arXiv:2303.00496v1 [math-ph] 1 Mar 2023

极小化Levy-Lieb泛函的通用对角线估计

S. DI MARINO、A. GEROLIN、L. NENNA

摘要。给定一个使Levy-Lieb泛函达到极小的波函数，本短文旨在估计粒子处于位置（x_1，...，x_N）且处于 δ接近状态 $D_\delta = \cup_{i\neq j}\{|x_i - x_j| \leq \delta\}$时的概率。

目录

1. 引言 1 2. 符号说明 4 3. 动能估计 5 4. 新的试探态：粒子交换及势能估计 7 5. 波函数的对角估计 9 参考文献 14

1. 引言

密度泛函理论旨在通过单电子密度，描述多体量子系统处于基态时的所有相关信息 ρ。遵循 Levy 和 Lieb 的方法[28,31]，基态能量可以改写为以下仅涉及电子密度的变分原理

$$\mathcal{E}_0[v] = \inf_{\substack{\sqrt{\rho}\in H^1(\mathbb{R}^3)\\ \rho(\mathbb{R}^3)=N\\ \int_{\mathbb{R}^3} v(x)\,d\rho<+\infty}} \left\{ \mathcal{F}_{LL,\varepsilon}[\rho] + \int_{\mathbb{R}^3} v(x)\,d\rho \right\},$$

其中 v 是外势，Levy-Lieb泛函$\mathcal{F}_{LL,\,\varepsilon}$ 定义为

$$\mathcal{F}_{LL,\varepsilon}[\rho] := \min_{\substack{\psi\in\mathcal{H}^N\\ \psi\mapsto\rho}} \left\{ \int_{\mathbb{R}^{3N}} \varepsilon|\nabla\psi|^2(x) + v_{ee}(x)|\psi|^2(x)\,dx \right\}, \tag{1}$$

其中，$\mathcal{H}^N = \bigwedge_{i=1}^N H^1(\mathbb{R}^3;\mathbb{C})$ 是费米子空间，$v_{ee}(x_1,\ldots,x_N) = \sum_{i<j}\frac{1}{|x_i-x_j|}$是 N 个电子之间的库仑相互作用势，而 $\psi\mapsto\rho$ 表示 ψ 的单体密度为 ρ，即 $\rho = N\int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}}|\psi|^2$。 1

Levy-Lieb泛函确实是具有给定密度的量子系统所能达到的最低（动能加相互作用）能量 ρ。这一普适泛函是密度泛函理论的核心对象，因为知道它便可以计算具有任意外势的系统的基态能量 v。关于它的完整综述，请读者参阅 [30]。

尽管电子是费米子，本文将只讨论玻色波函数的情形，即在（1）的约束搜索中，考虑 ψ 对称而非反对称的波函数。请注意，玻色系统的基态能量通常高于费米系统的基态能量。然而，在我们的分析中，玻色情形并没有太多限制，因为我们考察的是 ε 较小的情形。

我们的方法将 Levy-Lieb泛函解释为一个（经 Fisher 信息正则化的）多边际最优传输问题。

与最优传输理论的联系：近期研究表明，当 $\varepsilon \to 0$ 时，极限泛函对应于一个多边际最优传输问题 [2, 12, 13, 29]（另见物理和化学文献中的开创性研究 [5, 36–39]）：此时不再考虑波函数，而是将（1）中的约束搜索扩展为在 $\mathbb{R}^{3N}$ 上对概率测度进行最小化，且其 ρ边际分布为

$$\mathcal{F}_0[\rho] := \inf_{\mathbb{P}\in\Pi_N(\rho)} \left\{ \int_{\mathbb{R}^{3N}} v_{ee}(x_1,\dots,x_N)\, d\mathbb{P}(x_1,\dots,x_N) \right\}, \tag{2}$$

其中，$\Pi_N(\rho)$表示以 $\mathbb{R}^{3N}$ 为定义域、边缘分布为 ρ/N 的概率测度集合。

具有库仑代价的多边际最优传输（2）已受到数学、物理和化学界的关注，相关文献也在大幅增长。近期进展包括：关于使（2）最小化的蒙日型解是否存在的研究（例如，[3, 5, 7, 8, 11, 12, 18, 20]）；关于 Kantorovich 势结构性质的研究（例如，[4, 9, 17, 24]）；巨正则系综最优传输 [19]，高效计算算法（例如，[1, 14, 22, 25, 33]）；以及新型密度泛函的设计（例如，[6, 23, 27, 34]）。Levy-Lieb泛函在极限 $\varepsilon \to 0$ 附近的一阶展开由[10]给出。

关于密度泛函理论中多边际最优传输方法的完整介绍，请参阅综述（及其中的参考文献）[17, 21]；关于从化学角度对最新进展的回顾，请参阅综述文章 [40]。

本文的主要结果：在[4, 9, 16]中，证明了解supp($\mathbb{P}^*$)的支集 $\mathbb{P}^*$ 与极限问题（2）的对角线保持一致的正距离，即始终有 $|x_i - x_j| \geq \delta > 0$ 对任意 $x_i,\ x_j \in \mathrm{supp}(\mathbb{P}^*)$。换言之，电子之间始终保持一定距离；由于我们处于经典框架下，这正是预期的行为。

下文中，我们将用 D_δ 表示扩展对角线

$$D_\delta = \{(x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{3N} \ : \ \exists\, i \neq j \text{ s.t. } |x_i - x_j| \leq \delta\}.$$

特别地， [4,9] 中的结果可以改述为：多边际最优传输问题的解集中于以下集合的补集上：D_δ 对于某个 δ。这些结果的一个重要特点是， δ 仅取决于 ρ的集中性质。事实上，定义

$$\kappa(\rho, r) := \sup_{x \in \mathbb{R}^3} \rho(B(x, r))/N,$$

文献[9] 中的作者证明，若 $\kappa(\rho, \beta) < \frac{1}{2(N-1)}$则可以选取 $\delta = \frac{\beta}{2N}$。我们的主要结果是将这一性质推广到 $\varepsilon > 0$ 较小的情形。特别地，我们不认为 $\psi_\varepsilon = 0$ 会出现在 D_δ 上，但我们证明，电子处于位置 $x \in D_\delta$ 的概率极小（3）。

定理 1.1 (库仑相互作用的指数型非对角局域化**)**。 设 ψ_ε 是(1) 的一个极小化子，其中 $v_{ee}(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i<j} \frac{1}{|x_i - x_j|}$。考虑满足 β 的 $\kappa(\rho, \beta) \leq \frac{1}{4(N-1)}$，则令，并假设。那么，对于$(x) = |\psi_\varepsilon|^2(x)$ ， 有

$$\boxed{\int_{D_\alpha} \mathbb{P}_\varepsilon(x)\, dx \leq e^{-\frac{1}{24}\sqrt{\frac{\alpha}{\varepsilon}}}.} \tag{3}$$

在证明中，我们实际上考虑一般的排斥性成对势 v_{ee}，它满足下一节中所述的假设（5）。一般情形下的结果如下：

定理 *1.2*（一般相互作用代价的指数型非对角局域化）。设 ψ_ε 是（*1*）的一个极小化子，其中 v_{ee} 满足（*5*）。考虑 β，使得 $\kappa(\rho, \beta) \leq \frac{1}{4(N-1)}$；接着，设 α 满足 $m(2\alpha) \leq 8(N-1) M(\beta/2)$，并假设 $\varepsilon N^2 \ll \alpha^2 m(2\alpha)$。那么，对于 $\mathbb{P}_\varepsilon(x) = |\psi_\varepsilon|^2(x)$，有

$$\boxed{\int_{D_\alpha} \mathbb{P}_\varepsilon(x)\, dx \leq e^{-\frac{1}{6}\sqrt{\frac{\alpha^2 m(2\alpha)}{8\varepsilon}}}.} \tag{4}$$

请注意，在[9] 中，对角线估计在较弱（且更精确）的假设 $\kappa(\rho, \beta) < \frac{1}{N}$ 下也得到了证明：尽管我们认为，在这种情况下， $\varepsilon > 0$ 情形下类似的推广同样成立，但证明会更繁琐，也不够直观。出于同样的原因，为了使最终的估计更加直观，使用不等式 $\kappa(\rho, \beta) \leq \frac{1}{4(N-1)}$，而不是 $\kappa(\rho, \beta) < \frac{1}{2(N-1)}$。</output>

注 1.1 (关于 ε的自然假设**)**。这里我们想要为假设$\varepsilon N^2 \ll \alpha/16$提供依据。注意到，我们预期在对角线上有 $|\psi_\varepsilon| = 0$，因为那里有 $v_{ee} = +\infty$；如果 $|\psi_\varepsilon(x)| \sim 1$ 在 D_α 中的某一点上，那么我们便预期 $|\nabla \psi_\varepsilon| \sim \alpha^{-1}$，因此

局部动能为 $\frac{\varepsilon}{\alpha^2}$，而势能为 $\frac{1}{\alpha}$。由于扩展对角线之外的局域化现象是经典的，我们预期它在动能相对于势能可忽略的情形下成立，而这恰好对应于 $\varepsilon \ll \alpha$。此时会出现一个因子 N，它是常数，我们认为这实际上只是技术上的问题。

本文结构：第2节介绍全文将使用的符号。第3节给出关于Levy-Lieb泛函中动能项的一些估计。第4节致力于构造Levy-Lieb泛函的一个竞争态；最后，第5节推导波函数的对角估计，并通过迭代一个衰减估计，从而证明定理1.1和定理1.2 。

2. 符号说明

考虑一个子集 $I \subseteq \{1,\dots,N\}$，其基数为 $k = |I|$，定义为 $I = \{i_1,\dots,i_k\}$，其中 $1 \le i_1 < i_2 < \cdots < i_k$。则，$I$-投影

$$\pi_I : \mathbb{R}^{3N} \to \mathbb{R}^{3k}, \qquad \pi_I((x_1,\dots,x_N)) = (x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_k}).$$

有时我们将其记作 $x_I = \pi_I(x)$；若 $I = J^c$，则记作 $x = (x_I, x_J)$。稍微滥用符号，对于一个函数 $\mathbb{P} \in L^1(\mathbb{R}^{3N})$，$I \subseteq \{1,\dots,N\}$ 和 $J = I^c$，我们记作

$$(\pi_I)_\sharp(\mathbb{P})(x_I) = \int \mathbb{P}(x_I, x_J)\, dx_J,$$

它在测度密度上的作用恰好等同于通过投影函数 π_I进行推前。

如上文所述，我们用 $\Pi_N(\rho)$ 表示在 $\mathbb{R}^{3N}$ 上具有等于 ρ 的 N 个单体边缘分布的概率测度集合。
接下来，我们考虑一个具有如下形式的电子-电子对相互作用排斥势：v_{ee}

$$v_{ee}(x_1,\dots,x_N) = \sum_{i<j} c(x_i,x_j), \qquad \text{where } m(|x-y|) \le c(x,y) \le M(|x-y|) \qquad \forall x,y \in \mathbb{R}^3$$
$$\text{for some } m, M : (0,\infty) \to [0,\infty) \text{ decreasing such that } \lim_{t\to 0^+} m(t) = +\infty \tag{5}$$

此外，稍微滥用一下符号，我们将用

$$\mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^{3N}) \mapsto v_{ee}(\mathbb{P}) := \int_{\mathbb{R}^{3N}} v_{ee}(x_1,\dots,x_N)\, d\mathbb{P}(x_1,\dots,x_N) \tag{6}$$

注意，我们常常将测度 $\mathbb{P}$ 与其密度视为同一对象。

最后，给定一个开集 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^{3N}$，那么对于每个 $r > 0$，我们记

$$\Omega_{-r} := \{x \in \mathbb{R}^{3N} \ : \ B(x,r) \subseteq \Omega\}. \tag{7}$$

3. 动能估计

本节中，我们给出 Levy-Lieb泛函中动能项的一些初步估计。

记 L^1_+ 为正 L^1 函数锥，我们定义 $\mathcal{E}_{\text{kin}}: L^1_+(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ 为与某个绝对连续的 N-概率测度 h相关联的动能

$$\mathcal{E}_{\text{kin}}(h) := \begin{cases} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{\sum_{i=1}^N |\nabla_i h(x_1,\ldots,x_N)|^2}{h(x_1,\ldots,x_N)}\, dx_1,\ldots,dx_N & \text{if } \sqrt{h} \in H^1(\mathbb{R}^{3N}) \\ +\infty & \text{otherwise} \end{cases} \tag{8}$$

上下文清楚时，我们也将 $\mathcal{E}_{\text{kin}}(h) = \int \frac{|\nabla h|^2}{h}\, dx$简写。注意，动能泛函也称为费舍尔信息。此外，若 $\psi \in H^1(\mathbb{R}^{3N};\, \mathbb{R})$，则

$$\int |\nabla \psi|^2\, dx = \mathcal{E}_{\text{kin}}(|\psi|^2) = \mathcal{E}_{\text{kin}}(\mathbb{P}_\psi),$$

其中 $\mathbb{P}_\psi = |\psi|^2$ 是与波函数 ψ相关联的联合概率。因此，当 ψ 是玻色子情形下的极小化子时，上述等式链成立。以下引理总结了关于动能的齐次性、次可加性（这是 [32]中定理7.8的推论）以及投影下的可分解性的一些结果（[26, 35]中也出现了类似结果）。

引理3.1。 设 $\mathcal{E}_{\text{kin}}$ 定义如 （8）所示。则

（i） $\mathcal{E}_{\text{kin}}$ 是1次齐次的，即 $\mathcal{E}_{\text{kin}}$（$\lambda\mathbb{P}$） $= \lambda\mathcal{E}_{\text{kin}}$（$\mathbb{P}$）对任意 $\lambda > 0$ 均成立；（ii）给定 $\mathbb{P}_1$，……，$\mathbb{P}_k \in L^1$（$\mathbb{R}^{3N}$），有

$$\mathcal{E}_{\text{kin}}(\mathbb{P}_1 + \ldots + \mathbb{P}_k) \le \mathcal{E}_{\text{kin}}(\mathbb{P}_1) + \mathcal{E}_{\text{kin}}(\mathbb{P}_2) + \ldots + \mathcal{E}_{\text{kin}}(\mathbb{P}_k);$$

（iii）设 $\mathbb{P} \in L^1_+$（$\mathbb{R}^{3N}$）。给定 I， $J \subseteq \{1,\ldots,N\}$两个非空且不相交的集合，使得 $I = J^c$，记 $\mathbb{P}_I =$（π_I）$_\sharp\mathbb{P}$和 $\mathbb{P}_J =$（π_J）$_\sharp\mathbb{P}$。则有（此处 $N_I = \sharp I$ 和 $N_J = \sharp J$）

$$\mathcal{E}^N_{\text{kin}}(\mathbb{P}) \ge \mathcal{E}^{N_I}_{\text{kin}}(\mathbb{P}_I) + \mathcal{E}^{N_J}_{\text{kin}}(\mathbb{P}_J),$$

其中等号成立当且仅当 $\mathbb{P}$（x） $= \mathbb{P}_I$（x_I）$\mathbb{P}_J$（x_J）$/\lambda$，其中 $\lambda = \int \mathbb{P}$。特别地，如果 $\mathbb{P}$ 是某个概率测度的密度，则等号成立当且仅当 x_I 和 x_J 在概率 $\mathbb{P}$下相互独立。

证明。 (i) 1-齐次性显而易见。

（ii）对于次可加性，只需证明 $k = 2$ 的情形；然后对于任意 x，根据柯西-施瓦茨不等式，我们有

$$(\mathbb{P}_1(x) + \mathbb{P}_2(x)) \left(\frac{|\nabla \mathbb{P}_1(x)|^2}{\mathbb{P}_1(x)} + \frac{|\nabla \mathbb{P}_2(x)|^2}{\mathbb{P}_2(x)} \right) \ge (|\nabla \mathbb{P}_1(x)| + |\nabla \mathbb{P}_2(x)|)^2,$$

使用三角不等式并除以 $\mathbb{P}_1+\mathbb{P}_2$ 后，可将其改写为

$$\frac{|\nabla(\mathbb{P}_1+\mathbb{P}_2)|^2}{\mathbb{P}_1+\mathbb{P}_2} \leq \frac{|\nabla\mathbb{P}_1|^2}{\mathbb{P}_1}+\frac{|\nabla\mathbb{P}_2|^2}{\mathbb{P}_2},$$

对其积分即可得出结论。

(iii) 关于最后一点，我们固定 x_J，并针对测度 dx_I 使用柯西-施瓦茨不等式：

$$\begin{aligned}\left(\int \mathbb{P}(x_I,x_J)dx_I\right)\cdot\left(\int \frac{|\nabla_J\mathbb{P}(x_I,x_J)|^2}{\mathbb{P}(x_I,x_J)}dx_I\right) &\geq \left(\int |\nabla_J\mathbb{P}(x_I,x_J)|dx_I\right)^2 \\ &\geq \left|\nabla_J\left(\int \mathbb{P}(x_I,x_J)dx_I\right)\right|^2,\end{aligned}$$

其中在最后一步中，我们使用了三角不等式，并将导数移到了积分号外。现在我们注意到 $\mathbb{P}_J(x_J)=\int\mathbb{P}(x_I,x_J)dx_I$，因此可以将其写为

$$\int \frac{|\nabla_J\mathbb{P}(x_I,x_J)|^2}{\mathbb{P}(x_I,x_J)}dx_I \geq \frac{|\nabla_J\mathbb{P}_J(x_J)|^2}{\mathbb{P}_J(x_J)}.$$

对其关于 dx_J 积分，并对 x_I 进行类似计算，我们得到结论，即

$$\iint \frac{|\nabla\mathbb{P}(x_I,x_J)|^2}{\mathbb{P}(x_I,x_J)}dx_Idx_J \geq \int \frac{|\nabla_J\mathbb{P}_J(x_J)|^2}{\mathbb{P}_J(x_J)}dx_J+\int \frac{|\nabla_I\mathbb{P}_I(x_I)|^2}{\mathbb{P}_I(x_I)}dx_I.$$

结合柯西-施瓦茨不等式和三角不等式的等号成立条件，我们得到$\nabla_J\mathbb{P}(x_I,x_J)=v(x_J)\mathbb{P}(x_I,x_J)$，其中某个向量场为 v；通过简单积分，实际上可得 $v=\nabla(\mathbb{P}_J)/\mathbb{P}_J$；这可以看作 $\nabla_J\log(\mathbb{P})=\nabla_J\log\mathbb{P}_J$；类似地，我们可以得到 $\nabla_I\log(\mathbb{P})=\nabla_I\log\mathbb{P}_I$。将这两个等式相加，得到$\nabla(\mathbb{P}(x)/\mathbb{P}_I(x_I)\mathbb{P}_J(x_J))=0$。 □

下面的引理是对 [15]中定理 3.2 的直接改写，给出了 IMS 局部化公式；为完整起见，我们补充了一个简短的证明。

引理 3.2。设 η_1，η_2，η_3：$\mathbb{R}^{3N}\to[0,1]$ 是满足 $\eta_1+\eta_2+\eta_3\equiv 1$ 的 C^1 函数。那么，对于任意函数 $\mathbb{P}\in L^1_+(\mathbb{R}^{3N})$，有

$$\mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\mathbb{P}\eta_1)+\mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\mathbb{P}\eta_2)+\mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\mathbb{P}\eta_3)=\mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\mathbb{P})+\int\left(\frac{|\nabla\eta_1|^2}{\eta_1}+\frac{|\nabla\eta_2|^2}{\eta_2}+\frac{|\nabla\eta_3|^2}{\eta_3}\right)\mathbb{P}\,dx.$$

证明。对于每个 $i=1$，逐点有：

$$\frac{|\nabla(\mathbb{P}\eta_i)|^2}{\mathbb{P}\eta_i} = \frac{|\eta_i\nabla\mathbb{P} + \mathbb{P}\nabla\eta_i|^2}{\mathbb{P}\eta_i} = \frac{\eta_i^2|\nabla\mathbb{P}|^2 + 2\eta_i\mathbb{P}\nabla\mathbb{P}\cdot\nabla\eta_i + \mathbb{P}^2|\nabla\eta_i|^2}{\mathbb{P}\eta_i}$$
$$= \eta_i\frac{|\nabla\mathbb{P}|^2}{\mathbb{P}} + 2\nabla\mathbb{P}\cdot\nabla\eta_i + \mathbb{P}\frac{|\nabla\eta_i|^2}{\eta_i}$$

将它们相加，并利用 $\sum\eta_i = 1$ 和 $\sum\nabla\eta_i = 0$，可得

$$\sum_i \frac{|\nabla(\mathbb{P}\eta_i)|^2}{\mathbb{P}\eta_i} = \frac{|\nabla\mathbb{P}|^2}{\mathbb{P}} + \mathbb{P}\sum_i\frac{|\nabla\eta_i|^2}{\eta_i},$$

对其积分后，即得到所需的恒等式。

□

4. 新的试探态：粒子交换与势能估计

本小节旨在为泛函的极小化构造一个竞争态

$$\mathcal{F}_{LL,\varepsilon}(\mathbb{P}) = \begin{cases}\varepsilon\mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\mathbb{P}) + v_{ee}(\mathbb{P}) & \text{if } \mathbb{P}\in\Pi_N(\rho)\\ +\infty & \text{otherwise,,}\end{cases} \tag{9}$$

其中 $\mathcal{E}_{\mathrm{kin}}$ 定义于式（8）中，且 v_{ee} 满足式（5）。我们的想法是尝试模仿[4, 9, 16], 中半经典情形 $\varepsilon = 0$的做法：在该情形下，我们取两个点 y，$z\in\mathbb{R}^{3N}$ 并将它们替换为 $\tilde{y}$，$\tilde{z}$ 其中交换了它们的第一个分量，即 $\tilde{y} =$（z_1，y_2，.....，y_n）和 $\tilde{z} =$（y_1，z_2，.....，z_n）。

为此，对于 n粒子分布 $\mathbb{P}$，我们将考虑两个以 y 和 z为中心的小凸起函数

$$\eta_1(x) = \lambda_1\eta\Big(\frac{x-y}{r_1}\Big) \qquad \text{and} \qquad \eta_2(x) = \lambda_2\eta\Big(\frac{x-z}{r_2}\Big), \tag{10}$$

对于稍后选取的某些 $\lambda_1, \lambda_2, r_1, r_2$，以及某个 $\eta\in C_c^1(B(0,1))$，$\eta\geq 0$。首先，我们假设 $\mathrm{supp}(\eta_1)\cap\mathrm{supp}(\eta_2) = \emptyset$，只要.....就可以保证这一点

$$r_1 + r_2 \leq |y-z| \tag{11}$$

然后我们假设 $\int\eta_1\mathbb{P} = \int\eta_2\mathbb{P} = m$，这同样可以通过选择合适的 λ_i, r_i 来实现。于是定义

$$\rho_1^i(x_1) = (\pi_{\{1\}})_\sharp(\eta_i\mathbb{P}), \qquad \rho_{\hat{1}}^i(x_2, x_3, \ldots, x_N) = (\pi_{\{1\}^c})_\sharp(\eta_i\mathbb{P}), \tag{12}$$

$$\mathbb{P}_1 = \frac{1}{m}\rho_1^2\rho_{\hat{1}}^1, \qquad \mathbb{P}_2 = \frac{1}{m}\rho_1^1\rho_{\hat{1}}^2, \tag{13}$$

其中，ρ_1^i 和 $\rho_{\hat{1}}^i$ 是 $\eta_i\mathbb{P}$ 和 $\mathbb{P}_1$ 的边缘分布，而 $\mathbb{P}_2$ 和 $\tilde{y} =(z_1, y_2, \ldots, y_n)$及 $\tilde{z} =(y_1, z_2, \ldots, z_n)$附近集中分布的密度。最后，我们考虑

$$\bar{\mathbb{P}} := \mathbb{P} - \mathbb{P}\eta_1 - \mathbb{P}\eta_2 + \mathbb{P}_1 + \mathbb{P}_2, \tag{14}$$

它将作为泛函$\mathcal{F}_{LL,\varepsilon}$的极小化子 $\mathbb{P}$ 的竞争态。

注4.1。 为了使 $\mathbb{P}$ 成为竞争态，我们还需验证$\mathbb{P} \geq 0$，并确认其边缘分布正确。关于正性，注意到如果 λ_1和 λ_2 足够小，我们还有 $\eta_1+\eta_2 \leq 1$，特别是 $\mathbb{P}-\eta_1\mathbb{P}_1-\eta_2\mathbb{P}_2$，这将保证 $\mathbb{P} \geq 0$。

关于边际分布约束，注意到由 (12) 和 (13) 可知 $\eta_1\mathbb{P}+\eta_2\mathbb{P}$和 $\mathbb{P}_1+\mathbb{P}_2$ 具有相同的边缘分布，特别地， $\mathbb{P}$ 和 $\mathbb{P}$ 也具有相同的边缘分布。

引理*4.1*。设 $\mathbb{P}$ 是满足 $\mathcal{F}_{LL,\varepsilon}(\mathbb{P}) < +\infty$的。给定 $y, z \in \mathbb{R}^{3N}$，令 $\eta_1, \eta_2, \mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2, \bar{\mathbb{P}}$由 *(10)*、*(11)*、*(12)*、*(13)* 和 *(14)* 定义。则

$$\mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\bar{\mathbb{P}}) \leq \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\mathbb{P}) + \int \mathbb{P}(x) \left(\frac{|\nabla\eta_1|^2}{\eta_1} + \frac{|\nabla\eta_1|^2}{\eta_2} + \frac{|\nabla\eta_1+\nabla\eta_2|^2}{1-\eta_1-\eta_2} \right) dx;$$

$$v_{ee}(\bar{\mathbb{P}}) = v_{ee}(\mathbb{P}) - \int \mathbb{P}(\eta_1+\eta_2) \sum_{i>1} c(x_1,x_i)dx + \int (\mathbb{P}_1+\mathbb{P}_2) \sum_{i>1} c(x_1,x_i)dx.$$

证明。 考虑 $\eta_3 = 1-\eta_1-\eta_2$。于是有 $\mathbb{P} = \eta_3\mathbb{P} + \mathbb{P}_1 + \mathbb{P}_2$。利用引理 3.1，特别是利用 $\mathcal{E}_{\mathrm{kin}}$的次可加性以及独立变量情形下的精确能量分解，我们得到（由（13））

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\bar{\mathbb{P}}) &\leq \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\eta_3\mathbb{P}) + \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\mathbb{P}_1) + \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\mathbb{P}_2) \\ &= \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\eta_3\mathbb{P}) + \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\rho_1^2) + \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\rho_{\hat{1}}^1) + \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\rho_1^1) + \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\rho_{\hat{1}}^2); \end{aligned} \tag{15}$$

接下来回顾（12）以及分解能量的不等式（引理3.1 (iii)），得到

$$\mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\rho_1^i) + \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\rho_{\hat{1}}^i) \leq \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\eta_i\mathbb{P}) \tag{16}$$

因此，利用（15）、（16），再结合引理 3.2，即可得出结论。

对于势能项的估计，显然有

$$v_{ee}(\bar{\mathbb{P}}) = v_{ee}(\mathbb{P}) - \int \mathbb{P}(\eta_1+\eta_2)v_{ee}(x)dx + \int (\mathbb{P}_1+\mathbb{P}_2)v_{ee}(x)dx;$$

由于 $v_{ee}(x) = \sum_{i<j} c(x_i,x_j)$，我们只需证明，在 $1<i<j$ 抵消时，$c(x_i,x_j)$ 对最后两个积分的贡献。事实上，在这两个积分中，我们都可以对第一个变量积分消去：例如，记 $I=\{1\}$ 和 $J=I^c$，有

$$\begin{aligned}\int \mathbb{P}\eta_1 c(x_i,x_j)\,dx_I dx_J &= \int c(x_i,x_j)\left(\int \mathbb{P}\eta_1\,dx_I\right)\,dx_J\\ &= \int c(x_i,x_j)\rho_1^1(x_J)\,dx_J\\ &= \int c(x_i,x_j)\rho_1^1(x_J)\left(\int \frac{\rho_2^1(x_I)}{m}\,dx_I\right)\,dx_J\\ &= \int c(x_i,x_j)\mathbb{P}_1\,dx.\end{aligned}$$

类似地，我们可以证明 $\int \mathbb{P}\eta_2 c(x_i,x_j)\,dx = \int \mathbb{P}_2 c(x_i,x_j)\,dx$。 □

在下文中，我们将 $C_1(x) = \sum_{i=2}^N c(x_1,x_i)$ 记作

5. 波函数的对角估计

我们将用本节最后一部分推导使 Levy-Lieb泛函达到极小值的玻色波函数的对角估计，并特别证明定理1.1和定理 1.2。

引理 5.1. 设 ρ 为边缘分布，且 $\beta > 0$ 满足 $\kappa(\rho,\beta) \le 1/4(N-1)$。那么，对每个 $\mathbb{P} \in \Pi_N(\rho)$ 和 $y \in \mathbb{R}^{3N}$，对每个满足$r_1 + 2r_2 < \beta$和 $\delta > 0$的 r_1, r_2，存在 $z \in \mathbb{R}^{3N}$，使得按（10）、（12）和（13）定义 $\eta_1, \eta_2, \mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2, m$

(i) $\int C_1(\mathbb{P}_1 + \mathbb{P}_2)dx \le 2(N-1)M(\beta - r_1 - 2r_2)m;$
(ii) z 是 $1(+\delta, 1/2$倍增点，尺度为 r_2，对应于 $\mathbb{P}$，也就是说

$$\int_{B(z,r_2)} \mathbb{P}\,dx \le 2(1+\delta)^{3N} \int_{B(z,r_2/(1+\delta))} \mathbb{P}\,dx.$$

证明。 对于 $\gamma > 0$，我们考虑集合

$$\Omega = \left\{ y' \in \mathbb{R}^{3N} : |y_1' - y_i| \ge \gamma - \frac{\delta}{1+\delta} r_2 \text{ and } |y_1 - y_i'| \ge \gamma - \frac{\delta}{1+\delta} r_2, \forall i = 2,\dots,N \right\}.$$

我们知道，若 $z \in \Omega$，当然有

$$C_1(y_1', z_2', \dots, z_N') + C_1(z_1', y_2', \dots, y_N') \le 2(N-1)M(\gamma - r_1 - 2r_2)\ \forall y' \in B(y,r_1), z' \in B(z,r_2),$$

这尤其意味着 $\int C_1(\mathbb{P}_1 + \mathbb{P}_2)\,dx \le 2(N-1)M(\gamma - r_1 - 2r_2)m$。现在我们要证明 Ω中存在一个 $1/2$ 倍增点；为此，很容易看出

$$\Omega_{-\delta\frac{r_2}{1+\delta}} \subseteq \{ y' \in \mathbb{R}^{3N} : |y_1' - y_i| \ge \gamma \text{ and } |y_1 - y_i'| \ge \gamma, \forall i = 2,\dots,N \}$$

现在，对[4,9] 进行类似的计算即可得到

$$\int_{\Omega_{-\delta\frac{r_2}{1+\delta}}} \mathbb{P}(x)\,dx \ge 1 - 2(N-1)\kappa(\rho,\gamma),$$

其中 $\kappa(\rho,r) = \sup_{x\in\mathbb{R}^3}\rho(B(x,r))$。现在，若考虑 $\gamma=\beta$，则有 $\kappa(\rho,\beta) \le_4 \frac{1}{N-1}(\,)$，因此我们可以应用引理 5.2，并利用 $r = \frac{r_2}{1+\delta}$ 得到 Ω 中尺度为 r_2 的一个 $(1+\delta,1/2)$-倍增点的存在性。

□

引理 5.2 (倍增点的存在性)。 设 $\mathbb{P}\in L^1_+(\mathbb{R}^{3N})$ 为一个概率测度的密度，并设 $\delta>0$。考虑一个开集 $\Omega\subseteq\mathbb{R}^{3N}$；那么对于每个 $r>0$，我们记 $C_r := \int_{\Omega_{-r}}\mathbb{P}(x)\,dx$，其中 Ω_{-r} 定义同 (7)。那么，只要 $C_{\delta r}>0$，就存在 $y\in\Omega$，使得

$$\int_{B(y,(1+\delta)r)}\mathbb{P}(x)\,dx \le \frac{(1+\delta)^{3N}}{C_{\delta r}}\int_{B(y,r)}\mathbb{P}(x)\,dx,$$

也就是说，测度 $\mathbb{P}(x)\,dx$ 在点 y 处、尺度为 r时是倍增的，倍增常数为 $\frac{(1+\delta)^{3N}}{C_{\delta r}}$。

证明。 反设对于每个 $y\in\Omega$，反向不等式都成立

$$\int_{B(y,(1+\delta)r)}\mathbb{P}(x)\,dx > \frac{(1+\delta)^{3N}}{C_{\delta r}}\int_{B(y,r)}\mathbb{P}(x)\,dx.$$

于是我们可以在整个 Ω 上对该不等式积分

$$\int_\Omega\int_{B(y,(1+\delta)r)}\mathbb{P}(x)\,dx\,dy > \frac{(1+\delta)^{3N}}{C_{\delta r}}\int_\Omega\int_{B(y,r)}\mathbb{P}(x)\,dx\,dy.$$

现在利用 Fubini 定理可得

$$\begin{aligned}\omega_{3N}\cdot\big((1+\delta)r\big)^{3N} &= \int_{\mathbb{R}^{3N}}\int_{B(y,(1+\delta)r)}\mathbb{P}(x)\,dx\,dy \ge \int_\Omega\int_{B(y,(1+\delta)r)}\mathbb{P}(x)\,dx\,dy\\ C_{\delta r}\omega_{3N}\cdot r^{3N} &= \int_{\Omega_{-\delta r}}\mathbb{P}(z)|B(z,r)|\,dz = \int_\Omega\int_{B(y,r)\cap\Omega_{-\delta r}}\mathbb{P}(x)\,dx\,dy\\ &\le \int_\Omega\int_{B(y,r)}\mathbb{P}(x)\,dx\,dy,\end{aligned}$$

因此我们得到了矛盾。 □

命题 5.1 (单步衰减)。 设 ρ 和 β 满足 $\kappa(\rho,\ \beta) <_{1\,4(N-1)}$。则存在 $\alpha_0=\alpha(\beta,\ \varepsilon)$ 使得，如果 $\mathbb{P}$ 是 (9)的极小化者，则对于每个 $y\in D_\alpha$ 满足 $\alpha\le\alpha_0$，以及每个 $r_1\le\alpha/2$，都有

$$\int_{B(y,r_1/(1+\delta))}\mathbb{P}(x)\,dx \le \frac{1}{\delta^2 r_1^2\frac{m(2\alpha)}{2(1+\delta)^2\varepsilon}+1}\int_{B(y,r_1)}\mathbb{P}(x)\,dx, \tag{17}$$

只要 $\delta>0$ 满足 $m(2\alpha)>256\varepsilon C(\delta)/\beta^2$，其中

$$C(\delta) := \frac{(1+\delta)^2\cdot(2(1+\delta)^{3N}-1)}{\delta^2}. \tag{18}$$

一个蕴含它对 α_0的选择例如是 $m(2\alpha_0) > 8\max\{(N-1)M(\beta/2)\ 850\varepsilon N^2/\beta^2 \qquad\}$.

证明。设 $y \in D_\alpha$，不失一般性，我们可以假设 $|y_1 - y_2| < \alpha$;¯令 z由引理 5.1 给出。接下来考虑由¯(10)、(11)、(12)、(13) 和 (14) 定义的 r_1、r_2、η_1、η_2、$\mathbb{P}_1$、$\mathbb{P}_2$、$\mathbb{P}$；由于是 $\mathbb{P} \in \Pi(\rho)$，根据 $\mathbb{P}$的极小性，我们得到，

$$\mathcal{F}_{LL,\varepsilon}(\bar{\mathbb{P}}) \geq \mathcal{F}_{LL,\varepsilon}(\mathbb{P}),$$
$$\varepsilon \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\bar{\mathbb{P}}) + v_{ee}(\bar{\mathbb{P}}) \geq \varepsilon \mathcal{E}_{\mathrm{kin}}(\mathbb{P}) + v_{ee}(\mathbb{P});$$

现在我们可以使用引理 4.1 中的估计，从而得到

$$\varepsilon \int \mathbb{P}\left(\frac{|\nabla \eta_1|^2}{\eta_1} + \frac{|\nabla \eta_2|^2}{\eta_2} + \frac{|\nabla \eta_1 + \nabla \eta_2|^2}{1 - \eta_1 - \eta_2}\right) dx \geq \int \mathbb{P}(\eta_1 + \eta_2) C_1 dx - \int (\mathbb{P}_1 + \mathbb{P}_2) C_1 dx.$$

现在我们作出选择 $\eta(x) = \min\left\{\frac{(1+\delta)(1-|x|)_+}{\delta}, 1\right\}^2$。特别地，当 $|x| < \frac{1}{1+\delta}$时有 $0 \leq \eta \leq 1$和 $\eta \equiv 1$；此外，当 $\frac{1}{1+\delta} \leq |x| \leq 1$ 时有 $|\nabla\sqrt{\eta}| \equiv \frac{1+\delta}{\delta}$，否则为 0。因此我们有

$$\begin{aligned}\int \mathbb{P}\frac{|\nabla \eta_1|^2}{\eta_1} &= \frac{(1+\delta)^2}{\delta^2 r_1^2} \int_{B(y,r_1)\setminus B(y,r_1/(1+\delta))} \mathbb{P}\lambda_1 \, dx = \frac{(1+\delta)^2}{\delta^2 r_1^2}\left(\int_{B(y,r_1)} \mathbb{P}\lambda_1 \, dx - \int_{B(y,r_1/(1+\delta))} \mathbb{P}\lambda_1\right) \\ &\leq \frac{(1+\delta)^2}{\delta^2 r_1^2}\left(\int_{B(y,r_1)} \mathbb{P}\lambda_1 \, dx - m\right)\end{aligned}$$

类似地，我们有

$$\int \mathbb{P}\frac{|\nabla \eta_2|^2}{\eta_2} \leq \frac{(1+\delta)^2}{\delta^2 r_2^2}\left(\int_{B(z,r_2)} \mathbb{P}\lambda_2 \, dx - m\right) \leq \frac{(1+\delta)^2 \cdot (2(1+\delta)^{3N} - 1)}{\delta^2 r_2^2} \cdot m = \frac{C(\delta)}{r_2^2} \cdot m.$$

其中，在最后几步中我们使用了引理 5.1 (ii) 以及 $C(\delta) \cdot m$ (18)。现在利用 $\int C_1 \mathbb{P}\eta_1 \, dx \geq m(\alpha + 2r_1) \cdot m$ 以及我们对$\int C_1(\mathbb{P}_1 + \mathbb{P}_2) \, dx$ 所得到的估计，可得

$$\int \mathbb{P}(\eta_1 + \eta_2) C_1 dx - \int (\mathbb{P}_1 + \mathbb{P}_2) C_1 dx \geq [m(\alpha + 2r_1) - 2(N-1)M(\beta - r_1 - 2r_2)] \cdot m.$$

综上所述，我们得到

$$\frac{\varepsilon(1+\delta)^2}{\delta^2 r_1^2} \int_{B(y,r_1)} \lambda_1 \mathbb{P}(x) \, dx \geq \left[m(\alpha + 2r_1) - 2(N-1)M(\beta - r_1 - 2r_2) - \frac{\varepsilon C(\delta)}{r_2^2} + \frac{\varepsilon(1+\delta)^2}{\delta^2 r_1^2}\right] \cdot m.$$

现在我们可以使用 $m \geq \int_{B(y,r_1/(1+\delta))} \lambda_1 \mathbb{P}(x) \, dx$，并将两边除以 λ_1，即可将不等式写为

$$\int_{B(y,r_1/(1+\delta))} \mathbb{P}(x) \, dx \leq \frac{1}{\frac{\delta^2 r_1^2 F(r_1,\varepsilon,\alpha)}{(1+\delta)^2 \varepsilon} + 1} \int_{B(y,r_1)} \mathbb{P}(x) \, dx, \tag{19}$$

其中

$$F(r_1, \varepsilon, \alpha) := \max\left\{m(\alpha + 2r_1) - 2(N-1)M(\beta - r_1 - 2r_2) - \frac{\varepsilon C(\delta)}{r_2^2} \;:\; r_2 > 0\right\}.$$

现在我们可以选取 $r_1 \le \alpha/2 \le \beta/4$ 和 $r_2 = \beta/8$，然后选取 $\alpha < \alpha_0$，使得

$$\frac{m(2\alpha)}{2} - 2(N-1)M(\beta/2) > \frac{m(2\alpha)}{4} \quad \text{and} \quad \frac{m(2\alpha)}{2} - \frac{\varepsilon C(\delta)}{r_2^2} > \frac{m(2\alpha)}{4}. \tag{20}$$

这样我们得到 $F(r_1, \varepsilon, \alpha) \ge m(2\alpha)/2$：将此估计代入 (19)，便可得到

$$\int_{B(y,r_1/(1+\delta))} \mathbb{P}(x)\,dx \le \frac{1}{\delta^2 r_1^2 \frac{m(2\alpha)}{2(1+\delta)^2\varepsilon} + 1} \int_{B(y,r_1)} \mathbb{P}(x)\,dx.$$

为了确定该不等式对哪些 α 和 δ 成立，我们必须确保满足这两个条件 (20)，即

$$m(2\alpha) \ge \max\left\{8(N-1)M\Big(\frac{\beta}{2}\Big), 256\frac{\varepsilon C(\delta)}{\beta^2}\right\}; \tag{21}$$

注意到，α_0 可刻画为最大的 α，使得存在某个δ，令其满足 (21，也就是说，当 $C(\delta)$ 尽可能小时；当 $\delta = \frac{2}{3N}$时近似达到这一点。取此选择，我们有 $C(2/(3N)) \le 26N^2$，因此

$$m(2\alpha_0) \ge 8\max\left\{(N-1)M\Big(\frac{\beta}{2}\Big), 850\frac{\varepsilon N^2}{\beta^2}\right\}. \tag{22}$$

□

现在我们将迭代命题 5.1 中的估计

定理 5.1。考虑 ρ 和 β，使得 $\kappa(\rho, \beta) < \frac{1}{4(N-1)}$。再考虑 ~~$\alpha <$~~ α_0（如命题 5.1中所述），并假设 $A := \frac{\alpha^2 m(2\alpha)}{8\varepsilon} \gg N^2$。那么，如果$\mathbb{P}$ 是 (9)的极小值，我们有

$$\int_{D_{\alpha/2}} \mathbb{P}(x)\,dx \le e^{-\frac{1}{6}\sqrt{\frac{\alpha^2 m(2\alpha)}{8\varepsilon}}} \int_{D_{2\alpha}} \mathbb{P}(x)\,dx.$$

证明。考虑 δ 使得 $\delta^2 A = e^2$。根据关于 A 的假设，我们有$\delta \ll 1/N$；特别地，由（18）可估计 $C(\delta) \le \frac{2}{\delta^2}$，从而容易看出 $m(2\alpha) > 256\varepsilon C(\delta)/\beta^2$ 因此我们可以将命题5.1 与$r_1 = \alpha_k = \frac{\alpha}{2}(1+\delta)^{-k}$ 结合应用，从而对每个 $y \in D_\alpha$

$$\int_{B(y,\alpha_{k+1})} \mathbb{P}(x)\,dx \le \frac{1}{\delta^2\alpha^2\frac{m(2\alpha)}{8(1+\delta)^{2k+2}\varepsilon} + 1} \int_{B(z,\alpha_k)} \mathbb{P}(x)\,dx \le \frac{(1+\delta)^{2k+2}}{e^2} \int_{B(y,\alpha_k)} \mathbb{P}(x)\,dx. \tag{23}$$

现在我们可以对 $k = 0$、……、k_0 迭代该估计，其中（$1+\delta$）$^{2k_0+2} \le e^2 \le$（$1+\delta$）。此时我们有

$$\int_{B(y,\alpha/2e)} \mathbb{P}(x)\,dx \le \int_{B(y,\alpha_{k_0+1})} \mathbb{P}(x)\,dx \le \frac{(1+\delta)^{(k_0+1)(k_0+2)}}{(e^2)^{k_0+1}} \int_{B(y,\alpha_0)} \mathbb{P}(x)\,dx \le e^{-k_0} \int_{B(y,\alpha/2)} \mathbb{P}(x)\,dx.$$

对 $y \in D_\alpha$ 积分这个不等式，我们得到

$$\begin{aligned}\omega_{3N}\left(\frac{\alpha}{2e}\right)^{3N} \int_{D_{\alpha/2}} \mathbb{P}(y)\,dy &\le \int_{D_\alpha}\int_{B(y,\alpha/2e)} \mathbb{P}(x)\,dx\,dy \\ &\le e^{-k_0}\int_{D_\alpha}\int_{B(y,\alpha/2)} \mathbb{P}(x)\,dx\,dy \\ &\le e^{-k_0}\omega_{3N}\,(2\alpha)^{3N}\int_{D_{2\alpha}} \mathbb{P}(y)\,dy.\end{aligned}$$

现在注意到 $k_0 + 2 \ge \frac{\ln(e^2)\,2\ln(1+\delta)}{4\delta} \ge \frac{2}{4\delta} = \frac{\sqrt{A}}{2e}$，因此 $e^{-k_0} \le 10e^{-\frac{\sqrt{A}}{2e}}$。特别地

$$\int_{D_{\alpha/2}} \mathbb{P}(y)\,dy \le 10e^{-\frac{\sqrt{A}}{2e}+3N\ln(4e)} \int_{D_{2\alpha}} \mathbb{P}(y)\,dy;$$

注意到，由于 $A \gg N^2$，我们有 $\frac{\sqrt{A}}{2e} - 3N\ln(4e) \ge \frac{\sqrt{A}}{6}$。 □

证明。（定理 1.1 和定理 1.2）首先注意到，如果 ψ_ε 是（1）的极小化子，那么 $\mathbb{P}_\varepsilon = |\psi_\varepsilon|^2$ 是（9）的极小化子。接着注意到，如果 $m(2\alpha) \le 8(N-1)M(\beta/2)$ 且 $\varepsilon N^2 \ll \alpha^2 m(2\alpha)$，那么我们也有 $\alpha < \alpha_0$，因此可以应用定理 5.1。由此，利用 $\mathbb{P}_\varepsilon$ 是概率密度这一点，即可完成证明，因此 $\int_{D_{2\alpha}} \mathbb{P}_\varepsilon(y)\,dy \le 1$。利用 $m(t) = M(t) = 1/t$，即可推出定理 1.1 的结论。□

致谢。本工作部分内容是在 Research in Pairs 项目期间完成的，其间作者于2017年1月受邀访问 MFO（奥伯沃尔法赫数学研究所）。S.D.M. 是 GNAMPA（INdAM）成员。A.G. 感谢加拿大研究主席计划和加拿大自然科学与工程研究理事会对其研究提供的部分资助。L.N. 在2022—2023年以学术休假身份暂时加入 Inria（Matherials团队），并感谢该机构在此期间给予的接待。他的工作得到了一项公共拨款的支持，该拨款属于未来投资项目，项目编号为 ANR-11-LABX-0056-LMH，LabEx LMH，并获得 H-Code、巴黎-萨克雷大学的资助。作者感谢 M. Lewin 对本文初稿提出的意见（及提供的参考文献）。

参考文献

[1] Jean-David Benamou、Guillaume Carlier 和 Luca Nenna。用数值方法求解带库仑代价的多边缘最优传输问题。第577–601页，2016年。[2] Ugo Bindini 和 Luigi De Pascale。带库仑代价的最优传输与密度泛函理论的半经典极限。*J. Éc. polytech. Math.*，4：909–934，2017年。[3] Ugo Bindini、Luigi De Pascale 和 Anna Kausamo。关于带库仑代价的多边缘最优传输的 Seidl 型映射。*arXiv* 预印本 *arXiv:2011.05063*，2020年。[4] G. Buttazzo、T. Champion 和 L. De Pascale。带奇异代价的多边际最优传输问题的连续性与估计。*Appl. Math. Optim.*，2017年8月。[5] Giuseppe Buttazzo、Luigi De Pascale 和 Paola Gori-Giorgi。电子密度泛函理论的最优传输表述。*Phys. Rev. A*，85：062502，2012年6月。[6] Huajie Chen 和 Gero Friesecke。密度泛函理论中的对密度。*MultiscaleModeling & Simulation*，13(4)：1259–1289，2015年。[7] Maria Colombo、Luigi De Pascale 和 Simone Di Marino。一维排斥代价下的多边际最优传输映射。*Canad. J. Math.*，67：350–368，2015年。[8] Maria Colombo 和 Simone Di Marino。带库仑代价的 Monge 与 Kantorovich 多边际问题之间的等式。*Ann. Mat. Pura Appl. (4)*，194(2)：307–320，2015年。[9] Maria Colombo、Simone Di Marino 和 Federico Stra。带排斥代价的多边际最优传输的连续性。*SIAM J. Math. Anal.*，51(4)：2903–2926，2019年。[10] Maria Colombo、Simone Di Marino 和 Federico Stra。Levy-Lieb泛函半经典极限中的一阶展开。*arXiv* 电子论文，文章 arXiv:2106.06282，2021年6月。[11] Maria Colombo 和 Federico Stra。带库仑代价且具有球对称数据的多边际最优传输中的反例。*Mathematical Models and Methods inApplied Sciences*，26(06)：1025–1049，2016年。[12] Codina Cotar、Gero Friesecke 和 Claudia Klüppelberg。密度泛函理论与带库仑代价的最优传输。*Comm. Pure Appl. Math.*，66(4)：548–599，2013年。[13] Codina Cotar、Gero Friesecke 和 Claudia Klüppelberg。具有固定边缘分布的传输计划的光滑化以及 Hohenberg-Kohn 泛函的严格半经典极限。*Arch.Ration. Mech. Anal.*，228(3)：891–922，2018年。[14] Rafael Coyaud、Virginie Ehrlacher、Damiano Lombardi 等。带边缘矩约束的最优传输问题的近似。技术报告，2019年。[15] H. L. Cycon、R. G. Froese、W. Kirsch 和 B. Simon。薛定谔算子及其在量子力学和整体几何中的应用。《物理学中的教材与专著》。Springer-Verlag，柏林，学习版，1987年。[16]Luigi De Pascale。带库仑代价的最优传输：近似与对偶性。*ESAIM Math. Model. Numer. Anal.*，49(6)：1643–1657，2015年。[17] Simone Di Marino、Augusto Gerolin 和 Luca Nenna。排斥代价下的最优传输理论，载于《*Radon* 计算与应用数学系列》“应用科学中的拓扑优化与最优传输”卷，第9章，第204–256页。De Gruyter，2017年6月。[18] Simone Di Marino、Augusto Gerolin、Luca Nenna、Michael Seidl 和 Paola Gori-Giorgi。准备中。[19] Simone Di Marino、Mathieu Lewin 和 Luca Nenna。巨正则系综最优传输。*arXiv* 预印本 *arXiv:2201.06859*，2022年。[20] Gero Friesecke。多边际最优传输中 Monge 假设的一个简单反例、Kantorovich 计划集合的凸几何以及 Frenkel–Kontorova 模型。*SIAM Journal on Mathematical Analysis*，51(6)：4332–4355，2019年。

[21] Gero Friesecke、Augusto Gerolin和Paola Gori-Giorgi。密度泛函理论的强相互作用极限。*arXiv*预印本 *arXiv:2202.09760*，2022年。[22] Gero Friesecke、Andreas S. Schulz和Daniela Vögler。遗传列生成：高维多边际最优传输问题的快速计算。即将发表于 *SIAM*科学计算杂志，*arXiv*预印本：*arXiv:2103.12624*，2021年。[23] Augusto Gerolin、Juri Grossi和Paola Gori-Giorgi。通过对严格关联电子问题进行熵正则化得到的动能关联泛函。《化学理论与计算杂志》，16(1):488–498，2019年。[24] Augusto Gerolin、Anna Kausamo和Tapio Rajala。度量空间中具有排斥性代价的多边际最优传输对偶理论。《*ESAIM*：控制、优化与变分法》，25:62，2019年。[25] Yuehaw Khoo、Lin Lin、Michael Lindsey和Lexing Ying。二次量子化下严格关联电子多边际最优传输的半定松弛，2019年。[26] Michael K.-H. Kiessling。玻色原子或离子基态的Born系综Hartree极限。《数学物理杂志》，53(9):095223，2012年。[27] G. Lani、S. Di Marino、A. Gerolin、R. van Leeuwen和P. Gori-Giorgi。绝热严格关联电子泛函：核函数与精确性质。《物理化学化学物理》，18:21092–21101，2016年。[28] Mel Levy。电子密度、一阶密度矩阵和自然自旋轨道的普适变分泛函及 v-可表示性问题的解。《美国国家科学院院刊》，76(12):6062–6065，1979年。[29] Mathieu Lewin。密度泛函理论中Levy-Lieb泛函的半经典极限。《巴黎科学院数学报告》，356(4):449–455，2018年。[30] Mathieu Lewin、Elliott H Lieb和Robert Seiringer。密度泛函理论中的普适泛函。*arXiv*预印本 *arXiv:1912.10424*，2019年。[31] Elliott H. Lieb。库仑系统的密度泛函。《国际量子化学杂志》，24:243–277，1983年。[32] Elliott H. Lieb和Michael Loss。《分析》，第14卷，数学研究生教材。美国数学会，普罗维登斯，罗得岛州，第2版，2001年。[33] Simone Di Marino和Augusto Gerolin。薛定谔桥问题的最优传输方法及Sinkhorn算法的收敛性，2019年。[34] A. Mirtschink、C. J. Umrigar、J. D. Morgan III和P. Gori-Giorgi。将强耦合极限得到的能量密度泛函应用于He等电子系列的阴离子。《化学物理杂志》，140(18):18A532，2014年。[35] Nicolas Rougerie。德·菲内蒂定理、平均场极限与玻色–爱因斯坦凝聚。Spartacus-idh，巴黎，2016年。法国公学院 Peccot 课程（2014年）。[36] M. Seidl、S. Di Marino、A. Gerolin、L. Nenna、K. J. H. Giesbertz和P. Gori-Giorgi。重新审视球对称系统的严格关联电子泛函。*ArXiv*电子预印本，2017年2月。[37] Michael Seidl。密度泛函理论的强相互作用极限。《物理评论*A*》，60:4387–4395，1999年12月。[38] Michael Seidl、Paola Gori-Giorgi和Andreas Savin。密度泛函理论中的严格关联电子：一般表述及其在球对称密度中的应用。《物理评论*A*》，75:042511，2007年4月。[39] Michael Seidl、John P. Perdew和Mel Levy。密度泛函理论中的严格关联电子。《物理评论*A*》，59:51–54，1999年1月。

[40] Stefan Vuckovic、Augusto Gerolin、Timothy J Daas、Hilke Bahmann、Gero Friesecke和Paola Gori-Giorgi。基于密度泛函理论强相互作用极限数学结构的密度泛函。《*Wiley*跨学科评论：计算分子科学》，第e1634页，2022年。

Simone Di Marino，热那亚大学（DIMA）、MaLGA，热那亚，意大利

电子邮箱: simone.dimarino@unige.it

Augusto Gerolin，渥太华大学数学与统计系和化学与生物分子科学系，渥太华，加拿大
电子邮箱: agerolin@uottawa.ca

Luca Nenna，巴黎-萨克雷大学，法国国家科学研究中心，奥赛数学实验室，91405，奥赛，法国。

电子邮箱: luca.nenna@universite-paris-saclay.fr