考察：

$$\mathcal{Z}_{00}(1;q^2) = -\pi + \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^3}\frac{e^{q^2-\mathbf{n}^2}}{\mathbf{n}^2-q^2} \tag{α}$$

$$+\frac{\pi}{2}\int_0^1 \mathrm{d}t\, t^{-3/2}\left(e^{tq^2}-1\right) \tag{κ}$$

$$+\sqrt{\frac{\pi}{4}}\int_0^1 \mathrm{d}t\, t^{-3/2}e^{tq^2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\exp\left(-\frac{\pi^2}{t}\mathbf{n}^2\right) \tag{β}$$

这里我们利用了 $\mathcal{Y}_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$.

首先看最简单的 (κ), 它不含求和、仅为一个带参数积分，但积分在左端点处具有奇性；限制 $q^2\in(0,3)$, 则 $tq^2\in(0,3)$, 此时被积函数可展开为一快速收敛的级数，并逐项积分：

$$\begin{aligned}(\kappa) &= \frac{\pi}{2}\int_0^1 \mathrm{d}t\, t^{-3/2}\left(tq^2+\frac{1}{2!}\left(tq^2\right)^2+\cdots\right)\\ &= \frac{\pi}{2}\int_0^1 \mathrm{d}t\, t^{-3/2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{t^k q^{2k}}{k!}\\ &= \pi\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{2k-1}\frac{q^{2k}}{k!}\end{aligned} \tag{A.1}$$

由上述展开可见，被积函数在左端点处以 $t^{-3/2+1}=\frac{1}{\sqrt{t}}$ 规律发散，这对数值积分是很不利的；相反级数展开式中分母有 $k!$, 收敛迅速，因此后面可以用部分求和的方式计算这一积分[1]。据 Stirling 近似，只要 $\frac{eq^2}{k}<\frac{1}{2}$, 对应临界 $k\sim 16$, 则余项的衰减将远快于几何级数 $\left(\frac{1}{2}\right)^k$; 故有余项：

$$\epsilon_k < \frac{\pi}{2k+1}\frac{1}{\sqrt{2\pi(k+1)}}\left(\frac{eq^2}{k+1}\right)^k = \tilde{\epsilon}_k, \quad k\geq 16 \tag{A.2}$$

☞ [1] 感谢王子毓同学的提醒。

注意到 $\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^3$, $\mathbf{n}^2=0,1,2,3,\ldots$, 故 $\mathcal{Z}_{00}(1;q^2)$ 的第一项求和 (α) 在 $q^2=0,1,2,3,\ldots$ 处发散；而结合 (β), (A.1), $\mathcal{Z}_{00}(1;q^2)$ 的其他成分在上述点处均有界，故 $q^2=0,1,2,3,\ldots$ 是 $\mathcal{Z}_{00}(1;q^2)$ 的奇点。相应地，由于 $q^2<3$, 故在充分接近奇点的区域内，(α) 中的求和至多只需计算到 $\mathbf{n}^2=3$.

对于非奇异的区域，分别考察 (α), (β) 之求和的截断误差，分别用 $\epsilon_\alpha,\epsilon_\beta$ 标记；在上述分析的基础上，设截断阶数 $m^2\geq 3$, 限定 $q^2\in(0,3)$, 首先有余项：

$$\begin{aligned}\epsilon_\alpha &\equiv \sum_{\mathbf{n}^2>m^2}\frac{e^{q^2-\mathbf{n}^2}}{\mathbf{n}^2-q^2}\\ &< \int_m^\infty \mathrm{d}r\, 4\pi r^2\frac{e^{q^2-r^2}}{r^2-q^2} = \int_{\frac{m}{q}}^\infty \mathrm{d}r\, 4\pi r^2\frac{e^{1-r^2}}{r^2-1}\\ &< 2\pi e\int_{\frac{m}{q}}^\infty \mathrm{d}r\, r\, e^{-r^2} = \pi\, e\cdot e^{-\frac{m^2}{q^2}} \equiv \tilde{\epsilon}_\alpha\left(\frac{m}{q}\right)\end{aligned} \tag{A.3}$$

其中 $q=\sqrt{q^2}$; 注意，上面的 “$<$” 均是严格成立的；最后一步的放大实际上是相当狠的，将分母上的 $(r^2-1)\to 2r$, 以保证满足精度要求。

类似地，(β) 中，

$$\begin{aligned}\epsilon_\beta &\equiv \sum_{\mathbf{n}^2>m^2}\exp\left(-\frac{\pi^2}{t}\mathbf{n}^2\right)\\ &< \int_m^\infty \mathrm{d}r\, 4\pi r^2\exp\left(-\frac{\pi^2}{t}r^2\right) = \frac{4t^{3/2}}{\pi^2}\int_{\pi m/\sqrt{t}}^\infty \mathrm{d}r\, r^2 e^{-r^2}\\ &< \frac{4t^{3/2}}{\pi^2}\left(\frac{\pi m}{\sqrt{t}}\right)^{\frac{2}{3}}\int_{\pi m/\sqrt{t}}^\infty \mathrm{d}r\, r^3 e^{-r^2} = 4t^{\frac{7}{6}}\left(\frac{m}{\pi^2}\right)^{\frac{2}{3}}\int_{\pi m/\sqrt{t}}^\infty \mathrm{d}r\, r^3 e^{-r^2}\\ &= 2t^{\frac{1}{6}}\left(t+\pi^2 m^2\right)\left(\frac{m}{\pi^2}\right)^{\frac{2}{3}}e^{-\frac{\pi^2 m^2}{t}}\\ &< 2\left(1+\pi^2 m^2\right)\left(\frac{m}{\pi^2}\right)^{\frac{2}{3}}e^{-\frac{\pi^2 m^2}{t}} \equiv \tilde{\epsilon}_\beta(m,t)\end{aligned} \tag{A.4}$$

可见 $\tilde{\epsilon}_\beta$ 随 m 的衰减规律大致为 $m^{2+\frac{2}{3}}e^{-\frac{\pi^2 m^2}{t}}$, 还算是比较迅速的。此外，表观上 ($\beta$) 中的积分在 $t\to 0$ 处存在奇点，与 (κ) 相似；但实际有 $e^{-\frac{\pi^2}{t}\mathbf{n}^2}$ 的压低，被积函数在 $t\to 0$ 时趋于零，并不存在实际的奇点。因此，与 (κ) 不同，(β) 的积分可以用数值积分方法很好地求出。

综上可得，部分求和贡献的误差为：

$$\begin{aligned}\epsilon(m,m',k,q^2) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\epsilon_\alpha\left(\frac{m}{q}\right)+\epsilon_k+\sqrt{\frac{\pi}{4}}\int_0^1 \mathrm{d}t\, t^{-3/2}e^{tq^2}\epsilon_\beta(m',t)\\ &< \tilde{\epsilon}_k+\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\pi\, e\cdot e^{-\frac{m^2}{q^2}}+\sqrt{\frac{\pi}{4}}\int_0^1 \mathrm{d}t\, t^{-3/2}e^{tq^2}\tilde{\epsilon}_\beta(m',t)\\ &\sim \tilde{\epsilon}_k+\sqrt{\frac{\pi}{4}}\left(e\cdot e^{-\frac{m^2}{q^2}}+2\,\pi^2 m'^2\left(\frac{m'}{\pi^2}\right)^{\frac{2}{3}}\int_0^1 \mathrm{d}t\, t^{-3/2}\exp\left(tq^2-\frac{\pi^2 m'^2}{t}\right)\right)\\ &\equiv \tilde{\epsilon}(m,m',k,q^2)\end{aligned} \tag{A.5}$$

这里 $\tilde{\epsilon}$ 是放大得到的严格上限，m,m' 分别是两个对 $\mathbf{n}$ 求和的截断阶数。由前述分析可知，宜有 $m\geq\sqrt{3}\approx 2$, m' 的情况暂时不清楚。