arXiv:2304.00826v1 [math.NA] 3 Apr 2023

抛物型生物模型中行波涌现的平衡格式范式

METE DEMIRCIGIL 和 BENOÎT FABRÈGES

摘要。我们提出一种方法，用于设计平衡数值格式，以研究数学生物学中抛物型模型的行波。我们将文献中已知的抛物型模型平衡技术，与所谓的 LeVeque-Yee公式相结合，并将后者用作扩散速度的动态估计。每个时间步都利用这一公式在移动坐标系中考察演化问题；在该坐标系下，方程存在适合采用平衡技术处理的稳态解。随后，再以保持平衡的方式将解移回静止坐标系。我们以抛物型反应扩散方程为例说明这一方法，包括 Fisher-Kolmogorov-Petrovsky-Piskunov方程，以及一类具有三次反应项、会呈现拉动波向推动波转变的方程。我们表明，这些数值格式能够以一致的方式同时捕捉波速，并在一定程度上捕捉所谓的 Bramson 延迟。

1. 引言

许多生物系统都可能引发空间扩散现象，例如啮齿动物入侵 [30] ，或大肠杆菌大肠杆菌 细胞在微通道 [1] 中的群体迁移。对此类现象进行数学建模，有助于更好地理解这些扩散现象，也提供了定量分析框架，例如可用于描述扩散速度。从数学角度看，受到广泛关注的模型包括反应扩散方程（例如 [11, 23, 3, 20, 10]）和趋化性的抛物型模型（例如 [22, 29]）。因此，种群扩散这一生物学问题可转化为一个数学问题：行波是否存在；即 是否存在在移动坐标系中保持稳态的解。

对生物模型中的行波进行数学研究，自然会引出对这些行波解进行数值研究的问题。从数值角度看，这一问题颇具难度，因为要在大范围区域上采用精确的数值格式，才能准确捕捉解在长时间内的行为。此外，数值格式还应满足以下要求：（i）准确求出扩散速度；（ii）准确求出行波剖面。事实上，这两个问题相互关联，因为从数学上说，波速与波形密切相关：波形在其前沿往往呈指数衰减，而其指数衰减参数可通过色散关系与波速联系起来。因此，我们希望找到能同时准确捕捉波速和指数衰减的数值格式；由于指数衰减的性质，即便在极低数量级上也需要极高的精度。

本文中，我们将采用所谓的良平衡（WB）格式来探讨这些问题。 [19] 提出了 WB 格式这一概念，简而言之，它指的是能够保持连续模型稳态的数值格式，即数值格式的稳态与连续模型稳态的离散化结果相一致。凭借这一性质，这类格式能够准确地计算稳态剖面。此类格式有多种不同的构造方法，读者可参阅 [13] ，了解相关技术的总体讨论。然而，良平衡格式的核心在于准确平衡通量项与源项。针对抛物型方程的良平衡格式已有相关研究[15, 17]。这些研究采用的策略是用 $\mathscr{L}$-样条函数在每个网格单元内插值（关于 $\mathscr{L}$-样条函数这一概念的概述，参见 [16]）；这些函数对应于问题的稳态解。由此得到的插值在每个网格单元内部连续，但在网格节点处可能存在 C^1-间断。随后，利用每个节点处的 C^1 缺陷进行时间积分。值得注意的是，文献中提及的大多数模型都是一维模型，但近年来，向高维拓展已引起广泛关注 [8, 14, 5]。

然而，在上述研究中，数值格式通常是为描述稳态而设计的，而非行波。虽然在某些情况下可以显式计算传播速度，并据此实现数值格式，但在大多数情况下，传播速度是先验地未知的。这增加了为行波设计WB格式的难度。例如，在文献 [6], 中，作者提出了

一种数值格式，该格式对速度为 $\sigma = 0$的波满足良平衡，并用它来捕捉非零速度的行波。因此，严格来说，所提出的格式对于观测到的行波并非WB格式。

在本文中，为了克服这一困难，我们采用一种动态测量扩散速度的策略。我们使用了 [24] 提出的这一扩散速度估计方法，最近该方法被称为 LeVeque-Yee公式 [25]。该公式基于以下观察：假设 $u(t,\ x) = u($ $x - \sigma t)$ 是一个行波剖面，并且在 $\pm\infty$ 处具有固定的极限值 $u(\pm\infty)$，那么u 满足：

$$\partial_t u + \sigma \partial_x u = 0.$$

对 $\mathbb{R}$ 积分并重新排列各项，我们得到以下恒等式：

$$\sigma = -\frac{\int_{\mathbb{R}} \partial_t u dx}{u(+\infty) - u(\infty)} \tag{1}$$

因此，LeVeque-Yee公式只是恒等式（1）的离散化版本：

$$\hat{\sigma}^n_{LY} = \frac{\Delta x}{t^n - t^{n-1}} \frac{\sum_i \left(u_i^{n-1} - u_i^n\right)}{u_I^n - u_0^n}, \tag{2}$$

其中，u 是在笛卡尔网格 $(t^n)_{n\in\mathbb{N}} \times (i\Delta x)_{i=0,\ \ldots,\ I}$上计算的。对于非行波解，恒等式（1）的右端仍有定义，并可解释为其扩散速度的估计值。

本文的贡献在于将 LeVeque-Yee公式作为动态速度估计方法，与抛物型方程的 WB 格式方法相结合。本文提出的数值格式具有以下共同结构：

（1）在每个时间步，通过 LeVeque-Yee公式（2）估计扩散速度 $\hat{}\sigma^n$ 。（2）在该时间步内，考虑以速度 $\hat{}\sigma^n$ 移动的坐标系中的问题，并使用 WB格式对解进行数值积分。（3）给定移动坐标系中经时间积分得到的解后，将解移回静止坐标系。为以 WB 方式完成此操作，在每个网格单元内对静止坐标系中的解进行插值，并将前一时间步得到的值作为边界条件。最后，为了获得静止坐标系网格上的值，取所得到的静止解在相应位置处的值。

In 为了说明这一方法，我们将其应用于如下类型的反应扩散方程：

$$\partial_t u - \partial_{xx} u = f(u). \tag{3}$$

关于这些类型方程，已有许多理论结果，可作为比较我们数值结果的基准。首先，我们研究 Fisher/Kolmogorov-Petrovsky-Piskunov（F/KPP）方程的情形 $f(u) = u(1 - u)$ [11, 23], 。该方程是抛物型方程中行波现象的典型范例。然后，我们考虑参数 $a > 0$ 下、形式为 $f(u) = u(1 - u)(1 + au)$ 的三次反应函数，该参数在 [20] 中引入。这一类函数具有重要意义，因为它展现了从拉动波到推动波的转变（见第 1.2 小节），可用于说明我们的数值格式在这些不同状态下的表现。最后需要强调的是，这一方法并不局限于反应扩散方程，也可应用于含有对流项的抛物型方程，例如细菌趋化性模型（例如 [22, 29]）。

1.1. **Fisher-Kolmogorov-Petrovsky-Piskunov方程**。 费希尔–科尔莫戈罗夫–彼得罗夫斯基–皮斯库诺夫（F/KPP）方程

$$\partial_t u - \partial_{xx} u = u(1 - u), \tag{4}$$

由 [11]和 [23], 分别独立提出，是反应扩散方程的原型。它描述了一个种群$u(t,\ x)$中个体的无偏运动（以扩散算子建模），以及种群内部的竞争（例如对资源的竞争），后者通过逻辑斯谛增长项 $u(1 - u)$来描述：密度 u越高，增长率 $1 - u$ 越低；当种群达到最大密度 $u = 1$时，增长率趋于饱和。该方程有两个稳态 $u = 0$ 和 $u = 1$: 前者不稳定，后者稳定。

干 值得注意的是，对于速度 σ ，方程（4）存在如下形式的非负行波解

$$u_\sigma(-\infty) = 1, u_\sigma(+\infty) = 0 \text{ and } u_\sigma(t, x) = u_\sigma(x - \sigma t) \tag{5}$$

当且仅当 $\sigma \geq \sigma^* = \sigma_{F/KPP} := 2$ （见 [11, 23, 3]）时。这些解实际上具有平移不变性，我们将约定 $u_\sigma(0) = \frac{1}{2}$，以此固定一个特定解。因此，该方程描述了状态 $u = 0$ 被状态 $u = 1$ 线性空间入侵。此外，对于各种各样的初始数据 u^0，可以证明，在某种我们将具体说明的意义下， u 方程（4）的解会收敛到速度最小的行波 $\sigma^* = \sigma_{F/KPP}$。例如，取满足以下条件的初始数据 u^0:

$$\liminf_{x \to -\infty} u^0(x) > 0 \text{ and } \limsup_{x \to +\infty} \frac{\partial_x u^0(x)}{u^0(x)} \leq -1. \tag{6}$$

然后，定义等值集 $x_c(t)$ 在 $c \in (0, 1)$ 时的位置:

$$x_c(t) = \sup\{x | u(t, x) = c\} \tag{7}$$

通过对方程 (4) 的概率解释（参见 [21, 26]，其中给出了基于偏微分方程论证的证明），Bramson [4], 以及后来 Uchiyama [32] 针对满足 (6) 的初始条件证明，存在一个常数 x_∞，它取决于初始数据和 c，使得:

$$x_c(t) = 2t - \frac{3}{2}\ln(t) + x_\infty + o(1) \text{ and } \lim_{t \to +\infty} u(t, x + x_c(t)) = u_{\sigma^*}(x). \tag{8}$$

$x_c(t)$ 渐近展开中的对数延迟此后被称为 Bramson 延迟。从某种意义上说，这一结果非常令人意外，因为它表明解收敛到速度为 $\sigma_{F/KPP}$ 的行波，但所处参考系经过了对数修正项的平移。正如 [21], 中所观察到的，当 $u \sim 0$ 时，这一对数修正项源于扩散与反应项之间微妙的相互作用。因此，从数值角度来看，捕捉 Bramson 延迟很可能是一项非常精细的任务，因为这要求在极低量级上准确计算 u 的剖面。据我们所知，目前尚无关于方程 (4) 数值格式的研究探讨 Bramson 延迟这一问题。

1.2. 从拉动波到推动波的转变：反应扩散方程。

在 [20], 中，作者引入了含三次项的反应扩散方程:

$$\partial_t u - \partial_{xx} u = u(1 - u)(1 + au). \tag{9}$$

对于该模型，最小波速对应的解可以显式求出，并且可以得到如下波速公式:

$$\sigma^* = \begin{cases} 2 & \text{if } a \leq 2 \\ \sqrt{\frac{a}{2}} + \sqrt{\frac{2}{a}} & \text{if } a > 2 \end{cases}.$$

该公式所揭示的二分性也体现为波的定性行为的二分性，分别称为拉动型或推动型区间 [31]。对于 $a \leq 2$，该波处于拉动型区间：从定性上看，扩散由前沿最前端的动力学驱动，其中 $u \sim 0$。对于 $a > 2$，该波处于推动态：从定性上看，扩散受到整个种群的贡献。

这些区间也反映在等值集 $x_c(t)$ 的渐近展开中。对于 $a > 2$，根据 [28],中证明的向行波指数收敛，我们有:

$$x_c(t) = \sigma^* t + x_\infty + o\left(e^{-\omega t}\right), \tag{10}$$

对于常数 $\omega > 0$。对于 $a < 2$，等值集同样经过对数 Bramson 延迟 [21] 的修正:

$$x_c(t) = 2t - \frac{3}{2}\ln(t) + x_\infty + o(1). \tag{11}$$

临界情形 $a = 2$ 近期已在 [12, 7] 中得到研究，并且根据 [2]中引入的术语，被称为推拉 机制。其等值集会因对数延迟而发生偏移，偏移常数为 $-\frac{1}{2}$:

$$x_c(t) = 2t - \frac{1}{2}\ln(t) + x_\infty + o(1). \tag{12}$$

1.3. **论文概述**。 本文将 LeVeque-Yee公式与抛物型方程 WB 格式的方法相结合，旨在设计适用于行波的 WB 数值格式。第 2 节介绍我们针对反应扩散方程设计 WB 数值格式的方法。第 3 节通过将 WB 格式应用于 F/KPP方程 (4) 和三次情形 (9)，对其进行数值评估。我们将该格式与算子分裂方法进行比较。结果表明，该格式能够准确捕捉传播速度；对于拉动情形，我们还将渐近扩展与渐近展开中的 Bramson 对数修正 (8,11,12) 进行比较。我们将展示，所提出的方法在拉动情形下尤其有效，但在推动情形下并不优于标准格式。

2. 反应扩散方程的 WB格式

为了以 WB 方式对反应扩散方程 (3) 进行数值求解，我们提出一种基于 [15] 的数值格式。不同之处在于，我们还研究了采用隐式欧拉法进行时间积分，而非标准的显式欧拉法。事实上，正如 [15], 中针对显式欧拉法所指出的，为保证稳定性，基本上需要满足抛物型 CFL 条件。对于隐式欧拉法，通过数值研究我们发现，满足双曲型 CFL 条件即可。此外，采用隐式方式处理时间积分的计算成本并不高，这是因为该问题具有特殊的三对角结构。

对于给定的 Δx，我们考虑一个笛卡尔网格 $(t^n) \times (x_i)$，其中 $x_i = i\Delta x$，用于 $i \in \mathbb{Z}$。由于缺乏满足 CFL 条件的先验界，我们动态设置时间点 (t^n)。我们设定 $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$。我们引入由点 $z_i = i\Delta z$, $\Delta z = \Delta x$, $C_{i+\frac{1}{2}} = (z_i,\ z_{i+1})$ 构成的平行网格，并考虑 $u_i^n \approx u(t^n,\ x_i)$。

数值格式的步骤可总结如下：

(1) 我们在剖面 u 上使用 LeVeque-Yee公式 (2)，以获得传播速度的估计值 $\hat{\sigma}^n$ 。(2) 给定 $\hat{\sigma}^n$，在时间区间 (t^n, t^{n+1}) 上，我们在移动坐标系 (t, z) 中考虑 $u = (t, x - \hat{\sigma}^n(t - t^n))$，并将其记为 $\bar{u}$，从而得到方程：

$$\partial_t \bar{u} - \hat{\sigma}^n \partial_z \bar{u} - \partial_{zz} \bar{u} = f(\bar{u}). \tag{13}$$

为了处理方程 (3) 右端的非线性项，我们通过在每个网格 $(t^n, t^{n+1}) \times \bar{C}_{i+\frac{1}{2}}$上考虑 $f(\bar{u}) \approx \bar{u}\bar{F^n}_{i+\frac{1}{2}}$，将该项的非线性贡献冻结，其中$\bar{u}^n_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_i^n + u_{i+1}^n}{2}$、 $\bar{F^n}_{i+\frac{1}{2}} = F(\bar{u}^n_{i+\frac{1}{2}})$ 和 $F(u) = {}^{f}{}_{(u)\,u}$。正如引言中所指出的，对于 $a \leq 2$，F/KPP方程 (4) 或方程 (9) 的动力学主要由剖面前沿处的动力学决定，其中 $u \sim 0$。在那里，方程 (3) 的线性化能够极好地逼近非线性方程。因此，可以合理地预期，以这种方式数值处理非线性不会对传播动力学产生太大影响。得益于对非线性的冻结，我们得到一个线性问题，可对其应用$\mathscr{L}$-样条插值方法，如 [15], 中所提出的，从而得到数值 $\bar{u}_i^{n+1}$，这些数值近似于 $\bar{u}(t^{n+1}, z_i)$。

(3) 接下来，将其变换回静止坐标系（$t,\ x$）。使用数值 $\bar{u}_i^{n+1}$ 对 $u(t^{n+1},\ x_i)$ 的值进行外推，即 $\bar{u}(t^{n+1},\ z_i + \hat{\sigma}^n \Delta t^n)$。为此，我们考虑每个网格单元 $C_{i+\frac{1}{2}}$ 上以下静止问题的解 $\hat{u}$：

$$\begin{cases} -\hat{\sigma}^n \partial_z \hat{u} - \partial_{zz} \hat{u} = \hat{u}\hat{F^n}_{i+\frac{1}{2}},\ \text{for } z \in \bar{C}_{i+\frac{1}{2}} \\ \hat{u}(z_i) = \bar{u}_i^{n+1} \text{ and } \hat{u}(z_{i+1}) = \bar{u}_{i+1}^{n+1}, \end{cases} \tag{14}$$

其中 $\hat{u}^{n+1}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\bar{u}_i^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1}}{2}$ 且 $\hat{F}^{n+1}_{i+\frac{1}{2}} = F\left(\hat{u}^{n+1}_{i+\frac{1}{2}}\right)$。最后，设：

$$u_i^{n+1} = \hat{u}(z_i + \hat{\sigma}^n \Delta t^n).$$

为了避免取用非直接相邻网格单元的值，我们施加如下 CFL 条件：

$$\hat{\sigma}^n \Delta t^n \leq \Delta x. \tag{15}$$

2.1. F/KPP方程的 LeVeque-Yee公式。 我们将 LeVeque-Yee公式应用于剖面 u，以获得传播速度的估计：

$$\hat{\sigma}^n = \frac{\Delta x}{\Delta t^{n-1}} \frac{\sum_i \left(u_i^{n-1} - u_i^n\right)}{u_I^n - u_0^n}. \tag{16}$$

最左端的值 u_0^n（分别是最右端的值 u_I^n）在实际中（可能经过短暂的过渡阶段后）会非常接近稳态 1（分别是稳态 0）。此外，为满足 CFL 条件 (15)，我们动态设定网格的时间节点，以避免对速度估计施加限制。

2.2. 移动坐标系中的 WB格式。 如上所述，我们考虑 f 在移动坐标系 $(t, z) = (t, x - \hat{\sigma}^n \Delta t^n)$ 中的演化，即 $\bar{u}(t, z) = u(t, z + \hat{\sigma}^n (t - t^n))$，其中 $\bar{u}$ 满足方程 (13)。为对该解进行数值近似，我们采用 [15]中提出的 $\mathscr{L}$-样条插值方法。该格式基于以下显式时间积分规则之一：

$$\bar{u}_i^{n+1} = \bar{u}^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} \left(L_{i+\frac{1}{2}}^n - R_{i-\frac{1}{2}}^n \right), \tag{17}$$

或者采用隐式时间积分规则：

$$\bar{u}_i^{n+1} = \bar{u}^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} \left(L_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - R_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right), \tag{18}$$

其中 $R_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}$，$L_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}$，$R_{i-\frac{1}{2}}^n$，$L_{i+\frac{1}{2}}^n$对应于两个插值函数在点 $z = z_i$处的数值通量，分别属于 $\bar{C}_{i-\frac{1}{2}}$和 $\bar{C}_{i+\frac{1}{2}}$。采用隐式时间积分时，通过求解线性定常问题可得到数值 $R_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}$，$L_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}$：

$$\begin{cases} -\hat{\sigma}^n \partial_z w - \partial_{zz} w = w \bar{F}_{i+\frac{1}{2}}^n, \text{ for } z \in \bar{C}_{i+\frac{1}{2}} \\ w(z_i) = \bar{u}_i^{n+1} \text{ and } w(z_{i+1}) = \bar{u}_{i+1}^{n+1}. \end{cases} \tag{19}$$

给定解 w，接着令 $R_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} := w'(z_{i+1}^-)$，并令 $L_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} := w'(z_i^+)$。可以将 $L_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - R_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}$视为 z_i处 C^1-光滑性的缺陷度量。因此，若 $\bar{u}$ 在整个空间上满足方程 (19)，则时间积分 (18) 将保持稳态；这尤其意味着它是二阶椭圆方程的 C^1 解。因此，该过程是良平衡的，因为数值格式以连续稳态的离散化作为稳态。对于显式情形，只需将 (19) 中的边界条件改为 $w(z_i) = \bar{u}_i^n$和 $w(z_{i+1}) = \bar{u}_{i+1}^n$，并按相同步骤进行。

从数值上看，我们观察到，在满足以下抛物型 CFL 条件时，显式时间积分是稳定的：

$$\Delta t^n \leq \frac{1}{2} \Delta x^2$$

系数$_{1\ 2}$ 可以略高一些，但当其为 0.6 时，我们观察到了不稳定性。这一经验 CFL 条件与 [15]中的显式 CFL 条件思路相同。对于隐式时间积分，我们观察到，在满足双曲型 CFL 条件 (15) 时，该格式仍然稳定。

现在我们来描述 $(L_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}, R_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})$ 与 $(\bar{u}_i^{n+1}, \bar{u}_{i+1}^{n+1})$ 之间的隐式（线性）关系。显式情形也可*mutatis mutandis* 采用相同的方法。我们求解问题 (19)，得到 $(\bar{u}_i^{n+1}, \bar{u}_{i+1}^{n+1})$。在网格单元$C_{i+\frac{1}{2}}$上，这是一个常系数二阶微分方程。我们计算其特征多项式的根：

$$\mu^2 + \hat{\sigma}^n \mu + \bar{F}_{i+\frac{1}{2}}^n = 0 \tag{20}$$

判别式为 $\Delta_{i+\frac{1}{2}}^n = (\hat{\sigma}^n)^2 - 4\bar{F}_{i+\frac{1}{2}}^n$，存在三种情况：

(1) 假设 $\Delta_{i+\frac{1}{2}}^n > 0$，则令 $\mu_{i+\frac{1}{2},\pm}^n = \frac{\hat{\sigma}^n \pm \sqrt{\Delta_{i+\frac{1}{2}}^n}}{2}$。那么对于 $z \in \bar{C}_{i+\frac{1}{2}}$，有：

$$w(z) = a^- e^{\mu_{i+\frac{1}{2},-}^n z} + a^+ e^{\mu_{i+\frac{1}{2},+}^n z}$$

因此，通过设置以下矩阵：

$$M = \begin{pmatrix} e^{\mu_{i+\frac{1}{2},-}^n z_i} & e^{\mu_{i+\frac{1}{2},+}^n z_i} \\ e^{\mu_{i+\frac{1}{2},-}^n z_{i+1}} & e^{\mu_{i+\frac{1}{2},+}^n z_{i+1}} \end{pmatrix} \text{ and } \tilde{M} = \begin{pmatrix} \mu_{i+\frac{1}{2},-}^n e^{\mu_{i+\frac{1}{2}}^{n-} z_i} & \mu_{i+\frac{1}{2},+}^n e^{\mu_{i+\frac{1}{2}}^{n+} z_i} \\ \mu_{i+\frac{1}{2},-}^n e^{\mu_{i+\frac{1}{2}}^{n-} z_{i+1}} & \mu_{i+\frac{1}{2},+}^n e^{\mu_{i+\frac{1}{2}}^{n+} z_{i+1}} \end{pmatrix}, \tag{21}$$

我们得到以下两个系统：

$$\begin{pmatrix} \bar{u}_i^{n+1} \\ \bar{u}_{i+1}^{n+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a^- \\ a^+ \end{pmatrix} \text{ and } \begin{pmatrix} L_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \\ R_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \end{pmatrix} = \tilde{M} \begin{pmatrix} a^- \\ a^+ \end{pmatrix}.$$

因此，令 $S_{i+\frac{1}{2}} = \tilde{M} M^{-1}$，即可得到以下恒等式：

$$\begin{pmatrix} L_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \\ R_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \end{pmatrix} = S_{i+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \bar{u}_i^{n+1} \\ \bar{u}_{i+1}^{n+1} \end{pmatrix} \tag{22}$$

(2) 假设 $\Delta_{i+\frac{1}{2}}^n = 0$，则令 $\mu_{i+\frac{1}{2}}^n := -\frac{\hat{\sigma}^n}{2}$，解的形式为：

$$w(z) = (az + b) e^{\mu_{i+\frac{1}{2}}^n z}.$$

矩阵 $S_{i+\frac{1}{2}}$ 的定义照前述方法作相应调整*mutatis mutandis* 即可。

(3) 在 $\Delta_{i+\frac{1}{2}}^n < 0$ 的情况下，解 w 的形式为：

$$w(z) = \left(a \cos\left(\sqrt{-\Delta_{i+\frac{1}{2}}^n} z \right) + b \sin\left(\sqrt{-\Delta_{i+\frac{1}{2}}^n} z \right) \right) e^{-\frac{\hat{\sigma}^n z}{2}},$$

矩阵 $S_{i+\frac{1}{2}}$ 的定义同样照前述方法作相应调整*mutatis mutandis* 即可。

关系式 (22) 可以显式表示，但为简洁起见，我们不再展开。然后，将关系式 (22) 与时间积分 (18) 结合，可得到一个三对角系统，该系统可通过托马斯算法求逆。

2.3. 平移至静止坐标系的 WB 平移。 下一步，我们需要根据移动坐标系中的值 $\bar{u}_i^{n+1}(t, z) = (t, x - \hat{\sigma}^n(t - t^n))$，计算静止坐标系中的值 u_i^{n+1}。为此，我们求解方程 (14)，回顾如下：

$$\begin{cases} -\hat{\sigma}^n \partial_z \hat{u} - \partial_{zz} \hat{u} = \hat{u} \hat{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}, \text{ for } z \in \bar{C}_{i+\frac{1}{2}} \\ \hat{u}(z_i) = \bar{u}_i^{n+1} \text{ and } \hat{u}(z_{i+1}) = \bar{u}_{i+1}^{n+1}, \end{cases}$$

这里回顾一下，$\hat{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = F\left(\hat{u}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}\right)$ 是利用 $\hat{u}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{\bar{u}_i^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1}}{2}$ 更新后的非线性项。然后，令：

$$u_i^{n+1} = \hat{u}(z_i + \hat{\sigma}^n \Delta t^n). \tag{23}$$

施加 CFL 条件（15）可避免取用非直接相邻网格单元的值。方程（14）可以用与之前相同的方法求解。取 $N_{i+\frac{1}{2}} = M_{i+\frac{1}{2}}$，并将我们上文使用过的（$\phi_1$，$\phi_2$）的基本解系记为：

$$\tilde{N}_{i+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \phi_1(z_i + \hat{\sigma}^n \Delta t^n) & \phi_2(z_i + \hat{\sigma}^n \Delta t^n) \end{pmatrix} \tag{24}$$

由此得到以下 1×2 矩阵 x:

$$T_{i+\frac{1}{2}} := \tilde{N}_{i+\frac{1}{2}} N_{i+\frac{1}{2}}^{-1},$$

and:

$$u_i^{n+1} = T_{i+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \bar{u}_i^{n+1} \\ \bar{u}_{i+1}^{n+1} \end{pmatrix}. \tag{25}$$

3. 数值评估

我们首先将前述用于 F/KPP方程（4）的 WB格式与下文介绍的另外两种数值格式进行比较。我们也对方程（9）进行了类似的比较。

本节数值格式的代码见 [9]。

3.1. 替代格式。

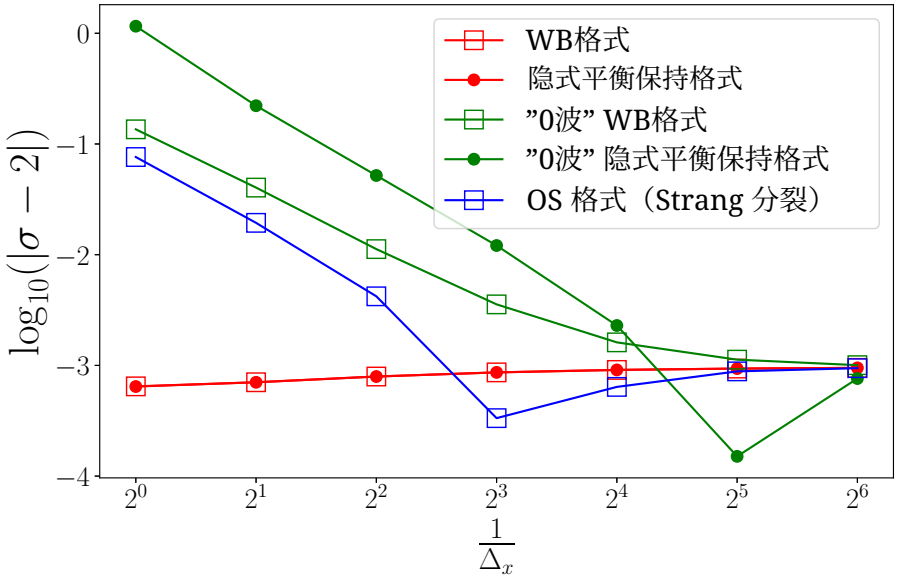


图 1. 不同数值格式下，F/KPP方程的 LeVeque-Yee 速度 σ 随空间离散尺度 Δ_x的变化（时刻 $t = 1500$ ）。

3.1.1. 采用 *Crank-Nicolson* 方法的 *OS* 格式。 第一种格式基于对热算子和反应项进行算子分裂（Strang 分裂）：

$$u^{n+1} = R_{\frac{\Delta t}{2}} e^{-\Delta t \partial_{xx}} R_{\frac{\Delta t}{2}} u^n$$

对于反应项，一般可以采用隐式欧拉积分；但对于 F/KPP方程这一特殊情形，可以进行如下精确积分：

$$R_{\frac{\Delta t}{2}} v = \frac{e^{\frac{\Delta t}{2}}}{e^{\frac{\Delta t}{2}} - 1 + \frac{1}{v}}.$$

热算子 通过 Crank-Nicolson 方法进行积分，其中 $v^{n+1} = e^{-\Delta t \partial_{xx}} v^n$ 对所有 i:

$$\frac{v_i^{n+1} - v_i^n}{\Delta t} = \frac{v_{i-1}^{n+1} - 2v_i^{n+1} + v_{i+1}^{n+1}}{2\Delta x^2} + \frac{v_{i-1}^n - 2v_i^n + v_{i+1}^n}{2\Delta x^2}.$$

3.1.2. 用于*“0*波”的 *WB*格式。第二种格式基于前文提到的 WB格式所采用的相同方法，但我们要求 $\hat{}\sigma^n = 0$。这一选择对应于文献 [15] 中研究的选择。如引言中所述，该方法仅对稳态是 WB 的，或者等价地说，仅对速度为 0 的行波是 WB 的。实现该格式时，无需从运动坐标系变换到静止坐标系，因为二者重合。或者，采用上文的记号，可得：

$$T_{i+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

3.2. **渐近传播速度**。F/KPP方程 (4) 的渐近传播速度为 $\sigma 2$。我们比较不同数值格式捕捉这一渐近速度的能力：第 2 节中的 WB格式（显式和隐式版本）、第 3.1.1 节中的 OS 格式，以及第 3.1.2 节中针对“0波”的 WB格式（同样包括显式和隐式版本）。

为捕捉渐近传播速度，我们在时间区间$[0, 1500]$上求解 F/KPP方程。由于预期的扩散速度为 $\sigma = 2$，所考虑的区域至少应扩大一倍：这里我们取区域 $[0, 3080]$。粗略地说，这个较大的区域可以避免边界效应。初始条件为 S形函数 $u_0(x) = 1 - \frac{1}{1+e^{-3(x-40)\circ}}$

图 1 展示了所考察数值格式在终止时刻 $t = 1500$ 使用 LeVeque-Yee公式得到的速度 $\hat{}\sigma^n$ 。对于某些格式，粗网格下得到的渐近传播速度与 2 相差甚远，因此必须将空间区域扩展至 $[0, 6080]$ ，以避免这些格式受到边界效应的影响。每次迭代中，所有所考察格式均采用相同的时间步长，即满足

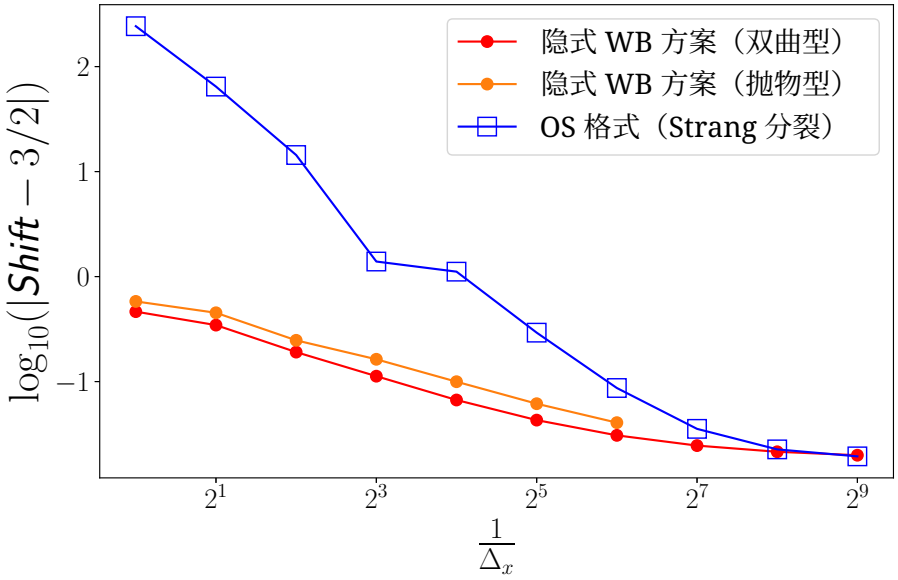


图 2. 使用隐式 WB 格式和 OS 格式拟合 Bramson 延迟的系数 $3/2$ ，适用于 F/KPP方程。

所有 CFL 条件中的抛物型条件 $\Delta_t^n \leq \frac{1}{2}\Delta_x^2$，这是显式 WB 方案所必需的。随着网格变细，所有数值格式似乎都收敛到相同结果，且该结果极为接近 2 这一渐近传播速度。不过，可以观察到速度并未完全收敛至 2。从启发式角度看，这种差异可能是 Bramson 延迟所致。事实上，对渐近展开 (8) 进行形式微分可得 $\dot{x_c}(t) = 2 - \frac{3}{2t} + o\left(\frac{1}{t}\right)$。随后代入数值 $t = 1500$，便可解释所观察到的 10^{-3} 阶差异。此外，值得注意的是，无论是显式还是隐式 WB 格式，即使在非常粗的网格上，也能极好地捕捉其他格式只有在细得多的网格上才能捕捉到的渐近行为。

3.3. **捕捉 Bramson 延迟**。 我们回顾一下，Bramson 延迟是等值集 $x_c(t)$ 的位置表达式中出现的对数修正项，对于 $c \in (0,1)$，其表达式由方程（8）给出。在数值模拟中，我们通过对等值集所在网格单元中的解进行线性插值，追踪等值集 $x_{0.5}(t)$ 的位置。通过在模拟最后一半的区间内，将模型$m_{\alpha,\beta,\gamma}(t) = \alpha\log(t) + \beta + \frac{\gamma}{\sqrt{t}}$ 拟合到 $x_{0.5}(t) - 2t$ ，来近似 Bramson 延迟的系数 $\frac{3}{2}$ 。由于渐近展开式（8）的下一项为 $-\frac{3\sqrt{\pi}}{\sqrt{t}}$ [27]，因此加入 $\frac{\gamma}{\sqrt{t}}$ 以改进模型拟合。

我们尝试通过加密空间区域的离散化来捕捉 Bramson 延迟。使用依赖抛物型 CFL 条件的数值格式，会导致时间迭代次数极多，在合理的时间内很快变得难以完成。此外，“0波”隐式平衡保持格式对渐近传播速度的捕捉不如隐式平衡保持格式。因此，我们只对隐式平衡保持格式和 OS 格式拟合 Bramson 延迟（见图 2）。WB格式和 OS 格式在时间上分别是一阶和二阶的。为了比较这些格式，我们还绘制了 WB格式的拟合结果，其中采用足够小的时间步长，以模拟时间上的二阶格式。在这种情况下，时间步长为 $\Delta_t^n = \min(0.05, \frac{1}{2}\Delta_x^2)$。然而，当 Δ_x 过小时，这一抛物型 CFL 条件仍会导致过高的计算成本。因此，我们仅在 $\Delta_x \geq 2^{-6}$ 下计算了满足抛物型 CFL 条件的隐式平衡保持格式。对于所有已计算的格式，所得位移似乎都收敛到一个与 $3/2$ 略有不同的值。造成这一差异的一个可能原因是展开式 (8) 中的高阶项（例如见 [18]）。在这里，隐式平衡保持格式再次展现出即使在粗网格上也能捕捉 Bramson 延迟的能力。此外，对于隐式平衡保持格式，时间步长为 $\Delta_t^n = \mathcal{O}(\Delta_x)$ 和时间步长为 $\Delta_t^n = \mathcal{O}(\Delta_x^2)$ 时，结果没有显著差异。

3.4. **三次情形下的渐近传播速度与 Bramson 延迟**。 对于方程（9），我们比较了在以下三种不同区间中使用 WB 和 OS 格式得到的解

- 拉动型区间，其中 $a = 1$,
- pushmi-pullyu 转变态（ $a = 2$），

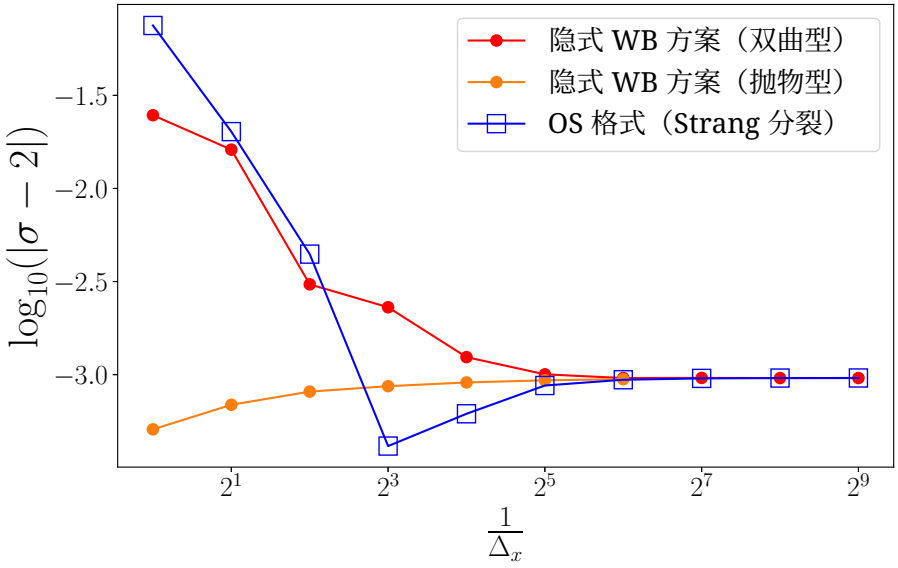


图 3. 拉动型区间内三次情形的渐近传播速度（$a = 1$）。对于 OS 格式，我们观察到在 $\Delta x = 2^{-3}$ 处， $\sigma - 2$的符号发生变化。

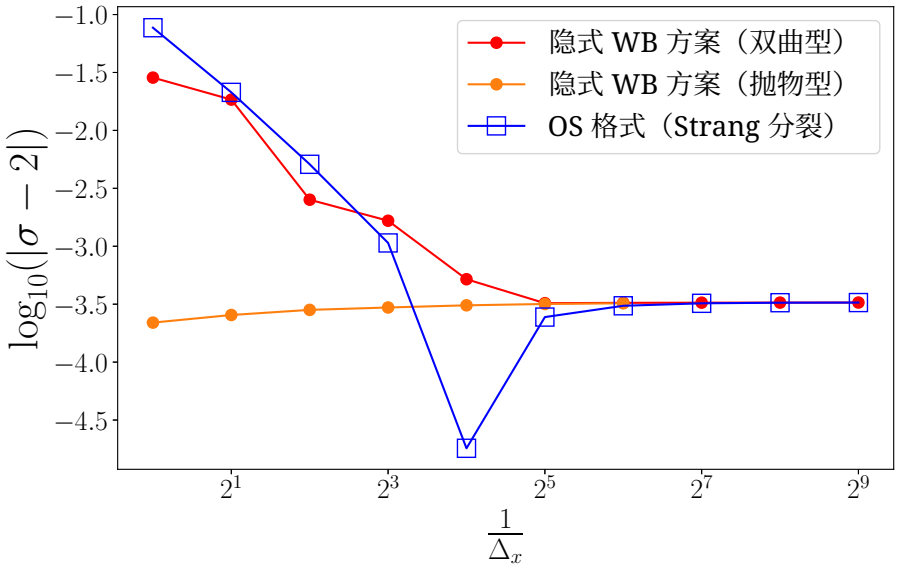


图 4. pushmi-pullyu 转变态内三次情形的渐近传播速度（$a = 2$）。对于 OS 格式，我们观察到在 $\Delta x = 2^{-4}$ 处， $\sigma - 2$的符号发生变化。

- 推动态， $a = 3$。

图 3、图 4 和图 5 展示了数值渐近速度在三种情形下的收敛情况。在所有情形中，数值格式都能很好地捕捉速度，但采用抛物型 CFL 条件的隐式平衡保持格式表现尤其出色。不过，如前所述，抛物型 CFL 条件的计算成本过高，不适合用于细网格。在推动态（$a = 3$）中可以看到，对于所有数值格式，随着网格逐渐加密，速度越来越接近预测速度（图 5）。这可能是因为渐近展开（10）所给出的时间指数收敛：该展开指出，连续解在 $t = 1500$ 处的展开速度应与预测速度极为接近；而在拉动情形中，由于 Bramson 延迟，情况则并非如此。此外，在推动情形下，采用双曲型 CFL 条件的两种格式表现大致相当。

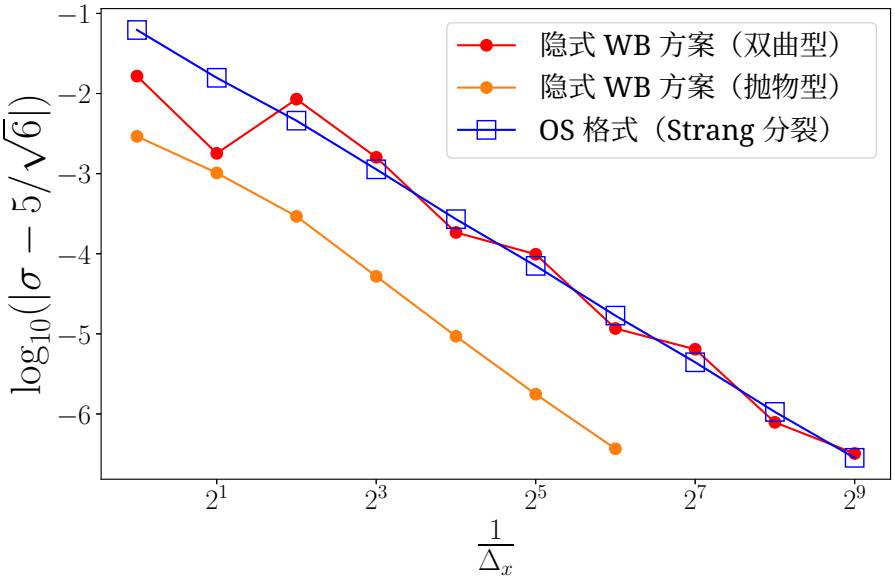


图 5. 推动态下三次情形的渐近传播速度（$a = 3$）

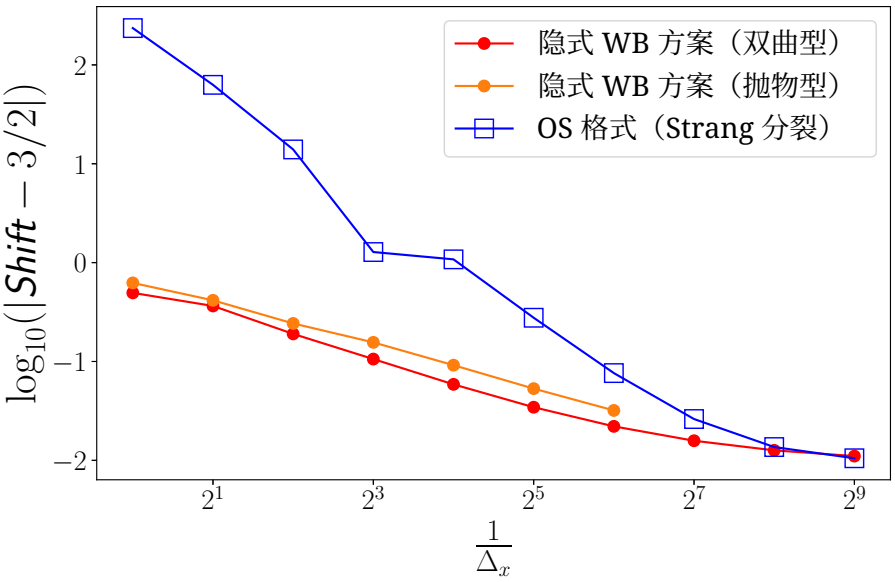


图 6. 拉动型区间下三次情形的 Bramson 延迟（$a = 1$）。

关于 Bramson 延迟，拉动型区间的结果（见图 6）与 F/KPP方程的结果非常相似。特别是，WB格式即使在粗网格上也能很好地近似这一位移。在 pushmi-pullyu 转变态下的 $1/2$ Bramson 延迟（见图 7）被所有数值格式捕捉到。再次证明，WB格式即使在粗网格上也能捕捉到 $1/2$ 位移，而 OS 格式只有在网格较细时才能跟上。

致谢

作者谨向 Vincent Calvez 和 Thierry Dumont 致以诚挚谢意，他们对本研究的完成至关重要。

本项目获得了欧洲研究委员会（ERC）欧盟“地平线2020”研究与创新计划的资助（第865711号资助协议）。

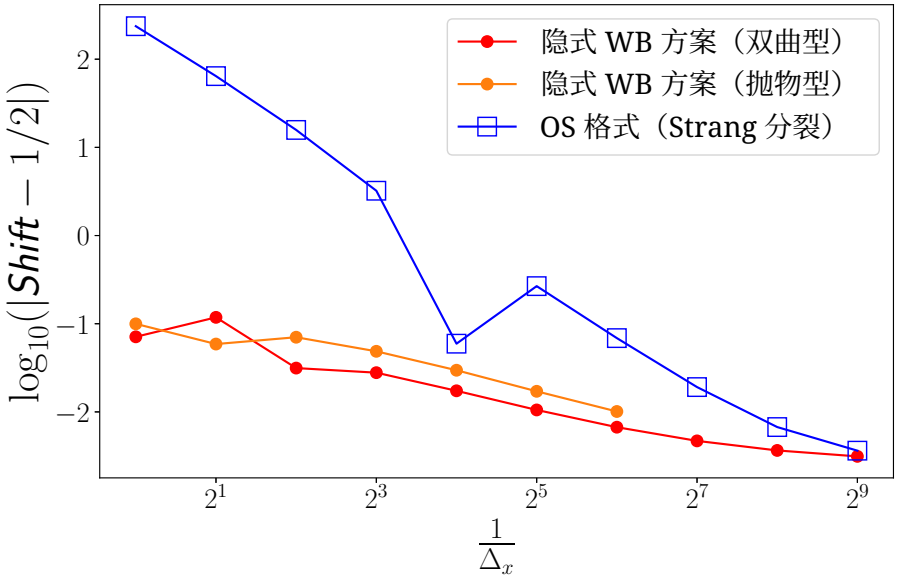


图 7. pushmi-pullyu 转变态中三次情形的 Bramson 延迟（$a = 2$）。

参考文献

[1] *J. Adler*，《细菌趋化性》，《科学》（纽约），*153*（*1966*），第*708–716*页。[2] *J. An*、*C. Henderson* 和 *L. Ryzhik*，《*Burgers-FKPP*方程的推动前沿、拉动前沿及推拉前沿》，*arXiv:2108*.07861 [*math*]，（*2021*）。[3] *D. G. Aronson* 和 *H. F. Weinberger*，《群体遗传学、燃烧和神经脉冲传播中的非线性扩散》，载于《偏微分方程及相关主题》，*J. A. Goldstein* 编，柏林、海德堡，*1975*，*Springer Berlin Heidelberg*，第*5–49*页。[4] *M. D. Bramson*，《分支布朗运动的最大位移》，《纯粹与应用数学通讯》，*31*（*1978*），第*531–581*页。[5] *G. Bretti* 和 *L. Gosse*，《趋化动力学模型的二维平衡保持近似的扩散极限》，《偏微分方程与应用》，*2*（*2021*），第*31*页。[6] *V. Calvez*、*L. Gosse* 和 *M. Twarogowska*，《介观尺度上的行进趋化聚集体与双稳性》，《*SIAM*应用数学杂志》，*77*（*2017*），第*2224–2249*页。[7] *B. Derrida*，《拉动前沿与推动前沿转变处*Bramson*位移的交叉行为》，*2022*。[8] *B. Després* 和 *C. Buet*，《具有线性弛豫的*Friedrichs*系统中平衡保持格式的结构》，*2014*年*11*月。[9] *B. Fabrèges*，《*F/KPP*方程的*WB*格式》。*https://plmlab.math.cnrs.fr/fabreges/reaction_diffusion_schemes*。[10] *P. C. Fife* 和 *J. B. McLeod*，《非线性扩散方程解趋近行波前解的过程》，《理性力学与分析档案》，*65*（*1977*），第*335–361*页。[11] *R. A. Fisher*，《有利基因的扩展波》，《优生学年鉴》，*7*（*1937*），第*355–369*页。[12] *T. Giletti*，《单稳拉动前沿与对数漂移》，*2021*年*5*月。[13] *L. Gosse*，《计算守恒律的定性正确近似》，第*2*卷，*Springer*，*2013*。[14] ，《标量守恒律的*Godunov*格式的二维版本》，《*SIAM*数值分析杂志》，*52*（*2014*），第*626–652*页。[15] ，《二维中以*$\mathcalL$*样条和*Steklov-Poincaré*算子处理黏性方程》，载于《创新算法与分析》，*L. Gosse* 和 *R. Natalini* 编，*Springer International Publishing*，*Cham*，*2017*，第*167–195*页。[16] ，《作用于线性抛物型方程的平衡保持格式的*L*样条与黏性极限》，《应用数学学报》，*153*（*2018*），第*101–124*页。[17] *L. Gosse* 和 *N. Vauchelet*，《双流动力学模型与一维聚集方程中的数值高场极限》，《*SIAM*科学计算杂志》，（*2016*）。[18] *C. Graham*，《*Fisher–KPP*前沿的精确渐近》，《非线性》，*32*（*2019*），第*1967*页。[19] *J. M. Greenberg* 和 *A. Y. Leroux*，《双曲型方程中源项数值处理的平衡保持格式》，《*SIAM*数值分析杂志》，*33*（*1996*），第*1–16*页。[20] *K. P. Hadeler* 和 *F. Rothe*，《非线性扩散方程中的行波前》，《数学生物学杂志》，*2*（*1975*），第*251–263*页。[21] *F. Hamel*、*J. Nolen*、*J.-M. Roquejoffre* 和 *L. Ryzhik*，《*Fisher-KPP*方程中*Bramson*对数修正的简短证明》，《网络与非均匀介质》，*8*（*2013*），第*275*页。[22] *E. F. Keller* 和 *L. A. Segel*，《趋化细菌的行进带：理论分析》，《理论生物学杂志》，*30*（*1971*），第*235–248*页。~~[23]~~ *A. Kolmogorov*、*I. Petrovsky* 和 *N. Piskunov*，《研究具有物质量增长的扩散方程及其在一个生物学问题中的应用》，《莫斯科国立大学通报》，*1*（*1937*），第*126*页。

[24] R. J. Leveque 和 H. C. Yee，含刚性源项的双曲守恒律数值方法研究，《计算物理学杂志》，86（1990），第 187–210 页。[25] C. Mascia、P. Moschetta 和 C. Simeoni，基于原型偏微分方程模型的生物表型相变，《应用与工业数学通讯》，11（2020），第 1–17 页。[26] J. Nolen、J.-M. Roquejoffre 和 L. Ryzhik，*Fisher-KPP* 方程解收敛至单一波，《中国数学年刊》B辑，38（2017），第 629–646 页。[27] , *Fisher–KPP* 前沿的精细长时间渐近行为，《当代数学通讯》，21（2019），第 1850072 页。[28] F. Rothe，收敛至推动前沿，《落基山数学杂志》，11（1981），第 617–634 页。[29] J. Saragosti、V. Calvez、N. Bournaveas、B. Perthame、A. Buguin 和 P. Silb~~erzan,~~ 移动浓度波中趋化细菌的方向持续性，《美国国家科学院院刊》，108（2011），第 16235–16240 页。[30] J. G. Skellam，理论种群中的随机扩散，《数学生物学通报》，53（1991），第 135–165 页。[31] A. N. Stokes，拟线性扩散中的两类移动前沿，《数学生物科学》，31（1976），第 307–315 页。[32] K. Uchiyama，布朗运动首次离开单侧移动边界及其上方逗留时间的研究与应用，《概率论及相关领域杂志》，54（1980），第 75–116 页。

科奇大学理学院，土耳其伊斯坦布尔电子邮件地址：
mete.demircigil@math.cnrs.fr

卡米耶·若尔当研究所（ICJ），克洛德·贝尔纳里昂第一大学，法国里昂电子邮件地址：
fabreges@math.univ-lyon1.fr