arXiv:2302.00383v1 [math.NA] 1 Feb 2023

非线性薛定谔方程低正则性积分器的长时间误差界

Yue Feng[1]、Georg Maierhofer[1] 和 Katharina Schratz[1]

[1]雅克-路易·利翁实验室，索邦大学，法国巴黎 *75005*

摘要

我们为三次非线性薛定谔方程（非线性薛定谔方程）提出了一种新的非共振低正则性积分器，可实现最优意义下的长时间误差估计；这里的最优性是相对于底层偏微分方程而言的。其核心思想是在离散化过程中精确处理零模。针对长时间误差估计，我们严格建立了小初值情况下非线性薛定谔方程不同低正则性积分器的误差界，小初值由无量纲参数 $\varepsilon \in (0,1]$ 表征。首先，我们研究二次非线性薛定谔方程的低正则性积分器，其中积分可精确计算，并证明了在 H^r 中、$r>1/2$ 为 $T>0$ 时，解在截至时间 $T_\varepsilon = T/\varepsilon$ 的范围内，在 H^r 中具有改进的一致一阶收敛，其误差界为 $O(\varepsilon\tau)$。随后，我们将改进的一致长时间误差界推广到长时间区间内的对称二阶低正则性积分器。针对三次非线性薛定谔方程，我们设计了新的非共振一阶及对称二阶低正则性积分器，能够精确处理零模，并严格完成截至时间 $T_\varepsilon = T/\varepsilon^2$ 的误差分析。借助正则性补偿振荡（RCO）技术，我们为新的非共振低正则性格式建立了改进的一致误差界；与三次非线性薛定谔方程的经典低正则性积分器相比，这些格式可进一步将长时间误差降低 ε^2 倍。我们还给出数值算例，以验证误差估计，并在长时间模拟中与经典时间分裂方法进行比较。

关键词：非线性薛定谔方程、低正则性积分器、对称格式、长时间误差界、正则性补偿振荡

1 引言

我们考虑一维（1D）环面 $\mathbb{T}=(-\pi,\pi)$ [7, 32, 33, 40] 上具有小初值的以下二次非线性薛定谔方程（NLSE）

$$\begin{cases} i\partial_t u(x,t) = -\partial_x^2 u(x,t) + u^2(x,t), \quad x\in\mathbb{T},\ t>0, \\ u(x,0) = \varepsilon\phi(x), \quad x\in\mathbb{T}, \end{cases} \tag{1.1}$$

以及三次非线性薛定谔方程 [5, 15, 42, 45]

$$\begin{cases} i\partial_t u(x,t) = -\partial_x^2 u(x,t) + |u(x,t)|^2 u(x,t), \quad x\in\mathbb{T},\ t>0, \\ u(x,0) = \varepsilon\phi(x), \quad x\in\mathbb{T}, \end{cases} \tag{1.2}$$

其中，$i=\sqrt{-1}$, $u(x,t)\in\mathbb{C}$ 是复波函数/序参量，空间坐标为 x，时间为 t, $\phi(x)$ 是给定的复值函数，而 $\varepsilon\in(0,1]$ 是一个用于刻画初始数据大小的无量纲参数。为简化记号，本文将完全聚焦于一维情形，但需要指出的是，这些构造和分析可直接推广至在 d 维环面 $\mathbb{T}^d$ 上研究非线性薛定谔方程低正则性格式的情形。

作为典型的色散型偏微分方程（PDE），非线性薛定谔方程（NLSE）在物理、化学、生物学和工程学等诸多领域发挥着重要作用 [1,41,44]。非线性项的具体形式与不同的应用相关。特别是，对于具有 $\chi^{(2)}$（即二次）非线性响应的光学材料，二次非线性薛定谔方程应用于非线性光学、激光等离子体相互作用以及非线性光纤中的波传播 [10,18,19]。三次非线性薛定谔方程，又称 Gross–Pitaevskii方程（GPE），广泛用于描述玻色–爱因斯坦凝聚体（BEC） [5,41,43]。在分析方面，人们已对非线性薛定谔方程的柯西问题进行了大量研究，包括解的存在性和唯一性，以及解随时间的渐近行为 [8,15,27,40]。近期，越来越多的研究致力于考察非线性演化方程的长时间行为，以及非线性项对解的影响 [7,13,24]。小初值半线性薛定谔方程的存在时间备受关注；相关研究表明，二次非线性薛定谔方程（1.1）和三次非线性薛定谔方程（1.2）的存在时间至少分别为 $O(\varepsilon^{-1})$ 和$O(\varepsilon^{-2})$ [7,31,37,45]。

通过引入 $w(x,t)=u(x,t)/\varepsilon$ 对变量的振幅进行重新缩放，我们得到如下具有 $O(\varepsilon)$-非线性项和 $O(1)$-初始数据的二次非线性薛定谔方程

$$\begin{cases} i\partial_t w(x,t)=-\partial_x^2 w(x,t)+\varepsilon w^2(x,t), \quad x\in\mathbb{T},\ t>0,\\ w(x,0)=\phi(x), \quad x\in\mathbb{T}, \end{cases} \tag{1.3}$$

以及具有 $O(\varepsilon^2)$-非线性项和 $O(1)$-初始数据的三次非线性薛定谔方程

$$\begin{cases} i\partial_t w(x,t)=-\partial_x^2 w(x,t)+\varepsilon^2|w(x,t)|^2 w(x,t), \quad x\in\mathbb{T},\ t>0,\\ w(x,0)=\phi(x), \quad x\in\mathbb{T}. \end{cases} \tag{1.4}$$

事实上，具有 $O(\varepsilon)$-非线性项和 $O(1)$-初始数据的二次非线性薛定谔方程（1.3）的长时间动力学，与具有 $O(1)$-非线性项和 $O(\varepsilon)$-初始数据的非线性薛定谔方程（1.1）的长时间动力学是等价的。三次非线性薛定谔方程（1.2）和（1.4）的长时间动力学之间的等价性类似。

过去几十年来，人们提出了许多准确而高效的数值方法来求解非线性薛定谔方程，包括有限差分法、指数积分器、时间分裂方法 [3,17,20,29,36]。根据这些误差估计，求解非线性薛定谔方程的时间分裂方法和指数积分器需要额外的两个导数，即 $\phi\in H^{r+2}(\mathbb{T}^d)$，其中$r>d/2$，才能在 $H^r(\mathbb{T}^d)$ 中达到一阶收敛；而有限差分法则要求初始数据具有更高的正则性。对于非光滑初始数据，有人提出了一种低正则性指数型积分器，在三次情形下可使 $\phi\in H^{r+1}(\mathbb{T}^d)$ 的 $H^r(\mathbb{T}^d)$ 达到一阶收敛，而二次情形则不需要额外的正则性 [39]。随后，人们提出了滤波低正则性格式，借助离散 Bourgain 空间和离散Strichartz型估计，实现了低正则性误差估计 [34,38,47]。这类低正则性格式也称为基于共振的格式，因为它们的构造基于方程的基于傅里叶的展开及其

解以及方程内在的共振结构 [9]。此外，基于共振的格式也被用于近似其他色散偏微分方程的动力学，例如 KdV 方程和非线性Klein–Gordon方程 [12,30,35]，其框架见 [9]。然而，迄今为止，现有的误差分析仅限于有限时间 $T = O(1)$，参见 [12, 30, 35, 39]及其中的参考文献。值得一提的是，有人提出了一种用于 KdV 方程的辛低正则积分器，它保留了问题的几何结构 [35]。非线性薛定谔方程具有时间可逆性或对称性，即在时间变量作如下变换 $t \to -t$ 并将方程取共轭后，方程保持不变 [3]。采用对称格式对非线性薛定谔方程进行离散化十分重要，这样才能在离散层面保持对称性。此外，几何性质对于控制数值格式的长时间行为至关重要 [16, 46]。

在长时间区间内，紧致区域上非线性薛定谔方程的不同数值格式的行为已得到研究 [14,22,23,25,26]。对于时间分裂方法，借助正则性补偿振荡（RCO）技术，并在正则性假设 $u \in H^5(\mathbb{T})$ 下，针对三次非线性薛定谔方程的长时间动力学，已证明其在时间达到 $O(1/\varepsilon^2)$ 量级时的改进的一致误差界为 $O(\varepsilon^2\tau^2)$ [6]。然而，据我们所知，目前尚无关于非线性薛定谔方程低正则性格式长时间误差估计的研究。本文旨在研究非线性薛定谔方程不同低正则性格式的长时间误差界。对于二次非线性薛定谔方程，我们重点研究经典一阶低正则性积分器和对称二阶低正则性积分器，并严格证明在固定 $T > 0$ 时，时间达到 $T_\varepsilon = T/\varepsilon$ 的改进的一致误差界。然而，对于三次非线性薛定谔方程，经典低正则格式只能在时间达到 $O(1/\varepsilon^2)$ 量级时获得一致误差界。请注意，三次非线性薛定谔方程的适当长时间区间对应的时间量级为 $O(1/\varepsilon^2)$，而非 $O(1/\varepsilon)$（后一时间区间是二次情形的自然选择，参见 (1.3) 与 (1.4)）。事实上，一些最成功的低正则性格式（参见 [9, 39]）基于对扭曲变量 $v = \exp(-it\partial_x^2)u$ 中杜哈梅公式的迭代，从而得到如下形式的近似

$$v(t_n+\tau) \approx \sum_{l\in\mathbb{Z}} e^{ilx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3}} \underbrace{e^{it_n(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)}}_{=:\mathcal{F}_1} \underbrace{\int_0^\tau e^{is(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)} ds\, \overline{\hat{v}_{l_1}(t_n)}\hat{v}_{l_2}(t_n)\hat{v}_{l_3}(t_n)}_{=:\mathcal{F}_2},$$

其中，$\hat{}v_l$ 是未知函数 v的傅里叶系数。随后，通过将 $\exp(is(l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2)) \approx \exp(2isl_1^2)$ 近似为该表达式，构造出 [39] 中的低正则性积分器。根据第 3.2 节基于正则性补偿振荡（RCO）技术的分析，我们推断，在长时间区间内，只要相位非零，即 $l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2 \neq 0$，对因子 $\mathcal{F}_1$ 求和就会使其误差贡献相互抵消。

因此，在时间尺度为 $O(1/\varepsilon^2)$ 时，误差的主导贡献来自零模，即满足 $l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2 = 0$ 时的各项。我们的新颖思路是对这一特定模进行精确处理，也就是说，我们不对 $\mathcal{F}_2$ 中的积分进行近似，因为该积分具有精确表达式 $\int_0^\tau 1 ds = \tau$。这一思路改善了长时间区间内的性能，尤其使我们能够利用 RCO 技术证明改进的均匀误差界。关于这一构造的更多细节请参见第 3.1 节；不过，我们先简要介绍一个如图1所示的数值示例，该示例突出了我们的非共振格式

（“NRLI1”）与用于三次非线性薛定谔方程的最先进的基于共振的低正则性积分器 [39] （“Ostermann & Schratz ’18”）相比，显著改善了长时间行为。在这一特定实验中，我们取 H^2 中的初始数据，并针对 ε 的不同取值采用固定时间步长 $\tau = 0.05$ 。更多详细的数值结果见第 4 节。

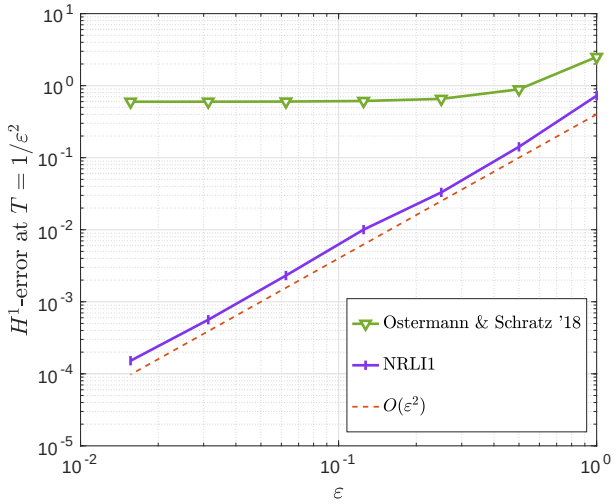


图1：低正则性格式长时间误差的比较。

本文其余部分安排如下。第2节中，我们给出二次非线性薛定谔方程的一阶和对称二阶低正则性积分器，并严格证明其在时间 $T_\varepsilon = T/\varepsilon$之前的改进的一致误差界。第3节中，我们为三次非线性薛定谔方程设计新的非共振一阶和对称二阶低正则性格式，并推导截至时间 $T_\varepsilon = T/\varepsilon^2$的误差界。第4节展示非线性薛定谔方程长时间动力学的数值结果。最后，第5节给出一些结论。本文中，记号 $A \lesssim B$ 表示存在一个与时间步长 τ 和 ε 无关的通用常数 $C > 0$，使得 $|A| \leq CB$。我们始终令 $r > 1/2$，并用 $\|\cdot\|_r$ 表示标准的 $H^r = H^r(\mathbb{T})$ 索伯列夫范数，同时利用众所周知的双线性估计

$$\|fg\|_r \leq C_r \|f\|_r \|g\|_r , \tag{1.5}$$

其中常数为 $C_r > 0$。

2 二次非线性薛定谔方程的长时间误差界

本节回顾用于二次非线性薛定谔方程 (1.3) 的一阶和对称二阶低正则性积分器，并建立截至时间 $T_\varepsilon = T/\varepsilon$ 的改进的一致误差界。

对于 $f \in L^2(\mathbb{T})$，我们用 $f(x) = \sum_{l\in\mathbb{Z}} \hat{f}_l e^{ilx}$ 表示其傅里叶展开。我们定义一种正则

化，通过其在傅里叶空间中的作用来表示，具体为

$$(\partial_x^{-1})_l := \begin{cases} (il)^{-1}, & l \neq 0, \\ 0, & l = 0, \end{cases} \quad \text{i.e.,} \quad \partial_x^{-1} f(x) = \sum_{l \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \frac{1}{il} \hat{f}_l e^{ilx}. \tag{2.1}$$

对于所谓的 φ_1 函数，定义为

$$\varphi_1(z) = \frac{e^z - 1}{z}, \tag{2.2}$$

由连续性可知,

$$\left(\frac{e^{it\partial_x^2} - 1}{it\partial_x^2} \right)_l = \begin{cases} \dfrac{e^{-itl^2} - 1}{-itl^2}, & l \neq 0, \\ 1, & l = 0. \end{cases} \tag{2.3}$$

2.1 一阶低正则性积分器

如 [39], 所述，我们引入扭曲变量 $v(t) = e^{-it\partial_x^2} w(t)$，它满足以下二次非线性薛定谔方程

$$\begin{cases} i\partial_t v(x,t) = \varepsilon e^{-it\partial_x^2} \left(e^{it\partial_x^2} v(x,t) \right)^2, \quad x \in \mathbb{T},\ t > 0, \\ v(x,0) = \phi(x), \quad x \in \mathbb{T}. \end{cases} \tag{2.4}$$

在本文后续内容中，我们简记 $v(t) := v(x,t)$，即在不会引起混淆时省略空间变量。由杜哈梅公式， $v(t)$ 的精确解为

$$v(t_n + \tau) = v(t_n) - i\varepsilon \int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2} \left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2} v(t_n + s) \right)^2 ds, \tag{2.5}$$

其中 $t_n = n\tau$对 $n = 0,1, \ldots, \frac{T/\varepsilon}{\tau} - 1$成立。由于 $e^{it\partial_x^2}$对任意 $t \in \mathbb{R}$，都是 H^r 上的线性等距映射，我们有

$$\|v(t_n + \tau) - v(t_n)\|_r \leq \varepsilon \int_0^\tau \|v(t_n + s)\|_r^2 \, ds \leq \varepsilon\tau \sup_{0 \leq s \leq \tau} \|v(t_n + s)\|_r^2 . \tag{2.6}$$

在中间 解 (2.5) 中，我们用 $v(t_n)$ 近似 $v(t_n + s)$，其中 $0 \leq s \leq \tau$，从而得到

$$v(t_n + \tau) \approx v(t_n) - i\varepsilon \int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2} \left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2} v(t_n) \right)^2 ds. \tag{2.7}$$

然后，我们将傅里叶空间中的积分写为

$$\begin{aligned} I_1^\tau(v, t_n) &= \int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2} \left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2} v \right)^2 ds \\ &= \int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2} \left[\left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2} \sum_{l_1} \hat{v}_{l_1} e^{il_1 x} \right) \left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2} \sum_{l_2} \hat{v}_{l_2} e^{il_2 x} \right) \right] ds \\ &= \int_0^\tau \sum_{l_1, l_2} e^{i(t_n+s)[(l_1+l_2)^2 - l_1^2 - l_2^2]} \hat{v}_{l_1} \hat{v}_{l_2} e^{i(l_1+l_2)x} ds. \end{aligned} \tag{2.8}$$

该格式构造中的关键关系为

$$(l_1+l_2)^2-l_1^2-l_2^2=2l_1l_2, \tag{2.9}$$

这使我们无需对精确解作任何额外的正则性假设，即可推导出一阶低正则性格式。将关系式 (2.9) 代入积分 (2.8)，得到

$$\begin{aligned}
I_1^\tau(v,t_n)=&\sum_{\substack{l_1,l_2\\ l_1,l_2\neq 0}} e^{it_n[(l_1+l_2)^2-l_1^2-l_2^2]}\frac{e^{i\tau[(l_1+l_2)^2-l_1^2-l_2^2]}-1}{2il_1l_2}\hat{v}_{l_1}\hat{v}_{l_2}e^{i(l_1+l_2)x}\\
&+2\tau\hat{v}_0\sum_{l_1\neq 0}\hat{v}_{l_1}e^{il_1x}+\tau\hat{v}_0^2\\
=&\frac{i}{2}\sum_{\substack{l_1,l_2\\ l_1,l_2\neq 0}} e^{it_n[(l_1+l_2)^2-l_1^2-l_2^2]}\frac{e^{i\tau[(l_1+l_2)^2-l_1^2-l_2^2]}-1}{(il_1)(il_2)}\hat{v}_{l_1}\hat{v}_{l_2}e^{i(l_1+l_2)x}\\
&+2\tau\hat{v}_0\sum_{l_1\in\mathbb{Z}}\hat{v}_{l_1}e^{il_1x}-\tau\hat{v}_0^2\\
=&\frac{i}{2}e^{-it_n\partial_x^2}\left[e^{-i\tau\partial_x^2}\left(e^{i(t_n+\tau)\partial_x^2}\partial_x^{-1}v\right)^2-\left(e^{it_n\partial_x^2}\partial_x^{-1}v\right)^2\right]+2\tau\hat{v}_0v-\tau\hat{v}_0^2.
\end{aligned}\tag{2.10}$$

记 v^n 为 $v(t_n)$的近似，并结合近似式 (2.7)，可得 $v(t)$的一阶低正则性格式如下

$$\begin{aligned}
v^{n+1}=&\,\Phi_{t_n}^\tau(v^n)\\
:=&\,(1-2i\varepsilon\tau\hat{v}_0^n)\,v^n+i\varepsilon\tau(\hat{v}_0^n)^2\\
&+\frac{\varepsilon}{2}e^{-it_n\partial_x^2}\left[e^{-i\tau\partial_x^2}\left(e^{i(t_n+\tau)\partial_x^2}\partial_x^{-1}v^n\right)^2-\left(e^{it_n\partial_x^2}\partial_x^{-1}v^n\right)^2\right].
\end{aligned}\tag{2.11}$$

最后，我们将变量变换回去，即 $w^n=e^{it\partial_x^2}v^n$，于是得到一阶低正则性积分器 (LI1)：

$$\begin{aligned}
w^{n+1}=&\,(1-2i\varepsilon\tau\hat{w}_0^n)\,e^{i\tau\partial_x^2}w^n+i\varepsilon\tau(\hat{w}_0^n)^2\\
&+\frac{\varepsilon}{2}\left[\left(e^{i\tau\partial_x^2}\partial_x^{-1}w^n\right)^2-e^{i\tau\partial_x^2}\left(\partial_x^{-1}w^n\right)^2\right].
\end{aligned}\tag{2.12}$$

注记 2.1. 类似地，低正则性积分器是针对以下二次非线性薛定谔方程引入的：*[39]*

$$\begin{cases}
i\partial_t w(x,t)=-\partial_x^2w(x,t)+\varepsilon|w(x,t)|^2, & x\in\mathbb{T},\ t>0,\\
w(x,0)=\phi(x), & x\in\mathbb{T}.
\end{cases}\tag{2.13}$$

用同样的思路，一阶低正则性格式为

$$\begin{aligned}
w^{n+1}=&\left(1-i\varepsilon\tau\overline{\hat{w}}_0^n\right)e^{i\tau\partial_x^2}w^n-i\varepsilon\tau\left\|w^n\right\|_{L^2}^2\\
&+\frac{\varepsilon}{2}\partial_x^{-1}\left[\left(e^{i\tau\partial_x^2}w^n\right)\left(e^{-i\tau\partial_x^2}\partial_x^{-1}\overline{w}^n\right)-e^{i\tau\partial_x^2}\left(w^n\partial_x^{-1}\overline{w}^n\right)\right].
\end{aligned}\tag{2.14}$$

2.2 LI1 的改进的均匀误差界 (2.12)

在本小节中，我们将证明一阶低正则性积分器（LI1）（2.12）在固定 $T>0$ 的情况下，直到时间 $T_\varepsilon = T/\varepsilon$ 的改进的均匀误差界。

定理 2.2. 设 $r>1/2$，并假设二次非线性薛定谔方程 (1.3)的精确解满足 $w(t)\in H^r$，其中 $0\le t\le T/\varepsilon$。那么存在常数 $\tau_0>0$，使得对于 $0<\tau\le\tau_0$，*LI1* (2.12) 满足以下误差界:

$$\|w(t_n)-w^n\|_r \lesssim \varepsilon\tau, \quad 0\le n\le \frac{T/\varepsilon}{\tau}. \tag{2.15}$$

注 2.3. 二次非线性薛定谔方程 (2.13) 的一阶低正则性积分格式(2.14) 的改进均匀误差界仍然成立。为简洁起见，我们只给出 *LI1* (2.12) 的证明，并省略格式 (2.14) 的详细证明。

由于 $e^{it\partial_x^2}$ 是线性等距映射，我们有

$$\|w(t_n)-w^n\|_r = \left\|e^{it_n\partial_x^2}\left(v(t_n)-v^n\right)\right\|_r = \|v(t_n)-v^n\|_r, \tag{2.16}$$

因此，只需证明 $v(t_n)$ 的误差界如下。

定理 2.4. 设 $r>1/2$，并假设二次非线性薛定谔方程 (2.4)的精确解满足 $v(t)\in H^r$，其中 $0\le t\le T/\varepsilon$。那么存在常数 $\tau_0>0$，使得对于 $0<\tau\le\tau_0$，一阶低正则性格式 (2.11)满足以下误差界

$$\|v(t_n)-v^n\|_r \lesssim \varepsilon\tau, \quad 0\le n\le \frac{T/\varepsilon}{\tau}. \tag{2.17}$$

在证明误差界 (2.17) 之前，我们先给出关于一阶低正则性格式 (2.11) 的稳定性和局部截断误差的一些结果。

引理 2.5. （稳定性）对于 $f,g\in H^r$，其中 $r>1/2$，有

$$\|\Phi_t^\tau(f)-\Phi_t^\tau(g)\|_r \le (1+\varepsilon L\tau)\|f-g\|_r, \tag{2.18}$$

其中 L 取决于 $\|f+g\|_r$。

证明. 根据数值流 (2.11)，有

$$\begin{aligned}\Phi_t^\tau(f)-\Phi_t^\tau(g) = {} & (f-g)-2i\varepsilon\tau\left(\hat f_0 f-\hat g_0 g\right)+i\varepsilon\tau\left(\hat f_0^2-\hat g_0^2\right)\\ & +\frac{\varepsilon}{2}e^{-it_n\partial_x^2}\left[e^{-i\tau\partial_x^2}\left(e^{i(t_n+\tau)\partial_x^2}\partial_x^{-1}f\right)^2-\left(e^{it_n\partial_x^2}\partial_x^{-1}f\right)^2\right]\\ & -\frac{\varepsilon}{2}e^{-it_n\partial_x^2}\left[e^{-i\tau\partial_x^2}\left(e^{i(t_n+\tau)\partial_x^2}\partial_x^{-1}g\right)^2-\left(e^{it_n\partial_x^2}\partial_x^{-1}g\right)^2\right],\end{aligned} \tag{2.19}$$

这立即推出

$$\|\Phi_t^\tau(f)-\Phi_t^\tau(g)\|_r \le (1+\varepsilon L\tau)\|f-g\|_r, \tag{2.20}$$

其中 L 取决于 $\|f+g\|_r$。 □

引理 2.6。（局部截断误差）设 $r > 1/2$，并假设二次非线性薛定谔方程（2.4）的精确流为 $v(t_k + t) = \phi^t(v(t_k)) \in H^r$，其中 $0 \le t \le \tau$。则局部截断误差满足以下估计

$$\left\|\phi^\tau(v(t_k)) - \Phi^\tau_{t_k}(v(t_k))\right\|_r \le c\varepsilon^2\tau^2,$$

其中 c 取决于 $\sup_{0\le t\le T/\varepsilon}\left\|\phi^t(v(t_k))\right\|_r$。

证明。由精确解 (2.5) 和近似 (2.7) 的表达式，可将局部截断误差写为

$$\begin{aligned}
&\phi^\tau(v(t_k)) - \Phi^\tau_{t_k}(v(t_k)) \\
&= -i\varepsilon\int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2}\left[\left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n+s)\right)^2 - \left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n)\right)^2\right]ds.
\end{aligned}$$

结合双线性估计 (1.5)，可得

$$\begin{aligned}
&\left\|\phi^\tau(v(t_k)) - \Phi^\tau_{t_k}(v(t_k))\right\|_r \\
&\le \varepsilon\int_0^\tau \left\|\left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n+s)\right)^2 - \left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n)\right)^2\right\|_r ds \\
&\le c\varepsilon\tau \sup_{0\le s\le\tau}\left(\|(v(t_n+s)+v(t_n))\|_r \|(v(t_n+s)-v(t_n))\|_r\right) \\
&\le c\varepsilon^2\tau \sup_{0\le s\le\tau}\int_0^s \left\|\left(e^{i(t_n+\xi)\partial_x^2}v(t_n+s)\right)^2\right\|_r ds \\
&\le c\varepsilon^2\tau^2,
\end{aligned}$$

其中 c 取决于 $\sup_{0\le t\le T/\varepsilon}\left\|\phi^t(v(t_k))\right\|_r$。 □

定理 *2.4* 的证明。由引理 2.5 和引理 2.6，可得

$$\begin{aligned}
\left\|v(t_{k+1}) - v^{k+1}\right\|_r &= \left\|\phi^\tau(v(t_k)) - \Phi^\tau_{t_k}(v^k)\right\|_r \\
&\le \left\|\phi^\tau(v(t_k)) - \Phi^\tau_{t_k}(v(t_k))\right\|_r + \left\|\Phi^\tau_{t_k}(v(t_k)) - \Phi^\tau_{t_k}(v^k)\right\|_r \\
&\le c\varepsilon^2\tau^2 + (1+\varepsilon L\tau)\left\|v(t_k) - v^k\right\|_r.
\end{aligned}$$

记 $e^k = v(t_k)$ 为 $-v^k$，可得

$$\|e^{k+1}\|_r - \|e^k\|_r \le c\varepsilon^2\tau^2 + \varepsilon L\tau\|e^k\|_r. \tag{2.21}$$

由于 $e^0 = 0$，对 $k = 0,1,\ldots,n$ 求和上述不等式，可得

$$\|e^{n+1}\|_r \le \|e^0\|_r + \varepsilon L\tau\sum_{k=0}^n\|e^k\|_r + c\varepsilon^2\tau^2(n+1) \le c\varepsilon T\tau + \varepsilon L\tau\sum_{k=0}^n\|e^k\|_r. \tag{2.22}$$

应用格朗沃尔不等式，可得

$$\|e^{n+1}\|_r \le c\varepsilon T\tau e^{LT}, \quad 0 \le n \le \frac{T/\varepsilon}{\tau} - 1, \tag{2.23}$$

由此完成了误差界（2.17）的证明。 □

2.3 非对称二阶低正则性积分器

在上一节中，我们为一阶低正则性格式（LI1）建立了改进的均匀误差界。与经典方法（例如时间分裂方法和指数积分器）相比，该格式不仅获得了改进的均匀误差界，而且在低正则性下具有更好的近似效果。然而，上述低正则性格式破坏了二次非线性薛定谔方程（1.3）的对称结构。为克服这一缺点，我们采用以下形式对（2.5）进行近似

$$v(t_n+\tau)\approx v(t_n)-\frac{i\varepsilon}{2}\int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2}\Bigg[\left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n)\right)^2 + \left(e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n+\tau)\right)^2\Bigg]ds. \tag{2.24}$$

由此得到如下对称二阶低正则性格式

$$\begin{aligned} v^{n+1} :=\ & v^n-i\varepsilon\tau\left(\hat{v}_0^n v^n+\hat{v}_0^{n+1}v^{n+1}\right)+\frac{i\varepsilon\tau}{2}\left((\hat{v}_0^n)^2+(\hat{v}_0^{n+1})^2\right)\\ &+\frac{\varepsilon}{4}e^{-it_n\partial_x^2}\Bigg[e^{-i\tau\partial_x^2}\left(\left(e^{i(t_n+\tau)\partial_x^2}\partial_x^{-1}v^n\right)^2+\left(e^{i(t_n+\tau)\partial_x^2}\partial_x^{-1}v^{n+1}\right)^2\right)\\ &-\left(e^{it_n\partial_x^2}\partial_x^{-1}v^n\right)^2-\left(e^{it_n\partial_x^2}\partial_x^{-1}v^{n+1}\right)^2\Bigg]. \end{aligned} \tag{2.25}$$

将变量变回 w^n，我们得到对称二阶低正则性积分器（SLI2），其形式如下

$$\begin{aligned} w^{n+1} =\ & e^{i\tau\partial_x^2}w^n-i\varepsilon\tau\left(\hat{w}_0^n e^{i\tau\partial_x^2}w^n+\hat{w}_0^{n+1}w^{n+1}\right)+\frac{i\varepsilon\tau}{2}\left((\hat{w}_0^n)^2+(\hat{w}_0^{n+1})^2\right)\\ &+\frac{\varepsilon}{4}\Bigg[\left(e^{i\tau\partial_x^2}\partial_x^{-1}w^n\right)^2+\left(\partial_x^{-1}w^{n+1}\right)^2\\ &-e^{i\tau\partial_x^2}\left(\left(\partial_x^{-1}w^n\right)^2+\left(e^{-i\tau\partial_x^2}\partial_x^{-1}w^{n+1}\right)^2\right)\Bigg]. \end{aligned} \tag{2.26}$$

注记 2.7. 设该数值格式记为 $w^{n+1}=\Phi_\tau(w^n)$，则容易验证，该方法在 $\Phi_\tau=\Phi_{-\tau}^{-1}$ 的意义下是对称的。

注记 2.8. 对于二次非线性薛定谔方程 (2.13)，我们可以采用相同的思路得到对称二阶低正则性积分器

$$\begin{aligned} w^{n+1} =\ & e^{i\tau\partial_x^2}w^n-i\varepsilon\tau\left(\overline{\hat{w}}_0^n e^{i\tau\partial_x^2}w^n+\overline{\hat{w}}_0^{n+1}w^{n+1}\right)-\frac{i\varepsilon\tau}{2}\left(\|w^n\|_{L^2}^2+\left\|w^{n+1}\right\|_{L^2}^2\right)\\ &+\frac{\varepsilon}{4}\partial_x^{-1}\Bigg[\left(e^{i\tau\partial_x^2}w^n\right)\left(e^{-i\tau\partial_x^2}\partial_x^{-1}\overline{w}^n\right)+w^{n+1}\partial_x^{-1}\overline{w}^{n+1}\\ &-e^{i\tau\partial_x^2}\left(w^n\partial_x^{-1}\overline{w}^n+\left(e^{-i\tau\partial_x^2}w^{n+1}\right)\left(e^{i\tau\partial_x^2}\partial_x^{-1}\overline{w}^{n+1}\right)\right)\Bigg]. \end{aligned} \tag{2.27}$$

2.4 SLI2 （2.26）的改进的均匀误差界

在本小节中，我们建立 SLI2 (2.26) 的改进的均匀误差界。为简单起见，我们仅展示主要结果。

定理 2.9. 假设二次非线性薛定谔方程 （1.3） 的精确解满足 $w(t) \in H^{r+2}$*for* $0 \le t \le T/\varepsilon$。则存在常数 $\tau_0 > 0$ ，使得对于 $0 < \tau \le \tau_0$，*SLI2* （2.26） 的误差界如下：

$$\|w(t_n) - w^n\|_r \lesssim \varepsilon\tau^2, \quad 0 \le n \le \frac{T/\varepsilon}{\tau}. \tag{2.28}$$

与前面一样，只需证明由 (2.25) 给出的 v^n 的误差界如下。

定理 2.10. 假设二次非线性薛定谔方程 （2.4） 的精确解满足 $v(t) \in H^{r+2}$*for* $0 \le t \le T/\varepsilon$。则存在常数 $\tau_0 > 0$ ，使得对于 $0 < \tau \le \tau_0$，误差界如下：

$$\|v(t_n) - v^n\|_r \lesssim \varepsilon\tau^2, \quad 0 \le n \le \frac{T/\varepsilon}{\tau}. \tag{2.29}$$

为简便起见，我们将对称格式的稳定性和局部截断误差统称为 [2,4,35] 。

引理 2.11. （稳定性）将 *SLI2* (2.25) 的映射记为

$$v^{n+1} = \Psi_{t_n}^{\tau}(v^n), \tag{2.30}$$

则对于 f， $g \in H^r$，有

$$\|\Psi_t^{\tau}(f) - \Psi_t^{\tau}(g)\|_r \le \exp(\varepsilon L\tau)\,\|f - g\|_r\,, \tag{2.31}$$

其中， L 取决于 $\|f\|_r$ 和 $\|g\|_r$。

引理 2.12. （局部截断误差）假设二次非线性薛定谔方程 (2.4) 的精确流为$v(t_k + t) = \phi^t(v(t_k)) \in H^{r+2}$ ，其中 $0 \le t \le \tau$。那么，局部截断误差满足以下误差估计

$$\left\|\phi^{\tau}(v(t_k)) - \Psi_{t_k}^{\tau}(v(t_k))\right\|_r \le c\varepsilon^2\tau^3,$$

其中， c 取决于 $\sup_{0\le t\le T/\varepsilon}\left\|\phi^t(v(t_k))\right\|_{r+2}$。

定理 *2.10* 的证明。根据引理 2.11 和引理 2.12，有

$$\begin{aligned}
\left\|v(t_{k+1}) - v^{k+1}\right\|_r &= \left\|\phi^{\tau}v(t_k) - \Phi_{t_k}^{\tau}(v^k)\right\|_r \\
&\le \left\|\phi^{\tau}v(t_k) - \Phi_{t_k}^{\tau}(v(t_k))\right\|_r + \left\|\Phi_{t_k}^{\tau}(v(t_k)) - \Phi_{t_k}^{\tau}(v^k)\right\|_r \\
&\le c\varepsilon^2\tau^2 + \exp(\varepsilon L\tau)\left\|v(t_k) - v^k\right\|_r.
\end{aligned}$$

记 $e^k = v(t_k)$ 为 $-v^k$，可得

$$\|e^{k+1}\|_r - \|e^k\|_r \le c\varepsilon^2\tau^2 + (\exp(\varepsilon L\tau) - 1)\,\|e^k\|_r. \tag{2.32}$$

将上述不等式对 $k = 0,1,\ldots,n$ 求和，可得

$$\begin{aligned}\|e^{n+1}\|_r &\le \|e^0\|_r + (\exp(\varepsilon L\tau) - 1)\sum_{k=0}^{n}\|e^k\|_r + c\varepsilon^2\tau^3(n+1)\\ &\le c\varepsilon T\tau^2 + (\exp(\varepsilon L\tau) - 1)\sum_{k=0}^{n}\|e^k\|_r.\end{aligned}$$

应用格朗沃尔不等式，可得

$$\|e^{n+1}\|_r \le c\varepsilon\tau^2, \quad 0 \le n \le \frac{T/\varepsilon}{\tau} - 1, \tag{2.33}$$

其中， c 与式 (2.12) 中的不同，由此完成了误差界 (2.29) 的证明。

3 三次非线性薛定谔方程的长时间误差界

对于一阶低正则性格式，借助关系式 (2.9)，可以精确计算积分 $I_1^\tau(v,t_n)$。这一思路难以推广至其他非线性项，包括三次情形，因为此时精确积分无法再表示为物理坐标下的形式，导致实现成本过高（因为快速傅里叶变换不再适用）。出于下文将会阐明的原因， [39] 中构造的基于共振的格式，对于具有 $O(\varepsilon)$ 初始数据和 $O(1)$ 非线性项的三次非线性薛定谔方程，只能在截至时间 $T_\varepsilon = T/\varepsilon^2$ 的长时间动力学中得到阶为 $O(\tau)$ 的一致误差界。这与先前的工作形成对比：基于我们提出的正则性补偿振荡（RCO）技术，我们得以为二阶时间分裂方法（斯特朗分裂）建立阶为 $O(\varepsilon^2\tau^2)$ 的改进的均匀误差界，其适用时间可达 $O(1/\varepsilon^2)$ 阶，即使在三次非线性薛定谔方程的情形下亦然 [6]。本节将低正则性指数积分器的思路与 RCO 技术相结合，设计新的非共振低正则性指数积分器。该方法不仅能够处理粗糙初始数据，还能针对光滑初始数据，在时间达到 $O(1/\varepsilon^2)$ 阶时获得改进的均匀误差界。

3.1 一种非共振的一阶低正则性积分器

与之前一样，我们再次考虑满足以下方程的扭曲变量 $v(t) = e^{-it\partial_x^2}w(t)$

$$\begin{cases} i\partial_t v(t) = \varepsilon^2 e^{-it\partial_x^2}\left[|e^{it\partial_x^2}v(t)|^2 e^{it\partial_x^2}v(t)\right], \quad x\in\mathbb{T},\ t>0,\\ v(x,0) = \phi(x), \quad x\in\mathbb{T}, \end{cases} \tag{3.1}$$

其温和解为

$$v(t_n+\tau) = v(t_n) - i\varepsilon^2\int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2}\left[|e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n+s)|^2 e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n+s)\right]ds. \tag{3.2}$$

在数值模拟中，仍需对该积分进行近似

$$\mathcal{I}_{\mathrm{cub}}^\tau(v,t_n) := \int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2}\left[|e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n+s)|^2 e^{i(t_n+s)\partial_x^2}v(t_n+s)\right]ds. \tag{3.3}$$

其中 [39] 一阶格式的构造基于该积分中的以下近似

$$v(t_n + s) \approx v(t_n), \tag{3.4}$$

将积分表示为傅里叶展开后，可得

$$I^{\tau}_{\mathrm{cub},1}(v, t_n) = \sum_{l\in\mathbb{Z}} e^{ilx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3}} e^{it_n(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)}\overline{\hat{v}_{l_1}}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\int_0^{\tau} e^{is(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)}ds,$$

其中，当 $j = 1$ 时，$\hat{v}_{l_j} = \hat{v}_{l_j}(t_n)$，2，3。接着，将剩余的积分近似为

$$\int_0^{\tau} e^{is(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)}ds \approx \int_0^{\tau} e^{2isl_1^2}ds. \tag{3.5}$$

如 [39] 所示，这种近似使所得格式具有优异的低正则性收敛性质。然而，这种近似会在零模中引入人工共振（即当 $l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2 = 0$ 时），从而对该方法的长时间行为产生负面影响。因此，我们引入一种基于对零模进行特殊处理的新低正则性格式。对于共振情形 $l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2 = 0$，可以精确计算为

$$\int_0^{\tau} e^{is(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)}ds = \tau. \tag{3.6}$$

对于 $l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2 \neq 0$ 这些情形，我们沿用 [39] 中的构造，并用主导二次项 $2l_1^2$ 近似指数，该项可以精确积分，

$$\int_0^{\tau} e^{2isl_1^2}ds = \tau\varphi_1(2i\tau l_1^2). \tag{3.7}$$

然后，我们将积分近似为

$$\begin{aligned}
I^{\tau}_{\mathrm{cub},1}(v, t_n) &\approx I^{\tau}_{\mathrm{num},1}(v, t_n)\\
&:= \sum_{l\in\mathbb{Z}} e^{ikx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3\\ l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2\neq 0}} e^{it_n(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)}\overline{\hat{v}_{l_1}}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\int_0^{\tau} e^{2isl_1^2}ds\\
&\quad + \sum_{l\in\mathbb{Z}} e^{ilx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3\\ l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2=0}} \overline{\hat{v}_{l_1}}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\tau\\
&= \sum_{l\in\mathbb{Z}} e^{ilx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3}} e^{it_n(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)}\overline{\hat{v}_{l_1}}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\tau\varphi_1(2i\tau l_1^2)\\
&\quad + \sum_{l\in\mathbb{Z}} e^{ilx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3\\ l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2=0}} \overline{\hat{v}_{l_1}}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\tau(1-\varphi_1(2i\tau l_1^2)).
\end{aligned} \tag{3.8}$$

根据关系式

$$l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2=2l_1^2-2l_1(l_2+l_3)+2l_2l_3=2(l-l_2)(l-l_3), \tag{3.9}$$

我们可以将第二项写为

$$\begin{aligned}
&\sum_{l\in\mathbb{Z}} e^{ilx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3\\ l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2=0}} \overline{\hat{v}_{l_1}}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\tau(1-\varphi_1(2i\tau l_1^2))\\
&=2\sum_{l\in\mathbb{Z}} e^{ilx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3\\ l=l_2,l_1=l_3}} \overline{\hat{v}_{l_1}}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\tau(1-\varphi_1(2i\tau l_1^2))-\sum_{l\in\mathbb{Z}} e^{ilx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3\\ l=l_2=l_1=l_3}} \overline{\hat{v}_{l_1}}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\tau(1-\varphi_1(2i\tau l_1^2))\\
&=2\tau\widehat{(g(v^n))_0 v^n}-\tau h(v^n),
\end{aligned} \tag{3.10}$$

其中，辅助函数 a 和 b 定义为

$$g(u)=u(1-\varphi_1(-2i\tau\partial_x^2))\overline{u},\quad \widehat{(h(u))}_l=(1-\varphi_1(2il^2\tau))\overline{\hat{u}_l}\hat{u}_l\hat{u}_l, \tag{3.11}$$

这意味着所有这些项都可以通过 $\mathcal{O}(N\log N)$ 次运算计算得到。与 [39], 中的格式相比，新格式包含两个额外项，即

$$\begin{aligned}
v^{n+1}=\mathcal{S}_\tau(v^n):=v^n-i\tau\varepsilon^2\Bigg[& e^{-it_n\partial_x^2}\Big((e^{it_n\partial_x^2}v^n)^2(\varphi_1(-2i\tau\partial_x^2)e^{-it_n\partial_x^2}\overline{v^n})\Big)\\
&+2\widehat{(g(v^n))_0 v^n}-h(v^n)\Bigg],
\end{aligned} \tag{3.12}$$

初始数据为 $v^0=\phi(x)$。将变量变换回去，我们得到针对 $w^n=e^{it_n\partial_x^2}v^n$ 的非共振一阶低正则性积分器（NRLI1）：

$$\begin{aligned}
w^{n+1}=\widetilde{\mathcal{S}}_\tau(w^n):=&\ e^{i\tau\partial_x^2}\left[w^n-i\tau\varepsilon^2(w^n)^2(\varphi_1(-2i\tau\partial_x^2)\overline{w^n})\right]\\
&-2i\varepsilon^2\tau\widehat{(g(w^n))_0}e^{i\tau\partial_x^2}w^n+i\varepsilon^2\tau e^{i\tau\partial_x^2}h(w^n),
\end{aligned} \tag{3.13}$$

初始数据为 $w^0=\phi(x)$，且 g、 h 由式 (3.11) 定义。

3.2 NRLI1 的改进的均匀误差界 (3.13)

在本小节中，我们采用正则性补偿振荡（RCO）技术，推导方法 NRLI1 (3.13) 的长时间误差界。

对于三次非线性薛定谔方程 (1.4)，我们假设精确解 $w(x,t)$ 在时刻 $T_\varepsilon=T/\varepsilon^2$之前满足以下条件，其中 $T>0$ 固定:

$$\text{(A)}\qquad \|w(x,t)\|_{L^\infty([0,T_\varepsilon];H^m_{\mathrm{per}})}\lesssim 1,\quad m\geq 2.$$

于是，对于具有 $O(\varepsilon^2)$-非线性项和 $O(1)$-初始数据的三次非线性薛定谔方程，在阶为 $O(1/\varepsilon^2)$ 的时间范围内，非共振低正则性格式 (3.13) 具有如下误差界。

定理 3.1。 设 w^n 是通过非共振一阶低正则性（*NRLI1*）格式 (3.13) 得到的数值近似。在假设 ***(A)*** 下，对于充分小且独立于 ε 的 $0<\tau_0\le 1$，使得当 $0<\tau\le \frac{\alpha\pi\tau_0^2}{(1+\tau_0)_2}<1$ 且常数为 $\alpha\in(0,1)$ 时，以下误差界成立

$$\|w(t_n)-w^n\|_1 \lesssim \varepsilon^2\tau+\tau_0^{m-1},\quad \|w^n\|_1\le 1+M,\quad 0\le n\le \frac{T/\varepsilon^2}{\tau}, \tag{3.14}$$

其中 $M:=\|w\|_{L^\infty([0,T_\varepsilon];\,H^1)}$。特别地，若精确解光滑，即 $w(t)\in H^\infty_{\mathrm{per}}$，则$\tau_0^{m-1}$误差项会指数衰减；当$\tau_0$ 较小但固定时，在实际计算中可以忽略，因此估计实际上变为

$$\|w(t_n)-w^n\|_1 \lesssim \varepsilon^2\tau. \tag{3.15}$$

注记 3.2. 与经典时间分裂方法或指数积分方法相比，非共振低正则性格式能够处理更一般初始数据的近似。与 *[39],* 中提出的低正则性格式相比，对于光滑初始数据，该格式在时间 $O(1/\varepsilon^2)$ 内（直至时间量级为 $O(1/\varepsilon^2)$ ）在 $O(\varepsilon^2\tau)$ 处取得改进的一致误差界。

与二次情形一样，我们只需建立扭曲变量的非共振低正则性格式的误差界。这意味着，在假设满足以下条件的情况下，我们需要证明如下结论：方程 **(3.1)** 的精确解 $v(x,t)$ 在时间 $T_\varepsilon=T/\varepsilon^2$ 内，且$T>0$ 固定：

$$\text{(B)}\qquad \|v(x,t)\|_{L^\infty\left([0,T_\varepsilon];H^m_{\mathrm{per}}\right)}\lesssim 1,\quad m\ge 2.$$

定理 3.3。 设 v^n 为通过非共振低正则性格式 (3.12)得到的数值近似。在假设（*B*）下，对于充分小且与 ε 无关的 $0<\tau_0\le 1$，使得当 $0<\tau\le \frac{\alpha\pi\tau_0^2}{(1+\tau_0)_2}<1$ 时，其中 $\alpha\in$ 为常数(0,1)，有如下误差界

$$\|v(t_n)-v^n\|_1 \lesssim \varepsilon^2\tau+\tau_0^{m-1},\quad \|v^n\|_1\le 1+M,\quad 0\le n\le \frac{T/\varepsilon^2}{\tau}, \tag{3.16}$$

其中 $M:=\|v\|_{L^\infty([0,T_\varepsilon];\,H^1)}$。特别地，若精确解光滑，即 $v(x,\ t)\in H^\infty_{\mathrm{per}}$，则 τ_0^{m-1}误差部分将呈指数级衰减；当 τ_0 较小但固定时，在实际计算中可以忽略，因此该估计实际上可化为

$$\|v(x,t_n)-v^n\|_1 \lesssim \varepsilon^2\tau. \tag{3.17}$$

我们先给出关于非共振一阶低正则性格式 **(3.12)** 的局部截断误差的以下结果。

引理 3.4. 三次非线性薛定谔方程 (3.1) 的非共振一阶低正则性格式(3.12) 的局部截断误差可写为 $(0\le n\le \frac{T/\varepsilon^2}{\tau}-1)$

$$\mathcal{E}^n:=\mathcal{S}_\tau(v(t_n))-v(t_{n+1})=\mathcal{R}(v(t_n))+\mathcal{W}^n \tag{3.18}$$

with

$$\mathcal{R}(v(t_n)) := i\varepsilon^2 \left(I^{\tau}_{\mathrm{num},1}(v(t_n)) - \mathcal{I}^{\tau}_{\mathrm{cub}}(v, t_n) \right). \tag{3.19}$$

在假设（*B*）下，对于 $0 < \varepsilon \leq 1$，我们有以下误差界

$$\|\mathcal{R}(v(t_n))\|_1 \lesssim \varepsilon^2 \tau^2 \|v(t_n)\|_2^3, \quad \|\mathcal{W}^n\|_1 \lesssim \varepsilon^4 \tau^2. \tag{3.20}$$

证明。 根据温和解 (3.2)，局部截断误差可写为

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^n &= \mathcal{S}_\tau(v(t_n)) + \mathcal{W}^n \\ &\quad - \left(v(t_n) - i\varepsilon^2 \int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2} \left[|e^{i(t_n+s)\partial_x^2} v(t_n)|^2 e^{i(t_n+s)\partial_x^2} v(t_n) \right] ds \right), \end{aligned} \tag{3.21}$$

其中 $\mathcal{W}^n$ 定义为

$$\begin{aligned} \mathcal{W}^n &= i\varepsilon^2 \int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2} \left[|e^{i(t_n+s)\partial_x^2} v(t_n+s)|^2 e^{i(t_n+s)\partial_x^2} v(t_n+s) \right] ds \\ &\quad - i\varepsilon^2 \int_0^\tau e^{-i(t_n+s)\partial_x^2} \left[|e^{i(t_n+s)\partial_x^2} v(t_n)|^2 e^{i(t_n+s)\partial_x^2} v(t_n) \right] ds. \end{aligned} \tag{3.22}$$

由于对于所有 $t \in \mathbb{R}$， $e^{it\Delta}$ 都是 H^r 上的线性等距映射，因此有

$$\|v(t_n+s) - v(t_n)\|_1 \leq \varepsilon^2 \int_0^s \|v(t_n+\xi)\|_1^3 \, d\xi \leq \varepsilon^2 s \sup_{0 \leq \xi \leq s} \|v(t_n+\xi)\|_1^3, \tag{3.23}$$

这意味着

$$\|\mathcal{W}^n\|_1 \lesssim \varepsilon^4 \tau^2. \tag{3.24}$$

在共振情形 $l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2 = 0$ 下，积分 $\int_0^\tau e^{is(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)} ds$ 可以精确计算。因此，我们只需考虑非共振情形 $l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2 \neq 0$，即

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^n &= \mathcal{R}(v(t_n)) + \mathcal{W}^n \\ &= \mathcal{W}^n + i\varepsilon^2 \sum_{l \in \mathbb{Z}} e^{ikx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3 \in \mathbb{Z} \\ l = -l_1 + l_2 + l_3 \\ l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2 \neq 0}} e^{it_n(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)} \overline{\hat{v}_{l_1}} \hat{v}_{l_2} \hat{v}_{l_3} \\ &\qquad \int_0^\tau \left(e^{2isl_1^2} - e^{is(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)} \right) ds, \end{aligned} \tag{3.25}$$

with

$$\begin{aligned} &\|\mathcal{R}(v(t_n))\|_1^2 \\ &= \varepsilon^4 \sum_{l \in \mathbb{Z}} (1+|l|)^2 \left| \sum_{l \in \mathbb{Z}} e^{ikx} \sum_{\substack{l_1,l_2,l_3 \in \mathbb{Z} \\ l = -l_1 + l_2 + l_3 \\ l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2 \neq 0}} e^{it_n(l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2)} |2l_1(l_2+l_3) - 2l_2 l_3| \right. \\ &\qquad \left. \overline{\hat{v}_{l_1}} \hat{v}_{l_2} \hat{v}_{l_3} e^{ilx} \int_0^\tau e^{2isl_1^2} \left(\frac{e^{is(-2l_1(l_2+l_3)-2l_2l_3)} - 1}{s|2l_1(l_2+l_3) - 2l_2 l_3|} \right) sds \right|^2. \end{aligned} \tag{3.26}$$

由于 $\frac{e^{i\beta}-1}{|\beta|}$ 对 $\beta\in\mathbb{R}$ 一致有界，我们得到

$$\begin{aligned}
&\|\mathcal{R}(v(t_n))\|_1^2\\
&\lesssim \varepsilon^4\tau^4\sum_{l\in\mathbb{Z}}(1+|l|)^2\left(\sum_{l\in\mathbb{Z}}e^{ikx}\sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3\\ l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2\neq 0}}\left(|l_1l_2|+|l_1l_3|+|l_2l_3|\right)\hat{v}_{l_1}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\right)^2\\
&\lesssim \varepsilon^4\tau^4\sum_{l\in\mathbb{Z}}(1+|l|)^2\left(\sum_{l\in\mathbb{Z}}e^{ikx}\sum_{\substack{l_1,l_2,l_3\in\mathbb{Z}\\ l=-l_1+l_2+l_3\\ l^2+l_1^2-l_2^2-l_3^2\neq 0}}\left(1+|l_1|\right)\left(1+|l_2|\right)\left(1+|l_3|\right)\hat{v}_{l_1}\hat{v}_{l_2}\hat{v}_{l_3}\right)^2.
\end{aligned}$$

我们通过其傅里叶系数引入辅助函数 $g(x)=\sum_{l\in\mathbb{Z}}\hat{g}_l e^{ilx}$

$$\hat{g}_k=(1+|l|)|\hat{v}_l|. \tag{3.27}$$

根据双线性估计 (1.5)，我们有

$$\|\mathcal{R}(v(t_n))\|_1\lesssim\varepsilon^2\tau^2\left\|g^3\right\|_1, \tag{3.28}$$

这意味着

$$\|\mathcal{R}(v(t_n))\|_1\lesssim\varepsilon^2\tau^2\|v\|_2^3. \tag{3.29}$$

□

定理 *3.1* 的证明。引入误差函数 $e^n:=e^n(x)$，定义为

$$e^n:=v^n-v(t_n),\quad n=0,1,\dots, \tag{3.30}$$

我们采用标准归纳论证来证明改进的一致误差界 (3.16)。由于 $v^0=\phi(x)$，当 $n=0$时显然成立。假设对于所有$0\le n\le q\le\frac{T/\varepsilon^2}{\tau}-1$，误差界 (3.16) 均成立，接下来证明 $n=q+1$ 的情形。对于 $0\le n\le q$，我们有

$$e^{n+1}=v^{n+1}-\mathcal{S}_\tau(v(t_n))+\mathcal{E}^n=e^n+Z^n+\mathcal{E}^n, \tag{3.31}$$

其中 Z^n 定义为

$$\begin{aligned}
Z^n=i\varepsilon^2\tau\Bigg[&e^{-it_n\partial_x^2}\left(\left(e^{it_n\partial_x^2}v(t_n)\right)^2\left(\varphi_1(-2i\tau\partial_x^2)e^{-it_n\partial_x^2}\overline{v(t_n)}\right)\right)\\
&-e^{-it_n\partial_x^2}\left((e^{it_n\partial_x^2}v^n)^2(\varphi_1(-2i\tau\partial_x^2)e^{-it_n\partial_x^2}\overline{v^n})\right)\\
&+2(\widehat{g(v(t_n))})_0v(t_n)-2(\widehat{g(v^n)})_0v^n-h(v(t_n))+h(v^n)\Bigg],
\end{aligned}$$

满足以下界

$$\|Z^n\|_1\lesssim\varepsilon^2\tau\|e^n\|_1. \tag{3.32}$$

由（3.31）可得，对于 $0 \le n \le q$,

$$e^{n+1} = e^0 + \sum_{k=0}^{n} \left(Z^k + \mathcal{E}^k \right). \tag{3.33}$$

由于 $e^0 = 0$，我们得到对于 $0 \le n \le q$,

$$\|e^{n+1}\|_1 \lesssim \varepsilon^2\tau^2 + \varepsilon^2\tau \sum_{k=0}^{n} \|e^k\|_1 + \left\| \sum_{k=0}^{n} \mathcal{R}(v(t_k)) \right\|_1. \tag{3.34}$$

对于扭曲变量 $v(t)$，我们有 $\|\partial_t \phi\|_{L^\infty([0,T/\varepsilon^2];H^m)} \lesssim \varepsilon^2$ 以及

$$\|v(t_n) - v(t_{n-1})\|_m \lesssim \varepsilon^2\tau, \quad 1 \le n \le \frac{T/\varepsilon^2}{\tau}. \tag{3.35}$$

根据 RCO 技术 [6], ，我们选择截断参数 $\tau_0 \in (0, 1)$ 以及相应的傅里叶模态 $N_0 = 2\lceil 1/\tau_0 \rceil$。结合 (3.34)，我们有

$$\left\|e^{n+1}\right\|_1 \lesssim \tau_0^{m-1} + \varepsilon^2\tau^2 + \varepsilon^2\tau \sum_{k=0}^{n} \left\|e^k\right\|_1 + \|\mathcal{L}^n\|_1, \tag{3.36}$$

with

$$\mathcal{L}^n = \sum_{k=0}^{n} P_{N_0}(\mathcal{R}(v(t_k))). \tag{3.37}$$

定义指标集

$$\mathcal{T}_{N_0} = \{l \mid l = -\frac{N_0}{2}, \ldots, \frac{N_0}{2} - 1\}, \tag{3.38}$$

对于 $l \in \mathcal{T}_{N_0}$，定义与 l 相关联的指标集 $\mathcal{I}_l^{N_0}$为

$$\mathcal{I}_l^{N_0} = \{(l_1, l_2, l_3) \mid -l_1 + l_2 + l_3 = l,\ l_1, l_2, l_3 \in \mathcal{T}_{N_0}\}. \tag{3.39}$$

于是可得如下展开式

$$P_{N_0}(\mathcal{R}(v(t_k))) = \sum_{l \in \mathcal{T}_{N_0}} \sum_{(l_1,l_2,l_3) \in \mathcal{I}_l^{N_0}} \mathcal{G}_{k,l,l_1,l_2,l_3}(s) e^{ilx},$$

其中，系数 $\mathcal{G}_{k,l,l_1,l_2,l_3}(s)$ 仅是 s 的函数,

$$\mathcal{G}_{k,l,l_1,l_2,l_3}(s) = e^{i(t_k+s)\delta_{l,l_1,l_2,l_3}} \left(\hat{v}_{l_1}(t_k)\right)^* \hat{v}_{l_2}(t_k) \hat{v}_{l_3}(t_k), \tag{3.40}$$

以及 $\delta_{l,\ l_1,\ l_2,\ l_3} = l^2 + l_1^2 - l_2^2 - l_3^2$。(3.34) 中的余项为

$$\mathcal{L}^n(x) = i\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n} \sum_{l \in \mathcal{T}_{N_0}} \sum_{(l_1,l_2,l_3) \in \mathcal{I}_l^{N_0}} \Lambda_{k,l,l_1,l_2,l_3} e^{ilx}, \tag{3.41}$$

其中，对于 $\Lambda_{k,\ l,\ l_1,\ l_2,\ l_3}=0$，当 $\delta_{l,\ l_1,\ l_2,\ l_3}=0$ 时，以及当 $\delta_{l,\ l_1,\ l_2,\ l_3}\neq 0$ 时，我们有

$$\begin{aligned}\Lambda_{k,l,l_1,l_2,l_3} &= \int_0^\tau \mathcal{G}_{k,l,l_1,l_2,l_3}(s)\,ds - \int_0^\tau e^{2i(t_k+s)l_1^2}\,(\hat{v}_{l_1}(t_k))^*\,\hat{v}_{l_2}(t_k)\hat{v}_{l_3}(t_k)\,ds \\ &= r_{l,l_1,l_2,l_3}e^{it_k\delta_{l,l_1,l_2,l_3}}c_{k,l,l_1,l_2,l_3},\end{aligned} \tag{3.42}$$

系数 c_{k,l,l_1,l_2,l_3} 和 r_{l,l_1,l_2,l_3} 由下式给出

$$c_{k,l,l_1,l_2,l_3} = (\hat{v}_{l_1}(t_k))^*\hat{v}_{l_2}(t_k)\hat{v}_{l_3}(t_k), \tag{3.43}$$

$$r_{l,l_1,l_2,l_3} = \int_0^\tau e^{is\delta_{l,l_1,l_2,l_3}}\,ds - \int_0^\tau e^{isl_1^2}\,ds = O\left(\tau^2|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}-2l_1^2|\right). \tag{3.44}$$

由于 $\Lambda_{k,l,l_1,l_2,l_3}=0$ 对于$\delta_{l,l_1,l_2,l_3}=0$成立，我们只需考虑情形 $\delta_{l,l_1,l_2,l_3}\neq 0$。首先，对于$l\in\mathcal{T}_{N_0}$ 和 $(l_1,l_2,l_3)\in\mathcal{I}_l^{N_0}$，有

$$|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}|\le 2\delta_{N_0/2}=2\left(\frac{N_0}{2}\right)^2\le\frac{2(1+\tau_0)^2}{\tau_0^2}, \tag{3.45}$$

这意味着对于 $0<\tau\le \frac{\alpha\pi\tau_0^2}{2(1+\tau_0)^2}$，其中 $0<\tau_0,\alpha<1$,

$$\frac{\tau}{2}|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}|\le\alpha\pi. \tag{3.46}$$

记 $S_{n,l,l_1,l_2,l_3}=\sum_{k=0}^n e^{it_k\delta_{l,l_1,l_2,l_3}}\ (n\ge 0)$，并使用分部求和公式，由 (3.42) 可得

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^n\Lambda_{k,l,l_1,l_2,l_3} &= r_{l,l_1,l_2,l_3}\sum_{k=0}^{n-1}S_{k,l,l_1,l_2,l_3}\left(c_{k,l,l_1,l_2,l_3}-c_{k+1,l,l_1,l_2,l_3}\right) \\ &\quad + S_{n,l,l_1,l_2,l_3}\,r_{l,l_1,l_2,l_3}\,c_{n,l,l_1,l_2,l_3},\end{aligned} \tag{3.47}$$

and

$$\begin{aligned}&c_{k,l,l_1,l_2,l_3}-c_{k+1,l,l_1,l_2,l_3}\\ &=(\widehat{v}_{l_1}(t_k))^*(\widehat{v}_{l_2}(t_k)-\widehat{v}_{l_2}(t_{k+1}))\widehat{v}_{l_3}(t_k)+(\widehat{v}_{l_1}(t_k)-\widehat{v}_{l_1}(t_{k+1}))^*\widehat{v}_{l_2}(t_{k+1})\widehat{v}_{l_3}(t_k)\\ &\quad+(\widehat{v}_{l_1}(t_{k+1}))^*\widehat{v}_{l_2}(t_{k+1})(\widehat{v}_{l_3}(t_k)-\widehat{v}_{l_3}(t_{k+1})),\end{aligned} \tag{3.48}$$

其中 c^* 是 c的复共轭。由 (3.46) 可知，对于 $C=\frac{2\alpha}{\sin(\alpha\pi)}$，

$$|S_{n,l,l_1,l_2,l_3}|\le\frac{1}{|\sin(\tau\delta_{l,l_1,l_2,l_3}/2)|}\le\frac{C}{\tau|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}|},\quad\forall n\ge 0. \tag{3.49}$$

结合 (3.44)、(3.47)、(3.48) 和 (3.49)，可得

$$\begin{aligned}\left|\sum_{k=0}^{n}\Lambda_{k,l,l_1,l_2,l_3}\right| \lesssim \tau\frac{|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}-2l_1^2|}{|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}|}\sum_{k=0}^{n-1}\Big(&|\hat{v}_{l_1}(t_k)-\hat{v}_{l_1}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_2}(t_k)|\,|\hat{v}_{l_3}(t_k)|\\&+|\hat{v}_{l_1}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_2}(t_k)-\hat{v}_{l_2}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_3}(t_k)|\\&+|\hat{v}_{l_1}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_2}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_3}(t_k)-\hat{v}_{l_3}(t_{k+1})|\Big)\\&+\tau\frac{|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}-2l_1^2|}{|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}|}\,|\hat{v}_{l_1}(t_n)|\,|\hat{v}_{l_2}(t_n)|\,|\hat{v}_{l_3}(t_n)|\,.\end{aligned}\tag{3.50}$$

由于 $\delta_{l,l_1,l_2,l_3}-2l_1^2=-2l_1(l_2+l_3)+2l_2l_3$，对于 $l\in\mathcal{T}_{N_0}$ 和 $(l_1,l_2,l_3)\in\mathcal{I}_l^{N_0}$，有

$$(1+|l|)\frac{|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}-2l_1^2|}{|\delta_{l,l_1,l_2,l_3}|}\lesssim\prod_{j=1}^{3}(1+|l_j|).\tag{3.51}$$

根据 (3.41)、(3.50) 和 (3.51)，由 (3.34) 可得，

$$\begin{aligned}&\|\mathcal{L}^n\|_1^2\\&=\varepsilon^4\sum_{l\in\mathcal{T}_{N_0}}(1+l^2)\Big|\sum_{(l_1,l_2,l_3)\in\mathcal{I}_l^{N_0}}\sum_{k=0}^{n}\Lambda_{k,l,l_1,l_2,l_3}\Big|^2\\&\lesssim\varepsilon^4\tau^2\Bigg\{\sum_{l\in\mathcal{T}_{N_0}}\Bigg(\sum_{(l_1,l_2,l_3)\in\mathcal{I}_l^{N_0}}|\hat{v}_{l_1}(t_n)|\,|\hat{v}_{l_2}(t_n)|\,|\hat{v}_{l_3}(t_n)|\prod_{j=1}^{3}(1+|l_j|)\Bigg)^2\\&\quad+n\sum_{k=0}^{n-1}\sum_{l\in\mathcal{T}_{N_0}}\Bigg[\Bigg(\sum_{(l_1,l_2,l_3)\in\mathcal{I}_l^{N_0}}|\hat{v}_{l_1}(t_k)-\hat{v}_{l_1}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_2}(t_k)|\,|\hat{v}_{l_3}(t_k)|\prod_{j=1}^{3}(1+|l_j|)\Bigg)^2\\&\quad+\Bigg(\sum_{(l_1,l_2,l_3)\in\mathcal{I}_l^{N_0}}|\hat{v}_{l_1}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_2}(t_k)-\hat{v}_{l_2}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_3}(t_k)|\prod_{j=1}^{3}(1+|l_j|)\Bigg)^2\\&\quad+\Bigg(\sum_{(l_1,l_2,l_3)\in\mathcal{I}_l^{N_0}}|\hat{v}_{l_1}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_2}(t_{k+1})|\,|\hat{v}_{l_3}(t_k)-\hat{v}_{l_3}(t_{k+1})|\prod_{j=1}^{3}(1+|l_j|)\Bigg)^2\Bigg]\Bigg\}.\end{aligned}\tag{3.52}$$

引入辅助函数 $\xi(x)=\sum_{l\in\mathbb{Z}}(1+|l|)\hat{v}_l(t_n)|\,e^{ilx}$，其中 $\xi(x)\in H^{m-1}_{\mathrm{per}}(\Omega)$ 由假设（B）蕴含，且 $\|\xi\|_{H^s}\lesssim\|v(t_n)\|_{H^{s+1}}$ 展开

$$|\xi(x)|^2\xi(x)=\sum_{l\in\mathbb{Z}}\sum_{l=-l_1+l_2+l_3}\prod_{j=1}^{3}\left((1+|l_j|)\,|\hat{v}_{l_j}(t_n)|\right)e^{ilx},\tag{3.53}$$

可得

$$\sum_{l\in\mathcal{T}_{N_0}}\Big(\sum_{(l_1,l_2,l_3)\in\mathcal{I}_l^{N_0}}|\hat{v}_{l_1}(t_n)|\,|\hat{v}_{l_2}(t_n)|\,|\hat{v}_{l_3}(t_n)|\prod_{j=1}^{3}(1+|l_j|)\Big)^2$$
$$\le\big\||\xi(x)|^2\xi(x)\big\|^2\lesssim\|\xi(x)\|_1^6\lesssim\|v(t_k)\|_2^6\lesssim 1. \tag{3.54}$$

注意到 (3.35)，我们可以相应地估计 (3.52) 中的各项:

$$\begin{aligned}&\Big\|\sum_{k=0}^{n}P_{N_0}\mathcal{R}(v(t_k))\Big\|_1^2\\&\lesssim\varepsilon^4\tau^2\Big[\|v(t_k)\|_2^6+n\sum_{k=0}^{n-1}\|v(t_k)-v(t_{k+1})\|_2^2\left(\|v(t_k)\|_2+\|v(t_{k+1})\|_2\right)^4\Big]\\&\lesssim\varepsilon^4\tau^2+n^2\varepsilon^4\tau^2(\varepsilon^2\tau)^2\lesssim\varepsilon^4\tau^2,\quad n\le q,\end{aligned} \tag{3.55}$$

而 (3.66) 蕴含

$$\|e^{n+1}\|_1\lesssim\tau_0^{m-1}+\varepsilon^2\tau+\varepsilon^2\tau\sum_{k=0}^{n}\|e^k\|_1,\quad 0\le n\le q. \tag{3.56}$$

利用离散 Gronwall 不等式，我们得到

$$\|e^{q+1}\|_1\lesssim\varepsilon^2\tau+\tau_0^{m-1},\quad 0\le q\le\frac{T/\varepsilon^2}{\tau}-1, \tag{3.57}$$

这意味着在 $n=q+1$ 处，(3.14) 中的第一个不等式成立。对于 $0<\tau_0\le 1$，当 $0<\tau\le\frac{\alpha\pi\tau_0^2}{(1+\tau_0)^2}<1$ 时，由三角不等式可得

$$\left\|v^{q+1}\right\|_1\le\|v(x,t_{q+1})\|_1+\left\|e^{q+1}\right\|_1\le M+1,\quad 0\le q\le\frac{T/\varepsilon^2}{\tau}-1,$$

这意味着 (3.14) 的归纳过程已经完成。 □

3.3 一种非共振对称二阶低正则性积分器 r

在本小节中，我们将设计一种非共振对称二阶低正则性积分器，它既能处理粗糙初始数据，也能针对光滑初始数据获得改进的均匀误差界。对于对称格式，我们要求该映射是自伴的 [4, 17]，即 $\widetilde{\mathcal{S}}_\tau=\widetilde{\mathcal{S}}_{-\tau}^{-1}$。遵循 [28] 中的思路，我们将对称二阶方法构造为复合格式，其形式为

$$w^{n+1}=\widetilde{\mathcal{S}}_{-\tau/2}^{-1}\circ\widetilde{\mathcal{S}}_{\tau/2}(w^n). \tag{3.58}$$

回顾一阶格式

$$\begin{aligned}w^{n+1}=\widetilde{\mathcal{S}}_\tau(w^n):=&\,e^{i\tau\partial_x^2}\left[w^n-i\tau\varepsilon^2(w^n)^2(\varphi_1(-2i\tau\partial_x^2)\overline{w^n})\right]\\&-2i\varepsilon^2\tau\widehat{(g(w^n))}_0e^{i\tau\partial_x^2}w^n+i\varepsilon^2\tau e^{i\tau\partial_x^2}h(w^n),\end{aligned} \tag{3.59}$$

我们有 e 以下非共振对称二阶低正则格式（NRSLI2 ）

$$
\begin{aligned}
w^{n+1} &= \widetilde{\mathcal{M}}_\tau(w^n, w^{n+1}) \\
&:= e^{i\tau\partial_x^2}\left[w^n - \frac{i\tau\varepsilon^2}{2}(w^n)^2(\varphi_1(-i\tau\partial_x^2)\overline{w^n})\right] - \frac{i\varepsilon^2\tau}{2}\left((w^{n+1})^2(\varphi_1(i\tau\partial_x^2)\overline{w^{n+1}})\right) \\
&\quad - \frac{i\varepsilon^2\tau}{2}\left[2(\widehat{g(w^n)})_0 e^{i\tau\partial_x^2}w^n - e^{i\tau\partial_x^2}h(w^n) + 2(\widehat{g(w^{n+1})})_0 w^{n+1} - h(w^{n+1})\right], \qquad (3.60)
\end{aligned}
$$

其中初始数据 $w^0 = \phi(x)$ 和 g, h 定义于 (3.11) 中。

3.4 NRSLI2 的改进的均匀误差界 (3.60)

在本小节中，我们对非共振对称二阶低正则性格式（NRSLI2）(3.60)进行长时间误差界分析。

对于三次非线性薛定谔方程 (1.4)，假设精确解 $w(x,t)$ 在时刻 $T_\varepsilon = T/\varepsilon^2$ 之前满足以下条件，其中 $T > 0$ 固定:

$$
\text{(C)} \qquad \|w(x,t)\|_{L^\infty([0,T_\varepsilon];H^m_{\mathrm{per}})} \lesssim 1, \quad m \geq 4.
$$

那么，对于具有 $O(\varepsilon^2)$-非线性项的三次非线性薛定谔方程，在时间范围达到 $O(1/\varepsilon^2)$ 阶时，NRSLI2 (3.60) 满足以下改进的均匀误差界。

定理 3.5. 设 w^n 为由非共振对称二阶低正则性（*NRSLI2*）格式 (3.60)得到的数值近似。在假设 *(C)* 下，对于$0 < \tau_0 \leq 1$ 充分小且与 ε 无关，使得当 $0 < \tau \leq \frac{\alpha\pi\tau_0^2}{(1+\tau_0)_2} < 1$ 时，其中常数 $\alpha \in (0,1)$，有如下误差界

$$
\|w(t_n) - w^n\|_1 \lesssim \varepsilon^2\tau^2 + \tau_0^{m-1}, \quad \|w^n\|_1 \leq 1 + M, \quad 0 \leq n \leq \frac{T/\varepsilon^2}{\tau}, \qquad (3.61)
$$

其中 $M := \|w\|_{L^\infty([0,T_\varepsilon];H^1)}$。特别地，若精确解是光滑的，即 $w(t) \in H^\infty_{\mathrm{per}}$，则$\tau_0^{m-1}$误差项将呈指数衰减；当$\tau_0$ 较小但固定时，在实际计算中可忽略该项，因此估计在实际应用中可化为

$$
\|w(t_n) - w^n\|_1 \lesssim \varepsilon^2\tau^2. \qquad (3.62)
$$

注 3.6. 二阶时间分裂方法需要额外四阶空间导数才能得到改进的一致误差界，而所提出的低正则性格式 (3.60) 需要额外三阶空间导数。与 *[39],*中的经典低正则性格式相比，对于光滑初始数据，新的非共振格式在 $O(\varepsilon^2\tau^2)$ 下可获得改进的均匀误差界，且该误差界在时间达到 $O(1/\varepsilon^2)$ 之前成立。

与定理 3.1 的证明相同，我们先在以下引理中估计局部截断误差。证明过程与 $[2,4]$ 中的估计类似，为简洁起见，此处省略细节。

引理 3.7。 三次非线性薛定谔方程 (1.4) 的非共振对称二阶格式(3.60) 的局部截断误差可写为 ($0 \le n \le \frac{T/\varepsilon^2}{\tau} - 1$)

$$\widetilde{\mathcal{E}}^n := \widetilde{\mathcal{M}}_\tau(w(t_n), w(t_{n+1})) - w(t_{n+1}) = \widetilde{\mathcal{R}}(w(t_n), w(t_{n+1})) + \widetilde{\mathcal{W}}^n, \tag{3.63}$$

那么，在假设 *(C)* 下，对于 $0 < \varepsilon \le 1$，我们有如下误差界

$$\left\|\widetilde{\mathcal{R}}(w(t_n), w(t_{n+1}))\right\|_1 \lesssim \varepsilon^2\tau^3 \left(\|w(t_n)\|_4^3 + \|w(t_{n+1})\|_4^3\right), \quad \left\|\widetilde{\mathcal{W}}^n\right\|_1 \lesssim \varepsilon^4\tau^3. \tag{3.64}$$

定理 *3.5* 的证明。 为简单起见，我们只展示一阶格式与二阶格式证明之间的差异。定义误差函数 $\widetilde{e}^n := \widetilde{e}^n(x)$ 如下:

$$\widetilde{e}^n := w^n - w(t_n), \quad n = 0, 1, \ldots, \tag{3.65}$$

为证明改进的均匀误差界 (3.61)，我们采用标准归纳论证。由于 $w^0 = \phi(x)$，当 $n = 0$ 时结论显然成立。假设对所有 $0 \le n \le q \le \frac{T/\varepsilon^2}{\tau} - 1$，误差界 (3.61) 均成立，下面证明 $n = q + 1$ 的情形。对于 $0 \le n \le q$，按照与一阶格式类似的步骤，我们有

$$\left\|\widetilde{e}^{n+1}\right\|_1 \lesssim \tau_0^{m-1} + \varepsilon^2\tau^2 + \varepsilon^2\tau \sum_{k=0}^{n} \left\|\widetilde{e}^k\right\|_1 + \|\widetilde{\mathcal{L}}^n\|_1, \tag{3.66}$$

with

$$\widetilde{\mathcal{L}}^n = \sum_{k=0}^{n} P_{N_0}(\widetilde{\mathcal{R}}(w(t_k), w(t_{k+1}), t_k)). \tag{3.67}$$

对于 (3.66) 右端的最后一项，我们有

$$\begin{aligned}
&\left\|\sum_{k=0}^{n} P_{N_0}\widetilde{\mathcal{R}}(w(t_k), w(t_{k+1}))\right\|_1^2 \\
&\lesssim \varepsilon^4\tau^4\left[\|w(t_n)\|_2^6 + \|w(t_{n+1})\|_2^6 + n\sum_{k=0}^{n-1}\|w(t_k) - w(t_{k+1})\|_2^2 \left(\|w(t_k)\|_2 + \|w(t_{k+1})\|_2\right)^4\right] \\
&\lesssim \varepsilon^4\tau^4 + n^2\varepsilon^4\tau^2(\varepsilon^2\tau^2)^2 \lesssim \varepsilon^4\tau^4, \quad n \le q,
\end{aligned}$$

而 (3.66) 推出

$$\|\widetilde{e}^{n+1}\|_1 \lesssim \tau_0^{m-1} + \varepsilon^2\tau + \varepsilon^2\tau^2 \sum_{k=0}^{n} \|\widetilde{e}^k\|_1, \quad 0 \le n \le q. \tag{3.68}$$

利用离散 Gronwall 不等式，我们有

$$\|\widetilde{e}^{q+1}\|_1 \lesssim \varepsilon^2\tau^2 + \tau_0^{m-1}, \quad 0 \le q \le \frac{T/\varepsilon^2}{\tau} - 1, \tag{3.69}$$

这意味着在 $n = q+1$ 处有 (3.14) 中的第一个不等式。对于 $0 < \tau_0 \le 1$，当 $0 < \tau \le \frac{\alpha\tau_0^2}{(1+\tau_0)^2} < 1$ 时，由三角不等式可得

$$\left\|w^{q+1}\right\|_1 \le \|w(x, t_{q+1})\|_1 + \left\|\widetilde{e}^{q+1}\right\|_1 \le M + 1, \quad 0 \le q \le \frac{T/\varepsilon^2}{\tau} - 1,$$

这意味着针对 (3.61) 的归纳过程已经完成。 □

4 数值结果

理解了定理 2.2、2.9、3.1 和 3.5 中主要结果的证明后，我们现在可以转向一些数值结果，将理论与实际观察进行比较。在接下来的数值实验中，我们采用标准的傅里叶谱方法作为空间离散的基础。在所有实验中，我们使用 $M = 2^{11}$ 个傅里叶模态，并使用上述对称格式以较小的时间步长$\tau = 10^{-6}$计算参考解。在这些数值实验中，我们选取如下形式的初始数据（参见 [39, 第 5.1] 节）：首先，我们固定空间离散中的傅里叶模态数 $2M$，并从均匀随机分布的复数向量中抽取一个样本：

$$\mathbf{U} = (U_{-M+1}, \dots, U_M), \quad U_j \sim U([0, 1+i]), j = 1, \dots, 2M.$$

对于给定的 θ 值，我们通过其傅里叶系数给出初始条件 $u(0,\cdot)$:

$$\hat{u}^0_{-M+j} = \langle -M+j \rangle^{-\theta} U_{-M+j}, \quad j = 1, \dots, 2M, \text{ where } \langle m \rangle = \begin{cases} |m|, & m \neq 0, \\ 1, & m = 0. \end{cases} \tag{4.1}$$

关于均匀分布的联合概率测度，该初始条件几乎必然属于 H^θ。

4.1 二次非线性薛定谔方程的长时间行为

我们首先将定理 2.2 和 2.9 的结果与实际实验进行比较。在图 2 中，可以观察到误差在 $t = T/\varepsilon$ 处对 ε 的明显线性依赖，这与定理 2.2 和 2.9 的预测一致。此外，图 3 展示了基于共振的格式中误差良好的长时间行为（注意，此处的初始数据具有式 (4.1) 的形式，其中 $\theta = 2.0$），即使分裂方法中的误差不断增大，这种长时间行为似乎仍能得到良好保持。

此外，从图4中可以观察到，在 $t = T/\varepsilon$ 处，我们得到了预期的时间步长 τ的线性/二次依赖关系。

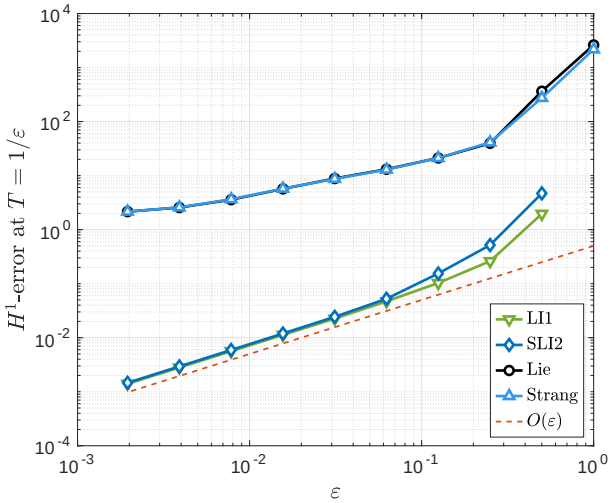


图 2：对于取自 H^1 ($\theta = 1$) 的初始数据，在固定 $\tau = 0.25$ 时的长时间 H^1-误差。

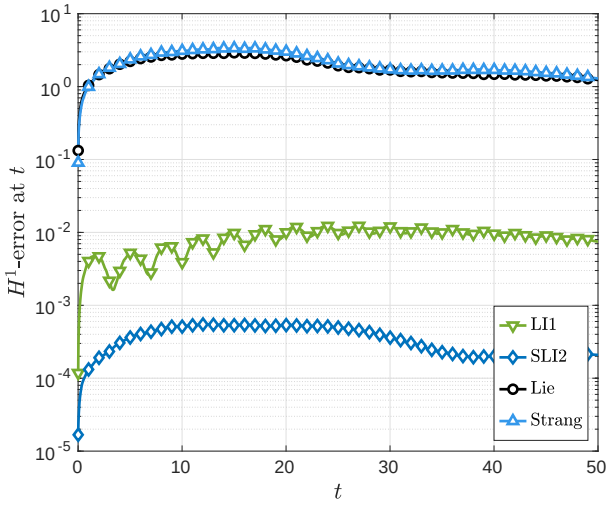
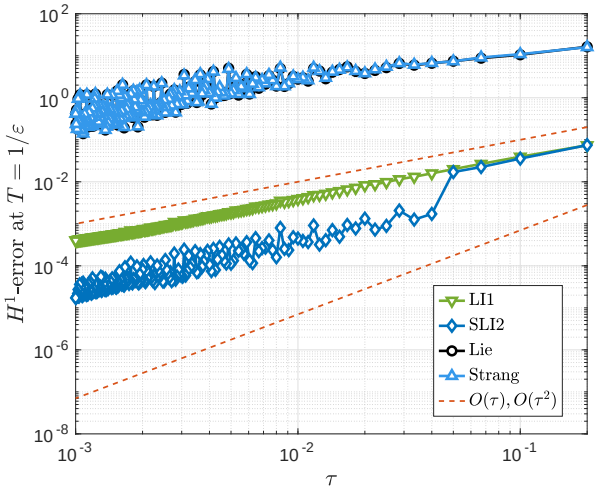


图 3：对于取自 H^1 ($\theta = 1$) 的初始数据，在固定 $\tau = 0.01$ 时，误差随 t 的变化。

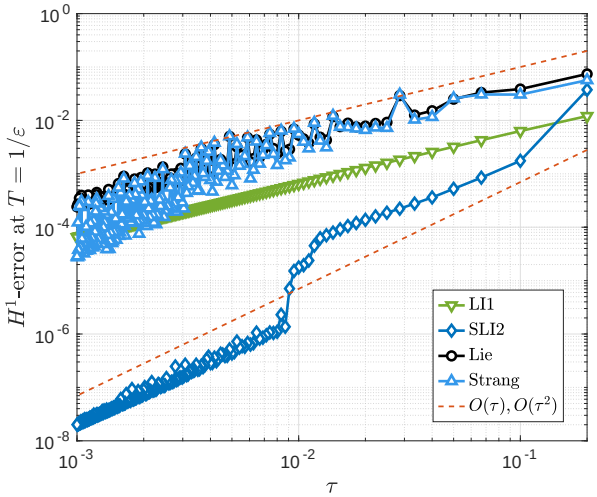
4.2 三次非线性薛定谔方程的长时间行为

对于三次非线性薛定谔方程的情形，我们也可以进行类似的数值实验。下文还将纳入参考解“Ostermann & Schratz '18”，这是 [39]中引入的方法。定理 3.1 和 3.5 的结果表明，我们的新型非共振低正则性积分器在 $t = T/\varepsilon^2$ 处的误差会随 ε^2呈二次衰减。图5显示，与 [39] 中首次提出的标准低正则性积分器相比，新格式有明显改进。这证实，即使对于 H^2 初始数据，也能观察到长时间行为的改善，凸显了这些新格式的重要性。

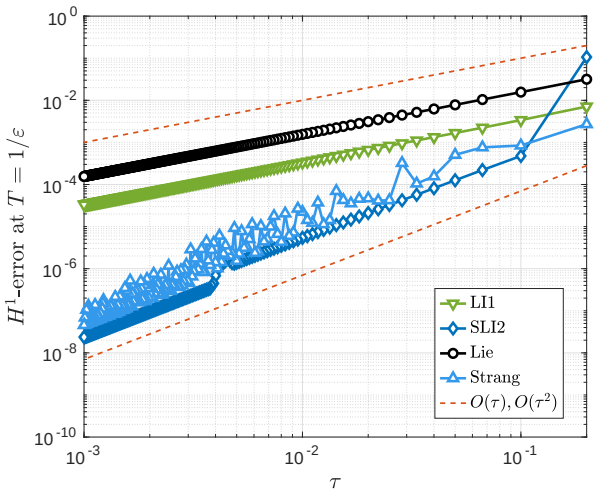
此外，从图6中可以看出，即使与分裂方法相比，新方法在长时间范围内也能显著降低误差。



(a) H^1 初始数据（$\theta = 1$）。



(b) H^2 初始数据（$\theta = 2$）。



(c) H^3 初始数据（$\theta = 3$）。

图4：固定 $\varepsilon = 0.1$时，长时间 H^1误差随 τ 的变化。

最后，我们可以从图7中验证，我们的方法确实是低正则性积分器，其收敛阶与定理 3.1 和 3.5 预测的线性和二次收敛阶一致。

5 结论

我们严格证明了弱非线性或小初值条件下，非线性薛定谔方程（NLSE）长时间动力学中不同低正则性格式的改进的一致误差界。对于二次非线性薛定谔方程，针对解属于 H^r 的情形，一阶格式和对称二阶格式分别在 $O(\varepsilon\tau)$ 和 $O(\varepsilon\tau^2)$ 下，建立了在时间尺度达到 $O(1/\varepsilon)$ 时具有 $r > 1/2$ 的改进一致 H^r 界。对于三次非线性薛定谔方程，我们

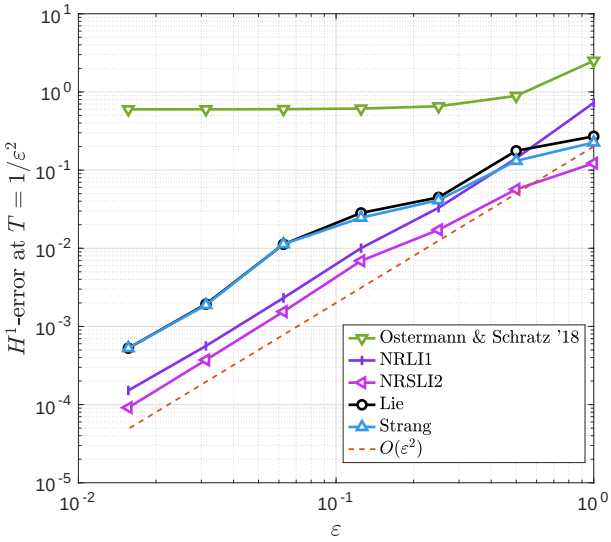


图 5：固定 $\tau = 0.05$ 时，初始数据属于 H^2 $(\theta = 2)$ 的长时间 H^1-误差。

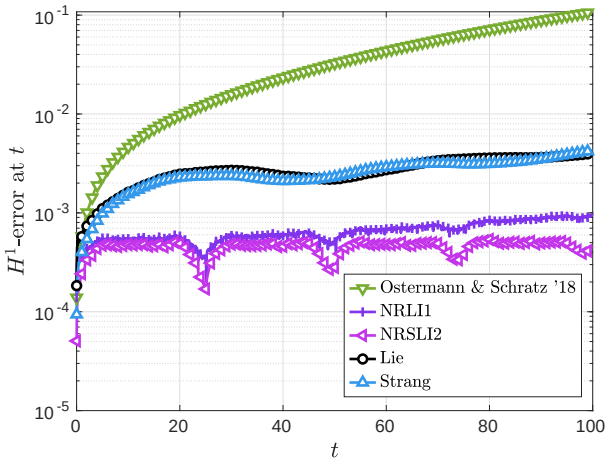
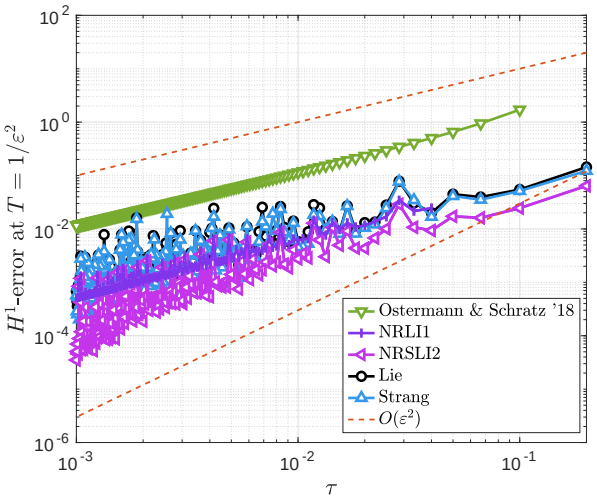


图 6：固定 $\tau = 0.01$ 时，初始数据属于 H^2 $(\theta = 2)$ 的误差随 t 变化的情况 .

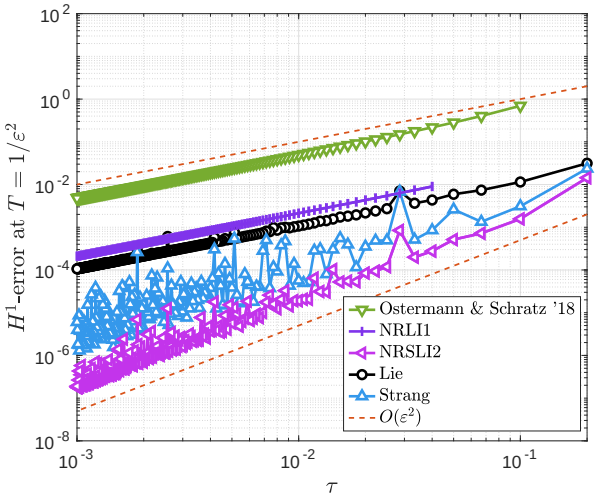
设计了新的非共振一阶格式和对称二阶低正则性格式，并借助正则性补偿振荡（RCO）技术，建立了时间尺度达到 $O(1/\varepsilon^2)$ 时的改进一致误差界。我们给出了数值结果，以验证改进的一致误差界，并凸显所提出的新型非共振格式的优越性能。

参考文献

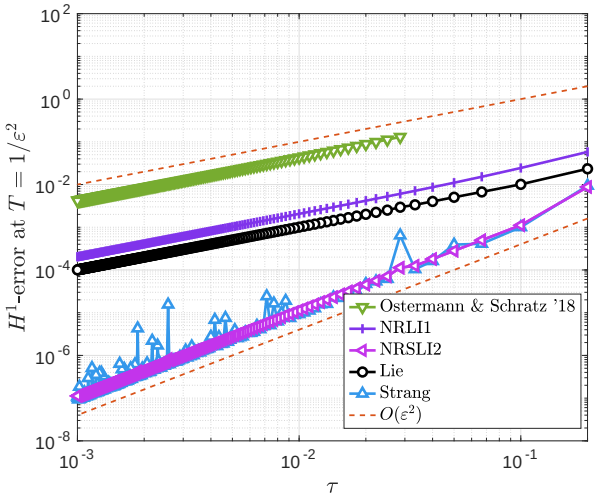
[1] F. Abdullaev、S. Darmanyan 和 P. Khabibullaev，光孤子，Springer-Verlag，纽约（1993）。



(a) H^2 初始数据（$\theta = 2$）。



(b) H^3 初始数据（$\theta = 3$）。



(c) H^4 初始数据（$\theta = 4$）。

图7：固定 $\varepsilon = 0.25$时，长期 H^1-误差随 τ的变化。

[2] Y. Alama Bronsard，非线性薛定谔方程的对称低正则性积分器，arXiv: 2301.13109（2023）。[3] X. Antoine、W. Bao 和 C. Besse，非线性薛定谔方程/*Gross–Pitaevskii*方程动力学的计算方法，Comput. Phys. Commun. 184，2621–2633（2013）。[4] V. Banica、G. Maierhofer 和 K. Schratz，通过 *Hasimoto*变换求解薛定谔映射的数值积分器，arXiv: 2211.01282（2022）。[5] W. Bao 和 Y. Cai，玻色–爱因斯坦凝聚的数学理论与数值方法，Kinet. Relat. Mod. 6，1–135（2013）。

[6] *W. Bao, Y. Cai* 和 *Y. Feng*，长时间（非线性）薛定谔方程时间分裂方法的改进一致误差界，数学计算，即将发表。[7] *I. Bejenaru* 和 *T. Tao*，二次非线性薛定谔方程的尖锐适定性与非适定性结果，*J. Funct. Anal. 233, 228–259 (2006).*[8] *J. Bourgain*，某些格点子集的傅里叶变换限制现象及其在非线性演化方程中的应用。*I.* 薛定谔方程，*Geom. Funct. Anal. 3, 107–156 (1993).*[9] *Y. Bruned* 和 *K. Schratz*，通过装饰树构造色散方程的基于共振的格式，*Forum of Math., Pi 10, 1–76 (2022).*[10] *A. V. Buryak, P. Di Trapani, D. V. Skryabin* 和 *S. Trillo*，二次非线性产生的光孤子：从基础物理到未来应用，*Phys. Rep. 370, 63–235 (2002).*[11] *T. Buckmaster, P. Germain, Z. Hani* 和 *J. Shatah*，大区域上非线性薛定谔方程的有效动力学，*Comm. Pure Appl. Math. 71 (2018), no. 7, 1407–1460.*[12] *M. C. Calvo* 和 *K. Schratz*，从经典区间到非相对论极限区间，*Klein–Gordon* 方程的一致精确低正则性积分器，*SIAM J. Numer. Analy. 60, 888–912 (2022).*[13] *R. Carles* 和 *J. D. Silva*，时变势下非线性薛定谔方程的长时间行为，*Comm. Math. Sci. 13, 443–460 (2015).*[14] *F. Castella, Ph. Chartier, F. Méhats* 和 *A. Murua*，非线性薛定谔方程的频闪平均，计算数学基础 *15, 519–559 (2015).*[15] *T. Cazenave* 和 *F. B. Weissler*，临界非线性薛定谔方程的柯西问题，*Non. Anal. TMA 14, 807–836 (1990).*[16] *D. Cohen, E. Hairer* 和 *C. Lubich*，强振荡微分方程的调制傅里叶展开，计算数学基础 *3, 327–345 (2003).*[17] *E. Celledoni, D. Cohen* 和 *B. Owren*，对称指数积分器及其在三次薛定谔方程中的应用，计算数学基础 *8, 303–317 (2008).*[18] *M. Colin, Th. Colin* 和 *M. Ohta*，具有三波相互作用的非线性薛定谔方程组孤立波的稳定性，*Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire 26, 2211–2226 (2009).*[19] *M. Colin, L. Di Menza* 和 *J. C. Saut*，二次介质中的孤子，*Nonlinearity 29, 1000–1035 (2016).*[20] *M. Delfour, M. Fortin* 和 *G. Payre*，非线性薛定谔方程的有限差分解，*J. Comput. Phys. 44, 277-288 (1981).*

[21] *E. Faou*，《几何数值积分与薛定谔方程》，欧洲数学学会，苏黎世，*2012*。[22] *E. Faou, B. Grébert* 和 *E. Paturel*，半线性哈密顿偏微分方程的 *Birkhoff* 正规形与分裂方法。第一部分：有限维离散化，*Numer. Math. 114, 429–458 (2010).*[23] *E. Faou, B. Grébert* 和 *E. Paturel*，半线性哈密顿偏微分方程的 *Birkhoff* 正规形与分裂方法。第二部分：抽象分裂，*Numer. Math. 114, 459–490 (2010).*[24] *K. Fujiwara* 和 *T. Ozawa*，无规范不变性的周期非线性薛定谔方程强解的存在时间，*J. Evol. Equ. 17, 1023–1030 (2017).*[25]*L. Gauckler* 和 *C. Lubich*，非线性薛定谔方程及其长时间谱半离散化，计算数学基础 *10, 141–169 (2010).*[26] *L. Gauckler* 和 *C. Lubich*，非线性薛定谔方程的长时间分裂积分器，计算数学基础 *10, 275–302 (2010).*[27] *J. Ginibre* 和 *G. Velo*，一类非线性薛定谔方程。*I.* 一般情形下的柯西问题，*J. Funct. Anal. 32, 1–32 (1979).*[28] *E. Hairer*、*C. Lubich* 和 *G. Wanner*，《几何数值积分：常微分方程的保结构算法》，*Springer*，柏林，*2002*。[29] *M. Hochbruck* 和 *A. Ostermann*，指数积分器，*Acta Numer. 19, 209–286 (2010).*[30] *M. Hofmanová* 和 *K. Schratz*，*KdV* 方程的一种指数型积分器，*Numer. Math. 136, 1117–1137 (2017).*[31] *M. Ikeda* 和 *T. Inui*，无规范不变性半线性薛定谔方程的 L^2 或 H^1-解的小数据爆破解，*J. Evol. Equ. 15, 571–581 (2015).*[32] *Kening, G. Ponce* 和 *L. Vega*，一维半线性薛定谔方程的二次型，*Trans. Amer. Math. Soc. 348, 3323–3353 (1996).*[33] *N. Kishimoto*，二次非线性薛定谔方程的低正则性双线性估计，*J. Differential Equations 247, 1397–1439 (2009).*[34] *B. Li* 和 *Y. Wu*，一维周期三次非线性薛定谔方程的全离散低正则性积分器，*Numer. Math. 149, 151–183 (2021).*[35] *G. Maierhofer* 和 *K. Schratz*，弥合差距：以 *KdV* 方程为例探讨辛性与低正则性，*arXiv: 2205.05024 (2022).*[36] *R. I. McLachlan* 和 *G. R. W. Quispel*，分裂方法，*Acta Numer. 11, 341–434 (2002).*[37] *T. Oh*，无规范不变性周期性非线性薛定谔方程的一个爆破解结果，*C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 350, 389–392 (2012).*

[38] *A. Ostermann*、*F. Rousset* 和 *K. Schratz*，《周期性非线性薛定谔方程的傅里叶积分器：通过离散 *Bourgain* 空间获得低正则性估计》，欧洲数学会杂志，即将刊出。[39] *A. Ostermann* 和 *K. Schratz*，《半线性薛定谔方程的低正则性指数型积分器》，计算数学基础 *18*，*731–755*（*2018*）。[40] *T. Ozawa*，《关于二次非线性薛定谔方程的注记》，函数方程 *38*，*217–232*（*1995*）。[41] *L. P. Pitaevskii* 和 *S. Stringari*，《玻色-爱因斯坦凝聚》，克拉伦登出版社（*2003*）。[42] *H. Sasaki*，《具有次临界幂非线性项的非线性薛定谔方程的存在时间》，微分方程进展 *14*，*1021–1039*（*2009*）。[43] *E. Schrödinger*，《原子和分子力学的波动理论》，物理评论 *28*，*1049–1070*（*1926*）。[44] *C. Sulem* 和 *P. Sulem*，《非线性薛定谔方程：自聚焦与波坍缩》，*Springer*（*1999*）。[45] *H. Sunagawa*，《非线性薛定谔方程小初值解存在时间的下界》，大阪数学杂志 *43*，*771–789*（*2006*）。[46] *Y. Wang* 和 *X. Zhao*，《非线性 *Klein-Gordon* 方程的对称低正则性积分器》，数学计算 *91*，*2215–2245*（*2022*）。[47] *Y. Wu* 和 *F. Yao*，《在 $\mathbb{T}$ 上无正则性损失的非线性薛定谔方程一阶傅里叶积分器》，数学计算 *91*，*1213–1235*（*2022*）。