(20)

关于N维Poisson-Boltzman方程的径向解*

114-121

ON THE RADIAL SOLUTIONS OF N-DIMENSIONAL POISSON -BOLTZMAN EQUATION

O175.2

杨 杰
Yang Jie
(重庆大学系统工程及应用数学系)

摘 要 讨论了由研究静电势导出的高维Poisson-Boltzman方程的径向解,这种静电势是由一位于无穷大电介质中的带电闭曲面产生的静电场引起的,证明了解的存在唯一性,并且给出了解的渐近估计。

关键词 径向解;N维Poisson-Boltzman方程;存在唯一性;渐近估计 P-B方程
中国图书资料分类法分类号 O175.2

ABSTRACT This paper discusses the higher dimensional Poisson-Boltzman equation resulting from studying the behavior of the electrostatic potential outside of a changed closed surface which contains in an infinitely large reservoir of electrolyte, proves the existeness and uniqneuess for the solution of the equation, and gives the asymptotic estimate for the solution as well.

KEY WORDS radial solution, N-dimensional Poisson-Boltzman equation, existeness and uniqueness, asymptotic estimate.

0 引 言

设 S 是位于一无穷大电介质中的带电闭壳体,因此,S 上的电荷在 S 以外的电介质中将产生出一个静电场,现要决定这个静电场中每一点的静电势。

在建立适当的坐标系后,令 $\psi(x)$ 为 x 点的电势,ρ_+,ρ_- 分别表示介质中正、负离子的密度,则由[1],ψ 满足下面的Poisson方程

$$\triangle\psi=-\frac{4\pi e}{D}(\rho_+-\rho_-)$$

其中 e 为电子的基本电量,D 为介质的介电常数。

当达到热力学平衡状态时,还有下面的Boltzman关系

$$\rho_+=\frac{N_0}{2}\exp(-e\psi/kt)$$

$$\rho_-=\frac{N_0}{2}\exp(e\psi/kt)$$

* 收文日期 1990-04-17
本文曾在全国第五届非线性偏微分方程学术会议上报告.(1990·10,成都)

其中，N_0 为中性电介质的离子浓度，k 为 Boltzman 常数，T 为绝对温度，这样，我们可以得下面的 Poisson-Boltzman 方程

$$\triangle\psi = \frac{\pi\varepsilon N_0}{D}\left(\exp\left(\frac{\varepsilon\psi}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{\varepsilon\psi}{kT}\right)\right) \tag{1}$$

现令 $u = \frac{\varepsilon\psi}{kT}$，然后对自变量进行适当的伸缩变换，可得(1)变为

$$\triangle u = shu \tag{2}$$

若 S 是一柱面，以 S 的某个横切圆的圆心为原点建立柱面坐标系(r,θ,z)，假设 S 上的电荷分布是均匀的，因此，$\psi(r,\theta,z)$ 只与 r 有关，而与 θ,z 无关，这时有边界条件

$$\left.\frac{\partial u}{\partial v}\right|_s = -\sigma,\quad \sigma > 0 \text{ 为常数}$$

以及

$$u(\infty) = 0$$

所以，要决定 ψ，只需解下面的问题，(设柱面园的半径为 $a > 0$)

$$\begin{cases} u'' + \frac{1}{r}u' = shu \\ u'(a) = -\sigma \\ u(\infty) = 0 \end{cases} \qquad \sigma > 0 \tag{3}$$

Krzwicki 和 Nadzieja[1]将 shu 换成一般严格单增函数 $f(u)$，讨论了上述问题解的存在唯一性及解的渐近性质，问题(3)实际上是二维的 Poisson-Boltzman 方程，本文将在一般的空间讨论相应的 Poisson-Boltzman 方程的径向解，将[1]的存在唯一性定理推广到高维情形，并且也得到了相应的解的渐近估计，这样的推广有很强的物理背景，例如 $N = 3$ 时，表示要决定带电球面在电介质中产生的静电势，其它背景将在文末的注记中加以说明，需要指出的是，本文所提出的解均指经典解。

1　解的存在唯一性

考虑 N 维 Poisson-Boltzman 方程

$$\triangle u = \mathrm{sh}u$$

的径向解，这时方程为

$$u'' + [(N-1)/r]u' = \mathrm{sh}u$$

为此，我们考虑更一般的问题

$$\begin{cases} u'' + [(N-1)/r]u' = f(u) \\ u'(a) = -\sigma \\ u(\infty) = 0 \end{cases} \qquad a > 0,\sigma > 0 \text{ 均为常数} \tag{4}$$

其中 $f \in c^2$ 为单调不减函数，且 $f(0) = 0$，$f'(0) > 0$

1.1　定理1　问题(4)存在唯一的解

为证明上述定理，$\forall c \in (-\infty, +\infty)$，先考虑下面的初值问题

$$\begin{cases} u'' + \frac{N-1}{r}u' = f(u) \\ u(a) = c \\ u'(a) = -\sigma \end{cases} \tag{4$_c$}$$

由常微分方程初值问题的标准理论知，存在$[a,\omega^*)$使(4)c在$[a,\omega^*)$上存在唯一的解，记为$u_c(r)$且$u_c(r)$连续依赖于初值c，令

$$\omega_c \triangleq \mathrm{Sup}\,\omega^*$$

即$u_c(r)$在$[a,\omega_c)$上为(4)c的饱和解。

关于$u_c(r)$，有下面的结论：

1.1.1　命题1　若$u_c(r)>0, \forall\ r\in[a,\omega_c)$，则必有下列之一成立：

① 存在$\alpha>0$，使$u_c(r)\geqslant\alpha, \forall\ r\in[a,\omega_c)$

② $\lim\limits_{r\to\omega_c} u_c(r)=0$，这时$\omega_c=+\infty$

证明　由于$f'(0)>0$，所以$f(x)>0, \forall\ x\in(0,+\infty)$，这样，$u_c(r)$在$[a,\omega_c)$上至多只有一个驻点，因为若不然，存在$r_1, r_2\in[a,\omega_c)$，$(r_1<r_2)$，使

$$u'_{c(r_1)}=u'_{c(r_2)}=0$$

将(4)c中方程两边同乘r^{N-1}，然后在$[r_1,r_2]$上积分，得

$$\begin{aligned} o &= r_2^{N-1}u'_c(r_2)-r_1^{N-1}u'_c(r_1) \\ &= \int_{r_1}^{r_2} s^{N-1}f(u_c(s))\mathrm{d}s>0 \end{aligned} \tag{5}$$

矛盾，现用反证法证明命题，若命题1不真，这时$u_c(r)$在$[a,\omega_c)$上不是单调下降的，否则由于① 不真，必有$\lim\limits_{r\to\omega_c}u_c(r)=0$，这与② 不真矛盾，因而，必存在$r_1,r_2\in(a,\omega_c)$，使得$u_c(r_1)<u_c(r_2)$，由于$u'_c(a)<0$，取

$$r_1<r_2$$

必有$r_0\in(a,r_2)$，使$u_c(r_0)=\min\limits_{a\leq r\leq r_2}u_c(r)$，且$u'(r_0)=0$，再由①不真，所以在$(r_2,\omega_c)$上存在$r_3$，使得

$$u_c(r_3)<u_c(r_0)<u_c(r_2)$$

这样，在(r_2,r_3)中必有$u_c(r)$的一个驻点$\bar r_0$，显然$\bar r_0\neq r_0$，这与$u_c(r)$至多只有一个驻点矛盾。

若①不真，这时必有$u_c(\omega_c-0)=0$，所以$u'_c(\omega_c-0)$存在且有限，因此，由饱和解的充要条件知，$\omega_c=+\infty$。

1.1.2　命题2　若存在$\bar r\in[a,\omega_c)$使

$$u'_c(\bar r)<0$$

则$u_c(r)$严格单调下降。

证明　仿[1]中(P_3)，略。

1.1.3　命题3　对于充分大的c，有

$$u_c(r)>1,\qquad \forall\ r\in[a,\omega_c)$$

证明　在(5)式中令$r_2=r, r_1=a$，得

$$u'_c(r)=\frac{-a^{N-1}\cdot\sigma}{r^{N-1}}+\frac{1}{r^{N-1}}\int_a^r s^{N-1}f(u_c(s))\mathrm{d}s \tag{6}$$

若结论不真，即存在$\{c_i\}$，使

$$1<c_1<c_2<\cdots\cdots$$

且$c_i\to\infty$，当$i\to\infty$时，且有$\{r_i\}$，$r_i\in[a,\omega_c)$，使$u_{c_i}(r_i)<1$，因此，$\forall\ i$，由于$u_{c_i}(a)=c_i>1$，故存在$\bar r_i\in[a,\omega_c)$，使

$$u_{c_i}(\bar r_1)=1 \quad 且\ u_{c_i}(r_1)>1,\forall\ r\in[a,r_1)$$

这样必有

$$u'_{c_i}(r_2)\leqslant 0,\forall\ i \tag{7}$$

为方便，以下记 $u_i=u_{c_i}$

由(6)，得

$$r^{N-1}u'_i(r)=-a^{N-1}\sigma+\int_a^r s^{N-1}f(u_i(s))\mathrm{d}s$$

然后令 $u=u_i$，并在 $[a,r_1)$ 上积分，得

$$\bar r_1^{N-1}u_1(\bar r_1)-a^{N-1}u_1(a)-(N-1)\int_a^{\bar r_1} r^{N-2}u_1(r)\mathrm{d}r$$

$$=-\int_a^{\bar r_1}a^{N-1}\sigma\mathrm{d}r+\int_a^{\bar r_1}\mathrm{d}r\int_a^r s^{N-1}f(u_i(s))\mathrm{d}s$$

即

$$\bar r_1^{N-1}-a^{N-1}c_i+a^{N-1}\sigma\bar r_1-a^N\sigma\geqslant\bar r_1^{N-1}-a^{N-1}+\int_a^{\bar r_1}\mathrm{d}r\int_a^r s^{N-1}f(u_i(s))\mathrm{d}s$$

$$>\bar r_1^{N-1}-a^{N-1}$$

因而必有

$$\bar r_1>\frac{c_i-1}{\sigma}+a \tag{8}$$

又由(6)

$$u'_i(\bar r_1)=-\frac{a^{N-1}\sigma}{\bar r_1^{N-1}}+\frac{1}{\bar r_1^{N-1}}\int_a^{\bar r_1}s^{N-1}f(u_i(s))\mathrm{d}s$$

$$\geqslant-\frac{a^{N-1}\sigma}{\bar r_1^{N-1}}+\frac{f(1)}{\bar r_1^{N-1}}\cdot\frac{\bar r_1^{N}-a^N}{N}$$

利用(8)知，当 i 充分大时，$\bar r_1$ 可充分大，这时由上式，有

$$u'_i(\bar r_1)>0$$

这与(7)矛盾，因而命题成立。

由(6)可得

$$u_c(r)=c\mp\frac{a\sigma}{N-2}\pm\frac{a^{N-1}\sigma}{(N-2)r^{N-2}}+\int_a^r\frac{\mathrm{d}\xi}{\xi^{N-1}}\int_a^\xi s^{N-1}f(u_c(s))\mathrm{d}r \tag{9}$$

因此，利用命题1，容易得到

1.1.4　命题4　若 $u_c(r)>0,\forall\ r\in[a,\omega_c)$，则

$$u_c(r)\to 0$$

或者

$$u_c(r)\to+\infty\quad，当\ r\to\omega_c 时$$

证明　由命题1知，只需证明命题1中①蕴含 $u_c(r)\to\infty$，当 $r\to\omega_c$ 时，事实上，设 α 为命题1中①的常数，分两种情况证明：

1) $\omega_c=\infty$，这时，由于 $f(u_c(r))\geqslant f(\alpha)>0$ 由(9)式，有

$$u_c(r)\geqslant c-\frac{a\sigma}{N-2}+\frac{a^{N-1}\sigma}{(N-2)r^{N-1}}+f(\alpha)\int_a^r\frac{\mathrm{d}\xi}{\xi^{N-1}}\int_a^\xi s^{N-1}\mathrm{d}s$$

$$=\frac{f(\alpha)r^2}{2N}+\frac{a^{N-1}\sigma}{(N-2)r^{N-1}}+\frac{f(\alpha)a^N}{N(N-2)r^{N-2}}+c$$

$$-\frac{a\sigma}{N-2}-\frac{f(\alpha)a^2}{2N}-\frac{f(\alpha)a^2}{N(N-2)}$$

故当 $r\to\omega_c=\infty$ 时，$u_c(r)\to\infty$。

2) $\omega_c<\infty$，此时，由 ω_c 的定义，当 $r\to\omega_c$ 时，$u_c(r)$ 和 $u_c'(r)$ 至少有一个趋于无穷，若是前者，则命题得证，若 $r\to\omega_c$ 时，$u(r)$ 有界，则 $f(u_c(r))$ 有界，不妨令

$$f(u_c(r)\leqslant M$$

则由(6)有

$$u_c'(r)\leqslant\frac{-a^{N-1}\sigma}{r^{N-1}}+\frac{r}{N}M$$

故当 $r\to\omega_c<\infty$ 时，$u_c'(r)$ 亦有界，这与 ω_c 的定义矛盾，因而命题得证。

利用命题 2，可得

1.1.5　命题 5　若存在 $r\in[a,\omega_c)$，使 $u_c(r)<0$，则

$$u_c(r)\to-\infty\text{，当 }r\to\omega_c\text{ 时，}$$

1.1.6　命题6　若 $c_1<c_2$，则

$$c_2-c_1\leqslant u_{c_2}(r)-u_{c_1}(r)$$

$\forall\ r\in[a,\omega_{c_1})\cap[a,\omega_{c_2}]$

证明　首先，由常微分方程组的比较原理(例如见[5])知，$\forall\ c_2>c_1$，有 $u_{c_2}(r)\geqslant u_{c_1}(r)$，$\forall\ r\in(a,\min\{\omega_{c_1},\omega_{c_2}\})$，又由(9)，$\forall\ i=1,2$，及 $\forall\ r\in(a,\min\{\omega_{c_1},\omega_{c_2}\})$，有

$$u_{c_i}(r)=c_i-\frac{a\sigma}{N-2}+\frac{a^{N-1}\sigma}{(N-2)r^{N-1}}+\int_a^r\frac{d\xi}{\xi^{N-1}}\int_a^\xi f(u_i(s))ds$$

因而，

$$\begin{aligned}u_{c_2}(r)-u_{c_1}(r)&=c_2-c_1+\int_a^r\frac{d\xi}{\xi^{N-1}}\int_a^\xi(f(u_{c_2}(s))-f(u_{c_1}(s))ds\\&\geqslant c_2-c_1\end{aligned}$$

命题详证。

1.1.7　定理1的证明　令

$$E\triangleq\{c\in(-\infty,+\infty)\,|\,u_c(r)\to-\infty\text{，当 }r\to\omega_c\text{ 时}\}$$

由命题3，命题5及命题6，存在 $c_0\in(0,+\infty)$，使得 $c_0=\sup\limits_{c\in E}c$ 且

$$E=(-\infty,c_0)$$

我们断言 $u_{c_0}(r)$ 即为(4)的解，分三种情况：

1) $\forall\ r\in[a,\omega_{c_0})$，有 $u_{c_0}(r)>0$

这时，根据命题 1，或者 $\omega_{c_0}=+\infty$，且 $\lim\limits_{r\to\infty}u_{c_0}(r)=0$，从而 u_{c_0} 是(4)的解；或者，存在 $\alpha>0$ 使 $u_{c_0}(r)\geqslant\alpha$，$\forall\ r\in[a,\omega_c)$，但由命题 4，当属后者时，有 $\lim\limits_{r\to\omega_{c_0}}u_{c_0}(r)=+\infty$，因此，根据解对参数的连续性定理，存在 $c<c_0$，使 $u_c(r)$ 不是单调下降的，而这与命题 2 矛盾，所以后者不出现。

2) 存在 $\bar r\in[a,\omega_{c_0})$，使 $u_{c_0}(\bar r)<0$

根据命题 5，这时有 $\lim\limits_{r\to\omega_{c_0}}u_{c_0}(r)=-\infty$，因此根据解对参数的连续依赖性，存在 $\varepsilon>0$，使 $\bar c\in(c_0,c_0+\varepsilon)$，有 $u_{\bar c}(\bar r)<0$，从而，再利用命题5，得

$$\lim_{r\to\omega_{\bar c}}u_{\bar c}(r)=-\infty$$

这样，我们得到 $\bar c\in E$，这与 $c_0=\sup\limits_{c\in E}c$ 矛盾，所以，这种情况不会发生。

3)$\forall r \in [a,\omega_{c_0})$，有 $u_c(r) \geqslant 0$，且存在 $\bar{r} \in (a,\omega_{c_0})$ 使 $u_{c_0}(\bar{r}) = 0$。

这时，$u_{c_0}(r)$ 在 $r = \bar{r}$ 处达到最小值，所以 $u'_{c_0}(r) = 0$，因此，根据解的存在唯一性定理，在 $[\bar{r},\omega_{c_0})$ 上有 $u_{c_0}(r) = 0$，从而 u_{c_0} 是(4)的解，这时 $\omega_{c_0} = +\infty$.

综上所述，我们证明了 $u_{c_0}(r)$ 为(4)的解。

下证唯一性，若 $\bar{u}(r)$ 为(4)的另一个解，则存在 $\bar{c}_0 > c_0$，$\bar{u}_{\bar{c}_0}(r)$ 为$(4)_{\bar{c}_0}$的解，由命题6

$$0 < \bar{c}_0 - c_0 \leqslant \bar{u}_{\bar{c}_0}(r) - u_{c_0}(r)$$

令 $r \to +\infty$，右边为零，矛盾，所以 $u_{c_0}(r)$ 为(4)的唯一解。

2 解的渐近估计

2.1 引理[2] **设** $g(x):(a,+\infty)\to R$ **为连续函数，并且**

$$\int_a^{+\infty} g(x)\mathrm{d}x < \infty$$

λ 为一正实数，则存在 $v_1, v_2 \in c^2(a, +\infty)$，满足

$$v'' - (\lambda^2 + g)v = 0$$

且

$$v_1(r) \sim \frac{v_1'(r)}{\lambda} \sim \exp(-\lambda r)$$

$$v_2(r) \sim \frac{v_2'(r)}{\lambda} \sim \exp(\lambda r)$$

利用上述引理，可得

2.2 定理2 **设** $u(r)$ **为(4)的解，则**

$$u(r) \sim r^{-\frac{N-1}{2}}\exp(-\lambda r)$$

其中 $\lambda^2 = f'(0)$

证明　令 $v = r^{\frac{N-1}{2}}u$，则

$$v'' = \frac{(N-1)(N-3)}{4}r^{\frac{N-5}{2}}u + (N-1)r^{\frac{N-3}{2}}u' + r^{\frac{N-1}{2}}u''$$

$$= \frac{(N-1)(N-3)}{4}r^{\frac{N-5}{2}}u + r^{-\frac{N-1}{2}}((N-1)r^{N-2}u' + r^{N-1}u'')$$

由于 u 为(4)的解，所以

$$(N-1)r^{N-2}u' + r^{N-1}u'' = r^{N-1}f(u)$$

因而

$$v'' = \frac{(N-1)(N-3)}{4}r^{\frac{N-5}{2}}u + r^{-\frac{N-1}{2}} \cdot r^{N-1}f(u)$$

故

$$v'' - (\lambda^2 + g(r))v = 0 \tag{10}$$

其中

$$g = \frac{f(u)}{u} - \lambda^2 + \frac{(N-1)(N-3)}{4r^2}$$

由命题1的证明知

$$u'(r) \leqslant 0 \qquad \forall r \in [a, +\infty)$$

所以由(6)

$$\int_a^\infty s^{N-1} f(u(s))\mathrm{d}s \leqslant a^{N-1}\sigma$$

由假设，$f \in C^2$ 且 $f'(0) = \lambda^2, f(0) = 0$，由 Taylor 展式有

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2}x^2 + 0(x^2)$$

$$= \lambda^2 x + \frac{f''(0)}{2}x^2 + 0(x^2)$$

因为 $u(r) \to 0+$，所以，当 r 充分大时，有

$$\frac{\lambda^2}{2}u(r) < f(u(r))$$

以及

$$\left| \frac{f(u(r))}{u(r)} - \lambda^2 \right| < Au(r)$$

其中 A 为一正常数，因此，当 R 充分大 量时

$$\int_a^\infty g(r)\mathrm{d}r \leqslant \int_a^\infty \left| \frac{f(u(r))}{u(r)} - \lambda^2 - \frac{(N-1)(N-3)}{4r^2} \right| \mathrm{d}r$$

$$\leqslant \int_a^\infty \left| \frac{f(u(r))}{u(r)} - \lambda^2 \right| \mathrm{d}r + \int_a^\infty \frac{(N-1)(N-3)}{4r^2}\mathrm{d}r$$

$$\leqslant \int_a^R \left| \frac{f(u(r))}{u(r)} - \lambda^2 \right| \mathrm{d}r + A\int_R^\infty u(r)\mathrm{d}r + A_1$$

$$\leqslant A_2 + \left(\frac{\lambda^2}{2}\right)^{-1} A\int_R^\infty r^{N-1} f(u(r))\mathrm{d}r < \infty$$

因而，由引理知

$$v(r) \sim c_1 \exp(\lambda r) + c_2 \exp(-\lambda r)$$

由于 当 R 充分大时

$$\int_R^\infty v(r)\mathrm{d}r = \int_R^\infty r^{\frac{N-1}{2}} u(r)\mathrm{d}r$$

$$\leqslant \frac{2}{\lambda^2}\int_R^\infty r^{N-1} f(u(r))\mathrm{d}r < \infty$$

所以 $c_1 = 0$，故

$$v(r) \sim \exp(-\lambda r)$$

即

$$u(r) \sim r^{-\frac{N-1}{2}} \exp(-\lambda r)$$

所以定理成立。

3 推广和注记

利用类似的方法可以讨论

$$\begin{cases} u'' + \dfrac{A}{r}u' = f(u) \\ u'(a) = -\sigma \\ u(\infty) = 0 \end{cases}$$

$A > 0$ 为常数，可以证明存在唯一性，且这时的渐近估计为

$$u(r) \sim r^{-\frac{A}{2}}\exp(-\lambda r)$$

高维 Poisson-Boltzman 方程的广义形式，即(3)中的方程，以及它们的一般形式

$$\triangle u = f(u)$$

出现在较多的物理邻域中，如相变换，核物理固体波以及近年来的人口遗传学中，例如令

$$f(u) = u^p - u \qquad p > 1$$

这时方程描述了 Van der Waals 流体在所考虑的区域中压力强度的分布。

关于其它定解条件的研究有很多(如[3])。

参 考 文 献

1 Krzywcki A, Nadzieja T. Radially Symmetric Solution of the Poisson-Boltzman Equation. Math. Methods in Appl. Sci. 1989,(11):403～408

2 Hartman P. Ordinary Differential Equations, Wiley, 1964

3 Ni W-M. On the Positive Radial solution of some semilinear elliptic equations on R^N, Appl, Math, Optim, 1983, (4):373～380

4 Lampert M A. The Conlomb Condensate of the Nonlinear Poisson-Boltzman Equations: a unified theory. Chemical physics, 1982, (65):143～155

5 Debye P, Hiickl E. Zur Theorie der Electrotyte I, GefrierpunktsserNidrigung and Verwandt Erscheinungen, phys. ztschr, 1923, (24):185～217

6 叶其孝，李正元. 反应扩散方程引论. 北京：科学出版社. 1990