自相似解与工业氨合成非线性反应扩散系统的整体存在性

Jamshid Khasanov[1] , Sokhibjan Muminov[2],

Sardor Jumaniyozov[3], Oybek Djabborov[4],

Khudayberganov Shuhrat[5]

乌尔根奇国立师范学院[1], 乌尔根奇 220100，乌兹别克斯坦

马蒙大学[2], 希瓦 220900，乌兹别克斯坦

乌尔根奇国立大学[3], 乌兹别克斯坦乌尔根奇 220100

卡尔希国立大学[4], 乌兹别克斯坦卡尔希 180119

乌尔根奇国立师范学院[5], 乌兹别克斯坦乌尔根奇 220100

通讯作者：Jamshid Khasanov 电子邮箱：jamshid_2425@mail.ru

摘要：本文研究了一个用于模拟氨工业合成的非线性反应–扩散方程组。通过应用李群分析，我们

[illegible]

了在现实参数取值下反应物浓度的时空演化。本研究为预测和优化催化反应器中的氨生产提供了严格的数学基础，并有望推广至其他化学反应系统。

{35K57, 35K65, 35B40, 80A32, 35C06}（反应扩散、渐近、化学应用）。

关键词： 非线性抛物型系统；反应扩散；氨生产；自相似约化；整体解；渐近展开。

1.引言

氨合成是一项至关重要的工业化学过程，全球年产量超过1.8亿吨，主要用于生产肥料和化

[illegible]

扩散动力学，对这类耦合系统进行数学建模，有助于深入理解反应器优化、产率提升和生

控状态预防

在本研究中，我们考察非线性反应–扩散系统：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = D_1 u^{m_1} \nabla \left(u^{\sigma_1} \nabla u \right) - a_1 u^{\alpha_1} v^{\beta_1}, \ t > 0, x \in R^N, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = D_2 v^{m_2} \nabla \left(v^{\sigma_2} \nabla v \right) - a_2 u^{\alpha_2} v^{\beta_2}, \ t > 0, x \in R^N, \end{cases} \tag{1}$$

具有初始条件

$$u(x,0) = u_0(x), \ \ v(x,0) = v_0(x), \ \ x \in R^N \tag{2}$$

系统 (1) 是退化的；当 , , , .因此，我们的分析聚焦于满足，

$$u^{\sigma_1} \nabla u, v^{\sigma_2} \nabla v \in C\left(R_+^N \times (0, +\infty) \right)$$

在积分恒等式意义下满足 (1)。该模型呈现非散度扩散、零浓度处的退化，以及具有同号消

反应–具有非线性扩散的方程已在从种群生态学到等离子体物理学等领域得到广泛研究。多

早期研究主要关注散度型算子 。尽管（1）中的非散度结构在各种应用场景中很自然，但

我们的贡献有三方面。首先，利用李群缩放，在相容性条件 下，我们将 (1)-(2) 化为一个

本文结构如下。第2节推导自相似约化。第3节陈述并证明整体存在性定理。第4节进行渐

2.自相似约化。

我们寻求形如以下形式的（1）–（2）的解

$$\begin{cases} u(t,x)=\bar{u}(t)\,w_1\left(\tau(t),x\right) \\ v(t,x)=\bar{v}(t)\,w_2\left(\tau(t),x\right) \end{cases} \tag{3}$$

其中

$$\bar{u}(t)=A_1(T+t)^n,\quad \bar{v}(t)=A_2(T+t)^n,$$

其中 n 以及 A_1（常数）为待定常数。 A_1, A_2

将（3）代入（1），并要求满足相容性条件

$$m_1+\sigma_1=m_2+\sigma_2 \tag{*}$$

可得约化系统

$$\begin{cases} \dfrac{\partial w_1}{\partial\tau}=D_1 w_1^{m_1}\nabla\left(w_1^{\sigma_1}\nabla w_1\right)-\dfrac{\psi_1}{\tau}\left(w_1^{\alpha_1}w_2^{\beta_1}+w_1\right),\ t>0,x\in R^N, \\ \dfrac{\partial w_2}{\partial\tau}\left(\dfrac{A_1}{A_2}\right)^{m_1+\sigma_1}=D_2 w_2^{m_2}\nabla\left(w_2^{\sigma_2}\nabla w_2\right)-\dfrac{\psi_2}{\tau}\left(w_1^{\alpha_2}w_2^{\beta_2}+w_2\right),\ t>0,x\in R^N, \end{cases} \tag{4}$$

其中新的时间变量和常数定义为 $\psi_1, \psi_2,$

$$\tau(t)=\frac{A_1^{m_1+\sigma_1}(T+t)^{n(m_1+\sigma_1)+1}}{n(m_1+\sigma_1)+1},\ \psi_1=\frac{a_1A_1^{\alpha_1-1}A_2^{\beta_1}}{n(m_1+\sigma_1)+1},\psi_2=\frac{a_2A_1^{\alpha_2+m_1+\sigma_1}A_2^{\beta_2-m_2-\sigma_2-1}}{n(m_2+\sigma_2)+1}$$

引入径向相似变量

$$\xi=\frac{|x|}{\tau^{\frac{1}{2}}} \tag{5}$$

并令 $g_{\tau=\xi=}(,)(),\ (1,\ 2)_i, w x f i$，系统 (4) 化简为常微分方程 s

$$\begin{cases} D_1 f_1^{m_1}\xi^{1-N}\dfrac{d}{d\xi}\left(\xi^{N-1}f_1^{\sigma_1}\dfrac{df_1}{d\xi}\right)+\dfrac{\xi}{2}\dfrac{df_1}{d\xi}-\psi_1\left(f_1^{\alpha_1}f_2^{\beta_1}+f_1\right)=0 \\ D_2 f_2^{m_2}\xi^{1-N}\dfrac{d}{d\xi}\left(\xi^{N-1}f_2^{\sigma_2}\dfrac{df_2}{d\xi}\right)+\dfrac{\xi}{2}\left(\dfrac{A_1}{A_2}\right)^{\sigma_1+m_1}\dfrac{df_2}{d\xi}-\psi_2\left(f_1^{\alpha_2}f_2^{\beta_2}+f_2\right)=0 \end{cases} \tag{6}$$

We 寻找满足边界条件的 (6) 的非负非平凡解 s

$$f_1(0)=M_1,\ f_2(0)=M_2,\qquad f_1(d_1)=f_2(d_2)=0,\quad 0<d_1,d_2<\infty, \tag{7}$$

其中 为给定常数，而 表示支撑集的有限半径。 M_1, M_2 d_1, d_2

3. 全局解的存在性.

3.1. 慢扩散情形( )。定义 $\gamma_i > 0$

$$\gamma = 2, \gamma_i = \frac{1}{m_i + \sigma_i}; (i = 1, 2); \tag{8}$$

并假设 $\gamma_1 \neq \gamma_2$。我们构造如下形式的显式上-解

$$\begin{cases} u_+(t,x) = (T+t)^n \bar{f}_1(\xi) \\ v_+(t,x) = (T+t)^n \bar{f}_2(\xi) \end{cases} \tag{9}$$

with

$$\bar{f}_1(\xi) = B_1(b - \xi^2)_+^{\gamma},$$
$$\bar{f}_2(\xi) = B_2(b - \xi^2)_+^{\gamma},$$

其中 是常数, 并且 ( ) max(,0) z z+ =

定理 1。（慢扩散的全局存在性）假设 并令以下代数条件成立: $\gamma_1 = \gamma_2 > 0$

$$4B_1^{m_1+\sigma_1} D_1 \gamma_1 (m_1 - 1) = 1, \tag{C1}$$

$$4B_2^{m_2+\sigma_2} \gamma_2 D_2 (m_2 - 1) = \left(\frac{A_1}{A_2}\right)^{\sigma_2 + m_2} \tag{C2}$$

$$\psi_1 \left(B_1^{\alpha_1 - 1} B_2^{\beta_1} b^{\alpha_1\gamma_1 + \beta_1\gamma_2 - \gamma_1} - 1\right) - \frac{N}{2(m_1 - 1)} \geq 0 \ , \tag{C3}$$

$$\psi_2 \left(B_1^{\alpha_2} B_2^{\beta_2 - 1} b^{\alpha_2\gamma_1 + \beta_2\gamma_2 - \gamma_2} + 1\right) - \frac{N}{2(m_2 - 1)} \left(\frac{A_1}{A_2}\right)^{m_1 + \sigma_1} \leq 0 \tag{C4}$$

如果初始数据满足

$$\begin{cases} u(t,0) \leq u_+(t,0) \\ v(t,0) \leq v_+(t,0) \end{cases}, x \in R^N$$

则问题 (1)-(2) 在 上具有整体弱解，并且 (0) N Q

$$u(t,x) \leq u_+(t,x), \quad v(t,x) \leq v_+(t,x), \qquad (t,x) \in Q. \tag{10}$$

证明。我们采用退化抛物型方程的比较原理 [Samariskiy]。取定义于 (9) 中的比较函数:

$$u_+(t,x) = (T+t)^n \bar{f}_1(\xi), \quad v_+(t,x) = (T+t)^n \bar{f}_2(\xi),$$

与 , ( ) ( ) (1,2) ξ = −ξ γi + = i 1/( ), i i im > 0, 1, 2 > 0. b 和 B

i f B b i γ = +σ B

将这些函数代入由（1）得出的微分不等式，我们得到

$$f_1^{m_1}\xi^{1-N}\frac{d}{d\xi}\left(\xi^{N-1}f_1^{\sigma_1}\frac{df_1}{d\xi}\right)-\frac{\xi}{2}\frac{df_1}{d\xi}-\psi_1\left(f_1^{\alpha_1}f_2^{\beta_1}+f_1\right)\geq 0 \tag{11.1}$$

$$f_2^{m_2}\xi^{1-N}\frac{d}{d\xi}\left(\xi^{N-1}f_2^{\sigma_2}\frac{df_2}{d\xi}\right)+\frac{\xi}{2}\left(\frac{A_1}{A_2}\right)^{\sigma_1+m_1}\frac{df_2}{d\xi}-\psi_2\left(f_1^{\alpha_2}f_2^{\beta_2}+f_2\right)\geq 0 \tag{11.2}$$

其中是在第 2 节中引入的常数。

代入显式形式并进行求导后，第一个(11)中的不等式变为

在条件(C1)下，不等式(11.1) 在满足以下条件时成立

$$\psi_1\left(B_1^{\alpha_1-1}B_2^{\beta_1}b^{\alpha_1\gamma_1+\beta_1\gamma_2-\gamma_1}-1\right)-\frac{N}{2(m_1-1)}\geq 0,$$

这恰好就是条件 (C3)。类似地，利用条件 (C2),

$$4B_2^{m_2+\sigma_2}\gamma_2 D_2(m_2-1)=\left(\frac{A_1}{A_2}\right)^{\sigma_2+m_2}$$

不等式 (11.2) 成立的条件是

$$\psi_2\left(B_1^{\alpha_2}B_2^{\beta_2-1}b^{\alpha_2\gamma_1+\beta_2\gamma_2-\gamma_2}+1\right)-\frac{N}{2(m_2-1)}\left(\frac{A_1}{A_2}\right)^{m_1+\sigma_1}\leq 0,$$

这与条件 (C4) 一致。

因此，是系统 (1) 的一对上解。根据假设

并且 ，比较原理给出

$$u(t,x)\leq u_+(t,x),\qquad v(t,x)\leq v_+(t,x)\quad \text{for all } (t,x)\in Q.$$

由于 和 对所有 均保持有界，估计式 (10) 排除了

有限时间爆破；因此，方程 (1)-(2) 存在整体弱解。至此完成

3.2.快速扩散情形： $\gamma_i < 0$

对于快扩散区域，我们考虑以下形式的下解

$$\begin{cases} u_-(t,x) = (T+t)^n \, \overline{f}_1(\xi) \\ v_-(t,x) = (T+t)^n \, \overline{f}_2(\xi) \end{cases} \tag{13}$$

with

$$\begin{cases} \overline{f}_1(\xi) = B_1 \left(b + \xi^2\right)^{\gamma_1}, \\ \overline{f}_2(\xi) = B_2 \left(b + \xi^2\right)^{\gamma_2}, \quad b > 0, \end{cases}$$

定理 2。(快扩散的整体存在性) 假设 并令 $\gamma_1 \, \gamma_2 < 0,$

以下条件成立：

$$4B_1^{m_1+\sigma_1} D_1 \gamma \, (m_1 - 1) = 1, \tag{C5}$$

$$4B_2^{m_2+\sigma_2} \gamma \, D_2 (m_2 - 1) = \left(\frac{A_1}{A_2} \right)^{\sigma_2 + m_2} \tag{C6}$$

$$\psi_1 \left(B_1^{\alpha_1 - 1} B_2^{\beta_1} b^{\alpha_1 \gamma_1 + \beta_1 \gamma_2 - \gamma_1} - 1 \right) + \frac{N}{2(m_1 - 1)} \leq 0 \tag{C7}$$

$$\psi_2 \left(B_1^{\alpha_2} B_2^{\beta_2 - 1} b^{\alpha_2 \gamma_1 + \beta_2 \gamma_2 - \gamma_2} + 1 \right) + \frac{N}{2(m_2 - 1)} \left(\frac{A_1}{A_2} \right)^{m_1 + \sigma_1} \geq 0. \tag{C8}$$

若初始数据满足

则问题 (1)-(2) 存在整体弱解，并且

$$\begin{cases} u(t,x) \geq u_-(t,x), \\ v(t,x) \geq v_-(t,x), \qquad (t,x) \in Q. \end{cases} \tag{14}$$

证明。 证明过程与定理 1. 完全相同，但使用比较函数 (13) 和相反的不等式。将 代入类似于 (11) 的微分不等式，并利用条件 (C5)-(C8)，可知 是 (1) 的下解。随后由比较原理得到下界 (14)，这保证了整体存在，因为 和 对所有 均为正，因此排除了有限时灭绝。

$\overline{f}_1(\xi) = B_1 \left(b + \xi^2\right)^{\gamma_1}$ u_- v_- ξ

4. 关于自治方程组解的渐近行为。

4.1. 慢扩散情形（。）：紧支撑解

在介绍自治方程组的解的渐近行为定理及其推论之前，我们先引入以下记号:

$$a_{1i}(\eta)=-\gamma_{i+2}+\frac{Ne^{-\eta}}{2\left(b-e^{-\eta}\right)},\qquad a_{21}(\eta)=\frac{1}{4D_1},a_{22}(\eta)=\frac{1}{4D_2}\left(\frac{A_1}{A_2}\right)^{m_1+\sigma_1}$$
$$a_{3i}(\eta)=\frac{\psi_i e^{(\alpha_i\gamma_1-\gamma_2\beta_i-\gamma_i+1)\eta}}{4D_i\left(b-e^{-\eta}\right)},\ a_{4i}(\eta)=\frac{\psi_i e^{-\eta}}{4D_i\left(a-e^{-\eta}\right)}. \tag{15}$$

Here $\gamma_{i+2}-\gamma_2\beta_i+\gamma_i-1$ $(i=1,2)$,

假设系统（1）的系数满足以下等式:

$$m_1+\sigma_1=m_2+\sigma_2$$

基于此，我们现在给出以下定理及其推论。

定理3。假设 。那么，对于问题（6）和（7）的紧支撑解，渐近关系 $\gamma_i>0$

$$f_i(\xi)=c_i\left(b-\xi^2\right)^{\gamma_i}\left(1+o(1)\right)(i=1,2) \tag{13}$$

成立，当且仅当 当且仅当满足以下条件:

$$\alpha_i\gamma_1-\gamma_2\beta_i-\gamma_i+1>0 \text{ and } c_1=\left(\frac{1}{4D_1\gamma_3}\right)^{\gamma_1},\ c_2=\frac{A_1}{A_2}\left(\frac{1}{4D_2\gamma_4}\right)^{\gamma_2}$$

其中 是由以下定义的常数 对于 γ_4,γ_3 $\gamma_{i+2}-\gamma_2\beta_i+\gamma_i-1$ $(i=1,2)$,

证明。为研究方程 (6)-(7) 的解的渐近行为，我们寻求具有如下形式的自相似系统 (6) 的解

$$f_i(\xi)=\bar{f}_i(\xi)\cdot y_i(\eta),\ \eta=-\ln\left(b-\xi^2\right),\ (i=1,2) \tag{14}$$

其中，和 $\bar{f}_i(\xi)$ $\left(b-\xi^2\right)^{\gamma_i}$ 是已知函数。 $(i=1,2)$,

将（14）代入系统（6），得到以下关于:

$$\frac{dL_i y}{d\eta}+a_{i1}(\eta)\cdot L_i y+y_i^{-m_i}(\eta)\cdot\left(\frac{dy_i(\eta)}{d\eta}+\gamma_i\cdot y_i(\eta)\right)\cdot a_{i2}(\eta)-y_i^{\alpha_i-m_i}(\eta)\cdot a_{i3}(\eta)+$$
$$+y_i^{1-m_i}(\eta)\cdot a_{i4}(\eta)=0 \tag{15}$$

where $L_i(y)=y_i^{\sigma_i}\left(\frac{dy_i}{d\eta}-\gamma_i y_i\right), i=1,2$

假设，且 $\xi\in\xi_0$ 那么满足 $0<\xi_0<\xi_1$ $\sqrt{\ }$ $\eta\ \xi$

$$\xi\in(\xi_0,\xi_1] \text{ for } \eta'(\xi)>0, \eta_0=\eta_0(\xi), \lim_{\xi\to\xi_0}\eta(\xi)=+\infty$$

引入以下记号

$$v_i(\eta)=L_i(y)=y_i^{\sigma_i}\left(\frac{dy_i}{d\eta}-\gamma_i y_i\right) \tag{16}$$

于是，系统（15）可改写为

$$v_1'(\eta)=-a_{11}(\eta)\cdot v_1(\eta)-y_1^{-m_1}(\eta)\cdot\left(\frac{dy_1(\eta)}{d\eta}-\gamma_1\cdot y_1(\eta)\right)\cdot a_{12}(\eta)-y_1^{\alpha_1-m_1}y_2^{\beta_1}(\eta)\cdot a_{13}(\eta)+$$
$$+y_1^{1-m_1}(\eta)\cdot a_{14}(\eta)=0.$$

$$v_2'(\eta)=-a_{21}(\eta)\cdot v_2(\eta)-y_2^{-m_2}(\eta)\cdot\left(\frac{dy_2(\eta)}{d\eta}-\gamma_2\cdot y_2(\eta)\right)\cdot a_{22}(\eta)-y_1^{\alpha_2}(\eta)\cdot y_2^{\beta_2-m_2}(\eta)\cdot a_{23}(\eta)+$$
$$+y_2^{1-m_2}(\eta)\cdot a_{24}(\eta)=0.$$

现在考虑函数。

$$\begin{aligned}
&g_1(\lambda_1,\eta)\equiv -a_{11}(\eta)\cdot\lambda_1-y_1^{-m_1}(\eta)\cdot\left(\frac{dy_1(\eta)}{d\eta}-\gamma_1\cdot y_1(\eta)\right)\cdot a_{12}(\eta)-\\
&-y_1^{\alpha_1-m_1}(\eta)\cdot y_2^{\beta_1}(\eta)\cdot a_{13}(\eta)+y_1^{1-m_1}(\eta)\cdot a_{14}(\eta)=0\\
&g_2(\lambda_2,\eta)\equiv -a_{21}(\eta)\cdot\lambda_2-y_2^{-m_2}(\eta)\cdot\left(\frac{dy_2(\eta)}{d\eta}-\gamma_2\cdot y_2(\eta)\right)\cdot a_{22}(\eta)-\\
&+y_1^{\alpha_2}(\eta)\cdot y_2^{\beta_2-m_2}(\eta)\cdot a_{23}(\eta)+y_2^{1-m_2}(\eta)\cdot a_{24}(\eta)=0
\end{aligned} \tag{18}$$

其中 $\lambda_i\in\ ,1,2.\ i\ R\ i\lambda\ =$

给定 以及极限行为 $\gamma_i>0$

$$\lim_{\eta\to\infty}a_{i1}(\eta)=-\gamma_{2+i}, \lim_{\eta\to\infty}a_{12}(\eta)=\frac{1}{4\cdot D_1}, \lim_{\eta\to\infty}a_{22}(\eta)=\frac{1}{4\cdot D_2}\left(\frac{A_1}{A_2}\right)^{\sigma_1+m_1}$$
$$\lim_{\eta\to\infty}a_{i3}(\eta)=0,\quad \alpha_i\gamma_1+\gamma_2\beta_i+\gamma_i-1>0,\ \lim_{\eta\to\infty}a_{i4}(\eta)=0\ (i=1,2)$$

对于每个固定的 $(\ )_i$ 都存在区间 在这些区间上 保持恒定符号 $[\eta_i,+\infty)\subset[\eta_0,+\infty)$ $)_i$ $(\ )$ $i=1\ 2,$

$$g_i(\lambda_i,\eta)>0 \text{ or } g_i(\lambda_i,\eta)<0, (i=1,2) \tag{19}$$

假设当 时不存在有限极限。如果(19)中的某个不等式成立，则

的振荡性意味着其图像会与这些直线相交无穷多次，且交点位于。然而，这是不可能的，因为在这些区间内，只有一个不等式(19)成立，因此根据(18)，其图像与至多相交一次。因此，当时，无穷极限。

根据表示式，的存在意味着也存在，且可取为零。因此，当时，(17)中右端的极限存在且等于零。求解所得的代数方程组可得各极限对应的常数，如定理所述。

因此，在给定条件下，渐近形式(13)既是必要的，也是充分的。证明至此完成。

4.2. 快扩散情形（）：在无穷远处衰减的解

假设系统(6)满足以下边界条件：

$$f_i'(0)=0,\ f_i(\infty)=0 \tag{20}$$

其中，我们考虑如下形式的解

$$f_i(\xi)=c_i\left(b+\xi^{\gamma}\right)_+^{\gamma_i}$$

其中系数定义如(9)所示。

定理 4. 假设。那么，对于在无穷远处衰减的(6)、(20)的解，以下渐近行为在时成立：

$$f_i(\xi)=c_i\left(b+\xi^{\gamma}\right)^{\gamma_i}\left(1+o(1)\right),\ i=1,2, \tag{21}$$

其中常数由下式给出

$$c_1=\left(-\frac{1}{4D_1\gamma_3}\right)^{\gamma_1},\ c_2=\frac{A_1}{A_2}\left(-\frac{1}{4D_2\gamma_4}\right)^{\gamma_2}$$

与和

证明。 证明过程与定理 2 使用相同的方法，但这里我们寻求具有以下形式的在无穷远处衰

$$f_i(\xi)=\overline{f_i}(\xi)\cdot y_i(\eta),\eta=\ln\left(b+\xi^2\right),\overline{f_i}(\xi)=\left(b+\xi^2\right)^{\gamma_i},i=1,2$$

将 (22) 代入系统 (6)，得到关于 的常微分方程组。条件 确保 当 时。分析 时的极

于有 所得代数 组，即

此，渐 $\xi\to\infty$

推论 1（慢扩散）。

若 γ_i 则 (1)-(2) 的广义解满足

$$\begin{cases} u_A(x,t)\approx c_1(T+t)^n\left(b-\left(|x|\tau^{-\frac{1}{2}}\right)^2\right)^{\gamma_1}(1+o(1)) \\ v_A(x,t)\approx c_2(T+t)^n\left(b-\left(|x|\tau^{-\frac{1}{2}}\right)^2\right)^{\gamma_2}(1+o(1)) \end{cases}$$

当 $|x|\to\sqrt{\tau}$ 时，其中常数 的显式表达式为

$$c_1=\left(\frac{1}{4D_1\gamma_3}\right)^{\gamma_1},c_2=\frac{A_1}{A_2}\left(\frac{1}{4D_2\gamma_4}\right)^{\gamma_2}$$

其中 $\gamma_3=\gamma_1\sigma_1+\gamma_1-1$ $\gamma_4=\gamma_2\sigma_2+\gamma_2-1$

推论 2（快速扩散）。

若 γ_i 则方程 (1)-(2) 的广义解满足

$$u_A(x,t)\approx c_1(T+t)^n\left(b+\xi^2\right)^{\gamma_1}(1+o(1))$$
$$v_A(x,t)\approx c_2(T+t)^n\left(b+\xi^2\right)^{\gamma_2}(1+o(1))$$

当 $\xi\to\infty$ 时，其中常数由下式明确给出

$$c_1=\left(-\frac{1}{4D_1\gamma_3}\right)^{\gamma_1},c_2=\frac{A_1}{A_2}\left(-\frac{1}{4D_2\gamma_4}\right)^{\gamma_2}$$

与 和 $\gamma_3=\gamma_1\sigma_1+\gamma_1-1$ $\gamma_4=\gamma_2\sigma_2+\gamma_2-1$

5. 数值模拟

为阐明理论结果并展示该模型的实际相关性，我们采用对应于工业氨合成条件的真实参数值，对系统（1）–（2）进行了数值模拟。计算在一个矩形区域上进行，采用狄利克雷边界条件（边界处为零浓度），并使用交替方向隐式（ADI）格式结合托马斯算法求解所得的三对角线性方程组。空间网格由 个点组成，时间积分最长覆盖 10 秒，共分为 101 个时间步。 201×201

参数选取如下：有效扩散系数 m2/s（氢）和 m2/s （氮）（多孔铁催化剂中的典型值），非线性指数 ，，以及反应速率常数 s^{-1}， s^{-1}，其反应级数为，，，。初始浓度按比例缩放至约（氢）和（氮），对应于在250巴和450°C下化学计量比为3:1的混合物。

$\alpha_1 = 1\,5_{\circ}$ $\beta_1 = 0\,5_{\circ}$ $\alpha_2 = 0\,5_{\circ}$ $\beta_2 = 1\,5_{\circ}$

31 3摩尔/米 H_2 10 3mol/m N_2

图1展示了选定时刻沿直线 y=0y = 0y=0 的浓度分布演化。浓度分布在中心附近保持近似抛物线形状，并因扩散而逐渐变平、范围扩大；与此同时，由于反应消耗，峰值不断降低。值得注意的是，氮的消耗速度快于氢，这与氮是合成过程中的限量反应物相一致。

图2描绘了总质量和转化率百分比随时间的演化。在10秒内，氢约有20%、氮约有30%被消耗；考虑到模拟采用批次过程，而实际反应器采用连续流，这一结果对应的单程转化率与工业观测值相当。

最后，图 3 展示了反应速率（总质量对时间的负导数）。两种速率起初都很高，随后单调下降；随着反应物耗尽，它们逐渐趋近于零。这种行为是受反应物可用量限制的系统的典型特征，也与氨合成中的捷姆金–佩日夫动力学相符。

这些模拟验证了解的整体存在性、自相似约化的有效性，以及扩散前沿附近的幂律渐近结构。此外，采用具有工业应用意义的参数时，该模型能够再现催化床中观测到的转化率和时空动力学，凸显了其在反应器设计与优化方面的价值。

图注

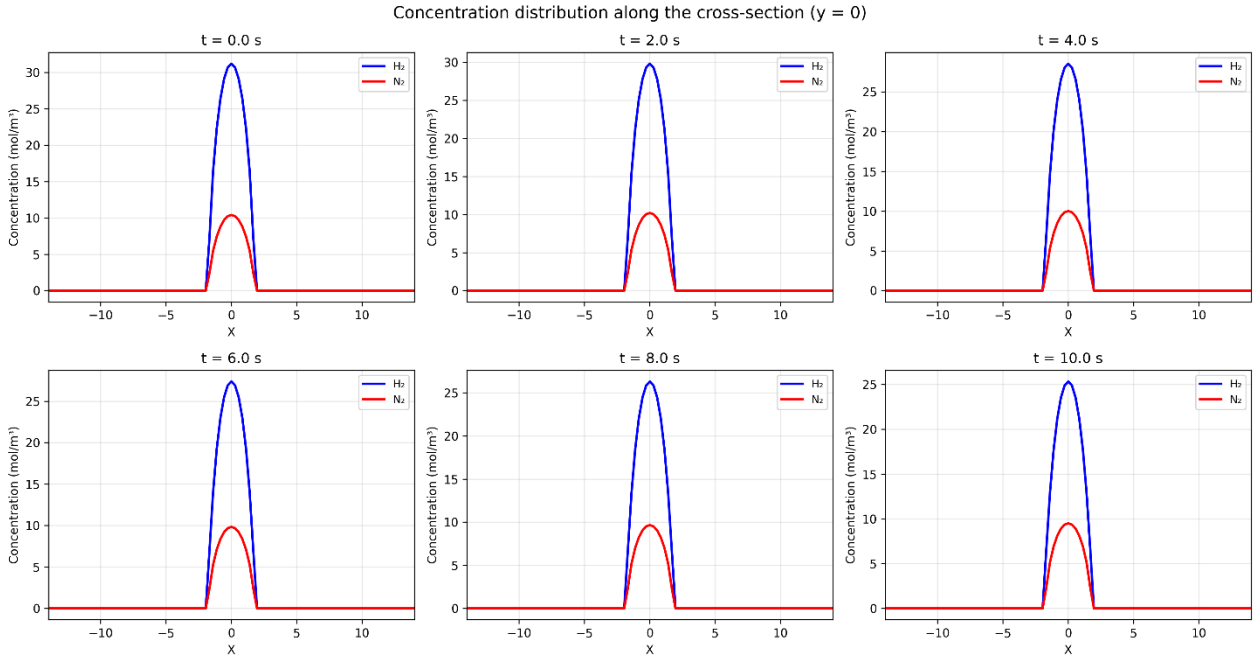

图1. 不同时刻浓度分布的横截面（y=0）。

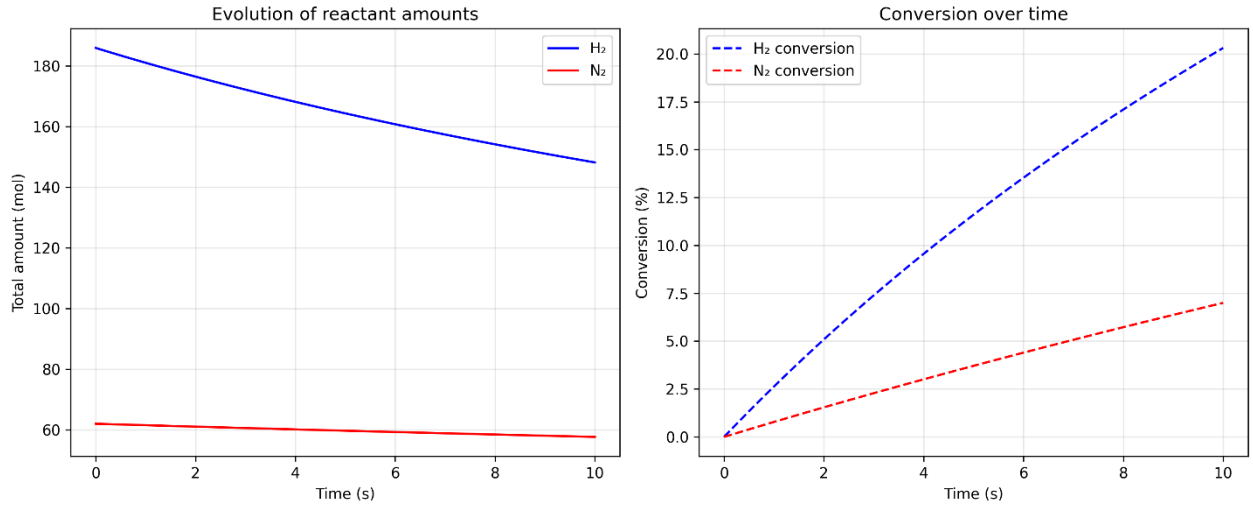

图2. 总质量（左）和转化率百分比（右）的演化。

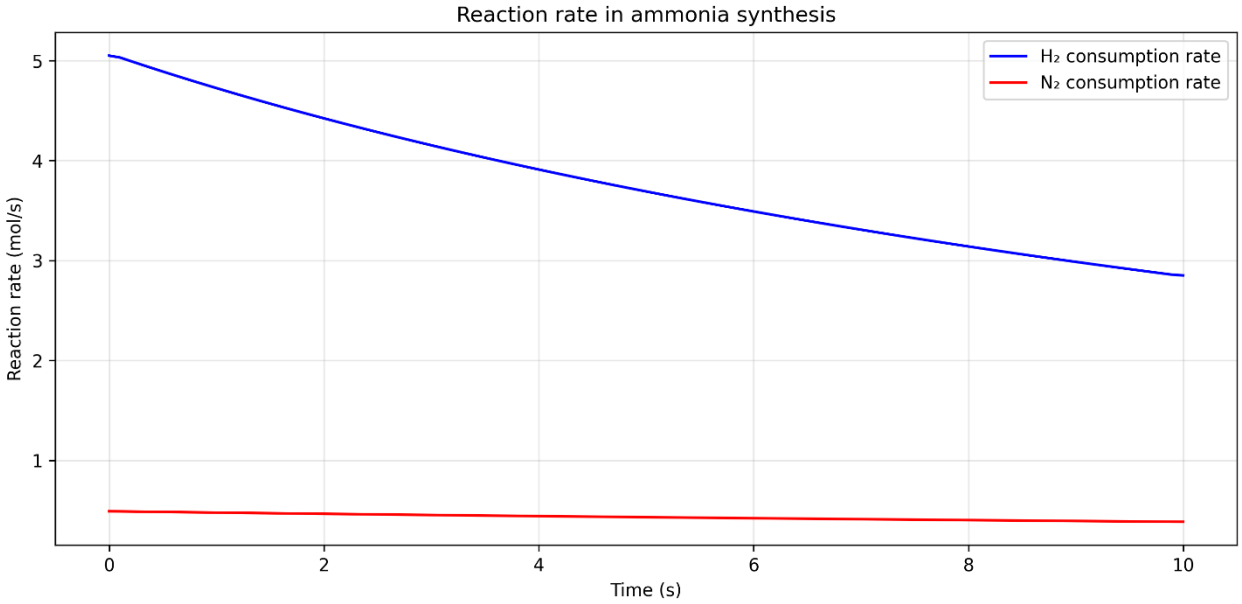

图 3. 氢和氮消耗反应速率的时间依赖性 .

6. 结论

在本研究中，我们为通过哈伯-博施法进行氨工业合成所建模的非线性反应-扩散系统建立了严格的数学框架。通过采用李群分析，我们推导出了自相似解，将原始偏微分方程约化为常微分方程系统，从而深入揭示了该系统的长时间行为。

通过运用比较原理并精心构造下解和上解，我们确定了模型参数的充分代数条件，确保慢扩散（）和快扩散

$$\gamma_i > 0$$

γ_i)<情形下弱解在全时间范围内的存在性。这些条件可避免有限时间内发生爆破或灭绝，并确保对于适当的初始数据，解有界且非负。

对扩散前沿附近的详细渐近分析揭示了浓度分布的幂律衰减，其显式指数由非线性参数决定。采用根据现实工业条件（高压、高温和多孔催化剂扩散率）校准的参数进行数值模拟，证实了理论预测。计算得到的反应物浓度时空演化、达到与工业单程性能相当水平的转化率，以及观测到的反应速率衰减，均与实验观察结果和捷姆金–皮热夫等成熟动力学模型吻合良好。

结果表明，所提出的模型不仅捕捉了退化抛物型系统的基本数学特征，也可作为预测反应物耗竭和优化催化反应器性能的实用工具。未来可进一步纳入可逆反应动力学、温度依赖性和三维流动效应，从而增强其在现代氨生产设施中的适用性。

总体而言，这项研究为理解和改进最重要的工业化学过程之一奠定了坚实基础，有助于提升全球肥料和原料生产的效率与可持续性。

参考文献

[1] A. A. Samarskii、V. A. Galaktionov、S. P. Kurdyumov 和 A. P. Mikhailov，《爆破解》《拟线性抛物方程》，Walter de Gruyter，柏林，1995年。

[2] V. A. Galaktionov 和 J. L. Vázquez，《演化偏微分方程的稳定性技巧：一种动力系统方法》，Birkhäuser，波士顿，2004年。

[3] J. L. Vázquez，《多孔介质方程：数学理论》，牛津大学出版社，牛津，2007年。

[4] M. Aripov，《求解非线性抛物问题的标准方法》，Fan，塔什干，1988年（俄文）。

[5] G. Fragnelli 和 D. Mugnai，通过 Carleman估计研究具有非散度形式漂移项的退化抛物算子的零可控性，《微分方程杂志》254卷（2013年）2683–2710。

[6] I. Boutaayamou、G. Fragnelli 和 D. Mugnai，关于退化抛物型方程内部退化且满足 Neumann边界条件的 Carleman估计，《数学分析杂志》135卷（2018年）1–35。

[7] Ln, Zen，《应用数学与物理》73 (2022) 145。

[8] L. Dong 和 Q. Zhang，变系数和退化扩散条件下扩散型捕食者-猎物模型的全局动力学，《应用数学与计算》458 (2024) 128201。

[9] M. Temkin 和 V. Pyzhev，助剂化铁催化剂上的氨合成动力学，《苏联物理化学学报》12 (1940) 327–356。

[10] A. Nielsen，《用于氨合成的助剂化铁催化剂研究》，第 3 编者，Jul. Gjellerup，哥本哈根，1968 年。

[11] O. Elishav、B. M. Lis、E. M. Miller 和 D. J. Arent，《氮基燃料的进展与展望》—替代燃料，《化学评论》120（2020 年）5352–5436。

[12] J. O. Khasanov，《数学建模》，《计算与应用数学问题》6（2022 年）39–47。

[13] M. Aripov、A. S. Matyakubov 和 J. O. Khasanov，《整体可解性与显式数学研究所通报 5 (2022) 22–31。

[14] M. Aripov、A. S. Matyakubov 和 J. O. Khasanov，关于自相似解：含源项且非散度形式的交叉扩散抛物型方程组，AIP会议论文集 2781 (2023年) 020005。

[15] M. Aripov 和 Sh. A. Sadullaeva，《应用数学与计算》6(2)（2013年）157–167。

[16] M. Aripov 和 S. Matyakubov，具有交叉扩散的非线性抛物型系统的爆破解，《物理学某些性质非散度形式且具有交叉扩散的非线性抛物型系统的爆破解》（2021年）。

[17] M. Aripov 和 M. Bobokandov，双重非线性
非散度形式的抛物型方程的密度渐近行为，2023年。

[18] A. S. Matyakubov、M. Aripov 和 J. O. Khasanov，非线性
非散度形式的退化抛物型系统的柯西问题，《东北联邦大学数学札记》（2020—2023年）。

[19] J. O. Khasanov、M. Aripov 和 A. S. Matyakubov，关于自...
非散度形式且带有源项的交叉扩散抛物型方程组的相似解，AIP会议论文集（2023年）。

[20] 美国地质调查局，《2024年矿产商品概要》：氮（氨），美国。
地质调查局，美国弗吉尼亚州雷斯顿，2024年。在线获取：
https://pubs.usgs.gov/periodicals/mcs2024/mcs2024-nitrogen.pdf