

DOI: 10.11830/ISSN.1000-5013.202404026



Gray-Scott 模型的高阶紧致 线性化差分格式

张馨心, 陈心妍, 蔡耀雄

(华侨大学 数学科学学院, 福建 泉州 362021)

摘要: 研究 Dirichlet 边界条件下的整数阶 Gray-Scott 方程。考虑将紧差分方法与算子分裂算法相结合, 提出一种高效求解 Gray-Scott 方程的数值格式。首先, 基于算子分裂思想将原问题分解为线性部分与非线性部分; 然后, 线性子问题采用 4 阶紧致差分格式, 非线性子问题采用 Crank-Nicolson 差分格式, 并且利用 Rubin-Graves 线性化技术处理非线性项, 建立线性求解格式, 实现有效求解; 最后, 严格证明了格式的稳定性, 给出其误差估计, 并且通过数值实验验证了格式的有效性。

关键词: Gray-Scott 方程; 算子分裂; 4 阶紧致差分格式; Rubin-Graves 线性化技术; 稳定性; 有效性

中图分类号: O 241.8

文献标志码: A

文章编号: 1000-5013(2025)03-0347-09

High-Order Compact Linearized Difference Scheme for Gray-Scott Model

ZHANG Xinxin, CHEN Xinyan, CAI Yaoxiong

(School of Mathematical Sciences, Huaqiao University, Quanzhou 362021, China)

Abstract: The Gray-Scott equation of integer order with Dirichlet boundary condition is studied. We propose a numerical scheme for solving efficiently the Gray-Scott equation by combining the compact difference method and the operator splitting algorithm. Firstly, the original problem is decomposed into linear and nonlinear parts based on the operator splitting idea. Then the linear subproblem is solved by using the fourth-order compact difference scheme, the nonlinear subproblem is solved by using the Crank-Nicolson difference scheme, and the nonlinear terms are handled by using the Rubin-Graves linearization technique to build a linear solving format to achieve an efficient solution. Finally, the stability of the scheme is proved, the error estimate of given, and the validity of the scheme is verified by numerical experiments.

Keywords: Gray-Scott equation; operator splitting; fourth-order compact difference scheme; Rubin-Graves linearization technique; stability; validity

Gray-Scott(GS)模型是一种用于描述反应-扩散的数学模型, 该模型最初由物理学家 Gray 和 Scott 在 1984 年提出^[1], 广泛用于研究自然界和工业过程中的模式形成和结构动力学^[2-9], 主要关注两种化学物质之间的反应和扩散过程。整数阶 GS 模型通常可以写成以下形式

$$\begin{cases} u_t = \mu_u \Delta u - uv^2 + F(1-u), & (x, t) \in \Omega \times (0, T], \quad \mu_u > 0, \\ v_t = \mu_v \Delta v + uv^2 - (F + \kappa)v, & (x, t) \in \Omega \times (0, T], \quad \mu_v > 0. \end{cases} \quad (1)$$

收稿日期: 2024-04-10

通信作者: 蔡耀雄(1979-), 男, 讲师, 主要从事偏微分方程数值解及理论的研究。E-mail: cai_yx@126.com。

基金项目: 福建省自然科学基金资助项目(2020J01074)

式(1)中: u, v 分别表示 2 种反应物的浓度; μ_u, μ_v 分别表示 2 种反应物扩散的速率; $F \geq 0$ 表示进料速率; $\kappa \geq 0$ 表示第 2 次反应的衰减速率。

Gray-Scott 模型以其在反应-扩散系统中产生复杂时空结构的能力而闻名,如斑点、条纹等,这使其在研究自然界中的图案形成^[10]、生物体内的化学过程等方面得到了广泛应用。研究人员通过调整模型的参数,可以模拟出不同条件下的系统行为,从而更好地理解复杂系统中的动力学现象。

Pearson^[11]进行了 GS 模型的细致数值探索,揭示了解中复杂结构的存在,然而,他采用的是一种基本的积分方案,引发了有关数值伪影的讨论。Doelman^[12]对一维 GS 模型中奇异同次元静止解和空间周期性静止解进行了线性稳定性分析,这种分析对于解释自复制脉冲现象具有一定的影响。Wang 等^[13]提出了一个二阶的有限差分方案,用于处理分数阶 GS 模型,并进行了时间稳定性的分析。另一方面,Zhang 等^[14]则提出了一种非线性空间分数阶反应扩散方程的稳定半隐式傅里叶谱方法,这一方法已成功应用于解决分数阶 GS 模型的问题。Zhai 等^[15]利用半隐式谱延迟校正(SDC)方法与算子分裂方案相结合模拟分数阶 GS 模型,并验证了该方法的稳定性与收敛性。

研究方程(1)在 Dirichlet 边界条件及如下初值条件下的 GS 模型,即

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x), \quad x \in \Omega。$$

其中, $\Omega = [-L, L]$ 为有界区域。

利用算子分裂思想^[16],可将原始方程分裂为线性部分和非线性部分。其中,线性部分的数值解算子记为 S_A ,非线性部分的数值解算子记为 S_B 。算子分裂格式有 Marchuk-Strang 分裂格式、Trotter-Lie 分裂格式及对称加权分裂格式等,本文采用 Marchuk-Strang 算子分裂格式^[17]求解 Gray-Scott 模型。

1 算子分裂法求解 Gray-Scott 方程

1.1 Strang 算子分裂方法

运用 Strang 算子分裂求解模式如下:1) 计算前半步算子 S_A ,其中 $t \in [t_k, t_{k+\frac{1}{2}}]$;2) 计算完整一步算子 S_B ,其中 $t \in [t_k, t_{k+1}]$,且 $u^{t_k} = u^{t_k+\frac{1}{2}}$;3) 计算后半步算子 S_A ,其中 $t \in [t_{k+\frac{1}{2}}, t_{k+1}]$,且 $u^{t_{k+\frac{1}{2}}} = u^{t_{k+1}}$ 。

在 Gray-Scott 方程(1)中,根据分裂策略,令 S_A 和 S_B 是以下线性部分和非线性部分相关的精确解算子,将其分为线性部分

$$\left. \begin{aligned} u_t &= \mu_u \Delta u - Fu, \\ v_t &= \mu_v \Delta v - (F + \kappa)v \end{aligned} \right\} \tag{2}$$

与非线性部分

$$\left. \begin{aligned} u_t &= -uv^2 + F, \\ v_t &= uv^2。 \end{aligned} \right\} \tag{3}$$

则问题(1)可以通过三步格式进行求解,即

$$u(x, t + \tau) \approx S_A\left(\frac{\tau}{2}\right)S_B(\tau)S_A\left(\frac{\tau}{2}\right)u(x, t)。$$

式(4)中: $u = (u, v)^T$ 。

1.2 线性子问题的数值近似: $S_A \rightarrow S_A^h$

取空间区域为 $[-L, L]$,空间节点数为 N ,则空间步长为 $h = \frac{2L}{N}$,空间节点可表示为 $x_i = -L + ih$;取时间区域为 $[0, T]$,时间节点数为 M ,则时间步长为 $\tau = \frac{T}{M}$,时间节点可表示为 $t_k = k\tau$, u_i^k 与 $u(x_i, t_k)$ 分别表示数值解与精确解。

对于线性子问题 S_A ,在时间上,采用 Crank-Nicolson 方法对其进行离散化得到

$$\left. \begin{aligned} \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} &= \mu_u (u_{xx})_i^{k+\frac{1}{2}} - F u_i^{k+\frac{1}{2}}, \\ \frac{v_i^{k+1} - v_i^k}{\tau} &= \mu_v (v_{xx})_i^{k+\frac{1}{2}} - (F + \kappa) v_i^{k+\frac{1}{2}}。 \end{aligned} \right\} \tag{5}$$

在空间上,令二阶中心差分算子为

$$\delta_x^2 u_i = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2}. \quad (6)$$

进一步,引进 4 阶帕德逼近格式

$$u''(x_i) = \frac{\delta_x^2 u(x_i)}{1 + \frac{h^2}{12} \delta_x^2} + O(h^4). \quad (7)$$

结合(5)式及 Crank-Nicolson 方法可得到全离散格式

$$\left. \begin{aligned} \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} &= \frac{\mu_u}{2} \left[\frac{\delta_x^2 u_i^k}{1 + \frac{h^2}{12} \delta_x^2} + \frac{\delta_x^2 u_i^{k+1}}{1 + \frac{h^2}{12} \delta_x^2} \right] - \frac{F}{2} (u_i^k + u_i^{k+1}), \\ \frac{v_i^{k+1} - v_i^k}{\tau} &= \frac{\mu_v}{2} \left[\frac{\delta_x^2 v_i^k}{1 + \frac{h^2}{12} \delta_x^2} + \frac{\delta_x^2 v_i^{k+1}}{1 + \frac{h^2}{12} \delta_x^2} \right] - \frac{F + \kappa}{2} (v_i^k + v_i^{k+1}). \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

进一步化简为

$$\left. \begin{aligned} &\left(\frac{1}{12} - \frac{\tau \mu_u}{2h^2} + \frac{F\tau}{24} \right) u_{i-1}^{k+1} + \left(\frac{10}{12} + \frac{\tau \mu_u}{h^2} + \frac{10F\tau}{24} \right) u_i^{k+1} + \left(\frac{1}{12} - \frac{\tau \mu_u}{2h^2} + \frac{F\tau}{24} \right) u_{i+1}^{k+1} = \\ &\left(\frac{1}{12} + \frac{\tau \mu_u}{2h^2} - \frac{F\tau}{24} \right) u_{i-1}^k + \left(\frac{10}{12} - \frac{\tau \mu_u}{h^2} - \frac{10F\tau}{24} \right) u_i^k + \left(\frac{1}{12} + \frac{\tau \mu_u}{2h^2} - \frac{F\tau}{24} \right) u_{i+1}^k, \\ &\left(\frac{1}{12} - \frac{\tau \mu_v}{2h^2} + \frac{(F + \kappa)\tau}{24} \right) v_{i-1}^{k+1} + \left(\frac{10}{12} + \frac{\tau \mu_v}{h^2} + \frac{10(F + \kappa)\tau}{24} \right) v_i^{k+1} + \left(\frac{1}{12} - \frac{\tau \mu_v}{2h^2} + \frac{(F + \kappa)\tau}{24} \right) v_{i+1}^{k+1} = \\ &\left(\frac{1}{12} + \frac{\tau \mu_v}{2h^2} - \frac{(F + \kappa)\tau}{24} \right) v_{i-1}^k + \left(\frac{10}{12} - \frac{\tau \mu_v}{h^2} - \frac{10(F + \kappa)\tau}{24} \right) v_i^k + \left(\frac{1}{12} + \frac{\tau \mu_v}{2h^2} - \frac{(F + \kappa)\tau}{24} \right) v_{i+1}^k. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$\text{令 } a = \frac{1}{12} - \frac{\tau \mu_u}{2h^2} + \frac{F\tau}{24}, b = \frac{10}{12} + \frac{\tau \mu_u}{h^2} + \frac{10F\tau}{24}, c = \frac{1}{12} + \frac{\tau \mu_u}{2h^2} - \frac{F\tau}{24}, d = \frac{10}{12} - \frac{\tau \mu_u}{h^2} - \frac{10F\tau}{24}, e = \frac{1}{12} - \frac{\tau \mu_v}{2h^2} + \frac{(F + \kappa)\tau}{24}, f = \frac{10}{12} + \frac{\tau \mu_v}{h^2} + \frac{10(F + \kappa)\tau}{24}, g = \frac{1}{12} + \frac{\tau \mu_v}{2h^2} - \frac{(F + \kappa)\tau}{24}, h = \frac{10}{12} - \frac{\tau \mu_v}{h^2} - \frac{10(F + \kappa)\tau}{24}.$$

可以将式(9)进一步化简为

$$\left. \begin{aligned} au_{i-1}^{k+1} + bu_i^{k+1} + au_{i+1}^{k+1} &= cu_{i-1}^k + du_i^k + cu_{i+1}^k, \\ eu_{i-1}^{k+1} + fu_i^{k+1} + eu_{i+1}^{k+1} &= gu_{i-1}^k + hu_i^k + gu_{i+1}^k. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

式(10)的矩阵表达式为

$$\begin{cases} \mathbf{A}\mathbf{U}^{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{U}^k, \\ \mathbf{C}\mathbf{V}^{k+1} = \mathbf{D}\mathbf{V}^k. \end{cases}$$

其中:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \begin{pmatrix} b & a & & & \\ a & b & a & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & a \\ & & & a & b \end{pmatrix}_{(N-1) \times (N-1)}, & \mathbf{B} &= \begin{pmatrix} d & c & & & \\ c & d & c & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c \\ & & & c & d \end{pmatrix}_{(N-1) \times (N-1)}, \\ \mathbf{C} &= \begin{pmatrix} f & e & & & \\ e & f & e & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & e \\ & & & e & f \end{pmatrix}_{(N-1) \times (N-1)}, & \mathbf{D} &= \begin{pmatrix} h & g & & & \\ g & h & g & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & g \\ & & & g & h \end{pmatrix}_{(N-1) \times (N-1)}, \\ \mathbf{U}^{k+1} &= \begin{bmatrix} u_1^{k+1} \\ \vdots \\ u_{N-1}^{k+1} \end{bmatrix}, & \mathbf{U}^k &= \begin{bmatrix} u_1^k \\ \vdots \\ u_{N-1}^k \end{bmatrix}, & \mathbf{V}^{k+1} &= \begin{bmatrix} v_1^{k+1} \\ \vdots \\ v_{N-1}^{k+1} \end{bmatrix}, & \mathbf{V}^k &= \begin{bmatrix} v_1^k \\ \vdots \\ v_{N-1}^k \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

由于式(10)中 2 个式子的证明类似,故以式(10)的第 1 式为例利用 Fourier 方法进行稳定性分析。

定理 1 差分方程按照谱范数稳定的充分必要条件是对于任意满足 $0 \leq \tau \leq \tau_0, 0 \leq n\tau \leq T$ 的格式成立 $|G(\tau, k)| \leq 1$ 。

证明:格式(10)中第 1 式的无条件稳定性。首先,令 $\omega = \frac{\tau}{h^2}, u_i^k = p^k e^{i\alpha x_i}$, 则有

$$p^{k+1}(ae^{-i\omega h} + b + ae^{i\omega h}) = p^k(ce^{-i\omega h} + d + ce^{i\omega h})。$$

利用欧拉公式 $e^{i\omega h} = \cos \omega h + i \sin \omega h$, 可得到 $p^{k+1}(2a \cos \omega h + b) = p^k(2c \cos \omega h + d)$ 。

令 $\mu_u = \lambda_1$ 。则进一步可得到

$$p^{k+1} = \frac{2 \cos \omega h \left(\frac{1}{12} + \frac{\lambda_1}{2} \omega - \frac{F\tau}{24} \right) + \left(\frac{10}{12} - \lambda_1 \omega - \frac{10}{24} F\tau \right)}{2 \cos \omega h \left(\frac{1}{12} - \frac{\lambda_1}{2} \omega + \frac{F\tau}{24} \right) + \left(\frac{10}{12} + \omega \lambda_1 + \frac{10}{24} F\tau \right)} p^k。$$

最终可得到增长因子

$$G(\tau, k) = \frac{\frac{1}{6} \cos \omega h + \frac{10}{12} + \omega \lambda_1 (\cos \omega h - 1) - \frac{F\tau}{12} (\cos \omega h + 5)}{\frac{1}{6} \cos \omega h + \frac{10}{12} + \omega \lambda_1 (1 - \cos \omega h) + \frac{F\tau}{12} (\cos \omega h + 5)}。$$

由此可见, $|G(\tau, k)| \leq 1$ 。同理可证明格式(10)的第 2 式也是无条件稳定的, 故证得格式(10)是无条件稳定的, 即说明线性子问题 S_A 的算法格式是稳定的。

引理 1 对于任意的网格函数 $\Psi = \{(u_i, v_i)^T \mid 0 \leq i \leq N-1\}$ 满足 $\|S_A^{\tau, h} \Psi\| \leq \|\Psi\|$, 其中, $\|\Psi\|^2 = h^2 \sum_{0 \leq i \leq N-1} (u_i^2 + v_i^2)$ 。

证明:由上述线性子问题 S_A 的算法格式是无条件稳定即可得。

1.3 非线性子问题的数值近似: $S_B \rightarrow S_B^{\tau, h}$

对于非线性子问题 S_B , 在时间上, 采用 Crank-Nicolson 格式对其进行离散化得到

$$\left. \begin{aligned} \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} &= -(uv^2)^{k+\frac{1}{2}} + F, \\ \frac{v_i^{k+1} - v_i^k}{\tau} &= (uv^2)^{k+\frac{1}{2}}。 \end{aligned} \right\} \tag{11}$$

进一步化简得

$$\left. \begin{aligned} \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} &= -\frac{(uv^2)^{k+1}}{2} - \frac{(uv^2)^k}{2} + F, \\ \frac{v_i^{k+1} - v_i^k}{\tau} &= \frac{(uv^2)^{k+1}}{2} + \frac{(uv^2)^k}{2}。 \end{aligned} \right\} \tag{12}$$

根据 Rubin-Graves 线性化技术^[18] 处理非线性部分 uv^2 , 即

$$(uv^2)^{k+1} = (uvv)^{k+1} = u^{k+1}(v^k)^2 + u^k v^{k+1} v^k + u^k v^k v^{k+1} - 2u^k v^k v^k。 \tag{13}$$

结合式(11)与式(13)可得 Dirichlet 边界条件下的非线性子问题的格式为

$$\left. \begin{aligned} \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} &= -\frac{1}{2}(v_i^k)^2 u_i^{k+1} + \frac{1}{2}(v_i^k)^2 u_i^k - u_i^k v_i^k v_i^{k+1} + F, \\ \frac{v_i^{k+1} - v_i^k}{\tau} &= -\frac{1}{2}(v_i^k)^2 u_i^k + \frac{1}{2}(v_i^k)^2 u_i^{k+1} + u_i^k v_i^k v_i^{k+1}。 \end{aligned} \right\} \tag{14}$$

现使用“冻结系数”策略^[19] 讨论格式(14)的稳定性。由以下常数冻结 $(v^k)^2$ 和 $u^k v^k$ 两项, 即

$$\theta_1 := \max_{0 \leq k \leq M} \max_{0 \leq i \leq N-1} \{(v_i^k)^2\}, \quad \theta_2 := \max_{0 \leq k \leq M} \max_{0 \leq i \leq N-1} \{u_i^k v_i^k\}。$$

那么, 式(14)用矩阵可以表示为

$$X u_i^{k+1} = Y u_i^k + Z。 \tag{15}$$

式(15)中:

$$u_i^k = \begin{pmatrix} u_i^k \\ v_i^k \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\tau}{2} \theta_1 & \tau \theta_2 \\ -\frac{\tau}{2} \theta_1 & 1 - \tau \theta_2 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\tau}{2} \theta_1 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\tau}{2} \theta_2 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} F\tau \\ 0 \end{pmatrix}。$$

当 $1-\tau\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1\neq 0$ 时,矩阵 \mathbf{X} 可逆。于是有

$$\mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y}=\frac{1}{1-\tau\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1}\begin{pmatrix} 1+\frac{\tau}{2}\theta_1-\tau\theta_2-\frac{\tau^2}{2}\theta_1\theta_2 & -\tau\theta_2(1-\frac{\tau}{2}\theta_2) \\ \frac{\tau}{2}\theta_1(1+\frac{\tau}{2}\theta_1) & 1-\frac{\tau}{2}\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1-\frac{\tau^2}{4}\theta_1\theta_2 \end{pmatrix}。$$

记

$$\begin{cases} g_{11}=1+\frac{\tau}{2}\theta_1-\tau\theta_2-\frac{\tau^2}{2}\theta_1\theta_2, g_{12}=-\tau\theta_2\left(1-\frac{\tau}{2}\theta_2\right), \\ g_{21}=\frac{\tau}{2}\theta_1\left(1+\frac{\tau}{2}\theta_1\right), g_{22}=1-\frac{\tau}{2}\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1-\frac{\tau^2}{4}\theta_1\theta_2。 \end{cases}$$

于是有

$$(\mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y})^T(\mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y})=\frac{1}{\left(1-\tau\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2}\begin{pmatrix} g_{11}^2+g_{21}^2 & g_{11}g_{12}+g_{21}g_{22} \\ g_{11}g_{12}+g_{21}g_{22} & g_{12}^2+g_{22}^2 \end{pmatrix}。$$

假设

$$\tau\leqslant\frac{1}{|\theta_1-2\theta_2|}。 \tag{16}$$

于是存在一个常数 C_1 ,使得

$$\begin{aligned} \frac{g_{11}^2+g_{21}^2+|g_{11}g_{12}+g_{21}g_{22}|}{\left(1-\tau\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2} &\leqslant\frac{g_{11}^2+g_{21}^2+|g_{11}g_{12}|+|g_{21}g_{22}|}{\left(1-\tau\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2}=\left[1-\frac{\frac{\tau^2}{2}\theta_1\theta_2}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right]^2+ \\ &\quad \frac{\tau^2}{4}\frac{\theta_1^2\left(1+\frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2}{\left(1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)\right)^2}+\tau\left|\frac{\theta_2\left(1-\frac{\tau}{2}\theta_2\right)}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right|\cdot\left|1-\frac{\frac{\tau^2}{2}\theta_1\theta_2}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right|+ \\ &\quad \frac{\tau}{2}\left|\frac{\theta_1\left(1+\frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right|\cdot\left|1+\frac{\frac{\tau}{2}\theta_2\left(1-\frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right|\leqslant 1+C_1\tau, \end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned} \frac{|g_{11}g_{12}+g_{21}g_{22}|+g_{12}^2+g_{22}^2}{\left(1-\tau\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2} &\leqslant\frac{|g_{11}g_{12}|+|g_{21}g_{22}|+g_{12}^2+g_{22}^2}{\left(1-\tau\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2}=\tau\left|\frac{\theta_2\left(1-\frac{\tau}{2}\theta_2\right)}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right|\cdot \\ &\quad \left|1-\frac{\frac{\tau^2}{2}\theta_1\theta_2}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right|+\frac{\tau}{2}\left|\frac{\theta_1\left(1+\frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right|\cdot\left|1+\frac{\frac{\tau}{2}\theta_2\left(1-\frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right|+ \\ &\quad \tau^2\frac{\theta_2^2\left(1-\frac{\tau}{2}\theta_2\right)^2}{\left(1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)\right)^2}+\left[1+\frac{\frac{\tau}{2}\theta_2\left(1-\frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1+\tau\left(\frac{\theta_1}{2}-\theta_2\right)}\right]^2\leqslant 1+C_1\tau。 \end{aligned}$$

结合上述 2 个不等式,得到

$$\|\mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y}\|_2^2\leqslant\|(\mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y})^T(\mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y})\|_\infty\leqslant 1+C_1\tau。 \tag{17}$$

式(17)中: $\|\mathbf{X}\|_2$ 和 $\|\mathbf{X}\|_\infty$ 是 \mathbf{X} 的 2 范数和 ∞ 范数。

因此,通过式(15)和式(17)有定理 2。

引理 2 在式(16)的条件下,对于任何一种网格剖分方法 $\mathbf{U}=\{(u_i,v_i)^T\mid 0\leqslant i\leqslant N-1\}$,有 $\|\mathbf{S}_B^{i,h}\mathbf{U}\|\leqslant\sqrt{1+C_1\tau}\|\mathbf{U}\|$ 。

结合式(1)、(10)、(14),可以得到 Dirichlet 边界条件下 Gray-Scott 方程的高效 4 阶算子分裂格式

$$\left. \begin{aligned} \boldsymbol{U}^* &= \boldsymbol{A}^{-1} \boldsymbol{B} \left(\frac{\tau}{2} \right) \boldsymbol{U}^k, \\ \boldsymbol{V}^* &= \boldsymbol{C}^{-1} \boldsymbol{D} \left(\frac{\tau}{2} \right) \boldsymbol{V}^k, \\ \frac{\boldsymbol{U}^{**} - \boldsymbol{U}^*}{\tau} &= -\frac{1}{2} (\boldsymbol{V}^*)^2 \boldsymbol{U}^{**} - \boldsymbol{U}^* \boldsymbol{V}^* \boldsymbol{V}^{**} + \frac{1}{2} (\boldsymbol{V}^*)^2 \boldsymbol{U}^* + \boldsymbol{F}, \\ \frac{\boldsymbol{V}^{**} - \boldsymbol{V}^*}{\tau} &= \frac{1}{2} (\boldsymbol{V}^*)^2 \boldsymbol{U}^{**} + \boldsymbol{U}^* \boldsymbol{V}^* \boldsymbol{V}^{**} - \frac{1}{2} (\boldsymbol{V}^*)^2 \boldsymbol{U}^*, \\ \boldsymbol{U}^{k+1} &= \boldsymbol{A}^{-1} \boldsymbol{B} \left(\frac{\tau}{2} \right) \boldsymbol{U}^{**}, \\ \boldsymbol{V}^{k+1} &= \boldsymbol{C}^{-1} \boldsymbol{D} \left(\frac{\tau}{2} \right) \boldsymbol{V}^{**}. \end{aligned} \right\} \tag{18}$$

式(18)中: $(\boldsymbol{U}^*, \boldsymbol{V}^*)$ 和 $(\boldsymbol{U}^{**}, \boldsymbol{V}^{**})$ 均是中间变量; $\boldsymbol{F} = F(1, \cdots, 1)^T$ 。

根据式(4),算法(18)也可表示为

$$\boldsymbol{\Phi}^{m+1} = S_A^{\frac{\tau}{2}, h} S_B^{\tau, h} S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \boldsymbol{\Phi}^m.$$

上式中: $\boldsymbol{\Phi}^m = (U^m, V^m)^T$ 是格式(18)在时间 t_m 处的数值解; $S_A^{\frac{\tau}{2}, h}$ 和 $S_B^{\tau, h}$ 分别是 S_A 和 S_B 的数值近似。

注 在条件(16)的情况下,可以验证矩阵 \boldsymbol{X} 的行列式满足 $|\boldsymbol{X}| = 1 - \tau\theta_2 + \frac{\tau}{2}\theta_1, |\boldsymbol{X}| \in \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$, 因此, \boldsymbol{X} 为可逆矩阵。

2 稳定性和收敛性理论分析

2.1 稳定性分析

定理 2 在条件(16)的情况下,对于问题(1)的算子分裂格式(17)是稳定的,有

$$\|\boldsymbol{\Phi}^{k+1}\| \leq e^{\frac{C_1 T}{2}} \|\boldsymbol{\Phi}^0\|. \tag{19}$$

证明:由引理 1 及引理 2,有

$$\|\boldsymbol{\Phi}^{k+1}\| = \|S_A^{\frac{\tau}{2}, h} S_B^{\tau, h} S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \boldsymbol{\Phi}^k\| \leq \|S_B^{\tau, h} S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \boldsymbol{\Phi}^k\| \leq \sqrt{1 + C_1 \tau} \|S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \boldsymbol{\Phi}^k\| \leq \sqrt{1 + C_1 \tau} \|\boldsymbol{\Phi}^k\| \leq e^{\frac{C_1 T}{2}} \|\boldsymbol{\Phi}^0\|.$$

定理 2 证明完毕。

2.2 收敛性分析

假设所研究模型(2)在 Dirichlet 边界条件下的解 $u(x, t)$ 与 $v(x, t)$ 满足正则性条件

$$u(x, t) \in H^3(0, T; H^S(\Omega)), \quad v(x, t) \in H^3(0, T; H^S(\Omega)), \quad S > 1. \tag{20}$$

需要以下引理从而证明格式的收敛性。

引理 3 对于任意函数 $u, v \in H^3(0, T; H^2(\Omega))$, 成立不等式

$$\|I^h S_A(\tau) \boldsymbol{u} - S_A^{\tau, h} I^h \boldsymbol{u}\| \leq C_2 \tau (\tau^2 + h^4).$$

上式中: $\boldsymbol{u} = (u, v)^T$; C_2 是与 τ, h 无关的正常数。

证明:由于式(9)是基于时间上的二阶 Crank-Nicolson 格式及空间上的 4 阶紧致差分格式得到的, 因此, 可得引理 3 的结论。

引理 4 对于任意函数 u, v 满足 $u, v \in H^3(0, T; L^2(\Omega))$, 可得到结论

$$\|I^h S_B(\tau) \boldsymbol{u} - S_B^{\tau, h} I^h \boldsymbol{u}\| \leq C_3 \tau^3.$$

证明:由于式(13)是基于时间上的二阶 Crank-Nicolson 格式与二阶 Rubin-Graves 线性化得到的, 因此, 可以得到引理 4 的结论。

定义 $\tilde{\boldsymbol{u}}(x, t) = (\tilde{u}(x, t), \tilde{v}(x, t))^T$ 为算子分裂方案(4)的精确解, 可得整体收敛性结论如下。

定理 3 设 $\boldsymbol{u}^k = (u(t_k), v(t_k))^T$ 与 $\boldsymbol{\Phi}^k = (U^k, V^k)^T$ 分别是方程(1)在 Dirichlet 边界条件下与算法(18)在时间节点 t_k 处的解, 则在满足式(16)及式(20)的正则性条件下, 可以得到结论

$$\|\boldsymbol{\Phi}^{k+1} - I^h \boldsymbol{u}^{k+1}\| \leq C(\tau^2 + h^4).$$

上式中: C 是正常数。

证明:对于 $0 \leq k \leq M$, 成立不等式

$$\|\Phi^{k+1} - I^h u^{k+1}\| \leq \|\Phi^{k+1} - I^h \tilde{u}^{k+1}\| + \|I^h \tilde{u}^{k+1} - I^h u^{k+1}\|. \tag{21}$$

根据文献[20]可得到

$$\|I^h \tilde{u}^{k+1} - I^h u^{k+1}\| \leq C_4 \tau^2. \tag{22}$$

式(22)中: C_4 是正常数。

根据引理 1 与引理 3, 式(21)右侧的第 1 项满足

$$\begin{aligned} \|\Phi^{k+1} - I^h \tilde{u}^{k+1}\| &= \left\| S_A^{\frac{\tau}{2}, h} S_B^{\tau, h} S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \Phi^k - I^h S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) S_B(\tau) S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| \leq \\ &\left\| S_A^{\frac{\tau}{2}, h} S_B^{\tau, h} S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \Phi^k - S_A^{\frac{\tau}{2}, h} I^h S_B(\tau) S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| + \\ &\left\| S_A^{\frac{\tau}{2}, h} I^h S_B(\tau) S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k - I^h S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) S_B(\tau) S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| \leq \\ &\left\| S_B^{\tau, h} S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \Phi^k - I^h S_B(\tau) S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| + C_2 \tau(\tau^2 + h^4). \end{aligned} \tag{23}$$

再根据引理 2 与引理 4, 式(23)中的第 1 项满足

$$\begin{aligned} \left\| S_B^{\tau, h} S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \Phi^k - I^h S_B(\tau) S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| &\leq \left\| S_B^{\tau, h} S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \Phi^k - S_B^{\tau, h} I^h S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| + \\ &\left\| S_B^{\tau, h} I^h S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k - I^h S_B(\tau) S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| \leq \\ &\sqrt{1 + C_1 \tau} \left\| S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \Phi^k - I^h S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| + C_3 \tau^3. \end{aligned} \tag{24}$$

再次利用引理 1 与引理 3, 可得到

$$\begin{aligned} \left\| S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \Phi^k - I^h S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| &\leq \left\| S_A^{\frac{\tau}{2}, h} \Phi^k - S_A^{\frac{\tau}{2}, h} I^h \tilde{u}^k \right\| + \left\| S_A^{\frac{\tau}{2}, h} I^h \tilde{u}^k - I^h S_A\left(\frac{\tau}{2}\right) \tilde{u}^k \right\| \leq \\ &\|\Phi^k - I^h \tilde{u}^k\| + C_2 \tau(\tau^2 + h^4). \end{aligned} \tag{25}$$

结合式(23)~(25)可得式(21)右侧的第 1 项满足

$$\|\Phi^{k+1} - I^h \tilde{u}^{k+1}\| \leq \sqrt{1 + C_1 \tau} \|\Phi^k - I^h \tilde{u}^k\| + (\sqrt{1 + C_1 \tau} + 1) C_2 \tau(\tau^2 + h^4) + C_3 \tau^3. \tag{26}$$

结合 $\|\Phi^0 - I^h \tilde{u}^0\| = 0$, 可由 Gronwall 不等式得到

$$\|\Phi^{k+1} - I^h \tilde{u}^{k+1}\| \leq C(\tau^2 + h^4). \tag{27}$$

最后, 结合式(21)、(22)、(27)可以证明

$$\|\Phi^{k+1} - I^h u^{k+1}\| \leq C(\tau^2 + h^4).$$

定理证明完毕。

3 数值算例

3.1 符号说明

通过具体的数值算例验证 4 阶高精度算子分裂格式的收敛阶和稳定性。为便于分析, 对符号进行解释, 即

$$\begin{aligned} \text{Err}_\infty &= \max_{1 \leq i \leq N, 1 \leq k \leq M} |u(x_i, t_k) - u_i^k|, \\ \text{Err}_2 &= \sqrt{h} \sqrt{\sum_{i=1}^N (u(x_i, t_k) - u_i^k)^2}. \end{aligned}$$

在验证格式的高效性及有效性时, 通过如下原则进行考虑。

假设 $\text{Err}_\infty(\tau, h) = O(\tau^r + h^s)$, 考虑空间精度, 当时间剖分网格加密到一定程度, 即 τ 取值充分小时,

满足 $\text{Err}_\infty(h) = c_1 h^s$, 且有 $s \approx \log_2 \frac{\text{Err}_\infty(\tau, h_1)}{\text{Err}_\infty(\tau, h_2)}$ 成立。

考虑时间精度, 当空间剖分网格加密到一定程度, 即 h 取值充分小时, 满足 $\text{Err}_\infty(\tau) = c_2 \tau^r$, 有 $r \approx$

$\log_2 \frac{\text{Err}_\infty(\tau_1, h)}{\text{Err}_\infty(\tau_2, h)}$ 成立。

3.2 收敛性验证

要验证数值格式(18)的收敛性,考虑初始条件

$$\begin{cases} u_0(x)=\cos(2.5\pi x), & x\in[-1,1], \\ v_0(x)=\cos(2.5\pi x), & x\in[-1,1]. \end{cases}$$

首先,考虑空间方向阶数,参数选取 $\mu_u=1,\mu_v=1,F=1,\kappa=1$ 。固定时间剖分 $M=3\ 000$,时间方向的区间 $T=0.1,U,V$ 的空间收敛阶分别如表 1、2 所示。由表 1、2 可知:空间方向接近 4 阶精度,与理论分析一致。

表 1 U 的空间收敛阶($T=0.1,M=3\ 000$)
Tab. 1 Spatial convergence rate of U ($T=0.1,M=3\ 000$)

N	$U\text{-Err}_\infty$	Rate	$U\text{-Err}_2$	Rate
4	1.144 5	—	1.349 6	—
8	$6.404\ 7\times10^{-2}$	4.227 3	$6.794\ 8\times10^{-2}$	4.456 7
16	$3.929\ 9\times10^{-3}$	4.037 0	$3.571\ 3\times10^{-3}$	4.361 9
32	$2.834\ 8\times10^{-4}$	3.723 3	$2.282\ 6\times10^{-4}$	3.955 5

表 2 V 的空间收敛阶($T=0.1,M=3\ 000$)
Tab. 2 Spatial convergence rate of V ($T=0.1,M=3\ 000$)

N	$V\text{-Err}_\infty$	Rate	$V\text{-Err}_2$	Rate
4	2.578 7	—	2.307 2	—
8	$7.719\ 5\times10^{-2}$	5.779 7	$7.324\ 4\times10^{-2}$	5.612 5
16	$4.037\ 4\times10^{-3}$	4.372 6	$4.028\ 7\times10^{-3}$	4.263 9
32	$2.443\ 2\times10^{-4}$	4.065 1	$2.438\ 7\times10^{-4}$	4.064 5

然后,考虑时间方向阶数,参数选取 $\mu_u=0.01,\mu_v=1,F=0.03,\kappa=0.062$ 。固定空间剖分 $N=3\ 000,T=1,U,V$ 的时间收敛阶分别如表 3、4 所示。由表 3、4 可知:随着网格的加密,最大误差和 L_2 误差均逐渐减小,且时间方向接近 2 阶精度,与理论分析一致。

表 3 U 的时间收敛阶($T=1,N=3\ 000$)
Tab. 3 Temporal convergence rate of U ($T=1,N=3\ 000$)

M	$U\text{-Err}_\infty$	Rate	$U\text{-Err}_2$	Rate
10	$5.176\ 8\times10^{-1}$	—	$3.367\ 7\times10^{-1}$	—
20	$1.427\ 4\times10^{-1}$	1.904 4	$9.089\ 3\times10^{-2}$	1.924 9
40	$3.536\ 1\times10^{-2}$	2.009 1	$2.300\ 8\times10^{-2}$	1.987 6
80	$8.750\ 5\times10^{-3}$	2.010 2	$5.760\ 0\times10^{-3}$	1.998 6

表 4 V 的时间收敛阶($T=1,N=3\ 000$)
Tab. 4 Temporal convergence rate of V ($T=1,N=3\ 000$)

M	$V\text{-Err}_\infty$	Rate	$V\text{-Err}_2$	Rate
10	1.053 2	—	$6.233\ 8\times10^{-1}$	—
20	$2.578\ 2\times10^{-1}$	2.021 1	$1.731\ 8\times10^{-1}$	1.897 3
40	$5.895\ 8\times10^{-2}$	2.091 2	$4.445\ 9\times10^{-2}$	1.973 6
80	$1.415\ 6\times10^{-2}$	2.040 8	$1.119\ 7\times10^{-2}$	1.992 6

4 结束语

提出求解 Gray-Scott 模型高效的算子分裂方法,并对其进行严格的理论分析,得到时间具有 2 阶精度、空间具有 4 阶精度的数值方法。数值实验的结果表明,该方法具有良好的稳定性与有效性。

参考文献:

[1] GRAY P,SCOTT S K. Autocatalytic reactions in the CSTR: Oscillations and instabilities in the system $A+2B\rightarrow 3B; B\rightarrow C$ [J]. Chemical Engineering Science,1984,39:1087-1097. DOI:10.1016/0009-2509(84)87017-7.
[2] MOTTONI P,ROTHER F. A singular perturbation analysis for a reaction-diffusion system describing pattern forma-

- tion[J]. *Studies in Applied Mathematics*, 1980, 63(3): 227-247. DOI: 10.1002/sapm1980633227.
- [3] JUDD S L, SILBER M. Simple and superlattice turing patterns in reaction-diffusion systems; Bifurcation, bistability, and parameter collapse[J]. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 2000, 136(1/2): 45-65. DOI: 10.1016/S0167-2789(99)00154-2.
- [4] HALE J K, PELETIER L A, TROY W C. Stability and instability in the Gray-Scott model: The case of equal diffusivities[J]. *Applied Mathematics Letters*, 1999, 12(4): 59-65. DOI: 10.1016/S0893-9659(99)00035-X.
- [5] MURATOV C B, OSIPOV V V. Spike autosolitons in the Gray-Scott model[EB/OL]. (1998-05-31)[2024-03-02]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.patt-sol/9804001>.
- [6] WANG Mi, YI Fengqi. On the dynamics of the diffusive Field-Noyes model for the Belousov-Zhabotinskii reaction[J]. *Journal of Differential Equations*, 2022, 318: 443-479. DOI: 10.1016/j.jde.2022.02.031.
- [7] KUTO K, YAMADA Y. Positive solutions for Lotka-Volterra competition systems with large cross-diffusion[J]. *Applicable Analysis*, 2010, 89(7): 1037-1066. DOI: 10.1080/00036811003627534.
- [8] KUANG Y, BERETTA E. Global qualitative analysis of a ratio-dependent predator-prey system[J]. *Journal of Mathematical Biology*, 1998, 36: 389-406. DOI: 10.1007/s002850050105.
- [9] FU Shengmao, CUI Shangbin. Persistence in a periodic competitor-competitor-mutualist diffusion system[J]. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 2001, 263(1): 234-245. DOI: 10.1006/jmaa.2001.7612.
- [10] CHEN W, WARD M J. The stability and dynamics of localized spot patterns in the two-dimensional Gray-Scott model[J]. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 2011, 10(2): 582-666. DOI: 10.1137/09077357X.
- [11] PEARSON J E. Complex patterns in a simple system[J]. *Science*, 1993, 261(5118): 189-192. DOI: 10.1126/science.261.5118.189.
- [12] DOELMAN A, GARDNER R A, KAPER T J. Stability analysis of singular patterns in the 1D Gray-Scott model: A matched asymptotics approach[J]. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1998, 122(1/2/3/4): 1-36. DOI: 10.1016/S0167-2789(98)00180-8.
- [13] WANG Tingting, SONG Fangying, WANG Hong, *et al.* Fractional Gray-Scott model: Well-posedness, discretization, and simulations[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2019, 347: 1030-1049. DOI: 10.1016/j.cma.2019.01.002.
- [14] ZHANG Hui, JIANG Xiaoyun, ZENG Fanhai, *et al.* A stabilized semi-implicit Fourier spectral method for nonlinear space-fractional reaction-diffusion equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, 405: 109141. DOI: 10.1016/j.jcp.2019.109141.
- [15] ZHAI Shuying, WENG Zhifeng, ZHUANG Qingqu, *et al.* An effective operator splitting method based on spectral deferred correction for the fractional Gray-Scott model[J]. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2023, 425: 114959. DOI: 10.1016/j.cam.2022.114959.
- [16] STRANG G. On the construction and comparison of difference schemes[J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1968, 5(3): 506-517. DOI: 10.1137/0705041.
- [17] LADICS T. Application of operator splitting in the solution of reaction-diffusion equations[C]// *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics*. Berlin: WILEY-VCH Verlag, 2007: 2020135-2020136. DOI: 10.1002/pamm.200701017.
- [18] RUBIN S G, GRAVES R A. Viscous flow solutions with a cubic spline approximation[J]. *Computers & Fluids*, 1975, 3(1): 1-36. DOI: 10.1016/0045-7930(75)90006-7.
- [19] PEROV A I, KOSTRUB I D, KAVERINA V K. Method of frozen coefficients in Hölder conditions[J]. *Differential Equations*, 2021, 57(5): 587-593. DOI: 10.1134/S0012266121050037.
- [20] DU Qiang, JU Lili, LI Xiao, *et al.* Stabilized linear semi-implicit schemes for the nonlocal Cahn-Hilliard equation[J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 363: 39-54. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.02.023.

(责任编辑: 黄晓楠 英文审校: 黄心中)