

ФИЗИКА. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ APPLIED MATHEMATICS & PHYSICS

УДК 517.9, 519.6

MSC 35K20, 35K58, 35K59

Оригинальное исследование

DOI 10.52575/2687-0959-2025-57-1-52-58

Численный метод решения уравнения «реакция – диффузия»

Барабаш О. П. 

(Статья представлена членом редакционной коллегии В. В. Меншиких)

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия

имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина»,

Россия, 394064, г. Воронеж, ул. Старых Большевиков, 54А

navyS9@yandex.ru

Аннотация. В работе рассматривается квазилинейное уравнение «реакция – диффузия», более известное как уравнение Колмогорова – Петровского – Пискунова – Фишера. Для численного решения начально-краевой задачи с данным уравнением была построена двухслойная разностная схема с весами, имеющая порядок аппроксимации $O(h^2 + \tau)$. Используемая схема позволила свести задачу поиска решения нелинейного уравнения к решению системы линейных алгебраических уравнений методом прогонки. Приведены результаты численной реализации схемы на нескольких модельных примерах с точным решением типа «бегущей волны». Демонстрируемые расчеты показали высокую точность предложенной разностной схемы.

Ключевые слова: уравнение «реакция – диффузия», уравнение Фишера, уравнение КПП, разностная схема, схема с весами, конечно-разностная аппроксимация, вычислительный эксперимент

Для цитирования: Барабаш О. П. 2025. Численный метод решения уравнения «реакция – диффузия». *Прикладная математика & Физика*, 57(1): 52–58. DOI 10.52575/2687-0959-2025-57-1-52-58

Original Research

Numerical Method for Solving the Reaction-Diffusion Equation

Olga P. Barabash 

(Article submitted by a member of the editorial board V. V. Menshikh)

Military Educational and Scientific Centre of the Air Force N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin Air Force Academy,

64A Stary'x Bol'shevikov St., Voronezh 394064, Russia

navyS9@yandex.ru

Abstract. Mathematical models with this equation are widely used in ecology, physiology, combustion, crystallization, plasma physics, and in general phase transition problems. In this article, we are interested in the finite-difference approximation of the initial-boundary value problem with the KPP-F equation. For this, a two-layer difference scheme "with weights" was built, having an approximation order of $O(h^2 + \tau)$. The used scheme made it possible to reduce the problem of finding a solution to a nonlinear equation to solving a system of linear algebraic equations using the sweep method. If n is the dimension of the system, then the sweep method provides a solution in approximately $8n$ arithmetic operations, and therefore is a more economical method than others. The results of numerical implementation of the scheme on several model examples with an exact "traveling wave" solution.

Keywords: Reaction-Diffusion Equation, Fisher Equation, KPP Equation, Difference Scheme, Weighted Scheme, Finite Difference Approximation, Computational Experiment

For citation: Barabash O. P. 2025. Numerical Method for Solving the Reaction-Diffusion Equation. *Applied Mathematics & Physics*, 57(1): 52–58. (in Russian) DOI 10.52575/2687-0959-2025-57-1-52-58

1. Введение. Важнейшей моделью среды, допускающей процессы самоорганизации, является уравнение «реакция – диффузия» (УРД):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \nabla^2 u + f(u),$$

где D – матрица коэффициентов диффузии, u – неизвестная векторная функция. Реакционно-диффузионные системы широко встречаются в химии, биологии, экологии и физике.

В 1937 г. советские математики А. Н. Колмогоров, И. Г. Петровский и Н. С. Пискунов [1] и Р. Фишер [2] одновременно предложили модель, которая описывает распространение биологических популяций:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1 - u).$$

Уравнение в честь авторов получило название Колмогорова – Петровского – Пискунова. Справедливости ради, стоит отметить, что первоначально уравнение было предложено Хотеллингом [3, 4] в 1921 г. в качестве модели, описывающей популяционный рост и распространение. На основе принципов Мальтуса рост моделировался как логистический процесс. Построение миграционных процессов в пространстве осуществлялось с использованием теории Фурье распространения тепла.

Указанному уравнению посвящено большое количество работ, связанных с распространением в пространстве волн различной природы [5]. В работе [6] получены точные решения двух типов уравнения Фишера. Однако особую роль играет конечно-разностная аппроксимация уравнений рассматриваемого класса. В этой связи необходимо отметить работы П. П. Матуса [7, 8], посвященные численной аппроксимации уравнения Ф-КПП, а также статью [9], в которой приведены и исследованы на устойчивость монотонные разностные схемы для уравнения КПП.

В настоящей работе строится разностная схема с весами, имеющая второй порядок точности по h и первый – по τ . Для рассматриваемой разностной схемы приведены результаты численного эксперимента на разных пространственно-временных сетках, а также для различных значений весовых параметров.

Целью данной работы является получение абсолютных и относительных погрешностей решения.

2. Постановка задачи. Разностная схема. Рассмотрим начально-краевую задачу для одномерного уравнения Фишера – Колмогорова – Петровского – Пискунова:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + Au(S - u), 0 < x < 1, 0 < t \leq T, A, S > 0, \quad (1)$$

с неоднородными граничными и начальным условиями:

$$u(0, t) = u_1(t), u(1, t) = u_2(t), 0 \leq t \leq T, \quad (2)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), 0 \leq x \leq 1. \quad (3)$$

В уравнении (1) параметры A и S имеют значения постоянной роста и теоретического максимума для функции u соответственно.

Разобьем отрезки $[0, 1]$ оси x на N частей, отрезок $[0, T]$ оси t M частей. Введем сетку

$$\overline{w}_{h\tau} = \overline{w}_h \times w_\tau = \{x_i = ih, i = 0, 1, \dots, N\} \times \{t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots, M\}$$

с постоянными шагами $h = 1/N$ и $\tau = T/M$.

Значение сеточной функции y в узле (x_i, t_j) будем обозначать y_i^j . Будем использовать шеститочечный шаблон с центром в точке (x_i, t_{j+1}) , состоящий из узлов

$$(x_{i\pm 1}, t_{j+1}), (x_i, t_{j+1}), (x_{i\pm 1}, t_j), (x_i, t_j).$$

Заменим $\frac{\partial u}{\partial t}$ первой разностной производной, а $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ – второй разностной производной и введем произвольные вещественные параметры $\sigma, \eta, \alpha, \beta$. Следуя методике А.А. Самарского [10], рассмотрим семейство разностных схем «с весами»:

$$\frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau} = \Lambda(\sigma y_i^{j+1} + \eta y_i^j) + \alpha(S - y_i^j)y_i^{j+1} + \beta(S - y_i^{j+1})y_i^j, 0 < i < N, 0 \leq j < M, \quad (4)$$

где

$$\Lambda y_i = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}.$$

Начальные и краевые условия аппроксимируем точно

$$y_0^j = u_1^j, y_N^j = u_2^j, \quad (5)$$

$$y_i^0 = y(x_i, 0) = u_0(x_i). \quad (6)$$

Для дальнейшего удобства перейдем к безындексным обозначениям, принятым в работе [11]:

$$y_i^j = y, y_i^{j+1} = \widehat{y}, y_t = \frac{\widehat{y} - y}{\tau}.$$

Для определения погрешности введенной схемы необходимо оценить разность решения y_i^j задачи (4) – (6) функции и непрерывной функции $u = u(x, t)$ в узлах сетки:

$$z_i^j = y_i^j - u_i^j.$$

Запишем задачу (4) – (6) в безындексном виде

$$\begin{cases} y_t = \Lambda(\sigma \bar{y} + \eta y) + \alpha(S - y)\bar{y} + \beta(S - \bar{y})y, (x, t) \in w_{h\tau}, \\ y(0, t) = u_1(t), y(1, t) = u_2(t), t \in w_\tau, \\ y(x, 0) = u_0(x), x \in \bar{w}_h. \end{cases} \quad (7)$$

Подставляя $y = z + u$ в (7), перейдем к задаче для z :

$$\begin{cases} z_t = \Lambda(\sigma \bar{z} + \eta z) + \psi, (x, t) \in w_{h\tau}, \\ z(0, t) = z(1, t) = 0, t \in w_\tau, \\ z(x, 0) = 0, x \in \bar{w}_h, \end{cases}$$

где невязка схемы при решении определяется уравнением:

$$\psi = \Lambda(\sigma \bar{u} + \eta u) - u_t + \alpha(S - u)\bar{u} + \beta(S - \bar{u})u.$$

С учетом линейности оператора Λ запишем:

$$\psi = \sigma \Lambda \bar{u} + \eta \Lambda u - u_t + \alpha(S - u)\bar{u} + \beta(S - \bar{u})u. \quad (8)$$

Считая функцию $u(x, t)$ достаточно гладкой и используя разложение в ряд Тейлора в окрестности точки (x, t) , получаем:

$$\begin{aligned} \Lambda u &= \frac{u(x-h, t) - 2u(x, t) + u(x+h, t)}{h^2} = u''_x + \frac{h^2}{12} u^{(4)}_x + O(h^4), \\ u_t &= \frac{\bar{u} - u}{\tau} = \frac{1}{\tau} (u + \tau u'_t + O(\tau^2) - u) = \frac{1}{\tau} (\tau u'_t + O(\tau^2)) = u'_t + O(\tau). \end{aligned}$$

Обозначим $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = Lu$ и $u'_t = \dot{u}$, запишем невязку:

$$\psi = \sigma Lu + \eta Lu - \dot{u} + O(h^2 + \tau) + \alpha(S - u)\bar{u} + \beta(S - \bar{u})u. \quad (9)$$

Подставим $\dot{u} = Lu + Au(S - u)$ в уравнение (9), тогда приходим к следующему виду невязки:

$$\psi = \dot{u}(\sigma + \eta - 1) - Au(\sigma + \eta)(S - u) + \alpha(S - u)\bar{u} + \beta(S - \bar{u})u + O(h^2 + \tau).$$

Далее примем $\sigma + \eta - 1 = 0$, тогда, используя разложение функции $\bar{u} = u + O(\tau)$, имеем:

$$\begin{aligned} \psi &= -Au(S - u) + \alpha(S - u)u + \beta(S - u)u + O(h^2 + \tau) = \\ &= u(-AS + \alpha S + \beta S) + u^2(A - \alpha - \beta) + O(h^2 + \tau). \end{aligned}$$

Отсюда очевидно, что при выполнении условий

$$\begin{cases} \sigma + \eta = 1, \\ \alpha + \beta = A, \end{cases} \quad (10)$$

погрешность аппроксимации

$$\psi = O(h^2 + \tau).$$

Таким образом, схема обладает первым порядком аппроксимации по τ и вторым по h .

В статье [12] разностная схема (4) представлена в виде системы линейных алгебраических уравнений, решение которых осуществляется методом прогонки.

В рамках настоящей статьи не рассматривается вопрос об устойчивости построенного семейства разностных схем. По этой причине мы придаем существенную роль численному эксперименту, который будет описан далее.

3. Вычислительный эксперимент. В этом разделе приведены результаты численного эксперимента для задачи (1) – (3) для параметров $T = 4$, $A = 1$, $S = 1$ и различных сеточных значений.

Численная реализация производилась на языке Python. Результаты расчета сравнивались с точным решением, определенным по формуле [13]:

$$u(x, t) = \frac{1}{(1 + e^{1/\sqrt{6}x - 5t/6})^2}.$$

Первый модельный пример выполнен для значений весовых коэффициентов $\sigma = 0, 5$, $\beta = 0, 5$ и включает расчеты при количестве разбиений $N = 10, 50$ по оси x и количестве отрезков разбиения $M = 40, 100, 400$ по оси t .

На рисунке 1 изображены графики точного (зеленым цветом) и численного решения (голубым цветом) в различные моменты времени: $t_1 = T/4$ (линия 1), $t_2 = T/2$ (линия 2), $t_3 = T$ (линия 3) при $N = 10, M = 40$.

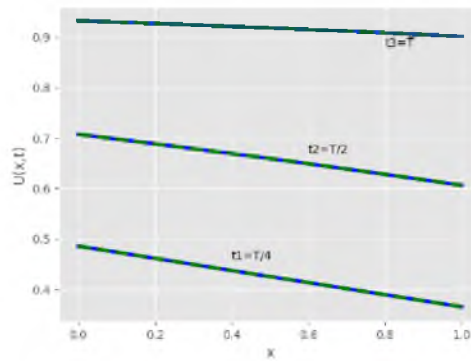


Рис. 1. Численное и точное решения в различные моменты времени для $\sigma = 0,5$, $\beta = 0,5$, $N = 10$, $M = 40$

Fig. 1. Numerical and exact solutions at various points in time for $\sigma = 0.5$, $\beta = 0.5$, $N = 10$, $M = 40$

Как видно из рисунка, графики точного и численного решения совпадают. Кроме того, полученный графический результат соответствует поведению функции на границах интервала:

$$u(0, t) = \frac{1}{(1 + e^{-5t/6})^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 1,$$

$$u(1, t) = \frac{1}{(1 + e^{1/\sqrt{6}-5t/6})^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 1.$$

В таблице 1 представлены результаты расчета абсолютных ошибок для первого примера. Сравнение абсолютных ошибок демонстрирует, что предложенный метод позволяет добиться хорошей точности и на грубой сетке.

Таблица 1
Table 1

Абсолютные ошибки в разные моменты времени для двух значений шага пространственной сетки и трех значений шага временной сетки
Absolute errors at different time points for two spatial grid pitch values and three temporary grid spacing values

M	$Error_{t_1}$	$Error_{t_2}$	$Error_{t_3}$
N = 10			
40	2.57065e-05	2.34178e-05	5.53951e-06
100	4.08557e-06	4.22129e-06	8.53315e-07
400	2.24928e-07	7.93971e-07	1.58376e-08
N = 50			
40	9.29992e-06	7.98158e-06	1.90455e-06
100	1.49558e-06	1.2847e-06	3.03764e-07
400	9.43145e-08	8.76976e-08	1.83649e-08

Таблица 2 содержит относительную погрешность численного решения, выраженную в процентах.

Таблица 2
Table 2

Относительные ошибки в разные моменты времени для двух значений шага пространственной сетки и трех значений шага временной сетки, %

Relative errors at different time points for two spatial grid pitch values and three temporary grid spacing, %

M	$Error_{t_1}$	$Error_{t_2}$	$Error_{t_3}$
N = 10			
40	0.00280051	0.00355238	0.00130186
100	0.000445089	0.000640349	0.00020054
400	2.45041e-05	0.000120442	3.72205e-06
N = 50			
40	0.00100039	0.00114312	0.000401929
100	0.00016088	0.000183995	6.41051e-05
400	1.01454e-05	1.25601e-05	3.87565e-06

В таблице 3 приведены абсолютные погрешности расчетов при количестве разбиений $N = 50$ по оси x и количестве отрезков разбиения $M = 40, 400, 1000$ по оси t и различных значениях сеточных параметров σ и β .

Таблица 3
Table 3

Абсолютные ошибки в разные моменты времени для двух значений шага пространственной сетки и трех значений шага временной сетки
Absolute errors at different time points for two spatial grid pitch values and three temporary grid spacing values

M	$Error_{t_1}$	$Error_{t_2}$	$Error_{t_3}$
$\sigma = 0.7, \beta = 0.3$			
40	0.000207816	0.000182228	6.30258e-05
400	1.99601e-05	1.74301e-05	6.06282e-06
1000	7.96264e-06	6.95561e-06	2.41838e-06
$\sigma = 0.9, \beta = 0.1$			
40	0.000405633	0.000358037	0.000125668
400	3.98215e-05	3.47889e-05	1.21221e-05
1000	1.59088e-05	1.38932e-05	4.83675e-06
$\sigma = 1.5, \beta = 0.7$			
40	0.000333032	0.000232901	2.75878e-05
400	3.46869e-05	2.25883e-05	2.60522e-06
1000	1.39021e-05	9.00973e-06	1.03895e-06
$\sigma = 3, \beta = -3$			
40	0.00339879	0.0032342	0.00119964
400	0.00035967	0.00030966	0.000104345
1000	0.000143991	0.000123394	4.13592e-05

Результаты, представленные в таблице 3, свидетельствуют о том, что используемая разностная схема обладает порядком аппроксимации не ниже $O(h^2 + \tau)$.

В следующем модельном примере расширим интервал пространственной переменной. Будем рассматривать задачу:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + Au(S - u), -20 < x < 20, 0 < t \leq T, A, S > 0,$$

$$u(-20, t) = u_1(t), u(20, t) = u_2(t), 0 \leq t \leq T,$$

$$u(x, 0) = u_0(x), -20 \leq x \leq 20.$$

Расчет произведем для параметров $T = 4$, $A = 1$, $S = 1$, значений весовых коэффициентов $\sigma = 0, 5$, $\beta = 0, 5$ и количестве разбиений $N = 200$ по оси x и количестве отрезков разбиения $M = 400$ по оси t .

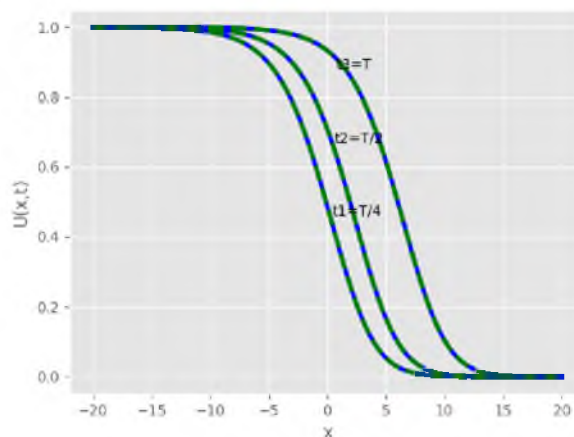


Рис. 2. Численное и точное решения в различные моменты времени
для $\sigma = 0, 5$, $\beta = 0, 5$, $N = 200$, $M = 400$, $-20 \leq x \leq 20$

Fig. 2. Numerical and exact solutions at various points in time for $\sigma=0.5$, $\beta=0.5$, $N=200$, $M=400$, $-20 \leq x \leq 20$

График демонстрирует, что численное решение совпадает с точным решением, имеющим профиль «бегущей волны». В таблице 4 приведены абсолютные и относительные ошибки численного решения на разных временах.

Таблица 4
Table 4

Абсолютные и относительные ошибки в разные моменты времени для двух значений шага пространственной сетки и трех значений шага временной сетки
Absolute and relative errors at different time points for two spatial grid pitch values and three temporary grid spacing values

M	$Error_{t_1}$	$Error_{t_2}$	$Error_{t_3}$
Абсолютная ошибка			
400	2.65924e-08	2.08158e-08	7.09457e-09
1000	2.78334e-08	2.17883e-08	7.42831e-09
Относительная ошибка			
400	2.65932e-06	2.08191e-06	7.09721e-07
1000	2.78342e-06	2.17919e-06	7.43107e-07

4. Заключение. В работе для численного решения начально-краевой задачи для квазилинейного уравнения Ф–КПП предложена разностная схема, линеаризирующая рассматриваемое уравнение и имеющая порядок аппроксимации $O(h^2 + \tau)$. При решении методом прогонки системы линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей число арифметических операций пропорционально количеству узлов сетки, а значит, такая разностная схема является экономичной. Сравнение приведенных в статье результатов численного расчета на разных пространственно-временных сетках с точным решением подтверждает теоретический порядок аппроксимации, а также свидетельствует об устойчивости разностной схемы.

Список литературы

1. Колмогоров А.Н. Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием вещества, и его применение к одной биологической проблеме. *Бюллетень МГУ, Серия А, Математика и механика*. 1937;1(64):1–16.
2. Fisher R.A. The wave of advance of advantageous genes. *The Annals of Human Genetics*. 1937;7:355–369.
3. Hotelling H. A mathematical theory of migration. *Environ Plan A*. 1978;10(11):1223–1239.
4. Мешков В.З., Половинкин И.П., Семенов М.Е. Об устойчивости стационарного решения уравнения Хотеллинга. *Обзорные прикладной и промышленной математики*. 2002;9(1):226–227.
5. Danilov V.G., Maslov V.P., Volosov V.P. Mathematical Modelling of Heat and Mass Transfer Processes. Dordrecht: Kluwer; 1995. 323 p.
6. Кудряшов Н.А. О точных решениях уравнений семейства Фишера. *Теоретическая и математическая физика*. 1993;2(94):296–306.
7. Matus P.P., Hieu L.M., Vulkov L.G. Analysis of second order difference schemes on non-uniform grids for quasilinear parabolic equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2017;300:186–199.
8. Matus P.P. Stability of Difference Schemes for Nonlinear Time-dependent Problems. *Computational Methods in Applied Mathematics*. 2003;3(2):313–329.
9. Матус П.П., Утебаев Б.Д. Монотонные разностные схемы повышенного порядка точности для параболических уравнений. *Доклады Национальной академии наук Беларуси*. 2020;64(4):391–398.
10. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука. 1971. 553 с.
11. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука. Физматлит. 1989. 432 с.
12. Barabash O.P., Polovinkina M.V., Polovinkin I.P., Zhadanova M.L. On a difference scheme for the Growth-Propagation Equation. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2023;44(3):989–992.
13. Ильина К.П. Эффективный численный метод решения задачи Фишера – Колмогорова – Петровского – Пискунова. *Международный научно-исследовательский журнал*. 2023;3(129).

References

1. Kolmogorov AN. Issledovanie uravneniya diffuzii, soedinennoj s vozrastaniem veshchestva, i ego primenenie k odnoj biologicheskoy probleme [Investigation of the Equation of Diffusion Combined with Increasing of the Substance and Its Application to a Biology Problem]. *Byul. MGU. Ser. A. Matematika i mekhanika [Bulletin of Moscow State University Series A: Mathematics and Mechanics]*. 1937;1(64):1–16.

2. Fisher RA. The wave of advance of advantageous genes. *The Annals of Human Genetics*. 1937;7:355–369.
3. Hotelling H. A mathematical theory of migration. *Environ Plan A*. 1978;10(11):1223–1239.
4. Meshkov VZ, Polovinkin IP, Semenov ME. On the stability of a stationary solution of the Hotelling equation. *Applied and Industrial Mathematics Review*. 2002;9(1):226–227. (In Russ.)
5. Danilov VG, Maslov VP, Volosov VP. Mathematical Modelling of Heat and Mass Transfer Processes. Dordrecht: Kluwer; 1995. 323 p.
6. Kudriashov NA. On exact solutions of the Fisher family equations. *Theoretical and Mathematical Physics*. 1993;2(94):296–306. (In Russ.)
7. Matus PP., Hieu LM., Vulkov LG. Analysis of second order difference schemes on non-uniform grids for quasilinear parabolic equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2017;300:186–199.
8. Matus PP. Stability of Difference Schemes for Nonlinear Time-dependent Problems. *Computational Methods in Applied Mathematics*. 2003;3(2):313–329.
9. Matus PP, Utebaev BD. Monotonnye raznostnye skhemy povyshennogo poryadka tochnosti dlya parabolicheskikh uravnenij [Monotone difference schemes of higher accuracy for parabolic equations]. *Dokl. Nacional'noj akademii nauk Belarusi [Reports of the National Academy of Sciences of Belarus]*. 2020;64(4):391–398.
10. Samarskii AA. Vvedenie v teoriiu raznostnykh skhem [Introduction to the theory of difference schemes]. M.: Nauka; 1971. 553 p.
11. Samarskii AA., Gulin AB.. Chislennye metody [Numerical methods]. M. : Nauka. Fizmatlit; 1989. 432 p.
12. Barabash OP., Polovinkina MV., Polovinkin IP., Zhadanova ML. On a difference scheme for the Growth-Propagation Equation. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2023;44(3):989–992.
13. Ilina KP. An effective numerical method for solving the Fischer – Kolmogorov – Petrovsky – Piskunov Problem. *Mezhdunarodnyi nauchno-issledovatel'skii zhurnal*. 2023;3(129).

Конфликт интересов: о потенциальном конфликте интересов не сообщалось.

Conflict of interest: no potential conflict of interest related to this article was reported.

Поступила в редакцию 09.09.2024

Поступила после рецензирования 16.01.2025

Принята к публикации 20.01.2025

Received September 9, 2024

Revised January 16, 2025

Accepted January 20, 2025

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

Барабаш Ольга Павловна – преподаватель кафедры математики и информатики, Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», г. Воронеж, Россия

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Olga P. Barabash – Lecturer of the Department of Mathematics and Informatics, Military Educational and Scientific Centre of the Air Force N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin Air Force Academy, Voronezh, Russia

[К содержанию](#)