

中图分类: 024

UDC: 004.3

学校代码: 10055

密级: 公开

南開大學
博 士 学 位 论 文

非线性特征值问题的平移对称高阶幂法

On Shifted Symmetric Higher Order Power Method for
Nonlinear Eigenvalue Problems

论文作者 唐耀宗

指导教师 杨庆之 教授

申请学位 理学博士

培养单位 数学科学学院

学科专业 计算数学

研究方向 最优化方法

答辩委员会主席 黄正海

评 阅 人 黄正海, 刘新为, 凌晨

韩德仁, 杨俊峰

南开大学研究生院

二〇二〇 年 五 月

南开大学学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下进行研究工作所取得的研究成果。除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人创作的、已公开发表或者没有公开发表的作品的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本学位论文原创性声明的法律责任由本人承担。

学位论文作者签名： 唐耀东

2020 年 7 月 18 日

非公开学位论文标注说明

(本页表中填写内容须打印)

根据南开大学有关规定，非公开学位论文须经指导教师同意、作者本人申请和相关部门批准方能标注。未经批准的均为公开学位论文，公开学位论文本说明为空白。

论文题目			
申请密级	<input type="checkbox"/> 限制(≤2 年) <input type="checkbox"/> 秘密(≤10 年) <input type="checkbox"/> 机密(≤20 年)		
保密期限	20 年 月 日至 20 年 月 日		
审批表编号		批准日期	20 年 月 日

南开大学学位评定委员会办公室盖章(有效)

注：限制★2 年(可少于 2 年)；秘密★10 年(可少于 10 年)；机密★20 年(可少于 20 年)

南开大学学位论文使用授权书

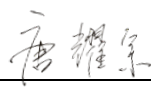
本人完全了解《南开大学关于研究生学位论文收藏和利用管理办法》关于南开大学(简称“学校”)研究生学位论文收藏和利用的管理规定,同意向南开大学提交本人的学位论文电子版及相应的纸质本。

本人了解南开大学拥有在《中华人民共和国著作权法》规定范围内的学位论文使用权,同意在以下几方面向学校授权。即:

1. 学校将学位论文编入《南开大学博硕士学位论文全文数据库》,并作为资料在学校图书馆等场所提供阅览,在校园网上提供论文目录检索、文摘及前 16 页的浏览等信息服务;
2. 学校可以采用影印、缩印或其他复制手段保存学位论文;学校根据规定向教育部指定的收藏和存档单位提交学位论文;
3. 非公开学位论文在解密后的使用权同公开论文。

本人承诺:本人的学位论文是在南开大学学习期间创作完成的作品,并已通过论文答辩;提交的学位论文电子版与纸质本论文的内容一致,如因不同造成不良后果由本人自负。

本人签署本授权书一份(此授权书为论文中一页),交图书馆留存。

学位论文作者暨授权人(亲笔)签字:  _____
2020 年 7 月 18 日

南开大学研究生学位论文作者信息

论 文 题 目	非线性特征值问题的平移对称高阶幂法				
姓 名	唐耀宗	学号	1120170021	答 辩 日 期	2020 年 7 月 13 日
论 文 类 别	博士 <input checked="" type="checkbox"/>	学历硕士 <input type="checkbox"/>	专业学位硕士 <input type="checkbox"/>	同等学力硕士 <input type="checkbox"/>	划 <input checked="" type="checkbox"/> 选 择
学院(单位)	数学科学学院		学科/专业(专业学位)名称		计算数学
联 系 电 话			电 子 邮 箱		
通信地址(邮编): 南开大学西区公寓, 300071, 天津					
非公开论文编号			备注		

注:本授权书适用我校授予的所有博士、硕士的学位论文。如已批准为非公开学位论文,须向图书馆提供批准通过的《南开大学研究生申请非公开学位论文审批表》复印件和“非公开学位论文标注说明”页原件。

摘要

非线性特征值问题由于其重要的理论价值以及实际价值而广受自然科学和工程技术领域的专家学者关注。本文主要研究一类源自玻色-爱因斯坦凝聚态的非线性特征值问题，内容包括算法设计、收敛性分析、扰动性分析以及数值算例等。

Kolda和 Mayo在 Kofidis和 Regalia所提出的对称高阶幂法的基础上，通过添加平移项，提出了平移对称高阶幂法。受到 Kolda和 Mayo的工作启发，我们将平移对称高阶幂法由张量的特征值求解推广到一类源自玻色-爱因斯坦凝聚态的非线性特征值问题，并通过不动点分析区分了使用平移对称高阶幂法可以求得特征对类型。

关于非线性特征值问题的平移对称高阶幂法的收敛性分析分成三个部分。首先，在非线性特征值问题的实特征向量个数有限的假设下，通过对平移项的相关分析，并利用凸函数相关性质，证明了采用平移对称高阶幂法求解非线性特征值问题将会得到收敛的结果。其次，通过非线性特征值问题相对应的约束优化问题转化为无约束优化问题，从而建立一个与平移对称高阶幂法产生的迭代序列相关联的新序列；通过 Kurdyka-Łojasiewicz不等式等工具证明了新序列的点列收敛性，进一步也就说明了平移对称高阶幂法的点列收敛性。最后，将多项式 Kurdyka-Łojasiewicz指数界的相关结果应用到非线性特征值问题相应优化问题的 Lagrange函数上，得到了平移对称高阶幂法的次线性收敛速度，从理论上解释了算法的效率。

关于扰动分析的情形，即考虑在非线性特征值问题的核心数据张量和矩阵发生扰动时，相应的非线性特征值会发生多大变化。具体地，即在张量和矩阵中，加入相应的正则扰动或是随机扰动；然后利用球面约束的条件，对扰动的非线性特征值问题对应的优化问题进行齐次化和张量的对称化；最后利用最大（或最小）特征值与对应特征向量的关系，推导出特征值的扰动量与张量、矩阵扰动之间的数量关系。

关于数值实验，计算了玻色-爱因斯坦凝聚态问题的基态解，即其最小特征值；而对于由其衍生出来的一般非线性特征值问题，则计算了相应的最大最小

特征值。此外，对于上面所述两种情形，从数值上刻画了其中发生张量或矩阵等数据扰动时，特征值会受到什么样的影响。总体而言，平移对称高阶幂法对于本文所考虑的非线性特征值问题来说，是一种稳定的数值方法。

关键词： 玻色-爱因斯坦凝聚态；非线性特征值；平移对称高阶幂法；收敛率；扰动分析.

Abstract

Nonlinear eigenvalue problems (NEPs) are widely concerned by the experts and scholars in the fields of natural science and engineering technology for its theoretical significance and application value. In this paper, we study a class of NEPs originated from Bose-Einstein condensate. The contents include algorithm design, convergence analysis, disturbance analysis and numerical examples.

Based on the work of Kofidis and Regalia, Kolda and Mayo put forward the shifted symmetric higher-order power method (SS-HOPM) by adding a shift term. Inspired by the work of Kolda and Mayo, we extend the SS-HOPM from the eigenvalue problems for tensors to the NEPs originated from Bose-Einstein condensate. Through the fixed point analysis, the types of eigenpairs that can be obtained by SS-HOPM are distinguished.

The convergence analysis of the SS-HOPM for NEPs we considered is divided into three parts. Firstly, under the assumption that the number of real eigenvectors of NEPs is limited, through analysis on the shift term, and by using the properties of convex function, we can prove the convergence of SS-HOPM for NEPs in this paper. Secondly, by transforming the constrained optimization problem corresponding to the NEP into unconstrained optimization problem, a new sequence associated with the iterative sequence of the corresponding SS-HOPM is established. Then, by means of Kurdyka-Łojasiewicz inequality and other tools, the convergence of the new sequence is proved, which further explains the convergence of the SS-HOPM. Finally, We apply the bound of the Kurdyka-Łojasiewicz exponent of polynomial to the Lagrange function of the optimization problem involved in this paper, then we obtain sublinear convergence rate of the SS-HOPM, which can explain the calculation efficiency of the algorithm theoretically.

We carry on the disturbance analysis on the eigenvalue of the NEPs when the core data is disturbed. Specifically, we add the regular or random disturbance to the tensor and matrix. After homogenizing and symmetrizing the disturbed NEPs with the spher-

ical constraint conditions, we derive the quantitative relationship between the perturbations of eigenvalue and tensor or matrix with the relationship between the maximum (or minimum) eigenvalue and its corresponding eigenvector.

We calculate the ground state solution of Bose-Einstein condensate problem and the maximum and minimum eigenvalues of the general NEPs in the numerical experiment. For the two cases above, we describe the influence on the eigenvalue when the disturbance of tensor or matrix occurs. Generally speaking, the SS-HOPM is a stable numerical method for the NEPs considered in this paper.

Key Words: Bose-Einstein condensation; nonlinear eigenvalue; shifted symmetric higher-order power method; convergence rate; perturbation analysis.

目录

摘要	I
Abstract	III
第一章 绪论	1
第一节 非线性特征值的研究意义及现状	1
第二节 本课题的研究现状	4
第三节 本文的贡献及结构	10
第二章 预备知识	13
第一节 张量和张量特征对	13
第二节 不动点理论	15
第三节 凸函数及相关性质	16
第四节 约束优化	16
第五节 矩阵特征值	17
第六节 Łojasiewicz梯度不等式	17
第七节 算法的收敛速度	17
第三章 平移对称高阶幂法	19
第一节 齐次优化问题的平移对称高阶幂法	19
第二节 非齐次目标函数的相关性质	20
第三节 非齐次优化问题的平移对称高阶幂法	24
第四节 平移对称高阶幂法的不动点分析	27
第五节 本章小结	30
第四章 收敛性分析	31
第一节 实特征向量个数有限假设下的收敛性分析	31
第二节 点列收敛性分析	34
第三节 收敛速度估计	42
第四节 本章小结	47
第五章 扰动分析	49

第一节 扰动情况分类·····	49
第二节 扰动分析 ·····	50
第三节 本章小结 ·····	54
第六章 数值算例·····	55
第一节 玻色-爱因斯坦凝聚态基态的求解 ·····	55
第二节 一般非线性特征值问题的计算 ·····	59
第三节 扰动情况的数值算例 ·····	61
第四节 本章小结 ·····	66
第七章 总结和展望 ·····	67
第一节 本文的总结 ·····	67
第二节 今后的展望 ·····	68
参考文献 ·····	69
致谢 ·····	83
个人简介 ·····	85

第一章 绪论

第一节 非线性特征值的研究意义及现状

1.1.1 非线性特征值的研究意义

美国数学家 Gilbert Strang 曾在其经典教材《线性代数》中提到“有振动的地方就有特征值和特征向量” [1]。而几乎所有的科学、工程领域都会涉及到不同层面（宏观或微观）的振动问题。特征值在不同的物理背景下具有其相应系统的“特征物理意义”，比如线性变换中特征向量的伸缩倍数[1-3]，动力学中的频率[4]，稳定分析中的极限荷载[5]，应力分析中的主应力[6]以及量子力学中的电离势能等[7]。

关于特征值的理论和算法研究目前已经成为科学和工程领域的一项重要课题。不过随着自然科学、工程技术的发展，在许多领域，传统的线性特征值问题已显现了其局限性。相关领域的专家学者将其推广到了非线性领域。事实上，在量子力学、电子结构计算、计算电磁学、声学、非线性光学、流体力学、分子化学、材料科学等科学领域 [8-15]，以及信号处理、电路模拟、控制理论、结构工程等工程技术领域 [13, 16-21]均出现了非线性特征值问题。

非线性特征值问题中的多项式特征值问题

$$(\lambda^m \mathbf{A}_0 + \lambda^{m-1} \mathbf{A}_1 + \cdots + \mathbf{A}_m) \mathbf{x} = 0,$$

其中 $\mathbf{A}_i \in \mathbb{C}^{n \times n} (1 \leq i \leq m)$ ，可以描述最优控制问题[16]以及结构设计问题（比如高层建筑、桥梁、飞行器等结构设计）[22-25]。多项式特征值问题中的特殊形式—二次特征值问题，可进行粘性阻尼结构中的动力分析[13]。

非线性特征值问题中的有理特征值问题

$$\left(\lambda \mathbf{A} + \mathbf{B} + \sum_{i=1}^k \frac{\rho_i \lambda}{k_i - m_i \lambda} \mathbf{C}_i \right) \mathbf{x} = 0,$$

其中 $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}_i$ 为对称矩阵， ρ_i 为常数，可用于描述量子点纳米结构的物理性质[18]以及流-固耦合结构振动问题（比如油气管道等输流管道结构和核燃料电池）[24, 25]。

时滞控制系统中的稳定性分析可用如下非线性特征值问题进行描述[19–21]:

$$\left(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}_0 - \sum_{k=1}^m \mathbf{A}_k e^{-\tau_k \lambda} \right) \mathbf{x} = 0,$$

其中 $\mathbf{A}_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$, τ_k 为正实数。

上面列举了几类特征值非线性的非线性特征值问题。其实还有很多特征值线性而特征向量非线性的非线性特征值问题, 比如电子结构计算中的 Kohn-Sham 密度泛函理论[26, 27]、Bose-Einstein 凝聚态问题中的 Gross-Pitaevskii 方程[15, 28, 29], 线性判别分析中的迹比优化问题[30, 31]等等。这类非线性特征值问题可以描述为:

$$\mathbf{H}(\mathbf{V})\mathbf{V} = \mathbf{V}\Lambda,$$

其中 $\mathbf{H}(\mathbf{V})$ 为 \mathbf{V} 的 Hermitian 矩阵函数, $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 和 $\Lambda \in \mathbb{C}^{k \times k}$ 即为所要寻找的特征向量和特征值矩阵, 此处要求 \mathbf{V} 列正交。

非线性特征值问题不存在类似于线性特征值问题的 (广义) Schur 分解, 故其在理论和计算上较之线性特征值具有更大的困难和挑战。2012 年 2 月 4 日, 来自国家自然科学基金委员会、重大研究计划指导专家组、北京大学、复旦大学、中科院软件所等单位的近 30 位专家学者出席了由中科院数学院承办的“非线性特征值计算的困难与挑战”研讨会。研讨会一致认为对非线性特征值问题开展研究是非常重要且迫切的。因此, 研究非线性特征值问题具有重要的科学和实用价值。

1.1.2 非线性特征值问题的研究现状

近些年来, 在科学、工程领域关于非线性特征值问题的研究主要涉及到特征值的存在唯一性、上下界估计、扰动分析等理论上的研究, 以及数值计算方面的研究。这些研究取得了一系列优秀的成果。

Gohberg 等人分别在 1979 年[22]、1980 年[32]和 1982 年[33]对多项式特征值问题的扰动分析、谱理论和代数理论进行了研究。Higham 等[34], Dedieu 等[35]和 Chu[36] 在 2003 年对多项式特征值问题的扰动分析进行了进一步研究。Bini 等[37]和 Melman[38]对多项式特征值问题中的定位问题进行了有效分析, 并给出很好的结果。2000 年 Tisseur[39], 2007 年 Higham 等[40], 2015 年 Lawrence 等[41]对多项式特征值问题的条件和误差方面进行了分析。2001 年 Tisseur 和 Meerbergen 在 SIAM Review 上对二次特征值问题的应用、数学性质以及各种数值求解方法进

行了综述, 其中重点讨论了相应二次特征值问题的谱性质以及问题中矩阵的结构问题[13]。2002年 Lancaster 在其著作中讨论了二次特征值问题的数学理论和应用于振动分析的情形[42]。Liu等人在2004 年对二次特征值问题的扰动分析进行了研究[43]。Qian 等人在2013年对二次特征值问题的灵敏度进行了分析[44]。2015年 Bindel 和 Hood对一般的特征值非线性的非线性特征值问题的特征值的定位进行了研究, 其结果推广了 Gershgorin 定理和 Bauer-Fike定理[45]。2009年 Eric Cancés等人对描述量子物理的玻色-爱因斯坦凝聚态、量子化学和材料科学中的电子结构的非线性特征值问题的先验误差进行了分析[46]。2013年 Bao和 Cai对来自于玻色-爱因斯坦凝聚态的非线性特征值问题的数学理论和数值方法进行了综述[8]。Cai等人在2018 年[31]和2019年[47]分别对特征向量非线性的一般的非线性特征值问题解的存在性、唯一性和扰动分析进行了研究。

对于多项式特征值问题求解, 最直观的做法即是对原问题进行线性化, 然后得到等价的广义特征值问题再求解 [13, 33, 42, 48–51]。此类方法仅适用于小规模问题, 因为它不仅增加了计算量级, 同时也丧失了结构特点, 从而导致时间复杂度和空间复杂度可能增大。基于 Rayleigh-Ritz原理的投影方法对于多项式特征值问题的求解更有效。其基本原理是: 通过将原多项式特征值问题投影到一个更低维度的子空间, 从而降低问题规模, 再通过线性化求解。投影梯度法不仅能充分利用原矩阵的结构性质, 其空间占用也较小。关于求解多项式特征值问题的投影梯度法的研究成果有: Jacobi-Davidson型方法和 Arnoldi型方法。Sleijpen等[52]和 Hochstenbach等[53]分别发展了 Jacobi-Davidson 方法, 并分析了其收敛性, 后者还进一步改进了 Rayleigh-Ritz方法。Hwang等[54]对 Jacobi-Davidson 方法进行预处理以提高计算效率。不过 Jacobi-Davidson型方法对于密集的特征值却难以计算, 而且一次只能计算一个特征对。对于特殊的多项式特征值问题—二次特征值问题, Bai 和 Su[55]提出了二阶 Arnoldi方法。Jia和 Sun[56]提出了变形的二阶 Arnoldi方法。Bao等[57]将二阶 Arnoldi方法推广到一般的多项式特征值问题, 并给出了广义 Arnoldi方法。Meerbergen[58]提出了求解二次特征值问题的二次 Arnoldi方法, 但其可能存在数值不稳定性。Lu等[59]提出了二水平正交 Arnoldi方法以解决二次 Arnoldi方法的数值不稳定性。Kressner和 Roman[60]将二次 Arnoldi方法和二水平正交 Arnoldi 方法从二次特征值问题推广到了一般的多项式特征值问题。魏伟和戴华[61] 将 Huang 等[62]提出的针对二次非线性特征值问题的半正交广义 Arnoldi方法及其变形推广一般

的到多项式特征值问题。

有理特征值问题的数值求解有两种选择。一是多项式化，然后线性化为广义特征值问题而求解，Effenberger等在[63]中，Su和Bai在[64]中采取了这样的策略；二是看成一般的非线性特征值问题，采用求解一般非线性特征值问题的方法直接求解，比如Voss等在[65]中采用投影方法对流-固耦合结构振动分析中的有理特征值问题进行了求解。

Kublanovskaya[66]，Dai和Bai[67]发展了基于矩阵分解的求解非线性特征值问题的Newton型二阶收敛算法。Anselone等[68]提出了基于非线性方程组的求解非线性特征值问题Newton型方法。Jarlebring，Michiels，Szyld和Xue[69–73]进一步发展了该Newton法，分别就其收敛性、收敛因子以及加速方法进行了研究。Ruhe在[74]中提出了求解非线性特征值问题的局部二阶收敛的逐次线性近似方法，Voss在[75]中证明了该结果的正确性。Asakura等[76, 77]和Beyn[78]研究了求解多项式特征值问题及一般非线性特征值问题的围道积分方法。

对于非线性特征值问题更多的理论研究以及数值求解方法的进展，可参阅[13, 79–82]以及其中的参考文献。

第二节 本课题的研究现状

本文针对在球面约束下的一类非线性特征值问题的求解进行研究，即

$$\begin{cases} \mathcal{A}\mathbf{x}^3 + \mathbf{B}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \\ \|\mathbf{x}\|_2 = 1, \end{cases} \quad (1.1)$$

其中 $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{n \times n \times n \times n}$ 是4阶对称张量， $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是对称矩阵， $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ 是向量。这类非线性特征值问题源自玻色-爱因斯坦凝聚态（简称BEC）[8, 83, 84]。

玻色-爱因斯坦凝聚态指的是，一定数量的稀薄玻色气体在能量很低或者温度很低时，凝聚为一个整体粒子的宏观量子态。目前，该问题在量子力学领域是一个非常重要和活跃的研究课题[29, 46, 85, 86]。此问题起始于1924年印度科学家玻色关于“光子在各个能量级上的分布”的研究[87]。爱因斯坦在1924年[88]和1925年[89]，推广了玻色的研究，预言全同粒子理想气体在一定条件下可实现凝聚，即玻色-爱因斯坦凝聚态。不过由于实验技术及条件限制，直到1995年，玻色-爱因斯坦凝聚态才由Cornell和Wieman等使用Rb原子在实验室实现[90]。由此开始，关于玻色-爱因斯坦凝聚态的理论研究以及实验研

究便成为物理学家们的研究热门。此后 Ketterle等使用 Na 原子 [91], Hunlet等使用 Li 原子[92] 在实验室也实现了玻色-爱因斯坦凝聚态。更多的玻色-爱因斯坦凝聚态实验研究可以参见文献[93–95]。在玻色-爱因斯坦凝聚态实验研究发展的同时, 其理论研究也取得了长足的进步。

玻色-爱因斯坦凝聚态其实是一个囚禁于外部势阱中的 N 个相互作用的玻色子组成的多粒子系统。一个自然的方法是采用如下所述的多体 Hamilton 系统来对其进行描述[96], 即

$$H_N = \sum_{j=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j + V(\mathbf{x}_j) \right) + \sum_{1 \leq j < k \leq N} V_{\text{int}}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k)$$

其中 $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^3 (j = 1, \dots, N)$ 表示粒子的位置, \hbar 是普朗克常数, N 表示系统中玻色子的数量, m 表示玻色子的质量, Δ_j 表示对应于 \mathbf{x}_j 的 Laplace算子, $V_{\text{int}}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k)$ 表示两个原子之间的相互作用, $V(\mathbf{x}_j)$ 表示外部势阱。外部势阱函数 $V(\mathbf{x})$ 通常存在无穷势阱、调和势阱以及光学晶格势阱等。比如调和势阱, 其函数形式为:

$$V(\mathbf{x}) = \frac{m}{2}(\gamma_1 x_1^2 + \dots + \gamma_d x_d^2),$$

其中 $\gamma_i \geq 0, i = 1, \dots, d$ 分别代表 $x_i, i = 1, \dots, d$ 方向的势阱频率。

该系统的波函数 $\Psi_N := \Psi_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t) \in L^2(\mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R})$ 满足含时 Schrödinger 方程

$$i\hbar \partial_t \Psi_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t) = H_N \Psi_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t)$$

其中 i 代表虚数单位。

原则上, 上述多体系统是可以求解的。但众所周知, 多体系统的计算过程繁琐而且计算量特别巨大。1947年 Bogoliubov[97]指出采用平均场理论可以有效克服上述困难。在平均场理论下, 两个原子之间的相互作用 $V_{\text{int}}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k)$ 可以近似替换为 $U_0 \delta(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k)$, 其中 $\delta(\cdot)$ 为 Dirac函数, $U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$, 此处 a_s 为 s -波散射长度 (正代表了原子间相互作用为排斥, 负代表了原子间相互作用为吸引), 其正负符号可以采用 Freshbach 共振技术来进行调节[98]。

因为在玻色-爱因斯坦凝聚态中所有的玻色子占据相同的量子态, 所以由 Hartree近似方法可以将多体波函数近似为[96]

$$\Psi_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t) = \prod_{j=1}^N \psi_H(\mathbf{x}_j, t)$$

其中 $\psi_H(\mathbf{x}, t)$ 为归一化后的单个玻色子的波函数

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_H(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = 1.$$

那么玻色子多体系统的能量可以表示为

$$E = N \int_{\mathbb{R}^3} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi_H(\mathbf{x}, t)|^2 + V(\mathbf{x}) |\psi_H(\mathbf{x}, t)|^2 + \frac{N-1}{2} g |\psi_H(\mathbf{x}, t)|^4 \right] d\mathbf{x}$$

将波函数进行伸缩变换

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{N} \psi_H(\mathbf{x}, t)$$

则可得系统的能量表达式如下[99, 100]

$$E(\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\mathbf{x}, t)|^2 + V(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \frac{1}{2} U_0 |\psi(\mathbf{x}, t)|^4 \right] d\mathbf{x}$$

上式即为著名的 Gross-Pitaevskii 能量泛函，是由 Gross 和 Pitaevskii 在 1961 年利用平均场理论分别独立推导得出的。此外，他们还得到了波函数所满足的方程[99, 100]

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) + NU_0 |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right) \psi(\mathbf{x}, t), \quad (1.2)$$

上述非线性 Schrödinger 方程即是著名的 Gross-Pitaevskii 方程，简称 GPE。

如果玻色-爱因斯坦凝聚态发生旋转，则波函数满足如下非线性 Schrödinger 方程[101]

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) + NU_0 |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 - \Omega L_z \right) \psi(\mathbf{x}, t),$$

其中 $L_z = xp_y - yp_x = -\hbar(x\partial_y - y\partial_x)$ 表示角动量的 z -分量， Ω 代表了旋转角度。

为方便起见，对波函数进行归一化变换，即

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) := \frac{\psi(\mathbf{x}, t)}{\sqrt{N}}$$

则

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = 1 \quad (1.3)$$

为简化 Gross-Pitaevskii 方程，在归一化条件 (1.3) 下缩放 (1.2)，即可得到以下无量纲 Gross-Pitaevskii 方程：

$$i \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \beta |\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|^2 \right) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \quad (1.4)$$

其中 β 是无量纲相互作用系数（正表示相互作用为排斥，负表示相互作用为吸引）， $V(\mathbf{x})$ 表示无量纲实值外部势阱函数。

在上述无量纲 Gross-Pitaevskii 方程中，时间和空间通常被认为是相互独立的。令 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{x})e^{-i\lambda t}$ ，则可以将时间变量 t 从方程中分离出来。于是玻色-爱因斯坦凝聚态问题中的 Gross-Pitaevskii 能量泛函变为

$$E(\mathbf{u}) = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x})|^2 + V(\mathbf{x}) |\mathbf{u}(\mathbf{x})|^2 + \frac{\beta}{2} |\mathbf{u}(\mathbf{x})|^4 \right] d\mathbf{x} \quad (1.5)$$

根据玻色-爱因斯坦凝聚态的含义，玻色子实现凝聚时其能量最低，可以由以下非凸最小化问题的全局最优解来描述：

$$\mathbf{u}_g = \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbf{S}} E(\mathbf{u}) \quad (1.6)$$

其中 \mathbf{S} 为球面约束，被定义为

$$\mathbf{S} = \{ \mathbf{u} | E(\mathbf{u}) < \infty, \int_{\mathbb{R}^d} |\mathbf{u}(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1 \}. \quad (1.7)$$

在物理文献中，上述能量最低的状态被称为玻色-爱因斯坦凝聚态基态。相应的处于其它能级的状态被称之为激发态。显然，激发态 $\mathbf{u}_k(\mathbf{x})$ 即为球面约束 \mathbf{S} 下的能量泛函的局部极小值。基态以及激发态可以根据能量大小进行排序，即

$$E(\mathbf{u}_g) < E(\mathbf{u}_1) < E(\mathbf{u}_2) < \dots$$

从文献[8]中的分析结果可知，非旋转玻色-爱因斯坦凝聚态的基态的波函数可以看作是一个实的非负函数，而旋转玻色-爱因斯坦凝聚态的基态的波函数通常是一个复函数。本文只考虑由没有旋转的静态玻色-爱因斯坦凝聚态问题衍生出来的非线性特征值问题，即只考虑波函数为实函数的情形。具体而言，即研究如何寻求合适的 $\lambda \in \mathbb{R}$ 和函数 $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ 使得如下所述的具有齐次 Dirichlet 边界条件的平稳 Gross-Pitaevskii 方程

$$\begin{cases} \lambda \mathbf{u}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} |\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x})|^2 + V(\mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \beta |\mathbf{u}(\mathbf{x})|^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \\ \|\mathbf{u}\|^2 := \int_{\mathbb{R}^d} |\mathbf{u}(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1 \end{cases} \quad (1.8)$$

成立。上述方程可以简化为

$$\begin{cases} -\Delta \mathbf{u} + V \mathbf{u} + \beta |\mathbf{u}|^2 \mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}, & \text{在 } \Gamma \text{ 内,} \\ \mathbf{u} = 0, & \text{在 } \partial \Gamma \text{ 上,} \\ \int_{\Gamma} |\mathbf{u}|^2 d\Gamma = 1, \end{cases} \quad (1.9)$$