

非线性反应扩散方程的数值解

唐世敏 秦素娣 R.O. 韦伯

(北京大学力学系) (澳大利亚新南威尔士大学)

(朱照宣推荐, 1990年8月20日收到)

摘 要

本文采用 Petrov-Galerkin 有限元法构造了非线性反应扩散方程的数值格式, 既适用于全场性的初值, 也适用于局部性的初值. 利用全场性初值求得的进波数值解与精确解高度吻合, 证明本方法与其它数值方法比较, 有更高的精度和稳定性. 利用各种局部性初值所算出的数值解表明, 任何局部的扰动都会得到充分的发展, 且当时间充分长后, 演变为向左、右传播的行波, 其波前的形状及传播速度完全由系统本身所决定, 而与初值的类型无关.

关键词 反应扩散方程 Petrov-Galerkin 有限元法 行波

一、前 言

反应和扩散的相互作用是自然界以及社会、经济生活中广泛存在的现象. 作为描述这一现象的最有代表性的数学模型——反应扩散方程

$$u_t = \alpha u_{xx} + \beta u^n(1-u) \quad (1.1)$$

已引起普遍的关注. (1.1)式左端 u_t 是变量 $u(x,t)$ 对时间 t 的增长率, 右端第一、二项则分别代表 u 在一维空间的扩散和反应(繁殖)效应. α 和 β 为正的实数, $n=1, 2, \dots$. 当 $n=1$ 时, (1.1)称为Fisher方程, 是Fisher^[1]为描述雄性变异体(virile mutant)在无限长一维空间中的传播而引入的. 方程(1.1)在描述核反应中中子数的演变^[2,3], 森林或发动机燃烧室中火焰的传播^[4,5]等许多领域都得到广泛的应用, 也是研究非线性复杂动力系统的分叉、混沌与自组织现象的一个典型方程^[6].

对方程(1.1)的解已有不少定性的讨论^[7,8], 并就 $n=1, 2$ 两种情形得到代表行波的精确特解. 当 $n=1$ 时, 有

$$u = \{1 + \exp[\sqrt{\beta/6\alpha}(x-Ut)]\}^{-2} \quad (1.2)$$

其中 $U = 5\sqrt{\alpha\beta/6}$; 当 $n=2$ 时, 有

$$u = \{1 + \exp[\sqrt{\beta/2\alpha}(x-Vt)]\}^{-1} \quad (1.3)$$

其中 $V = \sqrt{\alpha\beta/2}$.

在求数值解方面, 已先后提出拟谱法^[9], 各种形式的差分法和Galerkin有限元法^[5]以及交替迭代法^[10]. 这些方法虽均可成功地求反应扩散方程的数值解, 但有的精度不够高, 有的虽精度较高, 但过于繁琐或出现小振幅的高频伪振荡.

唐世敏和Weber^[11]已用一种 Petrov-Galerkin 有限元法, 针对局部性初值分布讨论了 Fisher 方程的数值解. 本文将此方法推广到(1.1)中 $n=2$ 的反应扩散方程. 既考虑了局部性的初值分布, 也考虑了满足边条件 $u(-\infty)=1$, $u(\infty)=0$ 的初值分布. 对数值格式与原微分方程的相容性及其对时间二阶、空间四阶的精度作了证明. 以精确解(1.3)在 $t=0$ 的值为初值所求得的数值解与精确解(1.3)的高度吻合说明本方法具有极高的精度. 各种类型局部性初值下的数值解说明, 任何形式的局部扰动均会得到充分的发展并在充分长的时间后发展为向左、向右的行波解, 而行波解的波形及其传播速度仅由 α , β 所体现的系统本身的性质所决定, 而与初值选取无关.

二、Petrov-Galerkin 有限元数值格式

1. 格式 I

考虑局部性初值的 Cauchy 初值问题

$$\begin{cases} u_t - \alpha u_{xx} - \beta u^2(1-u) = 0 & -\infty < x < \infty, t > 0 \end{cases} \quad (2.1a)$$

$$\begin{cases} u(x, 0) = u_0(x) & x \in \Omega \end{cases} \quad (2.1b)$$

初值 $u_0(x)$ 的支集 Ω 为有界闭集, 且

$$0 \leq u_0(x) \leq 1, \quad \forall x \in \Omega$$

由定解问题(2.1a, b)不难看到, 扩散效应将使局部初值向 Ω 的左、右方扩散; 同时, 反应效应又引起 u 的增殖. 我们取充分大的区间 $[a, b]$, 以 Ω 为其子集, 且在所考虑的 $\forall t \in (0, T)$, 有

$$u(a, t) = u(b, t) \equiv 0, \quad u_x(a, t) = u_x(b, t) \equiv 0 \quad (2.2)$$

即初值的影响仍远离 $x=a, b$.

将 $[a, b]$ 以步长 $h=(b-a)/N$ 剖分为 N 个单元, 得结点

$$x_j = a + (j-1)h \quad (j=1, 2, \dots, N+1)$$

定义分段线性函数 $\phi(x)$ 和三次样条函数 $\psi(x)$

$$\phi(x) = \begin{cases} 1 - |x|, & |x| \leq 1 \\ 0, & |x| > 1 \end{cases}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x \leq -2 \\ (x+2)^3/6, & -2 < x \leq -1 \\ -(3x^3 + 6x^2 - 4)/6, & -1 < x \leq 0 \\ (3x^3 - 6x^2 + 4)/6, & 0 < x \leq 1 \\ -(x-2)^3/6, & 1 < x \leq 2 \\ 0, & x > 2 \end{cases}$$

和插值函数族 $\{\phi_j(x)\}$, 权函数族 $\{\psi_j(x)\}$

$$\begin{cases} \phi_j(x) = \phi((x-x_j)/h) \\ \psi_j(x) = \psi((x-x_j)/h) \end{cases} \quad (j=1, 2, \dots, N+1)$$

将方程(2.1a)中的 $u^m(x, t)$ 以展式

$$u^m(x, t) \approx v^m(x, t) = U_j^m(t) \phi_j(x) \quad (m=1, 2, 3) \quad (2.3)$$

近似, 其中下标 j 由 1 到 $N+1$ 作 Einstein 约定求和. 将(2.3)代入(2.1a), 有

$$\dot{U}_j \phi_j - \alpha U_j \phi_j'' - \beta(U_j^2 - U_j^3) \phi_j = \varepsilon(x, t) \quad (2.4)$$

式中 $\dot{U}_j = dU_j/dt$, 二阶导数 ϕ_j'' 在经典的意义上已不复存在, 作广义函数理解, 在以 ψ_i 为权使用加权余量法, 即令

$$(\varepsilon, \psi_i) = \int_a^b \varepsilon \psi_i dx = 0 \quad (i=1, 2, \dots, N+1) \quad (2.5)$$

作分部积分后即可把对 ϕ_j 求微商转嫁到光滑的 ψ_j 上. 完成所有积分并考虑到边条件 (2.2), 得关于 $U_j(t)$ 的非线性常微分方程组

$$M_{i,j} \dot{U}_j - Q_{i,j} U_j - \beta M_{i,j} (U_j^2 - U_j^3) = 0 \quad (i=1, 2, \dots, N+1) \quad (2.6)$$

其中

$$M_{i,j} = \begin{cases} 1 & j=i \\ 13/33 & j=i \pm 1 \\ 1/66 & j=i \pm 2 \\ 0 & \text{其余情形} \end{cases}, \quad Q_{i,j} = \frac{20\alpha}{11h^2} \times \begin{cases} -1, & j=i \\ 1/3, & j=i \pm 1 \\ 1/6, & j=i \pm 2 \\ 0, & \text{其余情形} \end{cases}$$

采用梯形公式将(2.6)对 t 积分, 得

$$\begin{aligned} M_{i,j} (U_j^{n+1} - U_j^n) &= \frac{\tau}{2} \{ Q_{i,j} (U_j^{n+1} + U_j^n) + \beta M_{i,j} [(U_j^{n+1})^2 + (U_j^n)^2 - (U_j^{n+1})^3 - (U_j^n)^3] \} \\ &= 0 \quad (i=1, 2, \dots, N+1) \end{aligned} \quad (2.7)$$

其中 τ 为时间步长, $U_j^n = U_j(n\tau)$.

(2.7) 为 U_j^{n+1} 的非线性代数方程组, 采用 Newton-Raphson 迭代法求解, 记 $U_j^{n+1, k}$ 为 U_j^{n+1} 在第 k 步的迭代值, 则得以 $U_j^{n+1, k+1}$ 为未知量的线性代数方程组

$$A_{i,j} U_j^{n+1, k+1} = B_i \quad (i=1, \dots, N+1) \quad (2.8)$$

其中

$$\begin{aligned} A_{i,j} &= M_{i,j} \left[1 - \tau \beta U_j^{n+1, k} + \frac{3}{2} \tau \beta (U_j^{n+1, k})^2 \right] - \frac{\tau}{2} Q_{i,j} \\ B_i &= M_{i,j} \left\{ U_j^n - \frac{1}{2} \tau \beta [(U_j^{n+1, k})^2 - (U_j^n)^2 + (U_j^n)^3 - 2(U_j^{n+1, k})^3] \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \tau Q_{i,j} U_j^n \end{aligned}$$

$A_{i,j}$ 为主元占优的、带宽为5的带状矩阵, (2.8) 可用 Gauss 消元法求解.

下面证明此数值格式与微分方程(2.1a)的相容性并估计其精度. 设

$$R(u) \equiv 20[u_x - \alpha u_{xx} - \beta u^2(1-u)]/11 \quad (2.9)$$

R 为(2.1a)中的微分算子乘以为使矩阵 $M_{i,j}$ 的主元为1而引入的常数因子 $20/11$. 记 (2.4) 中空间离散算子为 D_i , 即

$$D_i(u) \equiv M_{i,j} \dot{U}_j - Q_{i,j} U_j - \beta M_{i,j} (U_j^2 - U_j^3) \quad (2.10)$$

将 Taylor 展式

$$f_{j \pm 1} = \sum_{p=0}^5 (\pm 1)^p \frac{f_j^{(p)}}{p!} h^p + O(h^6), \quad f_{j \pm 2} = \sum_{p=0}^5 (\pm 1)^p \frac{f_j^{(p)}}{p!} (2h)^p + O(h^6)$$

用于 t 时刻在结点 x_j 上未知函数 u^m 以及 u_t 的值 U_j^n 和 \dot{U}_j , 经过一些简单的运算, 我们发现

$$D_i(u) - [R(u)]_i = 5[R(u)]_{,i,i} h^2/11 + O(h^4) \quad (i=1, \dots, N+1) \quad (2.11)$$

其中 $[R(u)]_i$ 及 $[R(u)]_{,i,i}$ 分别为 $R(u)$ 及其对 x 的二阶偏导数在结点 x_i 的值, 显然 $[R(u)]_{,i,i} = 0$,

故(2.11)式既说明了 $D_i(u)$ 与 $R(u)$ 的相容性,又显示了截断误差为 $O(h^4)$ 。至于对 t 积分的梯形公式(2.7),众所周知,它是与相应的常微分方程相容的,其截断误差为 $O(\tau^2)$ 。所以综合起来,时空离散截断误差为 $O(\tau^2, h^4)$ 。在使用Newton-Raphson迭代时,我们也以此量阶的误差来控制迭代的步数,以保证整个计算过程均有 $O(\tau^2, h^4)$ 的精度。

因方程(2.1a)有很强的非线性,其数值格式的稳定性不易讨论。不过大量的数值实验表明,当 τ, h 在相当大的范围内变化时,此格式均显示了很好的稳定性。

2. 格式 I

为了便于将数值解和精确解(1.3)作比较,我们将格式 I 作部分修正,以适应边条件

$$u(a, t) = 1, u_x(a, t) = 0 \quad (2.12)$$

在 $x=b$ 端,仍为 u 及其对 x 的偏导数为零。为此将结点号码改编为

$$x_j = a + jh \quad (j=0, 1, \dots, N)$$

注意到 $U_0 = 1, \dot{U}_0 = 0$,重复格式 I 中所有步骤, $j=1$ 到 N 作Einstein约定求和。当 $i=1, 2$ 时,空间离散格式为

$$D_1(u) = 10\alpha/11h^2 \equiv g_1, D_2(u) = 10\alpha/33h^2 \equiv g_2$$

对于 $3 \leq i \leq N$,仍有 $D_i(u) = 0$ 。故再对 t 积分并采用Newton-Raphson迭代后有

$$A_i U_i^{k+1, k+1} = E_i \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad (2.13)$$

其中

$$E_i = \begin{cases} B_i + g_i \tau & (i=1, 2) \\ B_i & (3 \leq i \leq N) \end{cases}$$

三、数值结果

在数值求解中,取 $\alpha=0.1, \beta=1, h=0.02, \tau=0.005$ 。 $[a, b]$ 长度视初值分布及计算总时间 T 的长短适当选取,以使解有充分发展的余地,又不致作许多无谓的计算。

1. 数值解与精确解的比较

取精确解(1.3)在 $t=0$ 的值

$$u_0(x) = \{1 + \exp(\sqrt{\beta/2\alpha} x)\}^{-1}$$

为初值,用数值格式 I 完成了由 $t=0$ 到 $t=4$ 的数值计算, $t=0, 1, 2, 3, 4$ 的波形示于图1。以 $u_j(t)$ 和 $v_j(t)$ 分别表示数值解和精确解在结点 x_j 的值,定义 L_2 误差

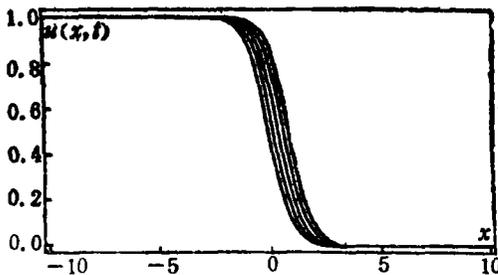


图1 精确解和数值解。由左向右: $t=0$, 精确解(初值); $t=1 \sim 4, \Delta t=1$, 数值解

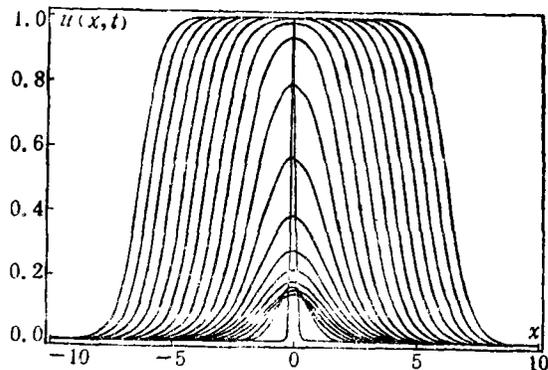


图2 局部窄频带陡峭初值(中)数值解。 $t=0$ 到 $t=40, \Delta t=2$

$$e(t) = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (u_j - v_j)^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

不同时刻 $e(t) \times 10^6$ 的值示于表1, 可以看出, $\forall t \in [0, 4], e(t)$ 为 $O(10^{-6})$ 量阶, 故在图中看不出数值解与精确解的差别。

表1 数值解与精确解比较

t	1.0	2.0	3.0	4.0
$e \times 10^6$	3.01	4.64	5.77	6.77
W	0.223593	0.223580	0.223593	0.223597
$(V-W) \times 10^5$	1.4	2.7	1.4	1.0

因恒有 $0 \leq u \leq 1$, 故可用 $u=0$ 与 $u=u(x,t)$ 之间所包围的面积

$$S(t) = \int_a^b u(x,t) dx$$

的增长率 $W = dS/dt$ 计算行波速度。表1中示出不同时刻 W 的值及与精确值 $V = \sqrt{a\beta/2}$ 的比较 $(V-W) \times 10^5$ 。从中看出 W 略小于 V , 而其绝对误差为 10^{-6} 量阶。实际误差与理论上证明的精度 $O(\tau^2, h^4)$ 同阶。

2. 局部窄频带陡峭初值

取初值 $u_0(x) = \text{sech}^2 10x$, 利用格式 I 由 $t=0$ 算到 $t=40$, 每隔 $\Delta t=2$ 画出一条解曲线, 如图2。由于初始时 $x=0$ 附近扩散效应远大于反应效应, 所以峰值先是急剧下降; 然后随着扩散效应的减少, 反应效应的增大而使峰值缓慢上升。到 $t=30$, 近似地形成向左、右传播的行波, 由 $t=30$ 起, 计算出的各时刻传播速度 W 如表2。 W 随 t 单调下降, 逐渐靠近精确行波的速度

$$V = \sqrt{a\beta/2} \approx 0.223607$$

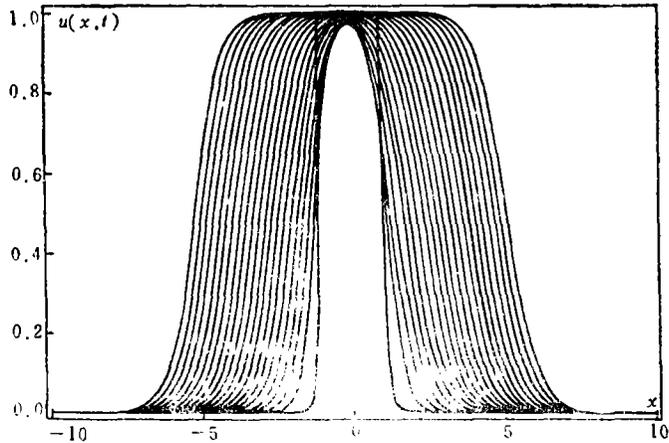


图3 局部宽频带平坦初值(方形)数值解, $t=0$ 到 $t=20, \Delta t=1$

表 2

t	30	32	34	36	38	40
W	0.23032	0.22809	0.22650	0.22550	0.22485	0.22439

3. 局部宽频带平坦初值

取初值

$$u_0(x) = \begin{cases} e^{10(x+1)}, & x \leq -1 \\ 1, & -1 < x \leq 1 \\ e^{-10(x-1)}, & x > 1 \end{cases}$$

用格式 I 由 $t=0$ 算到 $t=20$, 每隔 $\Delta t=1$ 作解的曲线如图 3。此例的特点是初始时 $x=0$ 附近扩散、反应效应均小, 但受两边扩散应的影响, 顶部的棱角变圆滑, 宽度减小, 峰值先有微小下降, 而后很快上升并变得平坦。到 $t=10$ 已近似地形成向左、右传播的行波。由此时起计算出传播速度 $W(\Delta t=2)$ 如表 3。 W 随 t 单调上升, 并逐渐靠近精确解的传播速度 V 。

表 3

t	10	12	14	16	18	20
W	0.21830	0.22044	0.22164	0.22234	0.22277	0.22303

我们还采用峰值小于 1 的各种局部初值用格式 I 作了计算, 均显示了峰值先下降, 而后上升, 同时向两边传播, 最后形成行波的总趋势。初值的形式不同, 影响形成进波的过程的长短。而时间充分久后的行波解的形状及其传播速度只与系统本身的参数 α, β 有关, 而与初值无关。

四、结 语

本文用 Petrov-Galerkin 有限元法构造的数值求解非线性反应扩散方程的格式, 理论上和实践上均已证明有 $O(\tau^2, h^4)$ 的精度。如对时间积分采用 Runge-Kutta 法还可提高到 $O(\tau^4, h^4)$ 。数值实验还证明本方法有较好的稳定性并不出现其它一些数值方法所带来的微小高频伪振荡。

本文给出的数值结果, 形象地、定性定量地揭示了反应扩散方程解的性质。

所以, 本文提供的方法和结果对同时具有反应和扩散机制的各个研究领域都有一定的参考价值。

本项研究是作者之一唐世敏 1989 年在澳大利亚新南威尔士大学的大学学院数学系作短期访问时着手进行的。他对当时所受到的热情接待和大力支持表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] Fisher, R. A., The wave of advance of advantageous genes, *Ann. of Eugen.*, 7 (1936), 355—369.
- [2] Canosa, J., Diffusion in nonlinear multiplication media, *J. Math. Phys.*, 10 (1969), 1862—1868.
- [3] Canosa, J., On a nonlinear diffusion equation describing population growth, *IBM J. Res. Develop.*, 17 (1973), 307—313.
- [4] Kolmogoroff, A., I. Petrovsky and N. Piscounoff, Study of the diffusion equation with growth of the quantity of matter and its application to biology problem, *Bulletin de l'Universite d'etat à Moscou, Série internationale, Section A*, 1 (1937).
- [5] Ramos, J. I., Numerical solution of reaction-diffusion equation, *Int. J. Comp. Maths*, 18 (1985), 43—66; 141—162; 289—310.

- [6] Griffiths, D. F. and A. R. Mitchell, Stable periodic bifurcations of an explicit discretization of a nonlinear partial differential equation in reaction diffusion, *IMA J. Numer. Anal.*, 8 (1988), 435—454.
- [7] Sachdev, P.L., *Nonlinear Diffusive Waves*, Cambridge University Press (1987), 103—105.
- [8] Wang, X. Y., Exact and explicit solitary wave solutions for the generalized Fisher equation, *Physics Letter A*, 131 (1988), 277—279.
- [9] Gazdag, J. and J. Canosa, Numerical solution of Fisher's equation, *J. Appl. Probab.*, 11 (1974), 445—457.
- [10] Evans, D. J. and M. S. Sahimi, The alternating group explicit (AGE) iterative method to solve parabolic and hyperbolic partial differential equations, *Ann. of Numerical Fluid Mechanics and Heat Transfer*, 2 (1989), 283—389.
- [11] Tang, S. and R. O. Weber, Numerical study of Fisher's equation by a Petrov-Galerkin finite element method, *J. Austral. Math. Soc., Ser B.* (in press)

Numerical Solution of a Nonlinear Reaction-Diffusion Equation

Tang Shi-min Qin Su-di

(*Peking University, Beijing*)

R. O. Weber

(*The University of New South Wales, Australia*)

Abstract

A nonlinear reaction-diffusion equation is studied numerically by a Petrov-Galerkin Finite Element Method, which has been proved to be 2nd-order accurate in time and 4th-order in space. The comparison between the exact and numerical solutions of progressive waves shows that this numerical scheme is quite accurate, stable and efficient. It is also shown that any local disturbance that will spread, have a full growth and finally form two progressive waves propagating in both directions. The shape and the speed of the long term progressive waves are determined by the system itself, and do not depend on the details of the initial values.

Key words reaction-diffusion equation, Petrov-Galerkin Finite Element Method, progressive wave