



西北工业大学

本科毕业设计论文

题 目 时间分数阶偏微分方程 Crank–Nicolson 格式矫正方法

专业名称 信息与计算科学

学生姓名 尹丽红

指导教师 王俊刚

毕业时间 2020 年 6 月

摘 要

时间分数阶偏微分方程是指时间变量中含有分数阶偏导数的一类方程。由于分数阶微分算子具有非局部性，它比整数阶导数更适合用来刻画具有记忆和遗传特质的物理过程和复杂系统，在物理、生物、材料化学以及社会学等众多学科领域有着广泛应用。但是分数阶问题的解析解大都含有一些难以计算的特殊函数，甚至更多情况下解析解难以求出，因此，构造高效稳定的数值方法甚为重要。由卷积数值积分 (CQ) 构造的数值格式具有高阶收敛性，且继承了一般线性多步法的稳定性，受到广泛关注。但是对于不满足相容性条件的初值问题，其解在 $t = 0$ 附近不光滑，该方法通常只能达到一阶收敛。因此人们开始对标准格式进行初始矫正，构造能够保持高阶收敛性的新的数值矫正格式。

本文通过研究时间分数阶扩散方程的数值解法，对 Crank–Nicolson 方法^[25] 构造一种新的初始矫正格式。主要结果如下：首先，本文详细介绍了全离散型 Crank–Nicolson 格式的构造过程。在标准 Crank–Nicolson 格式的初始值和右端加入包含待定系数的矫正项，期望能够通过选取适当的矫正系数改进标准格式的精度。通过 Laplace 变换等数学工具推出数值解的积分表达形式，并进一步得到误差表达式，再以二阶收敛为衡量标准，确定矫正系数，构造出一种新的矫正方法。然后，本文使用有限元软件包 FEniCS 求解几个不同算例，对矫正格式的收敛性进行验证，数值算例显示：当初值不满足相容性条件（边界条件）时，本文所构造的矫正方法仍然具有二阶收敛性。最后，以不满足相容性条件的初值为例，本文对比了几个 CQ 型数值格式的数值结果，发现在使用相同的网格尺度和时间步长时，本文所提出的新的矫正方法所得到的数值解误差最小。

关键词：Crank–Nicolson 方法，初步矫正，时间分数阶，卷积数值积分

ABSTRACT

Time fractional partial differential equations refer to a class of equations containing fractional partial derivatives in time variables. Because the fractional differential operator has nonlocality, it is more suitable for describing physical processes and complex systems with memory qualities. Thus, it is widely used in many disciplines such as physics, biology, material chemistry, and sociology. However, most of the analytical solutions of fractional problems contain special functions that are difficult to calculate, and even more often it is difficult to find analytical solutions. Therefore, it is necessary to construct efficient and stable numerical methods. The numerical formats constructed by the convolution quadrature(CQ) have high-order convergence and stability property, which have attracted widespread attention. However, for the initial value problem that does not meet the compatibility condition, the solution is weakly singular around $t = 0$, and the CQ methods usually have only an $O(\tau)$ convergence. Therefore, people began to construct the corrective methods for the original formats to restore the desired high-order rate.

In this paper, by studying the numerical solution of the time fractional diffusion equation, a new initial correction scheme is constructed for the Crank–Nicolson method^[25]. The main results are as follows: First, we introduce the construction process of the fully discrete Crank–Nicolson scheme in detail. Before the initial value and the source function of the standard Crank–Nicolson format, a correction item containing unknown coefficients is added. It is expected that the accuracy of the standard format can be improved by selecting an appropriate correction coefficient. Using mathematical tools such as Laplace transform, the integral expression form of the numerical solution is introduced, and the error expression is further obtained. Then, the second-order convergence is used as the standard to determine the correction coefficient, and a new correction method is constructed. Then, we use the finite element software package FEniCS to solve several specific equations to verify the convergence of the correction format. The numerical examples show that when the initial value does not meet the compatibility condition (boundary condition), the correction method indeed has second-order convergence. Finally, taking the initial value that does not meet the compatibility condition as an example, this paper compares the numerical results of several CQ-type numerical formats, and finds that when using the same grid scale and time step, the new correction proposed in this paper has the smallest error.

Key words: Crank-Nicolson method, initial correction, time-fractional order, convolution quadrature

目 录

第一章 绪论	1
1.1 课题背景及意义	1
1.2 国内外研究现状	3
1.3 主要研究内容与安排	4
第二章 矫正格式的推导	7
2.1 预备理论与知识	7
2.2 分数阶 Crank–Nicolson 格式介绍	9
2.2.1 空间——有限元半离散格式	10
2.2.2 时间——标准 Crank–Nicolson 全离散格式	12
2.2.3 时间——Crank–Nicolson 全离散矫正格式	12
2.3 解的积分表达形式	13
2.3.1 半离散格式数值解	13
2.3.2 全离散矫正格式数值解	14
2.4 推导矫正格式	15
2.4.1 推导矫正准则	15
2.4.2 矫正系数求解	16
2.5 本章小结	17
第三章 数值计算与分析	18
3.1 矫正格式收敛性的验证	18
3.1.1 时间方向收敛性验证	18
3.1.2 空间方向收敛性验证	20
3.2 若干 CQ 型数值格式收敛性比较	20
3.3 本章小结	21
第四章 全文总结	22
参考文献	23
致谢	25
毕业设计小结	26

第一章 绪论

1.1 课题背景及意义

分数阶微积分由经典的整数阶微积分概念推广而来，最早可溯源至 1695 年^[3]，L'Hospital 在信中向 Leibniz 询问当 $n = 1/2$ 时， $d^n y/dx^n$ 的意义。早期，Euler 和 Langrange 对这一问题也进行了研究，并给出了自己的见解，但大规模的系统研究最早出现在 19 世纪的初中期，Laplace, Fourier 等开始尝试利用积分给出分数阶导数的定义，Lacroix 借助 Gamma 函数给出 $y = x, n = 0.5$ 时的分数阶导数： $\frac{d^{1/2}y}{dx^{1/2}} = \frac{2\sqrt{x}}{\sqrt{\pi}}$ ，这与后来的 Riemann–Liouville 分数阶导数的结论相符。之后，还有 Liouville, Abel, Riemann, Holmgren 等大批数学家先后去发展和完善分数阶微积分，为此做出了很大贡献。但是因缺乏实际的物理意义，分数阶微积分一直被当做纯粹的数学理论问题来研究，发展进程缓慢。

分数阶微分方程最早的应用例子出现在 1832 年 Liouville 的位势问题和之后的 Abel 等时降落问题，此后其在科学工程中的应用才逐渐扩大。近几十年来，科学技术的进步与发展让越来越多的学者在实践中发现，由于分数阶导数的历史依赖性和非局部性，它比以往使用的整数阶模型更能准确地刻画具有记忆和遗传特质的物理过程和复杂系统（[12, pp.XVII -XXI]）。因此，分数阶微分方程逐渐被广泛应用于物理、生物、材料化学、金融、社会学等各大学科领域。例如非晶态半导体中的电荷传输；地下水中污染物的扩散；高分子体系的弛豫；粘弹性力学；纳米级金属薄膜中的反常热扩散过程^[17]；人口增长模型等。下面看几个具体的数学模型（[12, pp.261-307]）。

例 1 (线性粘弹性理论) 描述应变与应力关系的方程因相关材料的物理属性不同而由较大差异，众所周知，描述理想固体时常用 Hook 定律

$$\sigma(t) = E\epsilon(t),$$

描述牛顿流体时有

$$\sigma(t) = \eta \frac{d\epsilon(t)}{dt},$$

其中 E 和 η 是常数。而实际应用中的材料属性与这两者都有很大不同，模型描述会出现错误。于是大家倾向于将这两个模型结合使用，但仍存在一些问题：部分情况下实验结果与现实不符，方程形式复杂，计算困难，线性被破坏等。而这些问题可以由分数阶微分算子较好地解决。第一个推导和解决特殊应用问题分数阶偏微分方程的人 A.N.Gerasimov 提出了基本定律的一个变形形式：

$$\sigma(t) = \kappa {}_C D_t^\alpha \epsilon(t) \quad (0 < \alpha < 1),$$

其中 κ 是与材料相关的常数。并考虑了描述粘性流体在两个运动表面之间运动的问题：

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} &= \kappa D^\alpha \left(\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \right), \\ \rho x^3 \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} &= \kappa \frac{\partial}{\partial x} \left(x^3 \frac{\partial}{\partial x} (D^\alpha y) \right), \\ y &= y(x, t); \quad D^\alpha \equiv {}_{-\infty}^R D_t^\alpha.\end{aligned}$$

此外还有很多不同的粘弹性模型，如双参数 Scott Blair 定律，三参数广义 Voigt 模型。

例 2 (神经元) 在人体头部旋转的开始和结束时我们的眼睛会进行抽搐运动，称为眼球震颤，它实际上是前庭眼的反射运动以找到一个视觉固定点，由运动前神经元和运动神经元控制。T.J.Anastasio 指出了以往使用整数阶方法描述前庭神经元行为的不足之处，并通过拉普拉斯变换提出了一种新的分数阶模型：

$$\frac{R(s)}{V(s)} = \frac{\tau_1(s\tau_2 + 1)s^{\alpha_d - \alpha_i}}{s\tau_1 + 1},$$

其中 $R(s)$ 和 $V(s)$ 分别是前庭运动神经元放电率 $r(t)$ 和头部转动的角速度 $v(t)$ 的拉普拉斯变换后的结果， τ_1 和 τ_2 是时间常数， α_d 表示前庭神经元水平对应的分数导数的阶数， α_i 是 Anastasio 模型中分数阶积分项的阶数。

例 3 (分数阶扩散方程) 特定类型多孔介质（分型介质）中的扩散模型是分数阶导数的重要应用之一，由此得到的微分方程的阶数也与多孔材料的分形维数有关。在描述分形介质中的传递过程时，A.Le Mehaute 等人提出以下方程

$${}_0 D_t^{1/d-1} J(t) = LX(t),$$

其中 $J(t)$ 表示分形界面的宏观流动， $X(t)$ 表示局部驱动力， L 为常数， d 是分形介质的分形维数。经过进一步发展，该方程引出两类分数阶偏微分方程。第一种是对 Fick 定律的发展：

$${}_0 D_t^{1/d-1} P(r, t) = -A \left(\frac{\partial P(r, t)}{\partial r} + \frac{\kappa}{r} P(r, t) \right),$$

其中 $P(r, t)$ 是分形上随机游动的平均概率密度， A 和 κ 是常数， d 是异常扩散指数。另一种的一个经典方程例子是：

$${}_0 D_t^\alpha u(x, t) = \frac{d^2 u(x, t)}{dx^2}.$$

由于涉及的学科领域多，应用范围广，分数阶微分方程的理论研究受到了越来越多的关注，其中方程的求解是非常重要的部分。无论是对于数学体系的发展与完善还是进一步加强实际应用性以促进其他学科发展都具有非常重要的价值。目前求解分数阶微分算子常用的解析方法有 Laplace^[11] 变换法，Fourier^[14, 8] 变换

法，Adomian 分解法等。但是分数阶微分方程的精确解基本不能用具体的物理意义解释，也找不到对应的表达式，且大多数方程的精确解都会含有特殊函数，形式复杂，计算困难。因此，寻找高效稳定的数值方法来求解分数阶微分方程变得十分重要。

根据应用背景的不同，分数阶导数的定义也有不同的形式。目前大家主要研究的有 Caputo 分数阶导数，Riemann–Liouville 分数阶导数 (R–L) 和 Grunward–Letnikov 分数阶导数。Heymans^[18] 等指出求解 R–L 型分数阶导数需要用到未知函数的初值条件，而在实际应用中这类初值很难给出，因而对初值要求较简单的 Caputo 型分数阶导数更被广泛应用于各类工程中。根据分数阶导数所在的位置，分数阶微分方程又可以分为三类：时间分数阶，空间分数阶以及时空分数阶微分方程。顾名思义，时间分数阶偏微分方程是指时间变量中含有分数阶偏微分的一类方程，它是分数阶微分方程的一个重要组成部分。

1.2 国内外研究现状

近年来，随着分数阶偏微分方程被广泛应用于各个领域，国内外掀起了研究分数阶偏微分方程数值算法的热潮，具体的研究内容也更加贴近实用，出现了许多有效的数值计算方法和相应的误差分析结果，其中很多也适用于经典的整数阶微分方程。目前，时间分数阶方程的数值方法主要分为四类：有限差分法、卷积数值积分 (convolution quadrature)、间断有限元法 (discontinuous Galerkin) 和谱方法。

有限差分法具有简单直接、易于实现的特点，基本思想是用数值微分公式直接逼近被积函数中的导数，常被称为 L1 格式。L1 格式逼近时间分数阶方程的光滑解具有 $2 - \alpha$ 阶精度，即误差约等于 $O(\tau^{2-\alpha})$ ，其中 τ , α 分别为时间离散的步长和分数阶微分方程的阶数。后来，Cao, Alikehow 以及 Lv 等^[19, 2, 29] 陆续发展了具有更高阶精度的有限差分法。这些有限差分法对光滑解具有相应的最优精确度，但是对一般的不满足相容性条件的初值，时间分数阶方程的解在 $t = 0$ 处不光滑，数值算例显示这些有限差分方法通常只有一阶精度。近期，Jin^[23] 等和 Yan^[4] 等陆续研究了 L1 格式在非光滑数据时的数值误差和 L1 格式的初始矫正方法。经典的 L1 格式在非光滑数据下只有一阶精度，但通过在第一层时间步修改数值格式，可使 L1 格式能够对一般的（未必满足相容性条件）初值也能达到 $2 - \alpha$ 的最优精度。

间断有限元法最早由 Reed 和 Hill 在 1973 年首先提出，具有较好的稳定性。McLean 等^[30] 分析了最低阶的分段常数 DG 方法，在渐变网格下证明了数值解的一阶收敛率。接着，在统一的时间步长下，他们^[31] 又证明在远离 $t = 0$ 时，DG 方法依然可以达到一阶收敛。关于提高 DG 方法的准确性，Muatapha 等^[16] 建立了一种更高阶的 hp 型的间断 Galerkin 方法，并证明了该方法的适定性、误差以及收敛结果。

由 Lubich^[5, 6] 提出的卷积数值积分 (CQ) 为构造高阶的离散时间分数阶偏微

分方法提供了一个灵活的框架，并且该方法会自动继承一般线性多步法的稳定性，尤其是 k 步向后差分方法 (BDFk) 自动具有 $O(\tau^k)$ 的局部截断误差。与有限差分方法相似，对于不满足相容性条件的方程，其解在 $t = 0$ 附近不光滑，CQ 方法通常只能达到一阶收敛。为了将 BDF2 的精度提高到二阶，在研究扩散波方程过程中，Lubich^[7] 等在初始步对 BDF2 格式进行了一步矫正。除了线性问题，Cuesta^[9] 等将方程的解表示为正则函数的幂级数的展开式，通过逼近正则函数提出了针对半线性扩散波问题的二阶 CQ 方法。之后，Jin^[24] 等将 Lubich 的矫正方法^[7] 扩展到次扩散方程上，并在远离 $t = 0$ 处得到了二阶局部误差。近来，为了使得 CQ 方法对于一般次扩散问题都能保持原有的最优收敛阶，Jin^[26, 25] 等先后对 k 阶 BDF 方法和 Crank–Nicolson 方法进行初始矫正：前者在前 $k - 1$ 步进行矫正，后者对前两步进行矫正，矫正后的格式对于不满足相容性条件的初值分别能保持 k 阶和 2 阶的收敛速度。此外，Gunzburger^[15] 等在研究扩散波方程时通过在 $t = t_n - \tau/2$ 处近似方程，提出了一种不需要初步矫正的二阶 Crank–Nicolson 格式，并在初值和右端满足一定正则条件时给出了最优误差估计。对于该类方程，Crank–Nicolson 数值方法不需矫正就自然能够达到二阶，但对于次扩散方程就必须通过矫正才能达到二阶。

谱方法包括谱变分法和谱配置法。Li 和 Xu^[13] 在研究时间分数阶扩散方程过程中提出了一种 Galerkin 时空谱方法，通过引入变分公式证明了该方法的适定性，并根据先验误差估计证明了该方法的收敛性。构造高阶谱方法时，往往强调在单个区域进行谱近似，但 Chen^[10] 等突破惯例，提出了一种时间分数阶偏微分方程的多域谱法，并对稳定性进行了研究。由于现有的大多数数值方法的误差估计指出典型的分数阶微分方程具有缓慢的收敛速度，除非是人为构造的具有平滑解的方程，Chen^[20] 等通过定义一类与分数演算本质相关的广义 Jacobi 函数对分数方程进行光谱近似，并指出当数据足够光滑时，该方法可达到真正的光谱精度。

1.3 主要研究内容与安排

以上介绍的四类数值方法各具特点，其中卷积数值积分方法以其高阶收敛性和稳定性受到大家的广泛关注。但因它的高阶收敛性在计算初值不满足相容性条件问题时会遭到破坏，人们开始对其原有格式进行初始矫正，以期构造可以保持原有高阶收敛性的矫正格式。本文的内容也由此展开。

考虑如下分数阶偏微分方程 $u(t)$ ：

$$\partial_t^\alpha u(t) - \Delta u(t) = f(t) \quad t \in (0, T], \quad (1-1)$$

其中 $\Delta : H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ 表示拉普拉斯算子 (Laplace Operator)， $H_0^1(\Omega)$ ， $H^2(\Omega)$ 表示标准的 Sobolev 空间； Ω 为 $\mathbb{R}^d (d = 1, 2, 3)$ 中的有界凸区域，其边界记为 $\partial\Omega$ ； $T > 0$ 是一个固定值； $f : (0, T) \rightarrow L^2(\Omega)$ 是给定的右端项函数。符号 $\partial_t^\alpha u$ 表示关于时间 t 的 $\alpha \in (0, 1)$ 阶 Caputo 分数导数，其具体的定义内容参考定义 (2)。

方程 (1-1) 的边界条件是在 $\partial\Omega \times (0, T]$ 上 $u = 0$, 初始条件为在区域 Ω 中 $u(0) = v$.

方程 (1-1) 是时间分数阶次扩散方程, 能够描述带有长时记忆的流通的分数阶定律。先前, Jin^[25] 等针对时间分数阶次扩散方程构造了一种全离散型标准 Crank–Nicolson 格式。该格式先在空间上运用标准 Galerkin 有限元方法进行半离散, 将问题 (1-1) 转化为: 寻找函数 $u_h(t) \in X_h$, 当初值 $u_h(0) = v_h \in X_h$, 右端 $f_h(t) = P_h f(t)$ 时, 使其满足

$$\partial_t^\alpha u_h(t) - \Delta_h u_h(t) = f_h(t), \quad \forall t > 0. \quad (1-2)$$

再对半离散问题进行时间离散, 从而得到最终的全离散格式, 即全离散问题可视为对空间半离散问题的时间离散。用 U_h^n 近似方程的解 $u_h(t_n)$, $n = 1, 2, \dots, N$ 时, 具体的数值格式为:

$$\bar{\partial}_\tau^\alpha (U_h^n - v_h) - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^n - \frac{\alpha}{2}\Delta_h U_h^{n-1} = (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^n + \frac{\alpha}{2}F_h^{n-1}, \quad (1-3)$$

其中 $\Delta_h : X_h \rightarrow X_h$ 表示拉普拉斯算子在有限元子空间 $X_h \subset H_0^1(\Omega)$ 上的 Galerkin 近似, $F_h^n = P_h f(t_n)$ 表示 $f(t_n)$ 在 X_h 上的 L^2 投影, $v_h \in X_h$ 是初始值 v 的近似值, 即有 $v_h = U_h^0$ 。而 $\bar{\partial}_\tau^\alpha \varphi^n$ 表示 Riemann–Liouville 分数阶微分算子 ${}^R\partial_\tau^\alpha \varphi(t_n)$ 的欧拉向后型卷积数值积分的近似, 具体定义为:

$$\bar{\partial}_\tau^\alpha \varphi^n := \tau^{-\alpha} \sum_{j=0}^n b_{n-j} \varphi^j, \quad (1-4)$$

系数 b_j 可由幂级数展开式 $(1 - \xi)^\alpha = \sum_{j=0}^{\infty} b_j \xi^j$ ($\xi \in \mathbb{C}$ 且 $|\xi| < 1$) 确定, 具体为

$$b_j = (-1)^j \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(j + 1)\Gamma(\alpha - j + 1)}.$$

此外, 他们还指出在初值不满足相容性条件时该标准 Crank–Nicolson 格式在时间上达不到原有的二阶收敛, 并给出了该方法的两步矫正格式。(由于 Galerkin 有限元半离散格式的误差分析结果已经得到^[22, 21], 我们只关注于全离散格式关于时间的收敛性。) 因此, 为了使 Crank–Nicolson 格式在解决初值不满足相容性条件问题时仍保持原本的二阶收敛性, 本文通过研究时间分数阶次扩散方程 (1-1), 构造出标准 Crank–Nicolson^[25] 方法的一步矫正格式, 其形式更加简单, 且易于实现。本文具体从以下方面进行研究:

- (1) 构造 Crank–Nicolson 方法的一步矫正格式。Crank–Nicolson^[25] 格式是一种全离散格式, 它先在空间上使用标准的 Galerkin 有限元方法进行半离散, 再对半离散格式在时间维度上运用时间步长法达到全离散, 当 $\alpha = 1$ 时其形式与经典整数阶 Crank–Nicolson 格式一致。我们在该格式的初始值和右端项前添加修正系数, 利用 Laplace 变换, 母函数和柯西积分公式等数学工具推出半离散格式和全离散格式 (含有待定系数) 的积分表达形式, 再由积

分表达形式得到误差表达式，并以二阶收敛性作为衡量标准，进一步求出修正系数，得到一步修正格式 ($2 \leq n \leq N$):

$$\begin{aligned} \bar{\delta}_i^\alpha(U_h^1 - v_h) - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^1 &= \frac{1}{2}(\Delta_h v_h + F_h^0) + (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^1, \\ \bar{\delta}_i^\alpha(U_h^n - v_h) - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^n - \frac{\alpha}{2}\Delta_h U_h^{n-1} &= (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^n + \frac{\alpha}{2}F_h^{n-1}. \end{aligned} \quad (1-5)$$

- (2) 根据构造的一步修正格式，利用有限元软件 FEniCS 对具体方程进行数值求解，验证修正格式的二阶收敛性。此外，再通过具体数值算例对二阶向后差分格式 (SBD)、Crank–Nicolson 格式 (CN)、Crank–Nicolson 两步修正格式 (CN-2) 以及一步修正格式 (CN-1) 的计算性能进行比较。

针对时间分数阶扩散方程，无论是有限差分法还是由卷积数值积分 (CQ) 构造的数值方法，为了在计算不满足相容性条件问题时仍保持高阶收敛性，都需要对原有格式进行适当的初始修正。关于 CQ 型方法，目前有 k 阶向后差分格式 (BDF) 的 $k-1$ 步修正格式和 Crank–Nicolson 格式的两步修正格式。因而发展高阶稳定的数值方法是很有必要的。由此本文的创新点在于，通过待定系数法构造出一种新的 Crank–Nicolson 格式的修正格式，其只需对时间步进行初始的一步修正，形式更加简单，亦更容易实现。

后面章节的内容安排如下。第二章介绍相关的预备知识、标准 Crank–Nicolson 格式；通过半离散和全离散数值解的积分表达形式推出修正准则，给出修正系数。第三章利用三个数值例子从实验角度验证修正格式的二阶收敛性，并对几个 CQ 型方法的计算性能进行比较与讨论。第四章对全文进行概括总结，指出本文的结论和后续研究方向。

第二章 矫正格式的推导

本章首先介绍有关的预备知识，包括几个分数阶导数的定义和一些数学运算工具与引理；对将要矫正的标准 Crank–Nicolson 格式进行介绍，分为空间半离散格式和全离散格式两部分，并列含有待定系数的全离散矫正格式；再利用拉普拉斯逆变换和柯西积分公式，推出半离散解和全离散数值解（含有待定系数）的积分表达形式；以二阶收敛阶为衡量标准确定矫正系数，得到一步矫正格式。

2.1 预备理论与知识

定义 1 伽玛函数 (Gamma Function) 的积分变换定义为：

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} y^{x-1} \exp(-y) dy, \quad x > 0,$$

关于伽玛函数经常用到的一个重要性质是： $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ ， $\Gamma(1) = 1$ 。

定义 2 设 $f(t)$ 定义在区间 $[a, T]$ 上， m 是大于等于 α 的最小整数，则阶数为 α 的 Caputo 分数阶导数的定义为

$${}_a D_t^\alpha f(t) = 1/\Gamma(m-\alpha) \int_a^t (t-\tau)^{m-\alpha-1} f^{(m)}(\tau) d\tau.$$

定义 3 设 $f(t)$ 定义在区间 $[a, T]$ 上， m 是大于等于 α 的最小整数，则阶数为 α 的 Riemann-Liouville 分数阶导数的定义为

$${}_a D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dt^m} \int_a^t (t-\tau)^{m-\alpha-1} f(\tau) d\tau.$$

定义 4 (拉普拉斯变换) ^[33] 如果定义在 \mathbf{R}^+ 上的函数 $f(t)$ 使得积分

$$\widehat{f}(s) = \int_0^{+\infty} f(t)e^{-st} dt, \quad s \in \mathbf{C},$$

在 \mathbf{C} 的某一区域内收敛，则称 $F(s) = \widehat{f}(s)$ 为函数 $f(t)$ 的拉普拉斯变换. 若 $\widehat{f}(s)$ 是 $f(t)$ 的拉普拉斯变换，则称 $f(t)$ 是 $F(s)$ 的拉普拉斯逆变换，一般可写为如下复积分：

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\beta-i\infty}^{\beta+i\infty} F(s)e^{st} ds, \quad t > 0,$$

其中，积分路径为平行于虚轴的直线. 当 $F(s)$ 满足一定的条件时，可以用复积分理论中的留数定理来计算拉普拉斯逆变换.

定义 5 (傅里叶变换) ^[33] 设 $f(t)$ 为定义在 $(-\infty, +\infty)$ 上的实值（或复值）函数，其傅里叶积分收敛。则由积分

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt$$

建立的 $f(t)$ 与 $F(\omega)$ 之间的对应称作傅里叶变换（简称傅氏变换）。用字母 \mathcal{F} 表达，即

$$F(\omega) = [f(t)].$$

积分

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega)e^{i\omega t} d\omega$$

建立的 $F(\omega)$ 与 $f(t)$ 之间的对应称作傅里叶逆变换（简称傅氏逆变换）。用字母 \mathcal{F}^{-1} 表达，即

$$f(t) = \mathcal{F}^{-1}[F(\omega)].$$

性质 1 ^[33] 傅里叶变换的部分性质：位移性质，微分性质。

- 位移性质：

$$\mathcal{F}[f(t - t_0)] = e^{-i\omega t_0} \mathcal{F}[f(t)],$$

$$\mathcal{F}^{-1}[F(\omega - \omega_0)] = e^{-i\omega_0 t} \mathcal{F}^{-1}[F(\omega)],$$

其中， t_0 和 ω_0 是常数。

- 微分性质：

设函数 $f(t)$ 在 $(-\infty, +\infty)$ 上连续或只有有限个可去间断点，则若 $|t| \rightarrow +\infty$ 时， $f^{(n)}(t) \rightarrow 0$ ，则

$$\mathcal{F}[f^{(n)}(t)] = (i\omega)^n \mathcal{F}[f(t)] \quad (n = 0, 1, 2, \dots);$$

若 $\int_{-\infty}^{+\infty} |t^n f(t)| dt$ 收敛，则

$$\mathcal{F}^{-1}[F^{(n)}(\omega)] = (it)^n \mathcal{F}^{-1}[F(\omega)] \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

定理 1 (柯西积分公式) ^[34] 如果 $f(x)$ 在单连通区域 D 内解析， C 为 D 内任意一条正向简单闭曲线，它的内部完全含于 D ， Z_0 为 C 内的任一点，则

$$f(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz.$$

命题 1 设 m 是大于等于 α 的最小整数， ${}_a D_t^\alpha f(t)$ 存在，且在初始点 $t = a$ 处函数 $f(t)$ 存在 $m - 1$ 阶导数，那么

$${}_a^C D_t^\alpha f(t) = {}_a D_t^\alpha [f - T_{m-1}[f; a]](t),$$

其中， $T_{m-1}[f; a]$ 为函数 f 的 $m - 1$ 阶 Taylor 多项式：

$$T_{m-1}[f; a] = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(t-a)^k}{k!} f^{(k)}(a).$$

注释 1 在本文中我们研究 $m = 1, a = 0$, 即 $0 < \alpha < 1$ 时的分数阶偏微分方程, 此时命题 (1) 的结论简化为 ${}^C D_t^\alpha f(t) = D_t^\alpha [f(t) - f(0)]$.

引理 1 ^[25] 令 $0 < \alpha < 1$, 存在 $\delta_1 > 0$ (不依赖于 τ), 对于任意的 $z \in \Gamma_{\theta, \delta}^\tau$ 存在常数 c_0, c_1 (不依赖于 θ, τ) 使得下式成立:

$$c_0 \leq |1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2} e^{-z\tau}|^{1/\alpha} \leq c_1,$$

其中 $\delta \in (0, \delta_1]$, $\theta \in (\pi/2, \pi/2 + \delta_1]$, $\Gamma_{\theta, \delta} = \{z \in \mathbb{C}: |z| = \delta, |\arg z| \leq \theta\} \cup \{z \in \mathbb{C}: z = \rho e^{\pm i\theta}, \rho \geq \delta\}$, $\Gamma_{\theta, \delta}^\tau = \{z \in \Gamma_{\theta, \delta}: |\operatorname{Im}(z)| \leq \pi/\tau\}$. 图 (2-1) 给出了 $\Gamma_{\theta, \delta}$ 和 $\Gamma_{\theta, \delta}^\tau$ 的几何含义.

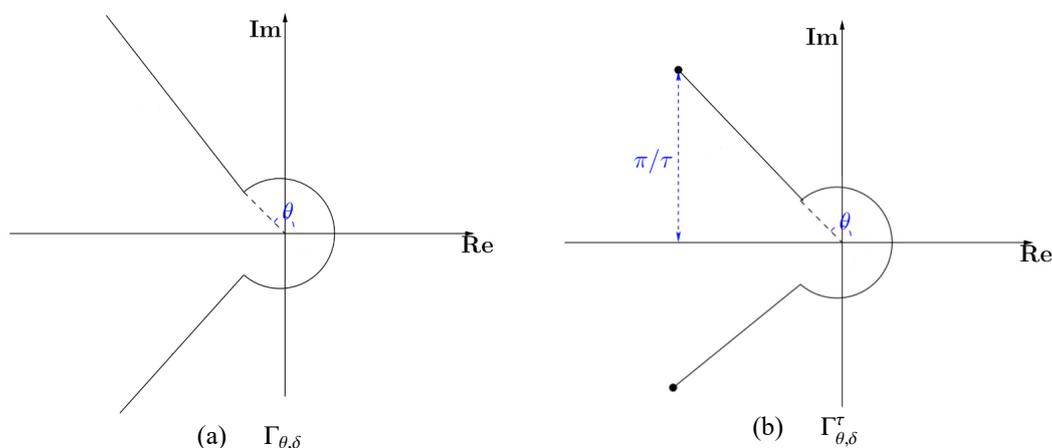


图 2-1 轮廓 $\Gamma_{\theta, \delta}$ 和 $\Gamma_{\theta, \delta}^\tau$ 的形状示意图

引理 2 ^[25] 令 $0 < \alpha < 1$, $\phi \in (\alpha\pi/2, \pi)$ 为一个固定值. 存在 $\delta_0 > 0$ (不依赖于 τ), 使得算子 $(\beta_\tau(e^{-z\tau})^\alpha - \Delta_h)^{-1}$ 关于 z 在由 Γ_ρ^τ 、 $\Gamma_{\theta, \delta}^\tau$ 和 $\Gamma_\pm^\tau := \mathbb{R} \pm i\pi/\tau$ 围成的区域中解析, 这个区域记为 Σ . 其中, $\Gamma_\rho^\tau := \{z = -\ln(\rho)/\pi + iy : \rho \in (0, 1), y \in \mathbb{R}, |y| \leq \pi/\tau\}$, Δ_h 是离散拉普拉斯算子,

$$\beta_\tau(e^{-z\tau}) = \frac{1 - e^{-z\tau}}{\tau(1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2} e^{-z\tau})^{1/\alpha}},$$

$\theta \in (\pi/2, \pi/2 + \delta_0]$, $\delta \in (0, \delta_0]$.

2.2 分数阶 Crank–Nicolson 格式介绍

Jin^[25] 等提出一种全离散的分数阶 Crank–Nicolson 方法, 其在空间上使用标准的 Galerkin 有限元方法, 在时间上使用由 Dimitrov^[32] 提出的时间步长方法. 在这一节, 我们先后对半离散的 Galerkin 有限元方法和全离散的 Crank–Nicolson 格式进行介绍.

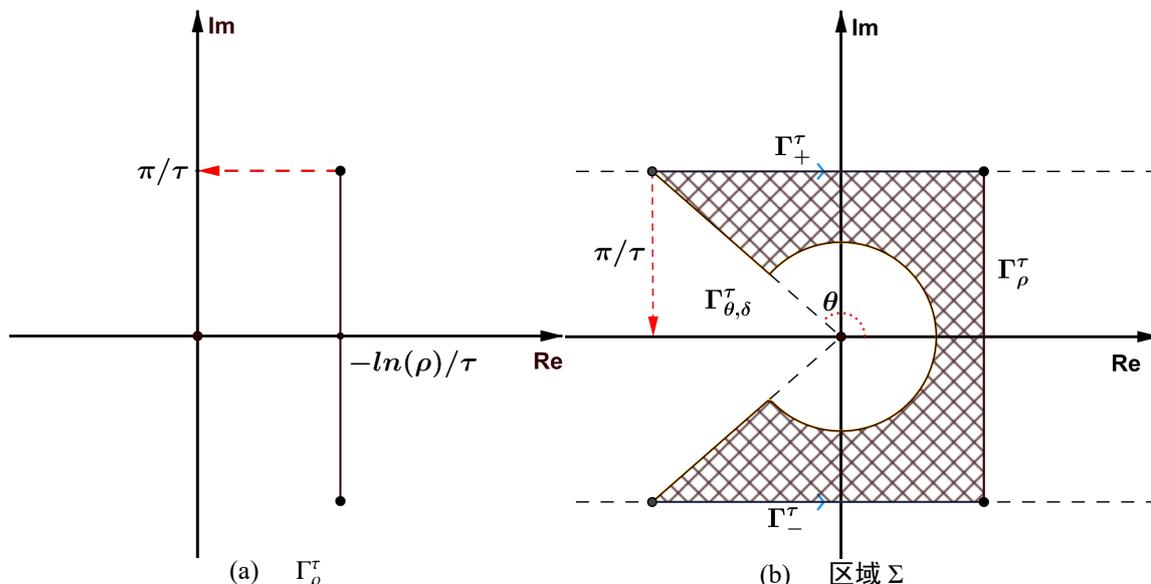


图 2-2 轮廓 Γ_ρ^τ 和区域 Σ 的形状示意图

2.2.1 空间——有限元半离散格式

Galerkin 有限元方法基本可分为 3 步：区域剖分、定义有限元函数空间、确定变分形式。

将 d 维区域 Ω 三角剖分成形状规则的准均匀 d 维单形元 B ，设网格尺度为 h ，记这个剖分为 B_h 。在此剖分 B_h 上，我们定义一个分段连续的线性有限元空间 X_h ：

$$X_h = \{v_h \in H_0^1(\Omega) : v_h|_B \text{ 是一个线性函数}, \forall B \in B_h\}.$$

在确定有限元空间 X_h 后，先依次定义 $L^2(\Omega)$ 空间， $H_0^1(\Omega)$ 空间到 X_h 的投影 P_h 和 R_h ：

$$(P_h \varphi, \chi_h) = (\varphi, \chi_h), \quad \forall \chi_h \in X_h,$$

$$(\nabla R_h \varphi, \nabla \chi_h) = (\nabla \varphi, \nabla \chi_h), \quad \forall \chi_h \in X_h,$$

接着，我们定义有限元空间 X_h 上的离散拉普拉斯算子 $\Delta_h : X_h \rightarrow X_h$ ：

$$-(\Delta_h \varphi_h, \chi_h) = (\nabla \varphi_h, \nabla \chi_h), \quad \forall \varphi_h, \chi_h \in X_h,$$

其中 (\cdot, \cdot) 表示 $L^2(\Omega)$ 中的内积。由文献^[28, 27] 知离散拉普拉斯算子 Δ_h 对任意 $z \in \Sigma_\theta := \{z \in \mathbb{C} \setminus \{0\} : |\arg z| \leq \theta\}$ 都有 $\|(z - \Delta_h)^{-1}\| \leq c|z|^{-1}$ 成立，其中 $\theta \in (\pi/2, \pi)$ 。因此存在一个常数 c （只依赖于 θ 和 α ）使得对任意 $z \in \Sigma_\theta$ ， $\|(z^\alpha - \Delta_h)^{-1}\| \leq c|z|^{-\alpha}$ 成立。

然后，我们以二维空间为例，根据 Galerkin 有限元方法推出方程 (1-1) 的变分形式。给方程 (1-1) 两边都乘以一个任意的 $\chi_h \in X_h$ 并移项，再对其关于区域 Ω 进行积分，可以得到：

$$\int_{\Omega} (\partial_t^\alpha u - \Delta u - f) \chi_h dS = 0,$$

即有

$$\int_{\Omega} \partial_t^\alpha u \chi_h dS - \int_{\Omega} f \chi_h dS + \int_{\Omega} -\Delta u \chi_h dS = 0.$$

而由 Green 第一公式可知,

$$\int_{\Omega} -\Delta u \chi_h dS = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \chi_h}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \chi_h}{\partial y} \right) dx dy - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \chi_h ds,$$

其中 \mathbf{n} 表示区域边界 $\partial\Omega$ 的单位外法向, $\partial u / \partial \mathbf{n}$ 是 u 沿 \mathbf{n} 的方向导数。而由有限元空间的定义知

$$\int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \chi_h ds = 0$$

, 于是有

$$\int_{\Omega} -\Delta u \chi_h dS = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \chi_h}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \chi_h}{\partial y} \right) dx dy.$$

因此我们将问题转化为: 寻找函数 $u_h(t) \in X_h$, 当初值条件为 $u_h(0) = v_h \in X_h$ 时, 使其满足

$$-(\partial_t^\alpha u_h, \chi_h) + (\nabla u_h, \nabla \chi_h) = (f, \chi_h), \quad \forall \chi_h \in X_h. \quad (2-1)$$

v_h 的选择取决于初值 v 的光滑性^[27], 当 $v \in L^2(\Omega)$ 时, 取 $v_h = P_h v$, 当 $v \in D(\Delta) = H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)$ 时, 取 $v_h = R_h v$ 。

根据定义在空间 X_h 上的离散拉普拉斯算子对式 (2-1) 进行变形, 进一步将问题转化为: 寻找函数 $u_h(t) \in X_h$, 当初值 $u_h(0) = v_h \in X_h$, 右端 $f_h(t) = P_h f(t)$ 时, 使其满足

$$\partial_t^\alpha u_h(t) - \Delta_h u_h(t) = f_h(t), \quad \forall t > 0. \quad (2-2)$$

Jin^[22, 21] 等已经证明了 Galerkin 有限元半离散格式 (2-2) 关于网格尺度 h 具有二阶收敛性, 并给出了定理描述, 具体内容可参考定理 (2), 我们后文中也通过数值算例验证了这一结论。因此在本文中我们主要关注格式 (2-2) 在对时间离散后构造的 Crank-Nicolson 格式关于时间步长 τ 的误差估计。

定理 2 ^[22] u 和 u_h 分别表示方程 (1-1) 的精确解和半离散格式 (2-2) 的解, 初值 $v \in H^q$, $q = 0, 1$ 。此时 $v_h = P_h v$, 令 $l_h = |\ln h|$, 则有

$$\|u_h(t) - u(t)\| + h \|\nabla(u_h(t) - u(t))\| \leq ch^2 l_h t^{-\alpha(1-q/2)} \|v\|_q, \quad q = 0, 1.$$

特别地, 当初值 v 足够光滑, 满足 $v_h = R_h v$ 时,

$$\|u_h(t) - u(t)\| + h \|\nabla(u_h(t) - u(t))\| \leq ch^2 |v|_2,$$

其中 $\|\nabla(u_h(t) - u(t))\| \leq cht^{-\alpha/2} \|v\|_1$ 。

2.2.2 时间——标准 Crank–Nicolson 全离散格式

根据注释 (1) 中 Caputo 分数阶导数与 Riemann–Liouville 分数阶导数的关系： $\partial_t^\alpha f(t) = {}^R\partial_t^\alpha [f(t) - f(0)]$ ，我们可以将半离散格式 (2-2) 转化为：

$${}^R\partial_t^\alpha(u_h(t) - v_h) - \Delta_h u_h(t) = f_h(t). \quad (2-3)$$

对区间 $[0, T]$ 进行均匀剖分，记为 $\{t_n = n\tau\}_{n=0}^N$ ，时间步长 $\tau = T/N$ ， $N \in \mathbb{N}$ 。利用欧拉向后型卷积数值积分 (1-4) 来离散 Riemann–Liouville 型微分算子 ${}^R\partial_t^\alpha \varphi(t_n)$ 时其只能达到 $O(\tau)$ 精度，因而为了实现 $O(\tau^2)$ 精度，Jin^[25] 等通过傅里叶变换得到了一种带有权重的 θ 型方法，接下来介绍其推导过程。

假设函数 φ 在 \mathbb{R} 上光滑，且 $t \leq 0$ 时 $\varphi = 0$ 。那么函数

$$\bar{\partial}_\tau^\alpha \varphi(t) := \tau^{-\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} b_j \varphi(t - j\tau)$$

在 $t = t_n$ 处与方法 (1-4) 一致，且满足

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\bar{\partial}_\tau^\alpha \varphi(t)](\xi) &= \int_{\mathbb{R}} \bar{\partial}_\tau^\alpha \varphi(t) e^{-it\xi} dt = \tau^{-\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}} b_j \varphi(t - j\tau) e^{-it\xi} dt \\ &= \tau^{-\alpha} (1 - e^{-i\tau\xi})^\alpha \mathcal{F}\varphi(\xi) = (i\xi)^\alpha (1 - \frac{i\alpha}{2}\tau\xi + O(\tau^2\xi^2)) \mathcal{F}\varphi(\xi). \end{aligned}$$

而根据傅里叶变换的性质，有

$$\mathcal{F}[{}^R\partial_t^\alpha \varphi(t - s)](\xi) = (i\xi)^\alpha e^{-is\xi} \mathcal{F}\varphi(\xi) = (i\xi)^\alpha (1 - is\xi + O(s^2\xi^2)) \mathcal{F}\varphi(\xi).$$

根据以上结果，当选择 $s = \alpha\tau/2$ 时可以得到

$$\begin{aligned} \bar{\partial}_\tau^\alpha \varphi(t) &= {}^R\partial_t^\alpha \varphi(t - \alpha\tau/2) + \mathcal{F}^{-1}[O(\tau^2\xi^2)(i\xi)^\alpha \mathcal{F}\varphi(\xi)] \\ &= {}^R\partial_t^\alpha \varphi(t - \alpha\tau/2) + O(\tau^2) \\ &= (1 - \frac{\alpha}{2}) {}^R\partial_t^\alpha \varphi(t) + \frac{\alpha}{2} {}^R\partial_t^\alpha \varphi(t - \tau) + O(\tau^2). \end{aligned}$$

由此，令 $t = t_n$ ，再结合 (2-3)，即可得到全离散的分数量 Crank–Nicolson 格式^[25]：

$$\bar{\partial}_\tau^\alpha(U_h^n - v_h) - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^n - \frac{\alpha}{2}\Delta_h U_h^{n-1} = (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^n + \frac{\alpha}{2}F_h^{n-1}, \quad (2-4)$$

2.2.3 时间——Crank–Nicolson 全离散矫正格式

当方程的解 u 光滑且满足相容性条件时，标准 Crank–Nicolson 方法 (2-4) 可以达到的最优收敛阶为二阶，但当初值 v 和右端项 f 不相容时，方程的弱解在 $t = 0$ 处具有奇异性，即使初值 v 和右端项 f 是光滑的，Crank–Nicolson 格式通常也只具有一阶收敛性。这一现象是由初值 v 和 f 导致的，于是，为了保持该类方法的二阶精度，本文考虑通过在初值 v 和右端初值 $f(0)$ 相关的项之前增加矫正系数 a_2 ，对 Crank–Nicolson 格式 (2-4) 的初始步进行矫正，将初始步格式设为：

$$\bar{\partial}_\tau^\alpha(U_h^1 - v_h) - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^1 - \frac{\alpha}{2}\Delta_h U_h^0 = a_2(\Delta_h v_h + F_h^0) + (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^1 + \frac{\alpha}{2}F_h^0,$$

根据 $v_h = U_h^0$ 进一步整理，可得矫正格式 ($2 \leq n \leq N$):

$$\begin{aligned} \bar{\partial}_t^\alpha(U_h^1 - v_h) - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^1 &= (\frac{\alpha}{2} + a_2)(\Delta_h v_h + F_h^0) + (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^1, \\ \bar{\partial}_t^\alpha(U_h^n - v_h) - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^n - \frac{\alpha}{2}\Delta_h U_h^{n-1} &= (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^n + \frac{\alpha}{2}F_h^{n-1}, \end{aligned} \quad (2-5)$$

目前系数 a_2 是未知的，我们需要借助矫正格式的二阶收敛性这一衡量条件来具体确定它。在此之前，我们需要先根据推出半离散解和全离散矫正格式数值解的积分表达形式，由此得到误差表达式，再根据二阶收敛性来确定矫正准则，从而进一步得到矫正系数。

2.3 解的积分表达形式

数值解的积分表达形式是研究数值方法收敛性的重要基础，要根据二阶收敛阶的衡量条件来确定矫正系数，我们必须先确定解的积分表达形式。本节中，我们先后利用拉普拉斯变换和生成函数（母函数）与柯西积分公式推导出 Galerkin 有限元半离散格式和 Crank–Nicolson 全离散矫正格式数值解的积分表达形式。

在正式推导之前我们先做两个预备工作。为了便于比较半离散解和全离散解的误差，我们将右端项 $f(t)$ 拆分为 $f(0)$ 和 R 两部分，即 $f(t) = f(0) + R$ ， R 是相应的局部截断误差： $R = tf'(0) + t * f''(t)$ 。此外，我们给出生成函数的定义以便后文使用：对于任意序列 $\{g^n\}_{n=0}^\infty \in l^2(L^2(\Omega))$ ，其生成函数为 $\tilde{g}(\xi) = \sum_{n=0}^\infty g^n \xi^n (\xi \in D)$ ，且 $\tilde{g}(\xi)$ 是单位圆盘 D 中的一个解析函数。

2.3.1 半离散格式数值解

设 Galerkin 半离散格式数值解为 $w_h(t) := u_h(t) - v_h$ ，显然， $w_h(0) = 0$ 。将 $w_h(t)$ 代入格式 (2-3)，可知函数 $w_h(t)$ 满足：

$${}^R\partial_t^\alpha w_h(t) - \Delta_h w_h(t) = \Delta_h v_h + f_h(t).$$

而由 $w_h(0) = 0$ 和注释 (1) 可推得 ${}^R\partial_t^\alpha w_h(t) = \partial_t^\alpha w_h(t)$ ，于是有

$$\partial_t^\alpha w_h(t) - \Delta_h w_h(t) = \Delta_h v_h + f_h(t).$$

再对上式进行 Laplace 变换并代入公式^[1] $\widehat{\partial_t^\alpha \varphi} = z^\alpha \widehat{\varphi} - z^{\alpha-1} \varphi(0)$ ，我们得到：

$$z^\alpha \widehat{w}_h(z) - \Delta_h \widehat{w}_h(z) = z^{-1} \Delta_h v_h + \widehat{f}_h(z).$$

对上式进行整理可得：

$$\widehat{w}_h(z) = (z^\alpha - \Delta_h)^{-1} (z^{-1} \Delta_h v_h + \widehat{f}_h(z)) = -K(z) \Delta_h v_h - zK(z) \widehat{f}_h(z),$$

再经过拉普拉斯逆变换，函数 $w_h(t)$ 便可被表示为：

$$w_h(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_{\theta,\delta}} e^{zt} (-K(z) \Delta_h v_h - zK(z) \widehat{f}_h(z)) dz \quad (2-6)$$

其中核函数 $K(z) = -z^{-1}(z^\alpha - \Delta_h)^{-1}$ ，积分线 $\Gamma_{\theta,\delta}$ 定义为：

$$\Gamma_{\theta,\delta} = \{z \in \mathbb{C} : |z| = \delta, |\arg z| \leq \theta\} \cup \{z \in \mathbb{C} : z = \rho e^{\pm i\theta}, \rho \geq \delta\}, \quad \theta \in (\pi/2, \pi].$$

再将 $f(t) = f(0) + R$ 代入 (2-6) 式，由拉普拉斯变换公式可得：

$$w_h(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_{\theta,\delta}} e^{zt} \left(-K(z) (\Delta_h v_h + f(0)) - zK(z) \widehat{R}_h(z) \right) dz. \quad (2-7)$$

2.3.2 全离散矫正格式数值解

设全离散格式 (2-5) 的数值解为 $W_h^n := U_h^n - v_h$ ，显然 $W_h^0 = 0$ ， W_h^n 满足如下格式 ($2 \leq n \leq N$):

$$\begin{aligned} \bar{\partial}_\tau^\alpha W_h^1 - (1 - \frac{\alpha}{2}) \Delta_h W_h^1 &= (1 + a_2) (\Delta_h v_h + F_h^0) + (1 - \frac{\alpha}{2}) R_h^1, \\ \bar{\partial}_\tau^\alpha W_h^n - (1 - \frac{\alpha}{2}) \Delta_h W_h^n - \frac{\alpha}{2} \Delta_h W_h^{n-1} &= \Delta_h v_h + F_h^0 + (1 - \frac{\alpha}{2}) R_h^n + \frac{\alpha}{2} R_h^{n-1}, \end{aligned} \quad (2-8)$$

为了使用生成函数等数学工具，我们对 F_h 的定义进行扩展：当 $n > N$ 时，令 $F_h^n = F_h^0$ 。显然， F_h 的扩展定义对于 $W_h^n (n = 1, 2, \dots, N)$ 的值没有影响。我们在格式 (2-8) 的两边乘以对应的 $\xi^n (\xi \in D)$ ，再对 $n = 1, 2, \dots$ 的结果求和，可以得到：

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\partial}_\tau^\alpha W_h^n \xi^n - \sum_{n=1}^{\infty} (1 - \frac{\alpha}{2}) \Delta_h W_h^n \xi^n - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha}{2} \Delta_h W_h^{n-1} \xi^n \\ = (\Delta_h v_h + F_h^0) \sum_{n=1}^{\infty} \xi^n + a_2 (\Delta_h v_h + F_h^0) \xi^1 \\ + \sum_{n=1}^{\infty} (1 - \frac{\alpha}{2}) R_h^n \xi^n + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\alpha}{2} R_h^{n-1} \xi^n. \end{aligned} \quad (2-9)$$

再根据 $W_h^0 = 0$ 和离散卷积规则，我们可以得到

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\partial}_\tau^\alpha W_h^n \xi^n &= \tau^{-\alpha} (1 - \xi)^\alpha \widetilde{W}_h(\xi), \\ \sum_{n=1}^{\infty} \left((1 - \frac{\alpha}{2}) \Delta_h W_h^n + \frac{\alpha}{2} \Delta_h W_h^{n-1} \right) \xi^n &= \left((1 - \frac{\alpha}{2}) + \frac{\alpha}{2} \xi \right) \Delta_h \widetilde{W}_h(\xi), \end{aligned}$$

和

$$\begin{aligned} (\Delta_h v_h + F_h^0) \sum_{n=1}^{\infty} \xi^n + \lambda (\Delta_h v_h + f_h^0) \xi^1 &= (\Delta_h v_h + f_h^0) \left(\frac{\xi}{1 - \xi} + \lambda \xi \right), \\ \sum_{n=1}^{\infty} (1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2} \xi) R_h^n \xi^n &= (1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2} \xi) \widetilde{R}_h(\xi). \end{aligned}$$

将以上结果代入 (2-9) 可得

$$\begin{aligned} \tau^{-\alpha} (1 - \xi)^\alpha \widetilde{W}_h(\xi) - (1 - \frac{\alpha}{2}) \Delta_h \widetilde{W}_h(\xi) - \frac{\alpha}{2} \xi \Delta_h \widetilde{W}_h(\xi) \\ = (\Delta_h v_h + F_h^0) \left(\frac{\xi}{1 - \xi} + a_2 \xi \right) + (1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2} \xi) \widetilde{R}_h(\xi). \end{aligned} \quad (2-10)$$

经过整理进一步得到

$$\widetilde{W}_h(\xi) = (\beta_\tau(\xi)^\alpha - \Delta_h)^{-1}(\mu(\xi)(\Delta_h v_h + F_h^0) + \widetilde{R}_h(\xi)),$$

其中

$$\beta_\tau(\xi) = \frac{1 - \xi}{\tau(1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}\xi)^{1/\alpha}}, \quad \mu(\xi) = (1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}\xi)^{-1}(\frac{\xi}{1 - \xi} + a_2\xi). \quad (2-11)$$

显然, $\widetilde{W}_h(\xi)$ 在原点附近关于 ξ 是解析的, 则由柯西积分公式可得, 对于 $\rho \in (0, 1)$

$$W_h^n = \frac{1}{2\pi i} \int_{|\xi|=\rho} \xi^{-n-1} \widetilde{W}_h(\xi) d\xi.$$

令 $\xi = e^{-z\tau}$ 对上式进行换元, 新的积分区间变为 Γ_ρ^τ (Γ_ρ^τ 的具体含义见引理 2), 则有:

$$W_h^n = \frac{\tau}{2\pi i} \int_{\Gamma_\rho^\tau} e^{zn} \widetilde{W}_h(e^{z\tau}) dz.$$

容易证明 $\mu(e^{-z\tau})$ 和 $\widetilde{R}_h(e^{-z\tau})$ 在 $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ 上是解析的, 而引理 2 的内容表示算子 $(\beta_\tau(\xi)^\alpha - \Delta_h)^{-1}$ 关于 z 在区域 $\Sigma \in \mathbb{C}$ 中解析, 其中 Σ 由曲线 Γ_ρ^τ , $\Gamma_{\theta,\delta}^\tau$ 和两条直线 $\mathbb{R} \pm i\pi/\tau$ (从左向右) 包围形成。因此, 在 $\Sigma \in \mathbb{C}$ 中, $e^{zn} \widetilde{W}_h(e^{z\tau})$ 关于 z 是解析函数。于是, 再借助柯西定理, 我们可以得到:

$$\begin{aligned} W_h^n &= \frac{\tau}{2\pi i} \int_{\Gamma_\rho^\tau} e^{zn} \widetilde{W}_h(e^{z\tau}) dz \\ &= \frac{\tau}{2\pi i} \int_{\Gamma_{\theta,\delta}^\tau} e^{zn} \widetilde{W}_h(e^{z\tau}) dz + \frac{\tau}{2\pi i} \int_{\mathbb{R} + \frac{i\pi}{\tau}} e^{zn} \widetilde{W}_h(e^{z\tau}) dz - \frac{\tau}{2\pi i} \int_{\mathbb{R} - \frac{i\pi}{\tau}} e^{zn} \widetilde{W}_h(e^{z\tau}) dz \\ &= \frac{\tau}{2\pi i} \int_{\Gamma_{\theta,\delta}^\tau} e^{zn} \widetilde{W}_h(e^{z\tau}) dz. \end{aligned}$$

即得 W_h^n 的积分表达式为

$$W_h^n = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_{\theta,\delta}^\tau} e^{zn} (-\tau) \beta_\tau(e^{-z\tau}) K(\beta_\tau(e^{-z\tau})) (\mu(e^{-z\tau})(\Delta_h v_h + F_h^0) + \widetilde{R}_h(e^{-z\tau})) dz. \quad (2-12)$$

2.4 推导矫正格式

在前面的章节中已经得到 Galerkin 有限元半离散格式和矫正格式的数值解的积分表达形式, 这一节我们对数值解包含的一些核函数进行分析, 以二阶收敛为衡量标准来确定矫正准则, 进而确定矫正系数以推出矫正格式。

2.4.1 推导矫正准则

通过比较式 (2-7) 和式 (2-12) 中的核函数, 我们可以得出, 为了使矫正格式具有 $O(\tau^2)$ 的收敛阶, 对于 $z \in \Gamma_{\theta,\delta}^\tau$ 应该满足:

$$I = \|\tau \beta_\tau(e^{-z\tau}) K(\beta_\tau(e^{-z\tau})) \mu(e^{-z\tau}) - K(z)\| \leq c\tau^2, \quad (2-13)$$

而由三角不等式可以得到：

$$\begin{aligned} I &= \|\tau\beta_\tau(e^{-z\tau})\mu(e^{-z\tau})(K(\beta_\tau(e^{-z\tau})) - K(z)) + (\tau\beta_\tau(e^{-z\tau})\mu(e^{-z\tau}) - 1)K(z)\| \\ &\leq |\tau\beta_\tau(e^{-z\tau})\mu(e^{-z\tau})| \|K(\beta_\tau(e^{-z\tau})) - K(z)\| + |\tau\beta_\tau(e^{-z\tau})\mu(e^{-z\tau}) - 1| \|K(z)\| \\ &= I_1 + I_2 \end{aligned}$$

我们先对 $KK = \|K(\beta_\tau(e^{-z\tau})) - K(z)\|$ 进行分析：

$$\begin{aligned} KK &= \|z^{-1}(z^\alpha - \Delta_h)^{-1} - \beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}(\beta_\tau(e^{-z\tau})^\alpha - \Delta_h)^{-1}\| \\ &= \|z^{-1}(z^\alpha - \Delta_h)^{-1} - \beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}(z^\alpha - \Delta_h)^{-1} \\ &\quad + \beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}(z^\alpha - \Delta_h)^{-1} - \beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}(\beta_\tau(e^{-z\tau})^\alpha - \Delta_h)^{-1}\| \\ &= \|(z^\alpha - \Delta_h)^{-1}(z^{-1} - \beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}) \\ &\quad + \beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}((z^\alpha - \Delta_h)^{-1} - (\beta_\tau(e^{-z\tau})^\alpha - \Delta_h)^{-1})\| \\ &\leq \|(z^\alpha - \Delta_h)^{-1}\| \|z^{-1} - \beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}\| \\ &\quad + |\beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}| \|(z^\alpha - \Delta_h)^{-1} - (\beta_\tau(e^{-z\tau})^\alpha - \Delta_h)^{-1}\|. \end{aligned}$$

Jin^[25] 等给出了 $|\beta_\tau(e^{-z\tau})|$, $|z^{-1} - \beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}|$ 以及 $\|(z^\alpha - \Delta_h)^{-1} - (\beta_\tau(e^{-z\tau})^\alpha - \Delta_h)^{-1}\|$ 的范围估计：

$$\begin{aligned} c_0|z| &< |\beta_\tau(e^{-z\tau})| < c_1|z|, |z^{-1} - \beta_\tau(e^{-z\tau})^{-1}| \leq c\tau^2|z| \\ \|(z^\alpha - \Delta_h)^{-1} - (\beta_\tau(e^{-z\tau})^\alpha - \Delta_h)^{-1}\| &\leq c\tau^2|z|^{2-\alpha}. \end{aligned}$$

因此，我们可以立即得到 $\|K(\beta_\tau(e^{-z\tau})) - K(z)\| \leq c\tau^2|z|^{1-\alpha}$ 。因而无论矫正系数 a_2 取何值，我们都可以得出 $I_1 \leq c\tau^2$ 。然而， I_2 中 $\|K(z)\| \leq c|z|^{1-\alpha}$ ， $|\tau\beta_\tau(e^{-z\tau})\mu(e^{-z\tau}) - 1|$ 的值与矫正系数 a_2 有关，因此进一步我们可以得到不等式 (2-13) 成立的充分条件为：

$$|\tau\beta_\tau(e^{-z\tau})\mu(e^{-z\tau}) - 1| \leq c|z|^2\tau^2. \quad (2-14)$$

2.4.2 矫正系数求解

将 (2-11) 中的式子代入 (2-14)，再用 $e^{-z\tau}$ 替换式子中的 ξ ，可得

$$|(1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}e^{-z\tau})^{-1-1/\alpha} (e^{-z\tau} + a_2e^{-z\tau}(1 - e^{-z\tau})) - 1| \leq c|z|^2\tau^2$$

于是有：

$$\begin{aligned} |(1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}e^{-z\tau})^{-1-\frac{1}{\alpha}} \|e^{-z\tau} + a_2e^{-z\tau}(1 - e^{-z\tau}) - (1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}e^{-z\tau})^{1+\frac{1}{\alpha}}| \\ \leq c|z|^2\tau^2. \end{aligned} \quad (2-15)$$

而由引理 2 知 $|(1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}e^{-z\tau})|$ 与常数同阶，那么，不等式 (2-15) 等价于：

$$|e^{-z\tau} + a_2e^{-z\tau}(1 - e^{-z\tau}) - (1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}e^{-z\tau})^{1+1/\alpha}| \leq c|z|^2\tau^2. \quad (2-16)$$

设 $h(z) = (1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}e^{-z\tau})^{1/\alpha}$, 将其 Taylor 展开, 可以得到

$$\begin{aligned} h(z) &= 1 + \frac{1}{2}(e^{-z\tau} - 1) + \sum_{k=2}^{\infty} C(\frac{1}{\alpha}, k) \left(-\frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}e^{-z\tau}\right)^k \\ &= 1 - \frac{1}{2}(1 - e^{-z\tau}) + O(|z|^2\tau^2). \end{aligned} \quad (2-17)$$

其中 $C(\gamma, k) = \frac{\Gamma(\gamma+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\gamma-k+1)}$ 。于是, 我们可以推出:

$$\begin{aligned} A &= e^{-z\tau} + a_2 e^{-z\tau}(1 - e^{-z\tau}) - (1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2}e^{-z\tau})^{1+1/\alpha} \\ &= e^{-z\tau} + a_2(1 - (1 - e^{-z\tau}))(1 - e^{-z\tau}) \\ &\quad - \left(1 - \frac{\alpha}{2}(1 - e^{-z\tau})\right) \left(1 - \frac{1}{2}(1 - e^{-z\tau}) + O(|z|^2\tau^2)\right) \\ &= a_2(1 - e^{-z\tau}) - a_2(1 - e^{-z\tau})^2 + e^{-z\tau} \\ &\quad - \left(1 - \frac{1}{2}(1 - e^{-z\tau}) - \frac{\alpha}{2}(1 - e^{-z\tau}) + O(|z|^2\tau^2)\right) \\ &= a_2(1 - e^{-z\tau}) - (1 - e^{-z\tau}) + \frac{1 + \alpha}{2}((1 - e^{-z\tau})) + O(|z|^2\tau^2) \\ &= (a_2 - 1 + \frac{1 + \alpha}{2})(1 - e^{-z\tau}) + O(|z|^2\tau^2). \end{aligned} \quad (2-18)$$

因此, 当 $a_2 = \frac{1-\alpha}{2}$ 时不等式 (2-14) 成立, 我们得到一步矫正格式 (2-5) 的具体形式 ($2 \leq n \leq N$, $v_h = U_h^0$):

$$\begin{aligned} \bar{\partial}_\tau^\alpha(U_h^1 - v_h) - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^1 &= \frac{1}{2}(\Delta_h v_h + F_h^0) + (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^1, \\ \bar{\partial}_\tau^\alpha(U_h^n - v_h) - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^n - \frac{\alpha}{2}\Delta_h U_h^{n-1} &= (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^n + \frac{\alpha}{2}F_h^{n-1}. \end{aligned} \quad (2-19)$$

2.5 本章小结

在这一章我们先阐述了一些本文会用到的基础数学概念及性质以及相关的引理等, 在此基础上介绍了针对分数阶次扩散方程 (1-1) 的标准 Crank–Nicolson 格式 (2-4) 的推导过程, 分为空间离散和时间离散两部分, 并给出含有待定系数的一步矫正格式 (2-5)。之后, 根据拉普拉斯变换 (逆变换), 生成函数和柯西积分公式等数学工具得到了半离散解和全离散矫正格式数值解的积分表达形式 (2-7, 2-12)。由此进一步推出矫正格式的误差表达式。再以二阶收敛性进行约束, 确定了矫正准则 (2-14), 推出矫正系数 $a_2 = \frac{1-\alpha}{2}$, 最终得到一步矫正格式 (2-19)。

第三章 数值计算与分析

在这一节中，我们利用有限元框架 FEniCS，根据矫正格式编写对应的 Python 程序，对具体方程进行数值计算，验证矫正格式的计算性能。我们先通过精确解已知的例 (a) 来检验构造的数值方法的准确性，之后借助四个具体的数值例子对矫正格式 (2-19) 关于时间的收敛性进行验证：

$$(a) v = 0, f = 2t^{2-\alpha}x(1-x)/\Gamma(3-\alpha) + 2t^2, \text{ 精确解 } u(x, t) = t^2x(1-x);$$

$$(b) v = x(1-x), f = 0;$$

$$(c) v = xy(1-x)(1-y), f = 0;$$

$$(d) v = 0, f = \cos(t)(1 + \chi_{(0,1/2)}(x));$$

$$(e) v = 0, f = 2t^\alpha + \Gamma(1+\alpha)x(1-x).$$

其中例 (d) 中的 $\chi_{(0,1/2)}(x)$ 表示 x 轴上开区间 $(0, 1/2)$ 的特征函数。选取的以上几个算例有的初值 v 与右端项 f 满足相容性条件且精确解光滑，有的初值与右端项虽光滑但不满足相容条件，有的初值齐次但右端项正则性条件较弱。此外，还包含了空间上是二维的算例。诚然，通过计算以上例子的数值实验结果，我们可以更好、更全面地验证矫正格式的计算性能及特点。

同时，固定时间步长 τ ，变换网格尺度 h ，利用一步矫正格式例 (b) 的数值解及收敛阶，以验证定理 (2) 中提出的结论：空间半离散格式关于网格尺度 h 具有二阶收敛性。

在验证了一步矫正格式 (2-19) 的收敛性后，固定网格尺度 h ，在时间步长 τ 保持一致的情况下，通过例 (b)，对一步矫正格式 (CN-1)，二阶向后差分格式 (SBD)^[26]，Crank–Nicolson 格式 (CN) 以及它的两步矫正格式^[25](CN-2) 的收敛性进行比较。

以上提到的四种数值格式在空间上都使用分段连续线性有限元方法，因而在固定一个很小的网格尺度 h 后，(本文固定 $h=10e-3$)，由空间离散导致的误差就可以忽略不计，我们主要关注时间离散造成的误差。由于大多数算例的精确解无从得知，我们拟用更小的时间步长计算出参考解 (固定 $\tau_{ref}=10e-4$)，根据它近似计算精确解和数值解之间的 L^2 误差。

3.1 矫正格式收敛性的验证

3.1.1 时间方向收敛性验证

我们将时间 T 依次剖分为 $N = 10, 20, 40, 80, 160, 320$ 份，对于不同的 $\alpha(0 < \alpha < 1)$ ，利用一步矫正格式 (2-5) 计算 $t_N = 1$ 时数值解与精确解 (参考解) 的 L^2 误差。首先，通过计算例 (a) 的数值解与精确解的误差来检验所构造的数值算法的

准确性。数值结果如表 3-1 所示，并在图 3-1 中对比了 $\alpha = 0.5$, $N = 160$ 时 $t_N = 1$ 处的数值解和精确解。从图表中我们可以看出数值解的误差很小，而且达到了二阶收敛，可以认为构造的数值方法是正确的。之后我们对后面四个初值条件不相容的算例进行同样的数值计算，并将结果列出。

表 3-1 例 (a) 在 $t_N = 1$ 处的 L^2 误差（一步矫正格式）

$\alpha \setminus N$	10	20	40	80	160	320	阶数
0.25	1.26e-05	3.13e-06	7.79e-07	1.94e-07	4.75e-08	1.04e-08	2.048
0.50	1.52e-05	3.79e-06	9.45e-07	2.35e-07	5.79e-08	1.37e-08	2.023
0.75	9.61e-06	2.40e-06	6.00e-07	1.49e-07	3.64e-08	8.32e-09	2.034

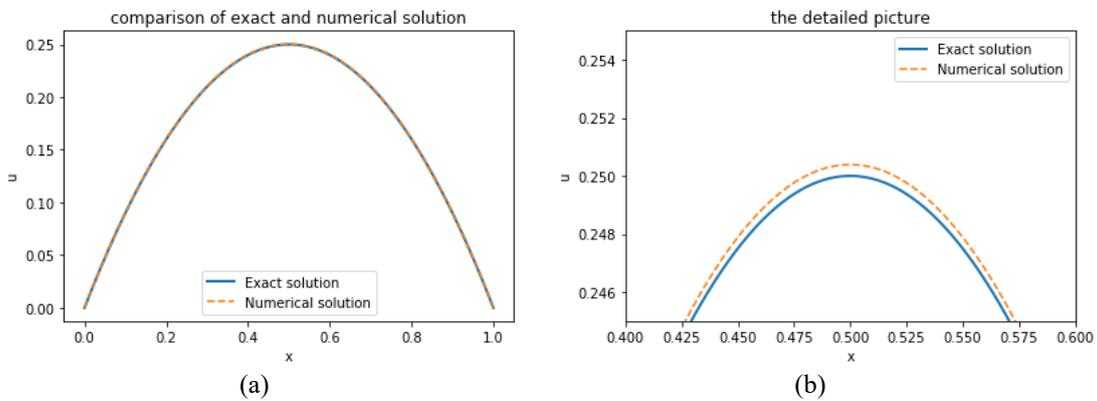


图 3-1 $\alpha = 0.5, N = 160$ 时例 (a) 在 $t_N = 1$ 处数值解与精确解对比图

算例 (b)(c)(d) 的计算结果分别由表 3-2, 表 3-3 和表 3-4 给出。其中例 (b) 和例 (c) 分别是一维和二维空间上初值光滑但不满足相容性条件的算例，例 (d) 是一个非齐次问题，且右端项 f 关于时间光滑。而由数据结果可以看出：本文提出的一步矫正格式在计算该三个问题时都能达到二阶收敛。这满足了我们的构造该矫正格式的初期目标。

表 3-2 例 (b) 在 $t_N = 1$ 处的 L^2 误差（一步矫正格式）

$\alpha \setminus N$	10	20	40	80	160	320	阶数
0.25	1.72e-05	4.10e-06	9.99e-07	2.47e-07	6.13e-08	1.53e-08	2.027
0.50	2.93e-05	7.12e-06	1.75e-06	4.34e-07	1.08e-07	2.69e-08	2.017
0.75	3.24e-05	7.72e-06	1.92e-06	4.77e-07	1.19e-07	2.97e-08	2.018

表 3-3 例 (c) 在 $t_N = 1$ 处的 L^2 误差（一步矫正格式）

$\alpha \setminus N$	10	20	40	80	160	320	阶数
0.25	1.72e-06	4.09e-07	9.99e-08	2.47e-08	6.12e-09	1.53e-09	2.027
0.50	2.72e-06	6.66e-07	1.64e-07	4.06e-08	1.01e-08	2.52e-09	2.016
0.75	3.60e-06	5.90e-07	1.46e-07	3.64e-08	9.08e-09	2.27e-09	2.126

表 3-4 例 (d) 在 $t_N = 1$ 处的 L^2 误差（一步矫正格式）

$\alpha \backslash N$	10	20	40	80	160	320	阶数
0.25	1.13e-05	2.71e-06	6.63e-07	1.64e-07	4.07e-08	1.01e-08	2.025
0.50	2.20e-05	5.38e-06	1.33e-06	3.29e-07	8.20e-08	2.04e-08	2.014
0.75	2.81e-05	6.78e-06	1.69e-06	4.21e-07	1.05e-07	2.62e-08	2.014

例 (e) 的精确解为 $u(x, t) = t^\alpha x(1 - x)$ ，也是一个非齐次问题，其计算结果由表 3-5 给出，可以看到此时一步矫正格式达不到二阶收敛。与例 (d) 进行比较，发现该算例右端项 f 的正则性较弱。因而推测本文提出的一步矫正格式的收敛性对方程右端项的正则性应有一定的要求。

表 3-5 例 (e) 在 $t_N = 1$ 处的 L^2 误差（一步矫正格式）

$\alpha \backslash N$	10	20	40	80	160	320	阶数
0.25	5.90e-05	2.49e-05	1.06e-05	4.53e-06	1.99e-06	9.20e-07	1.201
0.50	3.28e-05	1.18e-05	4.28e-06	1.61e-06	6.68e-07	3.39e-07	1.319
0.75	1.02e-05	3.18e-06	1.06e-06	4.26e-07	2.43e-07	1.92e-07	1.145

3.1.2 空间方向收敛性验证

我们固定时间步长 $\tau = 10e-4$ ，依次取网格尺度 $h = 2^{-4}, 2^{-5}, 2^{-6}, 2^{-7}, 2^{-8}, 2^{-9}$ ，利用一步矫正格式 (2-5) 计算例 (b) 在不同的 α 下 $t_N = 1$ 时数值解和精确解（参考解）的 L^2 误差，以验证定理 (2) 中提出的结论：空间半离散格式关于网格尺度 h 二阶收敛。

表 3-6 例 (b) 在 $t_N = 1$ 处的 L^2 误差（Galerkin 有限元方法）

$\alpha \backslash \tau$	2^{-4}	2^{-5}	2^{-6}	2^{-7}	2^{-8}	2^{-9}	阶数
0.25	8.96e-05	2.24e-05	5.61e-06	1.40e-06	3.50e-07	8.68e-08	2.002
0.50	6.79e-05	1.70e-05	4.25e-06	1.06e-06	2.65e-07	6.58e-08	2.002
0.75	3.92e-05	9.82e-06	2.46e-06	6.14e-07	1.53e-07	3.80e-08	2.002

由表 3-6 结果看出在时间步长固定时，一步矫正格式关于网格尺度 h 是二阶收敛的，即空间半离散格式关于网格尺度 h 能达到二阶收敛，这与定理 (2) 的结论一致。

3.2 若干 CQ 型数值格式收敛性比较

为了进一步探索本文提出的一步矫正格式的计算性能，我们分别用一步矫正格式 (CN-1)，二阶向后差分格式 (SBD)，Crank–Nicolson 格式 (CN) 及其两步矫正格式 (CN-2) 计算例 (b) 的数值解和误差，将计算结果在表 3-7 中列出。其中

CN-2 格式也是一种全离散格式, 具体形式为 ($3 \leq n \leq N$):

$$\begin{aligned} \bar{\partial}_\tau^\alpha(U_h - v_h)^1 - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^1 - (\frac{1}{2} - \frac{\alpha}{4})\Delta_h v_h &= (1 - \frac{\alpha}{2})(F_h^1 + \frac{1}{2}F_h^0), \\ \bar{\partial}_\tau^\alpha(U_h - v_h)^2 - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^2 - \frac{\alpha}{2}\Delta_h U_h^1 - \frac{\alpha}{4}\Delta_h v_h &= (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^2 + \frac{\alpha}{2}F_h^1 + \frac{\alpha}{4}F_h^0, \\ \bar{\partial}_\tau^\alpha(U_h - v_h)^n - (1 - \frac{\alpha}{2})\Delta_h U_h^n - \frac{\alpha}{2}\Delta_h U_h^{n-1} &= (1 - \frac{\alpha}{2})F_h^n + \frac{\alpha}{2}F_h^{n-1}. \end{aligned} \quad (3-1)$$

SBD 格式^[26] 是标准的二阶向后差分格式 (BDF) 的初始矫正格式, 具体形式为:

$$\begin{aligned} \bar{\partial}_\tau^\alpha(U_h - v_h)^1 - \Delta_h U_h^1 &= \frac{1}{2}(\Delta_h v_h + F_h^0) + F_h^1, \\ \bar{\partial}_\tau^\alpha(U_h - v_h)^n - \Delta_h U_h^n &= F_h^n, \quad 2 \leq n \leq N, \end{aligned} \quad (3-2)$$

且 SBD 格式中 $\bar{\partial}_\tau^\alpha \varphi^n := \tau^{-\alpha} \sum_{j=0}^n b_j \varphi^{n-j}$, 系数 c_j 满足关系式

$$((1 - \xi) + 1/2(1 - \xi)^2)^\alpha = \tau^{-\alpha} \sum_{j=0}^n c_j \xi^j.$$

表 3-7 例 (b) 在 $t_N = 1$ 处的 L^2 误差

格式	$\alpha \backslash N$	10	20	40	80	160	320	阶数
CN	0.25	1.19e-04	6.07e-05	3.05e-05	1.52e-05	7.56e-06	3.72e-06	1.002
	0.50	1.13e-04	6.06e-05	3.11e-05	1.57e-05	7.85e-06	3.87e-06	0.975
	0.75	3.52e-05	2.34e-05	1.32e-05	6.94e-06	3.53e-06	1.76e-06	0.864
SBD	0.25	2.23e-05	5.20e-06	1.25e-06	3.08e-07	7.64e-08	1.90e-08	2.039
	0.50	5.12e-05	1.19e-05	2.85e-06	6.99e-07	1.73e-07	4.30e-08	2.044
	0.75	7.79e-05	1.81e-05	4.33e-06	1.06e-06	2.61e-07	6.47e-08	2.047
CN-2	0.25	2.06e-05	4.82e-06	1.17e-06	2.87e-07	7.12e-08	1.77e-08	2.037
	0.50	4.24e-05	9.91e-06	2.40e-06	5.89e-07	1.46e-07	3.63e-08	2.038
	0.75	5.44e-05	1.27e-05	3.06e-06	7.51e-07	1.86e-07	4.63e-08	2.039
CN-1	0.25	1.72e-05	4.09e-06	9.99e-07	2.47e-07	6.13e-08	1.53e-08	2.027
	0.50	2.93e-05	7.12e-06	1.75e-06	4.34e-07	1.08e-07	2.69e-08	2.017
	0.75	3.24e-05	7.72e-06	1.92e-06	4.77e-07	1.19e-07	2.97e-08	2.018

从表 3-7 中我们可以看到: 网格尺度 h 固定, 时间步长 τ 保持一致时, CN 格式 (未矫正) 只达到一阶收敛, 而其他三种格式均达到二阶收敛。此外, 虽然一步矫正格式 (CN-1) 的收敛阶略逊于其他两个二阶格式 (CN-2 和 SBD), 但它的误差在同等参数下是最小的, 计算更精确。

3.3 本章小结

在这一章我们通过数值实验求解具体的算例验证了新提出的一步矫正格式的准确性以及求解初值条件不相容问题时的二阶收敛性; 并由特殊算例推得该格式在保持二阶收敛性时对右端项的正则性有要求。此外, 通过对比几个数值格式的计算结果发现该矫正格式误差最小。

第四章 全文总结

本文在研究时间分数阶次扩散方程 (1-1) 过程中，利用待定系数法对 Crank–Nicolson^[25] 格式进行初步矫正，构造了一种更有效更简单的数值计算格式，其对一般的初值（解在 $t = 0$ 处可能不光滑）也能达到二阶收敛。我们借助具体的数值算例对该格式的收敛性进行了验证，并对几个 CQ 型数值格式的计算性能进行了比较。

在第二章中我们先介绍了分数阶微分方程的标准 Crank–Nicolson 格式。它是经典的整数阶 Crank–Nicolson 格式在分数阶微分方程中的推广，其先在空间上使用 Galerkin 有限元方法进行半离散，再利用 Dimitrov^[32] 提出的线性多步法对时间进行离散，是一种全离散格式。在该格式基础上，利用待定系数对格式中初值和右端初值进行修正，通过拉普拉斯变换和柯西积分公式等数学工具推导出数值解的积分表达形式（含有待定系数），以二阶收敛为衡量标准对数值解中的核函数的阶数进行约束，推导出矫正准则，进一步求出矫正系数，确定矫正格式。

在第三章中我们通过几个数值例子（包括初值条件不相容和右端项非齐次的情况）对一步矫正格式 (CN-1) 的收敛性进行验证，无论是一维还是二维空间，右端项是否为 0，对于初值条件不相容的情况，该格式都能到达二阶收敛。以不满足相容性条件的初值为例，在网格尺度 h 固定，时间步长 τ 保持一致时对比了本文构造的 CN-1 格式，SBD 格式，标准 CN 格式以及 CN-2 格式的计算性能，发现 CN 格式只达到一阶收敛，其它均为二阶收敛，而其中 SBD 格式的收敛率稍高一些，CN-1 格式的误差最小，计算结果最精确。

这个题目后续还有很多有意义的工作，例如本文只是通过数值实验验证了矫正格式的二阶收敛性，并从算例发现要保持二阶收敛性对右端函数的正则性有要求，后续可从数学理论角度对该格式的误差进行完整的分析与论证；本文构造的格式只针对次扩散方程，可考虑将其运用到其它时间分数阶方程中，例如较近的扩散波方程。

参考文献

- [1] Kilbas A A, Srivastava H M, and Trujillo J J. Theory & Applications of Fractional Differential Equations[M]. Elsevier Science & Technology, Amsterdam, 2006.
- [2] Alikhanov and Anatoly A. A new difference scheme for the time fractional diffusion equation[J]. Journal of Computational Physics, 280:424–438, 2015.
- [3] Oldham K B and Spanier J. The Fractional Calculus[M]. Academic Press, New York-London, 1974.
- [4] Yan Y B, Khan M, and Ford N J. An Analysis of the Modified L1 Scheme for Time-Fractional Partial Differential Equations with Nonsmooth Data[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 56(1):210–227, 2018.
- [5] Lubich C. Discretized Fractional Calculus[J]. SIAM Journal on Mathematical Analysis, 17(3):704–719, 1986.
- [6] Lubich C. Convolution quadrature and discretized operational calculus. II[J]. Numerische Mathematik, 52(4):413–425, 1988.
- [7] Lubich C, Thomée V, and Sloan I H. Nonsmooth Data Error Estimates for Approximations of an Evolution Equation with a Positive-Type Memory Term[J]. Mathematics of Computation, 65(213):1–17, 1996.
- [8] C M Chen, Liu F, Turner I, and Anh V. A Fourier method for the fractional diffusion equation describing sub-diffusion[J]. Journal of Computational Physics, 227(2):886–897, 2007.
- [9] Cuesta E, Lubich C, and Palencia C. Convolution quadrature time discretization of fractional diffusion-wave equations[J]. Mathematics of Computation, 75(254):673–696, 2006.
- [10] Chen F, Xu Q W, and Hesthaven J S. A multi-domain spectral method for time-fractional differential equations[J]. Journal of Computational Physics, 293:157 – 172, 2015.
- [11] Jumarie G. Laplace’s transform of fractional order via the Mittag-Leffler function and modified Riemann - Liouville derivative[J]. Applied Mathematics Letters, 22(11):1659–1664, 2009.
- [12] Podlubny I. Fractional Differential Equations[M]. Academic Press, 1999.

- [13] Li X J and Xu C J. A Space-Time Spectral Method for the Time Fractional Diffusion Equation[J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 47(3):2108–2131, 2009.
- [14] Chen C M, Liu F, and Burrage K. Finite difference methods and a fourier analysis for the fractional reaction – subdiffusion equation[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 198(2):754–769, 2008.
- [15] Gunzburger M and Wang J L. A second-order Crank-Nicolson method for time-fractional PDEs[J]. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, 16(2):225–239, 2017.
- [16] Kassem M and Dominik S. Well-posedness of hp-version discontinuous Galerkin methods for fractional diffusion wave equations[J]. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 34(4):1426–1446, 2014.
- [17] Sokolov I M, Klafter J, and Blumen A. Fractional kinetics[J]. *Physics Today*, 55(11):48–54, 2002.
- [18] Heymans N and Podlubny I. Physical interpretation of initial conditions for fractional differential equations with Riemann-Liouville fractional derivatives[J]. *Rheologica Acta*, 45(5):765–771, 2005.
- [19] Cao W R, Zhang Z Q, and Karniadakis G E. Time-Splitting Schemes for Fractional Differential Equations I: Smooth Solutions[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 37(4):A1752–A1776, 2015.
- [20] Chen S, Shen J, and Wang L L. Generalized Jacobi Functions and Their Applications to Fractional Differential Equations[J]. *Mathematics of Computation*, 85(300):1603–1638, 2014.
- [21] Jin B T, Lazarov R, Pasciak J, and Zhou Z. Error analysis of semidiscrete finite element methods for inhomogeneous time-fractional diffusion[J]. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 35(2):561–582, 2014.
- [22] Jin B T, Lazarov R, and Zhou Z. Error Estimates for a Semidiscrete Finite Element Method for Fractional Order Parabolic Equations[J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 51(1):445–466, 2013.
- [23] Jin B T, Lazarov R, and Zhou Z. An analysis of the L1 scheme for the subdiffusion equation with nonsmooth data[J]. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 36(1):197–221, 2015.
- [24] Jin B T, Lazarov R, and Zhou Z. Two Fully Discrete Schemes for Fractional Diffusion and Diffusion-Wave Equations with Nonsmooth Data[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 38(1):A146–A170, 2016.

- [25] Jin B T, Li B Y, and Zhou Z. An analysis of the Crank – Nicolson method for subdiffusion[J]. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 38(1):518–541, 2017.
- [26] Jin B T, Li B Y, and Zhou Z. Correction of High-Order BDF Convolution Quadrature for Fractional Evolution Equations[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 39(6):A3129–A3152, 2017.
- [27] Vidar Thomee. Galerkin finite element methods for parabolic problems[J]. *Mathematics of Computation*, 17(2):186–187, 2006.
- [28] Arendt W, Batty C J, Hieber M, and Neubrander F. *Vector-Valued Laplace Transforms and Cauchy Problems*[M]. Birkhauser, Basel, second edition, 2001.
- [29] Lv C W and Xu C J. Error Analysis of a High Order Method for Time-Fractional Diffusion Equations[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 38(5):A2699–A2724, 2016.
- [30] Mclean W and Mustapha K. Convergence analysis of a discontinuous Galerkin method for a sub-diffusion equation[J]. *Numerical Algorithms*, 52(1):69–88, 2009.
- [31] McLean W and Mustapha K. Time-stepping error bounds for fractional diffusion problems with non-smooth initial data[J]. *Journal of Computational Physics*, 293:201–217, 2015.
- [32] Dimitrov Y. Numerical approximations for fractional differential equations[J]. *Journal of Fractional Calculus and Applications*, 5, 2015.
- [33] 张元林. 工程数学积分变换 [M]. 第 5 版. 北京: 高等教育出版社, 2012.
- [34] 钟玉泉. 复变函数论 [M]. 第 4 版. 北京: 高等教育出版社, 2013.