

Zur Berechnung der Weierstraßschen Zeta- und Sigma-Funktion

Ulrich Eckhardt

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Schalensummation	3
3	Eigenschaften der ζ - und σ -Funktion	6
4	Laurent-Entwicklung	11
5	Verbesserung der Konvergenz der Schalensumme	14
6	Fehlerabschätzung	17
7	Rationale Approximation der Zetafunktion	20
8	Numerische Betrachtungen	23
9	Anwendung in der Theorie der Supraleitung	27
A	Tabellenanhang	30
	Literatur	33

Kapitel 1

Einleitung

Es seien ω und ω' zwei komplexe Zahlen, deren Quotient nicht reell ist. Für ganze Zahlen m und n sei

$$w = w_{mn} = 2m\omega + 2n\omega'. \quad (1.1)$$

Dann ist die Weierstraßsche ζ -Funktion definiert als

$$\zeta(z) = \frac{1}{z} + \sum'_{m,n} \left(\frac{1}{z-w} + \frac{1}{w} + \frac{z}{w^2} \right), \quad (1.2)$$

wobei der Strich an der Summe bedeuten soll, daß über alle Paare m, n mit Ausnahme von $m = n = 0$ summiert werden soll. Man kann leicht zeigen, daß die Reihe (1.2) in jedem beschränkten Gebiet der komplexen Ebene beständig konvergiert, wenn man die endlich vielen Summanden wegläßt, die in diesem Gebiet singulär werden [12, Kap. I.5].

Die Weierstraßsche σ -Funktion ist definiert als

$$\sigma(z) = \prod'_{m,n} \left(1 - \frac{z}{w} \right) \cdot \exp \left[\frac{z}{w} + \frac{1}{2} \left(\frac{z}{w} \right)^2 \right]. \quad (1.3)$$

Auch hier soll der Strich am Produkt bedeuten, daß man den Faktor mit $m = n = 0$ wegläßt. Das Produkt konvergiert beständig in jedem beschränkten Gebiet der komplexen Ebene [12, Kap. I.9].

Wir beschränken uns hier auf den sogenannten äquianharmonischen Fall, das heißt, es soll $2\omega = ae^{i\pi/3}$ und $2\omega' = ae^{-i\pi/3}$ sein. Zusätzlich sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit $a = 1$ (vgl. (3.16) und (3.21)), also

$$2\omega = e^{i\pi/3} \qquad 2\omega' = e^{-i\pi/3}. \quad (1.4)$$

Die hier dargestellten Ergebnisse lassen sich ohne Schwierigkeiten auch auf andere Fälle übertragen. Ebenso kann man andere elliptische Funktionen mit den hier gezeigten Methoden behandeln. Die benutzte Notation lehnt sich an die des Handbuchs von Abramowitz und Stegun an [1, Kap. 18: Th. H. Southard: Weierstrass Elliptic and Related Functions].

Zur Berechnung der Funktionen $\sigma(z)$ und $\zeta(z)$ verwendet man vorzugsweise die Darstellung durch ϑ -Reihen [12, Kap. III.5] oder die Laurent-Entwicklung [1, 18.5], die beide sehr rasch konvergieren. Dagegen werden die beiden Darstellungen (1.2) und (1.3) nicht verwendet, obwohl dies für die physikalischen Anwendungen recht naheliegend wäre, denn die beiden Darstellungen weisen alle physikalisch wichtigen Eigenschaften, insbesondere Symmetrien, der beiden Funktionen auf.

Ziel dieser Arbeit ist es, die beiden Darstellungen (1.2) und (1.3) direkt zu untersuchen. Dabei wird die Summe in (1.2) beziehungsweise das Produkt in (1.3) über eine kleine Menge von Gitterpunkten w_{mn} exakt gebildet, für eine größere Menge von Gitterpunkten wird bis auf eine kontrollierbare Vernachlässigung exakt gerechnet, und der Rest der Gitterpunkte wird zu einem Integral „verschmiert“. Auf diese Weise findet man Näherungsformeln, die in verhältnismäßig großen Bereichen brauchbare Näherungen für $\sigma(z)$ und $\zeta(z)$ liefern. Alle dabei auftretenden Größen lassen sich sehr gut und sicher numerisch berechnen, und der Fehler kann zuverlässig abgeschätzt werden.

Die für die Arbeit erforderlichen Rechnungen wurden von Frau I. Oellers und von Frau P. Sahelangi mit großer Sorgfalt durchgeführt, wofür ich an dieser Stelle meinen Dank aussprechen möchte.

Kapitel 2

Schalensummation

Bei geeigneter Reihenfolge der Summation in (1.2) beziehungsweise der Produktbildung in (1.3) vereinfachen sich diese beiden Ausdrücke beträchtlich. Zudem wird die Konvergenzgeschwindigkeit recht gut. Dazu setzen wir

$$r_j = e^{j\pi i/3}, \quad j = 1, 2, \dots \quad (2.1)$$

Für $j = 0, 1, \dots, 5$ bilden die r_j die Ecken eines regelmäßigen Sechsecks. Es ist $r_1 = 2\omega$ und $r_5 = 2\omega'$. Setzt man

$$\begin{aligned} w &= w_{n,k,j} = nr_j + kr_{j+2}, & n &= 1, 2, \dots, \\ & & k &= 1, 2, \dots, n, & j &= 0, 1, \dots, 5, \end{aligned} \quad (2.2)$$

dann sind die $w_{n,k,j}$ mit den w_{mn} aus (1.1) identisch, sofern nicht $m = n = 0$ ist. Die Reihe (1.2) geht damit über in

$$\zeta(z) = \frac{1}{z} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^n \sum_{j=0}^5 \left[\frac{1}{z-w} + \frac{1}{w} + \frac{z}{w^2} \right]. \quad (2.3)$$

Die damit gegebene Summationsreihenfolge soll zur Abkürzung wie folgt bezeichnet werden

$$\sum^{(6)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^n \sum_{j=0}^5. \quad (2.4)$$

Für Partialsummen der Reihe (1.2) setzen wir

$$\sum^N{}^{(6)} = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^n \sum_{j=0}^5. \quad (2.5)$$

$\sum^{(6)}$ bedeutet also, daß über konzentrische Sechsecke summiert wird (Abbildung 2.1).

In der Summe (2.3) fallen noch einige Terme weg. Es ist nämlich

$$\sum_{j=0}^5 \frac{1}{w} = \sum_{j=0}^5 \left(ne^{j\pi i/3} + ke^{(j+2)\pi i/3} \right)^{-1} = \frac{1}{n + kr_2} \sum_{j=0}^5 e^{-j\pi i/3} = 0. \quad (2.6)$$

Ebenso wird

$$\sum_{j=0}^5 \frac{1}{w^2} = 0. \quad (2.7)$$

Damit vereinfacht sich (2.3) zu

$$\zeta(z) = \frac{1}{z} + \sum^{(6)} \frac{1}{z-w}. \quad (2.8)$$

Definiert man genauso

$$\prod^{(6)} = \prod_{n=1}^{\infty} \prod_{k=1}^n \prod_{j=0}^5 \quad \text{und} \quad \prod^N{}^{(6)} = \prod_{n=1}^{\infty} \prod_{k=1}^n \prod_{j=0}^5, \quad (2.9)$$

dann hat man auf die gleiche Weise

$$\sigma(z) = z \prod^{(6)} \left(1 - \frac{z}{w}\right). \quad (2.10)$$

Die beiden Ausdrücke (2.8) und (2.10) sind nur bedingt konvergent, die Reihenfolge der Summation beziehungsweise Produktbildung ist also wesentlich.

Wir berechnen jetzt

$$\sum_{j=0}^5 \frac{1}{z-w} = \sum_{j=0}^5 \frac{1}{z - r_j(n + kr_2)} = \frac{5z^5}{z^6 - (n + kr_2)^6} \quad (2.11)$$

sowie

$$\prod_{j=0}^5 \left(1 - \frac{z}{w}\right) = 1 - \frac{z^6}{(n + kr_2)^6}. \quad (2.12)$$

Daraus wird ersichtlich, daß die Konvergenz von (2.8) und (2.10) nur dadurch entsteht, daß sich Terme, die zu gegenüberliegenden Ecken einer Sechsecksschale gehören, gegenseitig auslöschen. Es ist daher bei direkter Verwendung von (2.8) und (2.10) mit numerischen Schwierigkeiten zu rechnen, und es empfiehlt sich, die beiden folgenden Darstellungen zu benutzen:

$$\zeta(z) = \frac{1}{z} + 6z^5 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^n \frac{1}{z^6 - (n + kr_2)^6}, \quad (2.13)$$

$$\sigma(z) = z \prod_{n=1}^{\infty} \prod_{k=1}^n \left(1 - \frac{z^6}{(n + kr_2)^6}\right). \quad (2.14)$$

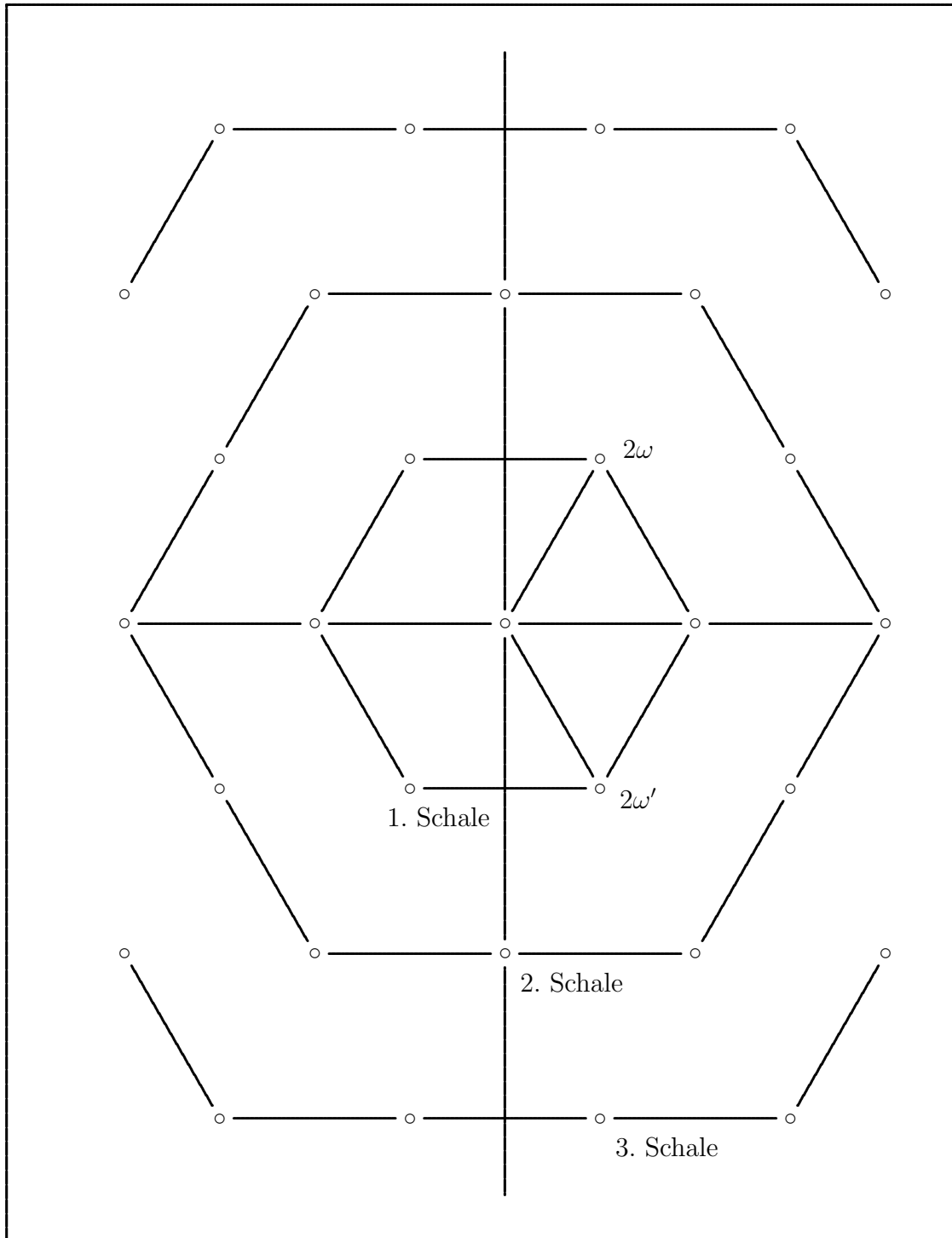


Abbildung 2.1: Das Periodengitter der Zetafunktion.

Kapitel 3

Eigenschaften der ζ - und σ -Funktion

Aus der Darstellung (2.8) kann man viele Eigenschaften der ζ -Funktion ablesen. So ist beispielsweise

$$\zeta(-z) = -\frac{1}{z} + \sum^{(6)} \frac{1}{-z-w} = -\frac{1}{z} - \sum^{(6)} \frac{1}{z-w} = -\zeta(z), \quad (3.1)$$

da der Punkt $-w = -nr_j - kr_{j+2} = nr_{j+3} + kr_{j+5}$ auch auf der n -ten Sechsecksschale liegt und aus w lediglich durch Umnummerierung entsteht.

Ebenso findet man weitere Symmetrien, etwa

$$\zeta(\bar{z}) = \overline{\zeta(z)}. \quad (3.2)$$

Ist schließlich $\varepsilon = e^{i\pi/3}$, dann wird

$$\zeta(\varepsilon z) = \varepsilon^{-1} \zeta(z). \quad (3.3)$$

Die wichtigste Eigenschaft der ζ -Funktion ist, daß

$$\zeta(z + r_i) = \zeta(z) + \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \bar{r}_i. \quad (3.4)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit (wegen (3.3)) weisen wir diese Eigenschaft für $i = 0$ nach. Es sei

$$S_N = \sum^{(6)} \left[\frac{1}{z + r_o - w} - \frac{1}{z - w} \right] + \frac{1}{z + r_o} - \frac{1}{z}. \quad (3.5)$$

S_N ist also die Differenz von zwei Sechseckssummen, deren Mittelpunkte gegeneinander um r_0 verschoben sind. Es heben sich fast alle Summanden weg, bis auf vier „Randsummen“:

$$\begin{aligned} S_N = & \sum_{k=1}^N \frac{1}{z + r_0 - Nr_0 - kr_2} + \sum_{k=0}^N \frac{1}{z + r_0 - Nr_0 - kr_4} - \\ & - \sum_{k=1}^N \frac{1}{z - Nr_3 - kr_1} - \sum_{k=0}^N \frac{1}{z - Nr_3 - kr_5}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Wir betrachten die erste dieser Summen:

$$\sum_{k=1}^N \frac{1}{z + r_0 - Nr_0 - kr_2} = - \sum_{k=1}^N \frac{1}{Nr_0 + kr_2} + O\left(\frac{1}{N}\right) = - \sum_{k=0}^{N'} \frac{1}{Nr_0 + kr_2} + O\left(\frac{1}{N}\right), \quad (3.7)$$

wobei der Strich an der Summe bedeuten soll, daß der erste und der letzte Summand je einen Faktor $\frac{1}{2}$ erhalten. Nun ist aber

$$\sum_{k=0}^{N'} \frac{1}{Nr_0 + kr_2} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N'} \frac{1}{r_0 + k/N \cdot r_2} = \int_0^1 \frac{dt}{r_0 + tr_2} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) = \frac{i\pi}{3} \bar{r}_2 + O\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (3.8)$$

Analoges gilt für die anderen drei Summen, insgesamt ist

$$S_N = \frac{i\pi}{3} (-\bar{r}_2 + \bar{r}_4 - \bar{r}_1 + \bar{r}_5) + O\left(\frac{1}{N}\right) = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} r_0 + O\left(\frac{1}{N}\right). \quad (3.9)$$

Damit ist

$$\zeta(z + r_0) - \zeta(z) = \lim_{N \rightarrow \infty} S_N = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} r_0.$$

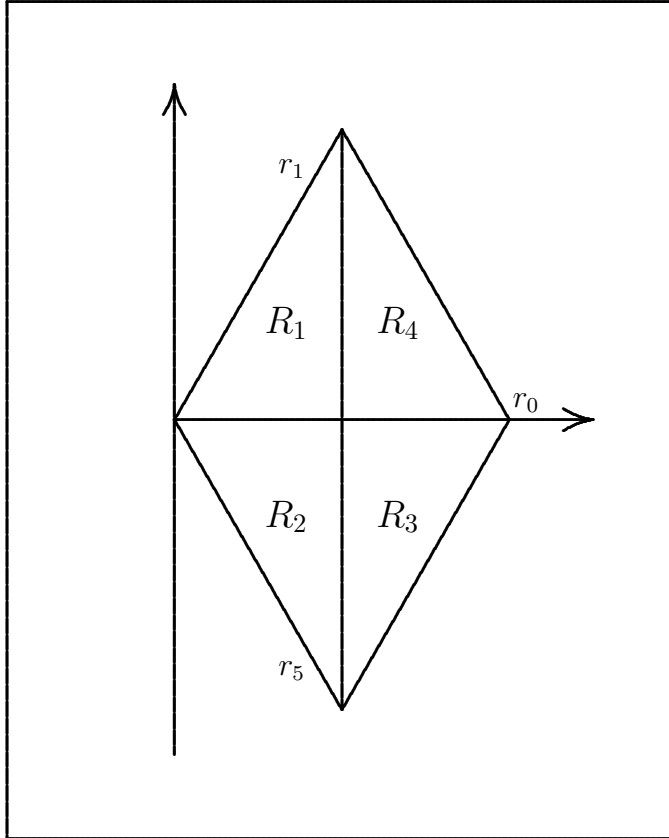


Abbildung 3.1: Die Dreiecke R_i .

Die Beziehung (3.4) gestattet es, die Betrachtung der ζ -Funktion auf das Periodenparallelogramm, das von 2ω und $2\omega'$ aufgespannt wird, zu beschränken. In diesem Periodenparallelogramm betrachten wir die Dreiecke R_1 , R_2 , R_3 und R_4 (Abbildung 3.1). Man kann nun die Berechnung von $\zeta(z)$ für z aus R_2 , R_3 oder R_4 auf die Berechnung für $z \in R_1$ reduzieren. Liegt etwa z in R_2 , dann liegt $\bar{z}$ in R_1 , also ist wegen (3.2):

$$z \in R_2 : \quad \zeta(z) = \overline{\zeta(\bar{z})}. \quad (3.10)$$

Für $z \in R_3$ ist $1 - z = -z + r_0 \in R_1$, also wegen (3.1) und (3.4)

$$z \in R_3 : \quad \zeta(z) = -\zeta(1 - z) + \frac{2\pi}{\sqrt{3}}. \quad (3.11)$$

Schließlich gilt für $z \in R_4$, daß $\bar{z} \in R_3$, also wegen (3.2) und (3.11)

$$z \in R_4 : \quad \zeta(z) = -\overline{\zeta(1 - \bar{z})} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}}. \quad (3.12)$$

Im vorliegenden äquianharmonischen Fall kann man noch weiter reduzieren, indem man (3.3) ausnutzt. Im Dreieck R_1 betrachten wir dazu die drei kongruenten Dreiecke Δ_1 , Δ_2 und Δ_3 (Abbildung 3.2). Es ist dann

$$z \in \Delta_2 \implies \varepsilon \bar{z} \in \Delta_1 : \quad \zeta(z) = \varepsilon^{-1} \overline{\zeta(\varepsilon \bar{z})}. \quad (3.13)$$

sowie

$$z \in \Delta_3 \implies 1 - \varepsilon^{-1} z \in \Delta_1 : \quad \zeta(z) = -\varepsilon^{-1} \zeta(1 - \varepsilon^{-1} z) + \varepsilon^{-1} \frac{2\pi}{\sqrt{3}}. \quad (3.14)$$

Man kann sich also darauf beschränken, die ζ -Funktion in dem Dreieck Δ_1 zu untersuchen. Δ_1 ist gegeben als die Menge derjenigen $z = x + iy$, für die

$$0 \leq x \leq \frac{1}{2}, \quad 0 \leq y \leq \frac{x}{\sqrt{3}} \quad (3.15)$$

ist. Es genügt also, wenn man $\zeta(z)$ für $|z| \leq \frac{1}{\sqrt{3}}$ kennt.

Es sei schließlich a eine reelle oder komplexe Zahl und $2\omega = ar_1$, $2\omega' = ar_5$. Dann ist

$$\zeta(a; z) = \frac{1}{z} + \sum^{(6)} \frac{1}{z - aw} = \frac{1}{z} + \frac{1}{a} \sum^{(6)} \frac{1}{z/a - w} = \frac{1}{a} \zeta\left(1; \frac{z}{a}\right). \quad (3.16)$$

Häufig wird die ζ -Funktion im äquianharmonischen Fall für ein Periodengitter gegeben, für das $a \neq 1$ ist. a wird dann so gewählt, daß die Invariante g_3 (vgl. (4.17)) den Wert 1 erhält, nämlich

$$\frac{1}{2}a = 1.5299\ 54037\ 05719\ 28749 \dots$$

[1, 18.13]. Die Beziehung (3.16) erlaubt die Umrechnung dieser Fälle.

Analog beweist man die folgenden Eigenschaften der σ -Funktion:

$$\sigma(-z) = -\sigma(z), \quad (3.17)$$

$$\sigma(\bar{z}) = \overline{\sigma(z)}, \quad (3.18)$$

$$\sigma(z + r_i) = -\sigma(z) \exp \left[\left(z + \frac{1}{2} r_i \right) \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \bar{r}_i \right], \quad (3.19)$$

$$\sigma(\varepsilon z) = \varepsilon \sigma(z), \quad (3.20)$$

$$\sigma(a; z) = a \sigma\left(1; \frac{z}{a}\right). \quad (3.21)$$

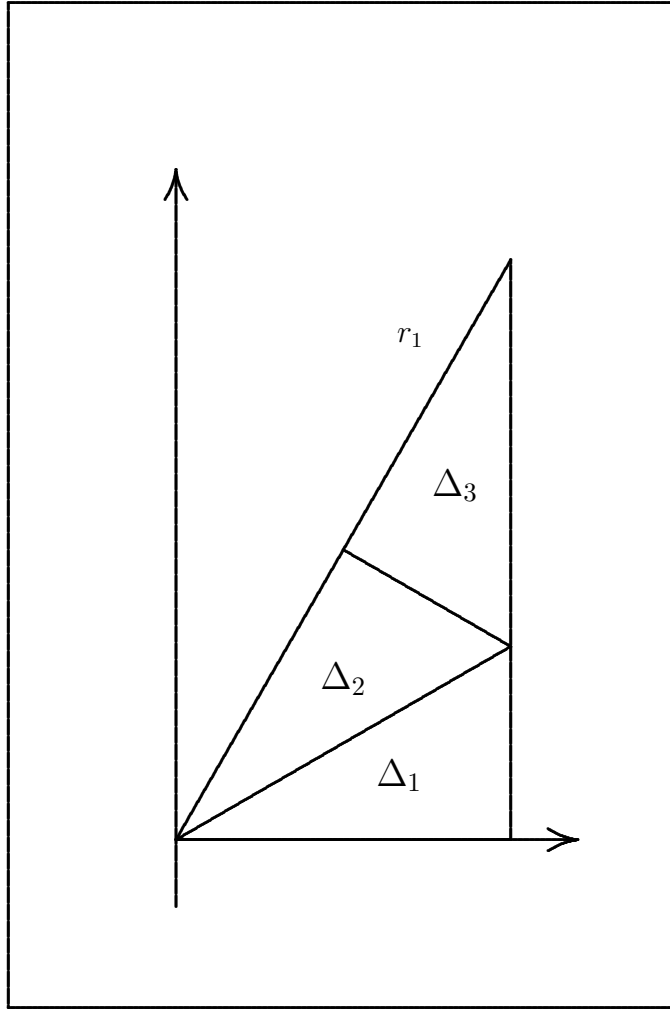


Abbildung 3.2: Die Dreiecke Δ_i .

Damit ergeben sich unter Benutzung der oben eingeführten Bezeichnungen die folgenden Reduktionsformeln:

Reduktion auf R_1 :

$$z \in R_2 : \quad \sigma(z) = \overline{\sigma(\bar{z})}, \quad (3.22)$$

$$z \in R_3 : \quad \sigma(z) = \sigma(1-z) \exp \left[\left(z - \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \right], \quad (3.23)$$

$$z \in R_4 : \quad \sigma(z) = \overline{\sigma(1-\bar{z})} \exp \left[\left(z - \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \right], \quad (3.24)$$

Reduktion auf Δ_1 :

$$z \in \Delta_2 : \quad \sigma(z) = \overline{\varepsilon \sigma(\varepsilon \bar{z})}, \quad (3.25)$$

$$z \in \Delta_3 : \quad \sigma(z) = \varepsilon \sigma(1 - \varepsilon^{-1} z) \exp \left[\left(\varepsilon^{-1} z - \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \right]. \quad (3.26)$$

Kapitel 4

Laurent-Entwicklung

Es sei N eine fest gewählte natürliche Zahl und

$$f(z) := f_N(z) = \prod^{(6)}_N \left(1 - \frac{z}{w}\right) \quad (4.1)$$

$$g(z) := g_N(z) = \sum^{(6)}_N \frac{1}{z - w}. \quad (4.2)$$

Es ist dann

$$g(z) = \frac{f'(z)}{f(z)}, \quad (4.3)$$

also

$$\begin{aligned} f'(z) &= g(z)f(z), \\ f''(z) &= g'(z)f(z) + f'(z)g(z), \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4.4)$$

Bei Schalensummation ist (vgl. (2.6) und (2.7)):

$$g^{(k)}(0) = (-1)^k \cdot k! \sum^{(6)}_N \frac{1}{w^{k+1}} = \begin{cases} 0 & \text{wenn } k+1 \text{ nicht} \\ & \text{durch 6 teilbar ist,} \\ -k! \sum^{(6)}_N \frac{1}{w^{k+1}} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.5)$$

Damit wird

$$f^{(6j)}(0) = \sum_{\nu=1}^j \binom{6j-1}{6\nu-1} g^{(6\nu-1)}(0) f^{(6j-6\nu)}(0). \quad (4.6)$$

Für $r = 1, 2, \dots$ setzen wir

$$a_r^{(N)} = - \sum^{(6)}_N \frac{1}{w^{6r}} \quad (4.7)$$

und

$$\alpha_r^{(N)} = \frac{f^{(6r)}(0)}{(6r)!}. \quad (4.8)$$

Dann ergibt sich aus (4.6):

$$\alpha_r^{(N)} = \frac{1}{6r} \sum_{\nu=1}^r a_\nu^{(N)} \alpha_{r-\nu}^{(N)}. \quad (4.9)$$

Die $a_r^{(N)}$ kann man ausrechnen. Daraus gewinnt man die $\alpha_r^{(N)}$ rekursiv nach (4.9). Es wird

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n^{(N)} z^{6n}, \quad (4.10)$$

$$g(z) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^{(N)} z^{6n-1}, \quad (4.11)$$

wobei die Summe (4.10) endlich ist, denn $f(z)$ ist ein Polynom in z . Die Funktion $f(z)$ ist eine Näherung für $\frac{1}{z}\sigma(z)$ und $g(z)$ ist eine Näherung für $\zeta(z) - \frac{1}{z}$. Neben (4.11) hat man noch die Darstellung (4.3) für $g(z)$, das heißt, eine rationale Approximation für $\zeta(z) - \frac{1}{z}$.

Man überlegt sich leicht, daß man in allen diesen Ausdrücken $N \rightarrow \infty$ gehen lassen kann. Damit erhält man Laurent-Entwicklungen für $\sigma(z)$ und $\zeta(z)$ sowie die Beziehung

$$\zeta(z) = \frac{\sigma'(z)}{\sigma(z)}. \quad (4.12)$$

Die Laurent-Koeffizienten

$$\alpha_r = \lim_{N \rightarrow \infty} \alpha_r^{(N)} \quad (4.13)$$

und

$$a_r = \lim_{N \rightarrow \infty} a_r^{(N)}$$

kann man in [1, Kap. 18.5] finden. In den Tabellen I und II sind sie für den vorliegenden Fall aufgeführt. Wie man aus Tabelle I sieht, nähern sich die Koeffizienten a_r mit wachsendem r sehr rasch dem Wert -6 . Dieses Verhalten wird aus der Reihenentwicklung (4.7) und (4.13) qualitativ verständlich. Es ist nämlich

$$\begin{aligned} -a_r &= \sum^{(6)} \frac{1}{w^{6r}} = \sum^{(6)} \frac{1}{(nr_j + kr_{j+2})^{6r}} = 6 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{6r}} \sum_{k=1}^n \frac{1}{(1 + \frac{k}{n}r_2)^{6r}} = \\ &= 6 + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n^{6r}} \sum_{k=1}^n \frac{1}{(1 - \frac{k}{n}r_2)^{6r}}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Unter Benutzung der Abschätzung

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \leq \left| 1 + \frac{k}{n}r_2 \right| \leq 1 \quad (4.15)$$

überzeugt man sich leicht davon, daß die Reihe in (4.14) mit wachsendem r klein wird. Unter Berücksichtigung dieses Verhaltens der a_r kann man näherungsweise setzen

$$\zeta(z) \approx \frac{1}{z} + \sum_{n=1}^N a_n z^{6n-1} - 6z^{6N+5} \frac{1}{1-z^6} \quad (4.16)$$

(vgl. dazu [5]).

Die Laurent-Entwicklung für $\zeta(z)$ hat den Nachteil, daß sie einen Konvergenzradius hat, der sicher kleiner als 1 ist, weil nämlich $\zeta(z)$ für $|z| = 1$ die Pole r_j hat. Dieser Nachteil wird dadurch gemildert, daß man $\zeta(z)$ nur für $|z| \leq \frac{1}{\sqrt{3}}$ zu kennen braucht.

Schwerwiegender ist die Tatsache, daß man für die Partialsummen der beiden Laurent-Reihen keine zuverlässige Fehlerabschätzung hat und daß man den Fehler bei der Berechnung der a_r und der α_r nicht erfassen kann. Es ist jedoch leicht möglich, für die Darstellungen (4.10) und (4.11) Fehlerabschätzungen zu liefern und außerdem diese Ausdrücke noch etwas zu verbessern.

Die beiden Zahlen

$$\begin{aligned} g_2 &= 60 \sum^{(6)} \frac{1}{w^4} = 0, \\ g_3 &= 140 \sum^{(6)} \frac{1}{w^6} = 140a_1 \end{aligned} \quad (4.17)$$

nennt man die Invarianten der Weierstraßschen elliptischen Funktionen. Der äquianharmonische Fall ist durch $g_2 = 0$ und $g_3 > 0$ charakterisiert. Aus den beiden Invarianten kann man rekursiv die Koeffizienten a_r berechnen [1, 18.5.3].

Kapitel 5

Verbesserung der Konvergenz der Schalensumme

Summiert man $\frac{1}{z-w}$ über die n -te Schale, so erhält man zunächst wegen $(n + nr_2)^6 = n^6 r_1^6 = n^6$:

$$S_n := \sum_{k=1}^n \frac{6z^5}{z^6 - (n + kr_2)^6} = \sum_{k=0}^{n'} \frac{6z^5}{z^6 - (n + kr_2)^6}, \quad (5.1)$$

wobei der Strich an der Summe bedeuten soll, daß der erste und der letzte Summand je einen Faktor $\frac{1}{2}$ erhalten. Weiterhin ist

$$\begin{aligned} S_n &= \frac{6z^5}{n^5} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n'} \frac{1}{(z/n)^6 - (1 + k/n \cdot r_2)^6} = \\ &= -\frac{5z^5}{n^5} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n'} \left(1 + \frac{k}{n} r_2\right)^{-6} - \frac{6z^{11}}{n^{11}} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n \frac{1}{\left(1 + \frac{k}{n} r_2\right)^6 \left[\left(1 + \frac{k}{n} r_2\right)^6 - \left(\frac{z}{n}\right)^6\right]}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Wir setzen voraus, daß gilt

$$|z| \leq \frac{1}{2}n. \quad (5.3)$$

Für $0 \leq t \leq 1$ ist (vgl. (4.15))

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \leq |1 + tr_2| \leq 1. \quad (5.4)$$

Damit folgt aus (5.2) die Abschätzung

$$\left| S_n + \frac{6z^5}{n^5} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n'} \left(1 + \frac{k}{n} r_2\right)^{-6} \right| \leq \frac{|z|^{11}}{n^{11}} \frac{6}{26} \frac{64^2}{27} \leq 35.009 \cdot \frac{|z|^{11}}{n^{11}}. \quad (5.5)$$

Setzt man

$$S = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n'} \left(1 + \frac{k}{n} r_2\right)^{-6}, \quad (5.6)$$

so ist dies gerade die Trapeznäherung für

$$I = \int_0^1 \frac{dt}{(1 + tr_2)^6} = -\frac{1}{5}. \quad (5.7)$$

Insgesamt ist also

$$\left| S_n + \frac{6z^5}{n^5} I \right| \leq \left| S_n + \frac{6z^5}{n^5} S \right| + \frac{6|z|^5}{n^5} |S - I| \leq 35.009 \frac{|z|^{11}}{n^{11}} + \frac{6|z|^5}{n^5} |S - I|. \quad (5.8)$$

Damit wird

$$\begin{aligned} \left| \zeta(z) - \frac{1}{z} - \sum_{n=N+1}^N \frac{1}{z-w} - \frac{6}{5} \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{z^5}{n^5} \right| &= \left| \sum_{n=N+1}^{\infty} \left(S_n + \frac{6z^5}{n^5} I \right) \right| \leq \\ &\leq 35.009 \cdot \sigma_N^{(11)} |z|^{11} + 6|z|^5 |S - I| \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{1}{n^5}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

wobei

$$\sigma_N^{(k)} = \sum_{n=N+1}^{\infty} n^{-k} = \zeta_0(k) - \sum_{n=1}^N n^{-k} \quad (5.10)$$

gesetzt wurde. $\zeta_0(s)$ ist die Riemannsche ζ -Funktion.

Setzen wir noch speziell

$$\sigma_N := \sigma_N^{(5)}, \quad (5.11)$$

dann ergibt sich die folgende Näherung für die ζ -Funktion aus (5.9):

$$\zeta(z) \approx \frac{1}{z} + \sum_N^{(6)} \frac{1}{z-w} + 1.2\sigma_N z^5. \quad (5.12)$$

Der Fehler dieser Approximation ist in (5.9) gegeben, wobei noch $|S - I|$ abzuschätzen ist, was in Kapitel 6 geschehen soll. Die Koeffizienten $\sigma_N^{(k)}$ sind in Tabelle III zu finden (aufgerundete Werte).

Um für die σ -Funktion eine ähnliche Darstellung zu finden, untersuchen wir $\ln \sigma(z)$. Es sei

$$T_n = \sum_{k=0}^n \ln \left(1 - \frac{z^6}{(n + kr_2)^6} \right) = - \sum_{k=0}^n \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{1}{\nu} \left[\frac{z^6}{n^6} \frac{1}{\left(1 + \frac{k}{n} r_2 \right)^6} \right]^{\nu}. \quad (5.13)$$

Wieder wird mit (5.3) und (5.4)

$$\begin{aligned} \left| T_n + \frac{z^5}{n^5} S \right| &\leq \sum_{k=0}^n \frac{1}{2} \frac{|z|^{12}}{n^{12}} \frac{1}{\left| 1 + \frac{k}{n} r_2 \right|^{12}} \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[\frac{|z|/n}{\left| 1 + \frac{k}{n} r_2 \right|} \right]^{6\nu} = \\ &= \frac{1}{2} \frac{|z|^{12}}{n^{11}} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n \frac{1}{\left| 1 + \frac{k}{n} r_2 \right|^{12}} \frac{1}{1 - \frac{|z|^6/n^6}{\left| 1 + \frac{k}{n} r_2 \right|^6}} \leq \\ &\leq \frac{1}{2} \frac{|z|^{12}}{n^{11}} \frac{64^2}{26 \cdot 27} \leq 2.918 \frac{|z|^{12}}{n^{11}}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Damit ergibt sich

$$\left| \ln \sigma(z) - \ln z - \sum_{n=1}^N {}^{(6)} \ln \left(1 - \frac{z}{w} \right) - 0.2 \sigma_N z^6 \right| \leq 2.918 \sigma_N^{(11)} |z|^{12} + |z|^6 |S - I| \sum_{n=N+1}^{\infty} n^{-5}, \quad (5.15)$$

und wir erhalten die folgende Näherungsdarstellung

$$\sigma(z) \approx z \prod_{n=1}^N {}^{(6)} \left(1 - \frac{z}{w} \right) e^{0.2 \sigma_N z^6}. \quad (5.16)$$

Der Ausdruck (5.15) ist der Logarithmus des relativen Fehlers der Näherungsdarstellung (5.16).

Kapitel 6

Fehlerabschätzung

Es ist noch $|S - I|$ abzuschätzen. Dazu verwenden wir die bekannte Restglieddarstellung der Trapezregel [1, 25.4.2]:

$$|S - I| \leq \frac{1}{12n^2} f''(\xi), \quad 0 < \xi < 1, \quad (6.1)$$

wobei

$$f(t) = \frac{1}{(1 + tr_2)^6}. \quad (6.2)$$

Es wird also unter Verwendung von (5.4):

$$|S - I| \leq \frac{1}{n^2} \frac{896}{81} \leq \frac{11.062}{n^2}. \quad (6.3)$$

Aus (5.9) erhalten wir als Schranke für den Fehler der Approximation (5.12)

$$\varepsilon_N := 35.009 \cdot \sigma_N^{(11)} |z|^{11} + 66.371 \cdot \sigma_N^{(7)} |z|^5. \quad (6.4)$$

Desgleichen folgt aus (5.15) als Fehlerschranke der Entwicklung (5.16) für $\sigma(z)$:

$$\delta_N := 2.918 \cdot \sigma_N^{11} |z|^{12} + 11.062 \cdot \sigma_N^{(7)} |z|^6. \quad (6.5)$$

Die beiden Schranken gelten unter der naheliegenden Voraussetzung (5.3), das heißt, es muß bis zu einer Schale summiert werden, deren Radius größer als $2|z|$ ist. Beschränkt man sich auf $|z| \leq 1/\sqrt{3}$ (und $N \geq 2$), dann wird

$$\varepsilon_N \leq 8.318 \cdot 10^{-2} \cdot \sigma_N^{(11)} + 4.259 \cdot \sigma_N^{(7)} \quad (6.6)$$

sowie

$$\delta_N \leq 4.003 \cdot 10^{-3} \cdot \sigma_N^{(11)} + 4.298 \cdot 10^{-1} \cdot \sigma_N^{(7)}. \quad (6.7)$$

Man kann beide Funktionen durch Hinzunahme weiterer Korrekturglieder noch genauer darstellen. Nach der Euler-Maclaurinschen Summenformel [1, 23.1.30] ist

$$S - I - \sum_{k=1}^{m-1} \frac{B_{2k}}{(2k)! n^{2k}} \left[f^{(2k-1)}(1) - f^{(2k-1)}(0) \right] = \frac{B_{2m}}{(2m)! n^{2m}} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f^{(2m)} \left(\left(1 + \theta\right) \frac{k}{n} \right) \quad (6.8)$$

wobei m eine fest gewählte natürliche Zahl ist, B_{2m} die $2m$ -te Bernoullische Zahl [1, Tabelle 23.2] und $0 < \theta < 1$. Der Ausdruck auf der rechten Seite von (6.8) kann abgeschätzt werden gemäß

$$\left| \frac{1}{n^{2m}} \frac{B_{2m}}{(2m)!} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f^{(2m)} \left((1+\theta) \frac{k}{n} \right) \right| \leq \frac{1}{n^{2m}} c_m \gamma_m, \quad (6.9)$$

wobei

$$c_m = \frac{|B_{2m}|}{(2m)!}, \quad \gamma_m = \max_{0 \leq t \leq 1} \left| f^{(2m)}(t) \right|. \quad (6.10)$$

Die Koeffizienten c_m und γ_m findet man in Tabelle IV. Setzt man (6.8) in (5.2) ein und summiert über n , dann erhält man

$$\begin{aligned} \zeta(z) &\approx \frac{1}{z} + \sum_{n=1}^N \binom{6}{n} \frac{1}{z-n} + 1.2\sigma_N z^5 - 6z^5 \sum_{k=1}^{m-1} \frac{B_{2k}}{(2k)!} \left[f^{(2k-1)}(1) - f^{(2k-1)}(0) \right] \sigma_N^{(5+2k)} = \\ &= \frac{1}{z} + \sum_{n=1}^N \binom{6}{n} \frac{1}{z-n} + 6z^5 \left[0.2\sigma_N + 0.5\sigma_N^{(7)} + \frac{14}{15}\sigma_N^{(9)} + \sigma_N^{(11)} - 3.3\sigma_N^{(13)} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{91}{3}\sigma_N^{(15)} - \frac{2764}{30}\sigma_N^{(17)} - \dots \right], \end{aligned} \quad (6.11)$$

und wegen (5.5) und (6.9) ist der Fehler dieser Approximation

$$\varepsilon_N^{(m)} := 35.009 \cdot |z|^{11} \cdot \sigma_N^{(11)} + 6|z|^5 \cdot c_m \gamma_m \cdot \sigma_N^{(5+2m)}. \quad (6.12)$$

Man kann durch passende Wahl von N und m versuchen, eine möglichst einfache und möglichst genaue Darstellung für $\zeta(z)$ zu finden. Dabei ist zu beachten, daß der erste Term in (6.12) auf jeden Fall eine von m unabhängige untere Schranke für $\varepsilon_N^{(m)}$ liefert. Man kann diesen Term noch günstiger abschätzen, wenn man in (5.2) auch noch Glieder mit $\left(1 + \frac{k}{n} r_2\right)^{6r}$, $r = 1, 2, \dots$, berücksichtigt. Allerdings ist dieser Mehraufwand nicht unbedingt von Vorteil, weil die Fehlerschranken (6.9) mit wachsendem m nicht gegen Null streben, so daß sich auch für den zweiten Term in (6.12) für festes N eine untere Schranke ergibt.

Eine weitere praktische Schwierigkeit ergibt sich daraus, daß die Zahlen $\sigma_N^{(k)}$ nicht ohne großen Aufwand beliebig genau berechenbar sind. Verwendet man die Tafel in [1, Tabelle 23.3] für die Riemannsche Zetafunktion, dann kann man die $\sigma_N^{(k)}$ mit einem Fehler von etwa 10^{-20} ausrechnen. Die Koeffizienten von $\sigma_N^{(k)}$ in (6.11) wachsen mit k sehr schnell an, so daß der Fehler in der Berechnung dieser Größen um einige Dezimalstellen nach links wandert. Benutzt man also die Tafel in [1], dann empfiehlt es sich, m in (6.11) so zu wählen, daß der zweite Anteil in (6.12) gerade etwas kleiner ist als der erste, das heißt, m nicht zu groß. Wir betrachten als Beispiel $N = 10$. Für $|z| \leq 1/\sqrt{3}$ ist $35.009|z|^{11}\sigma_{10}^{(11)} \leq 4.903 \cdot 10^{-13}$. In Tabelle 6.1 findet man den zweiten Anteil der Fehlerabschätzung (6.12) für verschiedene m .

Für $m = 6$ erhalten wir

$$\varepsilon_{10}^{(6)} \leq 5.113 \cdot 10^{-13} \quad (|z| \leq 1/\sqrt{3}). \quad (6.13)$$

Eine weitere Vergrößerung von m verbessert diese Fehlerschranke nur unwesentlich. Auf dieselbe Weise findet man für $|z| \leq 1$ den günstigsten Wert $m = 4$:

$$\varepsilon_{10}^{(4)} \leq 2.910 \cdot 10^{-10} \quad (|z| \leq 1). \quad (6.14)$$

Tabelle 6.1: Abschätzung von $6|z|^5 c_m \gamma_m \sigma_{10}^{(5+2m)}$ für $|z| \leq 1/\sqrt{3}$.

m	Abschätzung
1	5.221 – 7
2	5.614 – 9
3	1.403 – 10
4	5.423 – 12
5	2.924 – 13
6	2.090 – 14
7	2.785 – 15

Es seien noch die beiden Werte für $N = 20$ angegeben

$$\varepsilon_{20}^{(5)} \leq 6.541 \cdot 10^{-16} \quad (|z| \leq 1/\sqrt{3}) \quad (6.15)$$

und

$$\varepsilon_{20}^{(4)} \leq 2.931 \cdot 10^{-13} \quad (|z| \leq 1). \quad (6.16)$$

Nach (5.15) kann man auf die gleiche Weise eine Verbesserung der Darstellung der σ -Funktion und eine schärfere Fehlerabschätzung herleiten. Es ist

$$\sigma(z) \approx z \prod_{n=1}^N {}^{(6)} \left(1 - \frac{z}{w}\right) \exp \left(K_N^{(m)} z^6\right), \quad (6.17)$$

wobei

$$\begin{aligned} K_N^{(m)} = & 0.2\sigma_N + 0.5\sigma_N^{(7)} + \frac{14}{15}\sigma_N^{(9)} + \sigma_N^{(11)} - 3.3\sigma_N^{(13)} - \frac{91}{3}\sigma_N^{(15)} - \frac{2764}{30}\sigma_N^{(17)} - \dots \\ & \dots - \frac{B_{2m-2}}{(2m-2)!} \left[f^{(2m-3)}(1) - f^{(2m-3)}(0) \right] \sigma_N^{(3+2m)}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Der relative Fehler dieser Darstellung kann abgeschätzt werden durch

$$\delta_N^{(m)} := 2.918\sigma_N^{(11)}|z|^{12} + c_m \gamma_m |z|^6 \sigma_N^{(5+2m)}. \quad (6.19)$$

Für $|z| \leq 1$ erhält man damit

$$\delta_{10}^{(4)} \leq 3.129 \cdot 10^{-11} \quad (|z| \leq 1) \quad (6.20)$$

und

$$\delta_{20}^{(4)} \leq 2.683 \cdot 10^{-14} \quad (|z| \leq 1) \quad (6.21)$$

Kapitel 7

Rationale Approximation der Zetafunktion

Setzt man den Ausdruck (4.3) in die Beziehung (6.11) ein, dann wird

$$\zeta(z) \approx \frac{1}{z} + \frac{f'(z)}{f(z)} + 6z^5 K_N^{(m)}. \quad (7.1)$$

Hierbei ist $K_N^{(m)}$ die in (6.18) definierte Größe, und $f'(z)$ und $f(z)$ sind Polynome in z (4.1). Der Fehler dieser Approximation wird durch (6.12) gegeben. Die Beziehung (7.1) kann man noch zweckmäßig umformen. Beschränkt man sich auf $|z| \leq 1/\sqrt{3}$, dann empfiehlt es sich, alle Summanden auf einen gemeinsamen Nenner zu bringen. Für $|z| \leq 1$ ist die Darstellung

$$\zeta(z) \approx \frac{1}{z} + \frac{5z^5}{z^6 - 1} + 6z^5 \frac{P(z)}{Q(z)} \quad (7.2)$$

vorzuziehen. Die Koeffizienten der Polynome f und f' in (7.1) beziehungsweise von P und Q in (7.2) fallen rasch ab, und es ist leicht möglich, abzuschätzen, welchen Einfluß die Vernachlässigung hoher Potenzen von z hat. Auf diese Weise erhält man eine sehr bequeme rationale Darstellung der Zetafunktion.

Als Beispiel untersuchen wir die Darstellung (7.2) für $N = 10$ und $|z| \leq 1$. Hier wird wegen (6.14)

$$K_{10}^{(4)} = 4.14475\ 00305\ 74382 \cdot 10^{-6}. \quad (7.3)$$

Die damit errechneten Koeffizienten von $P(z) = \sum b_k z^{6k}$ und $Q(z) = \sum \beta_k z^{6k}$ findet man in den Tabellen 7.1 und 7.2. Berücksichtigen wir im Zähler- und im Nennerpolynom nur die Glieder bis $k = 3$ einschließlich, dann ist für $|z| \leq 1$ der dadurch verursachte Fehler kleiner als $6.903 \cdot 10^{-10}$. Dazu kommt der Fehler (6.14). Das heißt, wir können $\zeta(z)$ darstellen

$$\zeta(z) \approx \frac{1}{z} - \frac{6z^5}{1 - z^6} + 6z^5 \frac{b_0 + b_1 z^6 + b_2 z^{12} + b_3 z^{18}}{\beta_0 + \beta_1 z^6 + \beta_2 z^{12} + \beta_3 z^{18}}, \quad (7.4)$$

und der Fehler dieser Darstellung ist für $|z| \leq 1$ kleiner als $9.814 \cdot 10^{-10}$.

Tabelle 7.1: Die Koeffizienten b_k des Zählerpolynoms $P(z)$ der Entwicklung (7.2) für $N = 10$ und $m = 4$.

k	b_k			
0	2.28280	51095	67798	− 2
1	− 1.08563	66499	33698	− 3
2	− 2.12226	11858	52326	− 6
3	− 1.38256	90654	16207	− 8
4	2.75857	50723	23064	−11
5	1.27537	95472	96596	−14

Tabelle 7.2: Die Koeffizienten des Nennerpolynoms $Q(z)$ der Entwicklung (7.2).

k	β_k			
0	1.00000	00000	00000	
1	2.28239	06345	64740	− 2
2	− 5.42865	62466	01109	− 4
3	− 7.06670	38117	93060	− 7
4	− 3.45569	04205	19518	− 9
5	5.52001	47392	41348	− 12
6	2.12181	93986	17787	− 15

Bei der Darstellung für $z \cdot \zeta(z)$ durch „Economized Polynomials“ auf der reellen Achse für $|z| \leq \frac{1}{2}$ von Southard [1, 18.13.69] benötigt man Potenzen bis z^{36} um eine Genauigkeit von $3 \cdot 10^{-8}$ zu erreichen. Der Vorteil der Darstellung (7.5) ist evident: Sie ist nicht nur genauer, sondern hat auch einen größeren Gültigkeitsbereich. Zudem kommt sie mit erheblich weniger Potenzen von z aus.

Ähnlich kann man die σ -Funktion darstellen. Es ist mit (4.1), (6.17) und (6.20):

$$\sigma(z) \approx zf(z) \exp\left(K_{10}^{(4)} z^6\right) = \left(\alpha_0^{(10)} z + \alpha_1^{(10)} z^7 + \alpha_2^{(10)} 7^{19} + \dots\right) \exp\left(K_{10}^{(4)} z^6\right). \quad (7.5)$$

Der relative Fehler dieser Approximation ist durch (6.20) gegeben. Die Koeffizienten $\alpha_k^{(10)}$ findet man in Tabelle 7.3. Mit diesen Koeffizienten schätzt man ab, daß für $|z| \leq 1$ der Betrag der Näherung (7.5) stets kleiner als 2.002 ist. Damit wird der absolute Fehler von (7.5) kleiner als $6.269 \cdot 10^{-11}$. Vernachlässigt man alle Glieder mit $k \geq 6$, dann begeht man einen Fehler, der kleiner ist als $5.520 \cdot 10^{-12}$, also ist der Gesamtfehler kleiner als $6.821 \cdot 10^{-11}$. Der Zahlenwert von $K_{10}^{(4)}$ ist in (7.3) angegeben.

In den Tabellen V bis VII sind die Koeffizienten der Approximation für $N = 20$ mit den entsprechenden Fehlerschranken gegeben.

Tabelle 7.3: Die Koeffizienten $\alpha_k^{(10)}$ der Entwicklung der σ -Funktion.

k	$\alpha_k^{(10)}$			
0	1.00000	00000	00000	
1	− 9.77176	09365	43526	− 1
2	− 2.33667	71970	30751	− 2
3	5.42158	95427	89316	− 4
4	7.03214	69075	87865	− 7
5	3.46121	04352	58759	− 9
6	− 5.51789	29198	42730	− 12

Kapitel 8

Numerische Betrachtungen

Durch die Darstellungen (7.2) und (7.3) hat man ein sehr bequemes Mittel in der Hand, die Weierstraßsche Zeta- und Sigmafunktion mit vorgegebener Genauigkeit darzustellen. Vorteilhaft ist dabei, daß man die auftretenden Koeffizienten sehr leicht mit beliebiger Genauigkeit (etwa Rationalarithmetik) ausrechnen kann. Außerdem kann man den Gültigkeitsbereich der Darstellung ohne allzugroßen Genauigkeitsverlust vergrößern, wie etwa der Vergleich von (6.13) und (6.14) zeigt. Theoretisch genügt zwar, wie wir in Kapitel 2 sahen, die Kenntnis beider Funktionen in dem Dreieck Δ_1 , jedoch sind die dazu erforderlichen Reduktionen auf einer Großrechenanlage nicht zu empfehlen, weil dabei viele Vergleiche und wenige arithmetische Operationen auftreten. Stellt man dagegen die beiden Funktionen für $|z| \leq 1$ dar, dann benötigt man nur die beiden Reduktionsformeln (3.4) und (3.19), die keinerlei Schwierigkeiten bereiten.

Da die Berechnung der Koeffizienten b_k , β_k und $\alpha_k^{(N)}$ für große N viel Rechenzeit benötigt, und weil die Konvergenz der dabei auftretenden Reihen – ähnlich wie bei der Riemannschen Zetafunktion – für große N langsamer wird, empfiehlt es sich, N nicht zu groß zu wählen und dafür die Terme S_n und T_n (vgl. (5.2) und (5.13)) durch Hinzunahme weiterer Glieder der Reihenentwicklung darzustellen. Diese Zusatzglieder kann man dann wie beschrieben durch Integrale und Korrekturglieder ersetzen. Dieser Weg wurde hier nicht beschritten, da die erreichten Genauigkeitsschranken für unsere Zwecke (s. Kapitel 9) völlig ausreichen.

Wie bereits erwähnt wurde, kann die beschriebene Vorgehensweise sehr allgemein verwendet werden. Hat man irgendwelche Halbperioden ω und ω' , dann setzt man

$$\begin{aligned} r_0 &= 2\omega + 2\omega', \\ r_1 &= 2\omega', \\ r_2 &= r_1 - r_0, \\ r_3 &= -r_0, \\ r_4 &= -r_1, \\ r_5 &= -r_2. \end{aligned} \tag{8.1}$$

Zu irgendeiner Funktion $\varphi(z)$ kann man dann

$$\sum'_{m,n} \varphi(z-w) = \sum^{(6)} \varphi(z-w) \tag{8.2}$$

setzen und alle am Modell der Zetafunktion durchgeführten Schritte nachvollziehen. In der Festkörperphysik treten bei theoretischen Untersuchungen an unendlich ausgedehnten Kristallen solche Summen auf, die häufig nur bedingt konvergieren. A. H. Scholz berechnete solche Gittersummen nach einer Methode, die im Prinzip der hier beschriebenen Methode ähnlich ist [10, Anhang A 2].

Es stellt sich die Frage, wie groß die Genauigkeit der Approximation (7.2) für $N = 10$ und $N = 20$ tatsächlich ist. Im diese Frage zu untersuchen, wurde zunächst einmal der Defekt $\varepsilon_N^{(m)}(z) = \zeta(z) -$ Näherung für zwei spezielle Werte von z berechnet. Im Zähler- und Nennerpolynom wurden dabei Glieder bis $k = 10$ einschließlich mitgeführt. Für $z = \frac{1}{2}$ ist $\zeta(\frac{1}{2}) = \pi/\sqrt{3}$ und

$$\varepsilon_{10}^{(4)}\left(\frac{1}{2}\right) = 1.828 \cdot 10^{-14}$$

sowie

$$\varepsilon_{20}^{(4)}\left(\frac{1}{2}\right) = 3.150 \cdot 10^{-15}.$$

Man kann leicht $\varepsilon_N^{(m)}(1) = \lim_{z \rightarrow 1} \varepsilon_N^{(m)}(z)$ berechnen. Es wird

$$\varepsilon_{10}^{(4)}(1) = 4.020 \cdot 10^{-12}$$

und

$$\varepsilon_{20}^{(4)}(1) = 1.039 \cdot 10^{-13}.$$

Vergleicht man diese Werte mit den Fehlerschranken des Kapitels 6, dann sieht man, daß diese Abschätzungen durchaus akzeptabel sind.

Zur genaueren Untersuchung wurde noch die Fehlerfunktion $\varepsilon(x) = \zeta(x) -$ Näherung für $x = 0.01(0.01)0.99$ ausgerechnet. Als Vergleichsfunktion wurde die Laurent-Entwicklung mit Korrekturglied (4.16) und den Koeffizienten der Tabelle I gewählt. Für $|z| \leq \frac{1}{2}$ kann man bei dieser Darstellung mit einer Genauigkeit von etwa 20 Dezimalstellen rechnen. Für $|z| > \frac{1}{2}$ wurde die Reduktionsformel (3.11) benutzt. Als Näherung wurden für $N = 10$ die Formel (7.4) mit den Koeffizienten der Tabellen 7.1 und 7.2 und für $N = 20$ die Näherung der Tabellen V und VI (Glieder bis $k = 4$ im Zähler- und Nennerpolynom) verwendet. Die beiden Fehlerkurven findet man in den Abbildungen 8.1 und 8.2.

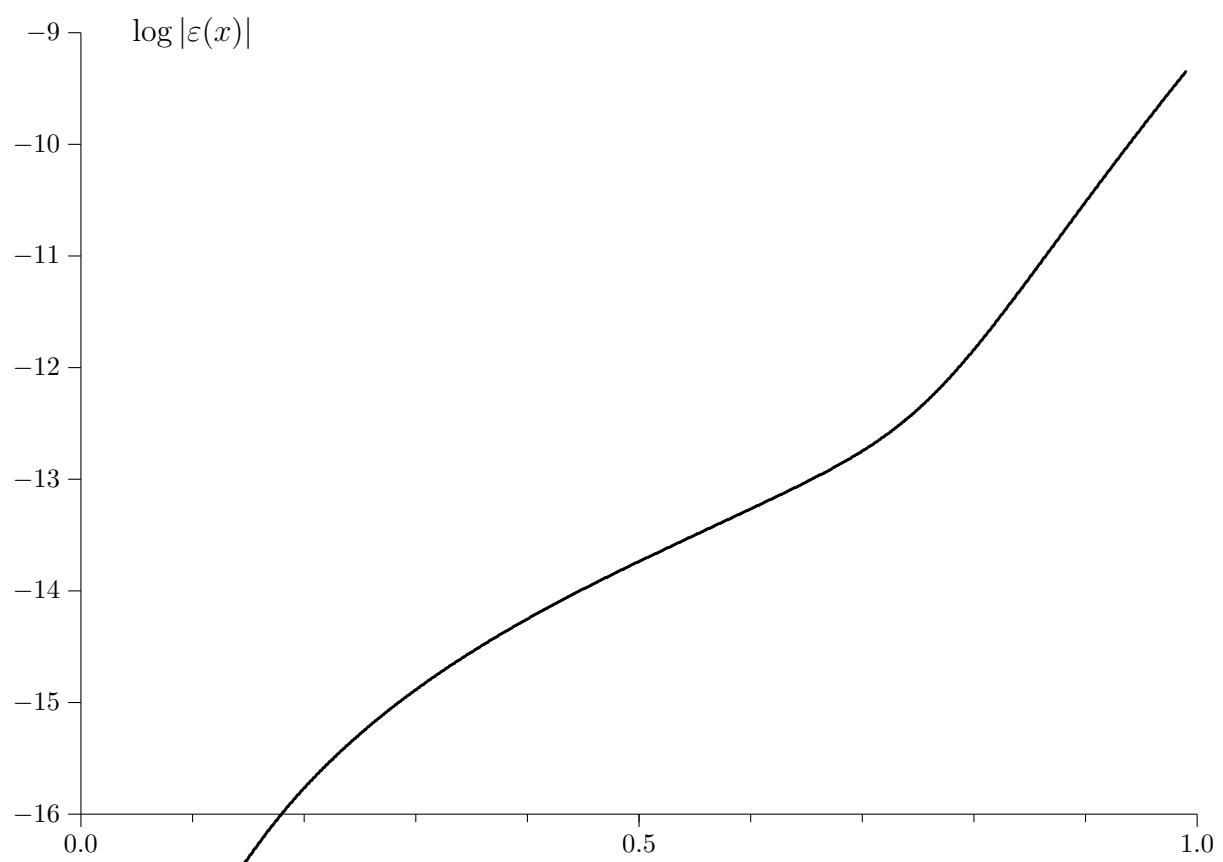


Abbildung 8.1: Die Fehlerfunktion $\varepsilon(x)$ ($N = 10$).

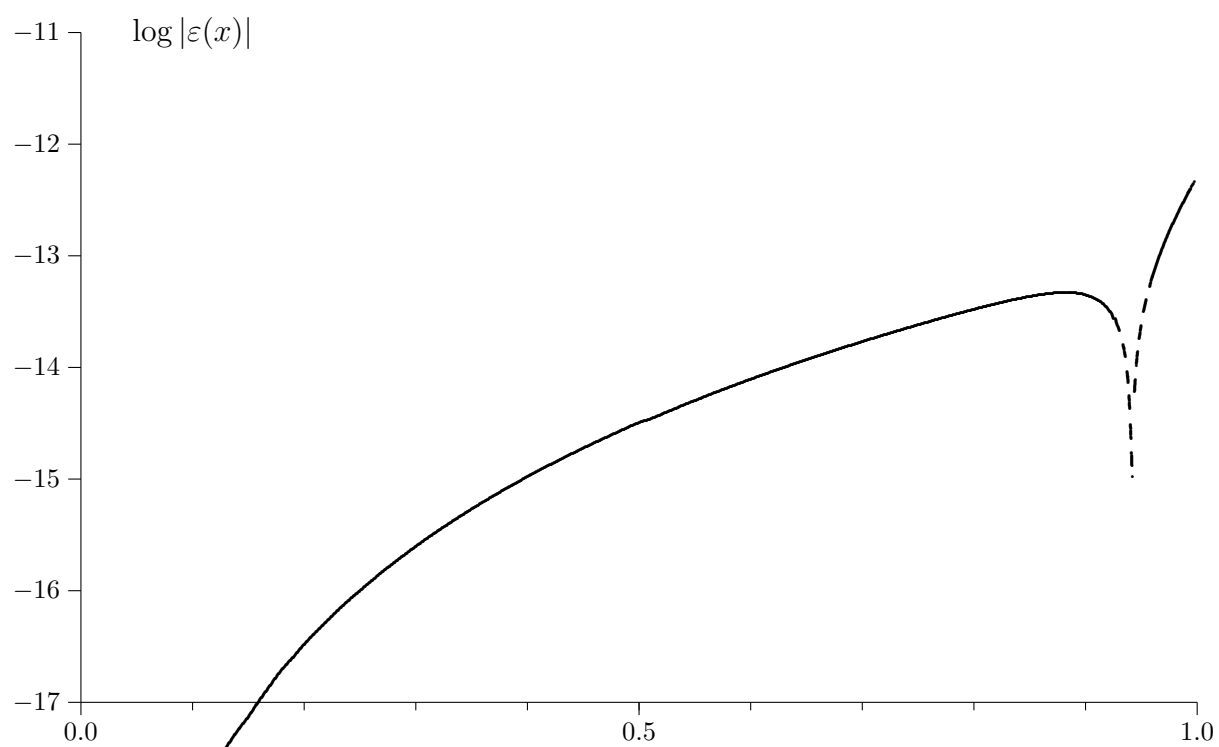


Abbildung 8.2: Die Fehlerfunktion $\varepsilon(x)$ ($N = 20$).

Kapitel 9

Anwendung in der Theorie der Supraleitung

Es gibt eine Reihe klassischer Anwendungen der Weierstraßschen elliptischen Funktionen in der Physik (vgl. etwa [9], [8] und [5]). Hier soll eine modernere Anwendung aus der Theorie der Supraleitung beschrieben werden (vgl. [2]).

An einen in der x - y -Ebene unendlich ausgedehnten Typ-II-Supraleiter werde ein konstantes homogenes Magnetfeld in z -Richtung angelegt. Das Magnetfeld dringt in Form von Flußwirbeln in den Supraleiter ein, sofern die Temperatur und die Feldstärke innerhalb gewisser Grenzen liegen. Die Flußwirbel mögen sich an den Stellen

$$r_{nm} = (x_{mn}, y_{mn}, 0)^\top \quad (9.1)$$

befinden. Im Punkte $r = (x, y, 0)^\top$ setzt sich das Vektorpotential $A(r)$ des Gesamtmagnetfeldes zusammen aus dem konstanten Anteil des angelegten Magnetfeldes und der Gesamtsumme aller Potentiale der Flußwirbel. Diese Potentiale stellen sich dabei so ein, daß das angelegte Feld nicht gestört wird. Bezeichnet man mit e_z den Einheitsvektor in z -Richtung, dann kann man – bis auf einen konstanten Faktor – das Vektorpotential so ansetzen:

$$A(r) = e_z \times \left[\alpha r - \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{r - r_{mn}}{|r - r_{mn}|^2} \right], \quad (9.2)$$

wobei α eine noch zu bestimmende Konstante ist. Aus Energiegründen ordnen sich die Flußwirbel in Form eines regelmäßigen Gitters an. Es kommen nur das hexagonale und das quadratische Gitter in Betracht [2]. Wir untersuchen hier den Fall des hexagonalen Gitters.

Zunächst hängt der Ausdruck (9.2) von der Summationsreihenfolge ab. Es ist eine physikalisch sinnvolle Reihenfolge zu finden. Dazu legen wir den Nullpunkt des Koordinatensystems in einen der Wirbel und führen um diesen Wirbel die Schalensummation des Kapitels 2 aus. Identifiziert man den Vektor $r = (x, y, 0)^\top$ mit der komplexen Zahl $z = x + iy$, dann wird

$$A(z) = i \left[\alpha z - \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{1}{\bar{z} - \bar{z}_{mn}} \right]. \quad (9.3)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei angenommen, daß $z_{mn} = na + ma e^{i\pi/3}$ ist, a reell, positiv. Dann wird wegen (3.16)

$$A(z) = i \left[\alpha z - \frac{1}{a} \zeta \left(\frac{\bar{z}}{a} \right) \right]. \quad (9.4)$$

Die Gitterkonstante a wird sich dabei so einstellen, daß die folgende physikalisch sinnvolle Periodizitätsbedingung erfüllt ist.

$$A(z + z_{mn}) = A(z). \quad (9.5)$$

Wegen (3.4) folgt daraus

$$\alpha z - \frac{1}{a} \zeta \left(\frac{\bar{z}}{a} \right) = \alpha z + \alpha z_{mn} - \frac{1}{a} \zeta \left(\frac{\bar{z}}{a} \right) - \frac{1}{a^2} \frac{2\pi}{\sqrt{3}} z_{mn},$$

also

$$\alpha z_{mn} = \frac{1}{a^2} \frac{2\pi}{\sqrt{3}} z_{mn},$$

folglich

$$a^2 = \frac{2\pi}{\alpha\sqrt{3}}. \quad (9.6)$$

Nun ist das Magnetfeld gerade

$$H = \text{rot } A(r) = (0, 0, 2\alpha)^\top, \quad (9.7)$$

somit ist 2α das angelegte äußere Feld. (9.6) besagt, daß die Flußwirbel bei Vergrößerung der Feldstärke des angelegten Feldes zusammenrücken. Insgesamt ist

$$A(z) = i \left[\frac{2\pi}{a^2\sqrt{3}} z - \frac{1}{a} \zeta \left(\frac{\bar{z}}{a} \right) \right]. \quad (9.8)$$

Der Ausdruck (9.8) kann mit den beschriebenen Methoden gut berechnet werden.

Formt man die Gorkovschen Gleichungen in der Eilenbergerschen Formulierung [3] in ein System von Integralgleichungen um, dann tritt dabei eine Funktion $\varphi(\rho)$ auf, die auf die folgende Weise definiert ist: Sei $\hat{k}_\perp = (\cos \vartheta, \sin \vartheta, 0)^\top$ eine fest vorgegebene Richtung in der x - y -Ebene, r ein fest vorgegebener Vektor mit z -Komponente Null und ρ eine reelle Zahl. Damit ist (in Vektorschreibweise)

$$\varphi(\rho) = \exp \left[i \int_0^\rho \hat{k}_\perp A(r + \eta \hat{k}_\perp) d\eta \right]. \quad (9.9)$$

In diesen Ausdruck kann man die Gittersumme (9.2) einsetzen und gliedweise integrieren. Dabei ergeben sich einige Vereinfachungen. Es ist

$$\begin{aligned} \hat{k}_\perp A(r + \rho \hat{k}_\perp) &= \alpha \hat{k}_\perp e_z \times r + \rho \alpha \hat{k}_\perp e_z \times \hat{k}_\perp - \sum_{m,n} \frac{\hat{k}_\perp e_z \times (r + \rho \hat{k}_\perp - r_{mn})}{|r + \rho \hat{k}_\perp - r_{mn}|^2} = \\ &= \alpha \hat{k}_\perp e_z \times r - \frac{\hat{k}_\perp e_z \times r}{|r + \rho \hat{k}_\perp|^2} - \sum^{(6)} \frac{\hat{k}_\perp e_z \times r - \hat{k}_\perp e_z \times r_{mn}}{|r + \rho \hat{k}_\perp - r_{mn}|^2}. \end{aligned} \quad (9.10)$$

Man sieht leicht, daß dieser Ausdruck für alle ρ nichtsingulär ist. Wir betrachten ohne Beschränkung der Allgemeinheit den Fall $r + \rho \hat{k}_\perp = 0$. Der erste Summand und die Summe in (9.10) sind dann nichtsingulär. Wenn $r + \rho \hat{k}_\perp = 0$ ist, muß r parallel zu $\hat{k}_\perp$ sein, also verschwindet der mittlere Term. In komplexer Schreibweise entspricht $\hat{k}_\perp A(r)$, wenn man $\hat{k}_\perp$ mit $e^{i\vartheta}$ identifiziert, der Realteil von

$$g(z) = e^{i\vartheta} \overline{A(z)} = -ie^{i\vartheta} \left(\alpha \bar{z} - \frac{1}{a} \zeta \left(\frac{z}{a} \right) \right), \quad (9.11)$$

und es ist

$$\begin{aligned} \int_0^\rho g(z + \eta e^{i\vartheta}) d\eta &= -i\alpha e^{i\vartheta} \rho \bar{z} - \frac{i\alpha \rho^2}{2} + i \ln(z + \rho e^{i\vartheta}) - i \ln z + \\ &+ i \sum^{(6)} [\ln(z + \rho e^{i\vartheta} - aw) - \ln(z - aw)]. \end{aligned} \quad (9.12)$$

Damit hat man

$$h(\sigma) := \exp \left[i \int_0^\rho g(z + \eta e^{i\vartheta}) d\eta \right] = \exp \left[\alpha e^{i\vartheta} \rho \bar{z} + \frac{\alpha \rho^2}{2} \right] \frac{\sigma(z)}{\sigma(z + \rho e^{i\vartheta})}, \quad (9.13)$$

wobei $\sigma(z) = \sigma(a; z)$.

Nach Definition (9.9) ist

$$\varphi(\rho) = \exp \left[i \Re \int_0^\rho g(z + \eta e^{i\vartheta}) d\eta \right], \quad (9.14)$$

also wird

$$h(\rho) = |h(\rho)| \varphi(\rho). \quad (9.15)$$

Setzt man $z = x + iy$, so wird schließlich

$$\varphi(\rho) = \exp [i\alpha \rho (x \sin \vartheta - y \cos \vartheta)] \frac{\sigma(z)}{\sigma(z + \rho e^{i\vartheta})} \frac{|\sigma(z + e^{i\vartheta})|}{|\sigma(z)|}. \quad (9.16)$$

Auch diese Funktion kann man mit den beschriebenen Methoden schnell und zuverlässig ausrechnen.

Ähnliche physikalische Verhältnisse liegen vor, wenn man superfluides Helium II in einem (unendlich großen) Gefäß rotieren läßt [6]. Es bilden sich dann ebenfalls Wirbel aus, und man kann zeigen, daß eine Anordnung der Wirbel in einem regelmäßigen hexagonalen Gitter energetisch am günstigsten ist [11].

Anhang A

Tabellenanhang

Tabelle I: Die Laurent-Koeffizienten a_r .

r	a_r
1	−5.86303 16934 25401 59847
2	−6.00963 99716 97680 49365
3	−5.99971 83563 70525 93430
4	−6.00001 16475 79779 74209
5	−5.99999 95874 35533 01811
6	−6.00000 00155 74366 53236
7	−5.99999 99994 27769 85556
8	−6.00000 00000 21265 56323
9	−5.99999 99999 99213 52073
10	−6.00000 00000 00029 15411

Tabelle II: Die Koeffizienten α_r .

r	α_r
0	1.00000 00000 00000 00000
1	− 0.97717 19489 04233 59974
2	− 0.02337 08221 12157 64728
3	0.00054 20620 96170 40207
4	0.00000 07054 61596 63147
5	0.00000 00034 64129 89887
6	− 0.00000 00000 05503 54106
7	− 0.00000 00000 00002 14435
8	− 0.00000 00000 00000 00018

Tabelle III: Die Koeffizienten $\sigma_N^{(k)}$.

N/k	5	7	9	11	13	15	17
1	3.693 -2	8.350 -3	2.009 - 3	4.942 - 4	1.228 - 4	3.059 - 5	7.638 - 6
2	5.678 -3	5.368 -4	5.527 - 5	5.908 - 6	6.431 - 7	7.066 - 8	7.804 - 9
3	1.563 -3	7.954 -5	4.463 - 6	2.624 - 7	1.581 - 8	9.665 -10	5.959 -11
4	5.860 -4	1.850 -5	6.479 - 7	2.391 - 8	9.085 -10	3.515 -11	1.375 -12
5	2.660 -4	5.695 -6	1.359 - 7	3.427 - 9	8.925 -11	2.373 -12	6.390 -14
6	1.374 -4	2.123 -6	3.664 - 8	6.700 -10	1.268 -11	2.453 -13	4.816 -15
7	7.787 -5	9.084 -7	1.186 - 8	1.642 -10	2.357 -12	3.462 -14	5.167 -16
8	4.735 -5	4.316 -7	4.405 - 9	4.777 -11	5.373 -13	6.191 -15	7.257 -17
9	3.042 -5	2.225 -7	1.824 - 9	1.590 -11	1.439 -13	1.334 -15	1.261 -17
10	2.042 -5	1.225 -7	8.237 -10	5.894 -12	4.382 -14	3.341 -16	2.61 -18
20	1.413 -6	2.237 -9	3.980 -12	7.547 -15	1.492 -17	—	—

Für größere N und k verwendet man zweckmäßigerweise die Abschätzung

$$\sigma_N^{(k)} \leq \frac{1}{N^{k-1}} \zeta_0(k)$$

Tabelle IV: Die Koeffizienten c_m und γ_m .

m	c_m	γ_m	$c_m \gamma_m$
1	8.334 - 2	1.328 + 2	1.107 +1
2	1.389 - 3	1.275 + 4	1.770 +1
3	3.307 - 5	1.869 + 6	6.181 +1
4	8.268 - 7	3.888 + 8	3.214 +2
5	2.088 - 8	1.089 +11	2.273 +3
6	5.285 -10	3.948 +13	2.087 +4
7	1.339 -11	1.801 +16	2.410 +5
8	3.390 -13	1.009 +19	3.418 +6
9	8.587 -15	6.802 +21	5.840 +7
10	2.175 -16	5.441 +24	1.184 +9

Tabelle V: Die Koeffizienten b_k des Zählerpolynoms $P(z)$ der Entwicklung (7.2) für $N = 30$ und $m = 4$.

k	b_k				
0	2.28280	51095	74960	91428	− 2
1	− 1.08554	85084	54859	29133	− 3
2	− 2.12645	27241	14374	04084	− 6
3	− 1.38338	93593	91642	44778	− 8
4	2.75323	51787	34619	36420	−11
5	1.28601	97116	26861	63324	−14
6	1.31544	66960	83880	48252	−18

Tabelle VI: Die Koeffizienten des Nennerpolynoms $Q(z)$ der Entwicklung (7.2).

k	β_k				
0	1.00000	00000	00000	00000	
1	2.28277	67424	10053	04838	− 2
2	− 5.42777	49202	26446	35011	− 4
3	− 7.08766	25117	60430	66171	− 7
4	− 3.45842	31342	56285	51765	− 9
5	5.50666	65687	87979	98146	− 12
6	2.14310	58385	13686	98748	− 15
7	1.87834	10824	52170	28925	− 19

Der Fehler bei Vernachlässigung aller Glieder im $k \geq 5$ in Zähler und Nenner ist kleiner als $1.202 \cdot 10^{-12}$.

Tabelle VII: Die Koeffizienten $\alpha_k^{(20)}$ der Entwicklung der σ -Funktion.

k	$\alpha_k^{(20)}$				
0	1.00000	00000	00000	00000	
1	− 9.77172	23257	58994	69516	− 1
2	− 2.33705	44916	12317	51188	− 2
3	5.42068	72577	14685	91945	− 4
4	7.05307	82804	17867	80653	− 7
5	3.46392	98008	25073	49763	− 9
6	− 5.50452	34629	49466	29447	− 12
7	− 2.14291	80044	05441	77045	− 15

$$K_{20}^{(4)} = 2.83671 \ 64907 \ 86591 \cdot 10^{-7}.$$

Fehler bei Vernachlässigung aller Glieder mit $k \geq 7$: $\leq 5.641 \cdot 10^{-14}$ (absoluter Fehler).

Literaturverzeichnis

- [1] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun, editors. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover Publications, Inc., New York, 1965.
- [2] A. A. Abrikosov. On the magnetic properties of superconductors of the second group. *Soviet Physics JETP*, 32:1174–1182, 1957.
- [3] G. Eilenberger. Transformation of Gorkov’s equation for type II superconductors into transport-like equations. *Z. Physik*, 214:195–213, 1968.
- [4] Otto Emersleben. Ein einfacher Weg zur Berechnung der Weierstraßschen Sigmafunktion. *Z. Angew. Math. Mech.*, 44:T14–T17, 1964.
- [5] Otto Emersleben. Erweiterung des Konvergenzbereichs einer Potenzreihe durch Herausnahme von Singularitäten, insbesondere zur Berechnung einer Zetafunktion zweiter Ordnung. *Mathematische Nachrichten*, 31:195–220, 1966.
- [6] R. P. Feynman. Application of quantum mechanics to liquid Helium. In C. J. Gorter, editor, *Progress in Low Temperature Physics I*, pages 17–53. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1957.
- [7] Ernst Graeser. *Einführung in die Theorie der elliptischen Funktionen und deren Anwendungen*. Verlag von R. Oldenbourg, München, 1950.
- [8] Alfred George Greenhill. *The Applications of Elliptic Functions*. Dover Publications, Inc., New York, 1959.
- [9] W. Magnus and F. Oberhettinger. *Anwendung der elliptischen Funktionen in Physik und Technik*. Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen, Bd. LV. Springer-Verlag, Berlin, Göttingen, Heidelberg, 1949.
- [10] A. H. Scholz. Anwendung der Modellvorstellung eines unendlich ausgedehnten Ionenkristalls zur Bestimmung des Einflusses der Kristalloberfläche auf die Gitterenergie eines endlichen Makrokristalls mit einer Leerstelle im Inneren. Technical Report Jül-762-MA, Berichte der KFA Jülich, Mai 1971.
- [11] В. К. Ткаченко. О вихревых решетках. Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики, 49:1875–1883, 1965.
- [12] Francesco Tricomi. *Elliptische Funktionen. Übersetzt und bearbeitet von Dr. Maximilian Krafft*. Mathematik und ihre Anwendungen in Physik und Technik, Reihe A, Band 20. Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig, Leipzig, 1948.