

中图分类号:

UDC:

学校代码: 10055

密级: 公开

南开大学
博士学位论文

一类非凸优化问题的理论和算法研究

The study of theories and algorithms for a class of nonconvex
optimization problems

论文作者 黄鹏斐

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 教授

评阅人 韩德仁、黄正海、

凌晨、刘新为、文再文 教授

南开大学研究生院

二〇二二年五月

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: 黄鹏斐

2022年5月25日

南开大学研究生学位论文作者信息

论 文 题 目	一类非凸优化问题的理论和算法研究				
姓 名	黄鹏斐	学号	1120190025	答 辩 日 期	2022 年 5 月 28 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	13672017817		电 子 邮 箱	huangpf@mail.nankai.edu.cn	
通信地址(邮编): 天津市南开区卫津路 94 号南开大学数学科学学院(300071)					
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。由作者填写一份并签字后交校图书馆,如已批准为非公开学位论文,须附批准通过的《南开大学研究生申请非公开学位论文审批表》和“非公开学位论文标注说明”页。

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 responsibility 由本人承担。

学位论文作者签名：黄鹏斐 2022 年 5 月 25 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)

中文摘要

本文主要研究了一类具有特殊结构的非凸优化问题。

我们首先考虑一个特殊的带球面约束的四次-二次非凸最小化问题，它的一个重要的应用是求解离散的非旋转的玻色-爱因斯坦凝聚态（BECs）的能量泛函最小化问题。我们通过探索它对应的关于特征向量非线性的非线性特征值问题（NEPv）来进行研究。我们展示了 NEPv 有唯一的非负特征向量，它实际是正的，对应着 NEPv 最小的非线性特征值，并且恰好是非凸优化问题的全局最优解。

第二，由这些性质我们得到，任何能收敛到一个非负的稳定点的算法，都能找到这个特殊的优化问题的全局最优解，比如正则化牛顿法。特别地，我们得到了不精确的交替方向乘子法关于此问题收敛到全局最优解的收敛性。

第三，由 NEPv 的正特征向量和全局最优解的等价性，我们通过两种基于牛顿法的算法来计算 NEPv 的正特征向量。第一种方法来自于 Ching-Sung Liu 提出的解饱和非线性薛定谔方程的 Newton-Noda 迭代法，这一方法可以自然地推广到我们考虑的 NEPv 上。第二种方法结合了求根方法的思想 and 牛顿法，在实际应用时，比如求解离散的 BECs 问题中，这一方法中的子问题只涉及到易于求解的分块三对角的线性系统。我们给出了它的收敛性和完整的计算复杂度分析。数值实验验证了我们的理论。

最后，我们给出一些充分条件，使得关于全局最优解的性质，算法的有效性的结果有可能推广到更一般的非凸优化问题以及对应的具有局部非线性的非线性特征值问题上。特别地，以求解一类离散的非线性饱和能量最小化问题为例应用了我们的理论。

关键词： 球面约束，非线性特征值，全局最优解，玻色-爱因斯坦凝聚态，交替方向乘子法，牛顿法

Abstract

This thesis studies a class of nonconvex optimization problems with special structures.

We first consider a special nonconvex quartic-quadratic minimization problem over a single spherical constraint, which includes the discretized energy functional minimization problem of non-rotating Bose-Einstein condensates (BECs) as one of the important applications. Such a problem is studied by exploiting its characterization as a nonlinear eigenvalue problem with eigenvector nonlinearity (NEPv). We show that the NEPv has a unique nonnegative eigenvector, which is actually positive, corresponding to the smallest nonlinear eigenvalue of NEPv, and is exactly the global minimizer to the nonconvex optimization problem.

Secondly, with these properties, we obtain that any algorithm converging to the nonnegative stationary point of this optimization problem finds its global optimum, such as the regularized Newton method. In particular, we obtain the convergence to the global optimum of the inexact alternating direction method of multipliers for this problem.

Thirdly, according to the equivalence between the positive eigenvector of NEPv and the global optimum, we use two Newton-based methods to compute the positive eigenvector of NEPv. The first method comes from the Newton-Noda iteration for saturable nonlinear Schrödinger equations proposed by Ching-Sung Liu, which can be transferred to the NEPv we consider. The second method combines the idea of the root-finding methods and the idea of Newton method, in which, each subproblem involving block tridiagonal linear systems can be solved easily for practical applications like solving discretized BECs problems. Numerical experiments are provided to support our theoretical results.

Finally, we give some sufficient conditions, such that the results about the global optimum and the efficiency of algorithms can be extended to more general nonconvex optimization problems and the NEPv with generally locally nonlinearities according-

ly. In particular, we apply our theories to the discretized nonlinear saturable energy functional minimization problem as an example.

Key Words: Spherical constraint, nonlinear eigenvalue, global minimizer, Bose-Einstein condensation, alternating direction method of multipliers, Newton method

目录

中文摘要	I
Abstract	II
第一章 绪论	1
第一节 玻色-爱因斯坦凝聚态问题	1
第二节 研究现状	3
第三节 本文的贡献及结构	7
第四节 符号约定	8
第二章 非线性特征值问题和全局最优解	9
第一节 预备知识	9
第二节 主要结果	10
第三节 其它问题表述形式	14
第三章 求全局最优解的算法和收敛性分析	19
第一节 正则化牛顿法	19
第二节 交替方向乘子法	19
第三节 不精确 ADMM	25
第四节 数值结果	27
3.4.1 实现细节	28
3.4.2 求解 SDP问题	29
3.4.3 ρ 的选择	30
3.4.4 收敛到全局最优解	30
3.4.5 RN方法与 ADMM比较	33
3.4.6 对组合势阱的数值结果	35
第四章 求非线性特征值问题正解的基于牛顿法的算法	37
第一节 预备知识	37
第二节 解 NEPv的 Newton-Noda迭代法和它的不精确版本	37
第三节 Newton-Root-Finding类方法	42
4.3.1 Newton-Bisection迭代法	42

4.3.2 NBI的复杂度分析	43
4.3.3 Newton-Root-Finding迭代法	46
第四节 数值实验	48
4.4.1 初始设置	48
4.4.2 例子	49
4.4.3 与其他一些算法的比较	54
第五节 伪谱离散格式的 NBI 和 NRI	57
第五章 非线性饱和能量最小化问题的性质和解法	61
第一节 一类更一般单位球面约束的优化模型和性质	61
第二节 非线性饱和能量最小化问题	64
第六章 总结和展望	69
参考文献	71
致谢	79
个人简历	81

第一章 绪论

优化的理论和算法在工程、经济学和其他各类科学研究中都有广泛的应用。而随着科学技术的发展，在物理学，信号处理，数据科学等应用领域中，大多数实际问题需要用不同的复杂的非凸优化模型来刻画 [1–4]。对于这些非凸优化问题，一般难以用统一的理论和算法来处理。另一方面，这些有具体应用背景的非凸优化问题，往往本身带有特殊的结构，比如稀疏性，对称性等等。所以利用问题特殊的数学结构，来分析某些有重要应用的非凸优化问题是很有必要的，也是很有意义的。这样一来，我们能得到和具体问题更相关的优化性质，并对分析和设计相应的高效算法有所启发。

第一节 玻色-爱因斯坦凝聚态问题

玻色-爱因斯坦凝聚态 (Bose-Einstein condensation, BEC) 是指在玻色子气体系统中，当温度接近绝对零度时，物体的波长急剧增加，粒子占据相同的量子态，聚集为一个大原子呈现出可观察的宏观量子状态。1924-1925年玻色和爱因斯坦基于量子统计首先预测了这种新的物质状态 [5,6]，直到1995年 BEC 才首次在实验中被证实 [7,8]，使我们可以进一步探索量子世界。自此，BEC 引起了原子物理学界和凝聚态物理学界的极大兴趣 [9,10]。根据不同的应用需求，又发展出了带有量子涡旋的旋转 BEC [11]，具有偶极-偶极相互作用的 BEC [12]，多组分的 BEC [13]等等。在对这些 BEC 的数值模拟研究中，计算数值基态解是一个基本的目标，而对各种不同的 BEC 问题进行求解通常都是困难的 [1,14]，所以本文中我们主要从优化的角度对一类相对简单但有重要应用的单组分的非旋转 BEC 问题开展讨论。关于更多的不同 BEC 问题的数学模型以及不同参数设置下 BEC问题基态的存在性和唯一性可以参考 Bao和 Cai的综述 [1]。后面我们可以看到，即使是对这样的相对简单的 BEC 问题，要计算它的数值基态解也会涉及到一个带球面约束的四次非凸优化问题或者非线性特征值问题。

根据平均场理论，经过合适的无量纲化和降维处理，BEC的性质可以通过一个带有外部势阱的非线性薛定谔方程，Gross-Pitaevskii 方程 (GPE) 来描

述 [10, 15]:

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = (-\Delta + V(\mathbf{x}) + \beta |\psi(\mathbf{x}, t)|^2) \psi(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, t > 0, \quad (1.1)$$

其中 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 是空间坐标, $\psi(\mathbf{x}, t)$ 是一个满足归一化条件 $\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = 1$ 的波函数, $d = 1, 2, 3$, $\beta \in \mathbb{R}$ 表示粒子间的相互作用系数, $V(\mathbf{x})$ 是一个实值的外部势阱。如无特别说明, 我们考虑 $\beta > 0$, 即散焦非线性性 [16]。满足 GPE 的 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 为稳定态, 它可以表示成时间分离的形式, 即 $\psi(\mathbf{x}, t) = u(\mathbf{x})e^{-i\lambda t}$, 从而得到如下的非线性特征值问题:

$$-\Delta u + V(\mathbf{x})u + \beta |u|^2 u = \lambda u, \quad \int_{\mathbb{R}^d} |u(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1, \quad (1.2)$$

其中, (λ, u) 称为非线性特征对。BEC 或者 GPE 的基态被定义为如下的能量泛函最小化问题的最优解 [1, 17, 18]:

$$u_g = \arg \min_{u \in S} E(u), \quad (1.3)$$

其中

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

S 是球面约束, 被定义为

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

显然, (1.2) 是 (1.3) 的 Euler-Lagrange 方程 (或者一阶最优性条件)。又由于外部势阱的限制, (1.3) 的基态随着 $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ 以指数衰减。因此能量泛函可以从整个空间 \mathbb{R}^d 截断到一个充分大的有界的计算域 D 上, 使得截断误差在狄利克雷边界条件下可以忽略不计 [1, 19, 20]。

为了计算 (1.3) 或 (1.2) 的数值解, 需要先对它们进行适当的离散化。几种常用的离散化格式都有被用于计算基态, 包括有限差分离散化 [21, 22] 和基于快速傅里叶变换 (FFT) 或离散正弦变换 (DST) 的伪谱近似离散 [17, 23, 24] 等。

本文在考虑 BEC 问题时主要是基于有限差分格式离散, 可以得到如下的带球面约束的四次-二次优化问题:

$$\begin{cases} \min_{x \in \mathbb{R}^n} & \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1}^n x_i^4 + x^T B x \\ \text{s.t.} & \|x\|_2^2 = 1, \end{cases} \quad (1.4)$$

其中 $\alpha > 0$ 是固定的常数, B 是一个对称矩阵。相应地还能得到如下具有特征向量非线性的非线性特征值问题 (NEPv):

$$\begin{cases} \alpha \mathcal{A}x^3 + Bx = \lambda x \\ \|x\|^2 = 1, \end{cases} \quad (1.5)$$

其中 $\mathcal{A}x^3 = (x_1^3, x_2^3, \dots, x_n^3)^T$ 是一个向量。在本文中, 根据上下文, 不造成歧义地, 我们称(1.3)或(1.4)为 BEC问题。

当要求获得更高的精度时, 基于伪谱的离散化更加合适。在这种情况下, B 是稠密矩阵, 通常只能用基于合适的预条件子 (preconditioner) 的迭代方法来求解涉及到的大规模线性系统。不过, 基于 FFT或 DST, 在形状规则的计算域中, 拉普拉斯算子往往可以被高效地实现。如果使用有限差分格式, B 将是一个稀疏矩阵, 能通过直接方法 [25] 有效求解对应的线性方程组。另一方面, 在这种情况下, B 具有特殊的结构, 能方便我们分析离散化的问题和相关算法的性质。同时, 它有可能为我们分析采用伪谱离散格式的 BEC 问题带来启发。

第二节 研究现状

经过合适的离散化以后, 已经有各种不同的方法可以用来求解 BEC问题的数值基态解。首先, 求解非线性薛定谔方程的稳定态的一个经典方法梯度流方法, 在物理文献中又称虚时间演化法 [1, 26, 27] 自然地可以用来求解 BEC 的基态。在 [17, 21, 28] 等一系列文献中提出了基于不同时间和空间离散格式的各种梯度流方法的变形, 比如基于向后 Euler有限差分离散或傅里叶伪谱离散的归一化梯度流方法 [17, 23, 28, 29]。最近 Liu 等人还提出了带拉格朗日乘子的梯度流方法来求更精确的 BEC 数值基态解 [30]。除此之外, 求 BEC 基态解的方法大致可分为两大类。第一类方法被设计用来求解 NEPv(1.5) 的最小特征值和对应的特征向量, 比如自洽场迭代法 (SCF) [4, 31], 它在迭代中求解一系列线性特征值问题; 基于有限元逼近的多重网格方法 [32], 它利用牛顿法解一系列线性边值问题和粗网格上的非线性特征值问题; 延拓法 [33] 和 Gauss-Seidel型方法 [34] 等等。第二类方法则是处理非凸约束优化问题 (1.4)的优化方法, 比如各种投影梯度法, 包括 (新型的) Soblev 梯度法 [22, 35], 预处理共轭梯度法 [36, 37]等。最近还发展出了基于 Riemann 流形的优化理论 [38] 的高效算法, 比如 Wen等人提出的结合了曲线搜索和 Barzilai-Borwein步长的可行性方法 [14]; Wu等人提出的相比于梯度型方法有更快收敛速率的正则化牛顿法 [39], 这一方法通过在迭

代点处的二次泰勒展开和正则项来近似目标函数，然后将近似问题看成是信赖域子问题来求解和调整正则项参数；还有自适应的正则化牛顿法 [40] 等等。但是据我们所了解，这些方法很少对算法是否收敛到了所希望的解，即 NEPv(1.5) 的最小特征值和对应特征向量，或者非凸优化问题 (1.4) 的全局最优解，提供理论保证。即使有收敛性分析，一般只在一些实际应用中比较难判断的假设下得到局部收敛性，比如 [41] 中证明了当计算时选取的初始点充分接近期望解的时候，梯度流方法可以收敛到基态解；[31] 中指出当最小特征值和第二小特征值之间的间隔满足一定条件时，SCF才有可能得到最小特征值和特征向量。

从优化的角度来看，(1.4) 本身作为一个带二次约束的四次非凸优化问题涉及到许多有趣的问题。首先，Hu 等人 [42] 证明了当 B 是 Hermitian 矩阵时，分区问题可以看成是 (1.4) 的一个特例，进而说明了 (1.4) 一般是 NP- 完全问题。所以我们只能通过松弛近似的办法来求解它，或者需要对 B 的结构进行假设，再具体分析求解 (1.4)。将 (1.4) 看成是一个多项式优化问题，那么各种不同的半定规划 (SDP) 松弛的方法可以用来近似求解它。比如，Luo 和 Zhang [43] 提出了一种关于带二次约束的四次齐次多项式的 SDP 松弛方式。Hu 等 [42] 也尝试了利用平方和表示 (sum-of-squares, SOS) [44] 和二次 SDP 的 SDP 松弛方法来近似求解 (1.4)。但是众所周知，SDP 类的方法通常都是非常耗时的，尤其是当原问题规模较大时，比如对于我们这里考虑的 BEC 问题，随着离散化中剖分变细，问题规模随之增大，SDP 松弛问题的规模呈指数增长，从而变得几乎不可能计算。此外，松弛是不是紧的，松弛问题的解和原问题的解之间的关系也是在采用 SDP 松弛方法近似求解原问题时所被关注的 [42, 45, 46]。又由于带有球面约束，(1.4) 还可以写成齐次多项式的形式，从而和特殊的多项式优化问题，张量 Z - 特征值问题联系起来。因此可以应用一些针对张量特征值的特殊算法，比如 Tang 等人就利用平移对称高阶幂法 (SS-HOPM) [47] 来求解 (1.4) [48]。

作为一个目标函数可微的球面约束问题，一些经典的优化算法，比如罚函数方法，增广拉格朗日方法以及序列二次规划方法等 [49] 都可以被用来求解 (1.4)，得到某个稳定点或是局部最小解。把球面约束看成是正交约束的一个特例，已经有一些保持约束的方法来处理它，比如前面已经提到的基于流形优化理论的正则化牛顿法 (the Regularized Newton, RN) [39]。在一定的假设条件下，可以证明 RN 能收敛到稳定点 [50]。不过，流形优化的技巧一般都很复杂，如果有正交约束之外的约束条件，算法比较难直接推广和实现。

在 [51] 中, 包括交替方向乘子法 (ADMM) 在内的基于 Bregman 迭代的分裂法也被用来解决正交约束问题。尽管没有收敛性分析, 这类方法有很好的数值表现。

事实上, 对于非凸优化问题, 很多传统的优化算法在直接被用来解决某类非凸问题时, 从数值表现上看常常是有效的, 尽管想提供关于解的质量的理论保证一般比较困难。在求解 BEC 的基态解时, 用基于梯度法, 牛顿迭代的方法或者分裂算法解非凸优化问题(1.4)或者 NEPv(1.5), 都能得到有效的数值结果 [14, 39, 50, 52]。另一方面, 由物理性质或者偏微分方程的理论 [53], 我们已经知道本文中考虑的非旋转的 BEC 问题的基态可以看成是一个实值非负波函数, 它恰好对应于(1.2)的最小特征值。

受此启发, 我们希望对一类特殊的带球面约束的四次-二次优化问题 (1.4), 在对它的结构进行一定假设下 (有实际问题满足这种假设), 主要从以下两个方面进行讨论:

- 能否利用问题的结构刻画出这个非凸优化问题全局最优解的特征, 并且得到更强的优化性质, 包括半定松弛问题的紧性, 判断算法是否收敛到最优解等。
- 根据这些性质, 进而设计全局收敛的算法, 初始点选取容易同时有较高的收敛速率。

不难看出, NEPv(1.5) 是约束优化问题 (1.4) 的一阶必要条件。由 BEC 问题基态的特点, 我们自然想到能否通过 NEPv(1.5) 的特征对的性质来刻画(1.4)的全局最优解的特征, 建立 (1.5) 的特征向量和 (1.4) 的全局最优解之间的关系。Bai 等人在 [54] 中通过将非线性 Rayleigh 商问题表征成对应的非线性特征值问题来求解, 建立了最小正特征值对应的特征向量和局部最小解的等价关系, 并由此设计了具有局部二次收敛性的算法。另一方面, 在关于矩阵和高阶张量的最大 (最小) 特征值的谱性质和非负特征向量的理论中, 有一个被广泛研究的基本结果—Perron-Frobenius 定理。对于一个非负不可约矩阵, Perron [55] 和 Frobenius [56] 指出它的谱半径就是最大特征值, 且只有唯一的正特征向量与之对应, 而且任何非负特征向量对应的一定是最大特征值。Chang 等人 [57] 将 Perron-Frobenius 定理推广到了非负不可约张量的最大 H-特征值上, 之后 Yang 和 Yang [58, 59] 给出了进一步的结果包括弱 Perron-Frobenius 定理, 并且在 [63] 中研究了最大 H-特征值的几何单性。Pearson 研究了本质正张量的性

质 [64]。Hu等人引入了严格非负张量并且研究了几种相关的非负张量之间的关系，并对非负张量的 Perron-Frobenius 定理做了总结 [65]。对 M - 矩阵和 M -张量，则有对应的关于最小特征值和正特征向量的结果 [66]。而对于张量的最大（或最小） Z - 特征值，我们知道它其实和一个带球面约束的齐次多项式最大化（或最小化）问题的最优值等价。[67] 指出对弱对称、非负不可约的张量，它的 Z -谱半径有一个正特征向量，但是这时正的 Z - 特征对一般没有唯一性。不过，对特殊的非负张量，比如在马尔科夫链中出现的概率转移张量，[60,61]研究了它相应的 Z_1 - 特征值问题的谱性质，特征向量的正性和正特征对的唯一性。Choi [62] 研究了无球面约束的 NEPv，将它看成是带非线性扰动的不可约 M -矩阵的特征值问题，利用不动点的理论证明了对于给定的正特征值，无约束的 NEPv 有唯一的正特征向量。我们希望对 NEPv(1.5) 也能得到类似 Perron-Frobenius 定理的性质，讨论它的最小特征值对应的非负特征向量的存在性，正性和唯一性，以及最小特征值的几何单性，也即正特征对的唯一性，进而建立这样的非负特征向量与带球面约束的非齐次的优化问题 (1.4) 的全局最优解的等价关系。

在用一般的算法求解非凸问题时，越来越多的研究者关注如何为良好的数值表现提供一个理论解释，或者判断什么样的非凸问题本质上是“好解的”，即通过传统的优化方法就能得到最优解或可接受的近似解 [?,68]。在带球面约束的二次规划问题 [69]、相位恢复 [70]、矩阵补全 [71]和张量正交分解 [72]等方面已经取得了一些进展。最近，Zhang 等人 [73] 在 B 具有不同的特殊结构的假设下，对(1.4)进行了几何分析。比如，他们证明了当 B 是对角矩阵时，(1.4)所有的局部极小点都是全局最优解；当 B 是秩-1 的半正定矩阵时，(1.4)有唯一的全局最优解。对一般的矩阵 B ，他们还基于四阶最优性条件和严格鞍点性质，在 α 充分大或者足够小的假设下，讨论了(1.4)的局部极小解和最优解的特征，从而帮助分析非凸优化算法的收敛性质。在本文中，我们在 B 的结构满足特定假设下研究 (1.4)，以得到更强和更具体的优化理论结果，包括凸的半定松弛问题的紧性、全局最优解的性质和算法的收敛性，并由此帮助我们解释在实践中比如求解 BEC问题时算法的良好表现以及设计更高效的算法。

前面提到过，对特殊的非负张量，有唯一的正特征向量，对应于最大特征值，已经有许多研究提出不同的算法来求解非负张量的最大特征值和对应的正特征向量。比如 Ng 等 [74] 将幂法推广到了求不可约非负张量的正特征对（或

者说最大 H -特征值) 上, 提出了 NQZ 算法。随后 [65, 75, 76] 在不同的假设下建立了 NQZ 算法的收敛性和线性收敛速率。Liu 等 [77, 78] 提出了一种改进的牛顿迭代法来寻找唯一的正特征对。但是和 H -特征值的情况不同, 求最大 Z -特征值或者相应的带球面约束的优化问题的最优值则一般是 NP 难的, 此时正的 Z -特征对不一定唯一, 所以不可能要求迭代算法全局收敛到最优解或者固定的正特征对。比如通过随机选取不同的初始点, $SS-HOPM$ [47] 可能收敛到球面约束优化问题的不同稳定点, 即不同的特征对。对于小规模的四次-二次优化问题, [79] 和 [80] 分别利用半定松弛的优化技巧和同伦方法来计算所有的 Z -特征值。但是, 对更大规模的问题, 还需要更高效的算法。[81] 中提出了一种修正牛顿迭代法, 通过不同的初始点能找到更大规模的非负张量的某些正的 Z_1 -特征对。最近, Liu [82] 又结合了牛顿法和 Noda 迭代 [83] 的思想, 提出了 Newton-Noda 迭代法来计算饱和非线性薛定谔方程对应的非线性特征值问题的正解, 在迭代过程中产生的迭代点列一直保持是正的, 并最终得到了算法的全局收敛性和局部二次收敛速率。在本文研究的模型的一个重要应用中, BEC 问题的数值基态解, 正解具有特殊的物理意义。另一方面, 由后面的讨论, 我们会得到 (1.4) 在本文考虑的范围内, 有唯一的正的全局最优解, 同时也是 $NEPv(1.5)$ 的最小特征值对应的正特征向量。所以, 我们自然会想到利用这一特点来设计算法, 能否提出能保证点列的正性的收敛算法, 直接得到 $NEPv(1.5)$ 的正解, 从而得到 (1.4) 的全局最优解。

第三节 本文的贡献及结构

本文我们主要围绕一类非凸优化问题展开研究。利用问题的结构讨论了相关非线性特征值问题的性质, 进而得到了关于全局最优解的刻画和半正定松弛的紧性等一些优化理论结果, 并研究了相关算法。

在第二章中, 我们刻画了带球面约束的四次-二次优化问题 (1.4) 的全局最优解的特征, 建立了求全局最优解和求非线性特征值问题 $NEPv(1.5)$ 最小特征值对应的正特征向量的等价性。受到非旋转的 BEC 问题的基态解是一个实值非负函数的启发, 我们首先研究了 (1.4) 的一阶必要性条件的性质。利用问题特殊的结构, 我们得到了关于 $NEPv(1.5)$ 的 “Perron-Frobenius” 结果。 $NEPv(1.5)$ 的最小特征值, 有唯一的正 (负) 特征向量, 这个正 (负) 特征向量正好是 (1.4) 唯一的全局最优解。此外, 我们还得到了 (1.4) 的一种 SDP 松弛问题的紧性。