_{\pm 2}$ выглядят так:

$$i\partial_t q_{\pm 2} + \partial_x^2 q_{\pm 2} + V_{\pm 2}(x, t)q_{\pm 2} = 0, \quad (4.48)$$

$$q_{\pm 2}|_{t=0} = 0,$$

$$\partial_x q_{\pm 2}|_{x=0} = \psi_{\pm 2}(t), \quad \psi_{\pm 2}(0) = 0,$$

$$(T_0 \psi_{\pm 2})|_{x=0} = \partial_x q_{\pm 2}|_{x=0}.$$

Введем новую функцию

$$\mu_{\pm j}(x, t) = e^{-iv_{\pm j}(x, t)} q_{\pm j}(x, t), \quad (4.49)$$

где

$$v_{\pm j}(x, t) = \int_0^t V_{\pm j}(x, \tau) d\tau = \sqrt{\beta_j \beta_{-j}} \int_0^t q_{\pm j}(x, \tau) q_{\mp j}^*(-x, \tau) d\tau. \quad (4.50)$$

Тогда ПГУ второго порядка аппроксимации (4.22) для $q_{\pm 2}$ при $x = 0$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} \partial_x q_{\pm 2}|_{x=0} &= \pm e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{iv_{\pm 2}} \partial_t^{\frac{1}{2}} (e^{-iv_{\pm 2}} q_{\pm 2})|_{x=0} \\ &\pm i \frac{1}{4} \partial_x V_{\pm 2} e^{iv_{\pm 2}} I_t (e^{-iv_{\pm 2}} q_{\pm 2})|_{x=0} = 0, \end{aligned} \quad (4.51)$$

где дробная $1/2$ -производная и I_t определены в предыдущих главах.

Используя вершинные граничные условия (4.43), имеем

$$v_{-1}(0, t) = v_{-2}(0, t) = v_1(0, t) = v_2(0, t),$$

$$\frac{1}{\beta_{-1}} \partial_x V_{-1}|_{x=0} + \frac{1}{\beta_{-2}} \partial_x V_{-2}|_{x=0} = \frac{1}{\beta_1} \partial_x V_1|_{x=0} + \frac{1}{\beta_2} \partial_x V_2|_{x=0}, \quad (4.52)$$

что приводит к

$$\begin{aligned}
(T_0 q_{\pm j})(x, t)|_{x=0} &= e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{iv_{\pm j}} \cdot \partial_t^{\frac{1}{2}} (e^{-iv_{\pm j}} q_{\pm j})|_{x=0} \\
&+ i \frac{1}{4} \partial_x V_{\pm j} e^{iv_{\pm j}} I_t (e^{-iv_{\pm j}} q_{\pm j})|_{x=0} = 0, \quad (4.53)
\end{aligned}$$

Условие сохранения тока в (4.43) приводит к

$$\begin{aligned}
\partial_x q_{-1}|_{x=0} &= -\sqrt{\frac{\beta_{-1}}{\beta_{-2}}} \partial_x q_{-2}|_{x=0} + \sqrt{\frac{\beta_{-1}}{\beta_1}} \partial_x q_1|_{x=0} + \sqrt{\frac{\beta_{-1}}{\beta_2}} \partial_x q_2|_{x=0} \\
&= -\frac{\beta_{-1}}{\beta_{-2}} (T_0 q_{-2})|_{x=0} + \frac{\beta_{-1}}{\beta_1} (T_0 q_1)|_{x=0} + \frac{\beta_{-1}}{\beta_2} (T_0 q_2)|_{x=0} \\
&= \left[-\frac{\beta_{-1}}{\beta_{-2}} + \frac{\beta_{-1}}{\beta_1} + \frac{\beta_{-1}}{\beta_2} \right] (T_0 q_{-1})|_{x=0}. \quad (4.54)
\end{aligned}$$

Поскольку граничное условие $\partial_x q_{-1}|_{x=0} = (T_0 q_{-1})|_{x=0}$ внутренней задачи (4.47) должно быть прозрачным, оно будет таким только в том случае, если дополнительный множитель в уравнении (4.54) равен 1, т.е. если выполняется следующее правило сумм:

$$\frac{1}{\beta_{-1}} + \frac{1}{\beta_1} = \frac{1}{\beta_{-2}} + \frac{1}{\beta_2}. \quad (4.55)$$

Таким образом, выполнение правила сумм (4.55) означает, что вершинные граничные условия (4.43) становятся эквивалентными ПГУ в вершине графа.

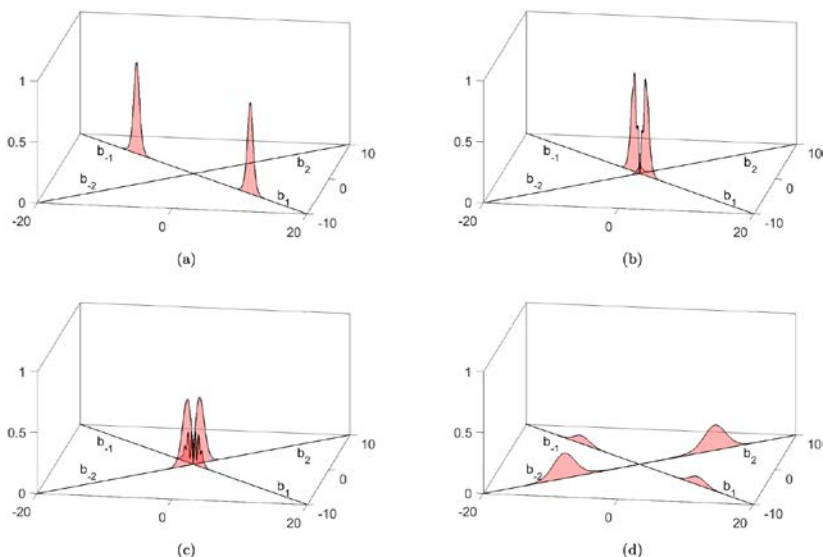


Рис.4.7. Динамика солитона в разные моменты времени: $t = 0$ (а), $t = 0.9$ (б), $t = 1.1$ (с) и $t = 2$ (д) при выполнении правила сумм (4.44) путем выбора следующих значений коэффициентов нелинейности: $\beta_{\pm 1} = 6$, $\beta_{\pm 2} = 2$.

Численный эксперимент

В этом подразделе мы покажем результаты численного эксперимента, проведенного для проверки результатов вывода прозрачных вершинных граничных условий для нелокального нелинейного уравнения Шрёдингера на звездообразном графе, показанном на Рис. 4.6. В этом численном эксперименте мы используем метод Рунге-Кутты. Начальные условия задаются на симметричных ребрах b_{-1} и b_1 и выбираются в качестве аналитических решений в уравнении (4.3), где его параметры заданы как $\alpha_1 = 1,13 + 1,13i$, $\beta_1 = 1,13 - 1,13i$ и $k_1 = \pm 2.5 + 1.5i$, $\bar{k}_1 = \mp 2.5 + 1.5i$ для ребер $b_{\pm 1}$ соответственно.

В качестве первого примера рассмотрим случай, когда выполняется правило сумм (4.44). Эволюция бегущих

солитонов для этого случая показана на Рис. 4.7 для четырех последовательных временных моментов. Этот пример можно дополнить, определив набор пар параметров (β_{-1}, β_1) для некоторого фиксированного $\beta_{-2} = \beta_2$. На Рис. 4.8 показана зависимость отклонения нормы от ее среднего значения в зависимости от параметров (β_{-1}, β_1) . На этом рисунке видно сохранение нормы вдоль красной линии.

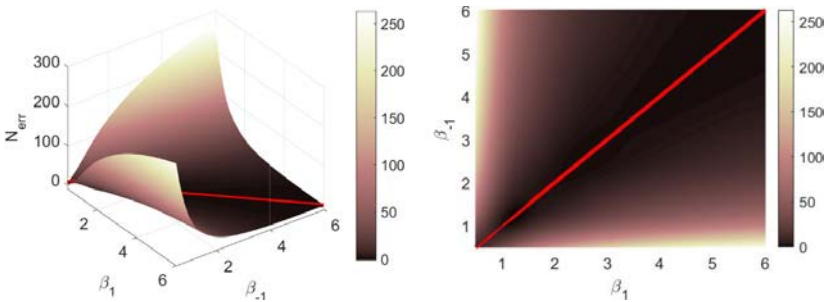


Рис. 4.8. Зависимость сохранения нормы от значений параметров β_{-1} и β_1 при фиксированном $\beta_{-2} = \beta_2 = 2$.

Отклонение нормы от ее среднего значения за все время определяется как

$$N_{\text{err}} = \int_0^T |\bar{N} - N| dt ,$$

где

$$\bar{N} = \frac{1}{T} \int_0^T N(t) dt$$

есть среднее значение полной нормы за все время, а T – общее время движения.

Второй пример – случай, когда выполняется правило сумм (4.55). На Рис. 4.9 показана эволюция бегущих солитонов для этого случая для четырех последовательных временных

моментов. Из этого графика видно безотражательное прохождение солитонов. В качестве последнего примера осталось рассмотреть случай, когда правило сумм нарушено. Результаты расчетов представлены на Рис. 4.10. На этом графике можно наблюдать отражение в вершине графа.

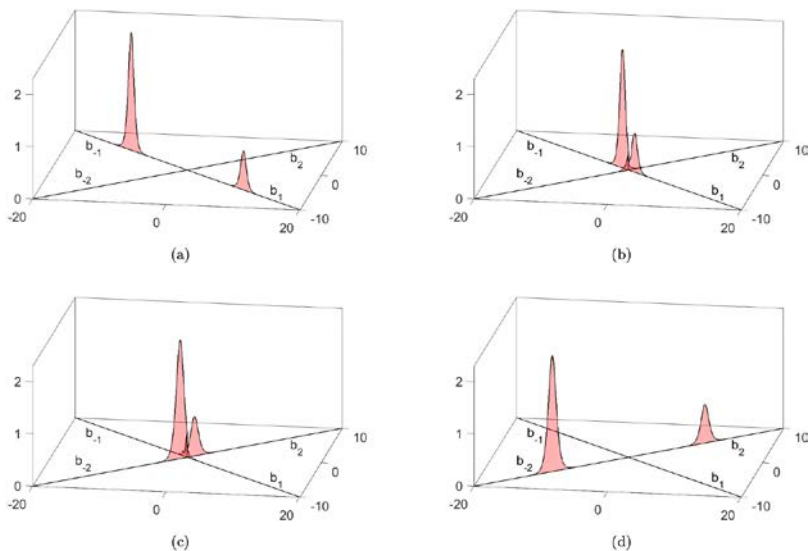


Рис. 4.9. Динамика солитона в разные моменты времени: $t = 0$ (а), $t = 0.9$ (б), $t = 1.1$ (с) и $t = 2$ (д) при выполнении правила сумм (4.55) путем выбора следующих значений коэффициентов нелинейности: $\beta_{-1} = \beta_{-2} = 2$, и $\beta_1 = \beta_2 = 6$.

Заметим, что выбор параметров (β_{-1}, β_1) , очевидно, не единственен для некоторых фиксированных β_{-2} и β_2 . В этом можно убедиться, построив зависимость коэффициента отражения от параметров (β_{-1}, β_1) . Для некоторого фиксированного момента времени t_0 коэффициент отражения можно определить как

$$R = \frac{N_{-1} + N_1}{N_{-1} + N_1 + N_{-2} + N_2'}$$

где $N_{\pm j}$ – частичные нормы ребер $b_{\pm j}$ в момент времени t_0 . График коэффициента отражения как функция от параметров граничных условий (β_{-1}, β_1) при фиксированном $\beta_{-2} = \beta_2 = 2$ в достаточное для перехода время ($t = 2$) показано на Рис. 4.11. На этом графике видна черная кривая (выделена красной линией), ограниченная значениями параметров (β_{-1}, β_1) , удовлетворяющими уравнению $\beta_{-1}^{-1} + \beta_1^{-1} = 1$. Это показывает проявление безотражательного перехода солитонов при выполнении ограничения (4.55).

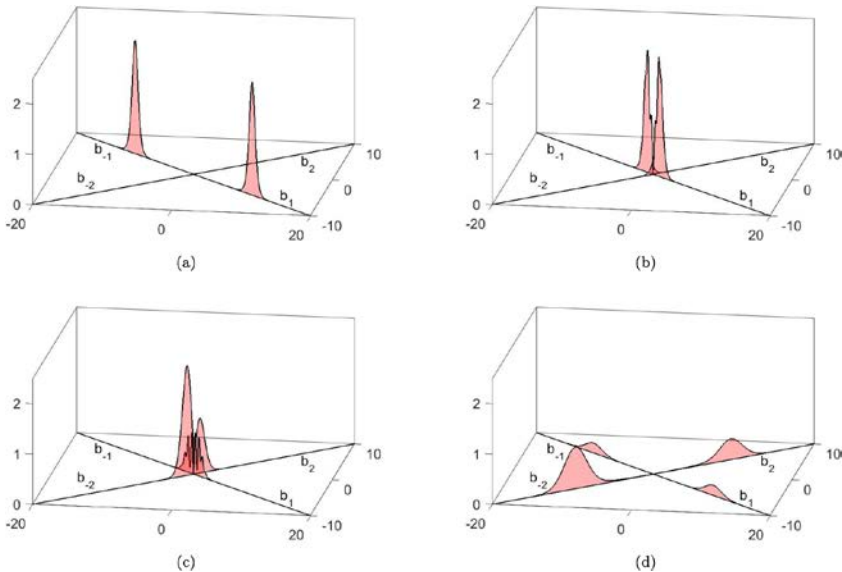


Рис. 4.10. Динамика солитона в разные моменты времени: $t = 0$ (а), $t = 0.9$ (б), $t = 1.1$ (с) и $t = 2$ (д) при нарушении правила сумм путем выбора следующих значений коэффициентов нелинейности: $\beta_{-1} = \beta_1 = 2$, и $\beta_{-2} = 0.5$, $\beta_2 = 1$.

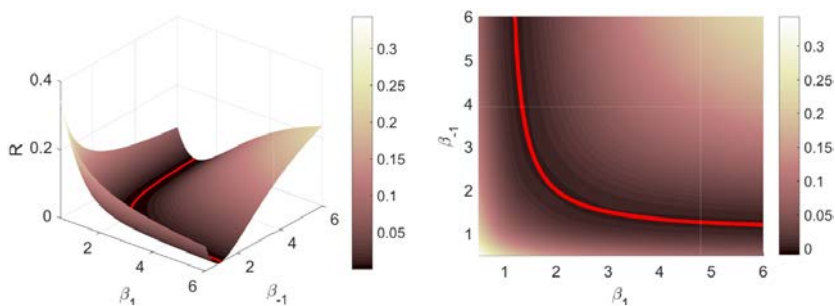


Рис.4.11. Зависимость коэффициента отражения от значений параметров β_{-1} и β_1 при фиксированном $\beta_{-2} = \beta_2 = 2$.

Вывод по главе

В данном исследовании с использованием так называемого потенциального подхода получены прозрачные граничные условия для нелокального нелинейного уравнения Шредингера. Такие граничные условия позволяют получить решение начальной задачи, заданной в интервале, который совпадает с решением задачи для всего пространства, заключенного в этом интервале. Детально представлена дискретизация полученных ПГУ и их численная реализация.

Подтверждение безотражательного перехода искусственными границами было достигнуто путем моделирования бегущих солитонов. Для проверки полученных результатов была рассчитана временная зависимость энергии в вычисляемой области. Хотя аппроксимация ПГУ первого порядка показывает хорошие результаты, рассматриваются также дополнительные члены второго порядка, показывающие, что абсолютная ошибка в этом случае уменьшается (что естественно). Хотя ПГУ обычно используются для численного моделирования, их также можно объяснить с физической точки зрения: приходящая волна не «чувствует» границу, на которой наложены ПГУ, что гарантирует отсутствие или минимальные потери в передача волн из одной области в другую.

Рассмотренная модель может быть использована для разработки и проектирования РТ-симметричных оптических волноводов, обеспечивающих квази-безотражательное распространение солитонов. Практическое применение таких функциональных материалов в устройствах оптоэлектроники позволит сэкономить ресурсы и повысить производительность за счет снижения потерь сигнала. Наконец, отметим, что приведенное выше рассмотрение может быть непосредственно применено на оптические волноводные сети путем определения физически значимых условий прозрачности точек ветвления сети. Такие структуры

еще более привлекательны с точки зрения оптоэлектронных приложений.

Далее мы вывели прозрачные граничные условия для нелокального нелинейного уравнения Шрёдингера на метрических графах, используя так называемый потенциальный подход. Выведены условия, придающие граничным условиям непрерывности по весу, и обобщенному условию Кирхгофа прозрачность. Приводятся численное использование прозрачных граничных условий, граничные условия и численное доказательство их эквивалентности с весовой непрерывностью и обобщенным правилам Кирхгофа. Результаты, полученные в данном исследовании, могут быть применены для моделирования оптических сетей и оптоэлектронных устройств с прозрачными точками ветвления, так что потери сигнала, информации, заряда и энергии минимальны в их работе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная монография посвящена решению проблем математического моделирования транспорта и динамики квазичастиц в различных разветвленных и сетеподобных квантовых структурах низкой размерности, возникающих в информационно-коммуникационных, опто-электронных и квантовых технологиях. На основе проведенных исследований предложена модель прозрачных квантовых графов, с помощью которого доказано, что прозрачные граничные условия на узле квантового графа становятся эквивалентными непрерывности волновой функции с весовыми коэффициентами и обобщенному правилу Кирхгофа на узле при выполнении определенных ограничений в виде правила сумм. Установлено, что движение релятивистских квазичастиц с полуцелым спином в прозрачных разветвленных квантовых структурах может быть описано с помощью уравнения Дирака на графах, для которого наложены прозрачные граничные условия на узлах графа, что позволило предложить модель прозрачных дираковских квантовых графов для релятивистского транспорта спина в разветвленных структурах низкой размерности. Предложена модель прозрачных нелинейных графов, с помощью которого показано, что при выполнении определенных ограничений, прозрачные граничные условия для нелинейного уравнения Шредингера на графах, в этом случае, тоже становятся эквивалентными условиям непрерывности волновой функции с весовыми коэффициентами и обобщенному правилу Кирхгофа на узле графа, что позволяет создать сети волокон, применяемых в оптоэлектронных технологиях для эффективной передачи световой энергии и сигнала. Показано, что данная научная методология также применима для вывода граничных условий в случае системы Манакова, рассматриваемая как на прямой, так и на метрическом графе. Кроме того, в последней

главе приводится результат исследования, в котором выводится прозрачное граничное условие для нелокального нелинейного уравнения Шредингера на прямой. Хотя полученное выражение ПГУ имеет очень сложную форму, ПГУ для ННУШ на метрических графах становятся эквивалентными условиям непрерывности волновой функции с весовыми коэффициентами и обобщенному правилу Кирхгофа на узле графа при выполнении определенных условий.

В рамках исследований при решении поставленных задач были предложены эффективные численные методы для решения уравнений Шредингера и Дирака, нелинейного уравнения Шредингера и системы связанных нелинейных уравнений Шредингера, называемых системой Манакова, а также нелокального нелинейного уравнения Шредингера на квантовых графах, с использованием явных и неявных методов, спектральных методов, а также и устойчивых разностных схем. Разработаны алгоритмы для численного решения начально-краевых задач с возможностью задания прозрачных граничных условий и их эквивалентов в точке разветвления.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. G. Berkolaiko, P. Kuchment, Introduction to Quantum Graphs, Mathematical Surveys and Monographs, 186, AMS (2013).
2. P. Exner, H. Kovařík, Quantum Waveguides, Springer, (2015)
3. D. Mugnolo, Semigroup Methods for Evolution Equations on Networks. Springer-Verlag, Berlin, (2014).
4. G. Berkolaiko, R. Carlson, S. Fulling, and P. Kuchment, editors. Quantum graphs and their applications // American Mathematical Society, volume 415 of Contemp. Math., Providence, RI, (2006)
5. P. Kuchment, Quantum graphs: I. Some basic structures // Waves Random Media, **14**(1): S107–S128 (2004). Special section on quantum graphs.
6. P. Kuchment, Quantum graphs. II. Some spectral properties of quantum and combinatorial graphs // Journal of Physics A, **38**(22), 4887–4900 (2005).
7. S. Gnutzmann, U. Smilansky, Quantum graphs: Applications to quantum chaos and universal spectral statistics // Advances in Physics, **55**(5–6), P. 527–625 (2006).
8. P. Exner, P. Seba and P. Stovicek, Quantum interference on graphs controlled by an external electric field // Journal of Physics A: Mathematical and General, **21**, P.4009–4019 (1988)
9. R. Kostykin and R. Schrader, Kirchhoff's rule for quantum wires // Journal of Physics A Mathematical and General, **32**, P.595 (1999).
10. J. Bolte and J. Harrison, The spin contribution to the form factor of quantum graphs // Journal of Physics A Mathematical and General, **36**, L433 (2003).
11. Z. Sobirov, D. Matrasulov, K. Sabirov, S. Sawada, and K. Nakamura, Integrable nonlinear Schrödinger equation on simple networks: Connection formula at vertices // Physical Review E, **81**, 066602 (2010).
12. K. Nakamura, Z.S. Sobirov, D. Matrasulov, S. Sawada, Transport in simple networks described by an integrable discrete

- nonlinear Schrödinger equation // *Physical Review E*, **84**, 026609 (2011).
13. K.K. Sabirov, Z.A. Sobirov, D. Babajanov and D.U. Matrasulov, Stationary Nonlinear Schrödinger Equation on Simplest Graphs // *Physics Letters A*, **377**, 860 (2013)
 14. Z.A. Sobirov, K.K. Sabirov, D.U. Matrasulov, A.A. Saidov, K. Nakamura, Ballistic Soliton transport in networks. In "Nonlinear Phenomena in Complex Systems: From Nano to Macro Scale (Eds. D. Matrasulov, H.E. Stanley) // Springer (2014).
 15. Z. Sobirov, D. Babajanov, D. Matrasulov, K. Nakamura, H. Uecker, Sine-Gordon solitons in networks: Scattering and transmission at vertices // *EPL (Europhysics Letters)*, **115**, 50002 (2016).
 16. K. Sabirov, S. Rakhmanov, D. Matrasulov, H. Susanto, The stationary sine-Gordon equation on metric graphs: Exact analytical solutions for simple topologies // *Physics Letters A*, **382**, 1092 (2018).
 17. K.K. Sabirov, D.B. Babajanov, D.U. Matrasulov and P.G. Kevrekidis, Dynamics of Dirac solitons in networks // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **51**, 435203 (2018).
 18. D. Babajanov, H. Matyokubov, and D. Matrasulov, Charged solitons in branched conducting polymers // *Journal of Chemical Physics*, **149**, 164908 (2018).
 19. D.U. Matrasulov, K.K. Sabirov and J.R. Yusupov, PT-symmetric quantum graphs // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **52**, 155302 (2019).
 20. K.K. Sabirov, M.E. Akramov, R.Sh. Otajonov, D.U. Matrasulov, Soliton generation in optical fiber networks // *Chaos, Solitons & Fractals*, **133**, 109636 (2020).
 21. R. Adami, C. Cacciapuoti, D. Finco, and D. Noja, Fast solitons on star graphs // *Reviews in Mathematical Physics*, **23**, 409 (2011).

22. R. Adami, C. Cacciapuoti, and D. Noja, Stable standing waves for a NLS on star graphs as local minimizers of the constrained energy // *Journal of Differential Equations*, **260**, 7397 (2016).
23. R. Adami, E. Serra, and P. Tilli, Negative Energy Ground States for the L2-Critical NLSE on Metric Graphs // *Communications in Mathematical Physics*, **352**, 387 (2017).
24. R. Adami, E. Serra, P. Tilli, Multiple positive bound states for the subcritical NLS equation on metric graphs // *Calculus of Variations and Partial Differential Equations*, **58** (1), 1-16 (2019).
25. R. Adami, S. Dovetta, E. Serra, P. Tilli, Dimensional crossover with a continuum of critical exponents for NLS on doubly periodic metric graphs // *Analysis & PDE*, **12** (6), 1597-1612 (2019).
26. R. Adami, F. Boni, A. Ruighi, Non-Kirchhoff Vertices and Nonlinear Schrödinger Ground States on Graphs // *Mathematics*, **8** (4), 617 (2020).
27. J.-G. Caputo and D. Dutykh, Nonlinear waves in networks: Model reduction for the sine-Gordon equation // *Physical Review E*, **90**, 022912 (2014).
28. D. Dutykh, J.-G. Caputo, Wave dynamics on networks: Method and application to the sine-Gordon equation // *Applied Numerical Mathematics*, **131**, 54–71 (2018).
29. D. Noja, Nonlinear Schrödinger equation on graphs: recent results and open problems // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, **372**, 20130002 (2014).
30. D. Noja, D. Pelinovsky, and G. Shaikhova, Bifurcations and stability of standing waves in the nonlinear Schrödinger equation on the tadpole graph // *Nonlinearity*, **28**, 2343 (2015).
31. D. Mugnolo, D. Noja, C. Seifert, Airy-type evolution equations on star graphs // *Analysis & PDE*, **11** (7), 1625-1652 (2018).
32. D. Noja, S. Rolandom, and S. Secchi, Standing waves for the NLS on the double-bridge graph and a rational–irrational dichotomy // *Journal of Differential Equations*, **266**, 147 (2019).

33. D. Noja, D.E. Pelinovsky, Standing waves of the quintic NLS equation on the tadpole graph // *Calculus of Variations and Partial Differential Equations*, **59** (5), 1–31 (2020).
34. Kairzhan and D.E. Pelinovsky, Spectral stability of shifted states on star graphs // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **51**, 095203 (2018).
35. Z.A. Sobirov, M.I. Akhmedov, H. Uecker, Cauchy problem for the linearized KdV equation on general metric star graphs // *Nanosystems: physics, chemistry, mathematics*, **6** (2), 198-204 (2015).
36. K. Sabirov, D. Jumanazarov, J. Yusupov, D. Matrasulov, Bogoliubov de Gennes equation on metric graphs // *Physics Letters A*, **382** (39), 2856–2860 (2018).
37. M. Cavalcante, The Korteweg–de Vries equation on a metric star graph // *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, **69**, 124 (2018).
38. W. Borrelli, R. Carlone, and L. Tentarelli, Nonlinear Dirac Equation on Graphs with Localized Nonlinearities: Bound States and Nonrelativistic Limit // *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, **51**(2), 1046–1081 (2019).
39. E. Serra, L. Tentarelli, Bound states of the NLS equation on metric graphs with localized nonlinearities// *Journal of Differential Equations*, **260** (7), 5627–5644 (2016).
40. W. Borrelli, R. Carlone, L. Tentarelli, On the nonlinear Dirac equation on noncompact metric graphs // *Journal of Differential Equations*, **278**, 326-357 (2021).
41. M. Hinz, M. Meinert, On the viscous Burgers equation on metric graphs and fractals // *Journal of Fractal Geometry*, **7**, 137-182 (2020).
42. B. Engquist, A. Majda, Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves // *Mathematics of Computation*, **31**, 629–651 (1977).
43. B. Engquist, A. Majda, Radiation boundary conditions for acoustic and elastic wave calculations // *Communications on Pure and Applied Mathematics*, **32**, 313 (1979).

44. R. Kosloff and D. Kosloff, Absorbing boundaries for wave propagation problems // *Journal of Computational Physics*, **63**, 363 (1986).
45. L. Halpern, Artificial Boundary Conditions for Incompletely Parabolic Perturbations of Hyperbolic Systems // *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, **22**, 1256 (1991).
46. T. Shibata, Absorbing boundary conditions for the finite-difference time-domain calculation of the one-dimensional Schrödinger equation // *Physical Review B*, **43**(8), 6760 (1991).
47. J.-P. Kusk, Absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation on finite intervals // *Physical Review B*, **46** (8), 5000 (1992).
48. I.L. Sofronov, Conditions for complete transparency on the sphere for the three-dimensional wave equation // *Russian Academy of Sciences Doklady Mathematics*, **46**, 397-401 (1993).
49. Arnold, M. Ehrhardt, Discrete transparent boundary conditions for wide angle parabolic equations in underwater acoustics // *Journal of Computational Physics*, **145** (2), 611-638 (1998).
50. Arnold, Numerically absorbing boundary conditions for quantum evolution equations // *VLSI Design*, **6**, 313-319 (1998).
51. T. Hagstrom, Radiation boundary conditions for the numerical simulation of waves // *Acta Numerica*, **8**, 47-106 (1999).
52. M. Ehrhardt, Discrete Transparent Boundary Conditions for General Schrödinger-type Equations // *VLSI Design*, **9**(4), P. 325-338 (1999).
53. M. Ehrhardt and A. Arnold, Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation // *Rivista di Matematica della Università di Parma*, **6**, 57-108 (2001).
54. M. Ehrhardt, Efficient numerical implementation of discrete transparent boundary conditions for parabolic equations in underwater acoustics // *Acta Acustica*, **88**, 711-713 (2002).

55. Arnold, M. Ehrhardt, I. Sofronov, Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation: Fast calculation, approximation, and stability // Communications in Mathematical Sciences, **1**(3), 501–556 (2003).
56. S. Jiang and L. Greengard, Fast evaluation of nonreflecting boundary conditions for the Schrödinger equation in one dimension // Computers & Mathematics with Applications, **47**, 955 (2004).
57. X. Antoine, C. Besse, V. Mouysset, Numerical schemes for the simulation of the two-dimensional Schrödinger equation using non-reflecting boundary conditions // Mathematics of Computation, **73** (248), 1779–1799 (2004).
58. X. Antoine and C. Besse, Artificial boundary conditions for Schrödinger-type equations and their numerical approximation, in: Advances in Scientific Computing and Applications // Y.Y. Lu, W.W. Sun and T. Tang Eds., Science Press, Beijing/New York, pp. 8–21 (2004).
59. Zisowsky, A. Arnold, M. Ehrhardt and Th. Koprucki, Discrete Transparent Boundary Conditions for transient kp-Schrödinger Equations with Application to Quantum-Heterostructures // Journal of Applied Mathematics and Mechanics (ZAMM), Vol. **85**, No. 11, 793-805 (2005).
60. X. Antoine, C. Besse, S. Descombes, Artificial boundary conditions for one-dimensional cubic nonlinear Schrödinger equations // SIAM Journal on Numerical Analysis, **43** (6), 2272-2293 (2006).
61. Zisowsky and M. Ehrhardt, Discrete Transparent Boundary Conditions for Parabolic Systems // Mathematical and Computer Modelling, Vol. **43**, Issue 3-4, 294-309 (2006).
62. Zisowsky and M. Ehrhardt, Discrete artificial boundary conditions for nonlinear Schrödinger equations // Mathematical and Computer Modelling, Vol. **47**, Issue 11-12, 1264-1283 (2008).
63. M. Ehrhardt and C. Zheng, Exact artificial boundary conditions for problems with periodic structures // Journal of Computational Physics, Vol. **227**, Issue 14, 6877-6894 (2008).

64. M. Ehrhardt, Discrete Transparent Boundary Conditions for Schrödinger-type equations for non-compactly supported initial data // *Applied Numerical Mathematics*, Vol. **58**, Issue 5, 660-673 (2008).
65. X. Antoine, A. Arnold, C. Besse, M. Ehrhardt and A. Schädle, A Review of Transparent and Artificial Boundary Conditions Techniques for Linear and Nonlinear Schrödinger Equations // *Communications in Computational Physics*, **4** (4), pp. 729-796 (2008).
66. L. Šumichrast, M. Ehrhardt, Comparison of the continuous, semi-discrete and fully-discrete transparent boundary conditions (TBC) for the parabolic wave equation 1. Theory // *Journal of Electrical Engineering*, **60** (2), 301–312 (2009).
67. X. Antoine, C. Besse, P. Klein, Absorbing boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation with an exterior repulsive potential // *Journal of Computational Physics*, **228** (2), 312–335 (2009).
68. M. Ehrhardt, Absorbing Boundary Conditions for Hyperbolic Systems // *Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications*, Vol. **3**, Number 3, 295-337 (2010).
69. P. Klein, X. Antoine, C. Besse and M. Ehrhardt, Absorbing Boundary Conditions for Solving N-Dimensional Stationary Schrödinger Equations with Unbounded Potentials and Nonlinearities // *Communications in Computational Physics*, Vol. **10**, Number 5, 1280-1304 (2011).
70. X. Antoine, C. Besse, P. Klein, Absorbing boundary conditions for general nonlinear Schrödinger equations // *SIAM Journal on Scientific Computing*, **33** (2), 1008-1033 (2011).
71. Arnold, M. Ehrhardt, M. Schulte and I. Sofronov, Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation on circular domains // *Communications in Mathematical Sciences*, Vol. **10**, Issue 3, 889-916 (2012).
72. R.M. Feshchenko, A.V. Popov, Exact transparent boundary condition for the three-dimensional Schrödinger equation in a rectangular cuboid computational domain // *Physical Review E*, **88**, 053308 (2013).

73. X. Antoine, E. Lorin, J. Sater, F. Fillion-Gourdeau, A.D. Bandrauk, Absorbing boundary conditions for relativistic quantum mechanics equations // *Journal of Computational Physics*, **277**, 268 (2014).
74. R. Hammer, W. Pötz, and A. Arnold, A dispersion and norm preserving finite difference scheme with transparent boundary conditions for the Dirac equation in (1+1)D // *Journal of Computational Physics*, **256**, 728 (2014).
75. P. Petrov, M. Ehrhardt, Transparent boundary conditions for iterative high-order parabolic equations // *Journal of Computational Physics*, **313**, 144-158 (2016).
76. X. Antoine, E. Lorin, Q. Tang, A friendly review of absorbing boundary conditions and perfectly matched layers for classical and relativistic quantum waves equations // *Molecular Physics*, **115** (15-16), 1861-1879 (2017).
77. S. Ji, Y. Yang, G. Pang, X. Antoine, Accurate artificial boundary conditions for the semi-discretized linear Schrödinger and heat equations on rectangular domains // *Computer Physics Communications*, **222**, 84-93 (2018).
78. X. Antoine, E. Lorin, A simple pseudospectral method for the computation of the time-dependent Dirac equation with perfectly matched layers // *Journal of Computational Physics*, **395**, 583-601 (2019).
79. X. Antoine, E. Lorin, Towards perfectly matched layers for time-dependent space fractional PDEs // *Journal of Computational Physics*, **391**, 59-90 (2019).
80. X. Antoine, C. Geuzaine, Q. Tang, Perfectly Matched Layer for computing the dynamics of nonlinear Schrödinger equations by pseudospectral methods. Application to rotating Bose-Einstein condensates // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, **90**, 105406 (2020).
81. X. Antoine, E. Lorin, Y. Zhang, Derivation and analysis of computational methods for fractional Laplacian equations with absorbing layers // *Numer. Algor.*, **87**, 409-444 (2021).

82. J.R. Yusupov, K.K. Sabirov, M. Ehrhardt and D.U. Matrasulov, Transparent Quantum Graphs // Physics Letters A, **383**(20), 2382-2388 (2019).
83. J.R. Yusupov, K.K. Sabirov, M. Ehrhardt and D.U. Matrasulov, Transparent nonlinear networks // Physical Review E, **100** (3), 032204 (2019).
84. J.R. Yusupov, K.K. Sabirov, Q.U. Asadov, M. Ehrhardt and D.U. Matrasulov, Dirac Particles in Transparent Quantum Graphs: Tunable transport of relativistic quasiparticles in branched structures // Physical Review E, **101** (6), 062208 (2020).
85. R. A. Adams, Sobolev spaces // volume **65** of Pure and Applied Mathematics Academic Press [A subsidiary of Harcourt Brace Jovanovich, Publishers], New York-London (1975).
86. P. Exner, Contact interactions on graph superlattices // Journal of Physics A: Mathematical and General, **29**(1), 87-102 (1996).
87. F. Schmidt and P. Deuffhard, Discrete transparent boundary conditions for the numerical solution of Fresnel's equation // Computers & Mathematics with Applications, **29**, 53-76 (1995).
88. C.E. Grosch and S.A. Orszag, Numerical solution of problems in unbounded regions: coordinate transform // Journal of Computational Physics, **25**, 273-296 (1977).
89. F. Ladouceur, Boundaryless beam propagation // Optics Letters, **21**, 4-5 (1996).
90. Pazy, Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations // Springer, New York (1983).
91. H.S. Carslaw and J.C. Jaeger, Conduction of heat in solids // Clarendon Press, Oxford, UK (1959).
92. J.S. Papadakis, Impedance formulation of the bottom boundary condition for the parabolic equation model in underwater acoustics // NORDA Parabolic Equation Workshop, NORDA Tech. Note, 143 (1982).
93. Arnold, Mathematical concepts of open quantum boundary conditions // Transport Theory and Statistical Physics, **30**, 561-584 (2001).

94. X. Antoine and C. Besse, Unconditionally stable discretization schemes of non-reflecting boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation // Journal of Computational Physics, **188**, 157–175 (2003).
95. Lubich, A. Schädle, Fast convolution for non-reflecting boundary conditions // SIAM Journal on Scientific Computing, **24**, 161–182 (2002).
96. R. Wilson, T.J. Karle, I. Moerman, T.F. Krauss, Efficient photonic crystal Y-junctions // Journal of Optics A: Pure and Applied Optics, **5**, S76 (2003).
97. P.I. Borel, L.H. Frandsen, A. Harpøth, et al., Topology optimised broadband photonic crystal Y-splitter // Electronics Letters, **41**, 69 (2005).
98. S.V. Boriskina, Spectral engineering of bends and branches in microdisk coupled-resonator optical waveguides // Optics Express **15**, 17371 (2007).
99. W. Yang, X. Chen, X. Shi, W. Lu, Design of a high transmission Y-junction in photonic crystal waveguides // Physica B: Condensed Matter, **405**, 1832 (2010).
100. J.B. Driscoll, R.R. Grote, B. Souhan, Asymmetric Y junctions in silicon waveguides for on-chip mode-division multiplexing // Optics Letters, **38**, 1854 (2013).
101. T. Kottos, U. Smilansky. Periodic orbit theory and spectral statistics for quantum graphs // Annals of Physics, **274**(1), 76–124 (1999).
102. O. Hul, S. Bauch, P. Pakonski, N. Savytskyy, K. Zyczkowski and L. Sirko, Experimental simulation of quantum graphs by microwave networks // Physical Review E, **69**, P.056205 (2004).
103. J.M. Harrison, U. Smilansky, B. Winn, Quantum graphs where back-scattering is prohibited // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, **40**, 14181 (2007).
104. P. Joly, M. Kachanovska, A. Semin, Wave propagation in fractal trees. Mathematical and Numerical Issues // hal-01801394 (2018).

- 105.K. Naimark, M. Solomyak, Eigenvalue estimates for the weighted Laplacian on metric trees // Proceedings of the London Mathematical Society, **80**, 690 (2000).
- 106.P. Exner, J. Lipovsky, On the absence of absolutely continuous spectra for Schrödinger operators on radial tree graphs // Journal of Mathematical Physics, **51**, 122107 (2010).
- 107.P. Kurasov, R. Ogik, A. Rauf, On reflectionless equi-transmitting matrices // Opuscula Mathematica, **34**, 483 (2014).
- 108.T. Cheon, Reflectionless and equiscattering quantum graphs and their applications, Int. J. Adv. Syst. Measur., **5** (2012) 34.
- 109.A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M. R.Peres, K.S. Novoselov, A. K. Geim, The electronic properties of grapheme // Reviews of Modern Physics, **81**, 109 (2009).
- 110.V.N. Kotov, B. Uchoa,V.M. Pereira, F. Guinea, and A.H. Castro Neto, Electron-Electron Interactions in Graphene: Current Status and Perspectives // Reviews of Modern Physics, **84**, 1067 (2012).
- 111.L. Brey and H. A. Fertig, Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation // Physical Review B, **73**, 235411 (2006).
- 112.E.A. Laird, F. Kuemmeth, G.A. Steele, K. Grove-Rasmussen, J. Nygård, K. Flensberg, and L.P. Kouwenhoven, Quantum transport in carbon nanotubes // Reviews of Modern Physics, **87**, 703 (2015).
- 113.M.Z. Hasan and C.L. Kane, Colloquium: Topological insulators // Reviews of Modern Physics, **82**, 3045 (2010).
- 114.X-L. Qi and S.-C.Zhang, Topological insulators and superconductors // Reviews of Modern Physics, **83**, 1057 (2011).
- 115.Chamon, R. Jackiw, Y. Nishida, S.-Y. Pi, and L. Santos, Quantizing Majorana fermions in a superconductor // Physical Review B, **81**, 224515 (2010).
- 116.J.Alicea, New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems // Reports on Progress in Physics, **75**, 076501 (2012).

- 117.W. Bulla and T. Trenkler, The free Dirac operator on compact and noncompact graphs // Journal of Mathematical Physics, **31**, 1157 (1990).
- 118.L. Pauling, The Diamagnetic Anisotropy of Aromatic Molecules // Journal of Chemical Physics, **4**, P.673 (1936).
- 119.K. Ruedenberg and C. W. Scherr, Free-Electron Network Model for Conjugated Systems. I. Theory // Journal of Chemical Physics, **21**, 1565 (1953).
- 120.S. Alexander, Superconductivity of networks. A percolation approach to the effects of disorder // Physical Review B, **27**, 1541 (1983).
- 121.K.K. Sabirov, J. Yusupov, D. Jumanazarov, and D. Matrasulov, Bogoliubov de Gennes equation on metric graphs // Physics Letters A, **382**, 2856 (2018).
- 122.D.U. Matrasulov, K.K. Sabirov, and J.R. Yusupov, PT-symmetric quantum graphs // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, **52**, 155302 (2019).
- 123.J. Yusupov and M. Dolgushev, A. Blumen, and O. Mülken, Directed transport in quantum star graphs // Quantum Information Processing, **15**, 1765 (2016).
- 124.A.N. Andriotis and M. Menon, Transport properties of branched graphene nanoribbons // Applied Physics Letters, **92**, 042115 (2008).
- 125.Y.P. Chen, Y.E. Xie, L.Z. Sun, and J.Zhong, Asymmetric transport in asymmetric T-shaped graphene nanoribbons // Applied Physics Letters, **93**, 092104 (2008).
- 126.J.G. Xu, L.Wang, and M.Q. Weng, Quasi-bound states and Fano effect in T-shaped graphene nanoribbons // Journal of Applied Physics, **114**, 153701 (2013).
- 127.A.G. Kvashnin, D.G. Kvashnin, O.P. Kvashnina, and L.A. Chernozatonskii, Transport investigation of branched graphene nanoflakes // Nanotechnology, **26**, 385705 (2015).
- 128.D.K. Campbell and A.R. Bishop, Solitons in polyacetylene and relativistic-field-theory models // Physical Review B, **24**, 4859 (1981).

- 129.H. Uecker, D. Grieser, Z. Sobirov, D. Babajanov, and D. Matrasulov, Soliton transport in tubular networks: Transmission at vertices in the shrinking limit // Physical Review E, **91**, 023209 (2015).
- 130.S. Gnutzmann, H. Schanz, and U. Smilansky, Topological Resonances in Scattering on Networks (Graphs) // Physical Review Letters, **110**, 094101 (2013).
- 131.S. Gnutzmann and D. Waltner, Stationary waves on nonlinear quantum graphs: General framework and canonical perturbation theory // Physical Review E, **93**, 032204 (2016).
- 132.S. Gnutzmann, D. Waltner, Stationary waves on nonlinear quantum graphs. II. Application of canonical perturbation theory in basic graph structures // Physical Review E, **94**, 062216 (2016).
- 133.Kairzhan, D. E. Pelinovsky, and R. H. Goodman, Drift of Spectrally Stable Shifted States on Star Graphs // SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, **18**(4), 1723–1755 (2019).
- 134.Y.S. Kivshar and G.P. Agrawal, Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals // Academic, San Diego (2003).
- 135.G.P. Agrawal, Applications of Nonlinear Fiber Optics // Academic, San Diego (2001).
- 136.R. Radhakrishnan, M. Lakshmanan, and J. Hietarinta, Inelastic collision and switching of coupled bright solitons in optical fibers // Physical Review E, **56**, 2213 (1997).
- 137.T. Kanna and M. Lakshmanan, Exact Soliton Solutions, Shape Changing Collisions, and Partially Coherent Solitons in Coupled Nonlinear Schrödinger Equations // Physical Review Letters, **86**, 5043 (2001).
- 138.M.J. Ablowitz, B. Prinari, and A.D. Trubatch, Soliton interactions in the vector NLS equation // Inverse Problems, **20**, 1217 (2004).
- 139.R. Radhakrishnan and M. Lakshmanan, Bright and dark soliton solutions to coupled nonlinear Schrodinger equations // Journal of Physics A: Mathematical and General, **28**, 2683 (1995).

140. A.P. Sheppard and Y.S. Kivshar, Polarized dark solitons in isotropic Kerr media // *Physical Review E*, **55**, 4773 (1997).
141. M. Vijayajayanthi, T. Kanna, and M. Lakshmanan, Bright-dark solitons and their collisions in mixed N-coupled nonlinear Schrödinger equations // *Physical Review A*, **77**, 013820 (2008).
142. B.F. Feng, General N-soliton solution to a vector nonlinear Schrödinger equation // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **47**, 355203 (2014).
143. Y. Ohta, D. S. Wang, and J. Yang, General N-Dark–Dark Solitons in the Coupled Nonlinear Schrödinger Equations // *Studies in Applied Mathematics*, **127**, 345 (2011).
144. P.G. Kevrekidis and D.J. Frantzeskakis, Solitons in coupled nonlinear Schrödinger models: A survey of recent developments // *Reviews in Physics*, **1**, 140 (2016).
145. J. Frantzeskakis, Dark solitons in atomic Bose–Einstein condensates: from theory to experiments // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **43**, 213001 (2010).
146. J.U. Kang, G.I. Stegeman, J.S. Aitchison, and N. Akhmediev, Observation of Manakov Spatial Solitons in AlGaAs Planar Waveguides // *Physical Review Letters*, **76**, 3699 (1996).
147. J. Yang, Multisoliton perturbation theory for the Manakov equations and its applications to nonlinear optics // *Physical Review E*, **59**, 2393 (1999).
148. K. Steiglitz, Time-gated Manakov spatial solitons are computationally universal // *Physical Review E*, **63**, 016608 (2000).
149. J. Yang, Suppression of Manakov soliton interference in optical fibers // *Physical Review E*, **65**, 036606 (2002).
150. W.-P. Zhong, M. Belić, and B. A. Malomed, Rogue waves in a two-component Manakov system with variable coefficients and an external potential // *Physical Review E*, **92**, 053201 (2015).
151. Zheng, Exact nonreflecting boundary conditions for one-dimensional cubic nonlinear Schrödinger equations // *Journal of Computational Physics*, **215**, 552 (2006).

152. H. Li, X. Wu, and J. Zhang, Local absorbing boundary conditions for nonlinear wave equation on unbounded domain // *Physical Review E*, **84**, 036707 (2011).
153. S.V. Manakov, On the theory of two-dimensional stationary self focussing of electromagnetic waves // *Soviet Physics – JETP*, **38**, 248 (1974).
154. S. Ganesan and M. Lakshmanan, Singularity-structure analysis and Hirota's bilinearisation of the Davey-Stewartson equation // *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **20**, L1143 (1987).
155. M. Lakshmanan, Analytic methods for soliton systems // *International Journal of Bifurcation and Chaos*, **3**, 3 (1993).
156. M.S. Ismail, Numerical solution of coupled nonlinear Schrödinger equation by Galerkin method // *Mathematics and Computers in Simulation*, **78**, 532 (2008).
157. M.M. Aripov, K.K. Sabirov, and J.R. Yusupov, Transparent vertex boundary conditions for quantum graphs: Simplified approach // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, **10**, 505 (2019).
158. J.R. Yusupov, K.S. Matyokubov, K.K. Sabirov, and D.U. Matrasulov, Exciton dynamics in branched conducting polymers: Quantum graphs based approach // *Chemical Physics*, **537**, 110861 (2020).
159. M. Taylor, *Pseudo Differential Operators* // *Lecture Notes in Mathematics Vol. 416* (Springer, Berlin, 1974).
160. L. Nirenberg, *Lectures on Linear Partial Differential Equations* // *CBMS Regional Conference Series in Mathematics Vol. 17* (AMS, Providence, 1972).
161. M.S. Ismail, T.R. Taha, Numerical simulation of coupled nonlinear Schrödinger equation // *Mathematics and Computers in Simulation*, **56**, 547 (2001).
162. M.S. Ismail and S.Z. Alamri, Highly accurate finite difference method for coupled nonlinear Schrödinger equation // *International Journal of Computer Mathematics*, **81**, 333 (2004).

163. M.S. Ismail, T.R. Taha, A linearly implicit conservative scheme for the coupled nonlinear Schrödinger equation // *Mathematics and Computers in Simulation*, **74**, 302 (2007).
164. M.S. Ismail, A Fourth Order Explicit Schemes for the Coupled Nonlinear Schrödinger Equation // *Applied Mathematics and Computation*, **196**, 273 (2008).
165. Q.-B. Xu and Q.-S. Chang, New numerical methods for the coupled nonlinear Schrödinger equations // *Acta Mathematicae Applicatae Sinica, English Series*, **26**, 205 (2010).
166. J. de Frutos and J. M. Sanz-Serna, An easily implementable fourth-order method for the time integration of wave problems // *Journal of Computational Physics*, **103**, 160 (1992).
167. S. Zhou and X. Cheng, Numerical solution to coupled nonlinear Schrödinger equations on unbounded domains // *Mathematics and Computers in Simulation*, **80**, 2362 (2010).
168. J. Chen and L.-M. Zhang, Numerical approximation of solution for the coupled nonlinear Schrödinger equations // *Acta Math. Appl. Sin. Engl. Ser.* **33**, 435 (2017).
169. Y. Hu, H. Li, and Z. Jiang, Efficient semi-implicit compact finite difference scheme for nonlinear Schrödinger equations on unbounded domain // *Applied Numerical Mathematics*, **153**, 319 (2020).
170. K. Nakamura, T. Kanna and K. Sakkaravarthi, Protocol of networks using energy sharing collisions of bright solitons // *Pramana*, **85** 1009–1021 (2015).
171. K.K. Sabirov, J.R. Yusupov, M.M. Aripov, M. Ehrhardt, and D.U. Matrasulov, Reflectionless propagation of Manakov solitons on a line: A model based on the concept of transparent boundary conditions // *Phys. Rev. E*, **103** 043305 (2021)
172. M.J. Ablowitz and Z.H. Musslimani, Integrable Nonlocal Nonlinear Schrödinger Equation // *Phys. Rev. Lett.* **110**, 064105 (2013).
173. S. Stalin, M. Senthilvelan, and M. Lakshmanan, Nonstandard bilinearization of PT-invariant nonlocal nonlinear Schrödinger

- equation: Bright soliton solutions // *Phys. Lett. A* **381**, 860 (2017).
- 174.M.J. Ablowitz and Z.H. Musslimani, Integrable discrete *PT* symmetric model // *Phys. Rev. E* **90**, 032912 (2014).
 - 175.M.J. Ablowitz and Z.H. Musslimani, Inverse scattering transform for the integrable nonlocal nonlinear Schrödinger equation // *Nonlinearity* **29**, 915 (2016).
 - 176.M.J. Ablowitz and Z.H. Musslimani, Integrable Nonlocal Nonlinear Equations // *Stud. Appl. Math.* **139**, 7 (2016).
 - 177.Sinha and P.K. Ghosh, Symmetries and exact solutions of a class of nonlocal nonlinear Schrödinger equations with self-induced parity-time-symmetric potential // *Phys. Rev. E* **91**, 042908 (2018).
 - 178.J. Yang, Physically significant nonlocal nonlinear Schrödinger equation and its soliton solutions // *Phys. Rev. E* **98**, 042202 (2018).
 - 179.Z. Wen and Zh. Yan, The nonlinear Schrödinger equation with generalized nonlinearities and *PT*-symmetric potentials: Stable solitons, interactions, and excitations // *Chaos* **27**, 073114 (2017).
 - 180.B-F. Feng, X-D. Luo, M.J. Ablowitz, and Z.H. Musslimani, General soliton solution to a nonlocal nonlinear Schrödinger equation with zero and nonzero boundary conditions // *Nonlinearity* **31**, 5385 (2018).
 - 181.M.J. Ablowitz, X-D. Luo, and Z.H. Musslimani, Inverse scattering transform for the nonlocal nonlinear Schrödinger equation with nonzero boundary conditions // *J. Math. Phys.* **59**, 011501 (2018).
 - 182.M.J. Ablowitz, Z.H. Musslimani, Integrable nonlocal asymptotic reductions of physically significant nonlinear equations // *J. Phys. A* **52**, 15LT02 (2019).
 - 183.R. Rusin, R. Kusdiantara, and H. Susanto, Variational approximations of soliton dynamics in the Ablowitz-Musslimani nonlinear Schrödinger equation // *Phys. Lett. A* **383**, 2039 (2019).

184. J. Rao, J. He, T. Kanna, and D. Mihalache, Nonlocal M -component nonlinear Schrödinger equations: Bright solitons, energy-sharing collisions, and positons // *Phys. Rev. E* **102**, 032201 (2020).
185. C.B. Ward, P.G. Kevrekidis, T.P. Horikis, and D.J. Frantzeskakis, Rogue waves and periodic solutions of a nonlocal nonlinear Schrödinger model // *Phys. Rev. Res.* **2**, 013351 (2020).
186. M. Akramov, K. Sabirov, D. Matrasulov, H. Susanto, S. Usanov, and O. Karpova, Nonlocal nonlinear Schrödinger equation on metric graphs: A model for generation and transport of parity-time-symmetric nonlocal solitons in networks // *Phys. Rev. E* **105**, 054205 (2022).
187. O. Maor, N. Dror, and B.A. Malomed, Holding spatial solitons in a pumped cavity with the help of nonlinear potentials // *Opt. Lett.* **38**, 5454-5457 (2013).
188. A. Duran and J.M. Sanz-Serna, The numerical integration of relative equilibrium solutions. The nonlinear Schrödinger equation // *IMA J. Numer. Anal.* **20**, 235 (2000).

Для заметок _____

This image shows a single page from a notebook or ledger. It features approximately 20 evenly spaced horizontal black lines across its entire width, providing a guide for handwriting. The margins are consistent on all sides, and there are no vertical lines or other markings present.

ЮСУПОВ ЖАМБУЛ РУСЛОНОВИЧ

**МЕТРИЧЕСКИЕ ГРАФЫ С ПРОЗРАЧНЫМИ УЗЛАМИ:
МОДЕЛЬ БЕЗОТРАЖАТЕЛЬНОГО ТРАНСПОРТА ЧАСТИЦ И
ВОЛН В КВАНТОВЫХ СЕТЯХ**

МОНОГРАФИЯ

Редактор: *У. Рабжабова*

Дизайнер-верстальщик: *А. Абдурахимов*

Номер лицензии № 249133.

Подписано в печать 09.10.2024.

Формат 60×84/16. Изд. п.л. 10,5. Усл. печ.л. 9.76.

Гарнитура шрифта “Cambria Math”. Тираж 35.

Заказ № 33.

Договор № 007NM от 07.08.2024.

Изготовлено и отпечатано в «DIZAYN MARKET».

г. Ташкент. Кибрайский район.

Уткир МФЙ. ул. Тинчлик, 1-проезд, дом 4.