第17卷 第1期 力 学 学 报 Vol. 17, No. 1
1985 年 1 月 ACTA MECHANICA SINICA Jan., 1985

化学反应体系中的孤波

唐文亮 张靓华
(山 西 大 学)

本文研究了化学反应扩散方程的动态行为，对于双分子过程得到了近似的孤波；对三分子过程，求得了扭结状的浓度孤波.

1. 化学反应扩散方程可以用来描述许多生物化学过程. 文献[1]曾详细讨论了单分子反应和双分子反应的定态解及其涨落，文献[2]又仔细地讨论了三分子反应模型均匀定态解及其稳定性. 本文试图讨论化学反应扩散方程的一些非定态行为. 由于它是一个非线性偏微分方程，对于它的严格求解尚未见有统一的方法可循. 虽然近年来孤波理论的进展，使得一些典型的发展方程（例如 KdV 方程、Sine-Gordon 方程和 NLS 方程等）可以通过反散射变换来求得分析解，可惜的是反应扩散方程不属于这些典型方程之列，因而不能用现有的方法来处理. 本文指出对于一维化学反应扩散方程，可以求得它的分析解，这是一种扭结状的浓度孤波，它可以是左行的或右行的，这种波经过以后会引起浓度的跃变；它也可以是驻波，但这是很不稳定的.

化学反应动力学中的基元反应是按参加反应的分子数目来分类的：即单分子反应，双分子反应和三分子反应，三分子反应一般已很少发生，四分子反应几乎是不可能发生的[3]，因此我们仅限于讨论到三分子反应的过程.

对于单分子反应

$$A \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} N,$$

其中 k_1 和 k_{-1} 分别是相应过程的反应系数，作时标的尺度变换 $\tau \equiv k_{-1}t$，并引进新的常量 $\gamma \equiv \frac{k_1 a}{k_{-1}}$ 后（a 为分子 A 的浓度），就可以得到分子 N 的浓度 n 所满足的方程：

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \phi_1(n), \quad \phi_1(n) \equiv -n + \gamma \tag{1}$$

对于双分子反应，例如

$$A + N \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} 2N,$$

$$B + N \underset{k_{-2}}{\overset{k_2}{\rightleftharpoons}} C.$$

其中 k_i, k_{-i} 是相应的反应系数，a, n, b 和 c 分别是分子 A, N, B 和 C 的浓度. 如果

本文于 1983 年 6 月 15 日收到.

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

我们设计由外部能控制使得 a、b、c 及 k_i, k_{-i} 保持不变，于是就得到分子N的浓度方程为

$$\frac{\partial n}{\partial t} = k_1 an - k_{-1}n^2 - k_2 bn + k_{-2}c$$

令

$$\tau \equiv k_{-1}t, \quad \alpha \equiv \frac{k_1 a - k_2 b}{k_{-1}}, \quad \gamma \equiv \frac{k_{-2}c}{k_{-1}}$$

最后，对于双分子反应，浓度 n 所满足的方程为

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \phi_2(n), \quad \phi_2(n) \equiv -n^2 + \alpha n + \gamma \tag{2}$$

对于三分子过程，例如

$$A + 2N \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} 3N$$

$$B + N \underset{k_{-2}}{\overset{k_2}{\rightleftharpoons}} C$$

类似地，令

$$\tau \equiv k_{-1}t, \quad \alpha \equiv a\frac{k_1}{k_{-1}}, \quad \beta \equiv \frac{bk_2}{k_{-1}}, \quad \gamma \equiv \frac{ck_{-2}}{k_{-1}}$$

又可以求得关于浓度 n 的方程为

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \phi_3(n), \quad \phi_3(n) \equiv -n^3 + \alpha n^2 - \beta n + \gamma \tag{3}$$

现在我们还计及反应过程中存在扩散，并设扩散系数为 D. 于是一般化学反应扩散方程可以归纳写为

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = D\nabla^2 n + \phi_i(n) \quad (i = 1,2,3) \tag{4}$$

的形式，若再令 $x/\sqrt{D} \to x$，仅讨论一个空间维度，则方程(4)化至如下的标准形式：

$$n_{xx} - n_t = -\phi_i(n) \quad (i = 1,2,3) \tag{5}$$

这里，我们已把 τ 写为 t，方程(5)就是我们讨论的基本方程，i 取 1,2,3 分别代表单、双和三分子的反应过程.

对于单分子过程，反应扩散方程

$$n_{xx} - n_t = n - \gamma$$

是线性的，可以用求解线性方程的典型方法去处理(从略). 以下仅讨论双分子和三分子过程.

2. 双分子过程的方程是

$$n_{xx} - n_t = n^2 - \alpha n + \gamma \tag{6}$$

对于忽略了扩散项的这个方程，在不同的 n_t 情形，文献[4]已作过详细的讨论. 现在我们讨论存在扩散的情形. 先讨论 $\gamma = 0$ 的情形. 令 $\xi \equiv x - ut$, $u = \text{const.}$, 所以

$$\ddot{n} + u\dot{n} = n(n - \alpha). \tag{7}$$

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

式中 n 上的点表示 n 对 ξ 求导数．设

$$n = TM. \tag{8}$$

并要求M满足无耗散的方程:

$$\ddot{M} = M(M - \alpha) \tag{9}$$

把(8)代入(7),并计及(9)后,近似地可以求得

$$T = 1 + u\frac{\dot{M}}{M^2} \tag{10}$$

这里还假定了 u 是小量．由于方程(9)有两个孤波解

$$M_1 = \frac{3}{2}\alpha\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\sqrt{-\alpha}}{2}(x - ut)\right), (\alpha < 0)$$

$$M_2 = -\frac{3}{2}\alpha\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - ut)\right) + \alpha, \qquad (\alpha > 0)$$

对应于方程(7)就有一个缓变幅度的孤波解

$$n_1 = \frac{3}{2}\alpha\left\{1 + \frac{u}{3\sqrt{-\alpha}}\,\mathrm{Sh}\left[\sqrt{-\alpha}(x - ut)\right]\right\}\mathrm{sech}^2\left[\frac{\sqrt{-\alpha}}{2}(x - ut)\right]$$

它仅在 $\alpha < 0$，即 $k_1 a < k_2 b$ 时才存在．对于$\alpha > 0$的情形，由于对应的 n_2 在某些突变点上会出现浓度由负无穷到正无穷的突变,似乎不能用来描写化学反应．

对于 $\gamma \neq 0$ 的情形,用类似的方法,可以求得

$$M = A\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{x - ut}{B}\right) + \delta$$

$$n = \left(1 + u\frac{\dot{M}}{M^2}\right)M$$

这里的

$$A = -\frac{3}{2}\sqrt{\alpha^2 + 4\gamma}, \quad B = 2(\alpha^2 + 4\gamma)^{-1/4}, \quad \delta = \frac{1}{2}(\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 4})$$

这时,即使是 $\alpha = 0$，仍可以存在孤波．

3. 对于三分子过程,我们能够找到严格的浓度孤波,它像一种扭结．先仍设 $\gamma = 0$ 的情形,方程是

$$n_{xx} - n_t = n^3 - \alpha n^2 + \beta n$$

我们找到了它的孤波解是

$$n = n_2\left[1 + \exp\left(\frac{n_2 x - u n_2^2 t}{\sqrt{2}}\right)\right]^{-1} \tag{11}$$

其中孤波的速度是

$$n_2 u = \frac{1}{\sqrt{2}}(n_2 - 2n_1) \tag{12}$$

式中的 n_i 由 $n_{1,2} = \dfrac{\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 4\beta}}{2}$ 式决定．在解(11)中用 n_1 代替 n_2，并在(12)式中把 n_1 和 n_2 互换．还可以得到另一个右行的浓度孤波，而解(11)是一个左行的浓度孤

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

波. 当 $8\alpha^2 = 36\beta$ 的条件满足时,则出现一个驻孤波,显然,由于这个条件很容易破坏,因而驻孤波是不稳定的.

当 $\gamma \neq 0$ 时,只要 $\phi_3(n) = 0$ 存在三个实根 n_1, n_2 和 n_3,那么用同样的方法可以找到三个孤波解:

$$n = n_3 + (n_2 - n_3)\left\{1 + \exp\left[\frac{(n_2 - n_3)x - (n_2 - n_3)^2 ut}{\sqrt{2}}\right]\right\}^{-1} \tag{13}$$

其中

$$u = \frac{n_3 + n_2 - 2n}{\sqrt{2}(n_2 - n_3)} \tag{14}$$

把(13)和(14)式中的 n_1, n_2 和 n_3 轮换,还可以得到另外两个浓度 n 的孤波. 它们之中可能是左行的,也可能是右行的,还可能是驻波;在形状上可能是正扭,也可能是反扭. 这都由 n_1, n_2 和 n_3 的大小来决定. 显然,这些波经过以后,会产生浓度的一个跃变.

参 考 文 献

[1] 霍裕平,物理学报, 31 (1982), 355.
[2] 霍裕平,张 澄,物理学报, 31 (1982), 369.
[3] Wilkinson, F., Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms, Van Nostrand Reinhold Co., New York, (1980), 34.
[4] Haken, H., Synergetics-An Introduction, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, (1977), 263—268.

SOLITARY WAVES IN CHEMIALLY REACTING SYSTEM

Tang Wenliang Zhang Jinghua
(Shanxi University, Taiyuan)

Abstract

This note is concerved with the investigation of dynamical behaviour of chemically reacting systems with diffusion. Solitary waves are obtained approximately for bimolecular process, and exact solitary waves are obtained for trimolecular process.

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net