

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