第6章 総和公式

数列の総和を評価するにあたり、その数列を連続関数で置き換え、離散的な総和の代わりに連続関数を定積分することで大まかな値を評価できる。例えば、1/k を k が 1 から 500 までにわたって加算した総和を評価する代わりに、連続関数 1/x を積分変数 x について区間 [1,500] で定積分をしても近い値が得られる。しかし、総和と積分の間には誤差が生じる。その誤差をオイラー・マクローリンの総和公式によって評価できる。

6.1 オイラー・マクローリンの総和公式

オイラー・マクローリンの総和公式は、離散的な総和と連続関数の定積分の関係を記述するために、オイラーとマクローリンが独立に導いた公式である。本節では、オイラー・マクローリンの総和公式を導出し、その典型的な用途として、調和級数の評価や階乗の漸近展開を取り扱う。

関数 f(x) の変数に整数 j を代入した値 f(j) を,ある範囲の整数にわたって総和 $\sum f(j)$ を評価することを考えよう。関数 f(x) が解析的に積分可能であれば,総和の粗い評価として f(x) の積分を用いてもよいことが図 6.1 から推測できる。図に描いた曲線が関数 f(x) であり,網掛けの面積が f(x) を区間 [0,n] で積分した結果である。 一方,そのグラフに重ねて描いた長方形の面積の総和が整数 j を 1 から N まで増加しながらとった f(j) の総和である。この図から,関数 f(x) の導関数が小さければ,積分と総和はほぼ等しくなることがわかる。

例えば 1/j を $j=1,2,\ldots,n$ まで増加させた総和は, 1/x を [1,n] で積分した $\log n$ に近い値であることが予想できる*ということである。実際には, 総和と積分は異なる値となる。その総和と積分の関係は,

$$\sum_{j=1}^{n} f(j) = \int_{0}^{n} f(x) dx + \frac{1}{2} [f(n) - f(0)] + \sum_{k=2}^{m} \frac{B_{k}}{k!} [f^{(k-1)}(n) - f^{(k-1)}(0)] + R_{m}(n),$$
(6.1)

^{*}整数 n が十分に大きな数であれば、オイラー数 γ を用いて $\sum_{i=1}^{n} 1/j \simeq \log n + \gamma$ となる。

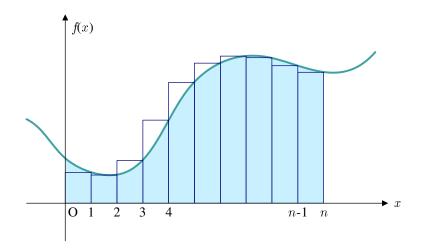


図 6.1: 関数 f(x) の積分と f(j) の総和の関係

なる形で記述される。この公式がオイラー・マクローリンの総和公式である。ただし, $R_m(n)$ は剰余項であり,

$$R_m(n) = \frac{(-1)^{m-1}}{m!} \int_0^n \tilde{B}_m(x) f^{(m)}(x) dx,$$

のように定義される。さらに、 $\tilde{B}_m(x)$ は前節で導入した周期ベルヌーイ多項式である。周期ベルヌーイ多項式 $\tilde{B}_m(x)$ は区間 [0,1) を繰り返す多項式であり、

$$\tilde{B}_m(x+1) = \tilde{B}_m(x), \quad \tilde{B}_m(x) = B_m(x) \quad (0 \le x < 1),$$

なる関係を満足する。ここで、 $B_m(x)$ は前節で紹介したベルヌーイ多項式である。ベルヌーイ数が $k \le 1$ に対して $B_{2k+1} = 0$ であることに注意すると、オイラー・マクローリンの総和公式 (6.1) は、

$$\sum_{j=1}^{n} f(j) = \int_{0}^{n} f(x) dx + \frac{1}{2} [f(n) - f(0)] + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(n) - f^{(2k-1)}(0)] + R_{2m}(n),$$
(6.2)

のように書き換えることができる。総和の範囲をもう少し一般化して,

$$\sum_{j=a+1}^{b} f(j) = \int_{a}^{b} f(x) dx + \frac{1}{2} [f(b) - f(a)] + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)] + R_{2m}(a,b),$$
 (6.3)

という記述も可能である。なお、この場合の剰余項は、

$$R_{2m}(a,b) = -\frac{1}{(2m)!} \int_a^b \tilde{B}_{2m}(x) f^{(2m)}(x) dx,$$

のように定義されているとする。この剰余項は $R_{2m}(a,b) = R_{2m}(b) - R_{2m}(a)$ であると考えてもよい。本書での総和公式の適用において、積分区間の開始点 a は定数であることが多い。その場合、 $R_{2m}(a,b)$ の代わりに、積分区間の開始点 a の記載を省略し、 $R_{2m}(b)$ と記述する。一般化した記述 (6.3) は、次項で示す導出過程から明らかになるだろう。または、公式 (6.2) について、 $x\mapsto x+a$ のように置き換え、n+a=b を代入すれば、(6.3) が得られるはずだ。

6.1.1 公式の導出

本項では、オイラー・マクローリンの公式を導出する。公式の導出は、n=1 の場合について限定して証明し、n を任意の自然数に拡張するという 2 段階のステップを実行する。

第1ステップとして, n=1 の場合に限定して証明してみよう。その場合, 証明する関係式は,

$$\frac{1}{2}\left[f(1) + f(0)\right] = \int_0^1 f(x) \, \mathrm{d}x + \sum_{k=2}^m \frac{B_k}{k!} \left[f^{(k-1)}(n) - f^{(k-1)}(0)\right] + R_m(1),\tag{6.4}$$

であり、そのときの剰余項は、

$$R_m(1) = \frac{(-1)^{m-1}}{m!} \int_0^1 \tilde{B}_m(x) f^{(m)}(x) dx,$$

のように計算される。剰余項を含めて(6.4)の右辺を計算すると、

RHS of (6.4) =
$$\int_0^1 f(x) dx - \int_0^1 \left(x - \frac{1}{2}\right) f'(x) dx$$

= $\frac{1}{2} \int_0^1 f'(x) dx = \frac{1}{2} \left[f(1) - f(0) \right] = \text{LHS of (6.4)},$

となるので, m=1 の条件でオイラー・マクローリンの公式が成立していることがわかる。 次に, 部分積分を適用して剰余項 R_m を計算する。剰余項は,

$$R_{m}(1) = \frac{(-1)^{m-1}}{m!} \int_{0}^{1} \tilde{B}_{m}(x) f^{(m)}(x) dx$$

$$= \frac{(-1)^{m-1}}{(m+1)!} \left[\tilde{B}_{m+1}(x) f^{(m)}(x) \right]_{0}^{1} - \frac{(-1)^{m-1}}{(m+1)!} \int_{0}^{1} \tilde{B}_{m+1}(x) f^{(m+1)}(x) dx$$

$$= \frac{(-1)^{m-1} B_{m+1}}{(m+1)!} \left[f^{(m)}(1) - f^{(m)}(0) \right] + \frac{(-1)^{m}}{(m+1)!} \int_{0}^{1} \tilde{B}_{m+1}(x) f^{(m+1)}(x) dx$$

$$= \frac{(-1)^{m-1} B_{m+1}}{(m+1)!} \left[f^{(m)}(1) - f^{(m)}(0) \right] + R_{m+1}(1),$$

と計算される。例えば、m=1における剰余項 R_1 に対してこの計算結果を適用すると、

$$R_{1}(1) = \frac{B_{2}}{2!} [f'(1) - f'(0)] + R_{2}$$

$$= \frac{B_{2}}{2!} [f'(1) - f'(0)] + \frac{B_{3}}{3!} [f^{(2)}(1) - f^{(2)}(0)] + R_{3}$$

$$= \sum_{k=2}^{m} \frac{B_{m}}{m!} [f^{(m-1)}(1) - f^{(m-1)}(0)] + R_{m}(1),$$

が得られる。つまり、剰余項に対して部分積分を繰り返していくことによって、n=1のときのオイラー・マクローリンの総和公式 (6.4) が成立することが導かれた。

第 2 ステップとして, 任意の自然数 a を用いて, 証明された公式 (6.4) に関して f(x) を f(x+a) で置き換える。すると, その総和公式 (6.4) は,

$$f(a+1) = \int_{a}^{a+1} f(x) dx + \frac{1}{2} [f(a+1) - f(a)]$$

+
$$\sum_{k=2}^{m} \frac{B_k}{k!} [f^{(k-1)}(a+1) - f^{(k-1)}(a)] + R_m(a+1) - R_m(a),$$

のように書き換えることができる。この結果に対し, a を 0 から n-1 まで増加させて和をとると, オイラー・マクローリンの総和公式 (6.1) が得られる。また, 容易にわかるように, 公式 (6.1) は,

$$\sum_{j=a+1}^{n} f(j) = \int_{a}^{n} f(x) dx + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{k}}{k!} \left[f^{(k-1)}(n) - f^{(k-1)}(a) \right] + R_{m}(n) - R_{m}(a), \quad (6.5)$$

のように書き換えることができる。なお, $B_1 = -1/2$ なる事実を用いた。この関係式が, 総和の範囲を一般化した公式 (6.3) である。よって, オイラーマクローリンの公式が導出できた。 \P

オイラー・マクローリンの総和公式は便利な公式であるが万能ではなく, 取り扱いに注意を要する。その公式の使用において, 剰余項 $R_m(n)-R_m(a)$ を除く右辺の項は左辺の近似式として解釈される。つまり, 剰余項は誤差として取り扱われるわけだが, 次数 m を増加させると, ほとんどの場合において, 誤差を表す剰余項が発散するからである。前節で導出した周期ベルヌーイ多項式の絶対値に関する法則 $|\tilde{B}_m(x)| \leq 2m!/(2\pi)^m$ を考慮して, 剰余項の絶対値の範囲を計算すると,

$$|R_m(n) - R_m(a)| = \frac{1}{m!} \int_a^n \tilde{B}_m f^{(m)}(x) dx$$

$$\leq \frac{2}{(2\pi)^m} \int_a^n f^{(m)}(x) dx,$$

となる。テイラー級数の剰余項の分母にm!が含まれていたことと比べると、オイラー・マクローリンの総和公式の剰余項が発散しやすいことがわかるだろう。

6.1.2 べき乗和への応用

オイラー・マクローリンの公式の応用として、整数の3乗和を計算してみよう。そのために $f(x)=x^3$ とおいてみる。この関数を微分してみると、 $f'(x)=3x^2$ 、 $f^{(2)}(x)=6x$ 、 $f^{(3)}(x)=6$ となり、4階以上の導関数がゼロとなるので、整数の3乗和はオイラー・マクローリンの総和公式において4次以上の剰余項は必ずゼロとなる。具体的に計算してみると、計算結果は

$$\sum_{j=1}^{n} j^{3} = \int_{1}^{n} x^{3} dx + \frac{n^{3} + 1}{2} + \sum_{k=2}^{3} \frac{B_{k}}{k!} \left[f^{(k-1)}(n) - f^{(k-1)}(1) \right]$$
$$= \frac{n^{4} - 1}{4} + \frac{n^{3} + 1}{2} + \frac{n^{2} - 1}{4} = \frac{1}{4} n^{2} (n+1)^{2},$$

となり、よく知られた整数の3乗和の公式と一致する。この場合、剰余項は、

$$R_4(n) = \int_0^n \tilde{B}_4(x) f^{(4)}(x) dx,$$

となる。この例では、必ず、 $f^{(4)}(x) = 0$ となるので剰余項はゼロである。その理由で、上記のオイラー・マクローリンの総和公式の適用結果には剰余項の記述を省略したのだ。

得られた結果に対し, $n\to\infty$ の極限をとると, j^3 の総和は発散する。当然の性質であるが, j^3 の無限級数が発散級数であることを意味する。第 6.1.6 項に発散級数にオイラー・マクローリンの総和公式を適用し, 有限の値となるゼータ関数に結びつける手法について説明する。

6.1.3 階乗の漸近形式

オイラー・マクローリンの総和展開に適用する関数を $f(x) = \log x$ とすると、 階乗の漸近公式を得ることができる。 なぜなら、総和公式が評価する値が、 $\log 1 + \log 2 + \cdots + \log n = \log n!$ となるからだ。 階乗 n! は n の増加とともにすさまじい勢いで増加する関数であるだけでなく、 1 から n まで順次に乗じて計算する関数であるので、 大きな n に対して n! を計算することは現実的でないことがある。 その意味で、 階乗の漸近展開を得ることに大きな意味がある。

関数 $f(x) = \log x$ を対象とし、高次導関数を計算すると、 $f^{(m)}(x) = (-1)^{m-1}(m-1)!/x^m$ となることが容易にわかる。対象関数をこのように定義すると、f(0) が発散するため、公式 (6.2) は使えない。その代わりに (6.3) を利用すればよい。オイラーマクローリンの総和公式で取り扱う関数は、階乗 n! の対数:

$$\log n! = \sum_{j=1}^{n} \log j = \sum_{j=2}^{n} \log j,$$

である。この等式が成立するのは $\log 1 = 0$ であることが理由である。オイラー・マクローリンの総和公式を適用すると、

$$\sum_{j=2}^{n} \log j = n \log n - n + 1 + \frac{1}{2} \log n + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{2k(2k-1)} \left(\frac{1}{n^{2k-1}} - 1 \right) + R_{2m}(n),$$
(6.6)

が得られる。定義にしたがって剰余項 $R_{2m}(n)$ を記述すると、

$$R_{2m}(n) = \frac{1}{2m} \int_{1}^{n} \frac{\tilde{B}_{2m}(x)}{x^{2m}} dx,$$

となる。剰余項 $R_{2m}(n)$ は, n に依存する項と依存しない項に分離することができる。その分離方法は任意であり、一例として、

$$R_{2m}(n) = \frac{1}{2m} \left(\int_2^{n-1} \frac{\tilde{B}_{2m}(x)}{x^{2m}} dx + \int_1^2 \frac{\tilde{B}_{2m}(x)}{x^{2m}} dx \right),$$

なる数式を挙げることができる。右辺の第1項はnに依存し、第2項はnに依存しない。とはいえ,第1項はさらにnに依存する項と依存しない項に分離できるので,nにしか依存しない項を抽出するのは一般的には困難である。後に示すように, $R_{2m}(\infty)$ が有限の値であれば,その値をnに依存しない項とすることが有効である。

オイラー・マクローリンの公式を適用した数式 (6.6) から $\log n!$ を得ることができる。具体的に数式を記述すると、

$$\log n! = n \log n - n + \frac{1}{2} \log n + C_n + \frac{1}{12n} - \frac{1}{360n^3} + \frac{1}{1260n^5} + \cdots,$$

が得られる。ここで, C_n は剰余項 $R_{2m}(n-1)$ のうち, n に依存しない係数項である。この場合, 剰余項を完全に n の依存項と, 係数項に分離したときの係数項を意味する。上で述べたように, 係数項 C_n を抽出するのが困難であるので, 後に, 数学的な考察によって C_n を決定する。未知数 C_n を残したまま n! を記述すると,

$$n! = n^n e^{-n} \sqrt{n} e^{C_n} \exp\left(\frac{1}{12n} - \frac{1}{360n^3} + \frac{1}{1260n^5} + \cdots\right),\tag{6.7}$$

なる式が得られる。さらに、指数関数 $\exp(1/12n - \cdots)$ をマクローリン展開してみよう。 指数関数のマクローリン展開の各項を 1/n の 5 次の項まで計算すると、

$$\frac{1}{1!} \left(\frac{1}{12n} - \dots \right)^1 = \frac{1}{12n} - \frac{1}{360n^3} + \frac{1}{1260n^5} + \dots$$

$$\frac{1}{2!} \left(\frac{1}{12n} - \dots \right)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{144n^2} - \frac{2}{4320n^4} + \dots \right) = \frac{1}{288n^2} - \frac{1}{4320n^4} + \dots$$

$$\frac{1}{3!} \left(\frac{1}{12n} - \dots \right)^3 = \frac{1}{6} \left(\frac{1}{1728n^3} - \frac{3}{51840n^5} + \dots \right) = \frac{1}{10368n^3} - \frac{1}{103680n^5} + \dots$$

$$\frac{1}{4!} \left(\frac{1}{12n} - \dots \right)^4 = \frac{1}{24} \left(\frac{1}{20736n^4} - \dots \right) = \frac{1}{497664n^4} - \dots$$

$$\frac{1}{5!} \left(\frac{1}{12n} - \dots \right)^5 = \frac{1}{120} \left(\frac{1}{248832n^5} - \dots \right) = \frac{1}{29859840n^5} - \dots,$$

を得る。これらの結果を加算すると指数関数がマクローリン展開でき,

$$n! = n^{n}e^{-n}\sqrt{n} e^{C_{n}} \left(1 + \frac{1}{12n} + \frac{1}{288n^{2}} - \frac{139}{51840n^{3}} - \frac{571}{2488320n^{4}} + \frac{163879}{209018880n^{5}} + \cdots \right),$$

が得られる。係数 C_n の決定には, ウォリス積:

$$\frac{\pi}{2} = \prod_{k=1}^{\infty} \frac{(2k)^2}{(2k-1)(2k+1)},$$

が有用である。ウォリス積を変形すると,

$$\frac{\pi}{2} = \lim_{n \to \infty} \frac{2^{4n} (n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^2},$$

と書き直すことができる。この式に、階乗の漸近形式 $n! \simeq n^n e^{-n} \sqrt{n} \, e^{C_n}$ を代入すると、 $e^{C_n} = \sqrt{2\pi}$ が得られる。よって、上の式は

$$n! = n^{n} e^{-n} \sqrt{2\pi n} \left(1 + \frac{1}{12n} + \frac{1}{288n^{2}} - \frac{139}{51840n^{3}} - \frac{571}{2488320n^{4}} + \frac{163879}{209018880n^{5}} + \cdots \right), \tag{6.8}$$

のように書き換えることができる。この結果はスターリングの公式と呼ばれる。スターリングの公式のゼロ次近似 $(n! \simeq \sqrt{2\pi n} \ n^n e^{-n})$ を表 6.1 に示す。この表によると, n=100 で 10 進 2 桁程度の精度が得られている。変数が 10^8 になると 10 進 9 桁程度の精度となる。

表 6.1 に示すように、 階乗は変数の増加とともにすさまじい勢いで増加するので、この公式よりも、 $\log n!$ の方が取り扱いやすいかもしれない。 数式 (6.7) の対数をとると、

$$\log n! = n \left(\log n - 1\right) + \log \sqrt{2\pi n} + \frac{1}{12n} - \frac{1}{230n^3} + \frac{1}{1260n^5} + \cdots$$
 (6.9)

が得られる。統計力学のように、非常に大きな n (10^{23} のオーダ) を取り扱う場合、右辺の第 2 項以降は無視できるとみなされ、 $\log n! \simeq n (\log n - 1)$ のように近似される。

スターリングの公式の導出において、剰余項を含め、n に依存しない項の総和が収束すると仮定した。その仮定のもとでは、剰余項のうちn に依存する部分がスターリングの公

表 6.1: スターリングの公式のゼロ次近似

n	n!	$\sqrt{2\pi n} \ n^n e^{-n}$
10^{1}	3.6288000000×10^6	3.5986956187×10^6
10^{2}	$9.3326215443 \times 10^{157}$	$9.3248476252 \times 10^{157}$
10^{3}	$4.0238726007 \times 10^{2567}$	$4.0235372920 \times 10^{2567}$
10^{4}	$2.8462596809 \times 10^{35659}$	$2.8462359621 \times 10^{35659}$
10^{5}	$2.8242294079 \times 10^{456573}$	$2.8242270544 \times 10^{456573}$
10^{6}	$8.2639316883 \times 10^{5565708}$	$8.2639309996 \times 10^{5565708}$
10^{7}	$1.2024234005 \times 10^{65657059}$	$1.2024233904 \times 10^{65657059}$
10^{8}	$1.6172037949 \times 10^{756570556}$	$1.6172037935 \times 10^{756570556}$

式の誤差となる。つまり、その誤差は、

$$|R_{2m}(n) - R_{2m}(\infty)| = \left| \frac{1}{(2m)!} \int_{n}^{\infty} \tilde{B}_{2m}(x) \frac{(2m-1)!}{x^{2m}} dx \right|$$

$$\leq \frac{2(2m-2)!}{(2\pi)^{2m} n^{2m-1}},$$

となるのでmを限りなく増加させるとオイラー・マクローリンの公式は発散する。しかし、mを十分大きくとっても、n>mであれば誤差は十分に小さくなる。よって、スターリングの公式の有効条件はmが漸近展開の次数mより大きいことである。

6.1.4 オイラー定数

オイラー・マクローリンの公式を利用すると、オイラー定数を計算することができる。オイラー定数は本書で何度も取り扱った $\gamma \simeq 0.57721566\dots$ である。この定数は、無理数かどうかも不明な定数であるが、本項でその計算方法の一例を示す。オイラー定数は、調和級数と対数の差、すなわち、

$$\gamma = \lim_{n \to \infty} \left(\sum_{j=1}^{n} \frac{1}{j} - \log n \right),$$

で定義される。積分公式から、1/x の原始関数が $\log x$ であるので、1/j の総和は $\log n$ に近い値となる。具体的に上にあげた数式が $n \to \infty$ の極限で収束することは第 4 章で示した。

オイラー定数 γ を得るには、オイラー・マクローリンの総和公式に適用する関数を f(x) = 1/x とし、j = 1, 2, ..., n にわたる総和を、

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{1}{j} = 1 + \sum_{j=2}^{n} \frac{1}{j},$$

のように考える。右辺をこのように分割したのは、オイラー・マクローリンの総和公式の適用において、分割をしなければ f(0) が必要になるので都合が悪いからである。右辺を分割したことによって、右辺の第 2 項に対して、オイラー・マクローリンの公式 (6.3) を適用することになるので、幸いにも、f(0) を使わないでもよくなるのだ。対象となる関数 f(x) の高階の導関数は $f^{(m)}(x) = (-1)^m m!/x^{m+1}$ となる。これらに注意すると、オイラー・マクローリンの総和公式は、

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{1}{j} = 1 + \sum_{j=2}^{n} \frac{1}{j}$$

$$= 1 + \log n + \frac{1}{2n} - \frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{2k} \left(1 - \frac{1}{n^{2k}} \right) + R_{2m}(n), \tag{6.10}$$

となる。一方, 剰余項 $R_{2m}(n)$ は,

$$R_{2m}(n) = -\frac{1}{(2m)!} \int_1^n \frac{(2m)! \, \tilde{B}_{2m}(x)}{x^{2m+1}} \, \mathrm{d}x,$$

のように定義される。剰余項の被積分関数に周期ベルヌーイ多項式 $\tilde{B}_{2m}(x)$ が含まれているので、任意のmに対して解析的に積分を実行するのは容易ではない。その代わり、

$$|B_{2m}(x)| \le \frac{2(2m)!}{(2\pi)^{2m}} \zeta(2m),$$

であることを利用すると、

$$|R_{2m}(n)| < \frac{4m(2m)!}{(2\pi n)^{2m}}\zeta(2m),$$

なる関係が導かれる。この関係式より, $n \ge m$ なる n を選び, そのうえで m を十分に大きくとれば, 剰余項をゼロに近づけることができる。オイラー・マクローリンの総和公式から導出した (6.11) に対して, $n \to \infty$ の極限をとると,

$$\log n + \gamma = \log n + \frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{2k}, \tag{6.11}$$

が得られる。この極限 (6.11) から即座に γ が計算できそうであるが, そうはいかない。なぜなら, $B_k/2k$ が k の増加とともに, 階乗と同程度の速度で増加するからである。一方, (6.10) と (6.11) の差をとると,

$$\gamma = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{j} - \log n - \frac{1}{2n} + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{2k n^{2k}} - R_{2m}(n),$$

が得られる。その結果、ベルヌーイ数を含む項が $B_{2k}/2kn^{2k}$ になるため、増加が抑制される。上に書いたように $n\gg m$ となるように n を選べば、 $B_{2k}/2kn^{2k}$ は k の増加に対して単調減少する。したがって、n が大きいという条件のもとでオイラー定数は、

$$\gamma = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{j} - \log n - \frac{1}{2n} + \frac{1}{12n^2} - \frac{1}{120n^4} + \frac{1}{252n^6} + \cdots, \tag{6.12}$$

なる漸近形式で計算することができる。ここで、剰余項 $R_{2m}(n-1)$ は十分小さくできるものとして省略した。得られた漸近展開による近似精度を図 6.2 に示す。近似精度と書いたが、実際には -2m-2 次の項の絶対値をプロットした。 このグラフには、n を媒介変

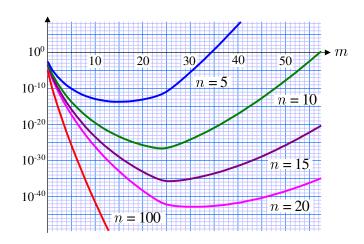


図 6.2: 漸近展開によるオイラー定数の近似精度

数としたときの、打ち切り項数mによる依存性を示している。一般の漸近展開と同様、打ち切り項数を増加すると、途中で誤差が増加に転じる。理屈としては、 $n \gg m$ の関係が崩れると、計算精度の向上が望めないのだ。打ち切り項数mをさらに増加させると誤差が発散する。そのため、実際の数値計算においては、目標精度に応じてnとmを選択することが必要である。このグラフによると、倍精度浮動小数点の精度(10 進数 15 桁)であれば、n=10 で、打ち切り項数m=8 で十分だろう。

図 6.2 で, n=100 とした場合, m=7 で 10 進数 30 桁の精度が得られると予想されている。その近似精度を検証しよう。オイラー定数を計算すると,表 6.2 の結果を得る。表に示す計算結果は,誤差がある桁を淡色表示している。なお, m=0 の近似結果は, (6.12) の右辺の第 3 項まで計算した値である。この数値計算によって,確かに,打ち切り項数 m=7

表 6.2: オイラー定数の計算結果

m	計算結果
0	0.577207331651528892769134766289
1	0.577215664984862226102468099622
2	0.577215664901528892769134766289
3	0.577215664901532861023103020257
4	0.577215664901532860606436353591
5	0.577215664901532860606512111166
6	0.577215664901532860606512090074
7	0.577215664901532860606512090082

で 10 進数 30 桁まで正確に計算できることが実証されている。しかも, m の増加とともに精度向上を追ってみると、図 6.2 との一致が確認できる。

6.1.5 ゼータ関数の計算

前項で、オイラー・マクローリンの総和公式がオイラー定数の計算に有用であることを確認した。オイラー定数の計算は、調和級数に関係する数学定数であるので、高次の調和級数であるゼータ関数の計算にも有用であることが予想できる。本項では、オイラー・マクローリンの総和公式を利用してゼータ関数を計算する。

第4章でゼータ関数の解析をし、整数変数におけるゼータ関数の振る舞いを明らかにしたが、任意の関数における振る舞いには言及していなかった。ゼータ関数 $\zeta(s)$ は s 次の調和級数:

$$\zeta(s) = 1 + \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} + \dots = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s},$$

として定義される。変数sが大きければ定義式でも十分な収束速度を得られる。その場合、 $\zeta(s)$ をちょっくせつ計算する代わりに、s次の交代調和級数:

$$\eta(s) = 1 - \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} - \frac{1}{4^s} + \cdots$$

を利用するとよい。交代調和級数を利用する利点は、誤差見積もりをしやすいことである。例えば、n 項で演算を打ち切ったときの誤差は $1/(n+1)^s$ より小さいことが明らかである。さらに、 $\eta(s)=(1-2^{-s+1})$ $\zeta(s)$ なる関係を利用して、

$$\zeta(s) = \frac{\eta(s)}{1 - 2^{-s+1}},$$

によってゼータ関数を計算するのである。倍精度浮動小数点 (10 進数 15 桁) の演算精度を得るために、10 項程度の打ち切り項数で計算するには s>15 でなければならない。つまり、s<15 については、収束が遅いので他の計算アルゴリズムが必要ということだ。

小さい s についても速く収束させる方法として、オイラー・マクローリンの総和公式を適用してみよう。総和公式を適用するにあたり、 $f(x)=1/x^s$ を設定する。すると、f(x) のm 階の導関数は、

$$f^{(m)}(x) = (-1)^m \frac{s(s+1)(s+2)\cdots(s+m-1)}{x^{s+1}},$$

となる。このような関数の設定によって、マクローリン総和公式は、

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{1}{j^s} = 1 + \sum_{j=2}^{n} \frac{1}{j^s}$$

$$= 1 + \frac{1}{s-1} \left(\frac{1}{n^{s-1}} - 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{n^s} - 1 \right)$$

$$+ \sum_{k=1}^{m} \frac{(-1)^{2k+1} s \left(s+1 \right) \left(s+2 \right) \cdots \left(s+2k-2 \right) B_{2k}}{(2k)!} \left(\frac{1}{n^{s+2k-1}} - 1 \right), \quad (6.13)$$

のように記述できる。この公式について, $n \to \infty$ の極限をとると, オイラー・マクローリンの総和公式は,

$$\zeta(s) = \frac{1}{2} - \frac{1}{s-1} + \sum_{k=1}^{m} \frac{(-1)^{2k+1} s (s+1)(s+2) \cdots (s+2k-2) B_{2k}}{(2k)!}, \tag{6.14}$$

のように書き換えられる。この級数でゼータ関数を計算することは可能だが,mの増加に対して収束が遅いのが問題である。その問題を解決するには,(6.14)から(6.13)を減算するとよい。減算の結果,

$$\zeta(s) = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{j^{s}} + \frac{1}{(s-1)n^{s-1}} - \frac{1}{2n^{s}} + \sum_{k=1}^{m} \frac{s(s+1)(s+2)\cdots(s+2k-2)B_{2k}}{(2k)!n^{s+2k-1}}, \quad (6.15)$$

なる公式が得られる。この公式の使い方としては, j が 1 から n の範囲にわたって $1/j^s$ の総和を計算しておく。得られた総和に, (6.15) の右辺の第 2 項と第 3 項を加算し, 第 4 項に記述する総和によって演算結果を補正する。その補正項の打ち切り項数によって, 図 6.3 に示すように演算精度が変化する。この図は, n=10 の条件で誤差を評価した結果を表している。つまり, 補正項の追加をする前に, 定義式にしたがった加算を 10 項だけ実行している。上で述べたように, ゼータ関数の変数が s=15 のとき, 補正項なしでも 10 進数

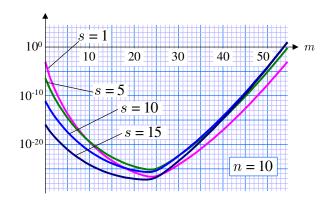


図 6.3: オイラー・マクローリンの総和公式による $\zeta(s)$ 近似精度

15 桁の精度が達成されている。変数 s が小さくなると補正項が必要であるが、それでも、m=8で 10 進数 15 桁の精度は確保できる。

6.1.6 発散級数の評価

ゼータ関数は, $\zeta(s) \equiv 1^{-s} + 2^{-s} + 3^{-s} + \cdots$ のように定義されているので、負の整数変数に対して, $\zeta(-n) = 1^n + 2^n + 3^n + \cdots$ と結びつけられると考えられるかもしれない。しかし、この数式の右辺は発散するので左辺と等号で結ぶのは正しくない。とはいえ、解析接続の結果として、右辺は $\zeta(-n) = -B_{n+1}/(n+1)$ と結びつけられるため、発散級数 $1^n + 2^n + 3^n + \cdots$ と $\zeta(-n)$ の間に何らかの関係があるかもしれない。本項ではその関係性を考察する。

第一に, n=1 の場合, すなわち, $1+2+3+4+\cdots$ なる無限級数について考察しよう。 この級数と $\zeta(-1)$ の関係性を調べるのだ。当然, この級数は発散するので, 加算するにあたり,

$$\sum_{k=0}^{\infty} k \longrightarrow \sum_{k=0}^{\infty} k g(k),$$

のように因数 g(k) を乗じて加算することにする。因数 g(k) を,信号処理の手法にならって窓関数と呼ぶことにしよう。窓関数 g(k) は大きくない k について $g(k) \simeq 1$ であり,十分に大きな k についてべき級数よりも速くゼロに収束するものとする。そのようにすることで,級数の発散を抑えようというのだ。その条件を満たす窓関数として, $g(k) \equiv e^{-\varepsilon k}$ が考えられる。係数 ε として非常に小さな値をとれば,大きくない k について $g(k) \simeq 1$ とすることができ,しかも,指数関数なので,k の増加に対して,どのべき級数よりも速くゼロに収束する。

上の考察にしたがい, k の無限級数の代わりに, $ke^{-\varepsilon k}$ の無限級数を計算しよう。この無限級数の評価のためにオイラー・マクローリンの総和公式を利用するなら, $f(x)\equiv xe^{-\varepsilon x}$ を定義する。定義した関数 f(x) の導関数を順次計算すると,

$$f'(x) = (1 - \varepsilon x) e^{-\varepsilon x} = e^{-\varepsilon x},$$

$$f''(x) = -\varepsilon e^{-\varepsilon x} = 0,$$

$$\vdots$$

$$f^{(m)}(x) = 0 \qquad (m \ge 2),$$

が得られる。この計算において, $\varepsilon \to 0$ の極限をとった。この導関数の計算によると, オイラー・マクローリンの総和公式 (6.2) において, m を大きくとれば剰余項 $R_{2m}(x)$ を確実にゼロにできる。 ここまでに計算した要素をオイラー・マクローリンの総和公式に代入すると,

$$\sum_{j=0}^{\infty} j e^{-\varepsilon j} = \int_0^{\infty} x e^{-\varepsilon x} dx - \frac{1}{12} = \frac{1}{\varepsilon^2} - \frac{1}{12},$$

が得られる。既に述べたように, $\varepsilon \to 0$ なので, この数式の右辺は発散する。そもそも, $1+2+3+\cdots$ が発散級数なので当然である。しかし, 右辺の第1項が勝手に設定したパラメー

次の例として, n=0 の条件で発散級数と $\zeta(-n)$ の関係を考察しよう。その例に相当する無限級数とは, $1+1+1+\cdots$ のように 1 を無限に加算する級数である。当然, この級数に対しても窓関数 $e^{-\varepsilon j}$ を乗じて級数を計算する。その級数計算にオイラー・マクローリンの総和公式を適用するため, 関数 $f(x)=1\cdot e^{-\varepsilon x}$ を定義すればよい。このとき, 導関数を計算すると,

$$f'(x) = -\varepsilon e^{-\varepsilon x} = 0,$$

$$f^{(m)}(x) = (-1)^m \varepsilon^m e^{-\varepsilon x} = 0 \quad (m \ge 2),$$

となる。これらの導関数として, $\varepsilon \to 0$ の極限をとった。つまり, 1 階以上の導関数はすべてゼロである。いうまでもなく, 剰余項 $R_m(x)$ はゼロとなるはずだ。これらの導関数をオイラー・マクローリンの総和公式に適用すると.

$$\sum_{i=0}^{\infty} 1 \cdot e^{-\varepsilon i} = \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon x} \, \mathrm{d}x - \frac{1}{2} \cdot f(0) = \frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{2},$$

が得られる。右辺の第 1 項は発散項であると同時に、 勝手なパラメータ ε に依存する項である。 その ε に依存する項を除くと、 -1/2 (= $\zeta(0)$) が残るのである。

これまでに得られた数式をさらに拡張する意味で、発散級数 $1^p + 2^p + 3^p + \cdots$ について考察しよう。ここで、指数 p は正の整数である。ここでも、 $x \to \infty$ の極限で x のべき級数よりも速くゼロに収束する窓関数として、 $g(x) = e^{-\varepsilon x}$ を仮定する。その窓関数を乗じた関数 f(x) についてオイラー・マクローリンの総和公式を適用する。総和公式を適用するにあたり、導関数を順次計算すると、

$$f'(x) = (px^{p-1} - \varepsilon x^p) e^{-\varepsilon x} = px^{p-1} e^{-\varepsilon x},$$

$$f''(x) = (p(p-1) x^{p-2} - \varepsilon px^{p-1}) e^{-\varepsilon x} = p(p-1) x^{p-2} e^{-\varepsilon x},$$

$$\vdots$$

$$f^{(k)}(x) = p(p-1)(p-2) \cdots (p-k+1) x^{p-k} e^{-\varepsilon x},$$

が得られる。ここで, $\varepsilon \to 0$ の極限をとった。指数 p が整数であるので, $m \ge p+1$ のとき, $f^{(m)}(x) = 0$ とすることが可能だ。つまり, オイラー・マクローリンの総和公式において, $m \ge p+1$ なる m を選べば剰余項 $R_m(x)$ を確実にゼロにできる。得られた情報をオイラー・マクローリンの総和公式に適用すると,

$$\sum_{j=1}^{\infty} j^p e^{-\varepsilon j} = \int_0^{\infty} x^p e^{-\varepsilon x} dx - \frac{B_{p+1}}{p+1}$$
$$= \frac{p!}{\varepsilon^{p+1}} - \frac{B_{p+1}}{p+1} = \frac{p!}{\varepsilon^{p+1}} + \zeta(-p),$$

が得らえる。右辺の第1項は、ガンマ関数の積分表示に注意すれば導出できる。右辺の第1項は、勝手に選んだパラメータ ε に依存する項であり、 $\varepsilon \to 0$ の極限で発散する。極限として発散するのは、もともと、 j^p の総和が発散級数だからだ。ここで、 ε に依存する項を取り除くと、 $\zeta(-p)$ が残ることになり、やはり、 j^p の総和を解析接続した関数 $\zeta(-p)$ と一致した。ここまで示すと、本来発散するはずの j^p についての無限級数がゼータ関数 $\zeta(-p)$ と無関係とは思えないだろう。

異なる窓関数を適用した場合 発散級数とゼータ関数の関係を示したものの、やはり、うさん臭い気がするかもしれない。発散級数に乗じた窓関数 g(k) に依存する疑いがあるのだ。そこで、小さい k に対して $g(k) \simeq 1$ を満たし、十分に大きい k ではべき級数より速くゼロに収束する関数として、 $g(k) = e^{-\varepsilon k^2/2}$ を考えてみよう。ここでは、 $1+2+3+\cdots$ 窓関数を乗じ、

$$\sum_{k=0}^{\infty} k e^{-\varepsilon k^2/2},$$

を評価しよう。連続関数 $xe^{-\varepsilon x^2/2}$ の原始関数が $\varepsilon^{-1}e^{-\varepsilon x^2/2}$ であることが容易にわかるので、オイラー・マクローリンの総和公式を利用するのがよさそうだ。オイラー・マクローリンの総和公式を利用するにあたり, $f(x)=xe^{-\varepsilon x^2/2}$ とおいて,導関数を順次計算すると,

$$f'(x) = (1 - \varepsilon x^2) e^{-\varepsilon x^2/2} = e^{-\varepsilon x^2/2},$$

$$f''(x) = (-3\varepsilon x + \varepsilon^2 x^3) e^{-\varepsilon x^2/2} = 0,$$

$$f'''(x) = (-3\varepsilon + 6\varepsilon^2 x^2 - \varepsilon^3 x^4) e^{-\varepsilon x^2/2} = 0,$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} k e^{-\varepsilon k^2/2} = \int_0^{\infty} x e^{-\varepsilon x^2/2} dx - \frac{1}{2} \cdot 0 - \frac{B_2}{2} f'(0) = \frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{12},$$

が得らえる。右辺の第 1 項は $\varepsilon\to 0$ の極限で発散するが、これはもともと発散級数であることに起因する。第 2 項は勝手なパラメータ ε に依存しない項であり、ここでもやはり $\zeta(-1)=-1/12$ と等しくなっている。

繰り込みとラマヌジャン総和法 発散級数から発散項を取り除き,本質的な性質を表す量だけを取り出す手法を物理学では繰り込みと呼ばれる。繰り込みに相当する例として,ラマヌジャン総和法を紹介しておこう。関数 f(x) が与えられたとき,その関数による級数 $f(0) + f(1) + f(2) + \cdots$ が発散級数であるとき,ラマヌジャン総和法によると,

$$\sum_{j=0}^{\infty} f(j) = -\frac{1}{2}f(0) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{(2k)!} f^{(2k-1)}(0), \tag{6.16}$$

のように記述できる。ここで、総和記号の右肩にアスタリスク (*) を付した記号 $\sum *$ がラマヌジャン総和法における総和記号であるとする † 。ラマヌジャン総和法は、発散級数に適切な窓関数を乗じてオイラー・マクローリンの総和公式を適用した結果に対し、発散項を取り除いた値を与えている。ラマヌジャン総和法を利用すると、

$$\sum_{k=0}^{\infty} j^{k} j^{k} = \zeta(-p),$$

となる。まさに、ラマヌジャン総和法は発散級数に繰り込みを適用した結果を与えるのだ。なお、ラマヌジャンはラマヌジャン総和法によって計算される値を、級数 $\sum f(j)$ の定数と呼んでいた ‡ 。

繰り込みに相当する例が実在することが実験でもわかっている。その例は、カシミール効果と呼ばれる量子物理の現象である。金属板を2枚平行に接近して配置したとき、その金属板が帯電していないにも関わらず互いに引力が働くのである。引力発生のメカニズムは、金属板が近傍に配置されているときとされていないときでエネルギーが異なり、よりエネルギーが低い状態に移ろうとするため金属板の間に引力が働くのである。カシミール効果における本質部分のみを数式として抽出すると、

$$\sum_{j=1}^{\infty} j^3 - \int_0^{\infty} x^3 \, \mathrm{d}x = \zeta(-3) = \frac{1}{120},$$

である。左辺の第 1 項が近傍に金属板が配置されたときのエネルギー, 第 2 項が金属板が近傍に存在しないときのエネルギーである。数式の上では, どちらのエネルギーも発散しているのだが, 差をとると有限の値に繰り込まれるのである。カシミール効果は 1948 年にカシミール (Casimir) が予言し, 1996 年にラモロー (Lamoreaux) が実証した。ゼータ関数は量子力学を先取りしたかのような数学的ツールであるといえる。

6.2 オイラー・ブールの総和公式

オイラー・マクローリンの総和公式に類似した関係式として, オイラー・ブールの総和 公式を紹介しよう。オイラー・ブールの総和公式は, 交代級数の評価に適している。形式 的に, オイラーブールの総和公式は,

$$\sum_{j=a}^{n-1} (-1)^j f(j+h) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{E_k(h)}{k!} \left[(-1)^{n-1} f^{(k)}(n) + (-1)^a f^{(k)}(a) \right] + R_m(n) - R_m(a), \tag{6.17}$$

[†]これは一般的な記法ではなく、本書に限り、筆者が導入した記法である。

[‡]黒川信重, "ラマヌジャン (の衝撃," 現代数学社, ISBN 978-4-7687-0447-9, p. 84, 2015.

なる形式で記述される。ただし、剰余項 $R_m(n)$ は、

$$R_m(n) = \frac{1}{2(m-1)!} \int_a^n f^{(m)}(x) \,\tilde{E}_{m-1}(h-x) \,\mathrm{d}x,$$

である。総和対象に $(-1)^j$ が含まれることが、交代級数の評価に適している理由だ。

オイラー・ブールの総和公式は,交代級数で表現される数学定数や超越関数の誤差評価に利用できる。数学定数や超越関数を無限級数で計算する場合,現実的には,ある有限項で計算を打ち切るわけだ。例えば,1000項で計算を打ち切ったとする。本来,無限項まで計算することによって真値が得られるのであれば,第1001項目から無限項までの総和が,打ち切ったことによる誤差であるのだ。オイラー・ブールの総和公式は,級数の途中から無限項までの総和を評価することによって,級数の誤差を調べることができるわけだ。

6.2.1 公式の導出

級数の誤差を調べるのに有用なオイラー・ブールの総和公式を導出しよう。導出の順序として、最初に、特殊なケース a=0, n=1 について公式を導出する。導出した結果を、さらに一般化して、オイラー・ブールの総和公式を完成させるのである。

特殊なケースとして, a=0, n=1 のときについて証明する。その場合, 証明すべき関係式は、

$$f(h) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{E_k(h)}{k!} \left[f^{(k)}(1) + f^{(k)}(0) \right] + R_m(1), \tag{6.18}$$

である。そのうち、m=1に限定すると、第一に証明する関係式は、

$$f(h) = \frac{1}{2}E_0(h)[f(1) + f(0)] + \frac{1}{2}\int_0^1 f'(x)\tilde{E}_0(h-x)\,\mathrm{d}x,\tag{6.19}$$

となる。この関係式の被積分項に含まれる周期オイラー多項式が, $0 \le x < 1$ で $E_0(x) = 1$, 一方, $-1 \le x < 0$ で $E_0(x) = -1$ であることに注意すると, (5.8) の右辺は,

RHS of
$$(5.8) = \frac{1}{2}E_0(h)[f(1) + f(0)] + \frac{1}{2}\int_0^h f'(x) dx - \frac{1}{2}\int_h^1 f'(x) dx$$

$$= \frac{1}{2}[f(1) + f(0)] + \frac{1}{2}[f(h) - f(0)] - \frac{1}{2}[f(1) - f(h)]$$

$$= f(h) = \text{LHS of } (6.19),$$

となる。したがって, a = 0, n = 1, m = 1 の条件でオイラー・ブールの総和公式が成立する。続いて, m を一般化したときにオイラー・ブールの総和公式が成立することを示す。

剰余項 $R_m(1)$ に部分積分を適用して計算すると、

$$R_m(1) = \frac{1}{2(m-1)!} \int_0^1 f^{(m)}(x) \, \tilde{E}_{m-1}(h-x) \, dx$$

$$= \frac{\tilde{E}_m(h)}{2m!} \left[f^{(m)}(1) + f^{(m)}(0) \right] + \frac{1}{2m!} \int_0^1 f^{(m+1)}(x) \, \tilde{E}_m(h-x) \, dx$$

$$= \frac{\tilde{E}_m(h)}{2m!} \left[f^{(m)}(1) + f^{(m)}(0) \right] + R_{m+1}(1),$$

が得られる。この結果を, $R_1(1)$ に対して繰り返し適用すると,

$$R_1(1) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m-1} \frac{\tilde{E}_k(h)}{k!} \left[f^{(m)}(1) + f^{(m)}(0) \right] + R_m(1),$$

なる結果を得る。この結果を(6.18)に代入すると、

$$f(h) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{\tilde{E}_k(h)}{k!} \left[f^{(m)}(1) + f^{(m)}(0) \right] + R_m(1), \tag{6.20}$$

が得られる。 ただし, $0 \le h < 1$ に対して, $\tilde{E}_k(h) = E_k(h)$ であるので, a = 0, n = 1 であれば任意の自然数 m に対してオイラー・ブールの総和公式が成立する。

さらに続き, n を一般化し, オイラー・ブールの総和公式を証明する。導出された関係式 (6.20) について, f(h) を f(j+h) で置き換えると, (6.20) は,

$$f(j+h) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{E_k(j+h)}{k!} \left[f^{(m)}(j+1) + f^{(m)}(j) \right] + R_m^{(j)}(1), \tag{6.21}$$

のように書き換えられる。この式において、剰余項 $R_m^{(j)}(1)$ は次のように計算される。

$$R_m^{(j)}(1) = \frac{1}{2(m-1)!} \int_0^1 f^{(m)}(j+x) \, \tilde{E}_{m-1}(h-x) \, \mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2(m-1)!} \int_j^{j+1} f^{(m)}(x) \, \tilde{E}_{m-1}(h-x-j) \, \mathrm{d}x$$

$$= \frac{(-1)^j}{2(m-1)!} \int_j^{j+1} f^{(m)}(x) \, \tilde{E}_{m-1}(h-x) \, \mathrm{d}x$$

$$= (-1)^j \left[R_m(j+1) - R_m(j) \right].$$

この計算において, $\tilde{E}_m(x+1) = -E_m(x)$ の関係を利用した。この剰余項を (6.21) に代入すると,

$$(-1)^{j} f(j+h) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{j} \tilde{E}_{k}(j+h)}{k!} \left[f^{(m)}(j+1) + f^{(m)}(j) \right] + R_{m}(j+1) - R_{m}(j), \qquad (6.22)$$

なる関係が得られる。整数jをaからn-1まで増加させてこの結果の総和を計算すると、オイラー・ブールの総和公式が導出される。¶

6.2.2 メルカトル級数の誤差

オイラー・ブールの総和公式の応用例としてメルカトル級数の誤差を評価しよう。メルカトル級数とは、対数関数のマクローリン級数から得られる関係式:

$$1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots = \log 2,$$

である。この級数を第 N 項で打ち切ったときの誤差について考察しよう。その誤差は, f(x)=1/x とおいてオイラー・ブールの総和公式を適用することによって評価することができる。このとき, $f^{(m)}(x)=(-1)^m m!/x^{m+1}$ である。このような関数 f(x) についてオイラー・ブールの総和公式を適用すると.

$$\sum_{j=N}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j+h} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{N+k} E_k(h)}{N^{k+1}} + \bar{R}_m(N), \tag{6.23}$$

が得られる。ただし、剰余項 $\bar{R}_m(N)$ は、

$$\bar{R}_m(N) = \frac{(-1)^m m}{2} \int_N^\infty \frac{\tilde{E}_{m-1}(h-x)}{x^{m+1}} dx,$$

によって計算される。剰余項 $R_m(N)$ に含まれる因数 $\tilde{E}_m(x-h)$ は周期オイラー多項式であるので、いかなる変数 x-h においても、 $|\tilde{E}_m(x-h)| \leq 1$ が成立する。よって、次数 m と N を大きくとると剰余項 $R_m(N)$ は急速にゼロに近づく。ここで、h=1 を代入すると上の式は、

$$\begin{split} \sum_{j=N}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j+1} &= -\frac{1}{2} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{N+k} 2^{k+1} E_k(0)}{(2N)^{k+1}} + \bar{R}_m(N) \\ &= -\frac{(-1)^N}{2N} + \sum_{k=1}^{m-1} \frac{(-1)^{N+\lfloor k/2 \rfloor} T_k}{(2N)^{k+1}} + \bar{R}_m(N), \end{split}$$

のように書き換えられる。したがって、メルカトル級数を N 項で打ち切った総和は、

$$\sum_{j=0}^{N-1} \frac{(-1)^j}{j+1} = \log 2 - \frac{(-1)^N}{2N} - \sum_{k=1}^{m-1} \frac{(-1)^{N+k} T_{2k-1}}{(2N)^{2k}} + \tilde{R}_{2m}(N),$$

となる。右辺の第 2 項以降が級数を打ち切ったことによる誤差である。この数式変形では、タンジェント数の偶数項が必ずゼロであることを利用し、奇数項のみで数式を書き換えている。例として、打ち切り項数を $N=500\,000$ としよう。そのとき、メルカトル級数の計算結果は、

$$\sum_{j=0}^{N-1} \frac{(-1)^j}{j+1} = \log 2 - 10^{-6} - \sum_{k=1}^m (-1)^k T_{2k-1} \cdot 10^{-12k} + \tilde{R}_{2m}(N),$$

となることが予想できる。つまり、計算結果を上の桁から調べていくと、最初の誤りは小数点以下の第6桁目に存在する。誤りは、真値より1小さい値である。第2の誤りは小数点以下の第12桁目に存在し、それ以降の誤りは12桁間隔で存在する。しかも、その桁ではタンジェント数 T_{2k-1} が誤差となって現れる。具体的に数値計算した結果を示すと、

$$\sum_{j=0}^{499\,999} \frac{(-1)^j}{j+1} = 0.69314\underline{6}1805\underline{60}94530941723\underline{0}1214581765\underline{84}075500134\underline{088}25\dots$$

のようになる。この数値のアンダラインを示した位置が $\log 2$ と異なる場所であり、その下に示した小さな数字が誤差を表す。第 $500\,000$ 項で打ち切った場合,小数点以下第 5 桁までしか正しくないが,ほとんどの桁は $\log 2$ と一致している。しかも,上に示した数式のように,誤った桁の誤差はタンジェント数になっている。

6.2.3 ライプニッツ級数の誤差

次の応用例として, ライプニッツ級数の誤差を評価しよう。ライプニッツ級数は, 逆正 接関数のマクローリン展開から派生する級数であり.

$$1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \dots = \frac{\pi}{4},$$

に示すように, $\pi/4$ に収束する。この級数を第 N 項で打ち切ったときの誤差について考察しよう。その誤差は, f(x)=1/x とおいてオイラー・ブールの総和公式を適用することによって評価することができる。このとき, $f^{(m)}(x)=(-1)^m m!/x^{m+1}$ である。このような関数 f(x) についてオイラー・ブールの総和公式を適用すると,

$$\sum_{j=N}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j+h} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{N+k} E_k(h)}{N^{k+1}} + \bar{R}_m(N), \tag{6.24}$$

が得られる。ただし、剰余項 $\bar{R}_m(N)$ は、

$$\bar{R}_m(N) = \frac{(-1)^m m}{2} \int_N^\infty \frac{\tilde{E}_{m-1}(h-x)}{x^{m+1}} dx,$$

によって計算される。ここで, h = 1/2 を代入すると上の式は,

$$2\sum_{j=N}^{\infty} \frac{(-1)^j}{2j+1} = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{N+k} E_k}{(2N)^{k+1}} + \bar{R}_m(N),$$

のように書き換えられる。すなわち、この式はライプニッツ級数の 2 倍を第 N 項で打ち切ったときの誤差である。この結果より、ライプニッツ級数の 4 倍を第 N 項で打ち切ったときの総和は、

$$4\sum_{j=0}^{N-1} \frac{(-1)^j}{2j+1} = \pi - 2\sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^N E_{2k}}{(2N)^{2k+1}} - 2\bar{R}_m(N), \tag{6.25}$$

のように表すことができる。この数式の記述において、オイラー数の奇数項が必ずゼロになるので、奇数項のみで記述できるように数式を書き換えた。ここで、打ち切り項数を $N=500\,000$ とすると、打ち切ったライプニッツ級数は、

$$4\sum_{j=0}^{499\,999} \frac{(-1)^j}{2j+1} = \pi - 2\sum_{k=0}^{m-1} E_{2k} \cdot 10^{-12k-6} - 2\tilde{R}_m(N),$$

のように書くことができる。この数式は次のように解釈できる。計算結果を上の桁から調べていくと、小数点以下の第 6 桁目で最初の誤りがあり、その後、12 桁間隔で誤りが繰り返される。このような規則性で生じた誤りは、各桁に対して順番にオイラー数の 2 倍にあたる $2E_{2k}$ だけ真値と異なっている。実際に計算した結果を書くと、

$$4\sum_{j=0}^{499\,999} \frac{(-1)^j}{2j+1} = 3.14159\underline{4}65358979323\underline{6}4626433832\underline{89}502884197\underline{047}39937510\dots$$

い結果となる。表示した計算結果は,数式で記述した予想通り,小数点以下の第6桁目で最初の誤りが現れ,その後,12桁間隔で誤りが現れる。各桁の誤差は予想通りオイラー数の2倍になっている。計算結果の有効桁が小数点以下の5桁しかないが,ほとんどの桁は正確に計算されている。

6.3 アーベルの部分和

数列の和と積分の間の関係を示す公式として、アーベルの部分和を紹介しよう。部分和 という名称は、部分積分の公式から導き出されることに由来する。本節では、アーベルの 部分和を導出したのち、その応用例としてゼータ関数のローラン展開を取り扱う。

6.3.1 アーベルの部分和

アーベルの部分和は、本章で取り扱った他の公式のように、数列の和と積分の間の関係を記述する数式である。この公式が部分積分の公式から導出されるため、部分和と呼ばれる。アーベルの部分和は、数列 a_n と関数 $\phi(x)$ との積 $a_n\phi(n)$ の総和に関する公式:

$$\sum_{k=1}^{n} a_k \phi(k) = A(n) \phi(n) - \int_1^n A(x) \phi'(x) dx, \qquad (6.26)$$

で記述できる。ここで, A(x) は数列 a_n を関数とみなしたときの, a_n の原始関数, $\phi'(x)$ は $\phi(x)$ の導関数である。具体的に書くなら,

$$A(x) = \sum_{k=1}^{\lfloor x \rfloor} a_k,$$

である。なお、 $\lfloor x \rfloor$ は、x を超えない最大の整数である。このような A(x) の定義から、その 導関数を $a(x) = \sum a_k \delta(k)$ と考えるとよいだろう。ただし、 $\delta(k)$ はディラックのデルタ関数である。

証明 アーベルの部分和は、端的にいうと部分積分である。部分積分とは異なる名称で呼ばれているが、上に記述した定義において A(x) $\phi'(x)$ を区間 [1,n] で部分積分すれば、アーベルの部分和が証明できる。部分積分を実行すると、

$$\int_{1}^{n} A(x) \, \phi'(x) \, \mathrm{d}x = \left[A(x) \, \phi(x) \right]_{1}^{n} - \int_{1}^{n} a(x) \, \phi(x) \, \mathrm{d}x$$
$$= A(n) \, \phi(n) - \int_{1}^{n} \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_{k} \delta(k) \, \phi(x) \, \mathrm{d}x = A(n) \, \phi(n) - \sum_{k=1}^{n} a_{k} \phi(k),$$

が得られる。上で定義したように、デルタ関数を用いて a_n と A(x) の導関数を関係づけたことから、計算がスムーズに進んだ。この計算の第 2 行目への数式変形において、第 1 項は $A(n)\phi(n)$ でなく、 $A(n)\phi(n)-A(1)\phi(1)$ なるように思えるかもしれない。それについては後に考察する。その疑問点を除くと、アーベルの部分和が証明されたことになる。¶

証明ができたものの、アーベルの部分和は具体的な使い方がわかりにくいかもしれない。 ここで具体的な例を示しておいた方がよいだろう。例として、 $1/k^2$ の和を考えよう。この 例では、 $a_n=1$ 、 $\phi(x)=1/x^2$ とするのだ。そのとき、 $A(x)=\lfloor x \rfloor$ である。この関数の設定 で計算すると、

$$\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{x^2} = \frac{\lfloor n \rfloor}{n^2} + \int_{1}^{n} \frac{2 \lfloor x \rfloor}{x^3} \, dx = \frac{\lfloor n \rfloor}{n^2} + \sum_{m=1}^{n-1} \int_{m}^{m+1} \frac{2 \lfloor x \rfloor}{x^3} \, dx$$

$$= \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^{n-1} \int_{m}^{m+1} \frac{m}{2x^3} \, dx = \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^{n-1} \left[\frac{m}{x^2} \right]_{m}^{m+1}$$

$$= \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^{n-1} m \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{(m+1)^2} \right)$$

$$= \frac{1}{n} + 1 + \sum_{m=2}^{n-1} \frac{1}{m^2} - \frac{n-1}{n^2}$$

$$= 1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \dots + \frac{1}{n^2},$$

が得られる。この結果は、具体的な計算を実行しているのではなく、アーベルの部分和が 左辺と同一の数式の結果になることを示したにすぎない。しかし、一つの具体例をもって アーベルの部分和の正当性を示している。

アーベルの部分和の証明において、第2行目への数式変形について生じた疑問点について 考察しよう。考察の鍵は関数 A(x) の導関数 a(x) である。その導関数は、 $a(x) = \sum A_k \delta(k)$ と定義されるように、無限小の幅をもつ非常に鋭い山をなす。デルタ関数の解釈によると、 $\delta(k)$ は x=k である瞬間に、山をふもとからその反対側まで超えてしまうので、区間 [k,k+1] には、導関数 a(x) は $a_k\delta(k)$ と $a_{k+1}\delta(k+1)$ の二つの山が含まれているのだ。その理由で、証明過程における第 2 行目への数式変形で第 1 項を、

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left[A(n) \phi(n) - A(1 - \varepsilon) \phi(1 - \varepsilon) \right] = A(n) \phi(n) - A(0) \phi(1)$$
$$= A(n) \phi(n) - 0 \cdot \phi(1) = A(n) \phi(n),$$

としたわけだ。それに対して, x = 1 におけるデルタ関数の山を明示的に含みたくない場合, 総和の区間を $1 < k \le n$ とすればよい。さらに一般的に書くと,

$$\sum_{m < k \le n} a_k \phi(k) = A(n) \phi(n) - A(m) \phi(m) - \int_m^n A(x) \phi'(x) dx,$$
 (6.27)

のように記述する。この数式の左辺の総和の範囲は,m+1,m+2,...である。本来なら、総和の開始がm+1であることを明確に記述すべきであるが,左辺の積分区間との対比のために、総和の範囲を不等号を用いて記述していると解釈すればよい。

数式 (6.27) に記述した積分区間 (m,n] は、二つの整数の間の区間である。それをさらに一般化し、任意の実数間の区間に書きたいと考えるのは当然の要求であろう。そのような要求に対し、アーベルの部分和の公式は、

$$\sum_{a < k \le b} \phi(n) = \int_a^b \phi(x) \, \mathrm{d}x + \int_a^b \left(x - \lfloor x \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi'(x) \, \mathrm{d}x + \left(a - \lfloor a \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(a) - \left(b - \lfloor b \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(b), \tag{6.28}$$

のように一般化できる。ここで、a とb は任意の実数であり、整数でなくてもよい。この数式には、これまで使ってきた a_n とその原始関数 A(x) を用いていない。この数式は、 $a_n=1$ であることを前提に記述されている。アーベルの部分和で $a_n=1$ 以外であることが考えられないので、当然の限定である。

証明 一般化されたアーベルの部分和の公式を証明しよう。第1ステップとして, a=n, b=n+1 のように積分区間を隣り合う整数の場合に限定する。その限定条件で部分積分を実行すると,

$$\int_{k}^{k+1} \left(x - k - \frac{1}{2} \right) \phi'(x) \, \mathrm{d}x = \left[\left(x - k - \frac{1}{2} \right) \phi(x) \right]_{k}^{k+1} - \int_{k}^{k+1} \phi(x) \, \mathrm{d}x$$
$$= \frac{\phi(k) + \phi(k+1)}{2} - \int_{k}^{k+1} \phi(x) \, \mathrm{d}x,$$

のように計算できる。この数式は,

$$\phi(k+1) = \int_{k}^{k+1} \phi(x) \, \mathrm{d}x + \int_{k}^{k+1} \left(x - \lfloor x \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi'(x) \, \mathrm{d}x$$
$$+ \left(k - \lfloor k \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(k) - \left(k + 1 - \lfloor k + 1 \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(k+1),$$

のように書き換えられる。この書き換えにおいて、積分区間 (k, k+1) で [x] = k であることを利用した。さらに、k-[k] = 0 と k+1-[k+1] = 0 成立することも明らかだ。また、トリッキーであるが、数式変形において、両辺に $\phi(k+1)$ を加算した。その理由で、変形後の右辺に $\phi(k+1)/2$ が残っている。この数式の左辺 $\phi(k+1)$ は、

$$\phi(k+1) = \sum_{k < j \le k+1} \phi(j),$$

のように、積分区間に含まれる整数による関数値の総和であると考えると、これからの考察がしやすい。

積分区間を (a,b] としよう。ただし、その積分区間は隣り合う整数の間に挟まれた狭い区間、すなわち、 $n \le a < b \le n+1$ であるとする。その積分区間の条件で部分積分を実行すると、

$$\int_{a}^{b} \left(x - n - \frac{1}{2} \right) \phi'(x) \, \mathrm{d}x = \left(b - n - \frac{1}{2} \right) \phi(b) - \left(a - n - \frac{1}{2} \right) \phi(a) - \int_{a}^{b} \phi(x) \, \mathrm{d}x, \quad (6.29)$$

が得られる。ここまでに得られた結果を分類して書いてみよう。分類した結果だけ書くと、

$$\sum_{m < k \le n} \phi(n) = \int_{m}^{n} \phi(x) dx + \int_{n}^{m} \left(x - \lfloor x \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi'(x) dx + \left(m - \lfloor m \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(m) - \left(n - \lfloor n \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(n), \quad (6.30a)$$

$$\phi(m) = \int_{a}^{m} \phi(x) dx + \int_{a}^{m} \left(x - \lfloor x \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi'(x) dx + \left(a - \lfloor a \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(a) - \left(m - m - \frac{1}{2} \right) \phi(m), \qquad (6.30b)$$

$$0 = \int_{n}^{b} \phi(x) dx + \int_{n}^{b} \left(x - \lfloor x \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi'(x) dx + \left(n - \lfloor n \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(n) - \left(b - b - \frac{1}{2} \right) \phi(b),$$
 (6.30c)

が得られる。第1式は,積分区間を異なる二つの整数間 (m,n] に設定した場合であり,これは (6.29) において,m から n-1 の範囲で k を変化させて加算すれば得られる。第2式は,積分区間の終端が整数である場合であり,(6.29) から導出される。第3式は,積分区間の始点が整数である場合であり,これも (6.29) から導出される。これら三つの式の和をとると,積分区間が少なくとも一つの整数をまたぐ条件で,一般化されたアーベルの部分和 (6.28) を満たすことが示される。一方,積分区間が整数をまたがない場合,(6.29) から

$$0 = \int_{a}^{b} \phi(x) dx + \int_{a}^{b} \left(x - \lfloor x \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi'(x) dx + \left(a - \lfloor a \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(a) - \left(b - \lfloor b \rfloor - \frac{1}{2} \right) \phi(b),$$
 (6.30d)

が導出される。この数式も一般化されたアーベルの部分和 (6.28) と合致している。したがって、一般化されたアーベルの部分和の公式 (6.28) は常に成立する。¶

6.3.2 ゼータ関数のローラン展開

アーベルの部分和の応用例で、ゼータ関数をローラン展開することができる。ゼータ関数 $\zeta(s)$ は s=1 で 1 位の極をもち、その留数が1 である関数である。そのような関数は、極を示す項 1/(s-1) を含む級数で記述できる。その項を除けば、 $\zeta(s)$ は s=1 で正則となるはずだ。つまり、ゼータ関数 $\zeta(s)$ は、

$$\zeta(s) = \frac{1}{s-1} + a_0 + a_1(s-1) + a_2(s-1)^2 + a_3(s-1)^3 + \cdots, \tag{6.31}$$

のようにローラン展開できる。本項の目的は、ローラン展開の展開係数 a_0, a_1, a_2, \dots を特定することである。

展開係数の特定の第1歩として,ゼロ次の係数を求めよう。ゼロ次の展開係数は,

$$a_0 = \lim_{s \to 1+} \left[\zeta(s) - \frac{1}{s-1} \right],$$

を計算すれば得られる。ここで, $s\to 1+$ は, 変数 s を正の方向から 1 に近づけることを意味する。正の方向から近づけることには理由がある。この数式の評価に対して, ゼータ関数の定義:

$$\zeta(s) = 1 + \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} + \frac{1}{4^s} + \cdots$$

を利用しようとしているからだ。この級数は s>1 でなけれれば収束しない。それが変数 s を正の方向から近づける理由である。アーベルの部分和の公式を利用すると、ゼータ関数は、

$$\zeta(s) = \lim_{n \to \infty} \left[1 + \sum_{1 < k \le n} \frac{1}{k^s} \right]$$

$$= \lim_{n \to \infty} \left[1 + \int_1^n \frac{\mathrm{d}x}{x^s} - s \int_1^n \frac{x - \lfloor x \rfloor - 1/2}{x^{s+1}} \, \mathrm{d}x - \frac{1}{2} + \frac{1}{2n^s} \right]$$

$$= \frac{1}{s-1} - s \int_1^\infty \frac{x - \lfloor x \rfloor - 1/2}{x^{s+1}} \, \mathrm{d}x + \frac{1}{2}, \tag{6.32}$$

のように記述できる。この計算結果も、ゼータ関数 $\zeta(s)$ が s=1 に 1 位の極をもち、その留数が 1 であることを示唆している。

アーベルの部分和の公式を利用したゼータ関数の記述から, ローラン展開のゼロ次の係数を算出しよう。上で記述した数式を引き継ぎ,

$$a_0 = \lim_{s \to 1+} \left[\zeta(s) - \frac{1}{s-1} \right] = \int_1^\infty \frac{\lfloor x \rfloor - x + 1/2}{x^2} \, \mathrm{d}x + \frac{1}{2}$$
$$= \int_1^\infty \frac{\lfloor x \rfloor - x}{x^2} \, \mathrm{d}x + \frac{1}{2} \int_1^\infty \frac{\mathrm{d}x}{x^2} + \frac{1}{2} = \int_1^\infty \frac{\lfloor x \rfloor - x}{x^2} \, \mathrm{d}x + 1$$

$$= \lim_{n \to \infty} \left[\sum_{k=1}^{n-1} \int_{k}^{k+1} \left(\frac{k}{x^2} - \frac{1}{x} \right) dx + 1 \right]$$

$$= \lim_{n \to \infty} \left(\sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{k+1} - \log n + 1 \right) = \lim_{n \to \infty} \left(\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k} - \log n \right) = \gamma,$$

が得られる。この結果によって、ゼータ関数 $\zeta(s)$ を s-1 を中心にローラン展開したときのゼロ次の係数が、オイラー定数 γ に等しいことが明らかになった。

引き続き、他の展開係数を計算しよう。ゼータ関数の展開係数を得るための手続きは単純である。本項の冒頭で示したゼータ関数のローラン展開の形態 (6.31) に s-1 を乗じると、

$$(s-1)\zeta(s) = 1 + a_0(s-1) + a_1(s-1)^2 + a_2(s-1)^3 + \cdots$$

のような形で記述できる。展開係数のうち, a_0 は既に $a_0 = \gamma$ であることがわかっている。 展開係数を得るには、

$$a_{n-1} = \frac{1}{n!} \frac{d^n}{ds^n} \left[(s-1) \zeta(s) \right]_{s-1}, \tag{6.33}$$

を計算すればよい。ゼータ関数を第m項で打ち切った高次の調和級数で表現し、そのn階の導関数を記述すると、

$$(-1)^n \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}s^n} \left[(s-1) \sum_{k=1}^m \frac{1}{k^s} \right] = (s-1) \sum_{k=1}^m \frac{\log^n k}{k^s} - n \sum_{k=1}^m \frac{\log^{n-1} k}{k^s}, \tag{6.34}$$

が得られる。本章で取り扱ったオイラー・マクローリンの総和公式によると、数列の和は近似的に積分に置き換えることができるので、(6.34) に記載した総和を積分で評価してみよう。右辺の第1項に含まれる総和は、

$$\sum_{k=1}^{m} \frac{\log^{n} k}{k^{s}} = \int_{1}^{m} \frac{\log^{n} x}{x^{s}} dx + c_{n}(s) + O\left(\frac{\log^{n} m}{m^{s}}\right)$$

$$= \int_{0}^{\log m} u^{n} e^{-(s-1)u} du + c_{n}(s) + O\left(\frac{\log^{n} m}{m^{s}}\right)$$

$$= \frac{1}{(s-1)^{n+1}} \int_{0}^{(s-1)\log m} t^{n} e^{-t} dx + c_{n}(s) + O\left(\frac{\log^{n} m}{m^{s}}\right), \qquad (6.35)$$

のように計算できる。第 2 行目への数式変形では積分変数を $x\mapsto u$ で置き換え,第 3 行目への数式変形では $u\mapsto t$ で置き換えた。右辺の第 2 項 $c_n(s)$ はオイラー・マクローリンの総和公式によって総和を積分に置き換えた際の誤差であり,第 3 項は無限級数を m 項で打ち切ったことによる誤差である。打ち切り項数 m を大きくすると誤差が小さくなることは,ランダウのオミクロンで示されている。一方,第 2 項をあえて数式として記述すると,

$$c_n(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\log^n k}{k^s} - \int_1^{\infty} \frac{\log^n x}{x^s} dx,$$

である。この数式は、無限級数を積分で表現した場合の誤差を率直に表現した数式であり、面白みのない数式かもしれない。しかし、これが現実の $c_n(s)$ である。この数式から、 $c_n(s)$ をsで微分した導関数は、

$$c'_{n}(s) = -c_{n+1}(s), (6.36)$$

なる関係を満たすことに注意しておこう。定義した量 $c_n(s)$ を構成する関数 $\log^n x/x^s$ を x の関数と考えると図 6.4 に示す曲線を描く。この曲線は, $x \ge 1$ で極大値を 1 か所だけもつ 関数である。 微分すれば容易に確認できることだが, 極大値の位置は $x = e^{n/s}$ であり, そ

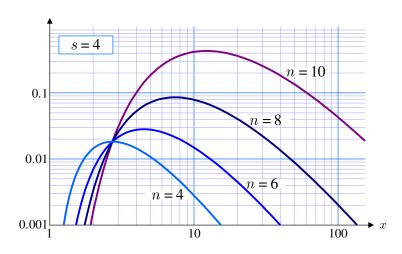


図 6.4: 関数 $\log^n x/x^s$ が描く曲線 (s=4)

の極大値は $(n/es)^n$ となる。このとき, $|c_n(s)|$ は, 必ず, 有限の値となり,

$$|c_n(s)| \le \sup_{x>1} \frac{\log^n x}{x^s} = \left(\frac{n}{es}\right)^n$$
,

の関係を満たす。当然のように書いたが説明が必要だろう。図 6.5 に $\log^n x/x^s$ のグラフと, $c_n(s)$ の対応関係を示している。その図において,網掛け部分の面積が c_n である。正確にいうと,関数 $\log^n x/x$ の最大値より右の網掛けの面積から,左の網掛けの面積を減算した結果が $c_n(s)$ である。これに対して, $\log^n x/x$ に重なるように描いた太枠の長方形を考えてみよう。 図から容易に推測できるように, $\log^n x/x$ の最大値より右の長方形の面積の和は,関数の最大値(と 1 の積)と等しい。最大値より左の面積の和も関数の最大値と等しい。網掛け部の面積は,太枠の長方形の面積より小さいので,結局, $c_n(s)$ は関数の最大値より小さいがです。

ゼータ関数の展開係数の特定に進んでいこう。導関数 (6.34) の右辺の第 1 項は、数式 (6.35) を s-1 倍した結果に等しい。その値を計算すると、

$$(s-1)\sum_{k=1}^{m} \frac{\log^{n} k}{k^{s}} = \frac{1}{(s-1)^{n}} \int_{0}^{(s-1)\log m} x^{n} e^{-x} dx$$

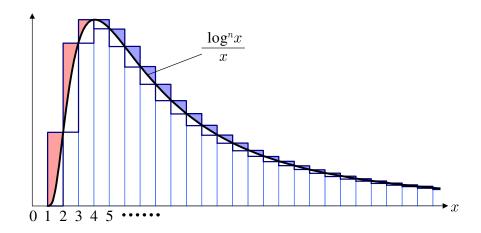


図 6.5: 誤差 $c_n(s)$ の検討の模式図

$$+(s-1)c_n(s) + (s-1)O\left(\frac{\log^n m}{m^s}\right),$$
 (6.37)

が得られる。一方、(6.34) の右辺の第 2 項は、数式 (6.35) において n を n-1 に置き換え、n 倍した結果に等しい。その値を計算すると、

$$n\sum_{k=1}^{m} \frac{\log^{n-1} k}{k^{s}} = \frac{n}{(s-1)^{n}} \int_{0}^{(s-1)\log m} x^{n-1} e^{-x} dx + (s-1) c_{n-1}(s) + (s-1) O\left(\frac{\log^{n-1} m}{m^{s}}\right)$$
$$= m^{-(s-1)} \log^{n} m + \frac{1}{(s-1)^{n}} \int_{0}^{(s-1)\log m} x^{n-1} e^{-x} dx + nc_{n-1}(s) + O\left(\frac{\log^{n-1} m}{m^{s}}\right), \tag{6.38}$$

が得られる。この数式の右辺を得るには、第1項の積分に部分積分を適用した。ここで得られた (6.37) と (6.37) の差が (6.34) に等しいはずなので、

$$(-1)^n \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}s^n} \left[(s-1)\zeta(s) \right] = (s-1)c_n(s) - n c_{n-1}(s), \tag{6.39}$$

なる等式が得られる。驚くことに、誤差を表現するつもりだった c(s) によって導関数が表現できてしまった。この数式に s=1 の極限を適用すると、

$$(-1)^{n} \frac{d^{n}}{ds^{n}} \left[(s-1)\zeta(s) \right]_{s=1}^{n} = -n c_{n-1}(s) = n \int_{1}^{m} \frac{\log^{n-1} x}{x^{2}} dx - n \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\log^{n-1} k}{k^{s}}$$

$$= \lim_{m \to \infty} \left[\frac{n}{(s-1)^{n}} \int_{0}^{(s-1)\log m} t^{n-1} e^{-t} dt - n \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\log^{n-1} k}{k^{s}} \right]$$

$$= \lim_{m \to \infty} \left[\frac{n}{(s-1)^{n}} \int_{0}^{(s-1)\log m} \left(t^{n-1} - t^{n} + \frac{t^{n+1}}{2!} - \cdots \right) dx - n \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\log^{n-1} k}{k^{s}} \right]$$

$$= \lim_{m \to \infty} \left[\log^n m - n \sum_{k=1}^m \frac{\log^{n-1} k}{k} \right], \tag{6.40}$$

が得られる。第 3 行目への数式変形では,(6.35) を導出する計算過程を参考にした。第 4 行目への数式変形で, e^{-t} をマクローリン展開した。最終行への数式変形では,s-1=0 であることから,s-1 が残っている項をすべて削除した。この計算結果を (6.33) に適用すると,展開係数が.

$$a_n = \frac{(-1)^n}{n!} \lim_{m \to \infty} \left[\sum_{k=1}^m \frac{\log^n k}{k} - \frac{\log^{n+1} m}{n+1} \right],$$

であることが導かれる。導出した展開係数に関して、

$$\gamma_n = \lim_{m \to \infty} \left[\sum_{k=1}^m \frac{\log^n k}{k} - \frac{\log^{n+1} m}{n+1} \right], \tag{6.41}$$

なる記号を定義すると、ゼータ関数 $\zeta(s)$ のローラン展開:

$$\zeta(s) = \frac{1}{s-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \gamma_n}{n!} (s-1)^n, \tag{6.42}$$

が得られる。既に示したように、ローラン展開のゼロ次の係数はオイラー定数 γ になる。この事実は、(6.41) に n=0 を代入すると、 $\gamma_0=\gamma$ が得られることで確認できる。なお、n=0 以外の定数 γ_n はスティルチェス定数と呼ばれる。

スティルチェス定数は、オイラー定数と同様、有理数であるかどうかなど、詳しい性質がわかっていない。ましてや、その定義式 (6.41) では収束がオイラー定数よりも遅く、近似値を得ることも難しい。オイラー・マクローリンの総和公式など、計算方法を工夫すれば、表 6.3 のようなスティルチェス定数の近似式を得ることができる。オイラーマクローリンの総和公式によるスティルチェス定数の計算方法は後に説明する。この表に記載した数値は、オイラーマクローリンの公式で計算した結果である。この表を見ると、スティルチェス定数は 10^{-3} から 10^{-5} の範囲でばらついているように見えるが、次数 n をさらに上昇させると、スティルチェス定数 γ_n はそれに対応して上昇する。例えば、 $\gamma_{40} \simeq 0.2487$ 、 $\gamma_{50} \simeq 126.8$ 、 $\gamma_{60} \simeq 9.854 \times 10^4$ のように上昇する。その上昇の振る舞いは、詳しくわかっていない \S が、脚注に掲げた Steven R. Finch の文献によると、 γ_n の大きさは、

$$|\gamma_n| \le \frac{(3 + (-1)^n)(2n)!}{n^{n+1}(2\pi)^n},$$

の関係を満たすようだ。その情報によると, ゼータ関数のローラン展開 (6.42) は, $\pi e/2$ (\simeq 4.27) の収束半径をもつ。

[§]Steven R. Finch, "Mathematical Constants," Cambridge Univ. Press, ISBN 0 521 81805 2, Sect. 2.21, p.167, 2003.

表 6.3: スティルチェス定数

n	γ_n	$\mid n \mid$	γ_n
0	$5.77215664901532860606 \times 10^{-1}$	12	$1.67272912105140193353 \times 10^{-4}$
1	$-7.28158454836767248605 \times 10^{-2}$	13	$-2.74638066037601588600 \times 10^{-5}$
2	$-9.69036319287231848453\times10^{-3}$	14	$-2.09209262059299945837 \times 10^{-3}$
3	$2.05383442030334586616\!\times\!10^{-3}$	15	$-2.83468655320241446642 \times 10^{-4}$
4	$2.32537006546730005746\times10^{-3}$	16	$-1.99696858308969774707 \times 10^{-4}$
5	$7.93323817301062701753 \times 10^{-4}$	17	$2.62770371099183366994 \times 10^{-5}$
6	$-2.38769345430199609872 \times 10^{-4}$	18	$3.07368408149252826592 \times 10^{-4}$
7	$-5.27289567057751046074 \times 10^{-4}$	19	$5.03605453047355629055 \times 10^{-4}$
8	$-3.52123353803039509602 \times 10^{-4}$	20	$4.66343561511559449400 \times 10^{-4}$
9	$-3.43947744180880481779 \times 10^{-5}$	21	$1.04437769756000115810 \times 10^{-4}$
10	$2.05332814909064794683\!\times\!10^{-4}$	22	$-5.41599582203997701655 \times 10^{-4}$
11	$2.70184439543903526672\!\times\!10^{-4}$	23	$-1.24396209040824577929\times 10^{-3}$

6.3.3 スティルチェス定数

前項でゼータ関数を記述する際に定義したスティルチェス定数を計算しよう。スティルチェス定数 γ_n は、(6.41) によって定義される。計算には、オイラー・マクローリンの総和公式 (6.2) を適用する。この公式を適用するにあたり、関数 f(x) を、

$$f(x) \equiv \frac{\log^n x}{x},$$

のように定義する。スティルチェス定数 γ_n を計算する公式の導出は、オイラー定数やゼータ関数と同一の導出過程を経るので、その過程を示すことは省略し、結果を書くと、

$$\gamma_n = \sum_{k=1}^m \frac{\log^n k}{k} - \frac{\log^{n+1} m}{n+1} - \frac{\log^n m}{2m} - \sum_{k=1}^p \frac{B_{2k}}{(2k)!} f^{(2k-1)}(m) + R_{2p}(m), \tag{6.43}$$

となる。ただし, $R_{2p}(m)$ は剰余項であり,

$$R_{2p}(m) = -\frac{1}{(2p)!} \int_1^m \tilde{B}_{2p}(x) f^{(2p)}(x) dx,$$

によって定義される。スティルチェス定数の計算において、剰余項は計算に含まれない項である。つまり、 $R_{2p}(m)$ は、補正項をp項だけ追加したことによる誤差であると考えられる。

スティルチェス定数を (6.43) で計算するには, f(x) の高次導関数の計算が必要だ。その高次導関数は単純な形にはならず、

$$f^{(m)}(x) = \frac{1}{x^{m+1}} \sum_{k=1}^{m} a_{mk} \log^{n-k} x, \tag{6.44}$$

なる級数で表現される。展開係数 a_{mk} は, $0 \le k \le m$ のときだけ $a_{mk} \ne 0$ となる係数であり, $a_{00} = 1$ である。さらに, 展開係数 a_{mk} は,

$$a_{mk} = \begin{cases} -ma_{m-1,k}, & \text{if } k = 0, \\ (n-k+1)a_{m-1,k-1} - ma_{m-1,k}, & \text{if } 1 \le k \le m-1, \\ (n-k+1)a_{m-1,m-1}, & \text{if } k = m, \end{cases}$$

$$(6.45)$$

なる漸化式で計算できる。上で述べたように $a_{00}=1$ であるから, (6.44) は m=0 のとき成立している。その数式が m-1 で成立していると仮定するなら, m 階の導関数 $f^{(m)}(x)$ は,

$$f^{(m)}(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[\frac{1}{x^m} \sum_{k=0}^{m-1} a_{m-1,k} \log^{n-k} x \right]$$

$$= \frac{1}{x^{m+1}} \sum_{k=0}^{m-1} \left[-ma_{m-1,k} \log^{n-k} x + (n-k) a_{m-1,k} \log^{n-k-1} x \right]$$

$$= \frac{1}{x^{m+1}} \left\{ -ma_{m-1,0} \log^n x + \sum_{k=0}^{m-1} \left[(n-k+1) a_{m-1,k-1} - ma_{m-1,k} \right] \log^{n-k} x + (n-m+1) a_{m-1,m-1} \log^{n-m} x \right\},$$

のように計算できる。この数式で漸化式 (6.45) が確認でき, n 階の導関数が (6.44) なる数式で表現できることが証明できた。例として, $f(x) = \log^2 x/x$ について, 高次導関数の展開係数は表 6.4 を用いて計算できる。例えば, 第m 行, 第k 列のセルを計算するには, 上隣のセルに-m を乗じ, 左上隣のセルにn-k を乗じ (この例ではn=2), その二つの積の和を書き込む。そのような手順によって表 6.4 が得られるわけだ。このようにn=2 の例で

表 6.4: 関数 $\log^2 x/x$ の高次導関数の展開係数

$m \setminus k$	0	1	2	3	4	5
0	1					
1	-1	2				
2	2	-6	2			
3	-6	16	-12	0		
4	24	-76	64	0	0	
5	-120	428	-396	0	0	0

は,k > 3のセルはすべてゼロになる。また,空白のセルと表外のセルがゼロであると考

えると、常に $1 \le k \le m-1$ の漸化式と同一の漸化式だけで計算しても同じ結果が得られる。この表によると、4 階と 5 階の導関数は、

$$f^{(4)}(x) = \frac{1}{x^5} \left(24 \log^2 x - 76 \log x + 64 \right),$$

$$f^{(5)}(x) = \frac{1}{x^6} \left(-120 \log^2 x + 428 \log x - 396 \right),$$

となる。このようにして計算した高次の導関数をオイラー・マクローリンの総和公式に代 入するとスティルチェス定数が計算できるのだ。