arXiv:2302.06043v1 [math.NA] 13 Feb 2023

# 周期性耦合簇计算中的有限尺寸效应

Xin Xing[1], * 和 Lin Lin[1, 2, †]加州大学伯克利分校数学系，CA 94720，美国[2]劳伦斯伯克利国家实验室应用数学与计算研究部，Berkeley, CA 94720，美国

我们首次对有带隙周期性系统中最简单且具有代表性的耦合簇理论——耦合簇双激发（CCD）理论——的有限尺寸误差进行了严格研究。假设使用精确的 Hartree-Fock 轨道和轨道能量求解 CCD方程，我们证明有限尺寸误差的收敛速率[1]按 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-3})$ 缩放，其中 $N_{\mathbf{k}}$ 是布里渊区中的离散点数量，用于表征系统大小。我们的分析表明，主要误差来自耦合簇振幅计算；采用精确振幅后，能量计算中有限尺寸误差的收敛可提高至 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-1})$。此外，我们首次证明了周期性系统中三阶 Møller-Plesset 微扰理论（MP3）的有限尺寸误差缩放规律。

目录

I. 引言 3 II. 背景 4 III. 主要结果陈述 6 IV. 定理 1 的证明 7 IV.1. 设定 7 IV.2. 证明概要 8 V. 主要技术工具 11 V.1. 代数奇异性 11 V.2. 具有代数奇异性的周期函数的求积误差 14 VI. 数值示例 15 VII. 讨论 16 参考文献 19 A. MP3 和耦合簇双激发（CCD）简介 20 A.1. 有限情形下的振幅 20 A.2. 热力学极限下的振幅 21 A.3. CCD($n$) 中的振幅 22

* xxing@berkeley.edu

† linlin@math.berkeley.edu

B. 定理 1 的证明 23 B.1. 引理 4 的证明：精确 CCD($n$) 振幅的奇异性结构 23 B.2. 引理 5 的证明：使用精确振幅进行能量计算时的误差 27 B.3. 引理 6 的证明：单次迭代中的振幅误差 29 B.4. 引理 7 的证明：CCD 迭代中的误差累积 32 C. 推论 3 的证明 33 D. 具有代数奇异性的周期函数的求积误差估计 35 E. 引理 11 的证明：积分形式函数的奇异性结构 45

## I. 引言

1990年，肯尼斯·威尔逊写道：“从头算量子化学是一个新兴的计算领域，其发展水平领先于格点规范理论五十年，是超级计算机计算时间的主要竞争者，也是计算许多费米子系统的新思想和新方法的丰富来源。”[21] 耦合簇（CC）理论是最先进的从头算量子化学方法之一，而含微扰三重激发的耦合簇单双激发（CCSD(T)）通常被称为分子量子化学的“黄金标准”。与其在分子系统中的成功相比，CC 理论在周期性系统（即块体固体和其他扩展系统）中的应用 [1, 7, 25] 一直受到很大限制。然而，得益于过去几年计算能力和数值算法的共同进步，周期性 CC 计算已越来越常规地用于凝聚态物质系统的基态和激发态性质研究 [5, 12, 25]。

不同于分子系统的 CC 计算，周期性系统的性质需要在热力学极限（TDL）下进行评估。可以通过采用包含 $N_{\mathbf{k}}$ 个晶胞的大型超胞来逼近热力学极限，但这种方法没有利用平移对称性，因此随着系统规模的增大，其效率会越来越低。一种更高效的方法是将一个晶胞的布里渊区（BZ）离散为 $N_{\mathbf{k}}$ 个网格点，而最广泛使用的离散化方法是称为 Monkhorst-Pack 网格的均匀网格 [16]。热力学极限下的结果由极限 $N_{\mathbf{k}} \to \infty$ 给出。由于长程库仑相互作用导致的奇异性，能量及其他物理性质向热力学极限的收敛通常较慢，并遵循低阶幂律。因此，理解周期性 CC 计算中有限尺寸效应的精确标度非常重要。有限尺寸标度分析是通过幂律外推计算热力学极限下性质的基础，也是更先进的有限尺寸误差修正方案的基础 [3, 5, 11, 13]。

据我们所知，本工作是首篇针对周期性耦合簇理论有限尺寸误差的数学研究。我们将有限尺寸误差解释为对某些奇异积分应用梯形法则所产生的数值求积误差。因此，本工作的主体内容是：（1）分析耦合簇理论中各物理量的奇异性结构；（2）给出与这些奇异被积函数相关的梯形求积误差的上界。乍看之下，任务（2）似乎是数值分析中的经典问题。因此，我们强调，针对光滑被积函数的标准求积误差分析（例如，参见 [19]）可能会给出过于保守的有限尺寸误差上界，且该上界不会随着 $N_{\mathbf{k}}$ 的增加而减小。我们的求积误差分析将泊松求和公式应用于一种新的情形，并与近期针对某些奇异积分发展起来的一种基于梯形法则的求积分析相关 [10]。与此前基于部分欧拉-麦克劳林公式、用于有限尺寸误差研究的求积分析相比 [22]，本方法给出的估计更为精确，适用范围也更广。

为简化论述和分析，我们聚焦于三维（3D）绝缘体系中的基态能量计算，并采用最简单且具有代表性的耦合簇理论，即耦合簇$_1$ $_1$双激发（CCD）理论。布里渊区采用大小为 $N_{\mathbf{k}}^{\frac{1}{3}} \times N_{\mathbf{k}}^{\frac{1}{3}} \times_1 N_{\mathbf{k}}^{\frac{1}{3}}$ 的 Monkhorst-Pack 网格进行离散化。耦合簇理论的核心是振幅方程，它是一个通常通过迭代方法求解的非线性系统。具体而言，使用零初始猜测通过不动点迭代求解振幅方程时，可以系统地生成一组微扰项，如 Møller-Plesset 微扰理论中的项 [18]，这些项可用费曼图表示。实际计算中，迭代次数需要截断在某个数值 $n$，我们将所得方案称为 CCD($n$)。我们假设振幅方程是在热力学极限下，使用精确（或实际计算中足够精确）的 Hartree-Fock 轨道和轨道能量求解的（见附录 A）。本文的主要结果是，在这些假设下，CCD($n$) 的收敛速率（对任意固定的 $n$）为 $\mathcal{O}\left(N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}\right)$（定理 1）。

值得注意的是，先前的数值研究 [5, 11] 表明，在不同假设下，CCD 能量计算的有限尺寸误差可能按 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-1})$ 的形式缩放。这一

差异将在本文末尾的第VII节中讨论。将讨论限制在 CCD($n$) 上是出于技术原因。在附加假设下，对于带有 $n \to \infty$ 的 CCD 收敛解，也可以建立相同的收敛速率（推论 3）。许多有限尺寸误差校正方法都假设耦合簇双激发振幅中的误差很小，而有限尺寸误差主要来自使用耦合簇双激发振幅 [5] 计算总能量。我们的分析表明，一般而言，实际情况恰恰相反：大部分有限尺寸误差事实上存在于耦合簇双激发振幅中，这导致了 $\mathcal{O}\left(N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}\right)$ 的收敛速率。另一方面，如果耦合簇双激发振幅足够精确，能量计算的收敛速率可以提高到$\mathcal{O}\left(N_{\mathbf{k}}^{-1}\right)$，而无需进行任何额外的有限尺寸校正。

许多量子化学方法的有限尺寸误差分析，都可以归结为特定的求积误差分析。近期，这一视角首次为周期性 Hartree-Fock 和二阶 Møller-Plesset 微扰理论（MP2）提供了统一的有限尺寸误差分析 [22], ，而且类似的分析也可用于随机相位近似（RPA）和二阶屏蔽交换（SOSEX）等更复杂的理论 [24]。这些理论的共同点（Hartree-Fock 层次以上）是，它们只包含某些微扰项（称为“粒子-空穴”费曼图，解释见正文），且相关被积函数奇异性相对较弱。因此，对于三维绝缘体系的基态能量计算，MP2、RPA 和 SOSEX 的有限尺寸误差均按 $\mathcal{O}\left(N_{\mathbf{k}}^{-1}\right)$ 标度。从三阶 Møller-Plesset 微扰理论（MP3）开始，必须考虑其他微扰项（称为“粒子-粒子”和“空穴-空穴”图示），这些项中的奇异性要强得多。我们的新技术可用于分析与这些项相关的求积误差。由于 MP3 图示是耦合簇双激发图示的子集，我们的结果也首次证明了 MP3 能量的有限尺寸误差按 $\mathcal{O}\left(N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}\right)$ 标度（推论 2）。

## II. 背景

将一个晶胞记为 Ω，其布拉维格子记为 $\mathbb{L}$。将相应的倒易布里渊区及格子记为 $\Omega^*$ 和 $\mathbb{L}^*$。考虑使用 Monkhorst-Pack 网格$\mathcal{K}$ 的平均场（Hartree-Fock）计算，该网格是对 $\Omega^*$进行离散化的、大小为 $N_{\mathbf{k}}$ 的均匀网格。计算得到的每个分子轨道都可以表示为

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_{\mathbf{k}}}} e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{|\Omega|\sqrt{N_{\mathbf{k}}}} \sum_{\mathbf{G}\in\mathbb{L}^*} \hat{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) e^{\mathrm{i}(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}},$$

其中，$n$ 是能带指标，$u_{n\mathbf{k}}$ 相对于晶胞具有周期性。按照化学文献中的惯例，$n \in \{i, j\}$ 表示一个占据（或“空穴”）轨道，而 $n \in \{a, b\}$ 表示一个未占据（或“粒子”）轨道。在全文中，我们使用以下归一化电子排斥积分（ERI）：

$$\langle n_1\mathbf{k}_1, n_2\mathbf{k}_2 | n_3\mathbf{k}_3, n_4\mathbf{k}_4\rangle = \frac{4\pi}{|\Omega|} {\sum_{\mathbf{G}\in\mathbb{L}^*}}' \frac{1}{|\mathbf{q}+\mathbf{G}|^2} \hat{\varrho}_{n_1\mathbf{k}_1, n_3(\mathbf{k}_1+\mathbf{q})}(\mathbf{G}) \hat{\varrho}_{n_2\mathbf{k}_2, n_4(\mathbf{k}_2-\mathbf{q})}(-\mathbf{G}), \tag{1}$$

其中 q $\mathbb{L}^*$ k k 是动量转移矢量，晶体动量守恒 k k k k 被隐式假设，并且 $\hat{\varrho}_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = \langle\psi_{n'\mathbf{k}'}|e^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{G})\mathbf{r}}|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ 是对偶积。该归一化电子排斥积分（以及下文的归一化振幅）主要用于更好地说明有限情形与热力学极限情形下各种计算之间的联系；与文献中的标准形式相比，它将在能量和振幅表达式中引入额外的 $\frac{1}{N_{\mathbf{k}}}$因子。

本文考虑占据能带与虚能带之间存在直接带隙的绝缘体系。此外，我们假设可以在任意 k 点精确计算轨道和轨道能量，并且

截断虚能带（即计算中只纳入有限数量的虚能带），这对应于使用固定基组进行计算。最后，我们假设在适当的规范下，$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 和 $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ 关于 $\mathbf{k} \in \Omega^*$ 光滑且周期。对于不存在拓扑障碍的系统，[2, 15], 可以利用基于格林函数的技术，将这些条件替换为较弱的条件。然而，这种处理会显著增加论述的复杂度，因此我们采用上述关于轨道和轨道能量的较强但更简单的假设。

CCD 中所有有限阶能量图都具有如下共同形式

$$\begin{aligned} E_{\#}^{N_{\mathbf{k}}} &= \frac{1}{N_{\mathbf{k}}^3} \sum_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a \in \mathcal{K}} \sum_{ijab} \left(2\left\langle i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j | a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b\right\rangle - \left\langle i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j | b\mathbf{k}_b, a\mathbf{k}_a\right\rangle\right) T_{ijab}^{\#,N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) \\ &= \frac{1}{N_{\mathbf{k}}^3} \sum_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a \in \mathcal{K}} \sum_{ijab} W_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) T_{ijab}^{\#,N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a), \end{aligned} \tag{2}$$

其中，$W_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)$ 是反对称化电子排斥积分，而归一化双激发振幅 $T^{\#,N_{\mathbf{k}}}_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)$ 在每一项中都不同（以 # 标注）。例如，MP2 和 MP3-4h2p（读作“四空穴二粒子”，因为 $i, j, k, l$ 是空穴指标，而 $a, b$ 是粒子指标）能量中的双激发振幅定义为

$$T_{ijab}^{\mathrm{MP2},N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) = \frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b}} \left\langle a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j\right\rangle, \tag{3}$$

$$T_{ijab}^{\mathrm{MP3\text{-}4h2p},N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) = \frac{1}{N_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}_k \in \mathcal{K}} \sum_{kl} \frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b}} \left\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j\right\rangle \frac{\left\langle a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b | k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l\right\rangle}{\varepsilon_{k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l}^{a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b}}. \tag{4}$$

MP2 能量只涉及粒子–空穴对（$i\mathbf{k}_i, a\mathbf{k}_a$）和（$j\mathbf{k}_j, b\mathbf{k}_b$）之间的相互作用，而 MP3-4h2p 能量则涉及空穴–空穴对（$i\mathbf{k}_i, k\mathbf{k}_k$）和（$j\mathbf{k}_j, l\mathbf{k}_l$）之间的相互作用。正是 MP3 和 CCD 中涉及粒子–粒子对或空穴–空穴对的这类相互作用项，使有限尺寸误差分析变得相当困难，相较之下，MP2 的相关分析则已有现成方法。

耦合簇双激发相关能也定义为公式（2），其中双激发振幅是有限阶微扰能中一部分双激发振幅的无穷和。具体而言，CCD 计算中的双激发振幅定义为非线性振幅方程的解，该方程由常数项、线性项和二次项组成。振幅方程的精确定义见公式（25）。

CCD 计算中常见的做法是从零初始猜测出发，使用不动点迭代近似求解振幅方程，这等价于拟牛顿法 [17]。经过 $n$ 次迭代后，我们将近似振幅称为 CCD($n$) 振幅，并将由此得到的近似能量称为 CCD($n$) 能量。在第 $n+1$ 次迭代中，将前一次迭代得到的 CCD($n$) 振幅代入公式（25）中振幅方程的右侧，即可得到 CCD($n+1$) 振幅。如果平均场计算得到良好的参考波函数，且占据带与虚能带之间的直接带隙足够大，那么该迭代将会收敛，CCD($n$) 也将收敛至 CCD [17]。CCD($n$) 方案与 Møller-Plesset 微扰理论 [18] 直接相关。例如，MP2 可视为 CCD(1)，而 CCD(2) 包含 MP2 和 MP3 中的所有项，以及四阶莫勒-普莱塞微扰理论中的一部分项。

在 $\mathcal{K}$ 收敛至 $\Omega^*$的热力学极限下，公式（2）中的相关能收敛为如下积分：

$$E_{\#}^{\mathrm{TDL}} = \frac{1}{|\Omega^*|^3} \int_{(\Omega^*)^{\times 3}} \mathrm{d}\mathbf{k}_i \, \mathrm{d}\mathbf{k}_j \, \mathrm{d}\mathbf{k}_a \sum_{ijab} W_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) T_{ijab}^{\#,\mathrm{TDL}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a), \tag{5}$$

其中需要指出，双激发振幅也已收敛（以其上标“TDL”表示）。对于耦合簇双激发中除 MP2 外的每个有限阶微扰能，其双激发振幅也收敛至热力学极限中的一个积分

例如，MP3-4h2p 项中的双激发振幅式（4）收敛至

$$T_{ijab}^{\text{MP3-4h2p,TDL}}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)=\frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}_k\sum_{kl}\frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b}}\left\langle k\mathbf{k}_k,l\mathbf{k}_l|i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j\right\rangle\frac{\left\langle a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b|k\mathbf{k}_k,l\mathbf{k}_l\right\rangle}{\varepsilon_{k\mathbf{k}_k,l\mathbf{k}_l}^{a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b}}. \quad (6)$$

由于 CCD($n$) 仅由有限个微扰项组成，因此在 TDL 中，其双激发振幅收敛为许多积分项之和。有关背景信息，请参阅附录 A。

## III. 主要结果陈述

比较式 (2) 中的 $E^{N_\mathbf{k}}{}_{\#}$ 与式 (5) 中的 $E_{\#}^{\text{TDL}}$，我们可以将 CCD 计算中任意项的有限尺寸误差拆分为

$$\begin{aligned}E_{\#}^{\text{TDL}}-E_{\#}^{N_\mathbf{k}}=&\left(\frac{1}{|\Omega^*|^3}\int_{(\Omega^*)^{\times 3}}\mathrm{d}\mathbf{k}_i\,\mathrm{d}\mathbf{k}_j\,\mathrm{d}\mathbf{k}_a-\frac{1}{N_\mathbf{k}^3}\sum_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}}\right)\sum_{ijab}\left(W_{ijab}T_{ijab}^{\#,\text{TDL}}\right)(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)\\&+\frac{1}{N_\mathbf{k}^3}\sum_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}}\sum_{ijab}W_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)\left(T_{ijab}^{\#,\text{TDL}}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)-T_{ijab}^{\#,N_\mathbf{k}}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)\right),\end{aligned} \quad (7)$$

这两部分分别可解释为：使用精确振幅进行能量计算时的有限尺寸误差，以及振幅计算中的有限尺寸误差。通过分别分析这两部分，我们对 CCD($n$) 计算中的有限尺寸误差给出严格估计。

定理 1（CCD($n$) 的误差）。在任意 $n>0$ 的 CCD($n$) 计算中，使用精确振幅进行能量计算时的有限尺寸误差以及振幅计算中的有限尺寸误差可估计为

$$\begin{aligned}&\left|\left(\frac{1}{|\Omega^*|^3}\int_{(\Omega^*)^{\times 3}}\mathrm{d}\mathbf{k}_i\,\mathrm{d}\mathbf{k}_j\,\mathrm{d}\mathbf{k}_a-\frac{1}{N_\mathbf{k}^3}\sum_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}}\right)\sum_{ijab}\left(W_{ijab}T_{ijab}^{CCD(n),TDL}\right)(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)\right|=\mathcal{O}(N_\mathbf{k}^{-1}),\\&\max_{ijab,\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}}\left|T_{ijab}^{CCD(n),TDL}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)-T_{ijab}^{CCD(n),N_\mathbf{k}}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)\right|=\mathcal{O}(N_\mathbf{k}^{-\frac{1}{3}}).\end{aligned}$$

结合这两个估计与式 (7)，CCD($n$) 能量计算中的总体有限尺寸误差为

$$\left|E_{CCD(n)}^{TDL}-E_{CCD(n)}^{N_\mathbf{k}}\right|=\mathcal{O}(N_\mathbf{k}^{-\frac{1}{3}}).$$

我们指出，在 MP2 中，其振幅计算不存在有限尺寸误差，即 $T^{\text{MP2}}{}_{ijab}^{,\ \text{TDL}}=T^{\text{MP}}{}_{ijab}^{2\ N_\mathbf{k},\circ}$ 因此，$\left|E_{\text{MP2}}^{\text{TDL}}-E^{N_\mathbf{k}}\text{MP}_2\right|=\mathcal{O}(N^{-1}{}_\mathbf{k})$，这恢复了 [22] 中的结果。由于 MP3 能量中的所有项都是 CCD(2) 的子集，因此上述关于 CCD($n$) 的结果也为 MP3 能量计算提供了有限尺寸误差分析。

推论 2。MP2 计算中的有限尺寸误差为 $\mathcal{O}\left(N^{-1}{}_\mathbf{k}\right)$，MP3 计算中的有限尺寸误差为 $\mathcal{O}\left(N^{-\frac{1}{3}}{}_\mathbf{k}\right)$。

定理 1 给出了 CCD 中包含有限个微扰项（费曼图）的 CCD($n$) 计算的有限尺寸误差估计，但不适用于收敛的 CCD 计算。这些估计

对任意固定的迭代次数 $n$ 均成立，即使迭代不如 $n \to \infty$ 收敛，而且这些估计中的前因子取决于 $n$。在额外假设能够控制迭代序列的正则性，并保证有限情形和热力学极限情形下不动点迭代收敛的条件下，我们证明，收敛的 CCD 能量计算的有限尺寸误差收敛速率与 CCD($n$) 能量计算的收敛速率相同。

推论 3（耦合簇双激发的误差）。在附加假设下，耦合簇双激发能量计算中的有限尺寸误差为 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-3})$。

## IV. 定理 1 的证明

### IV.1. 设定

在 CCD($n$) 及其包含的所有微扰项（例如 MP2 和 MP3）中，有限情形下计算得到的双激发振幅可视为张量

$$\{T_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)\}_{ijab,\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a \in \mathcal{K}} \in \mathbb{C}^{n_{\text{occ}} \times n_{\text{occ}} \times n_{\text{vir}} \times n_{\text{vir}} \times N_{\mathbf{k}} \times N_{\mathbf{k}} \times N_{\mathbf{k}}},$$

其中，假设有 $n_{\text{occ}}$ 个占据能带和 $n_{\text{vir}}$ 个虚能带。同时，热力学极限中的精确双激发振幅可视为一组关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a \in \Omega^*$ 的函数，其能带指标为 $i$、$j$、$a$、$b$。如引理 4 所示，所有这些函数都属于函数空间 $\mathbb{T}(\Omega^*)$，并具有特殊的光滑性；精确双激发振幅可表示为

$$\{T_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)\}_{ijab} \in \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\text{occ}} \times n_{\text{occ}} \times n_{\text{vir}} \times n_{\text{vir}}}.$$

在采用有限 $N_{\mathbf{k}}$ 进行 CCD($n$) 计算时，计算得到的振幅近似于 $\mathcal{K} \times \mathcal{K} \times \mathcal{K}$ 处的精确振幅。我们定义一个映射，用于在该离散网格上计算精确振幅：

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\mathcal{K}} : \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\text{occ}} \times n_{\text{occ}} \times n_{\text{vir}} \times n_{\text{vir}}} &\longrightarrow \mathbb{C}^{n_{\text{occ}} \times n_{\text{occ}} \times n_{\text{vir}} \times n_{\text{vir}} \times N_{\mathbf{k}} \times N_{\mathbf{k}} \times N_{\mathbf{k}}} \\ \{T_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)\}_{ijab} &\longrightarrow \{T_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)\}_{ijab,\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a \in \mathcal{K}}. \end{aligned}$$

在以下讨论中，我们用 $T$ 表示有限情形下的振幅张量，用 $t$ 表示热力学极限情形下的振幅函数。我们着重使用（逐元素）最大范数估计 $T$ 与 $t$ 之间振幅计算的误差：

$$\|T - \mathcal{M}_{\mathcal{K}} t\|_\infty = \max_{ijab,\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a \in \mathcal{K}} |T_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) - t_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)|. \tag{8}$$

类似地，定义 $\|t\|_\infty = \max_{ijab} \|t_{ijab}\|_{L^\infty(\Omega^* \times \Omega^* \times \Omega^*)}$ 和 $\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t\|_\infty \leqslant \|t\|_\infty$。

分别将有限情形和热力学极限情形下，给定双激发振幅时计算相关能的两个线性泛函定义为

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(T) &= \frac{1}{N_{\mathbf{k}}^3} \sum_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a \in \mathcal{K}} \sum_{ijab} W_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) T_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a), \\ \mathcal{G}_{\text{TDL}}(t) &= \frac{1}{|\Omega^*|^3} \int_{(\Omega^*)^{\times 3}} \mathrm{d}\mathbf{k}_i \, \mathrm{d}\mathbf{k}_j \, \mathrm{d}\mathbf{k}_a \sum_{ijab} W_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) t_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a). \end{aligned}$$

此外，分别将有限情形和热力学极限情形下对振幅方程进行不动点迭代的两个映射记为

$$\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T) : \mathbb{C}^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}} \to \mathbb{C}^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}},$$
$$\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t) : \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}} \to \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}},$$

它们分别对应公式（25）和公式（27）的右端，其中包含所有相关的 $i, j, a, b, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a$。本文的一项主要技术成果是证明 $\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}$ 的像属于 $\mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}}$（见引理 4）。

使用这些记号，有限情形下的 CCD($n$) 能量计算可表述为

$$E^{N_{\mathbf{k}}}_{\mathrm{CCD}(n)} = \mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(T_n) \quad \text{with} \quad \begin{array}{ll} T_m & = \mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T_{m-1}), m = 1, 2, \ldots \\ T_0 & = \mathbf{0} \in \mathbb{C}^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}} \end{array}, \tag{9}$$

热力学极限情形下则可表述为

$$E^{\mathrm{TDL}}_{\mathrm{CCD}(n)} = \mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}(t_n) \quad \text{with} \quad \begin{array}{ll} t_m & = \mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t_{m-1}), m = 1, 2, \ldots \\ t_0 & = \mathbf{0} \in \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}} \end{array}. \tag{10}$$

为与第三节中的记号衔接，我们有

$$T_n = \{T^{\mathrm{CCD}(n),N_{\mathbf{k}}}_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)\}_{ijab,\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}} \quad \text{and} \quad t_n = \{T^{\mathrm{CCD}(n),\mathrm{TDL}}_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)\}_{ijab}.$$

当这两种不动点迭代均关于 $n$ 收敛时，相应的 CCD($n$) 能量分别收敛到有限情形和热力学极限情形下的 CCD 能量。

最后，我们引入证明中将用到的梯形求积法则的记号。给定一个 $n$ 维立方定义域 $V$，我们通过先将 $V$ 均匀划分为若干子定义域，再以相同的偏移量在每个子定义域中采样一个点，从而在 $V$ 中构造均匀网格 $\mathcal{X}$。使用 $\mathcal{X}$ 对 $V$ 中的被积函数 $f(\mathbf{x})$ 应用（广义）梯形法则，定义为

$$\mathcal{Q}_V(f, \mathcal{X}) = \frac{|V|}{|\mathcal{X}|} \sum_{\mathbf{x}_i\in\mathcal{X}} f(\mathbf{x}_i).$$

进一步将目标精确积分及相应的求积误差记为

$$\mathcal{I}_V(f) = \int_V f(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}, \qquad \mathcal{E}_V(f, \mathcal{X}) = \mathcal{I}_V(f) - \mathcal{Q}_V(f, \mathcal{X}).$$

在以下分析中，除非另有说明，我们滥用符号“$C$”表示与上下文中所讨论的任何项均无关的一般常数。换言之，$f \leqslant Cg$ 等价于$|f| = \mathcal{O}(|g|)$。

### IV.2. 证明概要

在 CCD($n$) 计算中，式（7）所示的有限尺寸误差分解可写为

$$\begin{aligned} \left|E^{\mathrm{TDL}}_{\mathrm{CCD}(n)} - E^{N_{\mathbf{k}}}_{\mathrm{CCD}(n)}\right| &= |\mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}(t_n) - \mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(T_n)| \\ &\leqslant |\mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}(t_n) - \mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_n)| + |\mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_n) - \mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(T_n)| \\ &\leqslant |\mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}(t_n) - \mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_n)| + C\left\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_n - T_n\right\|_\infty, \end{aligned} \tag{11}$$

其中，最后两项分别可解释为使用精确 CCD($n$) 振幅 $t_n$ 时能量计算中的误差和振幅计算中的误差。最后一个不等式利用了线性算子 $\mathcal{G}_{N_\mathbf{k}}$ 的有界性，即

$$\begin{aligned}|\mathcal{G}_{N_\mathbf{k}}(T)| &\leqslant \frac{1}{N_\mathbf{k}^3}\sum_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}}\sum_{ijab}|W_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)T_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)|\\ &\leqslant \frac{1}{N_\mathbf{k}^3}\sum_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}}\sum_{ijab}C\max_{ijab,\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_c\in\mathcal{K}}|T_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)|\leqslant C\|T\|_\infty.\end{aligned}$$

这利用了这样一个事实：$W_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)=\mathcal{O}(1)$。

使用精确振幅进行能量计算时产生的误差，可以解释为求积误差

$$|\mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}(t_n)-\mathcal{G}_{N_\mathbf{k}}(\mathcal{M}_\mathcal{K}t_n)|=\left|\frac{1}{|\Omega^*|^3}\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*\times\Omega^*}\left(\sum_{ijab}\left(W_{ijab}[t_n]_{ijab}\right)(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a),\mathcal{K}\times\mathcal{K}\times\mathcal{K}\right)\right|. \tag{12}$$

所定义的被积函数关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a\in\Omega^*$ 是周期的。因此，主导求积误差取决于被积函数的光滑性。反对称化电子排斥积分 $W_{ijab}$ 由两个电子排斥积分构成。电子排斥积分 $\langle i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j|a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b\rangle$ 仅在零动量转移 $\mathbf{q}=\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_i=\mathbf{0}$ 处（及其周期映像处）存在奇异性（更准确地说，是不光滑），这是由其定义式（1）中的分数项导致的，

$$\frac{4\pi}{|\Omega|}\frac{\hat{\varrho}_{i\mathbf{k}_i,a(\mathbf{k}_i+\mathbf{q})}(\mathbf{0})\hat{\varrho}_{j\mathbf{k}_j,b(\mathbf{k}_j-\mathbf{q})}(\mathbf{0})}{|\mathbf{q}|^2}.$$

在这一项中，分子关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$ 和 $\mathbf{q}$ 是光滑的，奇异性完全来自仅依赖于 $\mathbf{q}$ 的分母。$W_{ijab}$ 中的另一个电子排斥积分 $\langle i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j|b\mathbf{k}_b,a\mathbf{k}_a\rangle$ 在其零动量转移点也具有类似的奇异性结构。

我们用某些阶的代数奇异性来刻画 CC 振幅和电子排斥积分的奇异性结构（见第 V.1 节）。我们的首个主要技术结果是，所有精确耦合簇双激发($n$) 振幅元素 $[t_n]_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)$ 的奇异性结构，与电子排斥积分 $\langle i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j|a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b\rangle$（或等价地，MP2/CCD(1) 振幅元素）的奇异性结构相同。

引理 4（振幅的奇异性结构）。在具有 $n>0$ 的耦合簇双激发($n$) 计算中，精确双激发振幅 $t_n=\{T_{ijab}^{CCD(n),TDL}\}_{ijab}$ 的每个元素都属于以下函数空间

$\mathbb{T}(\Omega^*)=\big\{f(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)\colon\ f$ 关于 $\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a\in\Omega^*$,$f$ 是周期的，除 $\mathbf{k}_a=\mathbf{k}_i$ 处具有 0 阶代数奇异性外处处光滑；$f$ 在非光滑点 $\mathbf{k}_a=\mathbf{k}_i\big\}$. 处关于 $\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j$ 光滑

我们的第二个技术性结果是：对任意振幅 $t$（其每个分量均属于 $\mathbb{T}(\Omega^*)$，这涵盖了精确的耦合簇双激发（CCD($n$）振幅），给出能量计算中求积误差的估计。

引理 5　（使用精确振幅时的能量误差）。对于任意振幅 $t\in\mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{occ}\times n_{occ}\times n_{vir}\times n_{vir}}$，t　*he* 有限尺寸效应 使用 $t$ 进行能量计算时的误差可估算为

$$|\mathcal{G}_{TDL}(t)-\mathcal{G}_{N_\mathbf{k}}(\mathcal{M}_\mathcal{K}t)|\leqslant CN_\mathbf{k}^{-1}.$$

上述两个引理共同证明，使用式（12）中的精确 CCD($n$) 振幅进行能量计算时，其有限尺寸误差按 $\mathcal{O}(N^{-1}{}_{\mathbf{k}})$ 的量级缩放。正如后文将要看到的，这可能远快于使用数值计算振幅时的收敛速率。

与式 (11) 中的有限尺寸误差分解类似，利用有限尺寸情形和 TDL 情形下耦合簇双激发($n$)振幅的递归定义，可以将振幅计算误差分解为两项

$$\begin{aligned}\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_n - T_n\|_\infty &= \|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}\mathcal{F}_{\text{TDL}}(t_{n-1}) - \mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T_{n-1})\|_\infty \\ &\leqslant \|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}\mathcal{F}_{\text{TDL}}(t_{n-1}) - \mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_{n-1})\|_\infty + \|\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_{n-1}) - \mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T_{n-1})\|_\infty .\end{aligned} \tag{13}$$

第一项是精确的耦合簇双激发($n$)振幅与使用精确的耦合簇双激发($n-1$)振幅 $\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_{n-1}$ 计算所得振幅之间的误差。第二项是使用精确的耦合簇双激发($n-1$)振幅 $\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_{n-1}$ 计算所得振幅与使用耦合簇双激发($n-1$)振幅 $T_{n-1}$ 计算所得振幅之间的误差。后一项可解释为耦合簇双激发($n-1$)振幅计算中的误差累积。

为了估计式 (13) 中的第一项误差，即使用 $t_{n-1}$ 时每个精确振幅条目与近似振幅条目之间的误差，

$$[\mathcal{M}_{\mathcal{K}}\mathcal{F}_{\text{TDL}}(t_{n-1}) - \mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_{n-1})]_{ijab,\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a} , \quad \forall i,j,a,b,\ \forall \mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a \in \mathcal{K},$$

可以将其分解为一系列求积误差之和，这些误差与振幅方程中不同线性项和二次项的计算有关。

第三个技术结果是对这些求积误差的估计，它表明第一个误差项[1]的量级为 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}})$。

引理 6（单次迭代中的振幅误差）。对于任意振幅 $t \in \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{occ}\times n_{occ}\times n_{vir}\times n_{vir}}$，使用 $t$ 时，下一次迭代振幅计算中的有限尺寸误差可估计为

$$\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}\mathcal{F}_{TDL}(t) - \mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t)\|_\infty \leqslant C N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}. \tag{14}$$

为处理公式（13）中的第二个误差项，目标是证明，应用 $\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}$ 能够以受控的方式传播 CCD($n-1$) 振幅计算中的误差。具体而言，注意到 $\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T)$ 由 $T$ 的常数项、线性项和二次项组成（详细信息见公式（25））， 我们可以利用其显式定义证明，第二个误差项可以由 CCD($n-1$) 振幅计算中的误差界定。

引理 7（有限 CCD 迭代映射的 Lipschitz 连续性）。对于任意两个振幅张量$T$、$S \in \mathbb{C}^{n_{occ}\times n_{occ}\times n_{vir}\times n_{vir}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}}$，有限情形下的迭代映射 $\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}$ 满足

$$\|\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T) - \mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(S)\|_\infty \leqslant C\left(1 + \|T\|_\infty + \|S\|_\infty\right)\|T - S\|_\infty. \tag{15}$$

将 $t = t_{n-1}$ 代入式 (14)，并将 $T = T_n$、$S = \mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_{n-1}$ 代入式 (15)，即可进一步估计式 (13) 中的误差分解:

$$\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_n - T_n\|_\infty \leqslant C\left(1 + \|T_{n-1}\|_\infty + \|t_{n-1}\|_\infty\right)\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_{n-1} - T_{n-1}\|_\infty + C N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}, \tag{16}$$

其中，第二个常数 $C$ 取决于精确 CCD($n-1$) 振幅 $t_{n-1}$。结合这一递推关系以及 $\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_0 = T_0$ 这一事实，可估计振幅计算中的有限尺寸误差:

$$\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t_n - T_n\|_\infty \leqslant C N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}, \qquad \forall n > 0,$$

其中常数 $C$取决于 $t_m$，其中 $m = 0$，1，2，.....，$n-1$。最后，结合此估计、引理 5 与 $t = t_{n-1}$，以及式（11）中的误差分解，我们完成定理 1 的证明。

## V. 主要技术工具

我们的主要思路是将 CCD($n$) 能量和振幅计算中的有限尺寸误差解释为某些奇异积分的梯形求积误差。具体而言， $\mathcal{K}$ 中所有关于 $\mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}$ 和 $\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}$ 的平均求和都是梯形求积公式，用于近似 $\Omega^*$ 中关于 $\mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}$ 和 $\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}$ 的相应积分。因此，问题归结为估计 $\mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}$ 和 $\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}$ 中定义的被积函数对应的梯形求积误差；这些被积函数由电子排斥积分和精确振幅构成。

一般而言，梯形法则的渐近误差取决于被积函数的边界条件和光滑性。在理想情况下，被积函数既是周期的又是光滑的，根据标准的欧拉–麦克劳林公式，求积误差会超代数地衰减，也就是说，对任意 $l>0$，衰减速度都快于 $N^{-l}{}_{\mathbf{k}}$。（参见引理 12，其中给出了一个简单的傅里叶分析解释。） $\mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}$和 $\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}$ 中定义的所有被积函数最终都具有周期性，但存在点奇异性。因此，刻画电子排斥积分和精确振幅的奇异性结构至关重要，因为它们构成了所有这些相关被积函数。

定理 1 的证明涉及两项主要技术挑战：在引理 4 中描述精确振幅的奇异性结构，以及在引理 5 和引理 6 中估计使用精确振幅进行能量和振幅计算时所定义被积函数的求积误差。对于第一项挑战，我们在第 V.1 节中定义一类具有特定阶代数奇异性的函数。对于第二项挑战，我们在第 V.2 节中总结能量和振幅计算中的五种一般积分形式，并基于泊松求和公式给出紧确的求积误差估计。

### V.1. 代数奇异性

将电子排斥积分 $\langle n_1\mathbf{k}_1, n_2\mathbf{k}_2 | n_3\mathbf{k}_3, n_4\mathbf{k}_4\rangle$ 视为 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q} = \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1$ 在 $\Omega^*$ 上的周期函数，同时令 $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}$ 满足晶体动量守恒。根据定义，该电子排斥积分可拆分为

$$\langle n_1\mathbf{k}_1, n_2\mathbf{k}_2 | n_3\mathbf{k}_3, n_4\mathbf{k}_4\rangle = \frac{4\pi}{|\Omega|}\frac{\hat{\varrho}_{n_1\mathbf{k}_1, n_3(\mathbf{k}_1+\mathbf{q})}(\mathbf{0})\hat{\varrho}_{n_2\mathbf{k}_2, n_4(\mathbf{k}_2-\mathbf{q})}(\mathbf{0})}{|\mathbf{q}|^2} + \frac{4\pi}{|\Omega|}\sum_{\mathbf{G}\in\mathbb{L}^*\setminus\{\mathbf{0}\}}\frac{\cdots}{|\mathbf{q}+\mathbf{G}|^2}, \quad (17)$$

其中，所有含 $\mathbf{G} \neq \mathbf{0}$ 的项关于 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q} \in \Omega^*$ 均为光滑函数，而电子排斥积分的奇异性仅来自 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$处的第一项分式。该分式的分子关于 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q} \in \Omega^*$ 是光滑的（注意假设 $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 关于 $\mathbf{k}$ 是光滑的），且利用轨道正交性，其在 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ 附近的量级为 $\mathcal{O}(|\mathbf{q}|^a) a \in \{0,1,2\}$。 $a$ 的确切值取决于能带指标 $(n_1, n_2)$ 和 $(n_3, n_4)$ 之间的关系。通过直接计算可以验证，该分式及其关于 $\mathbf{q}$ 的导数（对任意固定的 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$）满足以下特征。

定义 8（单变量函数的代数奇异性）。函数 $f(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^d$ 处具有 $\gamma \in \mathbb{R}$ 阶代数奇异性，当且仅当存在 $\delta > 0$ 使得

$$\left|\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}} f(\mathbf{x})\right| \leqslant C_{\boldsymbol{\alpha}} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^{\gamma - |\boldsymbol{\alpha}|}, \qquad \forall 0 < |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| < \delta,\ \forall \boldsymbol{\alpha} \geqslant 0,$$

其中常数 $C_{\boldsymbol{\alpha}}$ 取决于 $\delta$，以及非负的 $d$ 维导数多重指标 $\boldsymbol{\alpha}$。为简洁起见，也称 $f$ 在 $\mathbf{x}_0$ 处具有 $\gamma$ 阶奇异性（或不光滑）。

注 9. 在积分方程中，代数奇异性通常用于描述核函数在奇异点附近的渐近行为。上述定义对这一概念略作推广，还包括所有导数的渐近行为。请注意，当 $\gamma > 0$, $f(\mathbf{x})$ 连续但在 $\mathbf{x}_0$ 处不光滑时，其导数可能在该点处奇异。在这种情况下，我们稍微宽泛地使用这一名称，仍将 $\mathbf{x}_0$ 称为代数奇异点。

这类不光滑函数的一个简单例子是 $p(\mathbf{x})/|\mathbf{x}|^2$，其中 $p(\mathbf{x})$ 光滑，且在 $\mathbf{x}=\mathbf{0}$ 附近具有尺度 $\mathcal{O}(|\mathbf{x}|^{\gamma+2})$。利用这一概念，式 (17) 中的首项分数在 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ 处具有 $\gamma\in\{-2,-1,0\}$ 阶不光滑性。由于式 (17) 中的光滑项不会从定性上改变定义 8 中的不等式，电子排斥积分的例子在 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ 处也具有 $\gamma$ 阶不光滑性。此外，为了将电子排斥积分例子的代数奇异性与变化的 $\mathbf{k}_1$,$\mathbf{k}_2\in\Omega^*$ 联系起来，我们进一步引入多元函数关于单个变量的代数奇异性。

定义 10（多元函数的代数奇异性）。函数 $f(\mathbf{x},\mathbf{y})$ 关于 $\mathbf{y}$ 光滑 $\in V_Y\subset\mathbb{R}^{d_y}$，对于任意固定的 $\mathbf{x}$, 在 $\mathbf{x}_0\in\mathbb{R}^{d_x}$ 处关于 $\mathbf{x}$ 具有阶为 $\gamma$ 的代数奇异性，当且仅当存在 $\delta>0$ 使得

$$\left|\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial\mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}}\left(\frac{\partial^{\boldsymbol{\beta}}}{\partial\mathbf{y}^{\boldsymbol{\beta}}}f(\mathbf{x},\mathbf{y})\right)\right|\leqslant C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|},\quad\forall 0<|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|<\delta,\forall\mathbf{y}\in V_Y,\forall\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\geqslant 0,$$

其中常数 $C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 取决于 $\delta$、$\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$。与定义 8 中的单变量情形相比，关键的新增内容是：在 $\mathbf{x}=\mathbf{x}_0$ 处，关于 $\mathbf{y}$ 的偏导数具有共享的代数奇异性，且阶为 $\gamma$；以及 $C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 与 $\mathbf{y}\in V_Y$ 无关。

此类非光滑函数的一个简单例子是 $p(\mathbf{x},\mathbf{y})/|\mathbf{x}|^2$，其中 $p(\mathbf{x},\mathbf{y})$ 光滑，并且在 $\mathbf{x}=\mathbf{0}$ 附近具有尺度 $\mathcal{O}(|\mathbf{x}|^{\gamma+2})$。式（17）中的第一个分式项就属于这种形式，其中 $\mathbf{x}=\mathbf{q}$，$\mathbf{y}=(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j)$，且 $\gamma\in\{-2,-1,0\}$。因此，除 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ 处外，该电子排斥积分示例关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{q}\in\Omega^*$ 处处光滑，且奇异性阶为 $\gamma\in\{-2,-1,0\}$。若将电子排斥积分视为 $\mathbf{k}_1$,$\mathbf{k}_2$,$\mathbf{k}_3$, 的函数，则除 $\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1$ 处外，电子排斥积分处处光滑，且奇异性阶为 $\gamma$。这定义了引理 4 中 $\mathbb{T}(\Omega^*)$ 所用的代数奇异性。

引理 4 表明，精确 CCD($n$) 振幅 $[t_n]_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)$ 的所有项在 $\Omega^*\times\Omega^*\times\Omega^*$ 中处处光滑，除了 $\mathbf{q}=\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_i=\mathbf{0}$ 处存在 0 阶奇异性（如 $\mathbb{T}(\Omega^*)$ 中所述）。由于 CC 振幅与电子排斥积分具有相似的奇异性结构，我们也将 $\mathbf{q}$ 称为振幅的动量转移。回顾一下，精确 CCD(1) 振幅 $t_1=\left\{\langle a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b|i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j\rangle/\varepsilon^{a\mathbf{k}_a,\ b\mathbf{k}_i}_{\mathbf{k}_i,\ j\mathbf{k}_j}\right\}_{ijab}$ 的各项属于$\mathbb{T}(\Omega^*)$，且 $t_n$ 是通过递归应用 $\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}$ 于 $t_1$ 定义的。因此，只需证明

$$\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t)\in\mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}},\quad\forall t\in\mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}}.$$

对于每组 $(i,j,a,b)$，$[\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t)]_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)$ 由$t$ 的常数项、线性项和二次项组成（见公式（27））。事实证明，这些项分别作为 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{q}=\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_i$ 的函数时，除 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ 处存在 0 阶奇异性外，处处光滑。常数项是一个 MP2 振幅项 $[t_1]_{ijab}$，可直接验证。所有线性项均为积分形式，其被积函数是一个电子排斥积分与一个振幅项的乘积，可分为三类，代表性示例如下（忽略轨道能量分式和常数前因子）：

$$\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}_k\sum_{kc}\langle a\mathbf{k}_a,k\mathbf{k}_k|i\mathbf{k}_i,c\mathbf{k}_c\rangle\,t_{kjcb}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_c),\tag{18}$$

$$\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}_k\sum_{kc}\langle a\mathbf{k}_a,k\mathbf{k}_k|i\mathbf{k}_i,c\mathbf{k}_c\rangle\,t_{kjbc}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_b),\tag{19}$$

$$\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}_k\sum_{kl}\langle k\mathbf{k}_k,l\mathbf{k}_l|i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j\rangle\,t_{klab}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_l,\mathbf{k}_a),\tag{20}$$

这三类之间的区别在于被积函数相对于积分变量（例如上述示例中的 $\mathbf{k}_k$）的奇异性结构。对于任意固定的 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{q}\neq\mathbf{0}$，被积函数的奇异点

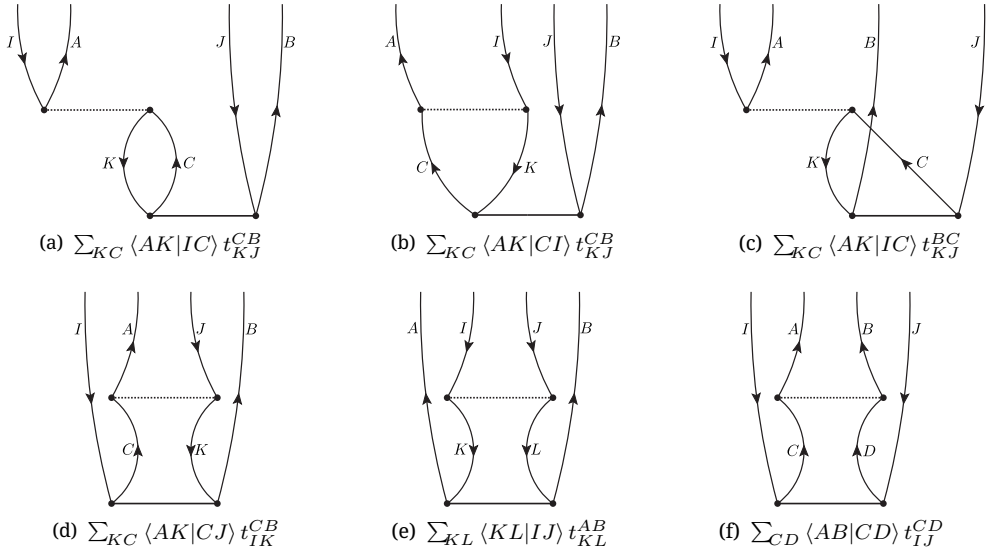



图 V.1. 振幅计算中所有线性项的图示。水平虚线表示电子排斥积分，水平实线表示 $t$ 振幅。(a)、(b)、(c) 和 (d) 中置换后的振幅未予绘出。大写字母 $P$ 表示轨道指标（$p$,$\mathbf{k}_P$）。(f) 中的振幅计算可以写成关于动量矢量 $\mathbf{k}_c$的积分，其他所有子图中的振幅计算则可以写成关于动量矢量 $\mathbf{k}_k$的积分。

相对于上述三个示例中的 $\mathbf{k}_k$，分别为：(1) 无；(2) $\mathbf{k}_k = \mathbf{k}_b$；(3) $\mathbf{k}_k = \mathbf{k}_i$ 和 $\mathbf{k}_k = \mathbf{k}_a$。因此，这三个被积函数分别在零个、一个和两个点处相对于 $\mathbf{k}_k$ 不光滑。我们的目标是证明，这些积分关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{q} \in$ 的导数在 $\Omega^*$ 中存在，但在 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ 处除外，并且满足定义 10 中阶为 $\gamma = 0$的代数奇异性条件。前两类可通过莱布尼茨积分法则（即在积分号下求导）以及交换求导与积分运算后的直接导数估计来处理。第三类则需要基于附录 E 中一个额外技术引理进行更深入的分析。图 V.1 绘出了所有线性振幅项的图示，其中第一类包括 (a)，第二类包括 (b) 和 (c)，第三类包括 (d)、(e) 和 (f)。

所有二次项也都具有积分形式，其被积函数为一个电子排斥积分与两个振幅元素的乘积；对其光滑性的分析可分解为两个子问题，与上述线性项的分析类似。例如，4h2p 二次项定义为

$$\frac{1}{|\Omega^*|^2}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \left(\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_c \sum_{klcd} \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | c\mathbf{k}_c, d\mathbf{k}_d\rangle\, t_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c)\right) t_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a). \tag{21}$$

括号中的项是 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{q}$、$\mathbf{k}_k$ 的线性函数，并且在 $\mathbf{k}_k = \mathbf{k}_i$ 处具有 0 阶奇异性。换言之，其奇异性结构与式 (20) 中 4h2p 线性项里的电子排斥积分 $\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j\rangle$ 相同。因此，整体 4h2p 二次项类似于 4h2p 线性项，只需将其中的电子排斥积分替换为上述括号中的项；仍可应用针对线性项的分析，证明其在 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$处具有 0 阶代数奇异性。

### V.2. 具有代数奇异性的周期函数的求积误差

对于定理 1，需要解决两个求积误差估计问题：引理 5 中使用精确振幅进行能量计算时的误差，以及引理 6 中使用精确振幅进行单次迭代振幅计算时的误差。这两个问题中的被积函数均为轨道能量分数、电子排斥积分和精确振幅的乘积，并且相对于 $\Omega^*$上的相关动量矢量具有周期性。因此，它们的光滑性决定了采用梯形法则时的主导求积误差。具体而言，被积函数的非光滑性仅来自电子排斥积分和振幅在其零动量转移点（及其周期性像）处的代数奇异性。因此，主导求积误差来自对依赖于所包含电子排斥积分和振幅的动量转移矢量的积分变量进行数值求积。

通过适当的变量替换并拆分误差项，引理 5 和引理 6 中的所有求积误差估计都可归纳为表 V.1 所述的五类积分。这五类积分的求积误差分别在附录 D 的引理 12、14、16、18 和 20 中研究。在¹¯我们的有限尺寸误差分析中，我们有 $V = \Omega^*$, $d = 3$, 和 $m = N^{\overline{3}}_{\mathbf{k}}$。

表 V.1. CCD 能量与振幅计算中出现的求积误差估计问题涉及的五类积分。假设所有函数相对于 $V \subset \mathbb{R}^d$ 均为周期函数，且除奇异点外处处光滑。参数 $d$表示定义域的维数，$m$ 表示用于梯形求积公式的均匀网格在每个维度上的点数（因此网格共有 $m^d$ 个点）。“估计”列给出了使用大小为 $m^d$的网格时梯形法则的求积误差估计，这些估计由“引理”列中指定的引理给出。

| 描述 | 奇异点和阶 | 估计 | 引理 |
|---|---|---|---|
| $\int_V \mathrm{d}\mathbf{x} f(\mathbf{x})$ | None | 超代数引理 12 | |
| $\int_V \mathrm{d}\mathbf{x} f(\mathbf{x})$ | $\mathbf{x} = \mathbf{0}$阶数为 $\gamma$ | $m^{-(d+\gamma)}$ | 引理 14 |
| $\int_V \mathrm{d}\mathbf{x} f_1(\mathbf{x}) f_2(\mathbf{x})$ | $f_1(\mathbf{x})$：$\mathbf{x} = \mathbf{0}$阶数为 $\gamma$; $f_2(\mathbf{x})$：$\mathbf{x} = \mathbf{z}$ 的阶数为 0 | $m^{-(d+\gamma)}$ | 引理16 |
| $\int_{V\times V} \mathrm{d}\mathbf{x}_1 \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) f_2(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ | $f_i(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$：$\mathbf{x}_i = \mathbf{0}$ 阶 $\gamma_i$, $i = 1, 2$ | $m^{-(d+\min_i \gamma_i)}$ | 引理18 |
| $\int_{V\times V} \mathrm{d}\mathbf{x}_1 \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) f_2(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) f_3(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2 \pm \mathbf{x}_1)$ | $f_i(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$: $\mathbf{x}_i = \mathbf{0}$ 的阶 $\gamma_i$, $i = 1, 2$; $f_3(\mathbf{x}_1,\mathbf{z})$: $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ 的阶 0 | $m^{-(d+\min_i \gamma_i)}$ | 引理 20 |

为说明表 V.1 中的分类，我们给出三个示例。

例 1：在精确振幅 $t \in \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}}$ 下，采用任意固定的 $i, j, a, b$ 和 $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a$进行振幅计算时，4h2p 线性项的形式为

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kl} \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j \rangle \, t_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a). \tag{22}$$

电子排斥积分和振幅分别具有动量转移 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_k$ 和 $\mathbf{q}_2 = \mathbf{k}_a - \mathbf{k}_k$。通过变量替换 $\mathbf{k}_k \to \mathbf{k}_i - \mathbf{q}_1$,，对 $\mathbf{q}_1 \in \Omega^*$ 上每个 $k$、$l$ 进行积分，可得两个函数的乘积，它们

在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{0}$ 和 $\mathbf{q}_2 = \mathbf{q}_1 + (\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_i) = \mathbf{0}$ 处具有代数奇异性，因此属于表 V.1 中的第 3 类。由于电子排斥积分在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{0}$ 处不光滑，阶为 $-2$，根据估算，使用 $\mathcal{K}$ 计算该项时，整体求积误差的量级为 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-3})$。

例 2：使用精确振幅 $t$ 的相关能交换项形式为

$$\int_{\Omega^*\times\Omega^*\times\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_i\,\mathrm{d}\mathbf{k}_j\,\mathrm{d}\mathbf{k}_a \sum_{ijab} \langle i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j | b\mathbf{k}_b, a\mathbf{k}_a\rangle\, t_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a).$$

电子排斥积分和振幅的动量转移分别为 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{k}_b - \mathbf{k}_i$ 和 $\mathbf{q}_2 = \mathbf{k}_a - \mathbf{k}_i$。通过变量替换 $\mathbf{k}_j \to \mathbf{k}_a + \mathbf{q}_1$ 和 $\mathbf{k}_i \to \mathbf{k}_a - \mathbf{q}_2$，，被积函数定义在 $\mathbf{k}_a$、$\mathbf{q}_1$,$\mathbf{q}_2 \in \Omega^*$ 上，且关于 $\mathbf{k}_a$光滑。因此，对 $\mathbf{k}_a$ 的部分积分属于类型 1；对于每个固定的 $\mathbf{k}_a$，对 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ 的部分积分属于类型 4。由于其中包含的电子排斥积分和振幅均具有 0 阶代数奇异性，计算该项的求积误差按 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-1})$ 缩放。

例 3：振幅计算中的四空穴二粒子二次项形式为

$$\int_{\Omega^*\times\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k\,\mathrm{d}\mathbf{k}_c \sum_{klcd} \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | c\mathbf{k}_c, d\mathbf{k}_d\rangle\, t_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) t_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a),$$

根据晶体动量守恒，$\mathbf{k}_l = \mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_k$ 和 $\mathbf{k}_d = \mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_c$。三个动量转移分别为 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{k}_c - \mathbf{k}_k$、$\mathbf{q}_2 = \mathbf{k}_c - \mathbf{k}_i$和 $\mathbf{q}_3 = \mathbf{k}_a - \mathbf{k}_k$。通过变量替换 $\mathbf{k}_c \to \mathbf{k}_i + \mathbf{q}_2$和 $\mathbf{k}_k \to \mathbf{k}_i + \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1$，，可得 $\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 + (\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_i)$，且关于 $\mathbf{q}_1$,$\mathbf{q}_2$ 的积分属于类型 5。由于其中包含的电子排斥积分和振幅均具有 0 阶代数奇异性，计算该项的求积误差按 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-1})$ 缩放。

表 V.2 总结了引理 5 和引理 6 的证明中所有 CCD 振幅和能量计算的求积误差估计。注意，精确 CCD($n$) 振幅 $t_n$ 的所有项处处光滑，除 $\mathbf{k}_a = \mathbf{k}_i$ 处的阶为 0 的奇异点外。当能带指标匹配（即 $n_1 = n_3, n_2 = n_4$）、部分匹配（即 $n_1 = n_3, n_2 \neq n_4$ 或 $n_1 \neq n_3, n_2 = n_4$）以及不匹配（即 $n_1 \neq n_3, n_2 \neq n_4$）时，电子排斥积分 $\langle n_1\mathbf{k}1, n_2\mathbf{k}_2 | n_3\mathbf{k}3, n_4\mathbf{k}_4\rangle$ 在 $\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1 = \mathbf{0}$ 处的奇异性阶数分别为 $-2$、$-1$ 和 0。除去误差超代数衰减的特殊项后，这些求积误差估计的一般规律是：当某项计算包含能带指标匹配、部分匹配和不匹配的电子排斥积分时，其误差分别可达 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}})$、$\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-\frac{2}{3}})$ 和 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-1})$。例如，公式 (22) 中的四空穴二粒子线性项由能带指标各异的电子排斥积分-振幅乘积 $k, l$ 构成。具有 (1) $k = i, l = j$、(2) $k = i, l \neq j$ 或 $k \neq i, l = j$，以及 (3) $k \neq i$，$l \neq j$ 的乘积，由于电子排斥积分 $\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j\rangle$，其求积误差分别为 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-3})$、$\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-\frac{2}{3}})$ 和 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-1})$。因此，四空穴二粒子线性项的总体求积误差为 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-3})$，主要由乘积项 $k = i$，$l = j$ 决定。在 CCD 振幅计算中，能带指标匹配或部分匹配的电子排斥积分只出现在图示中相互作用顶点具有梯形结构的项内；表 V.2 中具有 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-3})$ 误差的四个线性项见图 V.1 1。

## VI. 数值示例

为了展示采用大型 $\mathbf{k}$ 点网格进行能量和振幅计算时的有限尺寸误差，我们考虑一个具有有效势场的模型系统。使用固定的有效势场，我们可以在热力学极限下获得任意 $\mathbf{k}$ 点处的轨道和轨道能量，这满足定理 1 的假设。这一简化设定还使我们能够进行最多使用 $N_{\mathbf{k}} = 16^3 = 4096$ 个 $\mathbf{k}$ 点的大规模计算，这可以视为总共包含 4096 个原子的超胞。

表 V.2. CCD 能量中各个单独项（使用精确振幅）的误差估计，以及振幅计算的误差估计。所有振幅项均假设固定的 $I, J, A, B$，对动量矢量的积分和对能带指标的求和均针对中间轨道，例如 $K, L, C, D$。公式（27）中经 $\mathcal{P}$ 置换的每个 3h3p 线性项，其误差估计都与未置换项相同，因此此处不再列出。

| | Type | 项 | 误差估计 |
|---|---|---|---|
| 能量 | | $\sum_{IJAB} \langle IJ\|AB\rangle\, t_{IJ}^{AB}, \sum_{IJAB} \langle IJ\|BA\rangle\, t_{IJ}^{AB}$ | $N_{\mathbf{k}}^{-1}$ |
| 振幅 | 常数 | $\langle AB\|IJ\rangle$ | $0$ |
| | 线性 | $\langle KL\|IJ\rangle\, t_{KL}^{AB}, \langle AB\|CD\rangle\, t_{IJ}^{CD}, \langle AK\|CI\rangle\, t_{KJ}^{CB}, \langle AK\|CJ\rangle\, t_{KI}^{BC}$ | $N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}$ |
| | | $\langle AK\|IC\rangle\, t_{KJ}^{BC}$ | $N_{\mathbf{k}}^{-1}$ |
| | | $\langle AK\|IC\rangle\, t_{KJ}^{CB}$ | 超代数 |
| | 二次 | $\langle LK\|DC\rangle\, t_{IL}^{AD} t_{KJ}^{CB}$ | 超代数 |
| | | 所有其他项 | $N_{\mathbf{k}}^{-1}$ |

设晶胞为 $\Omega = [0,1]^3$，我们沿每个方向使用 16 个平面波基函数，对该晶胞中的算子和函数进行离散化（即 G 点的数量为 $16^3 = 4096$，且与 $N_{\mathbf{k}}$ 无关）。对于每个动量矢量 $\mathbf{k} \in \Omega^*$，我们求解有效 Kohn-Sham 方程，以获得 $n_{\text{occ}} = 1$ 个占据轨道和 $n_{\text{vir}} = 1$ 个虚轨道，其中高斯有效势定义为

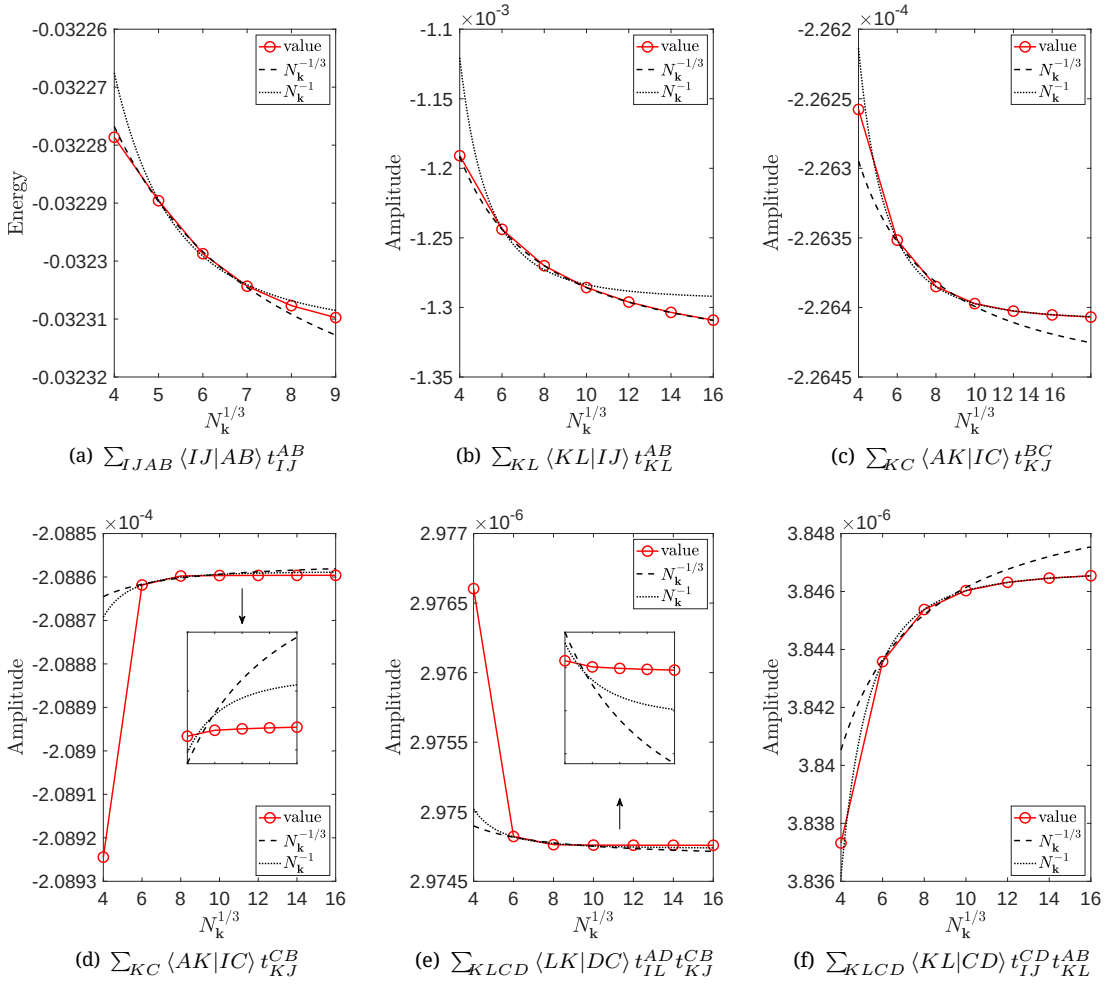
$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}\in\mathbb{L}} C \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{r}+\mathbf{R}-\mathbf{r}_0)^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{r}+\mathbf{R}-\mathbf{r}_0)\right),$$

取 $\mathbf{r}_0 = (0.5, 0.5, 0.5)$、$\Sigma = \mathrm{diag}(0.1^2, 0.2^2, 0.3^2)$，以及 $C = -200$。该模型问题的占据能带与虚能带之间的直接带隙约为 30.4。

图 VI.1 展示了六项具有代表性的计算，这些计算采用精确 CCD(1) 振幅，对应于表 V.2 中总结的误差估计。为在没有参考值的情况下确定渐近误差标度，我们在每幅图中使用小 $N_{\mathbf{k}}$ 处的三个数据点进行幂律外推（即按照 $C_0 + C_1 N^{-s}{}_{\mathbf{k}}$ 的形式拟合曲线），然后用较大$N_{\mathbf{k}}$ 处外推值与实际值之间的差异来衡量拟合质量。可以看出，所测试的能量和振幅计算的收敛率与表 V.2 中的理论估计一致。因此，这些结果验证了引理 5 和引理 6 中的有限尺寸误差估计，以及引理 12、14、16、18 和 20 中针对具有代数奇异性的周期函数得到的一系列一般求积误差估计。这些数值证据表明，定理 1 中的有限尺寸误差估计是锐利的。

## VII. 讨论

我们研究了周期性耦合簇理论计算趋近热力学极限时的收敛速率。本文的分析聚焦于最简单且具有代表性的耦合簇理论，即耦合簇双激发（CCD）理论。由于 CCD 包含许多来自 Møller-Plesset 微扰理论的有限阶微扰能项，这也为其中包含的微扰能项（例如 MP3）首次提供了有限尺寸误差分析。我们将有限尺寸误差解释为数值求积误差。关键步骤包括：(1) 分析奇异性结构，即被积函数的代数奇异性；(2) 为具有特定代数奇异性的奇异被积函数，界定（一元或多元）梯形法则的求积误差。我们的求积分析基于针对某些“挖孔”梯形求积公式的泊松求和公式，在其他领域也可能具有独立的参考价值。




(a) $\sum_{IJAB} \langle IJ|AB\rangle\, t_{IJ}^{AB}$ (b) $\sum_{KL} \langle KL|IJ\rangle\, t_{KL}^{AB}$ (c) $\sum_{KC} \langle AK|IC\rangle\, t_{KJ}^{BC}$

(d) $\sum_{KC} \langle AK|IC\rangle\, t_{KJ}^{CB}$ (e) $\sum_{KLCD} \langle LK|DC\rangle\, t_{IL}^{AD} t_{KJ}^{CB}$ (f) $\sum_{KLCD} \langle KL|CD\rangle\, t_{IJ}^{CD} t_{KL}^{AB}$

图 VI.1. 使用精确 CCD(1) 振幅进行的能量和振幅计算。所有振幅均在 $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_j = (0, 0, 0)$、$\mathbf{k}_a = (0, 0, \pi)$ 和 $(i, j, a, b) = (1, 1, 2, 2)$ 处求值。幂律外推在 (a) 中使用位于 $N_{\mathbf{k}} = 5^3$、$6^3$、$7^3$ 处的三个数据点，在其余子图中则使用位于 $N_{\mathbf{k}} = 6^3$、$8^3$、$10^3$ 处的三个数据点。表 V.2 中的理论估算表明，这些计算的求积误差渐近地分别以 $N^{-1}{}_{\mathbf{k}}$、$N^{-\frac{1}{3}}{}_{\mathbf{k}}$、$N^{-1}{}_{\mathbf{k}}$、超代数地、超代数地和 $N^{-1}{}_{\mathbf{k}}$ 的速率衰减。在子图 (d) 和 (e) 中，实际数据曲线比使用 $N^{-1}{}_{\mathbf{k}}$ 和 $N^{-\frac{1}{3}}{}_{\mathbf{k}}$ 的幂律外推收敛得更快。这可以视为求积误差超代数地衰减的证据。

我们的主要结果定理 1 研究了 CCD($n$) 计算在振幅方程上进行任意 $n > 0$ 次不动点迭代时的有限尺寸误差。然而，对于无能隙和小能隙系统，实践中观察到这种不动点迭代可能不收敛，或者振幅方程可能存在多个解。在发散的情况下，CCD 的微扰解释不再成立，因此我们对 CCD($n$) 的分析无法用于研究 CCD 能量计算中的有限尺寸误差。在存在多个解的情况下，CCD 本身定义不明确，其问题也同样如此

有限尺寸误差分析。

我们的有限尺寸误差分析不适用于不直接依赖 Hartree-Fock 轨道和轨道能量的理论，例如张量网络方法或量子蒙特卡罗方法。要精确分析这些方法，可能需要更深入地了解结构因子 [4, 9] 的行为。对于无能隙系统（例如金属），轨道能量差以及费米面附近的占据数会引入额外的奇异性，轨道能量差的形式为 $(\varepsilon^{a\mathbf{k}_a}{}_{,\,b\mathbf{k}i} \quad {}^{b}{}_{\mathbf{k}_i,\;j\mathbf{k}j})^{-1}$。在这种情况下，求积误差分析需要考虑这些额外的奇异性结构，而且金属中的有限尺寸标度也可能与有能隙系统中的情况有定性差异 [5, 8, 14]。

[1]我们指出，CCD 能量计算中的有限尺寸误差按 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-\frac{2}{3}})$ 标度；与文献中的数值结果相比，这一结论似乎过于悲观 [5, 11],，因为这些结果发现，当非线性振幅方程以自洽方式求解时，某些 CC 计算中的有限尺寸误差可按 $\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-1})$ 标度。在假设 Hartree-Fock 轨道和轨道能量可在任意给定 k 点精确求得的前提下，我们的分析对于 CCD($n$) 方案中的任意固定迭代步数都是严格的。设置 CC 迭代（公式（25））时需要轨道能量，而占据轨道能量的有限尺寸误差修正对于准确计算 Fock 交换能至关重要。然而，由于 CC 振幅方程的抽象形式（公式（24））可以在不明确涉及轨道能量的情况下表述，因此当迭代方案达到自洽时，可能会发生偶然的误差抵消。具体而言，如果 CCD 计算使用未经修正的不精确 Hartree-Fock 轨道能量，CCD 振幅方程的特殊结构意味着，这种简单方案可能等价于更复杂的方案，后者同时对 Hartree-Fock 轨道能量应用 Madelung 常数修正 [23],，并对电子排斥积分应用移位 Ewald 核 [4] 修正。换言之，在 CCD 理论中，仅修正轨道能量的有限尺寸误差可能适得其反。对这一更复杂方法的分析超出了本文的范围。一种可行的途径是将求积误差分析与奇点减除法 [6, 20, 23] 相结合，同时修正轨道能量和电子排斥积分。

尽管我们关注的是基态能量的有限尺寸误差，但我们认为，基于求积的分析包含了一些关键要素，有助于分析量子物理和量子化学中多种图示方法的有限尺寸误差，例如 $n$ 阶 Møller-Plesset 微扰理论（MPn）、GW、CCSD、CCSD(T) 以及运动方程耦合簇（EOM-CC）理论。

致谢：

本材料基于美国能源部科学办公室高级科学计算研究办公室和基础能源科学办公室通过高级计算实现科学发现（SciDAC）计划提供的支持（X.X.）。本工作还部分获得了空军科学研究办公室的资助，奖项编号为 FA9550-18-1-0095（L.L.）。L.L. 是西蒙斯研究员。我们感谢 Timothy Berkelbach、Garnet Chan 和 Alexander Sokolov 富有见地的讨论。

[1] R. J. Bartlett 和 M. Musiał。量子化学中的耦合簇理论。《现代物理评论》，79(1):291，2007年。[2] C. Brouder、G. Panati、M. Calandra、C. Mourougane 和 N. Marzari。绝缘体中 Wannier函数的指数局域化。《物理评论快报》，98:046402，2007年。[3] S. Chiesa、D. M. Ceperley、R. M. Martin 和 M. Holzmann。具有长程相互作用的多体模拟中的有限尺寸误差。《物理评论快报》，97(7):6–9，2006年。[4] L. M. Fraser、W. M. C. Foulkes、G. Rajagopal、R. Needs、S. Kenny 和 A. Williamson。周期性边界条件下均匀系统量子蒙特卡罗计算中的有限尺寸效应与库仑相互作用。《物理评论B》，53(4):1814–1832，1996年。[5] T. Gruber、K. Liao、T. Tsatsoulis、F. Hummel 和 A. Gr¨uneis。将耦合簇拟设应用于热力学极限下的固体和表面。《物理评论X》，8(2):021043，2018年。[6] F. Gygi 和 A. Baldereschi。固体中的自洽 Hartree-Fock 和屏蔽交换计算：硅的应用。《物理评论B》，34:4405–4408，1986年。[7] S. Hirata、R. Podeszwa、M. Tobita 和 R. J. Bartlett。扩展系统的耦合簇单双激发。《化学物理学杂志》，120(6):2581–2592，2004年。[8] M. Holzmann、B. Bernu 和 D. M. Ceperley。均匀电子气费米液体性质的有限尺寸分析。《物理学会议系列杂志》，321(1):012020，2011年。[9] M. Holzmann、R. C. Clay、M. A. Morales、N. M. Tubman、D. M. Ceperley 和 C. Pierleoni。液体和固体电子量子蒙特卡罗计算的有限尺寸效应理论。《物理评论B》，94(3):1–16，2016年。[10] F. Izzo、O. Runborg 和 R. Tsai。一类奇异积分的高阶修正梯形公式。arXiv 预印本 arXiv:2203.04854，2022年。[11] K. Liao 和 A. Gr¨uneis。通讯：固体周期性耦合簇理论计算中的有限尺寸修正。《化学物理学杂志》，145(14):141102，2016年。[12] J. McClain、Q. Sun、G. K. L. Chan 和 T. C. Berkelbach。用于固体基态和能带结构的基于高斯函数的耦合簇理论。《化学理论与计算杂志》，13(3):1209–1218，2017年。[13] T. N. Mihm、A. R. McIsaac 和 J. J. Shepherd。用于求得均匀电子气扭转平均关联能的最优扭转角。《化学物理学杂志》，150(19):191101，2019年。[14] T. N. Mihm、B. Yang 和 J. J. Shepherd。用于将耦合簇关联能外推至热力学极限的幂律。《化学理论与计算杂志》，17(5):2752–2758，2021年。[15] D. Monaco、G. Panati、A. Pisante 和 S. Teufel。陈绝缘体和量子霍尔绝缘体中 Wannier函数的最优衰减。《数学物理通讯》，359(1):61–100，2018年。[16] H. J. Monkhorst 和 J. D. Pack。布里渊区积分的特殊点。《物理评论B》，13(12):5188，1976年。[17] R. Schneider。电子结构计算中投影耦合簇方法的分析。《数值数学》，113(3):433–471，2009年。[18] I. Shavitt 和 R. J. Bartlett。化学与物理中的多体方法：多体微扰理论与耦合簇理论。剑桥大学出版社，2009年。[19] L. N. Trefethen。逼近理论与逼近实践，第164卷。工业与应用数学学会，2019年。[20] B. Wenzien、G. Cappellini 和 F. Bechstedt。立方和非立方晶体的高效准粒子能带结构计算。《物理评论B》，51(20):14701，1995年。[21] K. G. Wilson。从头算量子化学：格点规范理论学家的思想源泉。《核物理B会议增刊》，17:82–92，1990年。[22] X. Xing、X. Li 和 L. Lin。固体关联能计算的交错网格方法：二阶 Møller–Plesset 微扰理论。《化学理论与计算杂志》，17(8):4733–4745，2021年。[23] X. Xing、X. Li 和 L. Lin。周期性 Hartree-Fock 与二阶 Møller–Plesset 微扰理论有限尺寸误差的统一分析。arXiv 预印本 arXiv:2108.00206，2021年。[24] X. Xing 和 L. Lin。固体关联能计算的交错网格方法：直接环形耦合簇双激发和绝热连接形式中的随机相位近似。《化学理论与计算杂志》，18(2):763–775，2022年。[25] I. Y. Zhang 和 A. Gr¨uneis。材料科学中的耦合簇理论。《材料前沿》，6:123，2019年。

## 附录A MP3 和耦合簇双激发（CCD）简介

双激发振幅 $T^{\#,\ N_{\mathbf{k}}}_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)$ 在文献中通常记作 $t^{a\mathbf{k}_a,\ b\mathbf{k}_i}_{\ \ \ \

其中， $|\Phi_{IJ}^{AB}\rangle = a_A^\dagger a_B^\dagger a_J a_I |\Phi\rangle$ 为激发单 Slater 行列式， $\mathcal{H}_\mathcal{K}$ 为具有 k 点网格 $\mathcal{K}$ 的模型哈密顿量。在实际应用中，该非线性振幅方程可以使用拟牛顿法 [17]，求解，也可以等价地写成不动点迭代的形式：

$$t_{IJ}^{AB} = \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}} \langle AB|IJ\rangle + \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}} \mathcal{P}\left(\sum_C \kappa_C^A t_{IJ}^{CB} - \sum_K \kappa_I^K t_{KJ}^{AB}\right) + \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}}\left[\frac{1}{N_\mathbf{k}} \sum_{KL} \chi_{IJ}^{KL} t_{KL}^{AB} + \frac{1}{N_\mathbf{k}} \sum_{CD} \chi_{CD}^{AB} t_{IJ}^{CD} + \mathcal{P}\left(\frac{1}{N_\mathbf{k}} \sum_{KC} (2\chi_{IC}^{AK} - \chi_{CI}^{AK}) t_{KJ}^{CB} - \chi_{IC}^{AK} t_{KJ}^{BC} - \chi_{CJ}^{AK} t_{KI}^{BC}\right)\right]. \quad (25)$$

这一 CCD 振幅方程的重写形式也可以从[7] 中的 CCSD 振幅方程推导得出：去掉所有与单激发振幅相关的项，并对涉及的电子排斥积分和振幅进行归一化（这使方程和中间块中多出了因子 $1/N_\mathbf{k}$）。方程中的中间块定义如下：

$$\begin{aligned}
\kappa_C^A &= -\frac{1}{N_\mathbf{k}^2} \sum_{KLD} \left(2\langle KL|CD\rangle - \langle KL|DC\rangle\right) t_{KL}^{AD}, \\
\kappa_I^K &= \frac{1}{N_\mathbf{k}^2} \sum_{LCD} \left(2\langle KL|CD\rangle - \langle KL|DC\rangle\right) t_{IL}^{CD}, \\
\chi_{IJ}^{KL} &= \langle KL|IJ\rangle + \frac{1}{N_\mathbf{k}} \sum_{CD} \langle KL|CD\rangle\, t_{IJ}^{CD}, \\
\chi_{CD}^{AB} &= \langle AB|CD\rangle, \\
\chi_{IC}^{AK} &= \langle AK|IC\rangle + \frac{1}{2N_\mathbf{k}} \sum_{LD} \left(2\langle LK|DC\rangle - \langle LK|CD\rangle\right) t_{IL}^{AD} - \langle LK|DC\rangle\, t_{IL}^{DA}, \\
\chi_{CI}^{AK} &= \langle AK|CI\rangle - \frac{1}{2N_\mathbf{k}} \sum_{LD} \langle LK|CD\rangle\, t_{IL}^{DA},
\end{aligned}$$

其动量矢量指标也满足晶体动量守恒

$$\begin{aligned}
\kappa_P^Q &\to \mathbf{k}_p - \mathbf{k}_q \in \mathbb{L}^*, \\
\chi_{PQ}^{RS} &\to \mathbf{k}_p + \mathbf{k}_q - \mathbf{k}_r - \mathbf{k}_s \in \mathbb{L}^*.
\end{aligned}$$

### A.2 热力学极限下的振幅

在热力学极限下，随着 $\mathcal{K}$ 收敛至 $\Omega^*$，MP3 和耦合簇双激发中的所有平均求和 $N^{-1}{}_\mathbf{k} \sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{K}}$ 都收敛为积分 $|\Omega^*|^{-1} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}$。值得注意的是，在有限情形下，双激发振幅被近似计算为 $\mathcal{K}\times\mathcal{K}\times\mathcal{K}$ 上的张量；在热力学极限下，它收敛为 $\Omega^*\times\Omega^*\times\Omega^*$ 内关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$ 的函数。在 MP3 中，根据公式（23），对于任意 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a \in \Omega^*$，精确振幅 $T^{\mathrm{MP3}}{}_{,\ ijab}^{\mathrm{TDL}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) = t_{IJ}^{AB}$ 可表示为

$$t_{IJ}^{AB} = \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}} \langle AB|IJ\rangle + \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}}\left[\frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kl} \langle KL|IJ\rangle\, s_{KL}^{AB} + \frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_c \sum_{cd} \langle AB|CD\rangle\, s_{IJ}^{CD} + \mathcal{P}\left(\frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kc} (2\langle AK|IC\rangle - \langle AK|CI\rangle) s_{KJ}^{CB} - \langle AK|IC\rangle\, s_{KJ}^{BC} - \langle AK|CJ\rangle\, s_{KI}^{BC}\right)\right]. \quad (26)$$

类似地，在耦合簇双激发中，热力学极限下关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a \in \Omega^*$ 的精确振幅函数所满足的振幅方程，根据公式（25）可表示为

$$t_{IJ}^{AB} = \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}} \langle AB|IJ\rangle + \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}} \mathcal{P}\left(\sum_C \kappa_C^A t_{IJ}^{CB} - \sum_K \kappa_I^K t_{KJ}^{AB}\right) + \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}}\left[\frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kl} \chi_{IJ}^{KL} t_{KL}^{AB} + \frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_c \sum_{cd} \chi_{CD}^{AB} t_{IJ}^{CD} + \mathcal{P}\left(\frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kc} (2\chi_{IC}^{AK} - \chi_{CI}^{AK}) t_{KJ}^{CB} - \chi_{IC}^{AK} t_{KJ}^{BC} - \chi_{CJ}^{AK} t_{KI}^{BC}\right)\right], \tag{27}$$

其中，热力学极限中的中间块定义为

$$\begin{aligned}
\kappa_C^A &= -\frac{1}{|\Omega^*|^2}\int_{\Omega^*\times\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k\, \mathrm{d}\mathbf{k}_l \sum_{kld} \left(2\langle KL|CD\rangle - \langle KL|DC\rangle\right) t_{KL}^{AD}, \\
\kappa_I^K &= \frac{1}{|\Omega^*|^2}\int_{\Omega^*\times\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_c\, \mathrm{d}\mathbf{k}_d \sum_{lcd} \left(2\langle KL|CD\rangle - \langle KL|DC\rangle\right) t_{IL}^{CD}, \\
\chi_{IJ}^{KL} &= \langle KL|IJ\rangle + \frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_c \sum_{cd} \langle KL|CD\rangle\, t_{IJ}^{CD}, \\
\chi_{CD}^{AB} &= \langle AB|CD\rangle, \\
\chi_{IC}^{AK} &= \langle AK|IC\rangle + \frac{1}{2|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_l \sum_{ld} \left(2\langle LK|DC\rangle - \langle LK|CD\rangle\right) t_{IL}^{AD} - \langle LK|DC\rangle\, t_{IL}^{DA}, \\
\chi_{CI}^{AK} &= \langle AK|CI\rangle - \frac{1}{2|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_l \sum_{ld} \langle LK|CD\rangle\, t_{IL}^{DA}.
\end{aligned}$$

### A.3 CCD($n$) 振幅

在本文中，我们用 CCD($n$) 指通过对振幅方程应用 $n$ 次以零初始猜测为起点的不动点迭代，近似求解 CCD 振幅，然后使用所得振幅计算近似的 CCD 能量。在有限情形中，CCD(0) 的初始振幅设为零，并且当 $n = 1$时，我们有

$$T_{ijab}^{\mathrm{CCD}(1),N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) = \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}} \langle AB|IJ\rangle .$$

因此，CCD(1) 可等同于 MP2。在 CCD(2) 计算中，将 CCD(1) 振幅代入公式（25）的右侧，其中常数项与所有线性项之和恰好给出公式（23）中的 MP3 振幅，而所有二次项均属于四阶莫勒-普莱塞振幅。因此，CCD(2) 包含 MP2 和 MP3 中的所有项，以及四阶莫勒-普莱塞微扰理论中的一部分项。

在第 $n$ 次迭代中，我们将第（$n-1$）次迭代得到的耦合簇双激发($n-1$)振幅代入公式（25）中的振幅方程右端，左端则给出耦合簇双激发($n$)振幅，即:

$$\begin{aligned}
T_{ijab}^{\mathrm{CCD}(n),N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) = \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}} \langle AB|IJ\rangle + \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}} \mathcal{P}\Bigg(\sum_C \kappa_C^A T_{ijcb}^{\mathrm{CCD}(n-1),N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) \\
- \sum_K \kappa_I^K T_{kjab}^{\mathrm{CCD}(n-1),N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)\Bigg) + \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}} \frac{1}{N_{\mathbf{k}}} \sum_{KL} \chi_{IJ}^{KL} T_{klab}^{\mathrm{CCD}(n-1),N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) + \cdots
\end{aligned}$$

w此时，所有涉及的中间块均使用耦合簇双激发$(n-1)$振幅计算，例如: .,

$$\kappa_C^A = \frac{1}{N_{\mathbf{k}}^2}\sum_{KLD}\left(2\langle KL|CD\rangle - \langle KL|DC\rangle\right) T_{klad}^{\mathrm{CCD}(n-1),N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_l,\mathbf{k}_c),$$

$$\chi_{IJ}^{KL} = \langle KL|IJ\rangle + \frac{1}{N_{\mathbf{k}}}\sum_{CD}\langle KL|CD\rangle\, T_{ijcd}^{\mathrm{CCD}(n-1),N_{\mathbf{k}}}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_c).$$

在有限情形下，通过展开不动点迭代，CCD($n$) 振幅由许多对电子排斥积分和轨道能量分式的乘积进行平均求和构成，这些乘积对应于 Møller-Plesset 微扰理论中最高至 $2^n$阶的某些微扰项的双激发振幅 [18] 。展开后的 CCD($n$) 振幅中的每个平均求和，在热力学极限下都收敛为一个关于 $\Omega^*$ 中相关中间动量矢量的积分。因此，热力学极限下的 CCD($n$) 振幅可显式表示为多个积分之和，而在有限情形下，这些积分分别由梯形求积公式近似。

另一方面，热力学极限下的 CCD($n$) 振幅也可以通过对公式（27）中的热力学极限振幅方程应用 $n$ 不动点迭代来递归定义，即:

$$T_{ijab}^{\mathrm{CCD}(n),\mathrm{TDL}}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a) = \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}}\langle AB|IJ\rangle + \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}}\mathcal{P}\left(\sum_c \kappa_{c\mathbf{k}_a}^{a\mathbf{k}_a} T_{ijcb}^{\mathrm{CCD}(n-1),\mathrm{TDL}}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)\right. \tag{28}$$

$$\left. - \sum_k \kappa_{i\mathbf{k}_i}^{k\mathbf{k}_i} T_{kjab}^{\mathrm{CCD}(n-1),\mathrm{TDL}}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a)\right) + \frac{1}{\varepsilon_{IJ}^{AB}}\frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kl}\chi_{IJ}^{KL} T_{klab}^{\mathrm{CCD}(n-1),\mathrm{TDL}}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_l,\mathbf{k}_a) + \cdots$$

其中，所有相关中间块均使用精确的 CCD($n-1$) 振幅计算。展开这一不动点迭代可以验证，热力学极限下振幅的这种递归定义，与通过对有限情形下双激发振幅中的每个独立平均求和项取热力学极限而得到的上述定义一致。

## 附录 B 定理 1 的证明

### B.1 引理 4 的证明：精确 CCD($n$) 振幅的奇异性结构

基于第 V.1 节中电子排斥积分的光滑性，可以验证每个 CCD(1) 振幅元素，即具有任意 ($i, j, a, b$) 的 MP2 振幅，都属于 $\mathbb{T}(\Omega^*)$，因此满足引理中的陈述。由于精确 CCD($n$) 振幅在 $n > 1$ 处的定义，是通过将式 (10) 中的 $\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}$ 递归应用于 CCD(1) 振幅得到的，因此只需证明 $\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t) \in \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}}$， $\forall t \in \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}}$.

考虑任意的 $t \in \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}}$。固定一组 ($i, j, a, b$)，我们着重分析条目 $[\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t)]_{ijab}$ 中包含的常数项、线性项和二次项

$$\begin{aligned}
[\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t)]_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a) &= \frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b}}\langle a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b|i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j\rangle \\
&+ \frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b}}\frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}_k\sum_{kl}\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l|i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j\rangle\, t_{klab}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_l,\mathbf{k}_a) \\
&+ \frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b}}\frac{1}{|\Omega^*|^2}\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}_k\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{k}_c\sum_{klcd}\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l|c\mathbf{k}_c, d\mathbf{k}_d\rangle\, t_{ijcd}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_c) t_{klab}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_l,\mathbf{k}_a) \\
&+ \cdots,
\end{aligned} \tag{29}$$

其中，所列的线性项和二次项来自公式（27）中的 4h2p 项 $\chi_{IJ}^{KL} t_{KL}^{AB}$，而被忽略的项包括其余所有线性项和二次项。我们的目标是证明，这些项作为 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$ 的函数，属于 $\mathbb{T}(\Omega^*)$。可以直接验证，这些项满足 $\mathbb{T}(\Omega^*)$ 中描述的周期性条件。因此，我们着重证明：这些项除 $\mathbf{q} = \mathbf{k}_a - \mathbf{k}_i = \mathbf{0}$ 处的 0 阶奇异性外处处光滑，并且当 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ 时，关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j \in \Omega^*$ 光滑。回顾定义 10 中多元函数的代数奇异性：若周期函数 $f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)$ 除 $\mathbf{k}_a = \mathbf{k}_i$ 处的 $\gamma$ 阶奇异性外处处光滑，则在进行变量替换 $\mathbf{k}_a \to \mathbf{k}_i + \mathbf{q}$ 后，存在满足以下条件的常数 $\{C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}\}$

$$\left| \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{q}^{\boldsymbol{\alpha}}} \left( \frac{\partial^{\boldsymbol{\beta}}}{\partial (\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)^{\boldsymbol{\beta}}} f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{q}) \right) \right| \leqslant C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} |\mathbf{q}|^{\gamma - |\boldsymbol{\alpha}|}, \quad \forall \mathbf{q} \in \Omega^* \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j \in \Omega^*, \forall \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \geqslant 0, \tag{30}$$

利用函数的光滑性，该不等式可扩展到所有 $\mathbf{q} \in \Omega^* \setminus \{\mathbf{0}\}$。

常数项恰好是一个 MP2/CCD(1)振幅元素，且属于 $\mathbb{T}(\Omega^*)$。

所有线性项都可写成对 $\Omega^*$ 中一个中间动量矢量的积分，被积函数是一个电子排斥积分与一个振幅分量的乘积（示例见公式（29））。根据被积函数相对于中间动量矢量的奇异点数量，这些线性项可分为三类，见表B.1。对于同一类中的项，关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$ 的光滑性分析类似。下面分别举例说明每一类中的一项。

表B.1. 按相对于中间动量矢量的非光滑点数量对线性振幅项进行分类。经 $\mathcal{P}$ 置换的 3h3p 项与未置换的项属于同一类，因此不予列出。为简洁起见，省略对中间轨道的求和，例如 $K$、$L$、$C$ 和 $D$，以及前因子 $1/\varepsilon_{IJ}^{AB}$。

| 奇异点数量 | 线性项 |
|---|---|
| 0 | $\langle AK\|IC\rangle\, t_{KJ}^{CB}$ |
| 1 | $\langle AK\|CI\rangle\, t_{KJ}^{CB}$, $\langle AK\|IC\rangle\, t_{KJ}^{BC}$ |
| 2 | $\langle KL\|IJ\rangle\, t_{KL}^{AB}$, $\langle AB\|CD\rangle\, t_{IJ}^{CD}$, $\langle AK\|CJ\rangle\, t_{IK}^{CB}$ |

对于不存在奇异点的线性项，我们将 3h3p 项 $\langle AK|IC\rangle\, t_{KJ}^{CB}$ 详细表示为（忽略前因子和轨道能量分式），

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kc} \langle a\mathbf{k}_a, k\mathbf{k}_k | i\mathbf{k}_i, c\mathbf{k}_c \rangle\, t_{kjcb}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c),$$

其中 $\mathbf{k}_c = \mathbf{k}_a + \mathbf{k}_k - \mathbf{k}_i = \mathbf{k}_k + \mathbf{q}$。电子排斥积分和振幅的动量转移分别为 $\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_a = -\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{k}_c - \mathbf{k}_k = \mathbf{q}$，且二者均独立于 $\mathbf{k}_k$。因此，对于任意满足 $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ 的 $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{q}) \in (\Omega^*)^{\times 3}$，都存在一个包含该点的开域，使得上述被积函数关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{k}_k \in \Omega^*$ 光滑。这满足莱布尼茨积分法则的条件，因而可用该法则证明此积分在所有满足 $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ 的点 $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{q}) \in (\Omega^*)^{\times 3}$ 处均光滑，并且该积分的任意导数都等于相应被积函数导数的积分。代数奇异性

对于该项，在任意满足 $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ 的 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{q} \in \Omega^*$ 处，公式（30）中的条件可验证为

$$\begin{aligned}
\left|\partial_{\mathbf{q}}^{\boldsymbol{\alpha}} \partial_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j}^{\boldsymbol{\beta}} \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \cdots\right| &= \left|\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \partial_{\mathbf{q}}^{\boldsymbol{\alpha}} \partial_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j}^{\boldsymbol{\beta}} \cdots\right| \\
&\leqslant C \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kc} \left| \sum_{\substack{\boldsymbol{\alpha}_0+\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta}_0+\boldsymbol{\beta}_1=\boldsymbol{\beta}}} \partial_{\mathbf{q}}^{\boldsymbol{\alpha}_0} \partial_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j}^{\boldsymbol{\beta}_0} \langle a\mathbf{k}_a, k\mathbf{k}_k | i\mathbf{k}_i, c\mathbf{k}_c\rangle \, \partial_{\mathbf{q}}^{\boldsymbol{\alpha}_1} \partial_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j}^{\boldsymbol{\beta}_1} t_{kjcb}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) \right| \\
&\leqslant C \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kc} \left| \sum_{\substack{\boldsymbol{\alpha}_0+\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta}_0+\boldsymbol{\beta}_1=\boldsymbol{\beta}}} C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} |\mathbf{q}|^{0-|\boldsymbol{\alpha}_0|} |\mathbf{q}|^{0-|\boldsymbol{\alpha}_1|} \right| \\
&\leqslant C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} |\mathbf{q}|^{-|\boldsymbol{\alpha}|}, \qquad (31)
\end{aligned}$$

其中 $C_{\boldsymbol{\alpha},\,\boldsymbol{\beta}}$ 表示依赖于 $\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{\beta}$ 的一般常数；第三个不等式利用了 ERI 和振幅在 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ 处的代数奇异性，其阶为 0。最后，$\mathbf{q} = \mathbf{0}$ 处的 ERI 项关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$ 是光滑的（见式 (1)），根据假设 $t_{kjcb} \in \mathbb{T}(\Omega^*)$，振幅也如此。因此，我们可以使用莱布尼茨积分法则证明，$\mathbf{q} = \mathbf{0}$ 处的积分关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$ 是光滑的。上述讨论由此表明，该积分属于 $\mathbb{T}(\Omega^*)$。

对于具有一个非光滑点的线性项，我们考虑如下详述的 3h3p 项 $\langle AK|CI\rangle\, t_{KJ}^{CB}$

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kc} \langle a\mathbf{k}_a, k\mathbf{k}_k | c\mathbf{k}_c, i\mathbf{k}_i\rangle \, t_{kjcb}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c),$$

其中 电子排斥积分和振幅的动量转移分别为 $\mathbf{k}_k - \mathbf{k}_i$ 和 $\mathbf{k}_c - \mathbf{k}_k = \mathbf{q}$。B y 变量替换 $\mathbf{k}_k \to \mathbf{k}_i + \mathbf{q}_1$ 以及被积函数的周期性，可将该项改写为

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{q}_1 \sum_{kc} \langle a\mathbf{k}_a, k(\mathbf{k}_i + \mathbf{q}_1) | c(\mathbf{k}_a + \mathbf{q}_1), i\mathbf{k}_i\rangle \, t_{kjcb}(\mathbf{k}_i + \mathbf{q}_1, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a + \mathbf{q}_1),$$

其中，被积函数由于电子排斥积分而在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{0}$ 处不光滑，并且在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{0}$ 附近其渐近尺度为 $\mathcal{O}(1/|\mathbf{q}_1|^2)$。因此，对于任意 $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{q}) \in (\Omega^*)^{\times 3}$ 且 $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ 的点，都存在一个包含该点的开域，使得相关被积函数关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{q}_1 \in \Omega^* \setminus \{\mathbf{0}\}$ 光滑，且其绝对值有上界 $C/|\mathbf{q}_1|^2$，该上界在 $\Omega^*$ 上可积。这仍满足莱布尼茨积分法则的条件，因此可用该法则证明此积分在所有满足 $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ 的点 $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{q}) \in (\Omega^*)^{\times 3}$ 处均光滑。$\mathbf{q} = \mathbf{0}$ 处积分的代数奇异性可类似公式（31）予以证明，不过此时电子排斥积分导数的估计为

$$\left|\partial_{\mathbf{q}}^{\boldsymbol{\alpha}_0} \partial_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j}^{\boldsymbol{\beta}_0} \langle a\mathbf{k}_a, k(\mathbf{k}_i + \mathbf{q}_1) | c\mathbf{k}_c, i\mathbf{k}_i\rangle\right| \leqslant C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} / |\mathbf{q}_1|^2,$$

注意到，此处的电子排斥积分具有动量转移 $\mathbf{q}_1$，并且关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$ 和 $\mathbf{q}$ 光滑。

对于具有两个非光滑点的线性项，我们考虑公式（29）中详述的四空穴二粒子线性项 $\langle KL|IJ\rangle\, t_{KL}^{AB}$。首先，将带有能带指标（$k$、$l$）的电子排斥积分和振幅分别记为

$$\begin{aligned}
F_1^{kl}(\mathbf{q}_1, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) &= \langle k(\mathbf{k}_i - \mathbf{q}_1), l(\mathbf{k}_j + \mathbf{q}_1) | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j\rangle\,, \\
F_2^{kl}(\mathbf{q}_2, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) &= t_{klab}(\mathbf{k}_a - \mathbf{q}_2, \mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_a + \mathbf{q}_2, \mathbf{k}_a),
\end{aligned}$$

其中，$\mathbf{q}_1$ 和 $\mathbf{q}_2$ 分别是两个项中的动量转移。注意，$F_1^{kl}$ 不依赖于 $\mathbf{k}_a$，后者作为变量纳入以涵盖一般情况。电子排斥积分和振幅都依赖于 $\mathbf{k}_k$ 和 $\mathbf{k}_l$，利用变量替换和晶体动量守恒，可将这些依赖关系转换为对 $\mathbf{q}_1$,$\mathbf{q}_2$ 的依赖。例如，我们有 $t_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_i+\mathbf{k}_j-\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_a) = t_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) = t_{klab}(\mathbf{k}_a-\mathbf{q}_2, \mathbf{k}_i+\mathbf{k}_j-\mathbf{k}_a+\mathbf{q}_2, \mathbf{k}_a)$。

注意到，根据（$k$，$l$）与（$i$，$j$）之间的关系，可以验证 $F_1^{kl}$ 相对于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$、$\mathbf{q}_1 \in \Omega^*$ 处处具有周期性和光滑性，唯独在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{0}$ 处例外，其阶数分别为 0、$-1$ 或 $-2$。类似地，根据假设 $t_{klab} \in \mathbb{T}(\Omega^*)$，$F_2^{kl}$ 相对于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$、$\mathbf{q}_2 \in \Omega^*$ 处处具有周期性和光滑性，唯独在 $\mathbf{q}_2 = \mathbf{0}$ 处例外，其阶数为 0。使用这一记号，4h2p 线性项可以重新表述为

$$\begin{aligned}&\frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kl} F_1^{kl}(\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) F_2^{kl}(\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) \\ &\quad = \frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{q}_1 \sum_{kl} F_1^{kl}(\mathbf{q}_1, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) F_2^{kl}(\mathbf{q}_1-(\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_a), \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a),\end{aligned}$$

其中，第二个等式适用于 $\mathbf{k}_k \to \mathbf{k}_i - \mathbf{q}_1$，并利用了相对于 $\mathbf{k}_k \in \Omega^*$ 的被积函数的周期性。由于被积函数在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_a$ 和 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{0}$ 处不光滑，因此无法像前两种情况那样，利用莱布尼茨积分法则得到积分相对于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$ 的光滑性。我们给出一个技术引理，以积分形式分析此类函数的奇异性结构。

引理 11。设 $f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{z})$ 定义于 $V \times V \times V_Z$，其中 $V = [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^d$ 和 $V_Z \subset \mathbb{R}^{d_z}$ 的维数为任意 $d_z$。假设 $f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{z})$ 关于 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in V$ 是周期的，并且除 $\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}$ 或 $\mathbf{x}_2 = \mathbf{0}$ 外处处光滑，在这些点处的非光滑行为可表征为

$$\left| \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}}{\partial \mathbf{x}_1^{\boldsymbol{\alpha}_1}} \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}_2}}{\partial \mathbf{x}_2^{\boldsymbol{\alpha}_2}} \left( \frac{\partial^{\boldsymbol{\beta}}}{\partial \mathbf{z}^{\boldsymbol{\beta}}} f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{z}) \right) \right| \leqslant C_{\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta}} |\mathbf{x}_1|^{\gamma_1 - |\boldsymbol{\alpha}_1|} |\mathbf{x}_2|^{\gamma_2 - |\boldsymbol{\alpha}_2|}, \forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in V \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{z} \in V_Z, \quad (32)$$

对于任意导数阶数 $\boldsymbol{\alpha}_1$、$\boldsymbol{\alpha}_2$、$\boldsymbol{\beta} \geqslant 0$。

假设 $\min_i \gamma_i \geqslant -d+1$，部分积分函数

$$F(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = \int_V \mathrm{d}\mathbf{x} f(\mathbf{x}, \mathbf{x}-\mathbf{y}, \mathbf{z}),$$

在 $V \times V_Z$ 中除 $\mathbf{y} = \mathbf{0}$ 外处处光滑，其阶为 $\max(\gamma_1, \gamma_2)$。

证明。参见附录 E。 □

To 为转换为引理 11 中的条件，我们将 4h2p 线性项 a 的被积函数重新表述为 s

$$f(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) = \sum_{kl} F_1^{kl}(\mathbf{q}_1, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a) F_2^{kl}(\mathbf{q}_2, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a),$$

它满足公式（32），其中 $\mathbf{x}_1 = \mathbf{q}_1, \mathbf{x}_2 = \mathbf{q}_2, \mathbf{z} = (\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a)$、$\gamma_1 = -2$ 和 $\gamma_2 = 0$。引理 11 表明，部分积分函数，

$$\frac{1}{|\Omega^*|}\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{q}_1 f(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1-\mathbf{y}; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a),$$

关于 $\mathbf{y}$、$\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a \in$ 和 $\Omega^*$，除 $\mathbf{y} = \mathbf{0}$ 处的 0 阶情况外，该函数处处周期且光滑。由于 4h2p 线性项等于 $\mathbf{y} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_a$ 处的此函数，因此我们可以根据定义 10 证明它是

除 $\mathbf{k}_a = \mathbf{k}_i$ 处的 0 阶情况外，该函数处处周期且光滑。这证明 4h2p 线性项属于$\mathbb{T}(\Omega^*)$。

所有二次项也具有相同的积分形式：积分在 $\Omega^*$ 内对两个中间动量矢量进行，被积函数则是一个电子排斥积分与两个振幅元素的乘积（示例见公式（29））。这些二次项的光滑性分析可分解为两个子问题，并可通过前面对线性项的分析加以解决。我们以公式（29）中的四空穴二粒子二次项为例说明分析过程。

在四空穴二粒子二次项中，动量矢量为 $\mathbf{k}_l = \mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_k$ 和 $\mathbf{k}_d = \mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_c$；对任意固定的 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$，被积函数是 $\mathbf{k}_k$ 和 $\mathbf{k}_c$ 的函数。我们首先考虑关于 $\mathbf{k}_c$ 的偏积分：

$$H_{ijkl}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_k) = \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_c \sum_{cd} \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | c\mathbf{k}_c, d\mathbf{k}_d \rangle \, t_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c).$$

这里的被积函数作为 $\mathbf{k}_c$ 的函数，在 $\mathbf{k}_c = \mathbf{k}_k$ 和 $\mathbf{k}_c = \mathbf{k}_i$ 处均不光滑，阶为 0，这是由电子排斥积分和振幅导致的。因此，它与前文研究的具有两个非光滑点的线性项形式相同，我们可以采用相同的分析，证明这个中间函数 $H_{ijkl}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_k)$ 除 $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_k$ 处外处处光滑，且该处的阶为 0。于是，整个二次项可写为：

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kl} H_{ijkl}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_k) t_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a).$$

此处的被积函数形式与四空穴二粒子线性项相似，只是将电子排斥积分项 $\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j \rangle$替换为 $H_{ijkl}$，后者在 $\mathbf{k}_k = \mathbf{k}_i$ 处具有相同的非光滑行为，阶为 0。利用引理 11 对线性项所作的相同分析，可以证明该项作为 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$ 的函数，除 $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_a$ 处外处处光滑，且该处的阶为 0。这就证明了四空穴二粒子二次项属于 $\mathbb{T}(\Omega^*)$。所有其他二次项也都可以利用上述对三类线性项的分析方法进行类似分析。

既然已证明 $[\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t)]_{ijab}$ 中的所有常数项、线性项和二次项均属于 $\mathbb{T}(\Omega^*)$，引理 4 的证明至此完成。

### B.2 引理 5 的证明：使用精确振幅进行能量计算时的误差

考虑任意振幅 $t \in \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}} \times n_{\mathrm{occ}} \times n_{\mathrm{vir}} \times n_{\mathrm{vir}}}$。展开反对称化电子排斥积分后，使用 $t$ 进行能量计算所产生的有限尺寸误差，可分解为直接项计算误差和交换项计算误差：

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}(t) - \mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t) = {} & \frac{2}{|\Omega^*|^3} \mathcal{E}_{\Omega^* \times \Omega^* \times \Omega^*} \left( \sum_{ijab} \langle i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j | a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b \rangle \, t_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a), \mathcal{K} \times \mathcal{K} \times \mathcal{K} \right) \\ & - \frac{1}{|\Omega^*|^3} \mathcal{E}_{\Omega^* \times \Omega^* \times \Omega^*} \left( \sum_{ijab} \langle i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j | b\mathbf{k}_b, a\mathbf{k}_a \rangle \, t_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a), \mathcal{K} \times \mathcal{K} \times \mathcal{K} \right).\end{aligned}$$

对于每组能带指标 $i, j, a, b$，我们将直接项计算（即上文第一项）的被积函数记为，在进行变量替换 $\mathbf{k}_a \to \mathbf{k}_i + \mathbf{q}$ 后，表示为

$$F_{\mathrm{d}}^{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{q}) = \langle i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j | a(\mathbf{k}_i + \mathbf{q}), b(\mathbf{k}_j - \mathbf{q}) \rangle \, t_{ijab}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_i + \mathbf{q}).$$

电子排斥积分和振幅项的动量转移均等于 $\mathbf{q}$。对 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ 附近的电子排斥积分进行展开，并利用假设 $t_{ijab}\in\mathbb{T}(\Omega^*)$，可证明 $F^{ijab}\mathrm{d}$ 关于 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{q}\in\Omega^*$ 在除 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ 处之外处处具有周期性且光滑，且在该处为 0 阶。由于 $\mathbf{k}_i$ 和 $\mathbf{k}_a$ 在同一网格 $\mathcal{K}$ 上采样，$\mathbf{q}=\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_i$ 所诱导的网格（将每个 $\mathbf{q}$ 映射为 $\mathbf{q}+\mathbf{G}\in\Omega^*$，其中某个 $\mathbf{G}\in\mathbb{L}^*$，并利用被积函数关于 $\Omega^*$ 的周期性）与 $\mathcal{K}$ 大小相同，并且始终包含 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$。将此诱导网格记为 $\mathcal{K}_{\mathbf{q}}$。于是，对每组 $i,j,a,b$ 进行直接项计算时的求积误差可表示并拆分为

$$\begin{aligned}&\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*\times\Omega^*}\left(F_{\mathrm{d}}^{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{q}),\mathcal{K}\times\mathcal{K}\times\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\right)\\=&\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*}\left(\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{q}F_{\mathrm{d}}^{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{q}),\mathcal{K}\times\mathcal{K}\right)+\frac{|\Omega^*|^2}{N_{\mathbf{k}}^2}\sum_{\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j\in\mathcal{K}}\mathcal{E}_{\Omega^*}\left(F_{\mathrm{d}}^{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{q}),\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\right).\end{aligned}\tag{33}$$

根据上述分析，固定 $\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j\in\mathcal{K}$，$F^{ijab}\mathrm{d}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{q})$ 作为 $\mathbf{q}$ 的函数，在 $\Omega^*$ 中处处周期且光滑，除 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ 处存在 0 阶奇异性。引理 14 给出了具有单个代数奇异点的此类周期函数的求积误差估计；具体在本例中，我们有

$$\left|\mathcal{E}_{\Omega^*}\left(F_{\mathrm{d}}^{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{q}),\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\right)\right|\leqslant CN_{\mathbf{k}}^{-1},\quad\forall\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j\in\mathcal{K},$$

其中常数 $C$ 与 $\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j$ 无关，这是利用 $F^{ijab}\mathrm{d}$ 在 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ 处的代数奇异性刻画以及引理 14 中的前因子估计得到的（见注释 15）。

由于 $F^{ijab}\mathrm{d}$ 关于 $\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j\in$ 在 $\Omega^*$ 上是周期且光滑的，根据莱布尼茨积分法则，$\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{q}F^{ijab}\mathrm{d}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{q})$ 关于 $\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j\in$ 在 $\Omega^*$ 上也周期且光滑。根据引理 12，该部分积分函数（式 (33) 中的第一项）的求积误差超代数地衰减，如下所示

$$\left|\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*}\left(\int_{\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{q}F_{\mathrm{d}}^{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{q}),\mathcal{K}\times\mathcal{K}\right)\right|\leqslant C_lN_{\mathbf{k}}^{-l},\quad\forall l>0.$$

将上述两个估计代入式 (33)，即可证明直接项计算中的求积误差按如下方式缩放

$$\left|\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*\times\Omega^*}\left(\sum_{ijab}\langle i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j|a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b\rangle\,t_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a),\mathcal{K}\times\mathcal{K}\times\mathcal{K}\right)\right|\leqslant CN_{\mathbf{k}}^{-1}.$$

对交换项也可进行类似分析，其中我们通过两次变量替换 $\mathbf{k}_j\to\mathbf{k}_a+\mathbf{q}_1$ 和 $\mathbf{k}_i\to\mathbf{k}_a-\mathbf{q}_2$ 将被积函数表示为

$$F_{\mathrm{x}}^{ijab}(\mathbf{k}_a,\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)=\langle i(\mathbf{k}_a-\mathbf{q}_2),j(\mathbf{k}_a+\mathbf{q}_1)|b(\mathbf{k}_a-\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1),a\mathbf{k}_a\rangle\,t_{ijab}(\mathbf{k}_a-\mathbf{q}_2,\mathbf{k}_a+\mathbf{q}_1,\mathbf{k}_a),$$

其中，电子排斥积分和振幅的动量转移分别为 $\mathbf{q}_1$ 和 $\mathbf{q}_2$，。电子排斥积分和振幅关于 $\mathbf{k}_a$、$\mathbf{q}_1$,$\mathbf{q}_2\in\Omega^*$ 处处光滑，但分别在 $\mathbf{q}_1=\mathbf{0}$ 和 $\mathbf{q}_2=\mathbf{0}$处例外，且二者的阶均为 0。与直接项的讨论类似，交换项的计算等价于在 $F_{\mathrm{x}}^{ijab}$上使用均匀网格 $\mathcal{K}\times\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\times\mathcal{K}_{\mathbf{q}}$的梯形法则。与每组 $(i,j,a,b)$ 相关的求积误差可以拆分为

$$\begin{aligned}&\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*\times\Omega^*}\left(F_{\mathrm{x}}^{ijab}(\mathbf{k}_a,\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2),\mathcal{K}\times\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\times\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\right)\\=&\mathcal{E}_{\Omega^*}\left(\int_{\Omega^*\times\Omega^*}\mathrm{d}\mathbf{q}_1\,\mathrm{d}\mathbf{q}_2F_{\mathrm{x}}^{ijab}(\mathbf{k}_a,\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2),\mathcal{K}\right)+\frac{|\Omega^*|}{N_{\mathbf{k}}}\sum_{\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}}\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*}\left(F_{\mathrm{x}}^{ijab}(\mathbf{k}_a,\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2),\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\times\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\right).\end{aligned}\tag{34}$$

第一项超代数地衰减，因为 $\int_{\Omega^*\times\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{q}_1\,\mathrm{d}\mathbf{q}_2 F_{\mathrm{x}}^{ijab}(\mathbf{k}_a,\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)$ 关于 $\mathbf{k}_a\in\Omega^*$ 是光滑的周期函数，这可由莱布尼茨积分法则得到。对于第二项，在固定 $\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}$的情况下， $F_{\mathrm{x}}^{ijab}$可以看作两个周期函数的乘积，即 $f_1(\mathbf{k}_a,\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)f_2(\mathbf{k}_a,\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)$，其中 $f_1$ 处处光滑，但在 $\mathbf{q}_1=\mathbf{0}$ 处例外，且阶为 0； $f_2$ 处处光滑，但在 $\mathbf{q}_2=\mathbf{0}$ 处例外，且阶为 0。引理18给出了此类乘积形式的周期函数的求积误差估计，具体在本例中有

$$\left|\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*}\left(F_{\mathrm{x}}^{ijab}(\mathbf{k}_a,\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2),\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\times\mathcal{K}_{\mathbf{q}}\right)\right|\leqslant CN_{\mathbf{k}}^{-1},\quad \forall\mathbf{k}_a\in\mathcal{K},$$

其中，常数 $C$ 可证明与 $\mathbf{k}_a$ 无关，这可利用 $f_1$ 和 $f_2$ 的代数奇异性刻画以及引理18中的前因子估计得出（见注19）。

将这两个估计代入公式（34），即可证明交换项计算中的求积误差按如下规律缩放：

$$\left|\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*\times\Omega^*}\left(\sum_{ijab}\langle i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j|b\mathbf{k}_b,a\mathbf{k}_a\rangle\, t_{ijab}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_a),\mathcal{K}\times\mathcal{K}\times\mathcal{K}\right)\right|\leqslant CN_{\mathbf{k}}^{-1}.$$

综合上述对直接项和交换项的估计，可得：

$$|\mathcal{G}_{\mathrm{TDL}}(t)-\mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t)|=\mathcal{O}(N_{\mathbf{k}}^{-1}),\quad \forall t\in\mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}},$$

这涵盖了任意 $n>0$ 下精确的耦合簇双激发($n$) 振幅的情形。

### B.3 引理 6 的证明：单次迭代中的振幅误差

考虑使用任意振幅 $t\in\mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{occ}}\times n_{\mathrm{vir}}\times n_{\mathrm{vir}}}$ 进行振幅计算时产生的误差。固定一组 $(i,j,a,b)$ 和 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a\in\mathcal{K}$ 后，相应的误差项可利用公式（25）和公式（27）中的振幅映射定义详细写为：

$$\begin{aligned}
&[\mathcal{M}_{\mathcal{K}}\mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t)-\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t)]_{ijab,\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j\mathbf{k}_a}\\
=&\frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b}}\frac{1}{|\Omega^*|}\mathcal{E}_{\Omega^*}\left(\sum_{kl}\langle k\mathbf{k}_k,l\mathbf{k}_l|i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j\rangle\, t_{klab}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_l,\mathbf{k}_a),\mathcal{K}\right)\\
&+\frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i,j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a,b\mathbf{k}_b}}\frac{1}{|\Omega^*|^2}\mathcal{E}_{\Omega^*\times\Omega^*}\left(\sum_{klcd}\langle k\mathbf{k}_k,l\mathbf{k}_l|c\mathbf{k}_c,d\mathbf{k}_d\rangle\, t_{ijcd}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_c)t_{klab}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_l,\mathbf{k}_a),\mathcal{K}\times\mathcal{K}\right)\\
&+\cdots,
\end{aligned}\tag{35}$$

其中，常数项相互抵消，所列出的两个求积误差分别是 4h2p 线性项和 4h2p 二次项计算中的误差。被忽略的项是其余线性项和二次项计算中的误差，这些误差都可以类似地表述为梯形求积公式的求积误差。因此，问题归结为估计对振幅方程中由不同振幅项定义的被积函数应用梯形求积公式所产生的误差。

如 B.1 节所示，线性项可分为表 B.1 所列的三类，其被积函数分别含有零个、一个和两个非光滑点。对于每一类中的项，其求积误差均可采用类似的方法估计。下面我们将分别展示每一类中一个示例的误差估计。

Fo对于含有零个非光滑点的线性项，我们考虑 3h3p 项 $\langle AK|IC\rangle\, t_{KJ}^{CB}$ 详细 a s,

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kc} \langle a\mathbf{k}_a, k\mathbf{k}_k | i\mathbf{k}_i, c\mathbf{k}_c\rangle\, t_{kjcb}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c).$$

电子排斥积分和振幅的动量转移分别为 $\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_a = -\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{k}_c - \mathbf{k}_k = \mathbf{q}$，且与 $\mathbf{k}_k$无关。因此，对于任意 $\mathbf{k}_i$,$\mathbf{k}_j$,$\mathbf{k}_a \in \Omega^*$，被积函数关于 $\mathbf{k}_k$ 光滑且为周期函数，根据引理 12，其求积误差会超代数地衰减，即

$$\left| \mathcal{E}_{\Omega^*} \left( \sum_{kc} \langle a\mathbf{k}_a, k\mathbf{k}_k | i\mathbf{k}_i, c\mathbf{k}_c\rangle\, t_{kjcb}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c), \mathcal{K} \right) \right| \leqslant C_l N_{\mathbf{k}}^{-l/3}, \quad \forall l > 0. \tag{36}$$

利用引理 12 中的前因子估计以及被积函数导数在 $\mathbf{k}_k$ 上对所有 $\mathbf{k}_i$, $\mathbf{k}_j$, $\mathbf{k}_a$ 的一致有界性，可以证明常数 $C_l$ 与 $\mathbf{k}_i$, $\mathbf{k}_j$, $\mathbf{k}_a \in \Omega^*$ 无关（见注 13）。

Fo对于具有一个非光滑点的 r 个线性项，我们考虑 3h3p 项 $\langle AK|CI\rangle\, t_{KJ}^{CB}$，详见 a s

$$\int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kc} \langle a\mathbf{k}_a, k\mathbf{k}_k | c\mathbf{k}_c, i\mathbf{k}_i\rangle\, t_{kjcb}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c),$$

其中电子排斥积分和振幅的动量转移分别为 $\mathbf{k}_k - \mathbf{k}_i$ 和 $\mathbf{k}_c - \mathbf{k}_k = \mathbf{q}$。对于任意 $\mathbf{k}_i$, $\mathbf{k}_j$, $\mathbf{k}_a \in \Omega^*$，这些电子排斥积分在 $\Omega^*$ 中处处光滑，但在 $\mathbf{k}_k = \mathbf{k}_i$ 处除外，其阶为 0、 $-1$ 或 $-2$，具体取决于 $(k, c)$ 与 $(i, a)$ 之间的关系。由此可验证，由于包含 $k = i, c = a$ 的乘积项，整体被积函数除 $\mathbf{k}_k = \mathbf{k}_i$ 处外均光滑，且该点的阶为 $-2$。引理 14 给出了此类在一点具有代数奇异性的周期函数的求积误差估计；具体而言，在本例中有

$$\left| \mathcal{E}_{\Omega^*} \left( \sum_{kc} \langle a\mathbf{k}_a, k\mathbf{k}_k | c\mathbf{k}_c, i\mathbf{k}_i\rangle\, t_{kjcb}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c), \mathcal{K} \right) \right| \leqslant C N_{\mathbf{k}}^{-1/3}, \tag{37}$$

其中，利用引理 14 中的前因子估计以及电子排斥积分和振幅的代数奇异性刻画（见注释15），可以证明常数 $C$ 与 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$ 无关。

对于具有两个非光滑点的线性项，我们考虑公式（35）中详细介绍的 4h2p项 $\langle KL|IJ\rangle\, t_{KL}^{AB}$。首先，将每组 $(k, l)$ 对应的被积函数记为

$$F^{kl}(\mathbf{k}_k) = \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j\rangle\, t_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a). \tag{38}$$

$F^{kl}$ 中的电子排斥积分 $(\mathbf{k}_k)$ 除了在 $\mathbf{k}_k = \mathbf{k}_i$ 处之外处处光滑，其阶为 0、 $-1$ 或 $-2$，具体取决于 $(k, l)$ 与 $(i, j)$ 的关系。振幅 $F^{kl}(\mathbf{k}_k)$ 除了在 $\mathbf{k}_k = \mathbf{k}_a$ 处之外处处光滑，其阶为 0。通过变量替换 $\mathbf{k}_k \to \mathbf{k}_i - \mathbf{q}_1$， $F^{kl}(\mathbf{q}_1)$ 可表示为两个周期函数的乘积： $f_1(\mathbf{q}_1) f_2(\mathbf{q}_1)$，其中 $f_1(\mathbf{q}_1)$ 在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{0}$ 处不光滑，其阶为 0、$-1$ 或 $-2$；而 $f_2(\mathbf{q}_1)$ 在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_a$ 处不光滑，其阶为 0。当 $\mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_a \in \mathcal{K}$ 时，采用引理16 估计这种乘积形式的周期函数的求积误差；当 $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_a \in \mathcal{K}$ 时，则采用引理 14 估计，得到

$$\left| \mathcal{E}_{\Omega^*} \left( F^{kl}(\mathbf{q}_1), \mathcal{K}_{\mathbf{q}} \right) \right| \leqslant C \begin{cases} N_{\mathbf{k}}^{-1} & k \neq i, l \neq j \\ N_{\mathbf{k}}^{-\frac{2}{3}} & k = i, l \neq j \text{ or } k \neq i, l = j \\ N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}} & k = i, l = j \end{cases}$$

利用两个引理中的前因子估计以及电子排斥积分和振幅的代数奇异性刻画，可以证明常数 $C$ 与 $\mathbf{k}_i$,$\mathbf{k}_j$,$\mathbf{k}_a$ 无关（见注释15 和注释 17）。对上述各组 $(k,l)$ 的估计求和后，4h2p 线性项计算中的求积误差可估计为

$$\left|\mathcal{E}_{\Omega^*}\left(\sum_{kl}\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l|i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j\rangle\, t_{klab}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_l,\mathbf{k}_a),\mathcal{K}\right)\right| \leqslant C N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}.$$

与线性项的情形类似，根据相对于两个中间动量向量的非光滑性，所有二次项及其求积误差估计可分为四类，如表 B.2 所示。

表 B.2. 根据相对于中间动量向量的非光滑点对二次振幅项进行分类。我们用 $\mathbf{k}_1$,$\mathbf{k}_2$ 表示对中间动量向量进行适当变量替换后的两个积分变量，并用 $\mathbf{x}_1$,$\mathbf{x}_2$,$\mathbf{x}_3$ 表示 $\Omega^*$中的一般点。经 $\mathcal{P}$ 置换的 3h3p项与未置换的项属于同一类，因此未列出。每个乘积下方的中间块表示该乘积在公式（27）中的来源。

| 奇异点 | 二次项 |
|---|---|
| None | $\underbrace{\langle LK\|DC\rangle\, t_{IL}^{AD}}_{\chi_{IC}^{AK}}\, t_{KJ}^{CB}$ |
| $\mathbf{k}_1 = \mathbf{x}_1$ | $\underbrace{\langle LK\|CD\rangle\, t_{IL}^{AD}}_{\chi_{IC}^{AK}}\, t_{KJ}^{CB},\ \underbrace{\langle LK\|DC\rangle\, t_{IL}^{DA}}_{\chi_{IC}^{AK}}\, t_{KJ}^{CB},\ \underbrace{\langle LK\|DC\rangle\, t_{IL}^{AD}}_{\chi_{IC}^{AK}}\, t_{KJ}^{BC}\ \underbrace{\langle KL\|CD\rangle\, t_{KL}^{AD}}_{\kappa_C^A}\, t_{IJ}^{CB},\ \underbrace{\langle KL\|CD\rangle\, t_{IL}^{CD}}_{\kappa_I^K}\, t_{KJ}^{AB}$ |
| $\mathbf{k}_1 = \mathbf{x}_1, \mathbf{k}_2 = \mathbf{x}_2$ | $\underbrace{\langle LK\|CD\rangle\, t_{IL}^{DA}}_{\chi_{CI}^{AK}}\, t_{KJ}^{CB},\ \underbrace{\langle LK\|CD\rangle\, t_{IL}^{AD}}_{\chi_{IC}^{AK}}\, t_{KJ}^{BC},\ \underbrace{\langle KL\|DC\rangle\, t_{KL}^{AD}}_{\kappa_C^A}\, t_{IJ}^{CB},\ \underbrace{\langle KL\|DC\rangle\, t_{IL}^{CD}}_{\kappa_I^K}\, t_{KJ}^{AB}$ |
| $\mathbf{k}_1 = \mathbf{x}_1, \mathbf{k}_2 = \mathbf{x}_2, \mathbf{k}_1 \pm \mathbf{k}_2 = \mathbf{x}_3$ | $\underbrace{\langle KL\|CD\rangle\, t_{IJ}^{CD}}_{\chi_{IJ}^{AB}}\, t_{KL}^{AB},\ \underbrace{\langle LK\|DC\rangle\, t_{IL}^{DA}}_{\chi_{IC}^{AK}}\, t_{KJ}^{BC},\ \underbrace{\langle LK\|CD\rangle\, t_{JL}^{DA}}_{\chi_{CJ}^{AK}}\, t_{KI}^{BC}$ |

对于第一类和第二类的二次项，其求积误差可以用与上述线性项类似的方法，通过引理 12 和引理 14 进行估计。下面我们展示第三类和第四类二次项的求积误差估计。

对于第三类，我们考虑 3h3p 二次项 $\langle LK|CD\rangle\, t_{IL}^{AD} t_{KJ}^{BC}$，并将每组（$k$、$l$、$c$、$d$）对应的被积函数记为

$$F_{\text{3h3p}}^{klcd}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_l) = \langle l\mathbf{k}_l, k\mathbf{k}_k|c\mathbf{k}_c, d\mathbf{k}_d\rangle\, t_{ilad}(\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_l,\mathbf{k}_a) t_{kjbc}(\mathbf{k}_k,\mathbf{k}_j,\mathbf{k}_b),$$

其中 $\mathbf{k}_c = \mathbf{k}_k + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_b$ 和 $\mathbf{k}_d = \mathbf{k}_l + \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_a$。电子排斥积分和两个振幅的动量转移分别为 $\mathbf{k}_c - \mathbf{k}_l = \mathbf{k}_k - \mathbf{k}_l + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_b$、$\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_i$ 和 $\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_k$。为单独考察关于 $\mathbf{k}_k$ 和 $\mathbf{k}_l$ 的非光滑性，我们引入两个变量替换 $\mathbf{k}_k \to \mathbf{k}_b - \mathbf{q}_2$ 和 $\mathbf{k}_l \to \mathbf{k}_k + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_b + \mathbf{q}_1$，并利用被积函数的周期性将该项的计算表示为

$$\frac{1}{N_{\mathbf{k}}^2}\sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2\in\mathcal{K}_{\mathbf{q}}}\sum_{klcd} F_{\text{3h3p}}^{klcd}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2) \longrightarrow \frac{1}{|\Omega^*|^2}\int_{\Omega^*\times\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{q}_1\,\mathrm{d}\mathbf{q}_2 \sum_{klcd} F_{\text{3h3p}}^{klcd}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2),$$

其中，被积函数除在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{0}$ 和 $\mathbf{q}_2 = \mathbf{0}$处外处处光滑。这解释了为何将该项归为表 B.2 中列出的第三类。请注意，$F_{\text{3h3p}}^{klcd}$中的第一个振幅相对于

$\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ 光滑，因此 $F^{klcd}_{\text{3h3p}}$可以写成乘积形式 $f_1(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) f_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$，其中 $f_s(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$，且 $s = 1$、2 除在 $\mathbf{q}_s = \mathbf{0}$ 处外处处光滑，阶为 0。引理18给出了这种乘积形式的二元函数的求积误差估计；具体到本例，我们有

$$\left| \mathcal{E}_{\Omega^* \times \Omega^*} \left( \sum_{klcd} F^{klcd}_{\text{3h3p}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2), \mathcal{K}_{\mathbf{q}} \times \mathcal{K}_{\mathbf{q}} \right) \right| \leqslant C N_{\mathbf{k}}^{-1},$$

其中，利用引理18中的前因子估计以及电子排斥积分和振幅的代数奇异性刻画（见注19），可以证明常数 $C$ 与 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$ 无关。

对于第四类，我们考虑 4h2p 二次项 $\langle KL|CD\rangle\, t^{CD}_{IJ} t^{AB}_{KL}$，并将经过变量替换 $\mathbf{k}_k \to \mathbf{k}_c + \mathbf{q}_1$ 和 $\mathbf{k}_c \to \mathbf{k}_i + \mathbf{q}_2$ 后，每组 $(k, l, c, d)$ 对应的被积函数记为

$$F^{klcd}_{\text{4h2p}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | c\mathbf{k}_c, d\mathbf{k}_d \rangle\, t_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) t_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a),$$

其中，电子排斥积分除在 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{0}$ 处具有 0 阶奇异性外处处光滑；两个振幅分别除在 $\mathbf{q}_2 = \mathbf{0}$ 和 $\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_i = \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1$, 处具有 0 阶奇异性外，均处处光滑。这解释了为何将该项归为表 B.2 所列的第四类。引理 20 给出了此类乘积形式二元函数的求积误差估计；具体到本例，有

$$\left| \mathcal{E}_{\Omega^* \times \Omega^*} \left( \sum_{klcd} F^{klcd}_{\text{4h2p}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2), \mathcal{K}_{\mathbf{q}} \times \mathcal{K}_{\mathbf{q}} \right) \right| \leqslant C N_{\mathbf{k}}^{-1},$$

其中，常数 $C$ 可证明与 $\mathbf{k}_i$、$\mathbf{k}_j$、$\mathbf{k}_a$ 无关，这可由引理 20 中的前因子估计以及电子排斥积分和振幅的代数奇异性刻画得出（参见备注 21）。

汇总上述所有线性项和二次项的求积误差估计（总结见表 V.2），我们得到振幅计算的最终误差估计

$$\left| [\mathcal{M}_{\mathcal{K}} \mathcal{F}_{\text{TDL}}(t) - \mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}} t)]_{ijab, \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_a} \right| \leqslant C N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}, \qquad \forall i, j, a, b, \forall \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a \in \mathcal{K}.$$

值得指出的是，主要误差来自以下六个线性振幅项，

$$\sum_{KL} \langle KL|IJ\rangle\, t^{AB}_{KL}, \quad \sum_{CD} \langle AB|CD\rangle\, t^{CD}_{IJ}, \quad \mathcal{P} \sum_{KC} \langle AK|CJ\rangle\, t^{CB}_{IK}, \quad \mathcal{P} \sum_{KC} \langle AK|CI\rangle\, t^{BC}_{KJ},$$

其中涉及的电子排斥积分可能具有相同的能带指标，因此在零动量转移点处具有 $-2$ 阶非光滑性。

### B.4 引理 7 的证明：耦合簇双激发迭代中的误差累积

固定一组 $i, j, a, b$ 和 $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_a$，我们重点关注条目 $[\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T)]_{ijab,\ \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_a}$ 中的一个常数项、一个一次项和一个二次项，具体如下

$$\begin{aligned}
[\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T)]_{ijab, \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_a} &= \frac{1}{\varepsilon^{a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b}_{i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j}} \langle a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j \rangle \\
&+ \frac{1}{\varepsilon^{a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b}_{i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j}} \frac{1}{N_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}_k \in \mathcal{K}} \sum_{kl} \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j \rangle\, T_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) \\
&+ \frac{1}{\varepsilon^{a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b}_{i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j}} \frac{1}{N_{\mathbf{k}}^2} \sum_{\mathbf{k}_k \mathbf{k}_c \in \mathcal{K}} \sum_{klcd} \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | c\mathbf{k}_c, d\mathbf{k}_d \rangle\, T_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) T_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) \\
&+ \cdots,
\end{aligned} \tag{39}$$

其中，一次项和二次项来自公式（25）中的 4h2p 项 $\chi_{IJ}^{KL} t_{KL}^{AB}$，而上文省略的项则是公式（25）中包含的其他一次项和二次项。

在相减 $\mathcal{F}_{N_\mathbf{k}}(T) - \mathcal{F}_{N_\mathbf{k}}(S)$ 时，这两个映射中上述常数项相互抵消。两个 4h2p 线性项之差可表示并估计为

$$\begin{aligned}
&\left| \frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b}} \frac{1}{N_\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}_k \in \mathcal{K}} \sum_{kl} \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j \rangle \left( T_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) - S_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) \right) \right| \\
\leqslant & C \frac{1}{N_\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}_k \in \mathcal{K}} \sum_{kl} |\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j \rangle| \, \|T - S\|_\infty \\
\leqslant & C \|T - S\|_\infty \int_{\Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \sum_{kl} |\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j \rangle| \leqslant C \|T - S\|_\infty .
\end{aligned}$$

振幅映射 $\mathcal{F}_{N_\mathbf{k}}$ 中的所有其他线性项也可得到类似的估计。两个 4h2p 二次项之差可表示并估计为

$$\begin{aligned}
&\left| \frac{1}{\varepsilon_{i\mathbf{k}_i, j\mathbf{k}_j}^{a\mathbf{k}_a, b\mathbf{k}_b}} \frac{1}{N_\mathbf{k}^2} \sum_{\mathbf{k}_k \mathbf{k}_c \in \mathcal{K}} \sum_{klcd} \langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | c\mathbf{k}_c, d\mathbf{k}_d \rangle \left( T_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) T_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) - S_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) S_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) \right) \right| \\
\leqslant & C \int_{\Omega^* \times \Omega^*} \mathrm{d}\mathbf{k}_k \, \mathrm{d}\mathbf{k}_c \sum_{klcd} |\langle k\mathbf{k}_k, l\mathbf{k}_l | c\mathbf{k}_c, d\mathbf{k}_d \rangle| \left( \|T\|_\infty + \|S\|_\infty \right) \|T - S\|_\infty \\
\leqslant & C \left( \|T\|_\infty + \|S\|_\infty \right) \|T - S\|_\infty ,
\end{aligned}$$

其中第一个不等式使用了以下估计

$$\begin{aligned}
&|T_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) T_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) - S_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) S_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a)| \leqslant |T_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) \left( T_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) - S_{klab} \right. \\
&\left. (\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a) \right)| + |(T_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c) - S_{ijcd}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_c)) \, S_{klab}(\mathbf{k}_k, \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_a)| \leqslant \|T\|_\infty \|T - S\|_\infty + \|S\|_\infty \|T - S\|_\infty .
\end{aligned}$$

对于振幅映射 $\mathcal{F}_{N_\mathbf{k}}$ 中所有其他二次项，也可以得到类似的估计。将这些估计汇总起来，我们得到

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{F}_{N_\mathbf{k}}(T) - \mathcal{F}_{N_\mathbf{k}}(S)\|_\infty &= \max_{ijab, \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_a \in \mathcal{K}} \left| [\mathcal{F}_{N_\mathbf{k}}(T) - \mathcal{F}_{N_\mathbf{k}}(S)]_{ijab, \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_a} \right| \\
&\leqslant C \left( 1 + \|T\|_\infty + \|S\|_\infty \right) \|T - S\|_\infty .
\end{aligned}$$

## 附录C 推论 3 的证明

如第VII节所述，通常 CCD 振幅方程可能存在多个解，或者其不动点迭代可能发散。在这些情况下，CCD 能量计算中的有限尺寸误差可能定义不明确，且与我们分析的 CCD($n$) 无关。这里，我们考虑理想情况：对于任意充分大的 $N_\mathbf{k}$，$T = \mathcal{F}_{N_\mathbf{k}}(T)$ 和 $t = \mathcal{F}_{\mathrm{TDL}}(t)$ 均有唯一解，分别记为 $T_*^{N_\mathbf{k}}$ 和 $t_*$，且相应的不动点迭代在 $\|\cdot\|_\infty$-范数意义下收敛，即

$$\lim_{n \to \infty} \|T_n - T_*^{N_\mathbf{k}}\|_\infty = 0 \qquad \text{and} \qquad \lim_{n \to \infty} \|t_n - t_*\|_\infty = 0.$$

一般而言，保证不动点迭代收敛的一个常见充分条件是：目标映射在包含解点的定义域内是压缩的（稍后将具体说明），且初始猜测也位于该定义域内。遵循这一做法，我们作出四项假设：

• $\mathcal{F}$热力学极限是定义域 $\mathbb{B}$热力学极限 $\subset \mathbb{T}(\Omega^*)^{n_{占据}\times n_{占据}\times n_{虚}\times n_{虚}}$中的压缩映射，该定义域包含 $t_*$，且初始猜测为 0，即，

$$\begin{aligned}&\mathcal{F}_{\text{TDL}}(t)\in\mathbb{B}_{\text{TDL}},\quad \forall t\in\mathbb{B}_{\text{TDL}},\\&\|\mathcal{F}_{\text{TDL}}(t)-\mathcal{F}_{\text{TDL}}(s)\|_\infty\leqslant L\|t-s\|_\infty,\quad \forall t,s\in\mathbb{B}_{\text{TDL}},\end{aligned}$$

其中 $L<1$ 为常数。该假设保证 $\{t_n\}$ 属于 $\mathbb{B}_{\text{TDL}}$，并收敛于 $t_*$ .

• $\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}$ 当 $N_{\mathbf{k}}$ 足够大时，是定义域 $\mathbb{B}_{N^{\mathbf{k}}}\subset\mathbb{C}^{n_{\text{occ}}\times n_{\text{occ}}\times n_{\text{vir}}\times n_{\text{vir}}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}\times N_{\mathbf{k}}}$上的压缩映射，该定义域包含 $T^{N_{\mathbf{k}*}}$ 以及初始猜测 0，即

$$\begin{aligned}&\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T)\in\mathbb{B}_{N_{\mathbf{k}}},\quad \forall T\in\mathbb{B}_{N_{\mathbf{k}}},\\&\|\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T)-\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(S)\|_\infty\leqslant L\|T-S\|_\infty,\quad \forall T,S\in\mathbb{B}_{N_{\mathbf{k}}},\end{aligned}$$

with 一个常数 $L<1$。该假设保证 $\{T_n^{N_{\mathbf{k}}}\}$ 属于 $\mathbb{B}_{N_{\mathbf{k}}}$，并收敛于 $T_*^{N_{\mathbf{k}}}$。

• 对于足够大的 $N_{\mathbf{k}}$，上述两个假设中的定义域满足

$$\mathcal{M}_{\mathcal{K}}\mathbb{B}_{\text{TDL}}:=\{\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t:t\in\mathbb{B}_{\text{TDL}}\}\subset\mathbb{B}_{N_{\mathbf{k}}}. \tag{40}$$

定理 1 证明了，对于每个固定的 $n$，有限尺寸振幅 $T_n^{N_{\mathbf{k}}}$ 以如下意义收敛于 $t_n$

$$\lim_{N_{\mathbf{k}}\to\infty}\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_n-T_n^{N_{\mathbf{k}}}\|_\infty=0,$$

表明 $\{T_n^{N_{\mathbf{k}}}\}\subset\mathbb{B}_{N_{\mathbf{k}}}$ 收敛于 $\{t_n\}\subset\mathbb{B}_{\text{TDL}}$，其中 $\mathcal{K}\to\Omega^*$。直观而言，该论证表明 $\mathbb{B}_{N_{\mathbf{k}}}$ 与 $\mathcal{M}_{\mathcal{K}}\mathbb{B}_{\text{TDL}}$ 之间存在某种接近性，从而得出这里的假设。

• 注意，引理 6 中的误差估计的前因子 $C$ 取决于振幅 $t_*$。对于整个迭代序列 $\{t_n\}$，我们作出更强的假设：存在一个常数 $C$，使得

$$\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}\mathcal{F}_{\text{TDL}}(t_n)-\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_n)\|_\infty\leqslant CN_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}},\quad\forall n>0. \tag{41}$$

在这些假设下，CCD 能量计算中的有限尺寸误差可估计为

$$\begin{aligned}\left|E_{\text{CCD}}^{\text{TDL}}-E_{\text{CCD}}^{N_{\mathbf{k}}}\right|&=\left|\mathcal{G}_{\text{TDL}}(t_*)-\mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(T_*^{N_{\mathbf{k}}})\right|\\&\leqslant\left|\mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_*)-\mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(T_*^{N_{\mathbf{k}}})\right|+\left|\mathcal{G}_{\text{TDL}}(t_*)-\mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_*)\right|\\&\leqslant C\left\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_*-T_*^{N_{\mathbf{k}}}\right\|_\infty+CN_{\mathbf{k}}^{-1},\end{aligned} \tag{42}$$

其中，最后一个不等式利用了线性算子 $\mathcal{G}_{N_{\mathbf{k}}}$ 的有界性和引理 5。为估计收敛振幅中的有限尺寸误差 $\left\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_*-T_*^{N_{\mathbf{k}}}\right\|_\infty$，我们考虑在第 $n$ 次不动点迭代时进行振幅计算的误差分解公式（13），得到

$$\begin{aligned}\left\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_n-T_n^{N_{\mathbf{k}}}\right\|_\infty&\leqslant\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}\mathcal{F}_{\text{TDL}}(t_{n-1})-\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_{n-1})\|_\infty+\left\|\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(T_{n-1}^{N_{\mathbf{k}}})-\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}(\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_{n-1})\right\|_\infty\\&\leqslant CN_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}+L\left\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_{n-1}-T_{n-1}^{N_{\mathbf{k}}}\right\|_\infty,\end{aligned}$$

其中，第一项的最后一个估计使用了公式（41）中的假设，第二项则使用了 $\mathcal{F}_{N_{\mathbf{k}}}$ 是压缩映射以及 $\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_{n-1} \in \mathbb{B}_{N_{\mathbf{k}}}$ 的假设。由于有限尺寸情形和热力学极限情形中的初始猜测满足 $\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_0 - T_0^{N_{\mathbf{k}}}\|_\infty = 0$，我们可以递归地推导出

$$\left\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_n - T_n^{N_{\mathbf{k}}}\right\|_\infty \leqslant C\frac{1-L^n}{1-L}N_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}},$$

因此

$$\left\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_* - T_*^{N_{\mathbf{k}}}\right\|_\infty = \lim_{n\to\infty}\left\|\mathcal{M}_{\mathcal{K}}t_n - T_n^{N_{\mathbf{k}}}\right\|_\infty \leqslant CN_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{3}}.$$

将此估计代入公式（42），即可完成证明。

## 附录 D 具有代数奇异性的周期函数的求积误差估计

本节包含五个引理，针对表 V.1 所列的五类被积函数，给出梯形求积公式的求积误差估计。所有被积函数要么是光滑的，要么由在单个点具有代数奇异性的一元或多元函数构成。除了求积误差的渐近标度外，我们的有限尺寸误差分析还需要定量描述估计中的前因子与被积函数光滑性之间的关系。

对于在 $V$ 中处处光滑、但在 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ 处具有 $\gamma$ 阶代数奇异性的一元函数 $f(\mathbf{x})$，我们定义一个常数

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^l_{V,\mathbf{x}_0}(f) &= \min\left\{C : |\partial^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})| \leqslant C|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|}, \forall|\boldsymbol{\alpha}| \leqslant l, \forall \mathbf{x} \in V\setminus\{\mathbf{x}_0\}\right\} \\ &= \max_{|\boldsymbol{\alpha}|\leqslant l}\left\|\left(\partial^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})\right)/|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|}\right\|_{L^\infty(V)}. \end{aligned} \tag{43}$$

对于在 $V_X \times V_Y$ 中处处光滑、但在 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ 处具有 $\gamma$阶代数奇异性的多元函数 $f(\mathbf{x}, \mathbf{y})$，我们定义一个常数

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^l_{V_X\times V_Y,(\mathbf{x}_0,\cdot)}(f) &= \min\left\{C : \left|\partial^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{x}}\partial^{\boldsymbol{\beta}}_{\mathbf{y}} f(\mathbf{x},\mathbf{y})\right| \leqslant C|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|}, \forall|\boldsymbol{\alpha}|,|\boldsymbol{\beta}| \leqslant l, \forall \mathbf{x} \in V_X\setminus\{\mathbf{x}_0\}, \mathbf{y}\in V_Y\right\} \\ &= \max_{|\boldsymbol{\alpha}|\leqslant l}\left\|\left(\partial^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{x}}\partial^{\boldsymbol{\beta}}_{\mathbf{y}} f(\mathbf{x},\mathbf{y})\right)/|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|}\right\|_{L^\infty(V\times V)}, \end{aligned} \tag{44}$$

其中，下标“$(\mathbf{x}_0, \cdot)$”中的“$\cdot$”是用于表示光滑变量的占位符。利用这两个量，我们得到以下函数估计式，它们将在本节中广泛使用

$$|\partial^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})| \leqslant \mathcal{H}^l_{V,\mathbf{x}_0}(f)|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|}, \qquad \forall l \geqslant |\boldsymbol{\alpha}|,\ \forall \mathbf{x}\in V\setminus\{\mathbf{x}_0\}, \tag{45}$$

$$\left|\partial^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{x}}\partial^{\boldsymbol{\beta}}_{\mathbf{y}} f(\mathbf{x},\mathbf{y})\right| \leqslant \mathcal{H}^l_{V_X\times V_Y,(\mathbf{x}_0,\cdot)}(f)|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|}, \qquad \forall l \geqslant |\boldsymbol{\alpha}|,|\boldsymbol{\beta}|,\ \forall \mathbf{x}\in V_X\setminus\{\mathbf{x}_0\}, \mathbf{y}\in V_Y. \tag{46}$$

以下引理给出了标准结果：对光滑周期函数应用梯形求积法时，求积误差会超代数地衰减。为完整起见，我们使用泊松求和公式给出证明。

引理 12. 设 $f(\mathbf{x})$ 在 $V = [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^d$ 中光滑且具有周期性。使用 $m^d$ 大小的均匀网格 $\mathcal{X}$ 在 $V$中进行梯形法则求积时，其求积误差超代数地衰减为

$$|\mathcal{E}_V(f,\mathcal{X})| \leqslant C_l m^{-l}, \quad \forall l > 0.$$

证明。将 $f(\mathbf{x})$ 的傅里叶变换记为

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{|V|} \sum_{\mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}^d} \hat{f}(\mathbf{k}) e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad \text{with} \quad \hat{f}(\mathbf{k}) = \int_V f(\mathbf{x}) e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \, \mathrm{d}\mathbf{x}.$$

设 $\mathcal{X}_0$ 是 $V$ 中包含 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 的 $m^d$ 阶均匀网格，并令 $\mathcal{X} = \mathcal{X}_0 + \mathbf{x}_0$。记单位长度为$h = 1/m$。使用这些记号，我们有

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_V(f) &= \hat{f}(\mathbf{0}), \\ \mathcal{Q}_V(f, \mathcal{X}) = \frac{|V|}{m^d} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_0} f(\mathbf{x} + \mathbf{x}_0) &= \sum_{\mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}^d} \hat{f}(\mathbf{k}) e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_0} \frac{1}{m^d} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_0} e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \sum_{\mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}^d} \hat{f}\left(\frac{\mathbf{k}}{h}\right) e^{\mathrm{i}\frac{\mathbf{k}}{h}\cdot\mathbf{x}_0}, \end{aligned}$$

因此，使用 $\mathcal{X}$ 的梯形法则的求积误差可估计为

$$|\mathcal{E}_V(f, \mathcal{X})| \leqslant \sum_{\mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}^d \setminus \{\mathbf{0}\}} \left| \hat{f}\left(\frac{\mathbf{k}}{h}\right) \right|. \tag{47}$$

基于 $f(\mathbf{x})$ 在 $V$ 中的周期性和光滑性，我们可以利用分部积分将傅里叶变换系数估计为

$$\begin{aligned} \left| \hat{f}\left(\frac{\mathbf{k}}{h}\right) \right| &= \left| \int_V \mathrm{d}\mathbf{x} f(\mathbf{x}) e^{-\mathrm{i}\frac{\mathbf{k}}{h}\cdot\mathbf{x}} \right| \\ &= \frac{h^{|\boldsymbol{\alpha}|}}{|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}}} \left| \int_V \mathrm{d}\mathbf{x} \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}} f(\mathbf{x}) e^{-\mathrm{i}\frac{\mathbf{k}}{h}\cdot\mathbf{x}} \right| \\ &\leqslant \frac{h^{|\boldsymbol{\alpha}|}}{|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}}} \int_V \mathrm{d}\mathbf{x} \left| \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}} f(\mathbf{x}) \right| = C_{\boldsymbol{\alpha}} \frac{h^{|\boldsymbol{\alpha}|}}{|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}}}, \end{aligned} \tag{48}$$

对于任意导数阶 $\boldsymbol{\alpha} \geqslant 0$，其中 $|\boldsymbol{\alpha}| = \sum_i \boldsymbol{\alpha}_i$ 且 $|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}} = \prod_i |\mathbf{k}_i|^{\boldsymbol{\alpha}_i}$。将此估计代入公式 (47)，得到

$$|\mathcal{E}_V(f, \mathcal{X})| \leqslant C_{\boldsymbol{\alpha}} h^{|\boldsymbol{\alpha}|} \sum_{\mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}^d \setminus \{\mathbf{0}\}} \frac{1}{|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}}},$$

通过任意选取满足 $|\boldsymbol{\alpha}| = l > d$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$，即可证明该引理。 □

注 13. 如果将 $f(\mathbf{x})$ 替换为 $V \times V_Y$ 中定义的 $f(\mathbf{x}, \mathbf{y})$，该函数对于每个 $\mathbf{y} \in V_Y$ 关于 $\mathbf{x}$ 光滑且具有周期性，并满足 $\sup_{\mathbf{x} \in V,\ \mathbf{y} \in V_Y} |\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y})| < \infty$ 对任意 $\boldsymbol{\alpha} \geqslant 0$，则引理 12 可推广为

$$|\mathcal{E}_V(f(\cdot, \mathbf{y}), \mathcal{X})| \leqslant C_l m^{-l}, \quad \forall l > 0, \forall \mathbf{y} \in V_Y,$$

其中，常数 $C_l$ 与 $\mathbf{y} \in V_Y$ 无关，这是基于式 (48) 中的前因子估计得出的。

引理 14. 设 $f(\mathbf{x})$ 关于 $V = [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^d$ 是周期的，且除 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 处具有 $\gamma \geqslant -d + 1$ 阶奇点外处处光滑。在 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 处，将 $f(\mathbf{x})$ 设为 0。采用包含 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 且网格间距为 $m^d$ 的均匀网格 $\mathcal{X}$ 的梯形法则，其求积误差可估计为

$$|\mathcal{E}_V(f, \mathcal{X})| \leqslant C \mathcal{H}_{V,\mathbf{0}}^{d+\max(1,\gamma)}(f) m^{-(d+\gamma)}.$$

如果 $f(\mathbf{0})$ 在计算中设为 $\mathcal{O}(1)$ 值时，会引入额外的 $\mathcal{O}(m^{-d})$ 求积误差 $r$.

证明。定义一个满足以下条件的截断函数 $\psi \in \mathbb{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)$

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & |\mathbf{x}| \leqslant \frac{1}{2} \\ 0, & |\mathbf{x}| \geqslant 1 \end{cases},$$

并将其缩放形式记为 $\psi_L(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}/L)$，其在 $|\mathbf{x}| \leqslant L$ 中紧支撑。令 $h = 1/m$ 为均匀网格 $\mathcal{X}$的单位长度。利用截断函数，我们将 $f(\mathbf{x})$ 拆分为

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})\psi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) + f(\mathbf{x})(1 - \psi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{x})),$$

其中，第一项在 $V$中紧支撑，第二项在 $V$中光滑，并满足 $\partial V$上的周期边界条件。因此，求积误差可拆分为

$$\mathcal{E}_V(f, \mathcal{X}) = \mathcal{E}_V(f\psi_{\frac{1}{2}}, \mathcal{X}) + \mathcal{E}_V(f(1 - \psi_{\frac{1}{2}}), \mathcal{X}),$$

根据引理 12，第二个误差相对于 $m$ 超代数地衰减。问题归结为估计局部化被积函数 $f\psi_{\frac{1}{2}}$的第一个求积误差。在下面的讨论中，我们滥用记号 $f$来表示局部化函数 $f\psi_{\frac{1}{2}}$，并假设 $f$在$V$中紧支撑，且除 0 点外处处光滑，其阶为 $\gamma$。

由于 $f(\mathbf{0}) = 0$，使用 $\mathcal{X}$对 $f(\mathbf{x})$ 应用梯形法则可得

$$\mathcal{Q}_V(f, \mathcal{X}) = \mathcal{Q}_V(f(1 - \psi_h), \mathcal{X}),$$

因此，其求积误差可分解为

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_V(f, \mathcal{X}) &= \mathcal{I}_V(f\psi_h) + \mathcal{I}_V(f(1 - \psi_h)) - \mathcal{Q}_V(f(1 - \psi_h), \mathcal{X}) \\ &= \mathcal{I}_V(f\psi_h) + \mathcal{E}_V(f(1 - \psi_h), \mathcal{X}). \end{aligned} \tag{49}$$

式 (49) 中的第一部分可估计为

$$|\mathcal{I}_V(f\psi_h)| \leqslant C \int_{|\mathbf{x}| \leqslant h} |f(\mathbf{x})| \, \mathrm{d}\mathbf{x} \leqslant C\mathcal{H}^0_{V,\mathbf{0}}(f) \int_{|\mathbf{x}| \leqslant h} |\mathbf{x}|^\gamma \, \mathrm{d}\mathbf{x} \leqslant C\mathcal{H}^0_{V,\mathbf{0}}(f) h^{d+\gamma}, \tag{50}$$

利用 $f(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 处的代数奇异性刻画（式 (45)），可得。式 (49) 中的第二部分可利用泊松求和公式改写为

$$\mathcal{E}_V\left(f(1 - \psi_h), \mathcal{X}\right) = -\sum_{\mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}^d \setminus \{\mathbf{0}\}} \hat{f}_{\psi,h}\left(\frac{\mathbf{k}}{h}\right), \tag{51}$$

其中 $f_{\psi,\ h} = f(1 - \psi_h)$ 及其傅里叶变换可估计为

$$\begin{aligned} \left|\hat{f}_{\psi,h}\left(\frac{\mathbf{k}}{h}\right)\right| &= \frac{h^{|\boldsymbol{\alpha}|}}{|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}}} \left| \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}\mathbf{x} \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}} f(\mathbf{x})(1 - \psi_h(\mathbf{x})) e^{-\mathrm{i}\frac{\mathbf{k}}{h} \cdot \mathbf{x}} \right| \\ &\leqslant \frac{h^{|\boldsymbol{\alpha}|}}{|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}}} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}\mathbf{x} \left| \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}} f(\mathbf{x})(1 - \psi_h(\mathbf{x})) \right|, \end{aligned}$$

其中导数的阶为 $\boldsymbol{\alpha} \geqslant 0$。最后一个积分中的导数还可以进一步展开为

$$\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}} f(\mathbf{x})(1 - \psi_h(\mathbf{x})) = \sum_{\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{\alpha}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{\alpha}_1} \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}_1}} (1 - \psi_h(\mathbf{x})) \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}_2}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}_2}} f(\mathbf{x}).$$

利用 $1-\psi_h(\mathbf{x})$ 和 $f(\mathbf{x})$ 的局部性，以及不等式 $|\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\beta}} f(\mathbf{x})| \leqslant \mathcal{H}_{V,\mathbf{0}}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f)|\mathbf{x}|^{\gamma-|\boldsymbol{\beta}|}$（其中 $\boldsymbol{\beta} \leqslant \boldsymbol{\alpha}$ 任意），我们可以估计该导数为

$$\left|\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}} f(\mathbf{x})(1-\psi_h(\mathbf{x}))\right| \leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{0}}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f) \begin{cases} 0, & |\mathbf{x}| \leqslant \frac{1}{2}h \\ h^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|}, & \frac{1}{2}h \leqslant |\mathbf{x}| \leqslant h \\ |\mathbf{x}|^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|}, & h \leqslant |\mathbf{x}| \leqslant \frac{1}{2} \\ 0, & |\mathbf{x}| > \frac{1}{2} \end{cases}.$$

利用这一估计，可以对相应的积分作如下界定：

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}\mathbf{x} \left|\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}} f(\mathbf{x})(1-\psi_h(\mathbf{x}))\right| &\leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{0}}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f) \left(\int_{\frac{1}{2}h}^{h} h^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|} r^{d-1}\,\mathrm{d}r + \int_{h}^{\frac{1}{2}} r^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|+d-1}\,\mathrm{d}r\right) \\ &\leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{0}}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f)(h^{\gamma+d-|\boldsymbol{\alpha}|}+1). \end{aligned}$$

将这一估计代入公式（51），得到

$$|\mathcal{E}_V(f(1-\psi_h),\mathcal{X})| \leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{0}}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f) \sum_{\mathbf{k}\in 2\pi\mathbb{Z}^d\setminus\{\mathbf{0}\}} \frac{1}{|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}}} \left(h^{\gamma+d}+h^{|\boldsymbol{\alpha}|}\right).$$

任取满足 $|\boldsymbol{\alpha}| = \max(d+1, d+\gamma)$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$，得到

$$|\mathcal{E}_V(f(1-\psi_h),\mathcal{X})| \leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{0}}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f)h^{\gamma+d},$$

结合公式（49）和公式（50），即可证明该引理。 □

注释15. 若将 $f(\mathbf{x})$ 替换为 $f(\mathbf{x},\mathbf{y})$，其中 $f(\mathbf{x},\mathbf{y})$ 在 $V\times V_Y$ 中定义，且除 $\mathbf{x}=\mathbf{0}$ 处具有 $\gamma$ 阶奇异性外，在 $V\times V_Y$ 中处处光滑，则引理 14 可推广为

$$|\mathcal{E}_V(f(\cdot,\mathbf{y}),\mathcal{X})| \leqslant C\mathcal{H}_{V\times V_Y,(\mathbf{0},\cdot)}^{d+\max(1,\gamma)}(f)m^{-(d+\gamma)}, \quad \forall \mathbf{y}\in V_Y,$$

其中，前因子对所有 $\mathbf{y}\in V_Y$ 均一致适用。利用引理 14 中的前因子估计以及以下事实，可以得到这一推广：

$$\mathcal{H}_{V,\mathbf{0}}^{l}(f(\cdot,\mathbf{y})) \leqslant \mathcal{H}_{V\times V_Y,(\mathbf{0},\cdot)}^{l}(f), \quad \forall l\geqslant 0, \forall \mathbf{y}\in V_Y,$$

基于公式（43）和公式（44）中对这两个量的定义。

引理16. Let $f(\mathbf{x}) = f_1(\mathbf{x})f_2(\mathbf{x})$，其中 $f_1(\mathbf{x})$ 和 $f_2(\mathbf{x})$ 关于 $V=[-\frac{1}{2},\frac{1}{2}]^d$ 周期的，且

- $f_1(\mathbf{x})$ 除 $\mathbf{x}=\mathbf{z}_1=\mathbf{0}$ 处存在 $\gamma\leqslant 0$ 阶奇异性外处处光滑，
- $f_2(\mathbf{x})$ 除 $\mathbf{x}=\mathbf{z}_2\neq\mathbf{0}$ 处存在 0 阶奇异性外处处光滑。

考虑 $m^d$ 阶均匀网格 $\mathcal{X}$ in $V$。假设 $\mathcal{X}$ 满足：$\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2$ 要么位于网格上，要么与任一网格点相距 $\Theta(m^{-1})$，且 $m$ 足够大，使得 $|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2|=\Omega(m^{-1})$。在 $\mathbf{x}=\mathbf{z}_1$ 和 $\mathbf{x}=\mathbf{z}_2$ 处，$f(\mathbf{x})$ 设为 0。使用 $\mathcal{X}$ 的梯形法则求积误差为

$$|\mathcal{E}_V(f,\mathcal{X})| \leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_1}^{d+1}(f_1)\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_2}^{d+1}(f_2)m^{-(d+\gamma)}.$$

如果 $f(\mathbf{z}_1)$ 并将 $f(\mathbf{z}_2)$ 设为任意的 $\mathcal{O}(1)$ 值，这会引入额外的 $\mathcal{O}(m^{-d})$ 求积误差 *r.*

证明。首先，我们可以引入适当的平移 $f(\mathbf{x}) \to f(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)$，将非光滑点 $\mathbf{z}_1$ 和 $\mathbf{z}_2$ 移至 $V$ 中较小立方体 $[-\frac{1}{4},\frac{1}{4}]^d$ 内。假设已对 $f$ 和网格 $\mathcal{X}$ 应用了这种平移；由于函数的周期性，这不会改变积分值。利用截断函数$\psi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{x})$，我们将 $f(\mathbf{x})$ 拆分为

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})\psi_{\frac{1}{2}}^2(\mathbf{x}) + f(\mathbf{x})(1-\psi_{\frac{1}{2}}^2(\mathbf{x})), \tag{52}$$

其中，根据引理 14 的证明中的分析，第二项的求积误差超代数地衰减。问题归结为对局部化被积函数 $f\psi_{\frac{1}{2}}^2$的求积误差进行估计，该函数可分解为 $f\psi_{\frac{1}{2}}^2 = (f_1\psi_{\frac{1}{2}})(f_2\psi_{\frac{1}{2}})$。下文中，我们滥用记号 $f_i$ 表示$f_i\psi_{\frac{1}{2}}$，并用 $f$表示 $f\psi_{\frac{1}{2}}^2$，接着假设 $f_1$和 $f_2$均在 $V$中紧支撑，且除 $\mathbf{z}_1$ 和 $\mathbf{z}_2$ 处外处处光滑，其阶分别为 $\gamma$和 0。记 $h = 1/m$ 为 $\mathcal{X}$的单位长度。其余分析沿用引理 14 的证明。

首先，梯形法则的求积误差可改写为

$$\mathcal{E}_V(f,\mathcal{X}) = \left(\mathcal{I}_V\left(f\psi_{h,1}\right) + \mathcal{I}_V\left(f\psi_{h,2}\right)\right) + \mathcal{E}_V\left(f(1-\psi_{h,1})(1-\psi_{h,2}),\mathcal{X}\right), \tag{53}$$

其中 $\psi_{h,1}(\mathbf{x})$ 和 $\psi_{h,2}(\mathbf{x})$ 是两个以 $\mathbf{z}_1$ 和 $\mathbf{z}_2$, 为中心的缩放和平移后的截断函数，分别地，截断半径 $C_1h$ 为

$$\psi_{h,1}(\mathbf{x}) = \psi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{z}_1}{C_1h}\right), \qquad \psi_{h,2}(\mathbf{x}) = \psi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{z}_2}{C_1h}\right),$$

其中， $C_1$ 是一个常数，使得两个球 $B(\mathbf{z}_1, C_1h)$ 和 $B(\mathbf{z}_2, C_1h)$ 彼此之间不重叠，且与 $\mathcal{X}$中的任何网格点都不重叠，但 $\mathbf{z}_1$ 和 $\mathbf{z}_2$除外。这里我们用 $B(\mathbf{x}\ r)$ 表示以 $\mathbf{x}$ 为中心、半径为 $r$ 的球。根据引理中关于 $\mathcal{X}$的假设，这样的 $C_1$ 是存在的。

公式（53）中的第一部分可直接估计为

$$\begin{aligned}
&\left|\mathcal{I}_V\left(f\psi_{h,1}\right) + \mathcal{I}_V\left(f\psi_{h,2}\right)\right| \\
\leqslant &\int_{B(\mathbf{z}_1,C_1h)} \mathrm{d}\mathbf{x}|f(\mathbf{x})| + \int_{B(\mathbf{z}_2,C_1h)} \mathrm{d}\mathbf{x}|f(\mathbf{x})| \\
\leqslant &C\mathcal{H}^0_{V,\mathbf{z}_1}(f_1)\mathcal{H}^0_{V,\mathbf{z}_2}(f_2)\left(\int_{B(\mathbf{z}_1,C_1h)} \mathrm{d}\mathbf{x}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|^\gamma + \int_{B(\mathbf{z}_2,C_1h)} \mathrm{d}\mathbf{x}h^\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}_2|^0\right) \\
\leqslant &C\mathcal{H}^0_{V,\mathbf{z}_1}(f_1)\mathcal{H}^0_{V,\mathbf{z}_2}(f_2)h^{d+\gamma},
\end{aligned}$$

其中，第二个不等式使用了公式（45）中的两个估计，得到

$$\begin{aligned}
|f_1(\mathbf{x})| &\leqslant \mathcal{H}^0_{V,\mathbf{z}_1}(f_1)|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|^\gamma, \\
|f_2(\mathbf{x})| &\leqslant \mathcal{H}^0_{V,\mathbf{z}_2}(f_2)|\mathbf{x}-\mathbf{z}_2|^0.
\end{aligned}$$

The 公式（53）的第二部分可使用泊松求和公式进行估计，其中任意 $\boldsymbol{\alpha} \geqslant \mathbf{0}$ 均可

$$
\begin{aligned}
&\left|\mathcal{E}_V\left(f(1-\psi_{h,1})(1-\psi_{h,2}), \mathcal{X}\right)\right| \\
\leqslant & \sum_{\mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}^d \setminus\{\mathbf{0}\}}\left|\hat{f}_{\psi,h}\left(\frac{\mathbf{k}}{h}\right)\right| \\
\leqslant & \sum_{\mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}^d \setminus\{\mathbf{0}\}} \frac{h^{|\boldsymbol{\alpha}|}}{|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}}} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}\mathbf{x}\left|\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}}}\left(f(\mathbf{x})(1-\psi_{h,1}(\mathbf{x}))(1-\psi_{h,2}(\mathbf{x}))\right)\right| \\
\leqslant & C \sum_{\mathbf{k} \in 2\pi\mathbb{Z}^d \setminus\{\mathbf{0}\}} \frac{h^{|\boldsymbol{\alpha}|}}{|\mathbf{k}|^{\boldsymbol{\alpha}}} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}\mathbf{x} \sum_{\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2+\boldsymbol{\alpha}_3=\boldsymbol{\alpha}}\left|\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_1}(1-\psi_{h,1}(\mathbf{x}))\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_2}(1-\psi_{h,2}(\mathbf{x}))\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_3} f(\mathbf{x})\right|. \qquad (54)
\end{aligned}
$$

对于每组 $(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_3)$，为估算最后一个积分，我们考虑三种情况:

- $\boldsymbol{\alpha}_1 > 0$. 由于 $1-\psi_{h,1}(\mathbf{x})$ 在 $B(\mathbf{z}_1, \frac{1}{2}C_1 h)$ 内部以及 $B(\mathbf{z}_1, C_1 h)$ 外部为常数，其导数仅在环形区域 $B(\mathbf{z}_1, C_1) \setminus B(\mathbf{z}_1, \frac{1}{2}C_1 h)$ 内非零。此情形下，公式（54）中的导数项可估算为

$$
\left|\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_1}(1-\psi_{h,1})\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_2}(1-\psi_{h,2})\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_3} f\right| \leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_1}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f_1)\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_2}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f_2)\begin{cases}0 & |\mathbf{x}-\mathbf{z}_1| < \frac{1}{2}C_1 h \\ 0 & |\mathbf{x}-\mathbf{z}_1| > C_1 h \\ h^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|} & \text{otherwise}\end{cases}.
$$

  对于 $\mathbf{z}_1$ 周围环形区域内的 $\mathbf{x}$，估算使用了任意 $\boldsymbol{\beta} \geqslant \mathbf{0}$ 所满足的

$$
\begin{aligned}
\left|\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\beta}} f(\mathbf{x})\right| &\leqslant C \sum_{\boldsymbol{\beta}_1+\boldsymbol{\beta}_2=\boldsymbol{\beta}}\left|\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\beta}_1} f_1(\mathbf{x})\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\beta}_2} f_2(\mathbf{x})\right| \\
&\leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_1}^{|\boldsymbol{\beta}|}(f_1)\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_2}^{|\boldsymbol{\beta}|}(f_2) \sum_{\boldsymbol{\beta}_1+\boldsymbol{\beta}_2=\boldsymbol{\beta}}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|^{\gamma-|\boldsymbol{\beta}_1|}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_2|^{-|\boldsymbol{\beta}_2|} \\
&\leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_1}^{|\boldsymbol{\beta}|}(f_1)\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_2}^{|\boldsymbol{\beta}|}(f_2) \sum_{\boldsymbol{\beta}_1+\boldsymbol{\beta}_2=\boldsymbol{\beta}} h^{\gamma-|\boldsymbol{\beta}_1|}h^{-|\boldsymbol{\beta}_2|} \\
&\leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_1}^{|\boldsymbol{\beta}|}(f_1)\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_2}^{|\boldsymbol{\beta}|}(f_2)h^{\gamma-|\boldsymbol{\beta}|},
\end{aligned}
$$

  其中，第三个不等式利用了以下事实：$|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1| = \mathcal{O}(h)$ 且 $|\mathbf{x}-\mathbf{z}_2| = \Omega(h)$。

- $\boldsymbol{\alpha}_2 > 0$. 与第一种情况类似，我们可以得到导数的估算:

$$
\left|\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_1}(1-\psi_{h,1})\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_2}(1-\psi_{h,2})\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_3} f\right| \leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_1}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f_1)\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_2}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f_2)\begin{cases}0 & |\mathbf{x}-\mathbf{z}_2| < \frac{1}{2}C_1 h \\ 0 & |\mathbf{x}-\mathbf{z}_2| > C_1 h \\ h^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|} & \text{otherwise}\end{cases}.
$$

- $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{\alpha}_2 = \mathbf{0}, \boldsymbol{\alpha}_3 = \boldsymbol{\alpha}$。对于 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x})$，我们可以使用第一种情形中的估计，得到

$$
\left|(1-\psi_{h,1})(1-\psi_{h,2})\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}} f\right| \leqslant C\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_1}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f_1)\mathcal{H}_{V,\mathbf{z}_2}^{|\boldsymbol{\alpha}|}(f_2)\begin{cases}0 & |\mathbf{x}-\mathbf{z}_1| < \frac{1}{2}C_1 h \\ 0 & |\mathbf{x}-\mathbf{z}_2| < \frac{1}{2}C_1 h \\ \sum_{\boldsymbol{\beta}_1+\boldsymbol{\beta}_2=\boldsymbol{\alpha}}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|^{\gamma-|\boldsymbol{\beta}_1|}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_2|^{-|\boldsymbol{\beta}_2|} & \text{otherwise with } |\mathbf{x}|<1\end{cases}.
$$

基于对上述三种情形的分析，我们得到该积分的估计为

$$\int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}\mathbf{x}\,|\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_1}(1-\psi_{h,1})\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_2}(1-\psi_{h,2})\partial_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\alpha}_3} f| \leqslant C\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V,\mathbf{z}_1}(f_1)\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V,\mathbf{z}_2}(f_2)\begin{cases} h^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|+d} & \boldsymbol{\alpha}_1>0 \text{ or } \boldsymbol{\alpha}_2>0 \\ 1+h^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|+d} & \boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{\alpha}_2=\mathbf{0}\end{cases}.$$

当 $\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{\alpha}_2=\mathbf{0}$ 时的情形可直接得到估计；当 $\boldsymbol{\beta}_1=\boldsymbol{\alpha}$ 时，估计如下，其中 $\boldsymbol{\beta}_1<\boldsymbol{\alpha}$

$$\begin{aligned}
&\int_{B(\mathbf{0},2)\setminus(B(\mathbf{z}_1,\frac{1}{2}C_1h)\cup B(\mathbf{z}_2,\frac{1}{2}C_1h))} \mathrm{d}\mathbf{x}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|^{\gamma-|\boldsymbol{\beta}_1|}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_2|^{|\boldsymbol{\beta}_1|-|\boldsymbol{\alpha}|} \\
\leqslant&\left(\int_{B(\mathbf{0},2)\setminus B(\mathbf{z}_1,\frac{1}{2}C_1h)} \mathrm{d}\mathbf{x}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_1|^{p\gamma-p|\boldsymbol{\beta}_1|}\right)^{\frac{1}{p}}\left(\int_{B(\mathbf{0},2)\setminus B(\mathbf{z}_2,\frac{1}{2}C_1h)} \mathrm{d}\mathbf{x}|\mathbf{x}-\mathbf{z}_2|^{q|\boldsymbol{\beta}_1|-q|\boldsymbol{\alpha}|}\right)^{\frac{1}{q}} \\
\leqslant& C\left(1+h^{p\gamma-p|\boldsymbol{\beta}_1|+d}\right)^{\frac{1}{p}}\left(1+h^{q|\boldsymbol{\beta}_1|-q|\boldsymbol{\alpha}|+d}\right)^{\frac{1}{q}} \\
\leqslant& C\left(1+h^{\gamma-|\boldsymbol{\beta}_1|+\frac{1}{p}d}+h^{|\boldsymbol{\beta}_1|-|\boldsymbol{\alpha}|+\frac{1}{q}d}+h^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|+d}\right)\leqslant C\left(1+h^{\gamma-|\boldsymbol{\alpha}|+d}\right),
\end{aligned}$$

其中，最后一个估计假设 $|\boldsymbol{\alpha}|\geqslant\gamma+d$，并通过将 H¨older 不等式的指数设为以下数值而得到

$$\begin{cases} p=1,q=\infty & \text{when } d+\gamma-|\boldsymbol{\beta}_1|\leqslant 0 \\ p=\frac{d}{|\boldsymbol{\beta}_1|-\gamma},q=\frac{d}{d+\gamma-|\boldsymbol{\beta}_1|} & \text{when } d+\gamma-|\boldsymbol{\beta}_1|>0\end{cases}.$$

将此估计代入公式（54），并任取满足 $|\boldsymbol{\alpha}|=d+1$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$，可得

$$|\mathcal{E}_V\left(f(1-\psi_{h,1})(1-\psi_{h,2}),\mathcal{X}\right)|\leqslant C\mathcal{H}^{d+1}_{V,\mathbf{z}_1}(f_1)\mathcal{H}^{d+1}_{V,\mathbf{z}_2}(f_2)h^{d+\gamma},$$

结合公式（53），即可证明该引理。 □

注释17. 若将 $f_i(\mathbf{x})$ 替换为 $i=1$，并将 2 替换为 $f_i(\mathbf{x},\mathbf{y})$，其中 $V\times V_Y$ 定义的函数在 $V\times V_Y$ 中处处光滑，除 $\mathbf{x}=\mathbf{z}_i$ 处外，其阶分别为 $\gamma$ 和 0，则引理16可推广为

$$|\mathcal{E}_V(f_1(\cdot,\mathbf{y})f_2(\cdot,\mathbf{y}),\mathcal{X})|\leqslant C\mathcal{H}^{d+1}_{V\times V_Y,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{d+1}_{V\times V_Y,(\mathbf{0},\cdot)}(f_2)m^{-(d+\gamma)},\quad\forall\mathbf{y}\in V_Y,$$

其中，前因子对所有 $\mathbf{y}\in V_Y$ 均一致适用。利用引理 14 中的前因子刻画以及注释15中的类似讨论，即可得到这一推广。

引理18。设 $f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)=f_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)f_2(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$，其中 $f_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 和 $f_2(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 关于 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2\in V=[-\frac{1}{2},\frac{1}{2}]^d$ 周期，且

- $f_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 除 $\mathbf{x}_1=\mathbf{0}$ 处有 $\gamma_1$ 阶奇点外处处光滑，
- $f_2(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 除 $\mathbf{x}_2=\mathbf{0}$ 处有 $\gamma_2$ 阶奇点外处处光滑。

考虑 $m^d$ 阶均匀网格 $\mathcal{X}$，它位于包含 $\mathbf{x}=\mathbf{0}$ 的 $V$ 中。在 $\mathbf{x}_1=\mathbf{0}$ 或 $\mathbf{x}_2=\mathbf{0}$ 处，$f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 设为零。使用 $\mathcal{X}\times\mathcal{X}$ 对 $f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 应用梯形法则，求积误差为

$$|\mathcal{E}_{V\times V}(f,\mathcal{X}\times\mathcal{X})|\leqslant C\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)m^{-(d+\min_i\gamma_i)},$$

如果 $f(\mathbf{x}_1,\mathbf{0})$ 并将 $f(\mathbf{0},\mathbf{x}_2)$ 设为任意的 $\mathcal{O}(1)$ 值，这会引入额外的 $\mathcal{O}(m^{-d})$ 求积误 *or.*

证明。 $f$ 的求积误差可分为两部分

$$\mathcal{E}_{V\times V}(f,\mathcal{X}\times\mathcal{X})=\mathcal{E}_V\left(\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f(\cdot,\mathbf{x}_2),\mathcal{X}\right)+\frac{|V|}{m^d}\sum_{\mathbf{x}_1\in\mathcal{X}}\mathcal{E}_V\left(f(\mathbf{x}_1,\cdot),\mathcal{X}\right). \tag{55}$$

对于第一个求积误差， $\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 作为 $\mathbf{x}_1$ 的函数，相对于 $V$ 是周期的。利用莱布尼茨积分法则，可以证明被积函数在 $V$ 中处处光滑，唯独在 $\mathbf{x}_1=\mathbf{0}$ 处除外，且其导数可估计为

$$\begin{aligned}\left|\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial\mathbf{x}_1^{\boldsymbol{\alpha}}}\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\right|&=\left|\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial\mathbf{x}_1^{\boldsymbol{\alpha}}}f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\right|\\&\leqslant C\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2\sum_{\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}}\left|\partial_{\mathbf{x}_1}^{\boldsymbol{\alpha}_1}f_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\right|\left|\partial_{\mathbf{x}_1}^{\boldsymbol{\alpha}_2}f_2(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\right|\\&\leqslant C\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2\sum_{\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}}\left(\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)|\mathbf{x}_1|^{\gamma_1-|\boldsymbol{\alpha}_1|}\right)\left(\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)|\mathbf{x}_2|^{\gamma_2}\right)\\&\leqslant C\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)|\mathbf{x}_1|^{\gamma_1-|\boldsymbol{\alpha}|},\end{aligned}$$

其中第三个不等式使用了公式（44）中针对具有代数奇异性的多元函数的估计。该导数估计表明， $\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 在 $V$ 中处处光滑，唯独在 $\mathbf{x}_1=\mathbf{0}$ 处除外，其阶为 $\gamma_1$，且其代数奇异性刻画满足

$$\mathcal{H}^l_{V,\mathbf{0}}\left(\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f(\cdot,\mathbf{x}_2)\right)\leqslant C\mathcal{H}^l_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^l_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2),\quad\forall l\geqslant 0.$$

由引理 14 可得

$$\left|\mathcal{E}_V\left(\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f(\cdot,\mathbf{x}_2),\mathcal{X}\right)\right|\leqslant C\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1)}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1)}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)m^{-(d+\gamma_1)}. \tag{56}$$

对于第二个求积误差，对每个 $\mathbf{x}_1\in\mathcal{X}$， $f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 作为 $\mathbf{x}_2$ 的函数是周期的，且除 $\mathbf{x}_2=\mathbf{0}$ 外处处光滑，其阶为 $\gamma_2$。固定 $\mathbf{x}_1$，后，由引理 14 可得

$$\left|\mathcal{E}_V\left(f(\mathbf{x}_1,\cdot),\mathcal{X}\right)\right|\leqslant C\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_2)}_{V,\mathbf{0}}(f(\mathbf{x}_1,\cdot))m^{-(d+\gamma_2)},$$

其中，刻画的前因子含有 $l=d+\max(1,\gamma_2)$，且对任意 $\mathbf{x}_1\in V$，根据公式（43）的定义，还可进一步估计为

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^l_{V,\mathbf{0}}(f(\mathbf{x}_1,\cdot))&=\max_{|\boldsymbol{\alpha}|\leqslant l}\left\|\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{x}_2}f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)}{|\mathbf{x}_2|^{\gamma_2-|\boldsymbol{\alpha}|}}\right\|_{L^\infty(V)}\\&\leqslant C\max_{|\boldsymbol{\alpha}|\leqslant l}\sum_{\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}}\left\|\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}_{\mathbf{x}_2}f_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}_2}_{\mathbf{x}_2}f_2(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)}{|\mathbf{x}_2|^{\gamma_2-|\boldsymbol{\alpha}_2|}}|\mathbf{x}_2|^{|\boldsymbol{\alpha}_1|}\right\|_{L^\infty(V)}\\&\leqslant C\max_{|\boldsymbol{\alpha}|\leqslant l}\sum_{\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}}\left(\mathcal{H}^l_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)|\mathbf{x}_1|^{\gamma_1}\right)\left(\mathcal{H}^l_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)\right)\left\||\mathbf{x}_2|^{|\boldsymbol{\alpha}_1|}\right\|_{L^\infty(V)}\\&\leqslant C\mathcal{H}^l_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^l_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)|\mathbf{x}_1|^{\gamma_1},\end{aligned} \tag{57}$$

其中，第三个不等式使用了公式（44）中的估计。

将上述公式（56）和公式（57）中的两个估计代入公式（55），可得

$$|\mathcal{E}_{V\times V}(f,\mathcal{X}\times\mathcal{X})| \leqslant C\mathcal{H}^{l_*}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{l_*}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)\left(m^{-(d+\gamma_1)}+\frac{|V|}{m^d}\sum_{\mathbf{x}_1\in\mathcal{X}}|\mathbf{x}_1|^{\gamma_1}m^{-(d+\gamma_2)}\right)$$
$$\leqslant C\mathcal{H}^{l_*}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{l_*}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)m^{-(d+\min_i\gamma_i)},$$

其中 $l_*=d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)$。证明至此完成。 □

注19. 如果我们将 $f_i(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)$ 替换为关于 $\mathrm{y}\in V_Y$ 光滑且周期的 $f_i(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2,\mathrm{y})$，则引理18可推广为

$$|\mathcal{E}_{V\times V}(f(\cdot,\cdot,\mathbf{y}),\mathcal{X}\times\mathcal{X})| \leqslant C\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)}_{V\times V\times V_Y,(\mathbf{0},\cdot,\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)}_{V\times V\times V_Y,(\cdot,\mathbf{0}),\cdot}(f_2)m^{-(d+\min_i\gamma_i)},\ \forall\mathbf{y}\in V_Y,$$

其中，前因子对所有 $\mathrm{y}\in V_Y$ 一致适用。

引理 20. 设 $f(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)=f_1(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)f_2(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)f_3(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2-\mathrm{x}_1)$ 满足

- $f_1(\mathrm{x}_1,\ \mathrm{x}_2)$ 和 $f_2(\mathrm{x}_1,\ \mathrm{x}_2)$ 与引理18中的相同，
- $f_3(\mathrm{x}_1$ ，$\mathrm{z})$ 关于 $\mathrm{x}_1,\mathrm{z}\in V$ 是周期的，且除 $\mathrm{z}=\mathbf{0}$ 处具有阶奇异性外处处光滑 0.

考虑在 $V$ 中的均匀网格 $\mathcal{X}$，其大小为 $m^d$，并包含 $\mathrm{x}=\mathbf{0}$。在 $\mathrm{x}_1=\mathbf{0}$ 或 $\mathrm{x}_2=\mathbf{0}$ 处，将 $f(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)$ 设为 0。对 $f(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)$ 使用以 $\mathcal{X}\times\mathcal{X}$ 为 $f$ 的梯形法则，其求积误差为

$$|\mathcal{E}_{V\times V}(f,\mathcal{X}\times\mathcal{X})| \leqslant C\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_3)m^{-(d+\min_i\gamma_i)}.$$

如果将 $f(\mathrm{x}_1,\mathbf{0})$ 和 $f(\mathbf{0},\mathrm{x}_2)$ 设为任意 $\mathcal{O}(1)$ 值，则会引入额外的 $\mathcal{O}(m^{-d})$ 求积误差。

证明。对于这个新函数，我们仍将求积误差分成以下两部分：

$$\mathcal{E}_{V\times V}(f,\mathcal{X}\times\mathcal{X})=\mathcal{E}_V\left(\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f(\cdot,\mathbf{x}_2),\mathcal{X}\right)+\frac{|V|}{m^d}\sum_{\mathbf{x}_1\in\mathcal{X}}\mathcal{E}_V\left(f(\mathbf{x}_1,\cdot),\mathcal{X}\right). \tag{58}$$

在求积误差的第一部分中，$\int_V \mathrm{d}\mathrm{x}_2 f(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)$ 作为 $\mathrm{x}_1$ 的函数关于 $V$ 是周期的，下面我们首先证明它除 $\mathrm{x}_1=\mathbf{0}$ 处具有 $\gamma_1$阶奇异性外处处光滑。

为了利用引理 11 中现有的非光滑性分析，我们定义一个辅助函数

$$F(\mathbf{x}_1,\mathbf{y})=\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f_1(\mathbf{y},\mathbf{x}_2)f_2(\mathbf{y},\mathbf{x}_2)f_3(\mathbf{y},\mathbf{x}_2-\mathbf{x}_1),$$

其满足 $\int_V \mathrm{d}\mathrm{x}_2 f(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)=F(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_1)$。首先固定 $\mathrm{y}$，对于 $F(\mathrm{x}_1,\mathrm{y})$ 而言，被积函数作为 $\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2$ 的函数满足引理 11 中的条件，因此 $F(\mathrm{x}_1,\mathrm{y})$ 关于 $\mathrm{x}_1\in V$ 处处光滑，唯独在 $\mathrm{x}_1=\mathbf{0}$ 处的阶为 0。接下来，固定 $\mathrm{x}_1$ 并考虑一点 $\mathrm{y}_0\neq\mathbf{0}\in V$。可以验证，存在一个包含 $\mathrm{y}_0$ 的开域，使得对于该定义域中的任意 $\mathrm{y}$，被积函数关于 $\mathrm{x}_2$ 光滑，唯独在 $\mathrm{x}_2=\mathbf{0}$ 和 $\mathrm{x}_2=\mathrm{x}_1$，处例外，并且绝对值被积函数由 $C|\mathrm{x}_2|^{\gamma_2}$ 控制（这是由 $f_1$、$f_3$ 的有界性以及 $f_2$ 的代数奇异性得出的），其在 $V$ 上可积。这满足 $\mathrm{y}_0$ 附近应用莱布尼茨积分法则的条件，因此 $F(\mathrm{x}_1,\mathrm{y})$ 关于 $\mathrm{y}\in V$ 光滑，唯独在 $\mathrm{y}=\mathbf{0}$ 处例外。这两方面的讨论表明，$F(\mathrm{x}_1,\mathrm{y})$ 在所有满足 $\mathrm{x}_1\neq\mathbf{0}$、$\mathrm{y}\neq\mathbf{0}$ 的点处均光滑。

此外， $F(\mathbf{x}_1,\mathbf{y})$ 关于 $\mathbf{y}$ 在 $V\setminus\{\mathbf{0}\}$ 上的任意偏导数都可以估计为

$$\begin{aligned}
\left|\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}}F(\mathbf{x}_1,\mathbf{y})\right| &\leqslant C\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 \sum_{\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2+\boldsymbol{\alpha}_3=\boldsymbol{\alpha}} \left|\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}_1}f_1(\mathbf{y},\mathbf{x}_2)\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}_2}f_2(\mathbf{y},\mathbf{x}_2)\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}_3}f_3(\mathbf{y},\mathbf{x}_2-\mathbf{x}_1)\right| \\
&\leqslant C\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 \sum_{\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2+\boldsymbol{\alpha}_3=\boldsymbol{\alpha}} \mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)|\mathbf{y}|^{\gamma_1-|\boldsymbol{\alpha}_1|}\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)|\mathbf{x}_2|^{\gamma_2}\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_3) \\
&\leqslant C\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)\mathcal{H}^{|\boldsymbol{\alpha}|}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_3)|\mathbf{y}|^{\gamma_1-|\boldsymbol{\beta}|} \\
&= CC_{f_1,f_2,f_3,|\boldsymbol{\alpha}|}|\mathbf{y}|^{\gamma_1-|\boldsymbol{\beta}|},
\end{aligned}$$

其中 $C_{f_1,\ f_2,\ f_3,\ |\boldsymbol{\alpha}|}$ 表示三个代数奇点前因子的乘积，为简洁起见 y.

在上述估计中以 $\mathbf{x}_1$ 替换 $\mathbf{y}$，可得 $F(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_1) = \int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 除了在 $\mathbf{x}_1=\mathbf{0}$ 处具有 $\gamma_1$ 阶奇异性外，处处光滑。由引理 14 可得

$$\left|\mathcal{E}_V\left(\int_V \mathrm{d}\mathbf{x}_2 f(\cdot,\mathbf{x}_2),\mathcal{X}\right)\right| \leqslant CC_{f_1,f_2,f_3,l_1}m^{-(d+\gamma_1)}, \quad \text{with } l_1 = d+\max(1,\gamma_1). \tag{59}$$

对于求积误差的第二部分，对每个 $\mathbf{x}_1\in\mathcal{X}$， $f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 作为 $\mathbf{x}_2$ 的函数，除在 $\mathbf{x}_2=\mathbf{0}$ 和 $\mathbf{x}_2=\mathbf{x}_1$ 处分别具有 $\gamma_2$ 阶和 0 阶奇异性外，处处周期且光滑。应用引理16和注释17，并作分解 $f=(f_1f_2)(f_3)$，可得

$$\begin{aligned}
|\mathcal{E}_V(f(\mathbf{x}_1,\cdot),\mathcal{X})| &\leqslant C\mathcal{H}^{l_2}_{V,\mathbf{0}}((f_1f_2)(\mathbf{x}_1,\cdot))\mathcal{H}^{l_2}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_3)m^{-(d+\gamma_2)} \\
&\leqslant C\mathcal{H}^{l_2}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{l_2}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2)|\mathbf{x}_1|^{\gamma_1}\mathcal{H}^{l_2}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_3)m^{-(d+\gamma_2)} \\
&\leqslant CC_{f_1,f_2,f_3,l_2}|\mathbf{x}_1|^{\gamma_1}m^{-(d+\gamma_2)},
\end{aligned} \tag{60}$$

其中 $l_2 = d+\max(1,\gamma_2)$，第二个不等式推导如下

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}^{l_2}_{V,\mathbf{0}}((f_1f_2)(\mathbf{x}_1,\cdot)) &= \max_{|\boldsymbol{\alpha}|\leqslant l_2}\left\|\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{x}_2}(f_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)f_2(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2))}{|\mathbf{x}_2|^{\gamma_2-|\boldsymbol{\alpha}|}}\right\|_{L^\infty(V)} \\
&\leqslant C\max_{|\boldsymbol{\alpha}|\leqslant l_2}\sum_{\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}}\left\|\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}_{\mathbf{x}_2}f_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}_2}_{\mathbf{x}_2}f_2(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)}{|\mathbf{x}_2|^{\gamma_2-|\boldsymbol{\alpha}_2|}}|\mathbf{x}_2|^{|\boldsymbol{\alpha}_1|}\right\|_{L^\infty(V)} \\
&\leqslant C\left(\mathcal{H}^{l_2}_{V\times V,(\mathbf{0},\cdot)}(f_1)|\mathbf{x}_1|^{\gamma_1}\right)\mathcal{H}^{l_2}_{V\times V,(\cdot,\mathbf{0})}(f_2).
\end{aligned}$$

将式 (59) 和式 (60) 的两个估计代入公式（55），可得

$$\begin{aligned}
|\mathcal{E}_{V\times V}(f,\mathcal{X}\times\mathcal{X})| &\leqslant CC_{f_1,f_2,f_3,l_*}\left(m^{-(d+\gamma_1)}+\frac{|V|}{m^d}\sum_{\mathbf{x}_1\in\mathcal{X}}|\mathbf{x}_1|^{\gamma_1}m^{-(d+\gamma_2)}\right) \\
&\leqslant CC_{f_1,f_2,f_3,l_*}m^{-(d+\min_i\gamma_i)}
\end{aligned}$$

其中 $l_* = d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)$。至此证明完毕。 □

备注 21. 若将 $f_i(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ 替换为关于 $\mathbf{y}\in V_Y$ 光滑且周期的 $f_i(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\mathbf{y})$，则引理 20 可推广为

$$|\mathcal{E}_{V\times V}(f(\cdot,\cdot,\mathbf{y}),\mathcal{X}\times\mathcal{X})| \leqslant CC_{f_1,f_2,f_3}m^{-(d+\min_i\gamma_i)},\ \forall\mathbf{y}\in V_Y,$$

其中，前因子 $C_{f_1,f_2,f_3} = \mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2}_{V\times V\times V_Y\ \ \mathbf{0}\ \cdot),(,,\cdot)}(f_1)\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)}_{V\times V\times V_Y,(\cdot,\mathbf{0},\cdot)}(f_2)\mathcal{H}^{d+\max(1,\gamma_1,\gamma_2)}_{V\times V\times V_Y,(\cdot,\mathbf{0},\cdot)}(f_3)$ 对所有 $\mathbf{y}\in V_Y$ 都一致适用。

附录 E 引理 11 的证明：积分形式的函数的奇异性结构

在此证明中，我们假设 $\gamma_2 = \min_i \gamma_i \leqslant \gamma_1$。否则，如果 $\gamma_2 > \gamma_1$，目标函数可以重新表述为

$$F(\mathbf{y},\mathbf{z}) = \int_{V-\mathbf{y}} \mathrm{d}\mathbf{x} f(\mathbf{x}+\mathbf{y},\mathbf{x},\mathbf{z}) = \int_V \mathrm{d}\mathbf{x} f(\mathbf{x}+\mathbf{y},\mathbf{x},\mathbf{z}),$$

利用变量替换 $\mathbf{x} \to \mathbf{x}+\mathbf{y}$ 以及被积函数关于 $\mathbf{x} \in V$ 的周期性。经过此改写，$\tilde{}$以下证明可应用于 $f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\mathbf{z}) = f(\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_1,\mathbf{z})$，其中 $F(\mathbf{y},\mathbf{z}) = \int_V \mathrm{d}\mathbf{x} f(\mathbf{x},\mathbf{x}+\mathbf{y},\mathbf{z})$，$\tilde{}$而 $f$ 关于第二个变量的阶为 $\gamma_1$，且这是最小阶。

首先，我们研究 $F(\mathbf{y},\mathbf{z})$ 关于 $\mathbf{y} \in V$ 的光滑性，同时固定 $\mathbf{z}$。为简洁起见，当假设 $\mathbf{z}$ 是 $V_Z$ 中的一个不动点时，我们分别将 $F(\mathbf{y},\mathbf{z})$ 和 $f(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\mathbf{z})$ 记为 $F_{\mathbf{z}}(\mathbf{y})$ 和 $f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$。考虑 $V$ 中任意一个半径为 $\sigma$ 且不包含 0 的开球域 $B_\sigma$。对于任意 $\mathbf{y} \in B_\sigma$，我们可将 $F_{\mathbf{z}}(\mathbf{y})$ 分为两部分：

$$F_{\mathbf{z}}(\mathbf{y}) = \int_{V\setminus B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}) + \int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{y} \in B_\sigma. \tag{61}$$

对于第一项，其被积函数 $f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}) \in (V\setminus(B_\sigma \cup \{\mathbf{0}\})) \times B_\sigma$ 处光滑，并且根据公式（32）中的非光滑性刻画，其关于 $\mathbf{y} \in B_\sigma$ 的偏导数在 $\mathbf{x} \in V \setminus B_\sigma$ 上可积。因此，我们可以利用莱布尼茨积分法则证明，第一项在 $\mathbf{y} \in B_\sigma$ 处光滑，且

$$\frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{y}^{\boldsymbol{\alpha}}} \int_{V\setminus B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \int_{V\setminus B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} \frac{\partial^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial \mathbf{y}^{\boldsymbol{\alpha}}} f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{y} \in B_\sigma.$$

对于第二项，给定任意 $\mathbf{y} \in B_\sigma$，我们向 $\mathbf{y}$ 引入一个小扰动 $\delta\mathbf{y}$，使得 $\mathbf{y}+\delta\mathbf{y} \in B_\sigma$ 且 $B_\sigma + \delta\mathbf{y}$ 不包含 0，并考虑第二项分别在 $\mathbf{y}+\delta\mathbf{y}$ 和 $\mathbf{y}$ 处取值之差，写为

$$\begin{aligned}
&\int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}-\delta\mathbf{y}) - \int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}) \\
=&\int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x}\Big(f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x}-\delta\mathbf{y},\mathbf{x}-\mathbf{y}-\delta\mathbf{y}) - f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}) + f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}-\delta\mathbf{y}) - f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x}-\delta\mathbf{y},\mathbf{x}-\mathbf{y}-\delta\mathbf{y})\Big) \\
=&\left(\int_{B_\sigma-\delta\mathbf{y}} \mathrm{d}\mathbf{x} - \int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x}\right) f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}) + \int_{B_\sigma-\delta\mathbf{y}} \mathrm{d}\mathbf{x}\left(f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x}+\delta\mathbf{y},\mathbf{x}-\mathbf{y}) - f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y})\right) \\
=&\int_{\partial B_\sigma} \mathrm{d}S f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y})(-\delta\mathbf{y})\cdot\mathbf{n}(\mathbf{x}) + \mathcal{O}(|\delta\mathbf{y}|^2) + \int_{B_\sigma-\delta\mathbf{y}} \mathrm{d}\mathbf{x}\delta\mathbf{y}\cdot\nabla_1 f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}) + \mathcal{O}(|\delta\mathbf{y}|^2) \\
=&\delta\mathbf{y}\cdot\left(-\int_{\partial B_\sigma} \mathrm{d}S f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y})\mathbf{n}(\mathbf{x}) + \int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x}\nabla_1 f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y})\right) + \mathcal{O}(|\delta\mathbf{y}|^2),
\end{aligned}$$

其中，$\nabla_1 f_{\mathbf{z}}(\cdot,\cdot)$ 表示 $f$ 关于其第一变量的梯度，后续使用的记号 $\partial_1^{\boldsymbol{\alpha}} f(\cdot,\cdot)$ 亦同。该计算表明，公式（61）中的第二项在任意 $\mathbf{y} \in B_\sigma$ 处连续，直至一阶导数，其梯度等于上面括号中的项。

将上述对式（61）中两项的分析结合起来，我们得到

$$\nabla F_{\mathbf{z}}(\mathbf{y}) = \int_{V\setminus B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x}\nabla_{\mathbf{y}} f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}) - \int_{\partial B_\sigma} \mathrm{d}S f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y})\mathbf{n}(\mathbf{x}) + \int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x}\nabla_1 f_{\mathbf{z}}(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y}), \quad \mathbf{y} \in B_\sigma. \tag{62}$$

值得注意的是，上述光滑性分析以及式（62）中的梯度计算适用于任何不包含 0 的开域 $B_\sigma \subset V$。因此，上述分析表明， $F_{\mathbf{z}}(\mathrm{y})$ 在任意 $\mathrm{y} \in V \setminus \{\mathbf{0}\}$ 处都具有一阶导数连续性。

在公式（62）中，前两项的被积函数在任意 $\mathrm{y} \in B_\sigma$ 处（当 $\mathrm{x} \notin B_\sigma$时）都是光滑的。因此，根据莱布尼茨积分法则，这两个积分关于 $\mathrm{y} \in B_\sigma$ 是光滑的。对于第三项， $\nabla_1 f_{\mathbf{z}}(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)$中的每个元素都具有与公式（32）中所述的 $f_{\mathbf{z}}(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2)$相似的非光滑行为，唯一的区别是将$\gamma_1$ 改为 $\gamma_1 - 1$。基于这种相似性，我们可以对上文中的 $\int_V \mathrm{d}\mathrm{x} f_{\mathbf{z}}(\mathrm{x}, \mathrm{x} - \mathrm{y})$采用相同的分析方法，从而证明第三项在任意 $\mathrm{y} \in V \setminus \{\mathbf{0}\}$处连续，且其一阶导数也连续。递归地应用这一分析，我们便可证明 $F_{\mathbf{z}}(\mathrm{y})$在 $B_\sigma$ 中光滑，因此在 $V \setminus \{\mathbf{0}\}$中也光滑。

现在将 $\mathrm{z}$ 考虑在内，上述分析表明，对于任意固定的 $\mathrm{z} \in V_Z$， $F(\mathrm{y}, \mathrm{z})$关于 $\mathrm{y} \in V \setminus \{\mathbf{0}\}$ 是光滑的。另一方面，对于任意固定的 $\mathrm{y}$，根据公式（32）中的假设， $f(\mathrm{x}, \mathrm{x} - \mathrm{y}, \mathrm{z})$关于 $\mathrm{z} \in V_Z$是光滑的；关于 $\mathrm{x}$，它在 $\mathrm{x} = \mathbf{0}$ 和 $\mathrm{x} = \mathrm{y}$ 处有两个非光滑点，并且其关于 $\mathrm{z}$ 的偏导数在 $\mathrm{x} \in V$上可积。这满足莱布尼茨积分法则的条件，因此对于任意固定的 $\mathrm{y}$， $F(\mathrm{y}, \mathrm{z})$关于 $\mathrm{z} \in V_Z$ 是光滑的。基于这两种偏光滑性， $F(\mathrm{y}, \mathrm{z})$在 $V \times V_Z$ 中的所有位置都光滑，唯独在 $\mathrm{y} = \mathbf{0}$处除外。

最后，我们通过证明存在常数$\{C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}\}$，刻画 $F(\mathrm{y}, \mathrm{z})$在 $\mathrm{y} = \mathbf{0}$ 处的代数奇异性，使得

$$\left|\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}} \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}} F(\mathbf{y}, \mathbf{z})\right| \leqslant C_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} |\mathbf{y}|^{\gamma_2 - |\boldsymbol{\alpha}|}, \qquad \forall \mathbf{y} \in V \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{z} \in V_Z, \forall \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \geqslant \mathbf{0}. \tag{63}$$

任取 $\mathrm{y} \in V \setminus \{\mathbf{0}\}$，并选取以 $\mathrm{y}$ 为中心、半径为 $\sigma = |\mathrm{y}|/2$的球域 $B_\sigma$。对变量 $\mathrm{z}$ 使用莱布尼茨积分法则，可将公式（62）推广为关于 $\mathrm{y}$ 的 $\partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}} F(\mathrm{y}, \mathrm{z})$的一阶偏导数：

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}} \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}} F(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = & \int_{V \setminus B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} \partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}} \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}} f(\mathbf{x}, \mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{z}) - \int_{\partial B_\sigma} \mathrm{d}S \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}} f(\mathbf{x}, \mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{z})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})) \\ & + \int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} \partial_1^{\boldsymbol{\alpha}} \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}} f(\mathbf{x}, \mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{z}), \qquad \forall \mathbf{y} \in B_\sigma, \mathbf{z} \in V_Z, \forall |\boldsymbol{\alpha}| = 1, \boldsymbol{\beta} \geqslant \mathbf{0}. \end{aligned} \tag{64}$$

根据公式（32）中的假设，可以分别估计这三项：

$$\begin{aligned} \left| \int_{V \setminus B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} \partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}} \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}} f(\mathbf{x}, \mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{z}) \right| &\leqslant C \int_{V \setminus B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} |\mathbf{x}|^{\gamma_1} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{\gamma_2 - 1} \\ &\leqslant C \int_{V \setminus B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} |\mathbf{x}|^{\gamma_1} |\sigma|^{\gamma_2 - 1} \leqslant C |\mathbf{y}|^{\gamma_2 - 1}, \\ \left| \int_{\partial B_\sigma} \mathrm{d}S \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}} f(\mathbf{x}, \mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{z})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})) \right| &\leqslant C \int_{\partial B_\sigma} \mathrm{d}S |\mathbf{x}|^{\gamma_1} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{\gamma_2} \\ &\leqslant C |\mathbf{y}|^{\gamma_1} |\partial B_\sigma| \sigma^{\gamma_2} \leqslant C |\mathbf{y}|^{\gamma_1 + \gamma_2 + d - 1}, \\ \left| \int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} \partial_1^{\boldsymbol{\alpha}} \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}} f(\mathbf{x}, \mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{z}) \right| &\leqslant C \int_{B_\sigma} \mathrm{d}\mathbf{x} |\mathbf{x}|^{\gamma_1 - 1} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{\gamma_2} \\ &\leqslant C |\sigma|^{\gamma_1 - 1} \int_{B_\sigma} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{\gamma_2} \leqslant C |\mathbf{y}|^{\gamma_1 + \gamma_2 + d - 1}, \end{aligned}$$

其中所有常数 $C$' 都取决于 $\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{\beta}$ 以及公式（32）中的相应前因子。利用假设$\gamma_1 \geqslant -d + 1$，这些估计共同表明，公式（63）中对$F(\mathrm{y}, \mathrm{z})$ 的代数奇异性刻画对所有 $|\boldsymbol{\alpha}| = 1$ 均成立。

接下来我们证明式（63）对所有 $|\boldsymbol{\alpha}|=2$ 均成立。对于任意 $|\boldsymbol{\alpha}|=2$，将 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2$ 分解为 $|\boldsymbol{\alpha}_1|=|\boldsymbol{\alpha}_2|=1$，并相应地将 $\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}}\partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}F(\mathrm{y},\mathrm{z})$ 分解为 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}{}_{\mathbf{y}}\ \left(\partial^{\boldsymbol{\alpha}_2}{}_{\mathbf{y}}\ \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}F(\mathrm{y},\mathrm{z})\right)$。注意到，对于任意 $\mathrm{y}\neq\mathbf{0}$，$\partial^{\boldsymbol{\alpha}_2}{}_{\mathbf{y}}\ \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}F(\mathrm{y},\mathrm{z})$ 均可展开为式（64）中的三项，我们考虑作用于这三项各自的外部偏导数 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}{}_{\mathbf{y}}$。式（64）前两项上的偏导数 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}{}_{\mathbf{y}}$ 可直接估计为

$$\begin{aligned}\left|\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}_1}\int_{V\setminus B_\sigma}\mathrm{d}\mathbf{x}\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}_2}\partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}f(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y},\mathbf{z})\right| &= \left|\int_{V\setminus B_\sigma}\mathrm{d}\mathbf{x}\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2}\partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}f(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y},\mathbf{z})\right| \\ &\leqslant C\int_{V\setminus B_\sigma}\mathrm{d}\mathbf{x}|\mathbf{x}|^{\gamma_1}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{\gamma_2-2}\leqslant C|\mathbf{y}|^{\gamma_2-2},\\ \left|\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}_1}\int_{\partial B_\sigma}\mathrm{d}S\partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}f(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y},\mathbf{z})(\boldsymbol{\alpha}_2\cdot\mathbf{n}(\mathbf{x}))\right| &= \left|\int_{\partial B_\sigma}\mathrm{d}S\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}_1}\partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}f(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y},\mathbf{z})(\boldsymbol{\alpha}_2\cdot\mathbf{n}(\mathbf{x}))\right| \\ &\leqslant C\int_{\partial B_\sigma}\mathrm{d}S|\mathbf{x}|^{\gamma_1}|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{\gamma_2-|\boldsymbol{\alpha}_1|}\leqslant C|\mathbf{y}|^{\gamma_1+\gamma_2+d-2}.\end{aligned}$$

对于公式（64）中第三项的偏导数 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}{}_{\mathbf{y}}$，注意到 $\partial_1^{\boldsymbol{\alpha}_2}f(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2,\mathrm{z})$ 与公式（32）中描述的 $f(\mathrm{x}_1,\mathrm{x}_2,\mathrm{z})$ 具有类似的非光滑行为，只是将 $\gamma_1$ 替换为 $\gamma_1-1$。因此，我们可以对 $\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}}\partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}\int_V\mathrm{d}\mathrm{x}f(\mathrm{x},\mathrm{x}-\mathrm{y},\mathrm{z})$ 使用上述公式（63）中的导数估计，其中 $|\boldsymbol{\alpha}|=1$，从而估计 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}{}_{\mathbf{y}}\ \partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}\int_{B_\sigma}\mathrm{d}\mathrm{x}\partial_1^{\boldsymbol{\alpha}_2}f(\mathrm{x},\mathrm{x}-\mathrm{y},\mathrm{z})$，并得到

$$\left|\partial_{\mathbf{y}}^{\boldsymbol{\alpha}_1}\partial_{\mathbf{z}}^{\boldsymbol{\beta}}\int_{B_\sigma}\mathrm{d}\mathbf{x}\partial_1^{\boldsymbol{\alpha}_2}f(\mathbf{x},\mathbf{x}-\mathbf{y},\mathbf{z})\right|\leqslant C|\mathbf{y}|^{\gamma_1+\gamma_2+d-2}.$$

将上述对公式（64）中三项的偏导数 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}_1}{}_{\mathbf{y}}$ 估计结合起来，即可证明带有 $|\boldsymbol{\alpha}|=2$ 的公式（63）中的代数奇异性刻画。递归应用上述估计，我们可以验证公式（63）对所有导数阶数 $\boldsymbol{\alpha}\geqslant\mathbf{0}$ 均成立，从而证明 $F(\mathrm{y},\mathrm{z})$ 除 $\mathrm{y}=\mathbf{0}$ 处（其阶数为 $\gamma_2$）外，在 $V\times V_Z$ 上处处光滑。证明至此完成。