

## Преломление автоволн: правило тангенсов

О. А. Морнев<sup>1)</sup>

Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, 142290 Пущино, Россия

Поступила в редакцию 27 июля 2004 г.

После переработки 9 ноября 2004 г.

Преломление автоволн на границах раздела однородных областей реакционно-диффузионной среды с различными значениями коэффициента диффузии описывается *правилом тангенсов*.

PACS: 05.45.–a, 82.40.Ck, 87.10.+e

Нелинейные самоподдерживающиеся волны (автоволны), распространяющиеся в активных реакционно-диффузионных средах, характеризуются специфическими отличиями от волн в консервативных средах [1–3]. Одно из них относится к закону преломления – правилу, которое устанавливает связь между направлениями распространения волнового фронта по обеим сторонам границы раздела однородных областей среды. В настоящей работе показано, что если диффузионные свойства однородных областей различны, а активные свойства одинаковы, то преломление автоволн подчиняется “правилу тангенсов” (см. далее), а не “правилу синусов”, выражающему известный оптический закон преломления Снеллия.

Ниже рассматриваются кусочно-однородные активные среды, состояние однородных областей которых эволюционирует в соответствии с уравнением неразрывности

$$u_t + \operatorname{div} \mathbf{J} = f(u) \quad (1)$$

и линейным феноменологическим законом диффузии (закон Фика)

$$\mathbf{J} = -D\nabla u. \quad (2)$$

Здесь  $u = u(\mathbf{r}, t)$  – концентрация заполняющего среду реагента (активатора) в пространственной точке  $\mathbf{r} \equiv \{x, y, z\}$  в момент времени  $t$ ;  $u_t \equiv \partial u / \partial t$ ;  $f(u)$  – кинетическая функция, определяющая зависимость скорости производства активатора в единице пространственного объема от концентрации  $u$  (функция  $f(u)$  непрерывна и имеет одинаковый вид во всей среде);  $\mathbf{J}$  – вектор плотности диффузионного потока активатора;  $D$  – коэффициент диффузии активатора, значения которого постоянны в каждой однородной области, но изменяются скачком при переходах через их границы;  $\operatorname{div}$  и  $\nabla \equiv \operatorname{grad}$  – операторы пространственных дивергенции и градиента.

В однородных областях эволюционирующая автоволна представляется семейством фронтов – изоконцентрационных поверхностей  $u(\mathbf{r}, t) = \operatorname{const} \equiv u_F$ , где  $u_F$  есть значение концентрации на фронте, а  $u(\mathbf{r}, t)$  является решением реакционно-диффузионного уравнения

$$u_t = D\Delta u + f(u) \quad (\Delta \equiv \operatorname{div} \operatorname{grad}), \quad (3)$$

получаемого подстановкой (2) в (1). Уравнение (3) описывает, например, диффузию генов в биологических популяциях [4, 5]; температурные и/или концентрационные автоволны в горючих и других автокаталитических средах [6, 7]; автоволны замещения режимов кипения в охладителях [8]; автоволны перестроек сопротивления в нормальных металлах и сверхпроводниках [9]; передние фронты импульсов возбуждения в биологических электровозбудимых средах [10].

На поверхностях, разделяющих однородные области, решения уравнения (3) должны сопрягаться по некоторым правилам сшивки. Однако каковы бы ни были эти правила, ясно, что на указанных поверхностях должно наблюдаться преломление концентрационных фронтов, поскольку скорость  $\mathbf{v}_D = u^{-1}\mathbf{J} = -Du^{-1}\nabla u$  диффузионного переноса активатора в областях с различными значениями  $D$  различна.

Явления преломления удобно описывать, привлекая понятие лучей, дуальное понятию фронтов. Лучами будут называться кривые, ортогональные однопараметрическому семейству изохронных фронтов, которое выделяется из двухпараметрического семейства  $u(\mathbf{r}, t) = u_F$  фиксацией значения  $t$ . Другими словами, лучи суть интегральные кривые векторного поля градиента концентрации  $u$  при заданном  $t$ . Прямая, касательная к лучу в точке  $\mathbf{r}$ , определяется любым вектором, коллинеарным вектору  $\nabla u(\mathbf{r}, t)$ , в частности, самим этим вектором, а также вектором диффузионного потока  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -D\nabla u(\mathbf{r}, t)$ . Пусть области 1 и 2 – две соседние однородные области с коэффициентами диффузии  $D_1$  и  $D_2$ , разделенные по-

<sup>1)</sup>e-mail: mornev@mail.ru

верхностью  $\Pi$ , идеально проницаемой для диффузионных потоков. Как и в оптике, эффект преломления состоит в том, что гладкий луч, пересекая  $\Pi$  в некоторой точке  $O \in \Pi$ , претерпевает в этой точке излом: две гладкие компоненты луча, одна из которых расположена в области 1, а другая – в области 2, имеют в точке  $O \in \Pi$  две различные предельные касательные прямые, определяемые касательными векторами  $(\nabla u)_1, (\nabla u)_2$  (последние получаются из  $\nabla u$  односторонними предельными переходами к точке  $O \in \Pi$  вдоль гладких компонент луча со стороны областей 1 и 2, соответственно). Связь между положениями указанных прямых определяет закон преломления автоволны; задача состоит в установлении последнего.

Очевидно, что для нахождения закона преломления достаточно выявить связь между касательными векторами лучей  $(\nabla u)_1$  и  $(\nabla u)_2$  в точке  $O \in \Pi$ . Это можно сделать, исходя из двух общих фактов: требования непрерывности концентрационного поля  $u$  на поверхности  $\Pi$  и интегрального уравнения неразрывности, описывающего баланс активатора в среде<sup>2)</sup>.

Принимая требование непрерывности поля  $u$  на  $\Pi$ , рассмотрим контур  $O_1 O'_1 O'_2 O_2$ , показанный на рис.1. По соображениям непрерывности значения  $u$  в точ-

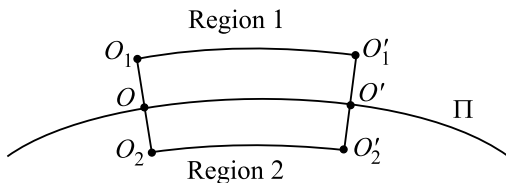


Рис.1. К выводу граничного условия (4). Пояснения в тексте

ках  $O_1$  и  $O'_1$ , лежащих в области 1, близки значениям  $u$  в соответственных точках  $O_2$  и  $O'_2$ , расположенных в области 2. Поэтому разность  $u(O'_1, t) - u(O_1, t)$  близка разности  $u(O'_2, t) - u(O_2, t)$ , что влечет близость пространственных производных переменной  $u$ , вычисленных в точках  $O_1$  и  $O_2$  вдоль направлений, касательных к дугам  $O_1 O'_1$  и  $O_2 O'_2$ . В пределе, когда ука-

<sup>2)</sup>Требование непрерывности поля  $u$  на поверхности  $\Pi$  диктуется следующими соображениями. Скачкообразное изменение коэффициента диффузии  $D$  при переходе через  $\Pi$  моделирует ту реальную физическую ситуацию, когда  $D$  непрерывно изменяется между значениями  $D_1$  и  $D_2$  в пространственном слое малой, но конечной, ширины  $\delta$ , прилегающем с обеих сторон к  $\Pi$ . В этом случае поле  $u$  является непрерывным. Но оно должно остаться таковым и в пределе  $\delta \rightarrow 0$ , иначе модель поверхностного скачка  $D$  будет неадекватна физической ситуации.

занный на рис.1 контур сжимается к дуге  $OO' \subset \Pi$ , получаем граничное условие

$$(\partial u / \partial \tau)_1 = (\partial u / \partial \tau)_2 \Leftrightarrow (\nabla u)_1 \cdot \tau = (\nabla u)_2 \cdot \tau, \quad (4)$$

где  $\partial / \partial \tau = \tau \cdot \nabla$  – символ производной вдоль единичного вектора  $\tau$ , касательного к  $\Pi$  в точке  $O$ , а нижние индексы 1 и 2, как и выше, обозначают односторонние пределы величин на поверхности  $\Pi$ . Условие (4) выполняется в любой точке  $O \in \Pi$  при любом выборе  $\tau$ ; оно показывает, что при переходе через  $\Pi$  проекция вектора  $\nabla u$  на любое направление, касательное к  $\Pi$  в точке перехода, изменяется непрерывно. При этом касательная проекция вектора  $\mathbf{J} = -D \nabla u$  терпит разрыв: это видно из равенства  $D_1^{-1} \tau \cdot \mathbf{J}_1 = D_2^{-1} \tau \cdot \mathbf{J}_2$ , равносильного (4).

Теперь рассмотрим граничное условие, связывающее на  $\Pi$  нормальные проекции векторов  $(\nabla u)_1$  и  $(\nabla u)_2$ . С этой целью обратимся к интегральному уравнению неразрывности

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V u dV + \oint_{\partial V} \mathbf{J} d\mathbf{S} = \int_V f(u) dV, \quad (5)$$

описывающему баланс активатора в произвольной замкнутой пространственной области  $V$ , ограниченной поверхностью  $\partial V$ . Это уравнение, имеющее большую общность, нежели дифференциальное уравнение неразрывности (1), сводится к последнему в гомогенных областях, а на поверхности, разделяющей эти области, порождает искомое граничное условие с помощью следующей стандартной математической конструкции. Применим (5) к показанному на рис.2 цилиндру с основаниями  $S_1$  и  $S_2$ , высекающему на  $\Pi$

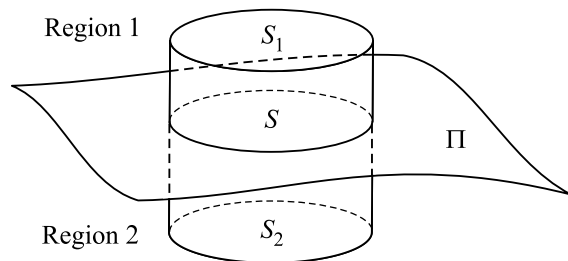


Рис.2. К выводу граничного условия (6). Пояснения в тексте

произвольную площадку  $S$ . Сожмем цилиндр, приближая его основания  $S_1, S_2$  к  $S \subset \Pi$  со стороны областей 1, 2. Тогда объемные интегралы и интег-

рал по боковой поверхности цилиндра в (5) обратятся в нуль, и (5) примет вид

$$\oint_S (\mathbf{J}_1 - \mathbf{J}_2) \cdot \mathbf{n} dS \equiv \\ \equiv - \oint_S [D_1(\nabla u)_1 - D_2(\nabla u)_2] \cdot \mathbf{n} dS = 0,$$

где  $\mathbf{n}$  – единичный вектор, нормальный к  $S$  и направленный в сторону области 1. Так как выбор площадки  $S$  произволен, последнее равенство эквивалентно граничному условию

$$D_1(\nabla u)_1 \cdot \mathbf{n} = D_2(\nabla u)_2 \cdot \mathbf{n}, \quad (6)$$

из которого, в частности, следует, что при переходе через поверхность  $\Pi$  проекция вектора  $\nabla u$  на направление, нормальное к этой поверхности, терпит разрыв. (При этом нормальная проекция вектора  $\mathbf{J}$  изменяется непрерывно: действительно, (6) равносильно равенству  $\mathbf{n}\mathbf{J}_1 = \mathbf{n}\mathbf{J}_2$ .)

Граничные условия (4), (6) определяют связь направлений векторов  $(\nabla u)_1$  и  $(\nabla u)_2$  в точках поверхности  $\Pi$ , то есть закон преломления лучей. Этот закон выявляется в два шага.

Вначале убедимся, что три вектора  $(\nabla u)_1$ ,  $\mathbf{n}$ ,  $(\nabla u)_2$ , имеющие общее начало в точке преломления  $O \in \Pi$ , расположены в одной плоскости (плоскость преломления). Для этого рассмотрим разложение  $(\nabla u)_i = \mathbf{N}_i + \mathbf{T}_i$  ( $i = 1, 2$ ), где  $\mathbf{N}_i$  и  $\mathbf{T}_i$  суть компоненты векторов  $(\nabla u)_i$ , нормальные и, соответственно, касательные к  $\Pi$  в точке  $O \in \Pi$ . Векторы  $\mathbf{N}_1$  и  $\mathbf{N}_2$  принадлежат прямой, проходящей вдоль нормали  $\mathbf{n}$ ; поэтому векторы  $(\nabla u)_1$  и  $(\nabla u)_2$  лежат в плоскостях, натянутых на пары векторов  $\{\mathbf{n}, \mathbf{T}_1\}$  и  $\{\mathbf{n}, \mathbf{T}_2\}$ . Покажем, что  $\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_2$ ; тогда плоскости  $\{\mathbf{n}, \mathbf{T}_1\}$  и  $\{\mathbf{n}, \mathbf{T}_2\}$  совпадают и образуют единую плоскость преломления, содержащую  $\mathbf{n}$ . Этот факт следует из граничного условия (4), которое с использованием вышеуказанного разложения можно представить в виде равенства  $(\mathbf{T}_1 - \mathbf{T}_2) \cdot \boldsymbol{\tau} = 0$ . Последнее должно выполняться при любом выборе вектора  $\boldsymbol{\tau}$ , касающегося  $\Pi$  в точке  $O \in \Pi$ ; но это возможно лишь при  $\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_2$ .

Обратимся к закону преломления. Рассмотрим плоскость преломления (плоскость  $R$  на рис.3), содержащую нормаль  $\mathbf{n}$  к поверхности  $\Pi$  в точке  $O$  преломления луча. Пусть  $\boldsymbol{\tau}$  – единичный вектор, лежащий в  $R$  и касательный к  $\Pi$  в точке  $O$ . Введем на  $R$  ортогональную систему координат  $Oxy$ , направив ось  $Ox$  вдоль  $\boldsymbol{\tau}$ , а ось  $Oy$  вдоль  $\mathbf{n}$  (рис.3). По доказанному, плоскость  $R$  содержит векторы  $(\nabla u)_1$ ,  $(\nabla u)_2$ . Из (4) следует, что проекции этих векторов на ось  $Ox$  имеют одинаковые знаки; из (6) следует, что знаки

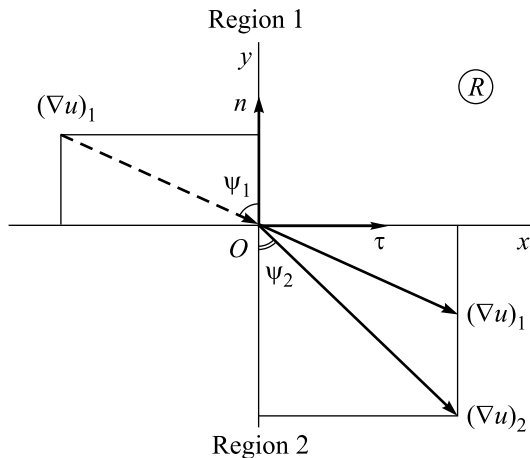


Рис.3. Геометрия расположения векторов  $(\nabla u)_1$  и  $(\nabla u)_2$  в плоскости преломления  $R$

проекций этих векторов на ось  $Oy$  также одинаковы. Поэтому  $(\nabla u)_1$  и  $(\nabla u)_2$  расположены в одном и том же квадранте плоскости  $R$ . Не ограничивая общности, можно считать, что таковым является IV квадрант плоскости  $R$  (рис.3): этого всегда можно добиться подходящими поворотами системы координат вокруг  $\boldsymbol{\tau}$  и  $\mathbf{n}$  и/или перестановкой номеров гомогенных областей 1, 2. Теперь пусть  $\varphi_1, \varphi_2$  – углы между векторами  $(\nabla u)_1, (\nabla u)_2$  и осью  $Ox$ . Введем углы  $\psi_1, \psi_2$  между  $(\nabla u)_1, (\nabla u)_2$  и осью  $Oy$ , определив их равенством  $\psi_i = \varphi_i - 3\pi/2$  ( $i = 1, 2$ ). Обращаясь к рис.3, нетрудно усмотреть, что

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \psi_1 &= ((\nabla u)_1 \cdot \boldsymbol{\tau}) / |(\nabla u)_1 \cdot \mathbf{n}|, \\ \operatorname{tg} \psi_2 &= ((\nabla u)_2 \cdot \boldsymbol{\tau}) / |(\nabla u)_2 \cdot \mathbf{n}|. \end{aligned} \quad (7)$$

Отсюда и из условий (4), (6) вытекает искомый закон преломления (правило тангенсов):

$$\operatorname{tg} \psi_1 / \operatorname{tg} \psi_2 = \operatorname{const} \equiv D_1 / D_2. \quad (8)$$

Подчеркнем, что этот закон является локальным: он описывает картину преломления вблизи поверхности  $\Pi$ , но не вдали от нее. Поэтому (8) остается в силе также и в том случае, когда коэффициент  $D$  в областях 1 и 2 не постоянен, а плавно меняется от точки к точке, совершая при переходе через скачок между локальными значениями  $D_1$  и  $D_2$ .

Правило тангенсов (8) применимо как в условиях нестационарной эволюции преломляющейся автоволны, так и в установившемся режиме преломления, когда геометрия фронтов и лучей перестает изменяться. В последнем случае правило тангенсов согласуется с результатами работы [11] и позволяет независимо воспроизвести их путем дополнительного анализа.

Другое представление формулы (8) получается, если учесть связь  $c = c_s D^{1/2}$ , где  $c$  – стационарная скорость плоской автоволны в бесконечной гомогенной среде с коэффициентом диффузии  $D$ ,  $c_s$  – размерная константа, не зависящая от  $D$ <sup>3)</sup>. Это представление имеет вид

$$\operatorname{tg} \psi_1 / \operatorname{tg} \psi_2 = \operatorname{const} \equiv c_1^2 / c_2^2, \quad (9)$$

здесь  $c_1$  и  $c_2$  – значения стационарной скорости  $c$  при  $D = D_1$  и  $D = D_2$ .

Нетрудно уяснить, что правило тангенсов предопределяет наличие изломов лучей и фронтов на поверхностях скачка коэффициента диффузии. Так как это правило является прямым следствием общефизических закономерностей, упомянутые изломы, вопреки мнению авторов работы [12], не могут быть устранены ни диффузией, ни специфическими динамическими эффектами, реализующимися при распространении автоволн. Кроме того, точная формула (9), по-видимому, не подтверждает некоторых результатов приближенного анализа, изложенных в работе [13], в которой рассмотрен случай исчезающе малой диффузии.

Факты, изложенные выше, относятся к активным средам, подчиняющимся паре соотношений (1), (2). Кратко остановимся на случае многокомпонентных активных сред, которые содержат несколько реагентов (компонент) – активаторов и ингибиторов и описываются несколькими парами соотношений вида (1), (2) (число пар равно числу компонент). В таких средах правило тангенсов (8) выполняется индивидуально для каждой из диффундирующих компонент, подверженных преломлению; при этом величины  $D_1$ ,  $D_2$ , входящие в соотношение (8), относятся именно к той преломляющейся компоненте, для которой это соотношение пишется.

В отличие от закона преломления (8), для сред с несколькими диффундирующими компонентами представление (9) этого закона теряет смысл, так как связь  $c = c_s D^{1/2}$  в таких средах, вообще говоря, нарушается. Нетрудно, однако, понять, что если в многокомпонентной среде диффундирует только одна компонента, то для этой компоненты указанная связь выполняется, и поэтому преломление такой компоненты подчиняется обоим соотношениям (8),

(9). Важным примером многокомпонентных активных сред с одной диффундирующей компонентой являются биологические электровозбудимые среды [10] типа нервной ткани и миокарда. В таких средах передача возбуждения от клетки к клетке обусловлена электродиффузией активатора возбуждения – ионов щелочных металлов через внутриклеточные электролиты и межклеточные контакты. Коэффициент электродиффузии ионов линейно зависит от электрической проводимости межклеточных контактов, и поэтому в зонах резкого изменения этого параметра автоволна возбуждения, регистрируемая по изменению разности электрических потенциалов на клеточных мембранах, должна преломляться в соответствии с (8), (9).

Подчеркнем, что утверждение о выполнимости правила тангенсов при преломлении автоволн в многокомпонентных средах относится к обычному аннигиляционному режиму, в котором сталкивающиеся автоволны гаснут, не порождая отраженных волн (последние в проведенном анализе не участвовали). Вопрос о закономерностях преломления автоволн в условиях, поддерживающих отражение [14], требует отдельного рассмотрения.

В заключение отметим, что процедура вывода правила тангенсов (8) никак не зависит от вида кинетической функции  $f(u)$ , входящей в уравнения (1), (3), (5). Поэтому закон преломления концентрационных и/или температурных фронтов, выраженный этим правилом, остается справедливым и для негомогенных сред без автокатализа, в которых вещества и/или тепло подвержены диффузии и, возможно, даже взаимодействуют друг с другом, но автоволны не распространяются. (Однако представление (9) закона преломления в таких средах становится бессмысленным, так как значения  $c_1$  и  $c_2$ , входящие в (9), определяются именно кинетической функцией – через решение задачи о стационарном движении плоской автоволны.)

Во всех рассмотренных случаях правило тангенсов допускает прямую экспериментальную проверку.

Автор признателен Э. Э. Шнолю за плодотворные дискуссии и замечания.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект # 02-01-00626).

<sup>3)</sup> Указанная связь является следствием масштабных свойств уравнения (3). Численное значение  $c_s$ , равное значению скорости стационарно движущейся плоской автоволны при  $D = 1$ , определяется только видом кинетической функции  $f(u)$ , входящей в (1), (3), и системой единиц измерения физических величин.

1. В. А. Васильев, Ю. М. Романовский, В. Г. Яхно, УФН **128**, 625 (1979).
2. В. И. Кринский, А. С. Михайлов, *Автоволны*, М.: Знание, 1984.
3. В. А. Васильев, Ю. М. Романовский, В. Г. Яхно, *Автоволновые процессы*, М.: Наука, 1987.

4. А. Н. Колмогоров, И. Г. Петровский, Н. С. Пискунов, Бюлл. МГУ, сер. А, Матем. и механика **1**, 1 (1937).
5. R. A. Fischer, Ann. Eugenics **7**, 355 (1937).
6. Я. Б. Зельдович, Д. А. Франк-Каменецкий, Доклады АН СССР **19**, 693 (1938).
7. Д. А. Франк-Каменецкий, *Диффузия и теплопередача в химической кинетике*, М.: Наука, 1987.
8. S. A. Zhukov, V. V. Barelko, and A. G. Merzhanov, Intern. J. of Heat Mass Transfer **24**, 47 (1980).
9. А. Вл. Гуревич, Р. Г. Минц, УФН **142**, 61 (1984).
10. A. C. Scott, Rev. Mod. Phys. **47**, 487 (1975); *Neuroscience: A Mathematical Primer*, New York, Springer, 2002; *Nonlinear Science: Emergence and Dynamics of Coherent Structures*, 2nd Edition, Oxford: Oxford University Press, 2003.
11. O. A. Mornev, in: *Self-Organization: Autowaves and Structures far from Equilibrium* (Ed. V. I. Krinsky), Berlin: Springer, 1984, p. 111.
12. P. K. Brazhnik and J. J. Tyson, Phys. Rev. **E54**, 1958 (1996).
13. C. Matsuoka et al., Physics Letters **A243**, 47 (1998).
14. O. A. Mornev, O. V. Aslanidi, and I. M. Tsyganov, Macromol. Symp. **160**, 115 (2000).