

一类分数阶Sturm-Liouville特征值问题的 数值解法

彭莎丽¹, 刘 峰^{1,2*}

(1. 南京航空航天大学 数学学院, 江苏南京 211106;

2. 南京航空航天大学 深圳研究院, 广东深圳 518063)

摘 要: 该文研究了一类具有混合边界条件的分数阶Sturm-Liouville特征值问题. 利用二阶Caputo分数阶导数逼近公式, 将其转化为广义特征值问题, 利用Jacobi-Davidson方法求解此问题时, 校正方程的求解是计算过程中的一个重要环节. 为了加快算法的收敛速度, 考虑近似求解该校正方程, 即求解Toeplitz线性代数方程组. 文中构造Strang循环预处理子, 提出求解校正方程的预处理广义极小残量法(PGMRES), 并证明了预处理后的系数矩阵特征值大部分聚集在1附近. 数值实验表明文中提出的算法是有效的.

关键词: Caputo分数阶导数; 分数阶Sturm-Liouville问题; Jacobi-Davidson方法; PGMRES

中图分类号: O241.6

文献标识码: A **文章编号:** 1000-4424(2025)03-0327-18

§1 引 言

考虑以下一类分数阶Sturm-Liouville特征值问题^[1]

$$\begin{cases} {}_0^C D_t^\alpha u(t) + (\lambda r(t) - q(t))u(t) = 0, \\ au(0) + bu'(0) = 0, cu(1) + du'(1) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

其中 $1 < \alpha \leq 2$, $t \in (0, 1)$, $q(t)$ 和 $r(t)$ 是实连续函数且 $r(t)$ 在区间 $[0, 1]$ 上满足 $r(t) \neq 0$, ${}_0^C D_t^\alpha$ 表示 α 阶Caputo分数阶导数, 其定义为^[2]

$${}_0^C D_t^\alpha u(t) = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_0^t \frac{u^{(n)}(s)}{(t - s)^{\alpha - n + 1}} ds,$$

其中 $\Gamma(\cdot)$ 表示Gamma函数, n 是正整数且满足 $n - 1 \leq \alpha \leq n$.

分数阶Sturm-Liouville特征值问题(1)由分数阶微分方程分离变量而得, 可用于模拟各种系统的行为和性能, 其中参数 $r(t)$ 和 $q(t)$ 在不同的应用中代表不同的含义. 例如, 在模拟材料的电导

收稿日期: 2023-07-24 修回日期: 2024-12-09

*通讯作者, Email: hliu@nuaa.edu.cn

基金项目: 国家自然科学基金(11401305; 11571171); 深圳市科技计划(JCYJ20230807142002006)

率^[3]中, 参数 $r(t)$ 和 $q(t)$ 分别表示材料的电阻和电势能, 特征值 λ 代表材料的电导率; 在金融市场的风险分析^[4]中, 参数 $r(t)$ 和 $q(t)$ 分别表示市场的波动率和风险溢价, 特征值 λ 代表市场的风险水平; 在分析捕获非晶体材料动力学行为^[5]中, 参数 $r(t)$ 和 $q(t)$ 分别表示介质的阻尼和刚度参数. 因此, 研究分数阶Sturm-Liouville特征值问题具有重要的意义.

近年来, 许多学者研究了分数阶Sturm-Liouville特征值问题的解析解. Neamaty等人^[6]研究了具有平凡点和奇异点的分数阶特征值问题, 并给出了部分特征值的解析解. Bas等人^[7]利用Laplace变换研究了带非奇异算子的分数阶特征值问题. 然而分数阶Sturm-Liouville特征值问题的解析解大多包含H函数或者Mittag-Leffler函数等, 这些函数的计算比较困难, 因此有必要研究分数阶Sturm-Liouville特征值问题的数值解法. Al-Mdallal^[8-9]提出求解分数阶特征值问题的Adomian分解法和同伦摄动法. Reutskiy^[10]提出结合外部激励法(MEE)和向后替换法(BSM)的方法求解分数阶微分方程特征值问题. Sadabad等人^[1]基于Laplace变换和Laplace逆变换, 将分数阶Sturm-Liouville特征值问题转化为具有弱奇异核的等效积分方程. 由于MEE和BSM方法只能计算部分特征值且Adomian分解法解的精度依赖于所计算特征值的个数, 因此考虑引入一种新的数值解法求解分数阶Sturm-Liouville特征值问题. 在数值求解过程中, 首先考虑离散化. Tian等人^[11]提出离散Riemann-Liouville分数阶导数的WSGL逼近公式. 针对Caputo分数阶导数, Bechelova^[12]提出 $L1$ 插值公式. 对于二阶Caputo分数阶导数, 被积函数含有时间的二阶导数, $L1$ 离散公式不可以直接使用, 为避免计算离散节点处的二阶导数, 孙志忠等人^[2]基于 $L1$ 插值逼近公式提出离散二阶Caputo分数阶导数的有限差分格式. 本文应用文^[2]的技巧推导二阶Caputo分数阶导数逼近公式, 并用该逼近公式对分数阶Sturm-Liouville特征值问题(1)进行离散, 得到一个广义特征值问题.

目前求解广义特征值问题的方法有Lanczos方法^[13]、Arnoldi方法^[14]、Krylov-Schur方法^[15]和Jacobi-Davidson方法^[16]等. 利用Jacobi-Davidson方法求解该广义特征值问题时, 校正方程的求解是此方法计算过程中的一个重要环节, 为了加快算法的收敛速度, 考虑近似求解该校正方程, 即求解Toeplitz线性代数方程组. Gu等人^[17]研究了HSS迭代法求解非Hermitian正定Toeplitz线性代数方程组. Freund^[18]提出求解Toeplitz线性代数方程组的look-ahead Bareiss方法. Saad等人^[19]提出利用GMRES算法求解非对称Toeplitz线性代数方程组.

然而利用GMRES方法近似求解校正方程及Toeplitz线性代数方程组时有时不收敛, 为了克服这一困难, 考虑将预处理技术与GMRES方法相结合, 提出求解Toeplitz线性代数方程组的预处理广义极小残量法(PGMRES). 由于循环矩阵与向量乘积所需计算成本较小, OLkin^[20]提出使用循环矩阵作为预处理子求解Toeplitz线性代数方程组. Strang^[21]提出Strang循环预处理矩阵. Chan等人^[22]证明了Strang循环预处理矩阵非奇异且经该循环矩阵预处理后系数矩阵的特征值分布集中.

本文利用二阶Caputo分数阶导数逼近公式对分数阶Sturm-Liouville特征值问题(1)进行离散, 得到广义特征值问题. 利用Jacobi-Davidson方法求解该广义特征值问题时, 校正方程的求解是此方法计算过程中的一个重要环节, 为了加快算法的收敛速度, 考虑近似求解该校正方程, 即求解非对称Toeplitz线性代数方程组. 利用系数矩阵的元素构建Strang循环预处理子, 分析经预处理的系数矩阵特征值分布性质, 提出了求解校正方程的预处理广义极小残量法(PGMRES). 数值算例表明了该方法的有效性.

§2 分数特征值问题的离散化

为了简化问题的分析, 令 $r(t) = 1, q(t) = -\frac{1}{t}, b = c = 0, a = d = 1$, 则分数阶Sturm-Liouville特征值问题(1)可简化为^[10]

$$\begin{cases} {}_0^C D_t^\alpha u(t) + (\frac{1}{t} + \lambda)u(t) = 0, \\ u(0) = 0, \quad u(1) = 0, \end{cases} \quad (2)$$

其中 $1 < \alpha \leq 2, t \in (0, 1)$.

首先考虑 $\alpha (0 < \alpha \leq 1)$ 阶Caputo分数阶导数

$${}_0^C D_t^\alpha u(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{u'(s)ds}{(t-s)^\alpha}$$

的数值逼近. 选取 $N+1$ 个节点 $t_n = nh (n = 0, 1, \dots, N)$, 对区间 $[0, 1]$ 进行网格划分, 取网格长度 $h = \frac{1}{N}$. 设 $t_0 = 0, t_N = 1$, 定义 $u_n = u(t_n)$, 即 $u(t_0) = 0$, 记

$$a_l^{(\alpha)} = (l+1)^{1-\alpha} - l^{1-\alpha}, l \geq 0,$$

有

$${}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{t_n} \frac{u'(s)}{(t_n-s)^\alpha} ds = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{i=1}^n \int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{u'(s)}{(t_n-s)^\alpha} ds, \quad (3)$$

其中 $n = 1, \dots, N$, 在区间 $[t_{i-1}, t_{i+1}]$ 上对 $u(s)$ 作线性插值, 即

$$L_{1,i} u(s) = \frac{t_{i+1}-s}{2h} u(t_{i-1}) + \frac{s-t_{i-1}}{2h} u(t_{i+1}),$$

$$u(s) - L_{1,i} u(s) = \frac{1}{2} u''(\xi_k) (s - t_{k-1})(s - t_{k+1}), \quad s \in [t_{k-1}, t_{k+1}],$$

其中 $\xi_k = \xi_k(s) \in (t_{k-1}, t_{k+1})$, 利用 $L_{1,i} u(s)$ 近似(3)中的 $u(s)$ 可得

$$\begin{aligned} {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n} &\approx \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{i=1}^n \int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{u(t_{i+1})-u(t_{i-1})}{2h} \frac{1}{(t_n-s)^\alpha} ds = \\ &\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{i=1}^n \frac{u(t_{i+1})-u(t_{i-1})}{2h} \cdot \frac{1}{1-\alpha} \left[(t_n-t_{i-1})^{1-\alpha} - (t_n-t_i)^{1-\alpha} \right] = \\ &\frac{h^{-\alpha}}{2\Gamma(2-\alpha)} \sum_{i=1}^n [u(t_{i+1}) - u(t_{i-1})] \cdot [(n-i+1)^{1-\alpha} - (n-i)^{1-\alpha}] = \\ &\frac{h^{-\alpha}}{2\Gamma(2-\alpha)} \sum_{i=1}^n a_{n-i}^{(\alpha)} [u(t_{i+1}) - u(t_{i-1})] = \\ &\frac{h^{-\alpha}}{2\Gamma(2-\alpha)} \left[a_0^{(\alpha)} u(t_{n+1}) + a_1^{(\alpha)} u(t_n) + \sum_{i=2}^{n-1} (a_{n-i+1}^{(\alpha)} - a_{n-i-1}^{(\alpha)}) u(t_i) - a_{n-2}^{(\alpha)} u(t_1) - a_{n-1}^{(\alpha)} u(t_0) \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

离散一阶Caputo分数阶导数逼近公式(4)的逼近误差为

$$R(u(t_n)) = {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n} - D^\alpha u(t_n),$$

其数值精度由如下定理给出.

定理2.1 设 $u(t) \in C^2[t_0, t_N]$, 则

$$|R(u(t_n))| \leq \frac{1}{2\Gamma(1-\alpha)} (N+1 + \frac{2}{2-\alpha}) \max_{t_0 \leq t \leq t_N} |u''(t)| h^{2-\alpha},$$

其中 $n = 1, \dots, N$.

证 考虑逼近误差

$$\begin{aligned} R(u(t_n)) &= {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n} - D^\alpha u(t_n) = \\ &\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{i=1}^n \int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{u'(s)}{(t_n-s)^\alpha} ds - \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{i=1}^n \int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{u(t_{i+1})-u(t_{i-1})}{2h} \frac{1}{(t_n-s)^\alpha} ds = \\ &\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{i=1}^n \int_{t_{i-1}}^{t_i} [u(s) - L_{1,i} u(s)]' \cdot \frac{1}{(t_n-s)^\alpha} ds = \\ &\frac{-\frac{1}{2} h^2 u''(\xi_i)}{(n-i)^\alpha h^\alpha} + \int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{1}{2} u''(\xi_i) (s - t_{i-1})(t_{i+1} - s) \alpha (t_n - s)^{-\alpha-1} ds, \end{aligned}$$

其中 $\xi_i \in (t_{i-1}, t_{i+1})$, 则

$$|R(u(t_n))| \leq \frac{1}{2\Gamma(1-\alpha)} \max_{t_0 \leq t \leq t_N} |u''(t)| \left[\sum_{i=1}^n \frac{h^{2-\alpha}}{(n-i)^\alpha} + \sum_{i=1}^n \int_{t_{i-1}}^{t_i} \alpha(s-t_{i-1})(t_{i+1}-s)(t_n-s)^{-\alpha-1} ds \right], \quad (5)$$

其中

$$\sum_{i=1}^n \frac{h^{2-\alpha}}{(n-i)^\alpha} \leq n \cdot h^{2-\alpha} \leq N \cdot h^{2-\alpha}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{n-1} \int_{t_{i-1}}^{t_i} \alpha(s-t_{i-1})(t_{i+1}-s)(t_n-s)^{-\alpha-1} ds \leq \\ & \sum_{i=1}^{n-1} \int_{t_{i-1}}^{t_i} \alpha \left(\frac{t_{i+1}-t_{i-1}}{2} \right)^2 (t_n-s)^{-\alpha-1} ds = \\ & h^2 \sum_{i=1}^{n-1} \int_{t_{i-1}}^{t_i} \alpha (t_n-s)^{-\alpha-1} ds = h^2 \int_{t_0}^{t_{n-1}} \alpha (t_n-s)^{-\alpha-1} ds = \\ & h^2 [(t_n-t_{n-1})^{-\alpha} - (t_n-t_0)^{-\alpha}] \leq h^2 \cdot h^{-\alpha} = h^{2-\alpha}, \end{aligned} \quad (7)$$

令 $t_n - s = \theta$, 则

$$\begin{aligned} & \int_{t_{n-1}}^{t_n} \alpha(s-t_{n-1})(t_{n+1}-s)(t_n-s)^{-\alpha-1} ds = \\ & \alpha \int_0^h (h-\theta)(h+\theta)\theta^{-\alpha-1} d\theta = \alpha \int_0^h (h^2\theta^{-\alpha-1} - \theta^{-\alpha+1}) d\theta = \\ & \alpha \left[\frac{h^2}{2-\alpha} h^{-\alpha} - \frac{1}{2-\alpha} h^{2-\alpha} \right] = h^{2-\alpha} \frac{2}{\alpha-2} = -\frac{2}{2-\alpha} h^{2-\alpha}, \end{aligned} \quad (8)$$

将(7)和(8)代入(5), 可得

$$|R(u(t_n))| \leq \frac{1}{2\Gamma(1-\alpha)} (N+1 + \frac{2}{2-\alpha}) \max_{t_0 \leq t \leq t_N} |u''(t)| h^{2-\alpha}.$$

现在考虑 $\alpha(1 < \alpha \leq 2)$ 阶 Caputo 分数阶导数

$${}_0^C D_t^\alpha u(t) = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \int_0^t \frac{u^{(2)}(s)}{(t-s)^{\alpha-1}} ds$$

的数值逼近.

令 $q(t) = u'(t)$, 则有

$${}_0^C D_t^\alpha u(t) = \frac{1}{\Gamma(1-(1-\alpha))} \int_0^t \frac{q'(s)}{(t-s)^{\alpha-1}} ds = {}_0^C D_t^{\alpha-1} q(t),$$

应用(4)和定理2.1可得

$$\begin{aligned} & {}_0^C D_t^{\alpha-1} q(t)|_{t=t_n} = \\ & \frac{h^{-(\alpha-1)}}{2\Gamma(2-(\alpha-1))} [a_0^{(\alpha-1)} q(t_{n+1}) + a_1^{(\alpha-1)} q(t_n) + \sum_{i=2}^{n-1} (a_{n-i+1}^{(\alpha-1)} - a_{n-i-1}^{(\alpha-1)}) q(t_i) - \\ & a_{n-2}^{(\alpha-1)} q(t_1) - a_{n-1}^{(\alpha-1)} q(t_0)] + R(q(t_n)), \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} |R(q(t_n))| & \leq \frac{1}{2\Gamma(1-(\alpha-1))} (N+1 + \frac{2}{3-\alpha}) \max_{t_0 \leq t \leq t_N} |q''(t)| h^{2-(\alpha-1)} = \\ & \frac{1}{2\Gamma(2-\alpha)} (N+1 + \frac{2}{3-\alpha}) \max_{t_0 \leq t \leq t_N} |u'''(t)| h^{3-\alpha}. \end{aligned}$$

记

$$b_l^{(\alpha)} = a_l^{(\alpha-1)} = (l+1)^{2-\alpha} - l^{2-\alpha}, l = 0, 1, 2, \dots, \quad (9)$$

则

$$\begin{aligned} & {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n} = \\ & \frac{h^{1-\alpha}}{2\Gamma(3-\alpha)} [b_0^{(\alpha)} q(t_{n+1}) + b_1^{(\alpha)} q(t_n) + \sum_{i=2}^{n-1} (b_{n-i+1}^{(\alpha)} - b_{n-i-1}^{(\alpha)}) q(t_i) - \\ & b_{n-1}^{(\alpha)} q(t_0)] + R(q(t_n)). \end{aligned} \quad (10)$$

类似地, 有

$$\begin{aligned} & {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_{n-1}} = \\ & \frac{h^{1-\alpha}}{2\Gamma(3-\alpha)} [b_0^{(\alpha)} q(t_n) + b_1^{(\alpha)} q(t_{n-1}) + \sum_{i=2}^{n-2} (b_{n-i}^{(\alpha)} - b_{n-i-2}^{(\alpha)}) q(t_i) - b_{n-3}^{(\alpha)} q(t_1) - \\ & b_{n-2}^{(\alpha)} q(t_0)] + R(q(t_{n-1})). \end{aligned} \quad (11)$$

将(10)和(11)相加可得

$$\begin{aligned} & {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_{n-1}} + {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n} = \\ & \frac{h^{1-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} [b_0^{(\alpha)} \frac{q(t_{n+1})+q(t_n)}{2} + b_1^{(\alpha)} \frac{q(t_n)+q(t_{n-1})}{2} + \sum_{i=2}^{n-1} (b_{n-i+1}^{(\alpha)} - b_{n-i-1}^{(\alpha)}) \frac{q(t_i)+q(t_{i-1})}{2} - \\ & (b_{n-1}^{(\alpha)} + b_{n-2}^{(\alpha)}) \frac{q(t_1)+q(t_0)}{2}] + [R(q(t_n)) + R(q(t_{n-1}))]. \end{aligned} \quad (12)$$

注意到

$$\frac{q(t_i) + q(t_{i-1})}{2} = \frac{u'(t_i) + u'(t_{i-1}))}{2} = \frac{u(t_i) - u(t_{i-1}))}{h} + \frac{h^2}{12} u'''(\xi_i), \quad \xi_i \in (t_{i-1}, t_i),$$

则(12)可改写为

$$\begin{aligned} & {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_{n-1}} + {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n} = \\ & \frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} [b_0^{(\alpha)} u(t_{n+1}) - b_0^{(\alpha)} u(t_n) + b_1^{(\alpha)} u(t_n) - b_1^{(\alpha)} u(t_{n-1}) + \sum_{i=2}^{n-1} (b_{n-i+1}^{(\alpha)} - \\ & b_{n-i-1}^{(\alpha)}) (u(t_i) - u(t_{i-1})) - (b_{n-1}^{(\alpha)} + b_{n-2}^{(\alpha)}) (u(t_1) - u(t_0))] + \hat{R}^{n-\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (13)$$

其中

$$\begin{aligned} \hat{R}^{n-\frac{1}{2}} = & \frac{h^{1-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} [b_0^{(\alpha)} \frac{h^2}{12} u'''(\xi_{n+1}) + b_1^{(\alpha)} \frac{h^2}{12} u'''(\xi_n) + \sum_{i=2}^{n-1} (b_{n-i+1}^{(\alpha)} - b_{n-i-1}^{(\alpha)}) \frac{h^2}{12} u'''(\xi_i) - \\ & (b_{n-1}^{(\alpha)} + b_{n-2}^{(\alpha)}) \frac{h^2}{12} u'''(\xi_1)] + [R(q(t_n)) + R(q(t_{n-1}))] \end{aligned}$$

满足

$$\begin{aligned} |\hat{R}^{n-\frac{1}{2}}| \leq & \frac{h^{3-\alpha}}{12\Gamma(3-\alpha)} [b_0^{(\alpha)} + b_1^{(\alpha)} + \sum_{i=2}^{n-1} (b_{n-i+1}^{(\alpha)} - b_{n-i-1}^{(\alpha)}) - (b_{n-1}^{(\alpha)} + b_{n-2}^{(\alpha)})] + \\ & 2 \cdot \frac{1}{2\Gamma(2-\alpha)} (N+1 + \frac{2}{3-\alpha}) \max_{t_0 \leq t \leq t_N} |u'''(t)| h^{3-\alpha} = \\ & \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} (N+1 + \frac{2}{3-\alpha}) \max_{t_0 \leq t \leq t_N} |u'''(t)| h^{3-\alpha}. \end{aligned} \quad (14)$$

结合(13)以及已知的边界条件 $u(t_0) = 0$, 可得如下定理.

定理2.2 设 $u(t) \in C^3[t_0, t_N]$, 则

$$\begin{aligned} & {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_{n-1}} + {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n} = \\ & \frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} [b_0^{(\alpha)} u(t_{n+1}) - b_0^{(\alpha)} u(t_n) + b_1^{(\alpha)} u(t_n) - b_1^{(\alpha)} u(t_{n-1}) + \sum_{i=2}^{n-1} (b_{n-i+1}^{(\alpha)} - \\ & b_{n-i-1}^{(\alpha)}) (u(t_i) - u(t_{i-1})) - (b_{n-1}^{(\alpha)} + b_{n-2}^{(\alpha)}) u(t_1)] + \hat{R}^{n-\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (15)$$

其中 $\hat{R}^{n-\frac{1}{2}}$ 满足(14), 且系数 $b_l^{(\alpha)} (l = 0, 1, 2, \dots)$ 具有如下性质.

引理2.1^[2] 设 $\alpha \in (1, 2)$, $b_l^{(\alpha)}$ 由(9)定义, $l = 0, 1, 2, \dots$, 则

- (1) $1 = b_0^{(\alpha)} > b_1^{(\alpha)} > b_2^{(\alpha)} > \dots > b_l^{(\alpha)} > 0$; $b_l^{(\alpha)} \rightarrow 0, l \rightarrow \infty$;
- (2) $(2-\alpha)l^{(1-\alpha)} < b_{l-1}^{(\alpha)} < (2-\alpha)(l-1)^{(1-\alpha)}, l \geq 1$.

此外, 利用具有二阶精度的中心差分公式离散一阶导数 $u'(t)$ 有

$$u'(t) = \frac{u(t+h) - u(t-h)}{2h}. \quad (16)$$

结合(15)和(16)可得

$$({}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_{n-1}} + {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n}) + \frac{u(t)}{t}|_{t=t_{n-1}} + \frac{u(t)}{t}|_{t=t_n} + \lambda(u(t_{n-1}) + u(t_n)) = 0,$$

其中

$$\begin{aligned} &({}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_{n-1}} + {}_0^C D_t^\alpha u(t)|_{t=t_n}) + \frac{u(t)}{t}|_{t=t_{n-1}} + \frac{u(t)}{t}|_{t=t_n} = \\ &\frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)}[b_0^{(\alpha)}u(t_{n+1}) - b_0^{(\alpha)}u(t_n) + b_1^{(\alpha)}u(t_n) - b_1^{(\alpha)}u(t_{n-1}) + \sum_{i=2}^{n-1} (b_{n-i+1}^{(\alpha)} - b_{n-i-1}^{(\alpha)}) \times \\ &(u(t_i) - u(t_{i-1})) - (b_{n-1}^{(\alpha)} + b_{n-2}^{(\alpha)})u(t_1)] + \frac{1}{t_{n-1}}u(t_{n-1}) + \frac{1}{t_n}u(t_n), \end{aligned}$$

即

$$\begin{cases} s \cdot [b_0^{(\alpha)}u_2 + (b_1^{(\alpha)} - 2b_0^{(\alpha)})u_1] + \frac{1}{t_1}u_1 = -\lambda u_1, & n=1; \\ s \cdot [b_0^{(\alpha)}u_3 + (b_1^{(\alpha)} - b_0^{(\alpha)})u_2 + (-2b_1^{(\alpha)} - b_0^{(\alpha)})u_1] + \frac{1}{t_1}u_1 + \frac{1}{t_2}u_2 = -\lambda(u_1 + u_2), & n=2; \\ \dots\dots\dots \\ s \cdot [b_0^{(\alpha)}u(t_{N+1}) - b_0^{(\alpha)}u(t_N) + b_1^{(\alpha)}u(t_N) - b_1^{(\alpha)}u(t_{N-1}) + \sum_{i=2}^{N-1} (b_{N-i+1}^{(\alpha)} - b_{N-i-1}^{(\alpha)})(u(t_i) - \\ u(t_{i-1})) - (b_{N-1}^{(\alpha)} + b_{N-2}^{(\alpha)})u(t_1)] + \frac{1}{t_{N-1}}u(t_{N-1}) + \frac{1}{t_N}u(t_N) = -\lambda(u_{N-1} + u_N), & n=N. \end{cases} \quad (17)$$

根据条件 $u'(1) = 0$, 并结合(16)可得 $u(t_{N+1}) = u(t_{N-1})$, 将其代入(17)中的最后一个式子, 有

$$\begin{aligned} &s \cdot [(b_1^{(\alpha)} - b_0^{(\alpha)})u(t_N) + (b_2^{(\alpha)} - b_1^{(\alpha)})u(t_{N-1}) + \dots + (-2b_{N-1}^{(\alpha)} - b_{N-2}^{(\alpha)} + b_{N-3}^{(\alpha)})u(t_1) + \\ &\frac{1}{t_{N-1}}u(t_{N-1}) + \frac{1}{t_N}u(t_N) = \\ &-\lambda(u_{N-1} + u_N), \quad n=N, \end{aligned}$$

则分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)可改写为如下广义特征值问题

$$Bu = \lambda Cu, \quad (18)$$

其中 $u = [u_1, u_2, \dots, u_N]^T$ 且系数矩阵

$$B = s \cdot \begin{bmatrix} b_1 - 2b_0 + \frac{1}{sh} & b_0 & & & \\ -2b_1 - b_0 + \frac{1}{sh} & b_1 - b_0 + \frac{1}{2sh} & \ddots & & \\ -2b_2 - b_1 + b_0 & b_2 - b_1 - b_0 + \frac{1}{2sh} & \ddots & \ddots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & b_1 - b_0 + \frac{1}{(N-1)sh} & b_0 \\ -2b_{N-1} - b_{N-2} + b_{N-3} & \dots & \dots & b_2 - b_1 + \frac{1}{(N-1)sh} & b_1 - b_0 + \frac{1}{Nsh} \end{bmatrix} \quad (19)$$

是一个近似Toeplitz矩阵, 其中 $s = \frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)}$ 以及

$$C = - \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (20)$$

§3 求解广义特征值问题的Jacobi-Davidson方法

利用Jacobi-Davidson方法求解分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)离散后的广义特征值问题(18). 记 $V_m = [v_1, v_1, \dots, v_m]$, $L = \text{span}\{v_1, v_2, \dots, v_m\} \in \mathbf{C}^{N \times m}$, $\{v_i\}_{i=1}^m$ 为 L 中的标准正交基, 且相应的测试空间为 $\text{span}\{w_1, w_2, \dots, w_m\}$, 令 $W_m = [w_1, w_2, \dots, w_m]$, 其中 $m \ll N$. 设 (θ, y) 是广义特征值问题(18)某个特征对 (λ, u) 的近似, 则由Petrov-Galerkin条件可得

$$By - \theta Cy \perp \{w_1, w_2, \dots, w_m\},$$

注意到 $y = V_m s$, 上述条件可等价表述为 $W_m^H (BV_m s - \theta CV_m s) = 0$, 即

$$W_m^H BV_m s = \theta W_m^H CV_m s. \quad (21)$$

设 $(\theta, s)(\|s\|_2 = 1)$ 是广义特征值问题(21)的特征对, $(\theta, V_m s)$ 是广义特征值问题(18)的Ritz对, 为了对Ritz向量 $y = V_m s$ 进行合理校正, 寻求向量 t 使其满足

$$\begin{cases} B(y+t) = \lambda C(y+t), \\ t \perp y. \end{cases} \quad (22)$$

对(22)两边左乘向量 w 和投影矩阵 $I - ww^H$, 可得

$$\begin{cases} \lambda = \frac{w^H B(y+t)}{w^H C(y+t)}, \\ (I - ww^H)(B - \lambda C)t = -(a - \lambda b), \end{cases} \quad (23)$$

其中 $a = By - \frac{w^H B y}{w^H y} y$ 且 $b = Cy - \frac{w^H C y}{w^H y} y$.

由于(23)中的 λ 未知, 用 θ 代替它, 得校正方程

$$(I - ww^H)(B - \theta C)(I - yy^H)t = -r, \quad (24)$$

其中残量 $r = By - \theta Cy$ 且测试向量 $w = \alpha By + \beta Cy$, $\alpha, \beta \in \mathbf{R}$.

通过计算校正方程(24)的解 t 可扩充子空间 V_m , 利用MGS正交化方法

$$v_{m+1} = t - \sum_{i=1}^m (t^H v_i) v_i,$$

将搜索子空间 V_m 扩充至 V_{m+1} . 计算矩阵 $W_{m+1}^H B V_{m+1}$ 相对于矩阵 $W_{m+1}^H C V_{m+1}$ 的特征对, 以及矩阵 B 相对矩阵 C 的Ritz对 (θ_{m+1}, y_{m+1}) , 直至残差 $r = By - \theta Cy$ 的范数小于等于给定的允许误差 ε , 此时 (θ_{m+1}, y_{m+1}) 是分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)的近似特征对.

利用Jacobi-Davidson方法求解离散后的广义特征值问题(18), 校正方程的求解是关键一步. 为了加快算法的收敛速度, 考虑近似求解校正方程(24). 对矩阵 $B - \theta C$ 作如下矩阵分裂

$$B - \theta C = E + R,$$

其中

$$E = s \cdot \begin{bmatrix} b_1 - b_0 + \frac{1}{Nsh} & b_0 & & & \\ b_2 - b_1 - b_0 + \frac{1}{Nsh} & b_1 - b_0 + \frac{1}{Nsh} & \ddots & & \\ b_3 - b_2 - b_1 + b_0 & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b_0 \\ b_N - b_{N-1} - b_{N-2} + b_{N-3} & \cdots & \cdots & \cdots & b_1 - b_0 + \frac{1}{Nsh} \end{bmatrix} \quad (25)$$

是一个非对称Toeplitz矩阵, $s = \frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)}$ 且

$$R = \begin{bmatrix} -sb_0 - \frac{1}{Nh} + \frac{1}{h} + \theta & & & & \\ -sb_2 - sb_1 - \frac{1}{Nh} + \frac{1}{h} + \theta & -\frac{1}{Nh} + \frac{1}{2h} + \theta & & & \\ -sb_3 - sb_2 & -\frac{1}{Nh} + \frac{1}{2h} + \theta & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ -sb_{N-1} - sb_{N-2} & \ddots & \ddots & \ddots & -\frac{1}{Nh} + \frac{1}{(N-1)h} + \theta \\ -sb_N - sb_{N-1} & \cdots & \cdots & \cdots & sb_0 - \frac{1}{Nh} + \frac{1}{(N-1)h} + \theta \quad \theta \end{bmatrix}.$$

令

$$K = E \approx B - \theta C,$$

则校正方程(24)可改写为

$$(I - ww^H)K(I - yy^H)t = -r.$$

由正交性条件 $t \perp y$, 得

$$t = -K^{-1}r + \frac{y^H K^{-1}r}{y^H K^{-1}w} K^{-1}w,$$

从而近似求解校正方程(24)时, 需要求解 $K^{-1}r$ 和 $K^{-1}w$, 即求解 Toeplitz 线性代数方程组

$$Kx = r \quad (26)$$

和

$$Kx = w, \quad (27)$$

其中 $K \in \mathbf{R}^{N \times N}$, $w \in \mathbf{R}^{N \times 1}$ 且 $r \in \mathbf{R}^{N \times 1}$.

§4 预处理矩阵的构造

对于任意 Toeplitz 线性代数方程组, 利用循环矩阵作为预处理子可加快 GMRES 迭代算法的收敛速度. 循环矩阵的一般形式为^[23]

$$C_N = \begin{bmatrix} c_0 & c_{-1} & \cdots & \cdots & c_{2-N} & c_{1-N} \\ c_1 & c_0 & c_{-1} & \ddots & \ddots & c_{2-N} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ c_{N-2} & \ddots & \ddots & \ddots & c_0 & c_{-1} \\ c_{N-1} & c_{N-2} & \cdots & \cdots & c_1 & c_0 \end{bmatrix},$$

其中 $c_{-j} = c_{N-j}$, $1 \leq j \leq N-1$. 任一循环矩阵 C_N 都能被 Fourier 矩阵 F 对角化^[24], 即

$$FC_N F^H = \Lambda_N, \quad (28)$$

其中 Λ_N 是对角矩阵, 且其对角元素为循环矩阵 C_N 的特征值. Fourier 矩阵 F 的一般形式为

$$F = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \phi & \phi^2 & \cdots & \phi^{N-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \phi^{N-1} & \phi^{2(N-1)} & \cdots & \phi^{(N-1)(N-1)} \end{bmatrix}, \quad (29)$$

其中 $\phi = e^{-2\pi i/N}$, 则矩阵 F 的元素为

$$(F)_{k,j} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{2\pi j k i / N}, 0 \leq j, k \leq N-1, i \equiv \sqrt{-1},$$

且矩阵 F 是 $N \times N$ 的酉矩阵.

由(29)可知, 矩阵 F 的第一列可表示为 $\frac{1}{\sqrt{N}} I_N$, 其中 $I_N = (1, 1, \dots, 1)^T$. 结合(28)得

$$FC_N e_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \Lambda_N I_N,$$

其中 e_1 表示单位矩阵的第一列, 则可以通过对 C_N 的第一列做快速 Fourier 变换(FFT)得到对角矩阵 Λ_N 的元素. 一旦求得矩阵 Λ_N , 则可利用 FFT 快速求得 $C_N y$ 和 $C_N^{-1} y$, 且其计算量为 $O(N \log_2 N)$ ^[23].

针对系数矩阵 K 的特殊结构, 考虑结合 Strang 循环预处理子求解 Toeplitz 线性代数方程组(26)和(27). Strang 循环矩阵基本定义如下.

定义 4.1^[23] 对于任意 Toeplitz 矩阵 $T = [t_{i-j}]_{0 \leq i, j \leq N-1} \in \mathbf{R}^{N \times N}$, 如果矩阵 T 的阶数 N 为

偶数, 其相应的Strang循环矩阵 $M(T) = [m_{i-j}]_{0 \leq i, j \leq N-1} \in \mathbf{R}^{N \times N}$ 的对角线元素为

$$m_i = \begin{cases} t_i, & 0 \leq i \leq (N-1)/2, \\ t_{i-N}, & (N-1)/2 \leq i \leq N-1, \\ m_{i+N}, & 0 < -i \leq N-1, \end{cases} \quad (30)$$

如果阶数 N 是奇数, 矩阵 $M(T)$ 对角线元素为

$$m_i = \begin{cases} t_i, & 0 \leq i < N/2, \\ 0, & i = N/2, \\ t_{i-N}, & N/2 < i < N, \\ m_{i+N}, & 0 < -i < N. \end{cases} \quad (31)$$

取 $p_0^{(\alpha)} = s \cdot b_0^{(\alpha)}$, $p_1^{(\alpha)} = s \cdot (b_1^{(\alpha)} - b_0^{(\alpha)} + \frac{1}{Nsh})$, $p_2^{(\alpha)} = s \cdot (b_2^{(\alpha)} - b_1^{(\alpha)} - b_0^{(\alpha)} + \frac{1}{Nsh})$, $p_j^{(\alpha)} = s \cdot (b_j^{(\alpha)} - b_{j-1}^{(\alpha)} - b_{j-2}^{(\alpha)} + b_{j-3}^{(\alpha)}) (j \geq 3)$. 根据定义4.1, 当矩阵阶数 N 是偶数, Toeplitz线性代数方程组(26)和(27)对应的Strang循环预处理矩阵 M 形式为

$$M = \begin{bmatrix} p_1^{(\alpha)} & p_0^{(\alpha)} & 0 & \cdots & 0 & p_{N/2}^{(\alpha)} & \cdots & p_2^{(\alpha)} \\ p_2^{(\alpha)} & p_1^{(\alpha)} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & p_{N/2}^{(\alpha)} \\ p_{N/2}^{(\alpha)} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & p_0^{(\alpha)} \\ p_0^{(\alpha)} & 0 & \cdots & 0 & p_{N/2}^{(\alpha)} & \cdots & p_2^{(\alpha)} & p_1^{(\alpha)} \end{bmatrix}. \quad (32)$$

经预处理的系数矩阵 $M^{-1}K$ 的特征值分布性质由如下定理给出. 不失一般性, 只考虑当阶数 N 是偶数的情况.

定理4.1 Toeplitz线性代数方程组(26)和(27)的系数矩阵 K 对应的Strang循环矩阵 M 满足

$$\|M^{-1}\|_{\infty} \leq \frac{1}{\ell}, \quad (33)$$

其中 $\ell = \frac{2^{3-\alpha} - 3^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} - 1$.

证 对于任一向量 $z = [z_1, z_2, \dots, z_N]^T \in \mathbf{R}^N$, 定义

$$t = [t_1, t_2, \dots, t_N]^T \triangleq M^{-1}z. \quad (34)$$

设 $|t_k| = \|t\|_{\infty}$, 则 $|t_i| \leq |t_k|$, $i = 1, 2, \dots, N$. 记 $[Mt]_k$ 为矩阵 M 的第 k 行和向量 t 的乘积, 则根据(32)和(34)可得

$$\begin{aligned}
|z_k| &= |[Mt]_k| = \left| p_0^{(\alpha)}|t_k| + |p_2^{(\alpha)}||t_k| + [Mt]_k - p_0^{(\alpha)}|t_k| - |p_2^{(\alpha)}||t_k| \right| \geq \\
&\left| p_0^{(\alpha)}|t_k| + |p_2^{(\alpha)}||t_k| \right| - \left| [Mt]_k - p_0^{(\alpha)}|t_k| - |p_2^{(\alpha)}||t_k| \right| \geq \\
&\left| p_0^{(\alpha)}|t_k| + |p_2^{(\alpha)}||t_k| \right| - \left| [Mt]_k - p_0^{(\alpha)}|t_k| \right| \geq \\
&p_0^{(\alpha)}|t_k| + |p_2^{(\alpha)}||t_k| + \sum_{j=1}^{N/2} p_j^{(\alpha)}|t_k| \geq |p_2^{(\alpha)}||t_k| + \sum_{j=0}^{N/2} p_j^{(\alpha)}|t_k| \geq \\
&|p_2^{(\alpha)}||t_k| \geq s \cdot (2^{3-\alpha} - 3^{2-\alpha} - \frac{1}{s})|t_k| \geq (\frac{2^{3-\alpha} - 3^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} - 1)|t_k| = \ell|t_k|,
\end{aligned}$$

其中 $s = \frac{h^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)}$ 且 $\ell = \frac{2^{3-\alpha} - 3^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} - 1$. 由 $|t_k|$ 的定义, 得

$$\|t\|_\infty = |t_k| \leq \frac{1}{\ell}|z_k| \leq \frac{1}{\ell}\|z\|_\infty. \quad (35)$$

结合矩阵算子范数的定义和(35)可得

$$\|M^{-1}\|_\infty = \max_{z \in \mathbf{R}^N, z \neq 0} \frac{\|M^{-1}z\|_\infty}{\|z\|_\infty} = \frac{\|t\|_\infty}{\|z\|_\infty} \leq \frac{1}{\ell}. \quad (36)$$

定理4.2 利用二阶Caputo分数阶导数逼近公式离散分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2), 设离散网格长度 $h \leq \frac{1}{6}$. 已知Toeplitz线性代数方程组(26)和(27)系数矩阵 K 及其对应的Strang循环预处理矩阵 M , 记

$$\ell = \frac{2^{3-\alpha} - 3^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} - 1, \quad \eta = \frac{4(2-\alpha)}{\Gamma(3-\alpha)}.$$

设存在正实数 ε 满足 $2^{\alpha-1}\eta \leq \varepsilon < \frac{\eta}{h^{1+\alpha}}$, 以及

$$a_0 = \left\lceil \frac{1}{h^{\frac{\alpha+1}{\alpha-1}}} \left(\frac{\eta}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{\alpha-1}} \right\rceil + 1, \quad (37)$$

做矩阵分裂 $M^{-1}K = I_N + H + J$, 其中 $\text{rank}(J) \leq 2a_0$, $\|H\|_\infty < \frac{\varepsilon}{\ell}$, 从而矩阵 $M^{-1}K$ 的特征值大部分集中在1附近.

证 根据(25)和(32)可得

$$M^{-1}K - I_N = M^{-1}(K - M), \quad (38)$$

对矩阵 $K - M$ 做如下分块

$$K - M = \begin{bmatrix} 0 & R_1 & R_2 \\ Q_1 & 0 & 0 \\ Q_2 & 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{N \times N}, \quad (39)$$

其中

$$\begin{aligned}
Q_1 &= \begin{bmatrix} p_{N/2+1}^{(\alpha)} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ p_{N-a_0}^{(\alpha)} & \cdots & p_{N/2+1}^{(\alpha)} & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{(\frac{N}{2}-a_0) \times \frac{N}{2}}, \\
Q_2 &= \begin{bmatrix} p_{N-a_0+1}^{(\alpha)} & \cdots & p_{N/2+1}^{(\alpha)} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ p_N^{(\alpha)} - p_0^{(\alpha)} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & p_{N/2+1}^{(\alpha)} \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{a_0 \times \frac{N}{2}},
\end{aligned}$$

和

$$R_1 = \begin{bmatrix} 0 & -p_{N/2}^{(\alpha)} & \cdots & -p_{a_0+2}^{(\alpha)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -p_{N/2}^{(\alpha)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{\frac{N}{2} \times (\frac{N}{2} - a_0)},$$

$$R_2 = \begin{bmatrix} -p_{a_0+1}^{(\alpha)} & \cdots & -p_2^{(\alpha)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -p_{N/2}^{(\alpha)} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & -p_{N/2}^{(\alpha)} \\ 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{\frac{N}{2} \times a_0},$$

其中 $1 \leq a_0 \leq \frac{N}{2}$. 记

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 0 & R_1 & 0 \\ Q_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{N \times N}, \hat{Q} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & R_2 \\ 0 & 0 & 0 \\ Q_2 & 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{N \times N},$$

则 $K - M$ 可改写为

$$K - M = \hat{R} + \hat{Q},$$

即

$$M^{-1}K - I_N = M^{-1}(K - M) = M^{-1}(\hat{R} + \hat{Q}) = H + J,$$

其中 $H = M^{-1}\hat{R}$, $J = M^{-1}\hat{Q}$. 由 $\text{rank}(\hat{Q}) = 2a_0$, 可得 $\text{rank}(J) \leq \text{rank}(\hat{Q}) = 2a_0$, 从而

$$\begin{aligned} \|\hat{R}\|_\infty &\leq \|Q_1\|_\infty + \|R_1\|_\infty = \sum_{i=N/2+1}^{N-a_0} |p_i^{(\alpha)}| + \sum_{i=a_0+2}^{N/2} |p_i^{(\alpha)}| = \sum_{i=a_0+2}^{N-a_0} |p_i^{(\alpha)}| \leq \\ &\sum_{i=a_0+2}^{N-a_0} s \cdot (|b_i^{(\alpha)}| + |b_{i-1}^{(\alpha)}| + |b_{i-2}^{(\alpha)}| + |b_{i-3}^{(\alpha)}|) \leq 4s \cdot \sum_{i=a_0+2}^{N-a_0} b_{i-3}^{(\alpha)} \leq 4s \cdot \sum_{i=a_0}^N b_{i-1}^{(\alpha)} \leq \\ &4s \cdot (N - a_0 + 1)b_{a_0-1}^{(\alpha)} < 4s \cdot (N - a_0 + 1)(2 - \alpha)(a_0 - 1)^{1-\alpha} \leq \\ &4s \cdot \frac{1}{h}(2 - \alpha)(a_0 - 1)^{1-\alpha} = \frac{\eta}{h^{1+\alpha}(a_0-1)^{\alpha-1}} < \varepsilon, \end{aligned}$$

其中 $\eta = \frac{4(2-\alpha)}{\Gamma(3-\alpha)}$. 结合定理4.1可得

$$\|H\|_\infty \leq \|M^{-1}\|_\infty \cdot \|\hat{R}\|_\infty < \|M^{-1}\|_\infty \cdot \frac{\eta}{h^{1+\alpha}(a_0-1)^{\alpha-1}} \leq \frac{1}{\ell} \cdot \frac{\eta}{h^{1+\alpha}(a_0-1)^{\alpha-1}} < \frac{\varepsilon}{\ell}. \quad (40)$$

综上所述, 经Strang循环预处理后的矩阵 $M^{-1}K$ 可以表示为单位矩阵 I_N , 低秩矩阵 J 和小范数矩阵 H 和的形式, 即 $M^{-1}K = I_N + H + J$, 其中 $J = M^{-1}\hat{Q}$, $\|H\|_\infty < \frac{\varepsilon}{\ell}$. 注意到矩阵 $\hat{Q}$ 的结构, 则

$$I_N + J = \begin{bmatrix} \times & 0 & \times \\ \times & I_{N-2a_0} & \times \\ \times & 0 & \times \end{bmatrix},$$

由(37)可知, a_0 是一个小量, 从而根据Gerschgorin圆盘定理可知, 矩阵 $M^{-1}K$ 的特征值大多数集中在1附近.

§5 预处理广义极小残量法

考虑到Toeplitz线性代数方程组(26)和(27)的系数矩阵是下Hessenberg形式的Toeplitz矩阵, 将预处理技术与GMRES算法结合, 提出求解非对称Toeplitz线性代数方程组的预处理广义极小残量法(PGMRES). 本节以求解Toeplitz线性代数方程组(27)为例, 阐述PGMRES方法求解非对称Toeplitz线性代数方程组的过程.

PGMRES方法的基本思想就是利用Arnoldi过程生成一个 $m \times m$ 的Hessenberg矩阵以及相应的基 V_m , 并通过极小化残量范数

$$\|r_m\| = \min\{\|M^{-1}(w - Kx)\|_2 : x \in x_0 + \kappa_m(M^{-1}K, r_0)\} \quad (40)$$

求近似解 x_m , 其中 x_0 为初始向量, $r_0 = M^{-1}(w - Kx_0)$, $r_m = M^{-1}(w - Kx_m)$, $\kappa_m(M^{-1}K, r_0) = \{r_0, (M^{-1}K)r_0, \dots, (M^{-1}K)^{m-1}r_0\}$. 计算一个长度为 m 的Arnoldi分解

$$M^{-1}KV_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T = V_{m+1} \tilde{H}_{m+1,m},$$

其中 $V_{m+1} = [V_m, v_{m+1}] \in \mathbf{R}^{N \times (m+1)}$ 是酉矩阵, 矩阵

$$\tilde{H}_{m+1,m} = \begin{bmatrix} H_m & \\ h_{m+1,m} e_m^T & \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{(m+1) \times m}$$

为上Hessenberg矩阵, 其中

$$H_m = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & \cdots & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & \ddots & \ddots & h_{2m} \\ & h_{32} & \ddots & \ddots & h_{3m} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & h_{m,m-1} & h_{mm} \end{bmatrix}.$$

由于 V_{m+1} 是酉矩阵, 则对任意向量 $x = x_0 + V_m z \in x_0 + \kappa_m(M^{-1}K, r_0)$, 有

$$\begin{aligned} \|M^{-1}(w - Kx)\|_2 &= \|M^{-1}(w - Kx_0) - M^{-1}KV_m z\|_2 = \\ \|r_0 - M^{-1}KV_m z\|_2 &= \|\beta V_{m+1} e_1^{(m+1)} - V_{m+1} \tilde{H}_{m+1,m} z\|_2 = \\ \|V_{m+1}(\beta e_1^{(m+1)} - \tilde{H}_{m+1,m} z)\|_2 &= \|\beta e_1^{(m+1)} - \tilde{H}_{m+1,m} z\|_2, \end{aligned}$$

其中 $\beta = \|r_0\|_2$ 且 $m+1$ 维向量 $e_1^{(m+1)} = (1, 0, \dots, 0)^T$. 因此, 极小化问题(40)等价于求 $z_m \in \mathbf{R}^m$, 满足

$$\|\beta e_1^{(m+1)} - \tilde{H}_{m+1,m} z_m\|_2 = \min\{\|\beta e_1^{(m+1)} - \tilde{H}_{m+1,m} z\|_2 : z \in \mathbf{R}^m\}. \quad (41)$$

若求得 z_m , 则所需的 x_m 即为 $x_m = x_0 + V_m z_m$. PGMRES方法求解方程(27)的具体实施步骤概述如下.

算法5.1 求解Toeplitz线性代数方程组(27)的PGMRES算法

- 1: 输入: Toeplitz系数矩阵 $K \in \mathbf{R}^{N \times N}$, 向量 $w \in \mathbf{R}^N$, 正整数 m , 允许误差 ε , 最大迭代步数 Max_{iter} , 初始向量 $x_0 = 0$;
- 2: 输出: x_m ;
- 3: 根据(30)或(31)计算Strang循环预处理子 $M \in \mathbf{R}^{N \times N}$;
- 4: 计算残量 $r_0 = M^{-1}(w - Kx_0)$; 令 $\beta = \|r_0\|_2$ 以及初始正交化向量 $v_1 = r_0/\beta$;

- 5: 循环 $j = 1$ 到 m 执行:
- 6: 利用FFT计算 M^{-1} , 计算 $p = M^{-1}Kv_j$;
- 7: 计算 $h_{ij} = (p, v_i)$, $i = 1, 2, \dots, j$;
- 8: 计算 $s_{j+1} = p - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$;
- 9: 计算 $h_{j+1,j} = \|s_{j+1}\|_2$, 若 $h_{j+1,j} = 0$ 则停止;
- 10: 计算 $v_{j+1} = s_{j+1}/h_{j+1,j}$;
- 11: 结束循环;
- 12: 定义 $V_m = [v_1, v_2, \dots, v_m]$, $\tilde{H}_{m+1,m} = \{h_{ij}\}_{1 \leq i \leq j+1; 1 \leq j \leq m}$;
- 13: 计算 $z_m = \arg \min_z \|\beta e_1^{(m+1)} - \tilde{H}_{m+1,m}z\|_2$, $x_m = x_0 + V_m z_m$ 及 $r_m = M^{-1}(w - Kx_m)$;
- 14: 如果 $\|r_m\|_2/\|r_0\|_2 \leq \varepsilon$ 或达到最大迭代步数, 计算Toeplitz线性代数方程组(27)的解 $x_m \in \mathbf{R}^N$, 停止; 否则置 $x_0 := x_m$, 转4.

§6 数值算法与算例

本节考虑利用Jacobi-Davidson方法求解分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2), §5讨论了该方法计算过程中, 如何有效地求解校正方程(24), 下面给出Jacobi-Davidson算法求解分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)的具体实施步骤.

算法6.1 求解分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)的Jacobi-Davidson算法

- 1: 输入: 系数矩阵 $B \in \mathbf{R}^{N \times N}$ 和 $C \in \mathbf{R}^{N \times N}$, 最大迭代次数 n , 允许误差 ε ;
- 2: 输出: 分数阶特征值 θ ;
- 3: 选取正交规范向量 $v_1 \in \mathbf{R}^N$ 且 $\|v_1\|_2 = 1$; 令 $V_1 = [v_1]$, $y = v_1$;
- 4: 循环 $m = 1$ 到 $n - 1$ 执行:
- 5: 计算 $\theta = \frac{w^H B y}{w^H C y}$, $r = By - \theta C y$;
- 6: 利用算法5.1求解校正方程(24), 得到校正向量 t ;
- 7: 根据校正向量 t , 利用MGS正交化过程

$$\tilde{v}_{m+1} = t - \sum_{i=1}^m (t^H v_i) v_i, v_{m+1} = \tilde{v}_{m+1} / \|\tilde{v}_{m+1}\|_2$$

将搜索子空间 V_m 扩充至 V_{m+1} ;

- 8: 计算 $W_{m+1}^H B V_{m+1} s = \theta W_{m+1}^H C V_{m+1}$ 的特征对 (θ, s) ($\|s\|_2 = 1$);
- 9: 计算Ritz向量 $y = V_{m+1} s$;
- 10: 计算相应Ritz对的残量 $r = By - \theta C y$ 并检验收敛性; 如果 $\|r\|_2 < \varepsilon$, 则算法停止, 否则置 $m = m + 1$;
- 11: 结束循环;
- 12: 重新开始: 记 $V_1 = [y]$, 返回步4.

本文所有数值实验均在i5-8250U处理器(单核主频1.80GHz, 10内核), 8GB内存的微机上调用MATLAB(版本号R2018B)编程求解. 计算结果表明本文算法的有效性.

例6.1 考虑分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2). 利用Jacobi-Davidson方法求解问题(2), 校正方程的求解是此方法计算过程中的一个关键环节, 为了加快算法的收敛速度, 考虑利用算法5.1计算该校正方程的近似解.

在算法5.1中, 取参数 $\varepsilon = 1\text{E} - 4$, $\text{Max}_{\text{iter}} = 1000$, 重开始数 $m = 30$, 其中 $\|r_m\|_2 / \|r_0\|_2 \leq \varepsilon$ 或达到最大迭代步数 Max_{iter} 为算法5.1的停机准则. 总迭代步数记为“IT”, 其计算公式为

$$\text{总迭代步数} = (\text{外迭代步数} - 1) \times \text{重开始数} + \text{内迭代步数},$$

运行时间记为“CPU”, 单位为秒. 比较以Strang循环矩阵 M 作为预处理矩阵的PGMRES(M)算法, 以T.Chan循环矩阵 C 为预处理矩阵的PGMRES(C)算法和GMRES算法的IT和CPU, 验证使用Strang循环矩阵 M 作为预处理子的PGMRES方法(PGMRES(M))的可行性和有效性.

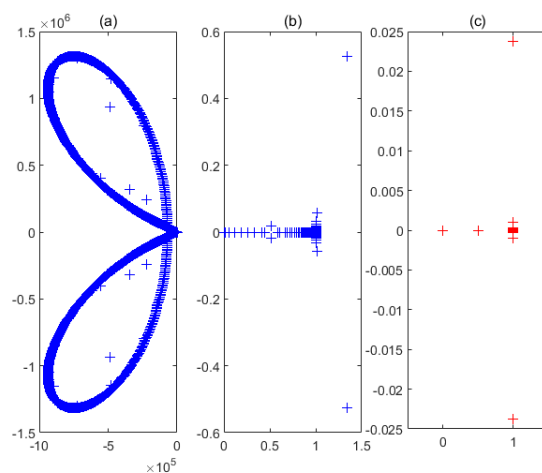


图1 $\alpha = 1.9$, $N = 1000$ 矩阵 K , $C^{-1}K$ 以及 $M^{-1}K$ 的特征值分布

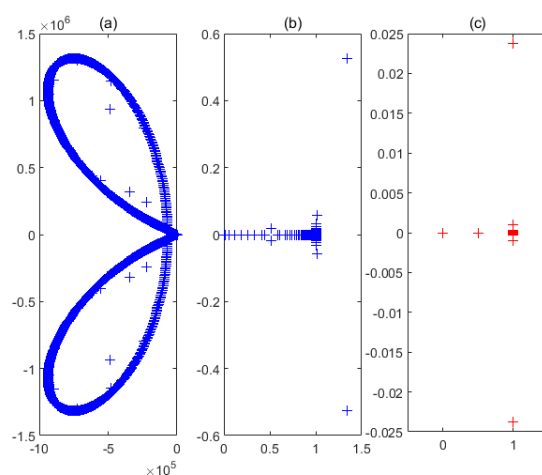


图2 $\alpha = 1.9$, $N = 2000$ 矩阵 K , $C^{-1}K$ 以及 $M^{-1}K$ 的特征值分布

图1和图2分别是 $N = 1000$ 和 $N = 2000$ 且 $\alpha = 1.9$ 时, 矩阵 K 以及经预处理的系数矩阵 $C^{-1}K$ 和 $M^{-1}K$ 的特征值分布图, 其中(a)表示矩阵 K 的特征值分布, (b)表示矩阵 $C^{-1}K$ 的

特征值分布, (c)表示矩阵 $M^{-1}K$ 的特征值分布. 从图1和图2中可以看出, (b)和(c)的特征值分布较(a)更为集中, 并且(c)特征值的聚集程度较(b)更高. 此外, 由于经Strang循环矩阵 M 预处理后的特征值聚集程度更高, 系数矩阵条件数更小, 求解器需要的迭代次数更少, 整个求解过程更加高效, 因而在表1和表2中, PGMRES(M)所需要的总迭代次数和运行时间比PGMRES(C)少.

表1和表2分别列出 $\alpha = 1.9$ 和 $\alpha = 1.999$, 取不同的矩阵阶数 N 时, PGMRES(M), PGMRES(C)和GMRES算法求解Toeplitz线性代数方程组所需的IT和CPU. 在表中, “-”表示相应的迭代步数超过最大迭代步数后发生上溢, 无法满足关闭标准而导致不能正常停止.

表1 $\alpha = 1.9$ 时算法5.1收敛所需总迭代步数和运行时间

N	GMRES		PGMRES(C)		PGMRES(M)	
	IT	CPU	IT	CPU	IT	CPU
1000	-	-	32	0.5804	3	0.1306
2000	-	-	37	3.1101	3	0.4156
3000	-	-	44	6.5581	3	0.9211
4000	-	-	45	11.2683	3	1.6198
5000	-	-	63	35.4178	3	3.8746

表2 $\alpha = 1.999$ 时算法5.1 收敛所需总迭代步数和运行时间

N	GMRES		PGMRES(C)		PGMRES(M)	
	IT	CPU	IT	CPU	IT	CPU
1000	-	-	37	0.7369	3	0.1103
2000	-	-	41	3.3468	3	0.4323
3000	-	-	41	6.6061	3	1.0565
4000	-	-	51	14.2158	3	1.6106
5000	-	-	56	32.3951	3	3.6955

数值结果表明, GMRES算法无法在最大迭代次数内找到满足精度要求的解, PGMRES(M)和PGMRES(C)均得到了满足精度要求的解, 并且PGMRES(M)比PGMRES(C)需要更少的总迭代步数和运行时间. 此外, 当矩阵阶数 N 越大时, PGMRES(M)比PGMRES(C)加速收敛效果更为明显.

取不同的矩阵阶数 N , 应用算法6.1计算分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)的特征值, 将部分结果列于表3中, 并与Reutskiy^[10]使用MEE和BSM(M-B)相结合的方法获得的数值结果进行比较, 其中“*”表示该方法未给出此特征值.

表3 $\alpha = 1.75$ 时, 分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2) 的部分特征值

λ	$N = 1000$	$N = 2000$	$N = 3000$	$N = 4000$	$N = 5000$	M-B
λ_1	1.0206	1.0171	1.0153	1.0140	1.0131	0.9968
λ_2	13.7742	13.7656	13.7603	13.7565	13.7537	13.6966
λ_3	35.5562	35.5508	35.5459	35.5420	35.5389	35.4622
λ_4	66.7822	66.7964	66.7972	66.7956	66.7935	*
λ_5	103.8315	103.8585	103.8647	103.8661	103.8659	*
λ_6	150.5265	150.6362	150.6709	150.6863	150.6942	*

表4 $\alpha = 1.9$ 时, 分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)的部分特征值

λ	$N = 1000$	$N = 2000$	$N = 3000$	$N = 4000$	$N = 5000$	M-B
λ_1	0.8352	0.8347	0.8344	0.8341	0.8340	0.8247
λ_2	16.5852	16.5825	16.5811	16.5802	16.5795	16.5498
λ_3	47.3929	47.3855	47.3824	47.3806	47.3793	47.3342
λ_4	92.4015	92.3860	92.3804	92.3772	92.3751	*
λ_5	150.7146	150.6848	150.6748	150.6695	150.6662	*
λ_6	222.2915	222.2421	222.2263	222.2183	222.2134	*

表3和表4表明, 矩阵阶数 N 越大, 由算法6.1获得的特征值越接近由M-B方法获得的特征值, 并且算法6.1可以求得分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)的其余特征值, 而M-B方法只求得部分特征值.

表5 $\alpha = 1.999$ 时, 分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)的部分特征值

λ	$N = 1000$	$N = 2000$	$N = 3000$	$N = 4000$	$N = 5000$
λ_1	0.7807	0.7807	0.7807	0.7807	0.7807
λ_2	19.3287	19.3287	19.3287	19.3287	19.3287
λ_3	58.2112	58.2112	58.2112	58.2112	58.2111
λ_4	116.9353	116.9356	116.9356	116.9355	116.9355
λ_5	195.4036	195.4049	195.4050	195.4049	195.4049
λ_6	293.5784	293.5818	293.5821	293.5820	293.5820

表6 $\alpha = 2$ 时, 分数阶Sturm-Liouville特征值问题(2)的部分特征值

λ	$N = 1000$	$N = 2000$	$N = 3000$	$N = 4000$	$N = 5000$	M-B
λ_1	0.7805	0.7805	0.7805	0.7805	0.7805	0.7805
λ_2	19.3607	19.3607	19.3607	19.3607	19.3607	19.3607
λ_3	58.3360	58.3363	58.3363	58.3363	58.3363	58.3363
λ_4	117.2214	117.2223	117.2225	117.2225	117.2226	*
λ_5	195.9279	195.9304	195.9309	195.9310	195.9311	*
λ_6	294.4212	294.4268	294.4278	294.4282	294.4283	*

将 $\alpha = 1.999$ 和 $\alpha = 2$ 的部分特征值分别列于表5和表6. 由表5和表6可知, 取不同的矩阵阶数 N 时, $\alpha = 1.999$ 的特征值几乎相同, 表明该算法的收敛性. 同时, $\alpha = 1.999$ 与 $\alpha = 2$ 的特征值几乎一致, 验证了所提出算法的有效性.

§7 总结与展望

本文利用二阶Caputo分数阶导数的逼近公式将分数阶Sturm-Liouville特征值问题转化为广义特征值问题. 利用Jacobi-Davidson方法求解该广义特征值问题时, 校正方程的求解是此方法计算过程中的一个重要环节. 为了加快算法的收敛速度, 考虑近似求解校正方程, 即求解Toeplitz线性代数方程组. 鉴于系数矩阵的特殊结构, 为其构造Strang循环预处理子, 并分析经预处理的系数矩阵的特征值分布性质. 数值结果表明该方法的高效性和精确性. 在实际应用中, 分数阶导数还有许多定义, 同时, 分数阶导数的阶数可以是高阶甚至还可以是随时间或空间变化的函数. 因此可以进一步研究高阶的分数阶Sturm-Liouville特征值问题. 对于变阶的分数阶特征值问题, 如何数值离散并且高效求解也是值得开展的课题.

参考文献:

- [1] Sadabad M K, Akbarfam A J. An efficient numerical method for estimating eigenvalues and eigenfunctions of fractional Sturm-Liouville problems[J]. Mathematics and Computers in Simulation, 2021, 185: 547-569.
- [2] 孙志忠, 高广花. 分数阶微分方程的有限差分方法[M]. 北京: 科学出版社, 2015.
- [3] Agrawal O P. Response of a diffusion-wave system subjected to deterministic and stochastic fields[J]. Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 2003, 83(4): 265-274.
- [4] Tankov P, Cont R. Financial Modelling with Jump Processes[M]. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2003.
- [5] Rossikhin Y A, Shitikova M V. Application of fractional calculus for dynamic problems of solid mechanics: novel trends and recent results[J]. Applied Mechanics Reviews, 2010, 63(1): 1-52.
- [6] Neamaty A, Darzi R. The solutions of fractional Sturm-Liouville problems with α -ordinary and singular points[C]//Proceedings of the Fifth International Conference Finite Difference Methods: Theory and Applications, Lozenetz, 2010, 147.
- [7] Bas E, Ozarslan R, Baleanu D, et al. Comparative simulations for solutions of fractional Sturm-Liouville problems with non-singular operators[J]. Advances in Difference Equations, 2018(1): 1-19.
- [8] Al-Mdallal Q M. An efficient method for solving fractional Sturm-Liouville problems[J]. Chaos Solitons Fractals, 2009, 40(1): 183-189.
- [9] Al-Mdallal Q M. On the numerical solution of fractional Sturm-Liouville problems[J]. International Journal of Computer Mathematics, 2010, 87(12): 2837-2845.
- [10] Reutskiy S Y. A novel method for solving second order fractional eigenvalue problems[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2016, 306: 133-153.
- [11] Tian Wenyi, Zhou Han, Deng Weihua. A class of second order difference approximations for solving space fractional diffusion equations[J]. Mathematics of Computation, 2015, 84(294): 1703-1727.
- [12] Bechelova A R. On the convergence of difference schemes for the diffusion equation of fractional order[J]. Ukrainian Mathematical Journal, 1998, 50(7): 1131-1134.
- [13] Lanczos C. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators[J]. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1950, 45: 225-280.
- [14] Arnoldi W E. The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem[J]. Quarterly of Applied Mathematics, 1951, 9(1): 17-29.
- [15] Stewart G W. A Krylov-Schur algorithm for large eigenproblems[J]. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 2002, 23(3): 601-614.
- [16] Sleijpen G L G, Van Der Vorst H A, Meijerink E. Efficient expansion of subspaces in the Jacobi-Davidson method for standard and generalized eigenproblems[J]. Electronic Transactions on Numerical Analysis, 1998, 7: 75-89.
- [17] Gu Chuanqing, Tian Zhaolu. On the HSS iteration methods for positive definite Toeplitz linear systems[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2009, 224(2): 709-718.
- [18] Freund R W. A look-ahead Bareiss algorithm for general Toeplitz matrices[J]. Numerische Mathematik, 1994, 68(1): 35-69.

- [19] Saad Y, Schultz M H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving non-symmetric linear systems[J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1986, 7(3): 856-869.
- [20] Olkin J A. Linear and Nonlinear Deconvolution Problems[D]. Houston: Rice University, 1986.
- [21] Strang G. A proposal for Toeplitz matrix calculations[J]. Studies in Applied Mathematics, 1986, 74(3): 171-176.
- [22] Chan R H, Michael K N, Jin Xiaoqing. Strang-type preconditioners for systems of LMF-based ODE codes[J]. IMA Journal of Numerical Analysis, 2001, 21(2): 451-462.
- [23] Jin Xiaoqing. Preconditioning Techniques for Toeplitz Systems[M]. 北京: 高等教育出版社, 2010.
- [24] Gray R M. Toeplitz and circulant matrices: A review[J]. Foundations and Trends in Communications and Information Theory, 2006, 2(3): 155-239.

A numerical method for solving a class of fractional Sturm-Liouville eigenvalue problems

PENG Sha-li¹, LIU Hao^{1,2}

- (1. School of Mathematics, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 21106, China;
- 2. Shenzhen Research Institute, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Shenzhen 518063, China)

Abstract: In this paper, a class of fractional Sturm-Liouville eigenvalue problems with mixed boundary conditions is studied. Using the second order Caputo fractional derivative approximation formula, the problem is discretized to a generalized eigenvalue problem, and the solution of the correction equation is the key in the process of solving the generalized eigenvalue problem by the Jacobi-Davidson method. To accelerate the convergence rate of this method, the corrected equation is considered to be solved approximately, that is, solving Toeplitz systems. This paper constructs the Strang circulant preconditioner, proposes the preconditioned generalized minimal residuals (PGMRES) method for solving the correction equation and proves that most of the eigenvalues of the preconditioned system are clustered around 1. Numerical examples show that the proposed method is effective.

Keywords: Caputo fractional derivative; fractional Sturm-Liouville problem; Jacobi-Davidson method; PGMRES

MR Subject Classification: 65F08; 65F15