arXiv:2303.01273v2 [math.NA] 4 Jul 2023

非线性特征值问题的 *a posteriori* 误差估计与后处理方法综述

Genevi`eve Dusson*[1] 和 Yvon Maday†[2]

[1]法国弗朗什-孔泰大学，贝桑松数学实验室，CNRS混合研究单位6623，格雷路16号，邮编25000，贝桑松，法国[2]索邦大学、法国国家科学研究中心、巴黎西岱大学，雅克-路易·利翁实验室（LJLL），F-75005巴黎，法国，以及法国大学研究院。

摘要

本文综述了非线性特征值问题背景下提出的各种后验误差分析和后处理方法，例如电子结构计算中用于求解基态的问题，并对这些方法进行了比较。我们给出了两种等价的误差重构方法：一种基于极小化能量的二阶泰勒展开，另一种基于非线性特征值方程的一阶展开。随后，我们展示了如何将若干后验误差估计和后处理方法表述为所推导出的重构误差的具体应用，并比较了它们的适用范围、数值成本和精度。

1 引言

非线性特征值问题广泛出现在科学与工程领域使用的许多数学模型中，例如在非线性弹性框架下计算机械结构的振动模态、描述玻色–爱因斯坦凝聚体稳态的 Gross–Pitaevskii 方程的基态 [50]，，或 Hartree–Fock 和 Kohn–Sham 方程的基态（[43] 这些方程用于计算量子化学和材料科学中分子系统的基态电子结构（数学介绍见 [9] ）。

这类问题的解的近似至关重要，针对不同的应用场景，人们提出了多种计算方法。这些近似方法基于不同的要素。首先是自由度的概念，它与用于近似求解这些问题的基组相关，由此得到离散问题，最终可在计算机上求解。其次，所得离散问题必然是非线性的，因此必须设计高效算法，以合理的计算成本准确求解这些问题。对于本文研究的问题，主要有两类方法。第一类是算法

*genevieve.dusson@math.cnrs.fr
†yvon.maday@sorbonne-universite.fr

直接极小化能量泛函，例如使用牛顿型方法求解鞍点问题 [2, 3], 投影 Sobolev 梯度流方法 [39, 27, 32, 34, 52, 62, 1]。第二类方法求解相应的一阶欧拉–拉格朗日方程，其形式为非线性特征值问题，并基于自洽场（SCF）算法 [47, 53, 5, 15, 22, 55]。 [14], 提出了一项比较直接极小化方法与 SCF 算法的分析，另见其中的参考文献。

这两种近似要素必须经过妥善调校，使近似解与对应的精确解足够接近。此外，由于精确解未知，需要提出估算精确解与近似解之间误差的方法。这些方法通常依赖所谓的先验分析和后验分析：先验分析旨在给出近似解趋近精确解的收敛率，而后验分析则推导出误差界，这些误差界应仅取决于可由近似解计算的量，从而评估近似解的精度。近年来，关于流体力学、固体力学等领域中以偏微分方程形式提出的问题之解的数值近似分析，已有大量文章发表；例如，可参见专著 [56] ，该专著主要关注达到给定精度所需的自由度数量。

就本文所讨论的非线性特征值问题而言，相关的先验分析是近期才发展起来的，主要基于论文 [9, 64, 7, 18, 40, 8, 17] 及其中引用的文献。这些文章研究离散化误差，即在近似求解所关注的问题时，由采用给定数量的自由度所导致的误差。它们给出了收敛率，也就是自由度数量增加时误差衰减速率的上界——分别针对特征向量和特征值。

这些先验方法首先可以说明：i）只要计算资源充足，就能够获得令人满意的近似；这就是收敛的概念。其次，ii）对于维数为 d 的问题，将自由度数量增加到原来的 2^d 倍，可使误差降低 2^r 倍，其中 r 与该方法的收敛阶有关。然而，这些结果通常并不足够，因为大多数情况下，由于方法的计算成本较高（其计算成本可能关于自由度数量呈多项式增长，例如 $[2^d]^p$，其中 p 可以是 $\simeq 5$ 或 10），可承受的离散化规模有限。因此，人们更关注的是，在采用给定的离散化方法完成计算后，估计误差的大小。这正是后验方法（估计器和指标）的设计目的。这些分析通常不给出收敛速率，而是提供具体数值，作为精确量与近似量之间误差的上界（如今大多数情况下也给出下界）；在此语境下，这些量包括能量、特征值、波函数（特征函数）等。此外，这些方法还可以帮助优化自由度（例如基函数）的选取，以尽可能降低达到给定精度所需的计算成本。

据我们所知，关于非线性特征值问题后验估计的首篇论文是 [46], ，该文对 Hartree–Fock 问题进行了后验分析，并针对基态能量提出了误差上界和下界。此后又有其他相关研究，例如 [21, 18, 20], ，该文在有限元离散化的背景下给出了非线性特征值问题的误差界；另请参阅 [11, 25]中关于傅里叶（平面波）离散的后验结果。

此外，还要提及双网格方法。这类方法的设计目的并非直接给出误差界，而是以较低的计算成本获得精确解。这类方法的第一步是通过完整计算——在此即求解一个非线性特征值问题——并限制自由度的数量来求得粗略解。由于涉及的自由度较少，这一步的计算成本应当相对较低。第二步则是进行更简单的计算，例如求解线性特征值问题或边值问题，并采用更多自由度来改进粗略解。针对非线性特征值问题，双网格方法的例子包括： [33, 6] 中针对 Gross–Pitaevskii 型方程提出的方法，以及 [12] 中针对 Kohn–Sham 模型提出的方法，后者采用了扰动方法。我们将在下文看到，这些双网格方法所用的分析技术与早期后验方法所用的技术可能非常相似。

上文引用的不同文献在方法上有一些共同之处，但它们针对的问题各不相同，边界条件可能也不同，且采用了不同的离散化方法。因此，直接比较这些方法相当困难。本文旨在通过统一的框架对它们进行比较，阐明其主要的异同（见表 1）。为此，我们将在一个简单的非线性特征值问题框架下介绍所有方法。具体而言，我们考虑周期设定，此时区域 Ω 是周期晶格 $\mathcal{R}$ of $\mathbb{R}^d$ and $X = H^1_{\#}(\Omega)$ 的原胞，其中 $d = 1$ 为 2 或 3。于是，对所有 $s \in \mathbb{R}^+$ and $k \in \mathbb{N}$[1],

$$\begin{aligned} H^s_{\#}(\Omega) &= \left\{ v_{|\Omega},\ v \in H^s_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^d) \mid v \text{ is } \mathcal{R}\text{-periodic} \right\}, \\ H^{-s}_{\#}(\Omega) &= [H^s_{\#}(\Omega)]' \quad (\text{dual space of } H^s_{\#}(\Omega)), \\ C^k_{\#}(\Omega) &= \left\{ v_{|\Omega},\ v \in C^k(\mathbb{R}^d) \mid v \text{ is } \mathcal{R}\text{-periodic} \right\}. \end{aligned}$$

接下来，我们重点研究变分模型中出现的一类特殊的（线性和）非线性特征值问题，其形式为

$$I = \inf \left\{ \mathcal{E}(v),\ v \in X,\ \int_\Omega v^2 = 1 \right\}, \tag{1.1}$$

它与如下形式的能量泛函 $\mathcal{E}$ 相关:

$$\mathcal{E}(v) = \frac{1}{2} a(v,v) + \frac{\mu}{2} \int_\Omega G(v^2(x))\, dx, \quad v \in X, \tag{1.2}$$

其中， $\mu = 1$ （非线性情形）是我们关注的情形，但也可能有对应于线性情形的 $\mu = 0$ ，并且

1. 积分中涉及给定函数 G 的项依赖于解的平方（v^2），以模拟我们主要关注的电子结构计算问题，例如 Hartree–Fock 和科恩–沈问题。在这些问题中，非线性项取决于电子密度 ρ；当能量泛函仅依赖于 X中的一个函数时，这对应于 v^2 。下文中，我们用 g 表示 G的导数。

[1]注意， $L^2_{\#}(\Omega)$ 与 $L^2(\Omega)$ 一致

2. 双线性型 a 定义为

$$a(u,v)=\int_\Omega (A\nabla u)\cdot\nabla v+\int_\Omega Vuv.$$

3. 我们对能量中出现的各元素作如下假设

- $A\in(L^\infty(\Omega))^{d\times d}$； $A(x)$ 对几乎所有 $x\in\Omega$ 对称；$\exists\,\alpha>0$ 使得 $\xi^T A(x)\xi\geq\alpha|\xi|^2$，且几乎所有 $x\in\Omega$；
- $V\in L^p(\Omega)$，其中某个 $p>\max(1,d/2)$；
- $G\in C^1([0,+\infty)\ \mathbb{R})\cap C^2((0,\infty)\ \mathbb{R})$ $g=G'$， $g(0)=0$ 且在 $(0,+\infty)$ 上；$\exists\,0\leq q<2$，使得 $\forall t\geq 0$， $|g(t)|\leq C(1+t^q)$；
- $g'(t)t$ 在 $[0,+\infty)$ 上局部有界。

(1.3)

在 (1.3) 中假设 $g(0)=0$ 不失一般性，因为若将 $G(t)$ 替换为 $G(t)+ct$，(1.1) 的极小化子不会改变，这是由于对 (1.1) 的解施加了归一化约束。

众所周知（例如参见 [7] 中的引理 2），在这些假设下，问题 (1.1) 恰有两个极小化子 u 和 $-u$，其中一个（记作 u）在 Ω 上为正。在下文中， u 将表示 (1.1) 的正极小化子。引入福克算子，对任意 $u\in X$，定义为$\mathcal{A}_u=D_v\mathcal{E}(u)$，即

$$\mathcal{A}_u=-\mathrm{div}A\nabla+V+\mu g(u^2). \tag{1.4}$$

于是，我们将对应于线性情形的算子记为 $\mathcal{A}$，即对于 $\mu=0$，从而

$$\mathcal{A}=-\mathrm{div}A\nabla+V. \tag{1.5}$$

写出问题 (1.1) 的欧拉–拉格朗日方程，可得函数 u 是非线性特征值问题的解

$$\forall v\in X,\quad \langle\mathcal{A}_u u-\lambda u,v\rangle_{X',X}=0, \tag{1.6}$$

其中，特征值 $\lambda\in\mathbb{R}$ 是与约束条件 $\|u\|_{L^2}=1$相对应的拉格朗日乘子。方程 (1.6) 加上约束条件 $\|u\|_{L^2}=1$，可写为

$$\begin{cases}\mathcal{A}_u u=\lambda u,\\ \|u\|_{L^2}=1.\end{cases} \tag{1.7}$$

注意，对于任意 $v\in X$， $\mathcal{A}_v$ 都是作用于 $L^2(\Omega)$ 上、型定义域为 X 的线性自伴算子。由此可从 (1.7) 推知， $u\in X\cap C^0(\Omega)$， $u>0$ 属于 Ω，且 $\overline{\lambda}$ 是问题 (1.7) 的最低特征值，称为 $\mathcal{A}_u$的基态特征值。不过需要注意，在某些情况下，最低特征值并不对应最低能量，例如具有旋转磁场的 Gross–Pitaevskii 方程，参见 [1, 第 6 节。1]对于量子化学方程，例如 Kohn–Sham 方程或 Hartree–Fock 方程，有一条称为构造原理的规则指出，基态确实对应于非线性算子 $\mathcal{A}_u$的最低特征值。一个重要

之处在于， λ 是 $\mathcal{A}_u$的单特征值。这些结果是经典的；其证明见 [7]。

我们现在考虑一族有限维子空间（X_δ）$_{\delta>0}$，它们属于 X （协调近似 $X_\delta \subset X$），满足

$$\forall v \in X, \quad \lim_{\delta\to 0} \min_{v_\delta \in X_\delta} \|v - v_\delta\|_X = 0. \tag{1.8}$$

一个例子是傅里叶离散。设 $\Omega = (0,\ 2\pi)^d$。对于任意 $k \in \mathbb{Z}^d$，我们通过 $e_k(x) = (2\pi)^{-d/2} e^{ik\cdot x}$ 定义平面波 e_k。接下来，我们考虑由参数 M 索引的离散空间；当空间增大时，该参数也随之增大（即对应于上面的 $1/\delta$）

$$X_M = \mathrm{Span}\left\{e_k,\ k \in \mathbb{Z}^d,\ |k| \le M\right\}, \tag{1.9}$$

其中， $|k|$ 表示所谓波矢 k 的 l^2-范数。

式（1.1）的变分近似随后通过求解

$$I_\delta = \inf\left\{\mathcal{E}(v_\delta),\ v_\delta \in X_\delta,\ \int_\Omega v_\delta^2 = 1\right\}. \tag{1.10}$$

问题 问题（1.10）至少有一个极小化子 u_δ，使得（u, u_δ）$_{L^2} \ge 0$，其满足

$$\forall v_\delta \in X_\delta, \quad \langle \mathcal{A}_{u_\delta} u_\delta, v_\delta\rangle_{X',X} = \lambda_\delta (u_\delta, v_\delta)_{L^2}, \tag{1.11}$$

对于某个 $\lambda_\delta \in \mathbb{R}$。容易看出（例如参见 [7, 63]）

$$\lim_{\delta\to 0} \|u - u_\delta\|_X = 0, \tag{1.12}$$

或者说，近似基态特征函数在 $H^1_\#$-范数下收敛到精确基态特征函数，由此可推得，当 δ 趋于 0 时，I_δ 和 λ_δ 分别收敛到 I 和 λ。在对非线性项 G作出更强假设的条件下，文献 [7]针对谱傅里叶离散和有限元离散化方法得到了最优收敛率。首先，在对 $\mathcal{A}$作出适当且符合实际的假设时，有

$$\|u - u_\delta\|_X \lesssim \min_{v_\delta \in X_\delta} \|u - v_\delta\|_X, \tag{1.13}$$

其中，我们用 $a \lesssim b$ 表示不等式 $a \le Cb$， $C > 0$ 为与离散化参数 δ无关的常数。此外，特征值的收敛速度要快得多，这与线性情形类似：特征值的收敛速度相较于特征向量呈二次收敛，即

$$|\lambda_\delta - \lambda| \lesssim \|u - u_\delta\|_X^2, \quad \text{for } \mu = 0. \tag{1.14}$$

在非线性情形下，还会出现一个涉及 $L^{6/(5-2q)}$ 范数的附加项；在额外的正则性假设下，该项可以吸收到 $\|u-u_\delta\|_X^2$ 项中，这里不再详述（关于此问题的准确说明，请参见 [7,Remark 3]）。此外，误差的 L^2 范数 $u-u_\delta$ 以及其负索 Sobolev 范数的收敛速度都快于误差的 $H^1_\#$ 范数。最后，残差的对偶范数与误差的 $H^1_\#$ 范数具有相同的渐近行为，即

$$\|u - u_\delta\|_X \lesssim \|\mathcal{A}_{u_\delta} u_\delta - \lambda_\delta u_\delta\|_{X'} \lesssim \|u - u_\delta\|_X.$$

第一个不等式并非显然，因为该问题是一个特征值问题；不过，对于 Gross–Pitaevskii 方程，这一点已在 [25]，中证明；对于拉普拉斯特征值问题，则已在 [13] 中证明。

本文的结构如下。第 2 节中，我们介绍两种等价的方法，用于近似精确解与近似解之间的误差：第一种基于极小化问题 (1.1)，第二种基于特征值问题 (1.6)。随后，我们介绍几种不同的后处理方法，这些方法基于前文给出的误差重构及其近似形式。第 3 节中，我们展示这一重构误差也出现在针对该问题提出的后验误差估计中，并对不同的贡献进行比较，揭示其主要特点和适用范围，例如所考虑的模型和离散化方法。

2 重构误差推导的两种方法

本节介绍在这一背景下估计误差的两种不同方法。一种基于能量极小化问题，通过考察能量泛函的二阶泰勒展开来进行。另一种则基于非线性特征值问题的一阶泰勒展开。由于非线性特征值问题对应于极小化问题的一阶欧拉–拉格朗日方程，因此这两种方法最终等价是很自然的。然而，由于方程的非线性结构以及对解向量的范数约束，推导过程并不简单。我们将介绍这两种推导，以突出它们的相似之处和差异，并指出采用这些方法的不同参考文献。

请注意，下面针对重构误差得到的方程与 [54] 中针对一般方程（无约束）所给出的方程类似。此外，[10], 中也提出了这样的泰勒展开和一阶误差重构，用于计算涉及多个特征值的材料系统平面波电子结构计算中的基态能量。

2.1 基于能量最小化问题的方法

在 [46] 中针对 Hartree–Fock 问题提出并分析的这种方法，其初始思路是根据 $\mathcal{E}(u_\delta)$ 的信息，为基态能量 $\mathcal{E}(u)$ 提供一个下界和一个上界。当然，由于协调离散化的变分表述，下面的上界是经典结果

$$\mathcal{E}(u_\delta) \geq \mathcal{E}(u).$$

为了得到下界，思路是考虑能量的二阶泰勒展开。在此之前，我们先引入一个记号：对于任意 $v \in X$，

$$\Lambda_v = \langle \mathcal{A}_v(v), v \rangle_{X',X},$$

使得（1.7）中的最小特征值满足 $\lambda = \Lambda_u$。接着，我们引入该问题的拉格朗日函数，它定义在 $v \in X$，$\nu \in \mathbb{R}$ 上，形式如下：

$$\mathcal{L}(v, \nu) = \mathcal{E}(v) - \nu \left(\int_\Omega v^2 - 1 \right),$$

并将 $\mathcal{E}^w(v)$ 定义为拉格朗日函数在某个 Λ_w 处的取值，即

$$\mathcal{E}^w(v) = \mathcal{L}(v, \Lambda_w) = \mathcal{E}(v) - \Lambda_w \left(\int_\Omega v^2 - 1 \right).$$

对于 $w \in X$，记 $D_v\mathcal{E}^w$ 为 $v \in X \mapsto \mathcal{E}^w(v)$ 的微分，则有

$$\forall w \in X, \quad \langle [D_v\mathcal{E}^u](u), w \rangle_{X',X} = 0, \tag{2.1}$$

若 u_δ 是离散问题 (1.11) 的解，则

$$\forall w_\delta \in X_\delta, \quad \langle [D_v\mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta), w_\delta \rangle_{X',X} = 0. \tag{2.2}$$

将 X 和 X_δ 上的两个极小值之间的能量差作二阶泰勒展开，得到

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(u_\delta) - \mathcal{E}(u) &= \mathcal{E}^{u_\delta}(u_\delta) - \mathcal{E}^{u_\delta}(u) \\ &= \langle [D_v\mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta), u_\delta - u \rangle_{X',X} - \frac{1}{2} \langle [D_v^2\mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta)(u_\delta - u), u_\delta - u \rangle_{X',X} + o(\|u - u_\delta\|_X^2). \end{aligned}$$

注意到 $(u - u_\delta, u_\delta)_{L^2} = -\frac{1}{2}\|u_\delta - u\|_{L^2}^2$，并定义 $\varepsilon_0 = \|u_\delta - u\|_{L^2}$，我们可以得出

$$u - u_\delta = -\frac{1}{2}\varepsilon_0^2 u_\delta + w, \quad \text{with} \quad w \perp u_\delta,$$

其中 $\|w\|_X \simeq \varepsilon = \|u_\delta - u\|_X$，当然还有 $\varepsilon_0 \leq \varepsilon$。利用上述分解和 (2.2)，能量差可写为

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(u_\delta) - \mathcal{E}(u) &= \langle [D_v\mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta), \frac{1}{2}\varepsilon_0^2 u_\delta - w \rangle_{X',X} \\ &\quad - \frac{1}{2} \langle [D_v^2\mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta) \left(\frac{1}{2}\varepsilon_0^2 u_\delta - w \right), \frac{1}{2}\varepsilon_0^2 u_\delta - w \rangle_{X',X} + o(\varepsilon^2) \\ &= -\langle [D_v\mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta), w \rangle_{X',X} - \frac{1}{2} \langle [D_v^2\mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta)(w), w \rangle_{X',X} + o(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

引入双线性型 $a_v \equiv [D_v^2\mathcal{E}^v](v)(.,.) = \langle [D_v^2\mathcal{E}](v)(.)\,.\rangle_{X',\ X} - \Lambda_v \langle .,. \rangle_{X',\ X}$，上一个方程可写为

$$\mathcal{E}(u_\delta) - \mathcal{E}(u) = -\langle [D_v\mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta), w \rangle_{X',X} - \frac{1}{2} a_{u_\delta}(w, w) + o(\varepsilon^2). \tag{2.3}$$

利用较小特征值是单重的这一事实，即 $\lambda_2 - \lambda > 0$ 与 $\mathcal{A}_u$的前两个特征值之间存在间隙，参见例如 [7], 中的引理 1，可得：

Pr命题 2.1. 存在一个常数 $c_u > 0$，使得对于任意的 $v \in X$、 $v \perp u$ ，

$$a_u(v, v) \geq c_u \|v\|_X^2.$$

由此结果，我们得到以下命题。

命题 2.2. 假设 $\varepsilon := \|u - u_\delta\|_X$ 足够小，则存在一个常数 $c_{u_\delta} > 0$，使得对于任意 $v \in X, v \perp u_\delta$

$$a_{u_\delta}(v, v) \geq c_{u_\delta} \|v\|_X^2.$$

利用这一命题，我们推导出存在一个唯一解 $\hat{w} \in X^{\perp}$ （其中 $X^{\perp}$ 是 X 中 u_δ 的正交补），称为重构误差，使得

$$a_{u_\delta}(\hat{w}, \psi) = -\langle [D_v \mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta), \psi \rangle_{X',X} \quad \forall \psi \in X \tag{2.4}$$

由此可将 (2.3) 改写为

$$\mathcal{E}(u) = \mathcal{E}(u_\delta) - \frac{1}{2} a_{u_\delta}(\hat{w}, \hat{w}) + \frac{1}{2} a_{u_\delta}(w - \hat{w}, w - \hat{w}) + o(\varepsilon^2) \tag{2.5}$$

并使作者得到 [46] 中的不等式

$$\mathcal{E}(u) \geq \mathcal{E}(u_\delta) - \frac{1}{2} a_{u_\delta}(\hat{w}, \hat{w}) + o(\varepsilon^2), \tag{2.6}$$

因此， $\mathcal{E}(u_\delta) - \frac{1}{2} a_{u_\delta}(\hat{w}, \hat{w})$ 是精确能量 $\mathcal{E}(u)$ 的渐近下界。

为了计算这一重构误差及其相应的下界，我们必须求解问题 (2.4)。当然，该问题无法精确求解，因此需要在比 X_δ 更大的空间 X_{δ_f} 中进行离散化。该问题表述如下：求 $\hat{w}_{\delta_f} \in X_{\delta_f}^{\perp}$ （其中 $X_{\delta_f}^{\perp}$ 是 X_{δ_f} 中 u_δ 的正交补），使得

$$\langle (\mathcal{A} + 2g'(u_\delta^2)u_\delta^2 + g(u_\delta^2) - \lambda_\delta)\hat{w}_{\delta_f}, \psi_{\delta_f} \rangle_{X',X} = -\langle (\mathcal{A} + g(u_\delta^2) - \lambda_\delta)u_\delta, \psi_{\delta_f} \rangle_{X',X} \quad \forall \psi_{\delta_f} \in X_{\delta_f}^{\perp}. \tag{2.7}$$

稍后我们将看到，注意到 w 与 $\hat{w}$ ——或者更确切地说，其离散表示 $\hat{w}_{\delta_f}$ —— ε^2 接近，可以进一步改进这一结果。事实上，我们首先注意到

$$[D_v \mathcal{E}^{u_\delta}](u) = [D_v \mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta) + [D_v^2 \mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta)(u - u_\delta) + o(\varepsilon).$$

由于

$$[D_v \mathcal{E}^{u_\delta}](u) = [D_v \mathcal{E}^{u}](u) + (\lambda_\delta - \lambda)u,$$

利用 (2.1) 和 (1.14)，我们证明

$$[D_v \mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta) + [D_v^2 \mathcal{E}^{u_\delta}](u_\delta)(u - u_\delta) = o(\varepsilon). \tag{2.8}$$

结合 (2.4) 和 (2.8)，我们可以推得，对于任意 $\psi \in X$

$$a_{u_\delta}(u - u_\delta - \hat{w}, \psi) = o(\varepsilon)\|\psi\|_X. \tag{2.9}$$

由于 $\|u - u_\delta - w\|_X = O(\varepsilon^2)$，有

$$a_{u_\delta}(w - \hat{w}, \psi) = o(\varepsilon)\|\psi\|_X,$$

命题 2.1 与 (2.1) 一起表明

$$\|w - \hat{w}\|_X = o(\varepsilon). \tag{2.10}$$

利用 (2.5)，我们首先推得 (2.6) 可以改进为等式

$$\mathcal{E}(u) = \mathcal{E}(u_\delta) - \frac{1}{2} a_{u_\delta}(\hat{w}, \hat{w}) + o(\varepsilon^2),$$

其次， $u_\delta + \hat{}w$ 比 u_δ更好地逼近 u 。然而， $u_\delta + \hat{}w$ 的范数尚未为 1。为解决这一问题，还需调整 α^* ，使得$\hat{}u_\delta = (1-\alpha^*)u_\delta + \hat{}w$ 在$L^2(\Omega)$中的范数为 1（这总是可行的，因为 $\|\hat{}w\|_X = O(\varepsilon^2)$[2]）。注意，只有通过在更细的网格上求解线性问题 (2.7)，利用 u_δ 才能计算出$\hat{}u_\delta$ 。

由此，我们在 X-范数和能量方面都获得了二次近似。按照 [46]，我们写作

定理 2.1. 设 若 $\|u - u_\delta\|_X$ 足够小，则 $\hat{}u_\delta = (1-\alpha^*)u_\delta + \hat{}w$ 满足

$$\|u - \hat{u}_\delta\|_X = o(\|u - u_\delta\|_X).$$

此外，若 $G \in C^3((0,\infty)\ \mathbb{R})$，则

$$\|u - \hat{u}_\delta\|_X \lesssim \|u - u_\delta\|_X^2,$$

and

$$|\mathcal{E}(u) - \mathcal{E}(\hat{u}_\delta)| \lesssim \|u - u_\delta\|_X^4.$$

最后两个改进估计可直接通过前述分析得到，只需将 $o(\varepsilon^q)$ 替换为 $\mathcal{O}(\varepsilon^{q+1})$，其中 $q = 0$ 取 1 或 2。

注 2.1. 量 $\hat{}u_\delta$ 和 $\hat{}w$ 可根据 u_δ 计算，在实践中可用于两个不同（互补）的目的。首先，它们可用于对解进行更精细的近似，即 $\hat{}u_\delta$ 比 u_δ 更接近精确解 u ；对于能量，也可类似地使用 $\hat{}w$，即 $\mathcal{E}(u) \simeq \mathcal{E}(u_\delta) - \frac{1}{2}a_{u_\delta}(\hat{}w, \hat{}w)$。其次，它们可用于获得更精细的误差界，如 $|\mathcal{E}(u) - \mathcal{E}(u_\delta)| \simeq \frac{1}{2}a_{u_\delta}(\hat{}w, \hat{}w)$。这两种可能的做法将在第 2.3 节和第 3 节中分别详细说明。

注 2.2. 值得一提的是，有一些研究从能量最小化的角度考察了这类非线性特征值问题，即 *[39, 26, 34, 32, 62]*。在 *[32],* 中，目标是通过直接最小化能量，并结合梯度流迭代与自适应有限元网格细化，为求解该问题提出一种自适应过程。另一些研究分别证明了连续 Sobolev 梯度流 *[39, 34],* 和离散梯度流 *[26, 62]*的指数收敛性。不过请注意，这些研究并未为计算所得的解提供具体的误差界。

2.2 基于非线性特征值问题的方法

在上一节中，我们从能量极小化问题 (1.1) 出发，推导出了重构误差方程 (2.7)。本节旨在从特征值问题 (1.6) 出发，得到同一方程。该问题表述如下：求 (u,λ)，使得 $\|u\|_{L^2} = 1$ 且

$$\mathcal{F}(u,\lambda) := \mathcal{A}_u(u) - \lambda u = 0. \tag{2.11}$$

为了改进（u_δ， λ_δ），可以考虑在更精细的离散空间 X_{δ_f} 中使用一步牛顿法，如上一节所述，即求解：求 $\tau_{\delta_f} \in X_{\delta_f}$， $(\tau_{\delta_f},\ u_\delta)_{L^2} = 0$

[2]请注意，通过设置$\hat{u}_\delta = \beta^*(u_\delta + \hat{}w)$ 可以得到另一种归一化

以及 $\gamma_{\delta_f} \in \mathbb{R}$，使得

$$\langle [D_v \mathcal{F}](u_\delta, \lambda_\delta)(\tau_{\delta_f}), \psi_{\delta_f} \rangle_{X',X} + \langle [D_\mu \mathcal{F}](u_\delta, \lambda_\delta)(\gamma_{\delta_f}), \psi_{\delta_f} \rangle_{X',X} = \langle \mathcal{F}(u_\delta, \lambda_\delta), \psi_{\delta_f} \rangle_{X',X} \quad \forall \psi_{\delta_f} \in X_{\delta_f}. \tag{2.12}$$

注意，解 τ_{δ_f} 是在 u_δ 的 $L^2(\Omega)$-正交补中求得，而不是在 X中，因为该问题在 X_δ上不适定，因此在 X上条件也不好。这也可以与归一化约束 $\|u_\delta\|_{L^2}^2 = 1$. 联系起来。事实上，该条件保证满足相对于此约束的一阶方程。由于我们有

$$\forall v \in X, \quad \forall \mu \in \mathbb{R}, \quad \mathcal{F}(v, \mu) = (\mathcal{A} + g(v^2) - \mu)v,$$

而 $\mathcal{F}$在 $(u_\delta, \lambda_\delta)$处的微分 $D_v\mathcal{F}(u_\delta, \lambda_\delta)$为

$$\forall v \in X, \quad D_v \mathcal{F}(u_\delta, \lambda_\delta)(v) = (\mathcal{A} + 2g'(u_\delta^2)u_\delta^2 + g(u_\delta^2) - \lambda_\delta)v,$$

细网格上的牛顿法单步迭代，其强形式为：求 $\tau_{\delta_f} \in X_{\delta_f}$，使得 $(\tau_{\delta_f}, u_\delta)_{L^2} = 0$ 满足

$$(\mathcal{A} + 2g'(u_\delta^2)u_\delta^2 + g(u_\delta^2) - \lambda_\delta)\tau_{\delta_f} = -(\mathcal{A} + g(u_\delta^2) - \lambda_\delta)u_\delta \quad \text{in} \quad X_{\delta_f}^\perp, \tag{2.13}$$

这与 (2.7) 类似。因此，我们提出 u_δ 的范数为 1 的改进近似，如下：

$$\widetilde{u}_\delta = (1 - \alpha')u_\delta + \tau_{\delta_f},$$

对于某个 $\alpha' \in \mathbb{R}$。于是，后处理能量与近似能量之差可用于估计精确能量与近似能量之间的误差，即

$$\mathcal{E}(u) - \mathcal{E}(u_\delta) \simeq \mathcal{E}(\widetilde{u}_\delta) - \mathcal{E}(u_\delta).$$

与之前的后验估计 (2.6) 相比，这里的界并无保证。尽管如此，只要空间 X_{δ_f} 足够大，它们渐近地与真实误差相符。

注 2.3. 所提出的过程实际上相当于对修改后的泛函 $\mathcal{F}$ 执行一个标准牛顿步，其中包括下文 (3.1) 中定义的归一化条件 $\|u_\delta\|_{L^2}^2 = 1$ 。因此，牛顿法的二次收敛结果适用于此情形，所提出的后处理会使特征函数的 $X-$范数和能量的收敛率加倍。

2.3 重构误差的实际近似

(2.7) 中给出的重构误差是问题 (1.7) 离散化误差的一阶近似。非线性特征值问题的后处理和误差估计方面的若干研究似乎都基于这一重构误差及其近似形式。本节将概述这些方法并对其进行比较。

本文主要关注非线性特征值问题。不过，后处理方法最初是在非线性特征值问题之前为线性特征值问题而开发的——而线性特征值问题本身实际上也是非线性问题。因此，我们先介绍几种

为线性特征值问题开发的方法。早在1999年，Xu 和 Zhou 就在 [59], 提出了一种双网格方法，用于高效求解特征值问题。该方法首先在粗有限元网格上求解特征值问题，然后在细网格上求解边值问题，以改进特征向量，随后通过瑞利商得到改进后的特征值。这样就无需付出在细网格上求解特征值问题的全部代价。后来，在 [51], 又提出了另一种后处理方法，这次只求得改进后的特征值，同样需要求解一个线性边值问题。

其他研究还包括多重网格方法，例如 [49, 44, 31], ，其思路是先在非常粗的网格上求解一个特征值问题，然后构造一系列网格，并改进初始解

- 要么在越来越细的网格上求解若干线性问题 [44],
- 要么应用某种梯度恢复算子 [31],

以此修正最初求得的特征向量和特征值。

秉承线性特征值问题的双网格和多重网格后处理方法的思路，人们提出了若干用于非线性特征值问题的方法。为了说明这些方法与重构误差方程 (2.13) 的关系，我们先用后处理解 $\widetilde{u}_\delta$ 而不仅仅是修正量 τ_{δ_f}来表示该方程。由 (2.13) 可得

$$(\mathcal{A}+2g'(u_\delta^2)u_\delta^2+g(u_\delta^2)-\lambda_\delta)(u_\delta+\tau_{\delta_f})=(\mathcal{A}+2g'(u_\delta^2)u_\delta^2+g(u_\delta^2)-\lambda_\delta)u_\delta-(\mathcal{A}+g(u_\delta^2)-\lambda_\delta)u_\delta,$$

因此

$$(\mathcal{A}+2g'(u_\delta^2)u_\delta^2+g(u_\delta^2)-\lambda_\delta)(u_\delta+\tau_{\delta_f})=2[g'(u_\delta^2)u_\delta^2]u_\delta.$$

因此，与重构误差对应的细网格上的问题为：求满足以下条件的$u_{\delta_f}\in X_{\delta_f}$

$$(\mathcal{A}+2g'(u_\delta^2)u_\delta^2+g(u_\delta^2)-\lambda_\delta)u_{\delta_f}=2[g'(u_\delta^2)u_\delta^2]u_\delta. \tag{2.14}$$

与这种后处理相关， [6]提出了一种两层离散化技术，作者针对 Gross–Pitaevskii 方程提出了三种不同的方案。所有方案都从在一个较小的基组上求解非线性特征值问题开始。随后提出了三种替代方案。第一种（方案 1）是在较大的基组上求解线性特征值问题，并用粗网格解固定非线性项。第二种（方案 2a）包括求解以下边值问题

$$(\mathcal{A}+g(u_\delta^2))u_{\delta_f}=\lambda_\delta u_\delta \quad \text{in} \quad X_{\delta_f},$$

其中，项 $g(u_\delta^2)$ 保留在等式左侧。第三种方案（称为 2b）是在细空间上求解线性边值问题，并将非线性项置于等式右侧，即求解

$$\mathcal{A}u_{\delta_f}=\lambda_\delta u_\delta-g(u_\delta^2)u_\delta \quad \text{in} \quad X_{\delta_f}. \tag{2.15}$$

针对第一种方案的数值分析给出了平面波近似的以下估计：

$$\begin{aligned}\|u-u_{\delta_f}\|_X &\lesssim M^{-2}\|u-u_\delta\|_X,\\ |\lambda-\lambda_{\delta_f}|+\|u-u_{\delta_f}\|_{L^2} &\lesssim \|u-u_\delta\|_X^2,\\ |E(u)-E(u_{\delta_f})| &\lesssim M^{-4}|E(u)-E(u_\delta)|.\end{aligned}$$

与这种后处理相关的是，早先在 [33] 有限元背景下也提出了一种两层离散化技术，其形式如（2.15）所示，该技术基于 Clement 型算子的拟正交性，因此难以移植到平面波方法中。他们不仅改进了特征函数的近似，也改进了特征值。近期，基于局部正交分解（LOD）的同一方法已扩展至含时 Gross–Pitaevskii 方程和非线性 Gross–Pitaevskii 特征值问题 [23]。

另一项针对非线性特征值问题提出后处理技术的工作是 [12],参见 [13, 24] ，其中给出了估计的证明。该方法基于特征值和特征向量的微扰展开，以极低的计算成本对特征函数和能量进行后处理。该方法针对 Kohn–Sham 方程提出；Kohn–Sham 方程属于非线性特征值问题，需要计算所考虑的非线性算子的若干个低能特征态。该方法首先在较小的平面波空间上求解完整的特征值问题，然后利用推导出的微扰展开，在更大的平面波空间上对特征向量和特征值进行后处理。该方法尤其利用了拉普拉斯算子在平面波表示下的对角结构，因此后处理的计算成本特别低，但也使得该方法难以推广到其他类型的离散化方法。将该方法应用于我们的单特征对非线性问题时，在较大离散空间上求解的线性边值问题旨在计算 $\tau_{\delta_f} \in X_{\delta_f}$ 解，以求得

$$(-\Delta - \lambda_\delta)\tau_{\delta_f} = -(\mathcal{A} + g(u_\delta^2) - \lambda_\delta)u_\delta, \quad \text{in } X_{\delta_f}, \tag{2.16}$$

在算子 $(-\Delta - \lambda_\delta)$ 为对角算子的情况下，每个特征值只需进行两次快速傅里叶变换，即可在细网格上计算残差。与 (2.13) 相比，左侧算子中的一些项被省略了。事实上，这些项已被证明相对于拉普拉斯算子渐近地很小。从误差角度来看，特征向量和能量分别改善了 M^{-2} 倍。因此，这种扰动方法带来的改进有限：特征向量改善 M^{-2}，能量改善 M^{-4} ；而在双网格情形下，特征函数的收敛率可以加倍。尽管如此，这种方法的计算成本要低得多。

除了双网格方法之外，还有使用两个以上网格在细网格基上计算解的近似值的多重网格方法。针对非线性特征值问题，人们已提出了若干此类方法，例如 [38, 37, 58]。在这三项研究中，其思路与双网格情形类似：先在较小的离散空间上求解一个非线性特征值问题，再对解进行后处理。在多重网格情形下，后处理包括多个步骤，通常涉及在规模逐渐增大的空间上求解边值问题；或者是在较大的网格上使用多重网格技术，从而避免在这些网格上求解边值问题。在这种情况下，除第一级外，这些问题的求解无法直接与方程 (2.14) 联系起来。

3 使用重构误差进行 *a posteriori* 误差估计

上一节通过利用重构误差方程提出了对精确解的更优近似 [46], a better approximation $\widetilde{u}_\delta$ ，从而可以用近似解与后处理解之差来估计误差 $u - u_\delta$，即

$$u - u_\delta \simeq \widetilde{u}_\delta - u_\delta.$$

原则上，这种方法适用于任何类型的协调离散化。

我们将在下文看到，在特征值问题的背景下，若干研究采用了这种后处理步骤来估计误差；有时还会对其稍作修改，以获得保证误差界。在一般的非线性问题背景下， [54] 的贡献提出了一种优雅的方法，将后处理步骤与保证误差界结合起来。具体而言，他们考虑了一种所谓的“非分裂残差”，它对应于式（2.12）中引入的重构误差 $[D\mathcal{F}(u,\lambda)]^{-1}(\mathcal{F}(u,\lambda))$，其中 $\mathcal{F}: X \times \mathbb{R} \to X \times \mathbb{R}$ 定义为

$$\mathcal{F}(u,\lambda) := \begin{cases} \mathcal{A}_u(u) - \lambda u \\ \displaystyle\int_\Omega u^2 - 1, \end{cases} \tag{3.1}$$

（相对于式（2.11）， $\mathcal{F}$的记号略有变化），且 $[D\mathcal{F}(u,\lambda)]: \ X \times \mathbb{R} \to X' \times \mathbb{R}$表示 $\mathcal{F}$ 在点 (u,λ) 处的微分。然后（参见 [54, 定理 1]），考虑稳定性常数

$$\gamma(u,\lambda) = \|[D\mathcal{F}(u,\lambda)]^{-1}\|_{\mathcal{L}(X'\times\mathbb{R},X\times\mathbb{R})},$$

以及局部非线性指标

$$L(\alpha) = \sup_{(v,\mu)\in\bar{B}_\alpha(u,\lambda)} \|D\mathcal{F}(v,\mu) - D\mathcal{F}(u,\lambda)\|_{\mathcal{L}(X'\times\mathbb{R},X\times\mathbb{R})},$$

若有效性判据

$$\alpha(u,\lambda) := 2\gamma(u,\lambda)L(2\varepsilon(u,\lambda)) \le 1$$

成立，则问题 $\mathcal{F}(v,\mu) = 0$ 有唯一解 $(u^*,\lambda^*) \in B_{2\varepsilon(u,\lambda)}(u,\lambda)$，且误差有如下界

$$\|(u^*,\lambda^*) - (u,\lambda)\|_Y \le 2\varepsilon(u,\lambda).$$

因此，这提供了一种通用的误差估计方法，代价是需要估计 $\varepsilon(u,\lambda)$ 的大小，而非精确求解重构误差方程。

关于线性特征值问题，已有若干后验误差估计被提出，包括 [41, 28, 42, 36, 48, 35, 29, 10, 45] 及其中的参考文献。这些估计通常基于一个后处理步骤，该步骤能够获得对该问题更精确的解，并且与误差界有或多或少的直接关系。

关于非线性特征值问题，已有多项工作针对本文关注的问题提出了误差估计。 [19], 中提出了误差界，该文介绍了用于 Gross–Pitaevskii 型方程有限元模拟的自适应加密技术。该工作后来在 [16] 中扩展至 Kohn–Sham 方程的有限元模拟。在这两项工作中，误差被证明在渐近意义下由一个误差指标（差一个常数因子）所界定，该指标涉及计算残差的 L^2-范数。然而，这些误差估计并非完全有保证。

在 [25] 中，我们基于谨慎的两步近似，为 Gross–Pitaevskii 方程给出了后验误差估计。通过分析误差的一阶泰勒展开（见第 2.2 节）得到的初步粗略误差界，可以刻画渐近区间，并验证何时能够保证所提出的第二个误差界成立；该误差界与实际误差接近。

因此，在实践中可以检验保证第二个误差界有效的条件。更确切地说，第一个误差界基于牛顿–坎托罗维奇定理（例如，见 [4]）；与 [54] 中的情况类似，该定理给出了确保近似解附近存在精确解的条件，并且精确解与近似解之间的误差有如下界

$$\|u-u_\delta\|_X+|\lambda-\lambda_\delta|\leq 2\|[D\mathcal{F}(u_\delta,\lambda_\delta)]^{-1}\|_{(X',\mathbb{R}),(X,\mathbb{R})}\|\mathcal{F}(u_\delta,\lambda_\delta)\|_{(X',\mathbb{R})}.$$

该估计中的因子 2 可确保吸收泰勒展开的高阶项。这项工作的一个重要部分是证明微分 $D\mathcal{F}$ 在 $(u_\delta,\ \lambda_\delta)$ 处可逆，并对其逆的范数进行估计。事实上，$[D\mathcal{F}(u_\delta,\ \lambda_\delta)]^{-1}$ 的主要部分是 $(\Delta)^{-1}$，它是 X' 与 X 之间的等距映射；而 $[D\mathcal{F}(u_\delta,\ \lambda_\delta)]^{-1}$ 的其余部分，就微分算子而言是低阶项。在本文给出的第二个精细估计中，项 $[D\mathcal{F}(u_\delta,\ \lambda_\delta)]^{-1}\mathcal{F}(u_\delta,\ \lambda_\delta)$ 由 $\Delta^{-1}\mathcal{F}(u_\delta,\ \lambda_\delta)$ 以及补充项来估计；借助第一个估计，证明这些补充项可以忽略不计。渐近地，可得以下估计

$$\|u-u_\delta\|_X\leq\alpha\|\mathcal{F}(u_\delta,\lambda_\delta)\|_{(X',\mathbb{R})},$$

当细化离散化参数 δ 时，α 可以任意接近 1；残差 $\mathcal{F}(u_\delta,\ \lambda_\delta)$ 的第二个分量为零，因为范数约束已得到精确满足。该方法的主要缺点是，获得这些估计的计算成本很高。事实上，为了检验必要假设是否成立，必须在离散空间中求解一个线性特征值问题，并计算最低的两个特征值。请注意，[25] 采用平面波离散化；但与扰动方法不同，它可以推广到其他离散化方法，例如有限元。最后请注意，在实际应用该方法并采用迭代算法求解由此得到的非线性离散问题时，上述估计还可进一步改进，从而将两种误差来源分离开来：离散化误差和迭代误差。

最近有人针对科恩–沈问题 [10] 提出了另一种方法，可准确估计感兴趣量的误差。这项工作同样利用了重构误差方程。此外，所提出的误差界可计算且精确，也就是说，它们接近真实误差。该方法包含一个成本很低的后处理步骤，与 [12], 中的方法类似，即只需在细空间上进行少量快速傅里叶变换。

文献 [57], 对有限元离散化给出了后验估计。要得到可计算的误差上界，还需求解一个辅助边值问题。这些结果具有渐近性，也就是说，它们只对足够细的网格有效，但无法通过后验方式保证网格足够细，从而确保误差界有效。请注意，在有限元方法的框架下，基于普拉格–辛格技术的局部估计器可用于提出替代性的全局误差界，并可通过局部细化有限元网格 [17, 16, 13]来提高精度。

4 结论

本文展示了已求解方程的一阶泰勒展开与后处理方法及误差估计技术之间的联系，并总结了若干相关研究，

尤其是针对非线性特征值问题的研究。为补充上述示例，我们选取了其中几个，并在表 1 中以统一的方式进行比较。具体而言，我们比较了最初考虑的问题、不同研究的目标，以及相关流程的计算成本。

	Cost
$u - u_\delta\|_{H^1}$ $_{\delta_f}\|_{L^2}$ $_f\|_{H^1}$	Boundary Value Problem (BVP)
$_1 \lesssim \delta^{-\sigma}$, $^{\sigma-2} + {\delta_f}^{-\sigma}$ $^{-4} + {\delta_f}^{-2\sigma}$	BVP or linear eigenvalue problem
um space, $u - u_\delta\|_{H^1}$ $E(u) - E(u_\delta)\|$	Residual computation
$- u_\delta\|^2_{H^1}$ $) - E(u_\delta)\|^2$	BVP
$, \lambda_\delta)\|_{X'}$	BVP
$, \lambda_\delta)\|_{X'}$	BVP
$(\Phi)\|_{X'}$ x)	BVP

s.

致谢词

我们谨以此文献给已故的 Roland Glowinski教授。他曾激励了许多代应用数学家和跨学科数学家。第二作者（YM）有幸在 Universit´e Pierre et Marie Curie（后更名为 Sorbonne Universit´e）修读他的 DEA学位（当时称为硕士）课程，并受益于他在这些课程和讲座中的启发式教诲。尽管他感兴趣的非线性特征值问题 [30] 性质不同，但他多年来一直关注分子动力学和电子结构计算方面的应用；这些应用无疑将在未来很长一段时间内受益于他的思想。

资金支持

本项目中，GD 得到了法国“未来投资计划”项目 ISITE-BFC（合同编号 ANR-15-IDEX-0003）的支持；YM 则得到了欧洲研究委员会（ERC）通过欧盟地平线2020研究与创新计划（资助协议编号 810367）对项目 EMC2 的支持。

参考文献

[1] R. Altmann, P. Henning, and D. Peterseim, Gross–Pitaevskii特征值问题的 j方法，《数值数学》，148 (2021)，第 575–610 页。[2] W. Bao and W. Tang, 通过直接极小化能量泛函求解玻色–爱因斯坦凝聚体基态，《计算物理学杂志》，187 (2003)，第 230–254 页。[3] M. Caliari, A. Ostermann, S. Rainer, and M. Thalhammer, 求解 Gross–Pitaevskii系统基态的一种极小化方法，《计算物理学杂志》，228 (2009)，第 349–360 页。[4] G. Caloz and J. Rappaz, 非线性问题与分岔问题的数值分析，《数值分析手册》，5 (1997)，第 487–637 页。[5] E. Cancès, HF电子计算的 SCF 算法，载于《从头算量子化学的数学模型与方法》，M. Defranceschi 和 C. Le Bris 编，施普林格柏林海德堡出版社，柏林、海德堡，2000，第 17–43 页。[6] E. Cancès, R. Chakir, L. He, and Y. Maday, 一类非线性椭圆特征值问题的双网格方法，《IMA 数值分析杂志》，38 (2018)，第 605–645 页。[7] E. Cancès, R. Chakir, and Y. Maday, 非线性特征值问题的数值分析，J. Sci. Comput.，45 (2010)，第 90–117 页。[8] E. Cancès, R. Chakir, and Y. Maday, 若干无轨道模型和 Kohn–Sham模型平面波离散化的数值分析，《ESAIM 数学建模与数值分析》，46 (2012)，第 341–388 页。

[9] E. Cancès, M. Defranceschi, W. Kutzelnigg, C. Le Bris, and Y. Maday, 计算量子化学：入门，载于《数值分析手册》第 10 卷，爱思唯尔，2003，第 3–270 页。
[10] E. Cancès, G. Dusson, G. Kemlin, and A. Levitt, 平面波电子结构计算中性质的实用误差界，SIAM 科学计算杂志，44 (2022)，第 B1312–B1340 页。[11] E. Cancès, G. Dusson, Y. Maday, B. Stamm, and M. Vohralík, 一种基于扰动方法的后验估计量，用于非线性薛定谔方程的平面波离散化，《法国科学院数学报告》，352 (2014)，第 941–946 页。[12] ——,一种基于扰动方法的后处理，用于 Kohn–Sham 模型的平面波离散化，《计算物理学杂志》，307 (2016)，第 446–459 页。[13] ——, 拉普拉斯特征值和特征向量的可靠且稳健的后验界：协调近似，SIAM 数值分析杂志，55 (2017)，第 2228–2254 页。[14] É. Cancès, G. Kemlin, and A. Levitt, 直接极小化和自洽迭代的收敛性分析，SIAM 矩阵分析与应用杂志，42 (2021)，第 243–274 页。[15] E. Cancès and C. Le Bris, 电子结构计算中，我们能否胜过 DIIS 方法?《国际量子化学杂志》，79 (2000)，第 82–90 页。[16] H. Chen, X. Dai, X. Gong, L. He, and A. Zhou, Kohn–Sham 模型的自适应有限元近似，《多尺度建模与仿真》，12 (2014)，第 1828–1869 页。[17] H. Chen, X. Gong, L. He, and A. Zhou, 量子物理中一类非线性特征值问题的自适应有限元近似，《应用数学与力学进展》，3 (2011)，第 493–518 页。[18] H. Chen, X. Gong, and A. Zhou, 非线性特征值问题的数值近似及其在密度泛函模型中的应用，《数学方法与应用科学》，33 (2010)，第 1723–1742 页。[19] H. Chen, L. He, and A. Zhou, 量子物理中非线性特征值问题的有限元近似，《计算方法、应用力学与工程》，200 (2011)，第 1846–1865 页。[20] X. Dai, L. He, and A. Zhou, 重特征值自适应有限元计算的收敛性与准最优复杂度，《IMA 数值分析杂志》，35 (2015)，第 1934–1977 页。[21] X. Dai, J. Xu, and A. Zhou, 自适应有限元特征值计算的收敛性与最优复杂度，《数值数学》，110 (2008)，第 313–355 页。[22] C. M. Dion and E. Cancès, 定态 Gross–Pitaevskii 方程的基态，《计算物理通讯》，177 (2007)，第 787–798 页。

[23] C. Döding, P. Henning, and J. Wärnegård, 一种用于模拟玻色–爱因斯坦凝聚体的高效双层方法，arXiv 预印本 arXiv:2212.07392，（2022）。[24] G. Dusson, Schr ¨odinger 方程平面波近似的后处理。第二部分：Kohn–Sham 模型，IMA J. Numer. Anal.，41（2020），第 2456–2487 页。[25] G. Dusson and Y. Maday, 非线性 Gross–Pitaevskii 型特征值问题的后验分析，IMA J. Numer. Anal.，（2016），第 drw001 页。[26] E. Faou and T. Jézéquel, 用于计算基态的归一化梯度算法的收敛性，IMA J. Numer. Anal.，38（2017），第 360–376 页。[27] J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García, 使用 Sobolev 梯度优化 Schr ¨odinger 泛函：在量子力学和非线性光学中的应用，SIAM J. Sci. Comput.，23（2001），第 1316–1334 页。[28] J. Gedicke and C. Carstensen, 对流–扩散特征值问题的后验误差估计器，Comput. Methods Appl. Mech. Eng.，268（2014），第 160–177 页。[29] S. Giani, L. Grubišić, H. Hakula, and J. S. Ovall, 使用辅助子空间技术估计椭圆特征值问题的后验误差，J. Sci. Comput.，88（2021）。[30] R. Glowinski, S. Leung, H. Liu, and J. Qian, Monge-Amp `ere 算子非线性特征值问题的数值求解，ESAIM：控制、优化与变分法，26（2020），第 118 页。[31] H. Guo, Z. Zhang, and R. Zhao, 椭圆特征值问题的超收敛双网格方法，J. Sci. Comput.，70（2017），第 125–148 页。[32] P. Heid, B. Stamm, and T. P. Wihler, Gross–Pitaevskii 方程的梯度流有限元离散与基于能量的自适应，J. Comput. Phys.，436（2021），第 110165 页。[33] P. Henning, A. Målqvist, and D. Peterseim, 玻色–爱因斯坦凝聚体基态计算的两层离散技术，SIAM J. Numer. Anal.，52（2014），第 1525–1550 页。[34] P. Henning and D. Peterseim, Gross–Pitaevskii 特征值问题的 Sobolev 梯度流：全局收敛性与计算效率，SIAM J. Numer. Anal.，58（2020），第 1744–1772 页。[35] M. F. Herbst, A. Levitt, and E. Cancès, 非自洽 Kohn–Sham 方程的后验误差估计，Faraday Discuss.，224（2020），第 227–246 页。[36] T. Horger, B. Wohlmuth, and T. Dickopf, 参数化椭圆特征值问题的同时约化基近似，Esaim Math. Model. Numer. Anal.，51（2017），第 443–465 页。[37] G. Hu, H. Xie, and F. Xu, Kohn–Sham 方程的多层校正自适应有限元方法，J. Comput. Phys.，355（2018），第 436–449 页。

[38] S. Jia, H. Xie, M. Xie, and F. Xu, 非线性特征值问题的全多重网格方法，中国科学：数学，59（2016），第 2037–2048 页。[39] P. Kazemi and M. Eckart, 使用 Sobolev 梯度最小化 Gross–Pitaevskii 能量泛函——分析与数值结果，国际计算方法杂志，7（2010），第 453–475 页。[40] B. Langwallner, C. Ortner, and E. Süli, 电子密度泛函 Galerkin 近似的存在性与收敛性结果，数学模型与应用科学方法，20（2010），第 2237–2265 页。
[41] M. G. Larson, 自伴椭圆特征值问题有限元近似的后验与先验误差分析，SIAM 数值分析杂志，38（2000），第 608–625 页。[42] H. Li and J. S. Ovall, 具有反平方势的 Schr ¨odinger 算子的后验特征值误差估计，数学与统计学院出版物与报告，（2015）。[43] L. Lin, J. Lu, and L. Ying, Kohn–Sham 密度泛函理论的数值方法，数值学报，28（2019），第 405–539 页。[44] Q. Lin and H. Xie, 特征值问题的多层校正格式，数学计算，84（2014），第 71–88 页。[45] X. Liu and T. Vejchodský, 特征函数的完全可计算后验误差界，数值数学，（2022）。[46] Y. Maday and G. Turinici, Hartree–Fock 方程数值模拟中的误差条与二次收敛方法，数值数学，94（2003），第 739–770 页。[47] R. McWeeny, 自洽场理论中的密度矩阵 I：密度矩阵的迭代构造，伦敦皇家学会会刊 A 辑：数学与物理科学，235 （ 1956 ），第 496–509 页。[48] M. T. Nakao, M. Plum, and Y. Watanabe, 偏微分方程的数值验证方法与计算机辅助证明，施普林格，新加坡，2019。[49] Neymeyr, K. , 以多重网格效率求解网格特征值问题，《科学计算方法：变分问题与应用》，（2003）。[50] L. P. Pitaevskii, S. Stringari, and S. Stringari, 玻色–爱因斯坦凝聚，Clarendon 出版社，2003 年 4 月。
[51] M. R. Racheva and A. B. Andreev, 特征值的超收敛后处理，Comput. Methods Appl. Math.，2（2002），第 171–185 页。[52] N. Raza, S. Sial, S. S. Siddiqi, and T. Lookman, 与非线性 Schr ¨odinger 方程相关的能量最小化，J. Comput. Phys.，228（2009），第 2572–2577 页。[53] C. C. J. Roothaan, 分子轨道理论的新进展，现代物理评论，23（1951），第 69–89 页。

[54] A. Schmidt, D. Wittwar, and B. Haasdonk，非线性问题严格且有效的后验误差界——RB 方法的应用，Adv. Comput. Math.，46（2020），第 32 页。[55] P. Upadhyaya, E. Jarlebring, and E. H. Rubensson，自洽场迭代收敛性的密度矩阵方法，Numer. Algebra Control Optim.，11（2021），第 99 页。[56] R. Verfurth，有限元方法后验误差估计技术（数值数学与科学计算），牛津大学出版社，第 1 版，2013 年 5 月。
[57] H. Xie and M. Xie，玻色–爱因斯坦凝聚体基态解的可计算误差估计，J. Sci. Comput.，81（2019），第 1072–1087 页。[58] F. Xu and Q. Huang，基于互补方法的非线性特征值问题级联自适应有限元方法，J. Comput. Appl. Math.，372（2020），第 112720 页。
[59] J. Xu and A. Zhou，特征值问题的双网格离散格式，Math. Com- put.，70（1999），第 17–26 页。[60] F. Zhang, F. Spiegelmann, E. Suraud, V. Frayssé, R. Poteau, R. Glowinski, andF. Chatelin，分子动力学模拟中瞬态（na19）2 和（na20）2 簇二聚体的形成，Physics Letters A，193（1994），第 75–81 页。[61] F.-S. Zhang, F. Wang, E. Suraud, and R. Glowinski，用于研究 nan 的碰撞与热力学性质的距离相关紧束缚分子动力学模型，Progress of Theoretical Physics Supplement，138（2000），第 72–77 页。
[62] Z. Zhang，一类非线性特征值问题的 Sobolev 梯度下降的指数收敛性，Commun. Math. Sci.，20（2022），第 377–403 页。[63] A. Zhou，玻色–爱因斯坦凝聚体基态解的有限维近似分析，Nonlinearity，17（2003），第 541 页。[64] ——,分子系统电子基态解的有限维近似，Math. Methods Appl. Sci.，30（2007），第 429–447 页。