求和转化为积分中的误差分析

在平动配分函数的推导过程中，存在求和转化为积分的步骤。这个过程中会引入一个误差，我们可以通过欧拉-麦克劳林求和公式来分析和计算这个误差。

推导过程回顾

考虑以下求和转化为积分的过程：

$$
\begin{aligned}
\sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{(n^2-1)h^2}{8a^2mkT}} &= \int_1^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{(n^2-1)h^2}{8a^2mkT}}\, dn \\
&= \int_1^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{n^2h^2}{8a^2mkT}} \cdot \mathrm{e}^{\frac{h^2}{8a^2mkT}}\, dn \\
&= \mathrm{e}^{\frac{h^2}{8a^2mkT}} \int_1^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{n^2h^2}{8a^2mkT}}\, dn \\
&= \mathrm{e}^{\frac{h^2}{8a^2mkT}} \int_{\frac{h}{\sqrt{8a^2mkT}}}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} \left(\frac{\sqrt{8a^2mkT}}{h}\right) dx \\
&= \mathrm{e}^{\frac{h^2}{8a^2mkT}} \cdot \frac{\sqrt{8a^2mkT}}{h} \int_{\frac{h}{\sqrt{8a^2mkT}}}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2}\, dx \\
&= \mathrm{e}^{\frac{h^2}{8a^2mkT}} \cdot \frac{\sqrt{8a^2mkT}}{h} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{h}{\sqrt{8a^2mkT}}\right)\right) \\
&= \frac{\sqrt{2\pi mkT}}{h} a \cdot \mathrm{e}^{\frac{h^2}{8a^2mkT}} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{h}{\sqrt{8a^2mkT}}\right) \\
&\approx \frac{\sqrt{2\pi mkT}}{h} a \cdot \mathrm{e}^{\frac{h^2}{8a^2mkT}}
\end{aligned}
$$

在上述推导过程中，我们将求和转换为了积分，并且通过一系列变换简化了表达式。

求和转化为积分的误差

在求和转化为积分的过程中，会引入一个误差。这个误差的绝对值可以通过欧拉-麦克劳林求和公式来计算。根据欧拉-麦克劳林公式，误差的形式为：

$$\sum_{n=a}^{b} f(n) \approx \int_a^b f(x)\,dx + \frac{f(a)+f(b)}{2} + \text{更高阶误差项}$$

在我们的推导中，积分的下限为1，上限为$+\infty$。因此，我们可以将误差项简化为：

$$\sum_{n=1}^{\infty} f(n) \approx \int_1^{\infty} f(x)\,dx + \frac{f(1)}{2}$$

这里的误差主要由边界项 $\frac{f(1)}{2} = 0.5$ 贡献。尝试在求和的时候多计入一项 $n = 0$，即

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{(n^2-1)h^2}{8a^2mkT}} = \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{(n^2-1)h^2}{8a^2mkT}} + \mathrm{e}^{\frac{h^2}{8a^2mkT}}$$

如果我们在求和时多计入一项 $n = 0$，可以通过欧拉-麦克劳林公式知道其误差大约是 0.5。由于多计入了一项 $n = 0$，求和的值将约增大 1，相当于对于不多计入时从 0 取积分限比真实值大了 0.5。也就是说，我们在积分近似时可以如此选取积分限，不仅简化了计算，而且不会引入更多的误差：

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{(n^2-1)h^2}{8a^2mkT}} = \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{(n^2-1)h^2}{8a^2mkT}}\,dn = \frac{\sqrt{2\pi mkT}}{h} a \cdot \mathrm{e}^{\frac{h^2}{8a^2mkT}}$$