2019 年 6 月 数值计算与计算机应用 第 40 卷第 2 期
Jun., 2019 Journal on Numerical Methods and Computer Applications Vol.40, No.2

解一类非线性特征值问题的数值算例*1)

杨庆之
(喀什大学数学与统计学院, 喀什 844008;
南开大学数学科学学院, 天津 300071)

黄鹏斐 刘亚君
(南开大学数学科学学院, 天津 300071)

摘 要

刻画玻色 - 爱因斯坦凝聚态 (BEC) 的 Gross-Pitaevskii 方程通过差分方法离散, 转化成一类非线性特征值问题 (BEC 问题). 在这篇文章中, 讨论了对 BEC 问题的求解方法, 并给出数值算例. 通过半定松弛的方法 (SDP 松弛方法) 和交替方向乘子法 (ADMM), 计算 BEC 问题的最小非线性特征值的一个界; 通过 Lasserre 半定松弛, 可以依次地计算 BEC 问题的所有实非线性特征值. 在数值算例中, 从求解问题的规模和求解速度两方面比较了 SDP 松弛方法和 ADMM, 同时用 matlab 自带的 fmincon 方法来求解, 初步比较了它们的数值计算结果.

关键词: BEC 问题; 半定松弛; 交替方向乘子法

MR (2010) 主题分类: 47J10, 90C22, 90C30

NUMERICAL EXAMPLES FOR SOLVING A CLASS OF NONLINEAR EIGENVALUE PROBLEMS

Yang Qingzhi
(*School of Mathematics and Statistics, Kashi University, Kashi 844008, China;*
School of Mathematical Sciences, Nankai University, Tianjin 300071, China)

Huang Pengfei Liu Yajun
(*School of Mathematical Sciences, Nankai University, Tianjin 300071, China*)

Abstract

The Gross-Pitaevskii equation, which depicts the Bose-Einstein condensate state (BEC), is discretized by a differential method and transformed into a class of nonlinear eigenvalue problems (BEC problem). This article discusses the solution to the BEC problem and give numerical examples. A bound of the minimum nonlinear eigenvalue of the BEC problem is calculated by the semidefinite programming relaxation method (SDP relaxation method) and the alternating direction multiplier method (ADMM); all real nonlinear eigenvalues of the BEC problem can be calculated sequentially by Lasserre semidefinite programming relaxation. In the numerical example, comparing the SDP relaxation method and ADMM from the scale of the problem and the speed of solving the problem. At the same time, using

* 2019 年 1 月 13 日收到.
1) 基金项目: 新疆维吾尔自治区自然科学基金 (2017D01A14, 2018D01A01) 资助.

the fmincon method that comes with matlab to solve the problem and compare their results preliminarily.

Keywords: BEC problem; semidefinite programming relaxation; alternating direction multiplier method

2010 Mathematics Subject Classification: 47J10, 90C22, 90C30

1. 问题描述 -BEC

玻色 - 爱因斯坦凝聚态 (BEC) 是指玻色子系统中大量粒子在低于某个临界值的温度下占据相同的量子基态, 并聚集成 "大粒子" 的现象. 假设这个基态可以统一由一个波函数 $\psi(\mathbf{x},t)$ 来表示, 它通常被定义为如下能量泛函在归一化约束下的最小解 [1]:

$$\begin{cases} \min \quad E(\psi(\cdot,t)) := \int_{R^d} [\frac{1}{2}|\nabla\psi(\mathbf{x},t)|^2 + V(\mathbf{x})|\psi(\mathbf{x},t)|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi(\mathbf{x},t)|^4] d\mathbf{x}, \\ \text{s.t.} \quad \int_{R^d} |\psi(\mathbf{x},t)|^2 d\mathbf{x} = 1, \end{cases} \tag{1.1}$$

其中 $\mathbf{x}$ 表示粒子在 d 维空间 $(d = 1,2,3)$ 中的位置, $V(\mathbf{x})$ 是外部势阱, β 是一个实值参数, V(x) 和 β 根据物理假设的不同有不同的选择. 由此得到 Gross-Pitaevskii 方程 [1]:

$$\begin{cases} i\partial_t\psi(\mathbf{x},t) = -\frac{1}{2}\Delta\psi(\mathbf{x},t) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x},t) + \beta|\psi(\mathbf{x},t)|^2\psi(\mathbf{x},t), \\ \int_{R^d} |\psi(\mathbf{x},t)|^2 d\mathbf{x} = 1, \end{cases} \tag{1.2}$$

为了得到 (1.2) 的稳定解, 令 $\psi(\mathbf{x},t) = \phi(\mathbf{x})e^{-i\mu t}$, 则得到非线性特征值问题:

$$\begin{cases} \mu\phi(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\Delta\phi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) + \beta|\phi(\mathbf{x})|^2\phi(\mathbf{x}), \\ \int_{R^d} |\phi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1, \end{cases} \tag{1.3}$$

设关于 $f(\mathbf{x})$ 的泛函 $I(f(\mathbf{x})) = \int_\Omega F(\mathbf{x}, f, f_{x_1}, \cdots, f_{x_n})d\mathbf{x}$, 它的稳定解满足 Euler-Lagrange 方程: $\frac{\partial F}{\partial f} - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i}(\frac{\partial F}{\partial f_{x_i}}) = 0$, 其中 $f_{x_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i}$. 显然, (1.3) 恰好是如下对应的能量泛函最小化问题的 Euler-Lagrange 方程:

$$\begin{cases} \min \quad E(\phi) := \int_{R^d} [\frac{1}{2}|\nabla\phi(\mathbf{x})|^2 + V(\mathbf{x})|\phi(\mathbf{x})|^2 + \frac{\beta}{2}|\phi(\mathbf{x})|^4] d\mathbf{x}, \\ \text{s.t.} \quad \int_{R^d} |\phi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1, \end{cases} \tag{1.4}$$

满足能量泛函最小化的基态解一定满足 (1.3), 而其他满足 (1.3) 但能量比最小能量大的解称为激发态.

在这篇文章中, 我们选择特定的 V(x) 和 β, 考虑下面的 BEC 问题 [2]:

$$\begin{cases} -\triangle u + Wu + \xi|u|^2u = \lambda u, & \text{在 } \Omega \text{ 中}, \\ u = 0, & \text{在 } \partial\Omega \text{ 上}, \\ \int_\Omega u^2 d\Omega = 1, \end{cases} \tag{1.5}$$

其中, 在一维, 二维和三维情况下, Ω 分别表示区域 $[0,1]$, $[0,1]^2$, $[0,1]^3$, $\xi=1$, $W=x^2$, $W=x_1^2+x_2^2$, $W=x_1^2+x_2^2+x_3^2$.

通过差分方法来离散边值问题 (1.5), 如选择均匀的插值步长 $h=\frac{1}{n}$, 在 $\Omega=[0,1]$ 的情况下, 得到一维的网格区域

$$\Omega_h=\{x_j=jh|j=1,2,\cdots,n-1\}\subset\Omega$$

和数值偏微分方程

$$\begin{cases} -\dfrac{u_{j+1}-2u_j+u_{j-1}}{h^2}+(jh)^2u_j+u_j^3=\lambda u_j, \quad j=1,2,\cdots,n-1, \\ u_0=0, u_n=0, \\ \sum\limits_{i=1}^{n-1}u_i^2h=1, \end{cases} \tag{1.6}$$

设对角张量 $\mathcal{A}$ 是四阶 (n-1) 维的单位张量,

$$B=n^2\cdot\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ \ddots & \ddots & \ddots & \\ & -1 & 2 & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}+\frac{1}{n^2}\cdot\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 4 & & \\ & & \ddots & \\ & & & (n-1)^2 \end{bmatrix},$$

则 (1.6) 可以写为如下非线性特征值问题:

$$\begin{cases} \mathcal{A}u^3+Bu=\lambda u, \\ \|u\|_2^2=n. \end{cases} \tag{1.7}$$

这里 $u=(u_1,\cdots,u_{n-1})^T$, $\mathcal{A}u^3=(u_1^3,\cdots,u_{n-1}^3)^T$. 对二维和三维的情况, 离散化后可得类似 (1.7) 的非线性特征值问题, 其中 $\mathcal{A}$ 是全 1 的对角张量, B 是非对角元非正的分块三对角矩阵, 并且对角占优, 所以是正定矩阵.

这篇文章讨论非线性特征值问题 (1.7) 的数值解法并给出数值算例. 第二节使用半定松弛和 ADMM 两种算法以给出最小非线性特征值的一个界, 其中半定松弛的方法理论上能得到最优化问题的全局最优解, 而 ADMM 方法可以更快地求解更大规模的非线性特征值问题. 第三节给出了应用 Lasserre 半定松弛计算所有实非线性特征值的算法. 第四节是数值例子, 首先比较了 ADMM 和 SDP 松弛方法对一维、二维和三维 BEC 问题的求解能力, 并且初步在一维情况下与 matlab 自带的 fmincon 方法的计算情况进行了比较; 然后对小规模情况计算了 BEC 问题的所有实非线性特征值.

2. 最小非线性特征值的界

2.1. SDP 松弛方法

容易看出, (1.7) 是下面最优化问题的 KKT 条件:

$$\begin{cases} \min & \dfrac{1}{2}\mathcal{A}u^4+u^TBu, \\ \text{s.t.} & \|u\|_2^2=n \end{cases} \tag{2.1}$$

可以证明 (详细证明见附录), (2.1) 和下面半定规划问题 (2.2) 是等价的:

$$\begin{cases} \min & \frac{1}{2}\langle X, \mathcal{A}X\rangle + \langle B, X\rangle, \\ \text{s.t.} & tr(X) = n \\ & X \succeq 0 \end{cases} \tag{2.2}$$

这里 $X \succeq 0$ 表示 X 半正定, $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 表示两个矩阵的内积, $\mathcal{A}X$ 表示一个矩阵, 其元素 $(\mathcal{A}X)_{ij} = \sum_{k,l=1}^{n-1} \mathcal{A}_{ijkl}X_{kl}$. 在 [3] 中, Hu Jiang 等直接对 (1.4) 进行离散化, 得到和 (2.1) 形式一样的带球面约束的齐次四次和二次多项式最小化问题, 并且讨论了用 SDP 松弛的方法求解这个问题, 但是他们并没有证明原问题和松弛问题的等价性.

因为 $\mathcal{A}$ 是单位张量, 所以 (2.2) 是一个凸优化问题, 可以方便地通过已有软件包, 比如 cvx 来求解. 记 (2.2) 的最优解为 $\overline{X}$, 由 [4] 的证明过程, 有 $\overline{u} = \sqrt{\text{diag}(\overline{X})}$ 是 (2.1) 的最优解. 又由于 $\mathcal{A}$ 的特殊对角结构, 我们可以将 (2.2) 化简为下式:

$$\begin{cases} \min & \frac{1}{2}\sum(\text{diag}(X)^2) + \langle B, X\rangle, \\ \text{s.t.} & tr(X) = n \\ & X \succeq 0 \end{cases} \tag{2.3}$$

而 (2.1) 的最优解 $\overline{u}$ 满足 KKT 条件 (1.7), 这样由 (2.2) 的解 X 我们就可以得到 (1.7) 的一个特征值 $\overline{\lambda} = \frac{(\mathcal{A}\overline{u}^4 + \overline{u}^T B\overline{u})}{n}$. 类似地, 我们通过求解问题:

$$\begin{cases} \min & \mathcal{A}u^4 + u^T Bu, \\ \text{s.t.} & \|u\|_2^2 = n \end{cases} \tag{2.4}$$

的半定松弛问题:

$$\begin{cases} \min & \langle X, \mathcal{A}X\rangle + \langle B, X\rangle, \\ \text{s.t.} & tr(X) = n \\ & X \succeq 0 \end{cases} \tag{2.5}$$

也可以得到全局最优解, 记为 $\overline{v}$, 显然有 $\overline{\lambda} \geq \frac{\overline{v}}{n} \doteq \underline{\lambda}$. 假设 λ^* 是满足 (1.7) 的最小特征值, 则 $\overline{\lambda} \geq \lambda^* \geq \underline{\lambda}$, 因此, 如 $\overline{\lambda} - \underline{\lambda}$ 足够小, 就可以得到 λ^* 的一个近似.

2.2. ADMM 方法

在一维的情况下用 SDP 松弛方法, 可以处理到剖分足够细即规模很大的差分方程. 但是在二维和三维的时候, 随着划分步长的缩小, 问题的规模分别以 2 次和 3 次方增长. 从表 3 的数值结果可以看出, 直接用 cvx 来求解 SDP 问题, 在二维情况下, 区间每一维划分为 50 份的时候, 计算就很慢了, 而此时显然还没有满足精度要求. 这一小节, 我们讨论如何用交替方向乘子法 (ADMM) 求解 (2.1) 和 (2.4).

这里我们讨论二维的情况, 类似 (2.1) 和 (2.4), 有:

$$\begin{cases} \min & \frac{1}{2}\mathcal{A}u^4 + u^T Bu, \\ \text{s.t.} & \|u\|_2^2 = n^2 \end{cases} \tag{2.6}$$

和

$$\begin{cases} \min & \mathcal{A}u^4 + u^T Bu, \\ \text{s.t.} & \|u\|_2^2 = n^2 \end{cases} \tag{2.7}$$

将 (2.6) 重新写成具可分结构的优化问题:

$$\begin{cases} \min & \frac{1}{2}\mathcal{A}x^4 + x^T Bx + I_c(y), \\ \text{s.t.} & x = y \end{cases} \tag{2.8}$$

其中, $C = \{y | \|y\|_2^2 = n^2\}$. 求解 (2.8) 的 ADMM 迭代格式为:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &:= \underset{x}{\operatorname{argmin}}\Big(\frac{1}{2}\mathcal{A}x^4 + x^T Bx - \lambda^T(x-y) + \frac{\beta}{2}\|x - y^k\|_2^2\Big) \\ y^{k+1} &:= \Pi_C\Big(x^{k+1} - \frac{\lambda^k}{\beta}\Big) \\ \lambda^{k+1} &:= \lambda^k - \beta(x^{k+1} - y^{k+1}) \end{aligned} \tag{2.9}$$

其中, x^{k+1} 步迭代通过 Newton 法来计算. (2.7) 也是类似求解.

由于 C 不是凸集, 所以 (2.8) 是非凸优化问题, 对可分非凸优化问题, ADMM 可能并不收敛, 即使收敛一般也不收敛到最优点. 对于这里特殊的 BEC 问题, 由 [5] 中推论 2 (见附录的说明), 可知迭代格式 (2.9) 产生的点列至少有一个聚点是 (2.8) 的增广拉格朗日函数的稳定点.

求特征值的界相对容易, 计算成本较低, 如果对一个特征值给出比较接近的上下界, 这样就可以对更精确求解特征值有很大帮助, 可以由此得到求特征值算法的初始点. 如果精度要求不高, 也可作为特征值的近似值.

3. 计算 BEC 问题的所有非线性特征值

我们已经知道通过半定松弛可以得到非线性最小特征值的界, 事实上, 通过 Lasserre 松弛方法, 理论上可以依次精确地计算出所有的实非线性特征值. 在这一节中我们讨论怎样计算出所有实非线性特征值和相应的实特征向量. 对于 BEC 问题, 它的非线性特征值为:

$$\begin{cases} \mathcal{A}x^3 + Bx = \lambda x, \\ \|x\|_2^2 = n, \end{cases} \tag{3.1}$$

等价于解多项式问题:

$$\begin{cases} \frac{1}{n}(\mathcal{A}x^4 + x^T Bx)x - \mathcal{A}x^3 - Bx = 0, \\ \|x\|_2^2 = n \end{cases} \tag{3.2}$$

由于 $\{x | \|x\|_2^2 = n\}$ 是紧集, 所以 (3.1) 至少有一个解. 并且这里我们假设 $(\mathcal{A}, B)$ 有有限个非线性特征值. 记为:

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_N.$$

为方便, 记:

$$\begin{aligned} f_0(x) &= \frac{1}{n}(\mathcal{A}x^4 + x^T Bx), \\ p(x) &= \Big(\|x\|_2^2 - n, \frac{1}{n}(\mathcal{A}x^4 + x^T Bx)x - \mathcal{A}x^3 - Bx\Big). \end{aligned} \tag{3.3}$$

3.1. 求解最大的非线性特征值

由 (3.1), 最大的特征值 λ_1 可通过求解下述最大值问题得到:

$$\begin{cases} \lambda_1 = \max \quad f_0(x), \\ \text{s.t.} \quad p(x) = 0 \end{cases} \tag{3.4}$$

对 (3.4) 应用 Lasserre 半定松弛 (Lasserre's hierarchy of semidefinite relaxations) [6,7],

$$\begin{cases} v_{1,k} := \max \langle f_0, y \rangle, \\ \text{s.t.} \quad L_p^k(y) = 0, \\ \quad M_k(y) \succeq 0, y \in R^{N_{2k}^n} \end{cases} \tag{3.5}$$

(3.5) 的对偶问题为

$$\begin{cases} \tilde{v}_{1,k} := \min \quad \gamma \\ \text{s.t.} \quad \gamma - f_0 \in I_{2k}(p) + \sum[x]_{2N} \end{cases} \tag{3.6}$$

其中, $k = m, m+1, \cdots$ 为松弛阶, 比如可以从 $m = \dfrac{\deg(f_0)}{2}$ 开始, $L_p^k(y), M_k(y), R^{N_{2k}^n}, I_{2k}(p)$, $\sum[x]_{2N}$ 的定义和 [6] 中的相同, 为了完整性, 我们在附录中给出详细定义. 随着松弛阶增加, $\{v_{1,k}\}, \{\tilde{v}_{1,k}\}$ 单调递减, 当松弛阶足够大时, 和 λ_1 相等.

定理 1. [7, 定理3.1] 最大非线性特征值 λ_1 有下列性质:

1. 如果 k 充分大, 都有 $v_{1,k} = \tilde{v}_{1,k} = \lambda_1$
2. 如果 λ_1 在 $\|x\|_2 = 1$ 上有有限个特征向量, 当 k 充分大, 对 (3.5) 的每一个最优解 y^*, 存在整数 $t \le k$, 使得

$$\operatorname{rank} M_{t-m}(y^*) = \operatorname{rank} M_t(y^*). \tag{3.7}$$

3.2. 第二大和其他实非线性特征值的求解

计算出最大的非线性特征值问题后, 就可以类似 [6] 中的做法, 依次计算出第二个直到最小实特征值. 假设已经计算出 λ_i, 如果 λ_{i+1} 存在, 就等价于解最优化问题:

$$\begin{cases} \lambda_{i+1} = \max \quad f_0(x), \\ \text{s.t.} \quad p(x) = 0, f_0 \le (\lambda_i - \delta) \end{cases} \tag{3.8}$$

其中, δ 满足

$$0 < \delta < \lambda_i - \lambda_{i+1}. \tag{3.9}$$

和解 λ_1 一样, 对 (3.8) 应用 Lasserre 半定松弛来求解. 但是在实际应用中, 一般不知道 λ_{i+1} 是否存在, 即使存在, 也不知道它的值, 所以为了得到满足 (3.9) 的 δ, 我们考虑下述最优化问题:

$$\begin{cases} \tau_i = \min \quad f_0(x), \\ \text{s.t.} \quad p(x) = 0, f_0 \ge (\lambda_i - \delta) \end{cases} \tag{3.10}$$

如果 $\tau_i = \lambda_i$, 且 λ_{i+1} 存在, 则有 $\lambda_{i+1} < \lambda_i - \delta$. 若此时, 求解 (3.8) 的 Lasserre 松弛问题, 存在某个松弛阶, 使得松弛问题无解, 说明 $\lambda_i = \lambda_{\min}$.

由此, 得到一个依次解所有实非线性特征值的算法:

算法 1 计算所有实非线性特征值的方法

输入: 给定对称四阶张量 $\mathcal{A}$ 和对称矩阵 B. 设定小的常数 $\delta_0 > 0$.

1: 解 (3.4) 的 Lasserre 半定松弛问题, 得到最大的非线性特征值 λ_1. $i := 1$.

2: $\delta := \delta_0$, 通过解 (3.10) 的半定松弛问题得到 τ_i. 如果 $\tau_i = \lambda_i$, 则执行步骤 3; 如果 $\tau_i < \lambda_i$, 则令 $\delta := \min(\delta/5, \lambda_i - \tau_i)$, 再次计算 τ_i, 重复这一过程, 直到 (3.9) 成立.

3: 解 (3.8) 的半定松弛问题, 如果存在松弛阶, 使得半定松弛问题无解, 停止. λ_i 就是最小的非线性特征值. 否则, 得到 λ_{i+1}.

4: $i := i + 1$, 执行步骤 2.

4. 数值实验

4.1. 求解一个 BEC 特征值

在这一节中, 我们比较了用几种不同方法计算 BEC 特征值时的数值表现. 我们的计算是在 Lenovo 笔记本, Intel(R) Core(TM), CPU 为 2.80GHz, 内存为 12GB 的环境下利用 matlab 2016b 和 cvx 2.1 进行的.

设 $\overline{\lambda}, \underline{\lambda}$ 分别表示特征值 λ 的上下界; n 表示将区间在每一维度上分成 n 份; cpu($\overline{\lambda}$) 和 cpu($\underline{\lambda}$) 分别表示计算 $\overline{\lambda}$ 和 $\underline{\lambda}$ 的时间. 结果列在表 1- 表 6 中, 可以看出, 对二维情况 ADMM 可以算到 n=200 以上, 而用 cvx 计算 SDP 在 n=50 的时候就失效了. 观察数值实验, 也可以看到 2 维情况从 n=40 开始, 3 维情况从 n=11 开始, ADMM 和 SDP 松弛两种方法计算的结果不一样. 在 3 维情况下, n=11 时, 在结果和约束条件误差为 10^{-8} 时, ADMM 算出的目标函数值比 CVX 算出来的要小, 可能是此时 cvx 软件包求解能力已不足以计算出全局最优解.

观察数值实验, 还有一些问题没有解决, 在数值实验中解 ADMM 子问题时, 采用 Newton 法, 其中下降方向是通过 Gauss-Seidel 迭代解线性方程组得到的, 在 n 增大时迭代次数显著增加 (比如对 2 维情况, n=300 时, 第一次迭代 149 次), 并且和 [8] 中用有限元方法求解的 BEC 问题的规模相差很大, 利用 $\mathcal{A}$ 和 B 的稀疏性和结构特点可能可以进一步改进计算规模.

表 1: SDP 松弛方法在 $\Omega = [0, 1]$ 上的结果

n	$\overline{\lambda}$	$\underline{\lambda}$	error	cpu($\overline{\lambda}$)	cpu($\underline{\lambda}$)
100	11.6421	11.6391	0.0030	0.30	0.33
200	11.6427	11.6398	0.0029	0.64	0.55
300	11.6428	11.6399	0.0029	1.02	0.92
400	11.6429	11.6399	0.0030	1.50	1.64
500	11.6429	11.6399	0.0030	2.77	2.73
600	11.6429	11.6399	0.0030	3.75	3.80
700	11.6429	11.64	0.0029	4.50	4.64

对于 (2.1) 这样的带非线性等式约束的非线性优化问题, 在 matlab 中可以通过自带的 fmincon 方法来求解, 这里选择'interior-point' 算法, 所以只在 n 很小的时候可以正确退出程

表 2: ADMM 在 $\Omega=[0,1]$ 上的结果

n	$\overline{\lambda}$	$\underline{\lambda}$	error	cpu($\overline{\lambda}$)	cpu($\underline{\lambda}$)
100	11.6421	11.6392	0.0029	0.04	0.07
200	11.6427	11.6398	0.0029	0.08	0.12
300	11.6428	11.6399	0.0029	0.13	0.24
400	11.6429	11.6399	0.0030	0.39	0.39
500	11.6429	11.6399	0.0030	0.53	0.54
600	11.6429	11.6399	0.0030	0.76	0.74
700	11.6429	11.6400	0.0029	1.08	0.94

表 3: SDP 松弛方法在 $\Omega=[0,1]^2$ 上的结果

n	$\overline{\lambda}$	$\underline{\lambda}$	error	cpu($\overline{\lambda}$)	cpu($\underline{\lambda}$)
10	22.3486	22.3352	0.0134	0.49	0.97
20	22.4724	22.4597	0.0127	1.44	1.21
30	22.4954	22.4828	0.0125	7.00	7.17
40	22.5196	22.5031	0.0164	20.38	17.52
50	22.5233	22.5068	0.0165	86.54	92.41

表 4: ADMM 在 $\Omega=[0,1]^2$ 上的结果

n	$\overline{\lambda}$	$\underline{\lambda}$	error	cpu($\overline{\lambda}$)	cpu($\underline{\lambda}$)
10	22.3486	22.3352	0.0134	0.07	0.07
20	22.4724	22.4597	0.0127	0.16	0.14
30	22.4953	22.4828	0.0125	0.22	0.19
40	22.5034	22.4909	0.0125	0.37	0.33
50	22.5071	22.4946	0.0125	0.63	0.56
100	22.5121	22.4996	0.0125	8.63	7.99
200	22.5133	22.5008	0.0125	112.93	124.73
300	22.5135	22.5011	0.0124	706.70	635.62

序得到局部极小解, 否则会在没有得到极小解时就退出, 此时选取每一次程序退出时的解作为下一次计算的初始点. 即使这样处理, 可以从表 7 看到, 在一维情况下, 当 n=150 时 matlab 自带的方法也没有得到一个局部极小解. 所以这里只初步地比较了它和 SDP 松弛方法以及 ADMM 在一维情况下对 (2.1) 的计算情况, 见表 7, 其中 $\overline{\lambda}$ 和 cpu($\overline{\lambda}$) 分别表示特征值的上界和计算上界所用的时间.

表 5: SDP 松弛方法在 $\Omega=[0,1]^3$ 上的结果

n	$\overline{\lambda}$	$\underline{\lambda}$	error	cpu($\overline{\lambda}$)	cpu($\underline{\lambda}$)
8	33.3028	33.2618	0.0410	1.11	1.23
10	33.445	33.4053	0.0397	5.38	5.65
11	33.5435	33.4880	0.0555	11.35	12.37
12	33.5763	33.5214	0.0549	33.69	34.71
13	33.6019	33.5474	0.0545	75.02	76.21
14	33.6223	33.5681	0.0542	131.93	128.61

表 6: ADMM 在 $\Omega=[0,1]^3$ 上的结果

n	$\overline{\lambda}$	$\underline{\lambda}$	error	cpu($\overline{\lambda}$)	cpu($\underline{\lambda}$)
8	33.3028	33.2618	0.041	0.24	0.23
10	33.4450	33.4053	0.0397	0.33	0.32
11	33.4889	33.4497	0.0392	0.37	0.34
12	33.5223	33.4834	0.0389	0.38	0.36
13	33.5483	33.5096	0.0387	0.46	0.41
14	33.5689	33.5304	0.0385	0.57	0.46
20	33.6348	33.5969	0.0379	1.23	1.2
40	33.6823	33.6448	0.0375	17.86	17.38
100	33.6956			3367.11	

表 7: 在 $\Omega=[0,1]$ 上计算最小非线性特征值上界三种方法比较

n	matlab		sdp 松弛		admm	
	$\overline{\lambda}$	cpu($\overline{\lambda}$)	$\overline{\lambda}$	cpu($\overline{\lambda}$)	$\overline{\lambda}$	cpu($\overline{\lambda}$)
10	11.5612	0.29s	11.5612	0.16s	11.5612	0.02s
50	11.6396	6.44s	11.6396	0.23s	11.6396	0.01s
100	11.6421	10.26s	11.6421	0.28s	11.6421	0.03s
150	11.6531	9.92s	11.6426	0.30s	11.6425	0.04s

4.2. 解所有的非线性特征值

这里我们利用 GloptiPoly 3 [9] 来计算 Lasserre 半定松弛问题, 其中半定规划子问题的求解器选择为 SeDuMi 1.3 [10], 由于 SeDuMi 正是基于原始对偶内点法 (primal-dual interior point methods) 来解半定规划问题的, 所以当非线性特征值对应有限个特征向量的时候, 如果 (3.7) 满足, 则可以求出它对应的所有特征向量.

$n = 4$, 用时 2.7929 秒

$\lambda_1 = 56.4268 \quad x_1 = \pm(-0.9772, 1.4297, -1.0005)$

$\lambda_2 = 34.3120 \quad x_2 = \pm(-1.4155, 0.0217, 1.4127)$

$\lambda_3 = 11.1386 \quad x_3 = \pm(1.0201, 1.4003, 0.9992)$

$n = 5$, 用时 4.7980 秒

$\lambda_1 = 92.2470 \quad x_1 = \pm(0.8096, -1.3457, 1.3583, -0.8299)$

$\lambda_2 = 67.2840 \quad x_2 = \pm(-1.3503, 0.8329, 0.8029, -1.3558)$

$\lambda_3 = 36.3531 \quad x_3 = \pm(-1.3390, -0.8291, 0.8583, 1.3353)$

$\lambda_4 = 11.3183 \quad x_4 = \pm(0.8515, 1.3435, 1.3329, 0.8327)$

$n = 6$, 用时 28.4443 秒

$\lambda_1 = 136.1488 \quad x_1 = \pm(-0.6876, 1, 2158, -1, 4251, 1.2333, -0.7052)$

$\lambda_2 = 109.8193 \quad x_2 = \pm(-1.2225, 1.2326, -0.0166, -1.2153, 1.2284)$

$\lambda_3 = 74.3238 \quad x_3 = \pm(1.4149, -0.0116, -1.4142, 0.0145, 1.4134)$

$\lambda_4 = 37.8196 \quad x_4 = \pm(1.2268, 1.2170, -0.0175, -1.2337, -1.2213)$

$\lambda_5 = 11.4169 \quad x_5 = \pm(0.7256, 1.2323, 1.4039, 1.2170, 0.7091)$

这里只列出了 $n = 4, 5, 6$ 时的情况, 在 $n = 7$ 的时候求解所有的实非线性特征值需要 212.8084s, $n = 8$ 时 moments 变量总数为 6434, 运行半个小时后仍未计算结束. 虽然理论上能通过 Lassere 半定松弛的办法得到所有的实非线性特征值, 但是随着划分越来越密, 即 n 越来越大, 半定规划松弛的问题规模越来越大, 求解问题花费的时间越来越长. 在一维情况下对小规模问题求解所有的实非线性特征值就需要过长的时间, 导致问题实际上变得不可解, 这也是通过半定松弛来求解特征值问题的方法的缺点.

5. 总　　结

在这篇文章中, 我们主要比较了用三种不同方法求解 BEC 的非线性特征值的数值表现. 先说明通过求解两个相关的最优化问题, 可以得到最小特征值的界, 然后分别用半定松弛和 ADMM 以及 matlab 自带的 fmincon 函数求解这两个优化问题. 着重从数值表现上说明了 ADMM 和半定松弛方法各自的优缺点. 这些数值结果对用户采用哪种方法求解这一类非线性特征值问题有一定参考价值.

半定松弛方法可以保证求得了最优化问题的全局最小值, 且证明了这个最小值就是原问题的最小值, 但是问题规模和求解速率受到限制, 在后续研究中我们希望利用问题的稀疏性和结构特点, 以改进计算规模; 与之相比, ADMM 方法可以更快地求解更大规模的问题, 但是没有理论保证得到极小解. 不过对于这里特殊的 BEC 问题, 已经知道 ADMM 可以得到至少一个聚点, 且这个聚点是对应的增广拉格朗日函数的稳定点. 又数值实验表明 ADMM 和半定松弛方法解得的结果相同, 猜测 ADMM 方法对这个问题可能有更好的收敛性, 甚至可能收敛到全局最优解, 希望能在后续研究中证明.

同时注意到本文中选择了特定的 $V(\mathbf{x})$ 和 β 以及求解区域. 针对不同的求解区域, 离散化后可能会得到不同的张量 $\mathcal{A}$ 和矩阵 B. 如果求解区域不对称会导致矩阵不对称的情况, 可能需要另外的处理方法. 但就我们了解的实际问题模型, 区域都是对称的. 此外如果想保证 SDP 松弛是紧的, 问题离散后需要张量和矩阵仍然是非对角元非正的.

另一方面, 将 BEC 问题转化成多项式优化问题, 并应用 Lasserre 半定松弛的办法来求解, 可以计算出所有的实特征值和对应的实特征向量 (假设特征向量有限), 但是实际应用时只能对小规模问题, 即 n 很小的时候求解. Kolda [11] 提出了带平移项的对称高阶幂法来求解对称张量的特征值, 如果选择了合适的平移项, 使得目标函数为凸函数 (凹函数), 理论上可以求出所有的局部极大值 (局部极小值), 对应的 KKT 点都可以得到一个特征对. 但是如何选取合适的平移项以提高收敛速度也是一个问题.

A. 附录 A

在这里重述 [6] 中给出的 (3.5) 和 (3.6) 中 $L_p^k(y), M_k(y), R^{N_{2k}^n}, I_{2k}(p), \sum[x]_{2N}$ 的定义:

定义 1. [6]

- 记 $R[x] := R[x_1, \cdots, x_n]$ 为关于 $x := (x_1, \cdots, x_n)$ 的实多项式环. $R[x]_d$ 表示 $R[x]$ 中所有次数不超过 d 的多项式组成的空间. 若 $R[x]$ 中的子集 J 满足 $J \cdot R[x] \subseteq J$, $J + J \subseteq J$, 则称 J 是 $R[x]$ 的一个理想. $p := (p_1, \cdots, p_r)$ 是 $R[x]$ 中的多项式组, 则称包含所有 p_i 的最小理想为 p 生成的理想, 即集合 $p_1 \cdot R[x] + \cdots + p_r \cdot R[x]$, 记为 $I(p)$. 称下述集合为 $I(p)$ 的第 k 个截断:

$$I_k(p) := p_1 \cdot R[x]_{k-\deg(p_1)} + \cdots + p_r \cdot R[x]_{k-\deg(p_r)},$$

- 多项式 $\sigma \in R[x]$ 称为一个平方和 (sum of squares, SOS), 如果存在 $p_1, \cdots, p_k \in R[x]$, 使得 $\sigma = p_1^2 + \cdots + p_k^2$. 记 $\Sigma[x]$ 为所有 SOS 多项式的集合, 并且

$$\Sigma[x]_m := \Sigma[x] \bigcap R[x]_m,$$

- 令 N 为非负整数集. 对 $x := (x_1, \cdots, x_n)$ 和 $\alpha := (\alpha_1, \cdots, \alpha_n)$, 记 $x^\alpha := x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$, $|\alpha| := \alpha_1 + \cdots + \alpha_n$. 记

$$N_d^n := \{\alpha \in N^n : |\alpha \leq d|\}, \quad d \in N,$$

  $R[x]_d$ 的对偶空间是所有次数为 d 的截断多重序列 (truncated multi-sequences(tms)), 记为 $R^{N_d^n}$. $R^{N_d^n}$ 中的向量 y 以 $\alpha \in N_d^n$ 为指标, 即,

$$y = (y_\alpha)_{\alpha \in N_d^n},$$

  每个 $y \in R^{N_d^n}$ 定义了 $R[x]_d$ 上的一个线性泛函 $\mathcal{L}_y$:

$$\mathcal{L}_y(x^\alpha) \quad \forall \alpha \in N_d^n,$$

- 令 $q \in R[x]_{2k}$, 对每个 $y \in R^{N_{2k}^n}$, $\mathcal{L}_y(qp^2)$ 是关于 $\mathrm{vec}(p)$ 的一个二次型, 其中 $\mathrm{vec}(p)$ 是多项式 p 的系数向量, p 满足 $\deg(qp^2) \leq 2k$. $L_q^{(k)}(y)$ 是使下式成立的对称矩阵:

$$\mathcal{L}_y(qp^2) = \mathrm{vec}(p)^T (L_q^{(k)}(y)) \mathrm{vec}(p),$$

  当 $q = 1$ 时, $L_1^{(k)}(y)$ 称为由 y 生成的第 k 个矩量矩阵 (moment matrix), 记为 $M_k(y)$.

定理 2.[4] 假设 $\mathcal{A}$ 非对角元非正, B 的非对角元也非正, 则最优化问题 (2.1) 和 (2.2) 是等价的. 更进一步, 若 X 是 (2.2) 的一个可行解, 则 $x=\sqrt{\mathrm{diag}(X)}$ 是 (2.1) 的一个可行解, 且使得 $\frac{1}{2}\mathcal{A}x^4+x^TBx\le\frac{1}{2}\langle X,\mathcal{A}X\rangle+\langle B,X\rangle$.

证明. 首先, (2.1) 的一个可行解是 x, 则 xx^T 是 (2.2) 的一个可行解; 另一方面, 如果 X 是 (2.2) 的可行解, 令 $x_i=\sqrt{X_{ii}}, i=1,2,\cdots,n$. 由 $\mathcal{A}$ 的非对角元非正有,

$$\begin{aligned}\mathcal{A}x^4&=\sum_{i,j=1}^{n}\sum_{k,l=1}^{n}\mathcal{A}_{ijkl}x_ix_jx_kx_l\\&=\sum_{i,j=1}^{n}\sum_{k,l=1}^{n}\mathcal{A}_{ijkl}\sqrt{X_{ii}X_{jj}}\sqrt{X_{kk}X_{ll}}\\&\le\sum_{i,j=1}^{n}\sum_{k,l=1}^{n}\mathcal{A}_{ijkl}X_{ij}X_{kl}\\&=\langle X,\mathcal{A}X\rangle,\end{aligned}\tag{A.1}$$

又 B 的非对角元非正, 所以

$$\begin{aligned}x^TBx&=\sum_{k,l=1}^{n}B_{kl}x_kx_l\\&=\sum_{k,l=1}^{n}B_{kl}\sqrt{X_{kk}}\sqrt{X_{ll}}\\&\le\sum_{k,l=1}^{n}B_{kl}X_{kl}\\&=\langle B,X\rangle,\end{aligned}\tag{A.2}$$

所以两个优化问题等价, 最优值相等.

特别地, 对本文中的非线性特征值问题, $\mathcal{A}$ 是对角张量, B 的非对角元非正, 显然满足假设条件.

定理 3.[5, 推论2]

$$\begin{aligned}\min\quad&f(x),\\\text{s.t.}\quad&x\in S,\end{aligned}\tag{A.3}$$

$$\mathcal{L}_\beta=f(x)+I_S(y)-\lambda^T(x-y)+\frac{\beta}{2}\|x-y\|_2^2,$$

其中, S 为紧集, 若 $f(x)$ 是 Lipschitz 可微的, 则对充分大的 β, 按如下迭代:

$$\begin{aligned}x^{k+1}&:=\operatorname*{argmin}_x\Big(f(x)-\lambda^T(x-y)+\frac{\beta}{2}\|x-y^k\|_2^2\Big)\\y^{k+1}&:=Proj_S\Big(x^{k+1}-\frac{\lambda^k}{\beta}\Big)\\\lambda^{k+1}&:=\lambda^k-\beta(x^{k+1}-y^{k+1})\end{aligned}\tag{A.4}$$

产生的序列 (x^k,y^k,λ^k) 至少有一个聚点, 且每个聚点是 $\mathcal{L}_\beta$ 的一个稳定点.

本文中, S 是球面, $f(x)=\frac{1}{2}\mathcal{A}x^4+x^TBx$ 是多项式函数, 显然满足定理假设.

致谢. 感谢谢和虎研究员对作者在本文写作过程中给予的启发和帮助.

参 考 文 献

[1] Bao W, Cai Y. Mathematical theory and numerical methods for bose-einstein condensation[J]. Kinetic and Related Models (KRM), 2013, 6(1): 1–135.

[2] 谢和虎. 非线性特征值问题的多重网格算法 [J]. 中国科学: 数学, 2015, 45(8): 1193–1204.

[3] Hu J , Jiang B , Liu X , et al. A note on semidefinite programming relaxations for polynomial optimization over a single sphere[J]. Science China Mathematics, 2016, 59(8): 1543–1562.

[4] Yang Y, Yang Q. On solving biquadratic optimization via semidefinite relaxation[J]. Computational Optimization and Applications, 2012, 53(3): 845–867.

[5] Wang Y, Yin W, Zeng J. Global convergence of admm in nonconvex nonsmooth optimization[J]. Journal of Scientific Computing, 2019, 78(1): 29–63.

[6] Cui C, Dai Y, Nie J. All real eigenvalues of symmetric tensors[J]. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 2014, 35(4): 1582–1601.

[7] Nie J. The hierarchy of local minimums in polynomial optimization[J]. Mathematical Programming, 2015, 151(2): 555–583.

[8] Jia S , Xie H , Xie M , et al. A full multigrid method for nonlinear eigenvalue problems[J]. Science China, 2016, 59(10): 1–12.

[9] Henrion D, Lasserre J B, Lofberg J. Gloptipoly 3: moments, optimization and semidefinite programming[J]. Optimization Methods and Software, 2009, 24(4-5): 761–779.

[10] Sturm J F. Using sedumi 1.02, a matlab toolbox for optimization over symmetric cones[J]. Optimization Methods and Software, 1999, 11(1-4): 625–653.

[11] Kolda T G , Mayo J R , et al. An adaptive shifted power method for computing generalized tensor eigenpairs[J]. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 2014, 35(4): 1095–1124.