第 31 卷 第 1 期 物 理 学 报 Vol. 31, No. 1
1982 年 1 月 ACTA PHYSICA SINICA Jan., 1982

反应扩散系统中的涨落问题

陈 式 刚
(中国科学院物理研究所)

1981 年 1 月 10 日收到

提 要

本文用 Master 方程导出的带有扩散涨落项的福克--普朗克方程讨论了三个化学模型在不同情况下的涨落问题. 文章指出: 平衡态附近的无空间关联的涨落, 偏离平衡时涨落的关联性, Schlögl 三分子模型具有非经典的临界指数, 而 Schlögl 双分子模型具有经典的临界指数等多样的情况是由系统的本身性质决定的. 用本文的方法能统一地处理这些问题, 并且因而澄清了文献[6]中提出的关于临界指数的疑点.

非平衡相变与平衡相变有许多类似之处, 但也有根本的不同之点. 非平衡定态是靠外部的控制条件来实现的, 因此它的相变只能发生于有限的系统中, 系统的大小与边界上控制量的作用距离有关. 尽管如此, 作为极限情况, 讨论无穷大系统的非平衡相变仍是很有意义的. 这方面的工作表明: 无穷系统中的激光、Bénard 流[1,2]和三分子模型中的软模不稳定性[1,3]等相变都类似于一维系统的相变, 它们没有明显的相变点, 在"临界点"处关联长度不趋向无穷大[4]. 而在化学系统方面的工作表明: 一些无穷大的化学系统的非平衡相变完全类似于平衡态的相变, 在三维空间有明显的转变点, 存在着标度性质, 可以利用重正化群的技术[5,6]. 但是在这些工作中存在一个临界指数是否是经典的这样的问题. 文献[6]提出了涨落力的形式的问题, 指出通常朗之万方程或福克-普朗克方程中的涨落力可能是不对的[7,8], 而正确的涨落力与场论方法所依据的分布函数不自洽.

研究非平衡相变中的涨落问题有两种不同的方法: 一种是用朗之万方程和福克-普朗克方程来讨论[1]; 另一种是用 Master 方程的办法, 这种方法主要用于化学系统[9]. 第一种方法较为简洁, 易于求解, 并且很容易推广到三维空间中去, 但要用平衡态附近的涨落耗散定理求出涨落力, 这个工作较为繁复并且可能导致不正确的结果. 第二种方法较为烦琐, 难于求解, 但是是自我完备的, 在理论上没有什么疑点. 因此最好的办法是把这两者结合起来, 由 Master 方程导出福克-普朗克方程[10,11]和朗之万方程, 给出正确的涨落力. 而我们知道, 当化学系统中粒子数密度 $n \gg 1$ 时, 把 Master 方程近似为福克-普朗克方程总是允许的. 在本文中, 我们就是要用这种办法讨论化学系统(反应扩散系统)中的统计涨落问题, 它使结果变得非常简单明了. 在讨论临界点处的涨落之前, 我们先讨论平衡态附近及相变点以前的线性涨落, 这会使我们对涨落有个全面的图像. 为了简单起见, 只讨论三个模型:

(I) 单分子模型

$$A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} X;$$

(II) Schlögl 三分子模型

$$A + 2X \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} 3X \qquad B \underset{k_4}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} X$$

(III) Schlögl 双分子模型

$$A + X \underset{k_1}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} 2X \qquad B + X \xrightarrow{k_2} C.$$

模型 (I) 可描述平衡态附近的性质；模型 (II) 相当于场论中的 ϕ^4 场，具有非经典的临界指数；模型 (III) 相当于 ϕ^3 场，但它的涨落很小，具有经典的临界指数. 它们分别地代表了不同的情况. 把这些讨论一般化，例如讨论任意反应扩散系统的平衡涨落及具有定态之间转变的反应扩散系统的临界涨落，是没有什么困难的，它只增加了讨论的烦琐性.

考虑一个具有反应 (I) 的一维系统. 把空间分成小格子，格子的位置以指标 i 表示，i 格子中 x 的粒子数为 x_i. 则分布函数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots; t)$ (i 从哪里数起是无所谓的，我们就从 1 开始) 满足 Master 方程

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial f(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots; t)}{\partial t} \\
&= \sum_i k_1 A[f(x_1, x_2, \cdots, x_i - 1, \cdots; t) - f(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots; t)] \\
&\quad + \sum_i k_2[(x_i + 1)f(x_1, x_2, \cdots, x_i + 1, \cdots; t) \\
&\quad - x_i f(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots; t)] \\
&\quad + \sum_i d\{(x_i + 1)[f(x_1, x_2, \cdots, x_{i-1} - 1, x_i + 1, \cdots; t) \\
&\quad + f(x_1, x_2, \cdots, x_i + 1, x_{i+1} - 1, \cdots; t)] \\
&\quad - 2x_i f(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots; t)\},
\end{aligned} \tag{1}$$

其中 d 为两相邻格子间粒子由扩散引起的交换率. 当 $x_i \gg 1$ 时(1)式可作如下的展开：

$$\text{第一方括号} = -\frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}, \tag{2}$$

$$\text{第二方括号} = \frac{\partial x_i f}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_i^2}, \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
\text{花括号} = 2&\frac{\partial x_i f}{\partial x_i} + \frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_i^2} - \frac{\partial x_i f}{\partial x_{i-1}} - \frac{\partial x_i f}{\partial x_{i+1}} \\
&+ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_{i-1}^2} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_{i+1}^2} - \frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_i \partial x_{i-1}} - \frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_i \partial x_{i+1}}.
\end{aligned} \tag{4}$$

在 i 求和号下可把花括号中项的 i 指标作如下的位移：

$$2\frac{\partial x_i f}{\partial x_i} - \frac{\partial x_i f}{\partial x_{i-1}} - \frac{\partial x_i f}{\partial x_{i+1}} \Rightarrow -\frac{\partial}{\partial x_i}(x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i)f, \tag{5}$$

$$\frac{1}{2}\frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_{i-1}^2} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_{i+1}^2} - \frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_i^2} \Rightarrow \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}(x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i)f, \tag{6}$$

$$-\frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_i \partial x_{i-1}}-\frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_i \partial x_{i+1}}+2\frac{\partial^2 x_i f}{\partial x_i^2}\Rightarrow$$

$$-\left(\frac{\partial}{\partial x_{i+1}}+\frac{\partial}{\partial x_{i-1}}-2\frac{\partial}{\partial x_{ii}}\right)\frac{\partial x_i f}{\partial x_i}. \tag{7}$$

把(5),(6),(7)式代入(4)式，再把(2),(3),(4)式代入(1)式，然后让空间格子长度趋向零，把空间坐标记为 $\boldsymbol{x}$，粒子数密度记为 $n(\boldsymbol{x})$，就得到泛函形式的福克-普朗克方程

$$\frac{\partial f}{\partial t}=-\int d\boldsymbol{x}\frac{\delta}{\delta n(\boldsymbol{x})}[k_1 n_A-k_2 n(\boldsymbol{x})+D\nabla^2 n(\boldsymbol{x})]f$$

$$+\int d\boldsymbol{x}\int d\boldsymbol{x}'\frac{\delta^2}{\delta n(\boldsymbol{x})\delta n(\boldsymbol{x}')}[\frac{1}{2}(k_1 n_A+k_2 n(\boldsymbol{x}))\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

$$+D\nabla n(\boldsymbol{x})\cdot\nabla'\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]f, \tag{8}$$

式中 D 就是通常的扩散系数，假设它与 n 无关，∇ 为梯度算符，$\nabla n(\boldsymbol{x})\cdot\nabla'\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$ 表示∇和∇作为矢量进行点乘，并且∇既作用在 $n(\boldsymbol{x})$ 上也作用在 $\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$ 上. (8) 式是在一维情况下导出的，现在它同样适用于三维情况. 与(8)式相应的朗之万方程为

$$\frac{\partial n}{\partial t}=k_1 n_A-k_2 n(\boldsymbol{x})+D\nabla^2 n(\boldsymbol{x})+F(\boldsymbol{x},t). \tag{9}$$

涨落力 $F(\boldsymbol{x},t)$ 的关联函数由(8)式中第二方括号(乘以2)给出，但是其中 $n(\boldsymbol{x})$ 要取平均值，即取平衡解 $n^e=k_1 n_A/k_2$，

$$\langle F(\boldsymbol{x},t)F(\boldsymbol{x}',t')\rangle=2n^e[k_2\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')+D\nabla\cdot\nabla'\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]\delta(t-t'). \tag{10}$$

对(9)式运用涨落耗散定理可以得到与(10)式相同的结果. 现设

$$n(\boldsymbol{x})=n^e+n_1(\boldsymbol{x}), \tag{11}$$

涨落部分 $n_1(\boldsymbol{x})$ 的分布函数满足方程

$$\frac{\partial f}{\partial t}=-\int d\boldsymbol{x}\frac{\delta}{\delta n_1(\boldsymbol{x})}[-k_2 n_1(\boldsymbol{x})+D\nabla^2 n_1(\boldsymbol{x})]f$$

$$+\int d\boldsymbol{x}\int d\boldsymbol{x}'\frac{\delta^2}{\delta n_1(\boldsymbol{x})\delta n_1(\boldsymbol{x}')}n^e[k_2\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

$$+D\nabla\cdot\nabla'\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]f, \tag{12}$$

它具有定态解

$$f=N\exp\left\{-\int d\boldsymbol{x}\frac{n_1^2(\boldsymbol{x})}{2n^e}\right\}, \tag{13}$$

N 为归一化常数. 这就是平衡态的解，为一高斯分布，它是泊松分布的极限情况，当我们从 Master 方程过渡到福克-普朗克方程时，泊松分布变为高斯分布. 平衡态的涨落不存在空间关联.

下面导出模型 (II) 的福克-普朗克方程. 相对于模型 (I)，现在多了一个反应

$$A+2X\underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}}3X. \tag{14}$$

我们只要在(8)式中加入(14)式的贡献就行了，(14)式的贡献是

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{(14)}=k_2 A(x-1)(x-2)f(x-1)-k_2 Ax(x-1)f(x)$$

$$+ k_1(x+1)x(x-1)f(x+1) - k_1x(x-1)(x-2)f(x) \qquad (15)$$

如同(2),(3)式那样展开，忽略 $(x+1),(x-1)$ 中的 1，把空间坐标连续化，再把(15)式的贡献加到(8)式中并适当地改变(8)式的单分子反应的标号之后，得

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t} = -\int dx \frac{\delta}{\delta n(x)}[&- k_1n^3(x) + k_2n_An^2(x) - k_3n(x) + k_4n_B \\ &+ D\nabla^2 n(x)]f + \int dx \int dx' \frac{\delta^2}{\delta n(x)\delta n(x')}\Big[\frac{1}{2}(k_1n^3(x) \\ &+ k_2n_An^2(x) + k_3n(x) + k_4n_B)\delta(x-x') \\ &+ D\nabla n(x)\cdot\nabla'\delta(x-x')\Big]f \end{aligned} \qquad (16)$$

相应的朗之万方程为

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -k_1n^3 + k_2n_An^2 - k_3n + k_4n_B + D\nabla^2 n + F. \qquad (17)$$

涨落力 F 的关联函数由(16)式第二项方括号中给出．由(8)与(16)式的推导过程，很容易就总结出写出福克-普朗克方程的一般方法：把反应扩散方程的右端项（除去涨落力项）作为漂移力放在福克-普朗克方程第一项

$$-\int dx \frac{\delta}{\delta n(x)}(\quad)f$$

的括号中，再把反应项(不包括扩散)都取正号乘以 $\frac{1}{2}\delta(x-x')$，并加扩散涨落项

$$D\nabla n(x)\cdot\nabla'\delta(x-x'),$$

放在福克-普朗克方程的第二项

$$\int dx \int dx' \frac{\delta^2}{\delta n(x)\delta n(x')}(\quad)f$$

的括号中，就得到相应的反应扩散过程的福克-普朗克方程．如果反应方程中表征产生或湮没的粒子数的系数不是 1，而是 N_x，那么在涨落项中要把 N_x 换为 N_x^2．如果反应不是单变量的，漂移项和扩散项都要对这些变量求和．扩散项中还包括这些变量的交叉项，括号中是相应变量方程中共同出现的项，这些项中表征粒子数的系数是相应的两个反应方程中这些系数的乘积．当然，只有在反应扩散方程中的每一项都代表一个元过程的时候，这样做才是对的．

文献[6]中取模型 (II) 的参数为

$$k_1 = 1, \quad k_2 = 3, \quad k_3 = (3+\varepsilon)n_A^2, \quad k_4 = (1+\varepsilon')n_A^3/n_B. \qquad (18)$$

现设 $\varepsilon = \varepsilon'$ (这时 (II) 有二级相变)，于是反应扩散方程成为

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -(n-n_A)^3 - \varepsilon n_A^2(n-n_A). \qquad (19)$$

令

$$n = n_A + n_1(x), \qquad (20)$$

(16)式可写为

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\int dx \frac{\delta}{\delta n_1(x)}[-\varepsilon n_A^2 n_1(x) - n_1^3(x) + D\nabla^2 n_1(x)]f$$

$$+\int dx\int dx'\frac{\delta^2}{\delta n_1(x)\delta n_1(x')}[4n_A^3\delta(x-x')$$
$$+n_AD\nabla\cdot\nabla'\delta(x-x')]f. \tag{21}$$

$\varepsilon=0$ 为相变点. 在相变点之前,即 $\varepsilon>0$, $\varepsilon\nrightarrow 0$ 时,可以忽略 n_1^3 项,易见这时(21)式成为线性方程,它满足细致平衡条件,有定态解:

$$f=N\exp\left\{-\frac{1}{2}\int dx\, n_1(x)\frac{\varepsilon n_A^2+D\overleftarrow{\nabla}\cdot\vec{\nabla}}{n_A(4n_A^2+D\overleftarrow{\nabla}\cdot\vec{\nabla})}n_1(x)\right\}, \tag{22}$$

N 为归一化常数,$\overleftarrow{\nabla}$ 向左边作用,$\vec{\nabla}$ 向右边作用. 由(22)式看到:偏离开平衡态后,漂移项系数和关联项系数不再成比例,梯度算符不能被消去,因此产生了涨落在空间上的关联. 如把(22)式表示成为傅里叶分量

$$n_1(x)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int n_1(k)e^{ik\cdot x}dk, \tag{23}$$

则有

$$f=N\exp\left\{-\frac{1}{2}\int\frac{dk}{(2\pi)^3}\frac{\varepsilon n_A^2+Dk^2}{n_A(4n_A^2+Dk^2)}n_{1k}n_{1-k}\right\}. \tag{24}$$

由此可见:对于短波 $k>2n_A/\sqrt{D}$,涨落主要由扩散决定,它以 n_A 衡量,结果与(13)式同;对于长波 $k<\sqrt{\varepsilon/D}\,n_A$,涨落主要由化学反应决定,它以 $4n_A/\varepsilon$ 衡量. 这些结论已由文献[9]得出,不过这里更为简洁.

我们还可求出(21)式在线性近似下的非定态解,为了这个目的,把它写到傅里叶表示(23)式中去:

$$\frac{\partial f}{\partial t}=\int\frac{dk}{(2\pi)^3}\left[(\varepsilon n_A^2+Dk^2)\frac{\delta n_1(k)f}{\delta n_1(k)}\right.$$
$$\left.+n_A(4n_A^2+Dk^2)\frac{\delta^2 f}{\delta n_1(k)\delta n_1(-k)}\right]. \tag{25}$$

它的各个分量是互相独立的,因此很易求解,对 $n_1(k,\,t=0)=n_1^0(k)$ 的初始分布得

$$f(n_1(k),\,n_1^0(k);\,t)$$
$$=\exp\left\{-\frac{1}{2}\int\frac{dk}{(2\pi)^3}\ln\left[\pi\frac{n_A(4n_A^2+Dk^2)}{\varepsilon n_A^2+Dk^2}(1-e^{-(\varepsilon n_A^2+Dk^2)t})\right]\right\}$$
$$\times\exp\left\{-\frac{1}{2}\int\frac{dk}{(2\pi)^3}\frac{\varepsilon n_A^2+Dk^2}{n_A(4n_A^2+Dk^2)}\cdot\frac{(n_1(k)-n_1^0(k)e^{-(\varepsilon n_A^2+Dk^2)t})^2}{1-e^{-(\varepsilon n_A^2+Dk^2)t}}\right\}. \tag{26}$$

所以在动量空间看来,线性反应扩散过程的涨落是平庸的. 容易把(26)式在形式上变到坐标空间,用它来求时空关联函数.

现在转向(21)式所描述的临界涨落问题. 在临界点附近 n_1^3 项与 $\varepsilon n_A^2 n_1$ 项有同样的量级,不能被忽略. 这时(21)式不满足细致平衡条件,不存在势. 侥幸的是在临界点附近,我们只对长波涨落感兴趣,在 $k\ll 2n_A/\sqrt{D}$ 时扩散涨落相对于化学涨落只是一个小量,于是在细致平衡的势条件中可以把扩散涨落作为小量展开. 根据文献[10],势条件现在可以写为

$$\frac{1}{4n_A^2-D\nabla^2}[(\varepsilon n_A^2+3n_1^2(x))\delta(x-x')-D\nabla^2\delta(x-x')]$$

$$= \frac{1}{4n_A^2 - D\nabla'^2}[(\varepsilon n_A^2 + 3n_1^2(x'))\delta(x-x') - D\nabla'^2\delta(x-x')]. \tag{27}$$

如果把分母中的 ∇^2 和 ∇'^2 展开，并且只作用在不含 n_1 的项上(因为 $\nabla^2 n_1$ 相对于 n_1^2 可以忽略不计)，则等式成立．这时(21)式有定常解

$$f = N\exp\left\{-\frac{1}{4n_A^3}\int dx\left[\frac{\varepsilon n_A^2}{2}n_1(x)\left(1-\frac{D\overleftarrow{\nabla}\cdot\vec{\nabla}}{4n_A^2}\right)n_1(x)\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{1}{2}D(\nabla n_1(x))\left(1-D\frac{\overleftarrow{\nabla}\cdot\vec{\nabla}}{4n_A^2}\right)(\nabla n_1(x)) + \frac{1}{4}n_1^4(x)\right]\right\}. \tag{28}$$

它是一个场论模型，由扩散涨落产生的两项相对于 $\frac{1}{2}D(\nabla n_1(x))^2$ 分别在接近临界情况和长波情况 ($k \ll 2n_A/\sqrt{D}$) 可以忽略不计．于是得到标准的 ϕ^4 场论模型

$$f = N\exp\left\{-\frac{1}{4n_A}\int dx\left[\frac{\varepsilon}{2}n_1^2(x) + \frac{D}{2n_A^2}(\nabla n_1(x))^2 + \frac{1}{4n_A^2}n_1^4(x)\right]\right\}, \tag{29}$$

它有非经典的临界指数．文献[6]曾期望文献[7, 8]中的涨落函数会否定场论模型，从而否定由它得出的非经典的临界指数的结果，看来情况并不如此．所谓涨落力与场论模型不自洽，指的就是扩散涨落，上面的讨论表明这一点是确定的．但是扩散涨落是短波涨落，它对长波涨落无贡献，而只有长波涨落决定了临界指数．因此在临界点附近场论模型能正确地描述长波部分的分布，并给出正确的临界指数，这正体现了 Ландау 关于二级相变的原始思想．因此，Schlögl 三分子模型应该具有非经典的临界指数．

按照前面得出的关于福克-普朗克方程的规则，对于模型 (III)，我们先写出它的反应扩散方程，为简单起见以 n_A 表 $k_1 n_A$，以 n_B 表 $k_2 n_B$，

$$\frac{\partial n}{\partial t} = (n_A - n_B)n - k_1 n^2 + D\nabla^2 n. \tag{30}$$

根据它就可写出对应的福克-普朗克方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\int dx \frac{\delta}{\delta n(x)}[(n_A - n_B)n(x) - k_1 n^2(x) + D\nabla^2 n(x)]f$$
$$+\int dx dx' \frac{\delta^2}{\delta n(x)\delta n(x')}\left[\frac{1}{2}(n_A + n_B + k_1 n(x))n(x)\delta(x-x')\right.$$
$$\left.+ D\nabla n(x)\cdot\nabla'\delta(x-x')\right]f. \tag{31}$$

文献[6]与文献[12]正是在这个模型上得到平均场临界指数的．文献[6]所依据的基本方程在我们的近似中也能得到．如对定常态分布，将(31)式乘以 $n(x)$，对 $n(x)$ 由 0 到 ∞ 积分得

$$k_1\langle n^2(x)\rangle - (n_A - n_B)\langle n(x)\rangle = \langle\nabla^2 n(x)\rangle. \tag{32}$$

如将(31)式乘以 $n(x)n(x')$，对 $n(x)$ 作泛函积分，得到

$$2(n_A - n_B)\langle n(x)n(x')\rangle - k_1(\langle n(x)n^2(x')\rangle + \langle n^2(x)n(x')\rangle)$$
$$+ D(\langle n(x)\nabla'^2 n(x')\rangle + \langle n(x')\nabla^2 n(x)\rangle)$$
$$+ [(n_A + n_B)\langle n(x)\rangle + k_1\langle n^2(x)\rangle]\delta(x-x')$$
$$+ 2D\nabla\langle n(x)\rangle\cdot\nabla'\delta(x-x') = 0. \tag{33}$$

(32) 和 (33) 式就是文献[6]中讨论的出发点，所不同的只是要把这里的 $n^2(x)$ 换为 $n^2(x)-n(x)$，∇^2 换为差分算符. 因此，从 Master 方程到福克-普朗克方程的近似在(32),(33)式这一级上没有丢掉重要的项，它们的结果仍是一致的.

模型 (III) 的特点是：它有两个定态 $n=0$ 与 $n=n_A-n_B$，在 $n_A<n_B$ 时 $n=0$ 是稳定的，在 $n_A>n_B$ 时 $n=n_A-n_B$ 是稳定的. 模型 (III) 具有三次势，但是因为 n 只能取正值，所以这两个定态都是全局稳定的. 与讨论模型 (II) 时同样的理由，对于临界涨落，可以忽略扩散涨落的影响. 由于在临界点附近 $n\approx 0$，涨落项中非线性项也可忽略. (31)式成为

$$\frac{\partial f}{\partial t}=-\int dx\frac{\delta}{\delta n(x)}[(n_A-n_B)n(x)-k_1n^2(x)+D\nabla_n^2(x)]f$$
$$+\int dx\frac{\delta^2}{\delta n(x)^2}n_An(x)f. \tag{34}$$

在过了临界点之后 $n(x)$ 有非零平均值 n_A-n_B，取涨落项中 $n=n_A-n_B$，则(34)式有定态解：

$$f=N\exp\left\{-\frac{1}{n_A(n_A-n_B)}\int dx\left[\frac{1}{2}(n_A-n_B)n^2(x)\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{k_1}{3}n^3(x)+\frac{D}{2}(\nabla n(x))^2\right]\right\}. \tag{35}$$

这是一个 ϕ^3 场论，但是 n 限制在 $n>0$. (35)式表明：当从临界点之上趋向临界，即 $n_A-n_B\to 0$ 时，相当于场论模型中 $\hbar$ 位置的涨落 $n_A(n_A-n_B)$ 也趋向零. 因此，随着控制参量愈来愈接近临界点，(35)式愈来愈接近平均场的结果. 在临界点之下和临界点处，(35)式不再适用. 我们也可以在这种意义上同意文献[6]的说法：场论形式与涨落力不自洽. 这是模型 (III) 的特殊情况. 但是这时平均场近似是一种很好的近似，在这基础上利用(32),(33)式一类矩方程作切断近似能得出很好的结果，这就是文献[6]中采用的办法. 由此可见，模型 (III) 具有经典的临界指数，文献[6]的结果是正确的.

上面的讨论表明：反应扩散系统中的非平衡涨落，随着情况的不同有着不同的特征. 在平衡态附近它表现为没有空间关联的泊松涨落. 在偏离平衡时，显示出空间关联，长波涨落主要是化学涨落，短波的主要是扩散涨落. 在 Schlögl 三分子模型中，于临界点附近显示出标度性质，它具有 ϕ^4 场非经典的临界指数. 在 Schlögl 双分子模型中，于临界点附近也显示出标度性质，但是具有经典的临界指数. 在本文的开头，我们还提到激光、Bénard 流和布鲁塞尔三分子模型中的非平衡相变问题，由于这些系统中存在着一个表征结构的特征长度，它们的相变显示出一维的特性，没有明显的转变点. 这些情况都是由系统本身的性质所决定的，与所用的方法无关 (只要它是正确的). 通常在用朗之万方程讨论问题时，往往忘了涨落力的具体形式与量级，用本文的方法则能使人始终注意到这一点，这大概就是本文所描述的方法的主要优点吧.

参 考 文 献

[1] H. Haken, Synergetics (An Introduction), (1978).

[2] R. Graham, 载于 Fluctuations, Instabilities and Phase Transitions Vol. II.
[3] D. Walgraef, G. Dewel and P. Borckmans, *Phys. Rev. A*, **21**(1980), 397.
[4] D. J. Scalapino, M. Sears, R. A. Ferrell, *Phys. Rev. B*, **6**(1972), 3409.
[5] G. Dewel, D. Walgraef and P. Borckmans, *Z. Phys. B*, **28**(1977), 235.
[6] C. Y. Mou, G. Nicolis and R. M. Mazo, *J. Stat. Phys.*, **18**(1978), 19.
[7] S. Grossman, *J. Chem. Phys.*, **65**(1976), 2007.
[8] C. W. Gardiner, *J. Stat. Phys.*, **15**(1976), 451.
[9] G. Nicolis and I. Prigogine, Self-organization in Nonequilibrium System, (1977).
[10] H. Haken, *Rev. Mod. Phys.*, **47**(1975), 67.
[11] H. Haken, *Z. Phys.* B, **20**(1975), 413.
[12] C. Gardiner, K. J. McNeil, P. F. Walls and I. Matheson, *J. Stat. Phys.*, **14**(1976), 307.

FLUCTUATIONS IN REACTION-DIFFUSION SYSTEM

CHEN SHI-GANG
(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

In this paper, we use the Fokker-Planck equation, which is derived from the Master equation and has a diffusive fluctuation term, to discuss three chemical models' fluctuation under different situations. We point out: the fluctuation near equilibrium is local and Gaussian; as the system deviate from equilibrium, the fluctuations appear correlative at different points in space; Schlögl's trimolecular model has non classical exponents; but Schlögl's dimolecular model has classical exponents. The diversification of these fluctuations is determined by the property of the system itself. By the method used in this paper, we can treate these problems in a unified base, and, therefore, provide a solution to the question about critical exponents presented in the literature[6].