

5.5 Satulapisteaprossimaatio

Satulapisteaprossimaatiota (engl. *saddle point approximation* tai *method of steepest descent*) käytetään tutkimaan, miten integraalin avulla määritellyt funktiot

$$F(T) := \int_{\gamma} f(z)e^{Tg(z)} dz, \quad T \in \mathbb{R}, \quad (5.28)$$

käyttäytyvät kun $T \rightarrow \infty$. Tässä oletetaan yleensä, että f ja g ovat analyyttisiä funktioita integrointireitin ympäristössä ja usein lähdetään liikkeelle integrointireitistä γ , joka kulkee reaaliakselia pitkin. Menetelmän idea on muokata integrointireittiä γ Cauchyn lausetta käyttäen (Lause 1.41) siten, että integrointireitillä $\operatorname{Re} g(z)$ on mahdollisimman pieni: tällöin nimittäin myös integrandin moduli tyypillisesti minimoituu, kun $T \gg 1$, sillä onhan

$$\left| f(z)e^{Tg(z)} \right| = |f(z)|e^{T\operatorname{Re} g(z)}.$$

Muotoa (5.28) olevia integraaleja tulee vastaan lähes aina, kun differentiaaliyhtälöitä ratkaistaan pian esiteltävän Fourier'n muunnoksen avulla. Esimerkiksi vapaan hiukkasen Schrödingerin yhtälön ratkaisu $\psi_t(x)$ alkutilalla, jonka Fourier'n muunnos on $\hat{\psi}_0(p)$, $p \in \mathbb{R}$, saadaan integraalista

$$\psi_t(x) := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{i(px - t\frac{1}{2m}p^2)} \hat{\psi}_0(p). \quad (5.29)$$

Näin ollen sekä rajat $|t| \rightarrow \infty$ että $|x| \rightarrow \infty$ johtavat muotoa (5.28) olevan funktion asymptotiikan ratkaisemiseen.

5.5.1 Reaaliset satulapisteintegraalit

Yhden satulapisteen reaalinen tapaus

Aloitetaan erikoistapauksesta, jossa polku γ kulkee reaaliakselia pitkin pisteestä a pisteeseen b , ja eksponentissa oleva reaalfunktio g toteuttaa seuraavat ehdot: $g''(x) < 0$ kaikilla $x \in (a, b)$ ja löytyy *kriittinen piste* $x_0 \in (a, b)$, jossa $g'(x_0) = 0$. Koska $g'' < 0$, on derivaatta g' aidosti vähenevä koko välillä, ja pätee siis $g'(x) > 0 > g'(y)$ aina, kun $x < x_0 < y$. Nähdään, että näillä oletuksilla välillä on vain yksi kriittinen piste x_0 ja tämä piste on funktion $g(x)$ globaali maksimi.

Näistä oletuksista seuraa seuraava tulos, jonka yleinen muoto tunnetaan *Morsen lemmannä* (https://en.wikipedia.org/wiki/Morse_theory):

Lause 5.14 *Olkoon g on kahdesti jatkuvasti derivoituva funktio välillä (a, b) , jolle $g''(x) < 0$ kaikilla x , ja löytyy $x_0 \in (a, b)$, jossa $g'(x_0) = 0$. Tällöin löytyy samalla välillä määritelty jatkuvasti derivoituva reaalfunktio h , jolla $h(x_0) = 0$, $h'(x_0) = 1$, $h'(x) > 0$ kaikilla x , ja*

$$g(x) = g(x_0) + \frac{1}{2}g''(x_0)h(x)^2, \quad a < x < b. \quad (5.30)$$

TODISTUS Merkitään yksikertaisuuden vuoksi kaavan (5.30) vakioita $g_0 := g(x_0)$ ja $b_0 := g''(x_0) < 0$. Sovelletaan Taylorin lausetta asteella $n = 1$ pisteessä $x = x_0$. Koska $g'(x_0) = 0$, häviää ensimmäisen asteen termi, ja saadaan siis

$$g(x) = P_1(x; x_0) + R_1(x; x_0) = g_0 + \int_{x_0}^x g''(t)(x-t) dt.$$

Jälkimmäisen integraalin polku voidaan parametrisoida uudelleen $t = r(x - x_0) + x_0$, $r \in [0, 1]$, josta saadaan

$$g(x) = g_0 + \frac{b_0}{2}(x - x_0)^2 \int_0^1 \frac{2}{b_0} g''(r(x - x_0) + x_0)(1-r) dr.$$

Koska tässä olevassa integraalissa on aina $b_0^{-1}g'' > 0$, on myös

$$I(x) := \int_0^1 \frac{2}{b_0} g''(r(x-x_0) + x_0)(1-r) dr > 0,$$

joten voidaan määritellä reaalinen funktio

$$h(x) := (x - x_0)\sqrt{I(x)},$$

jolle kaava (5.30) pätee. Selvästi $h(x_0) = 0$ ja I on jatkuva funktio, jolle $I(x_0) = 1$. Näin ollen

$$\frac{h(x) - h(x_0)}{x - x_0} = \sqrt{I(x)} \xrightarrow{x \rightarrow x_0} \sqrt{I(x_0)} = 1,$$

joten h on derivoituva pisteessä x_0 ja sille pätee $h'(x_0) = 1$. Kun $x \neq x_0$, on $h(x)/(x - x_0) = \sqrt{I(x)} > 0$, joten $h(x) > 0$, kun $x > x_0$, ja $h(x) < 0$, kun $x < x_0$. Näin ollen voidaan kaavasta (5.30) ratkaista

$$h(x) = \begin{cases} \sqrt{2(g(x) - g_0)/b_0}, & \text{kun } x > x_0, \\ -\sqrt{2(g(x) - g_0)/b_0}, & \text{kun } x < x_0. \end{cases}$$

Tästä seuraa ketjusäännön perusteella, että h on jatkuvasti derivoituva sekä kun $x < x_0$ että kun $x > x_0$. Molemmissa alueissa saadaan yhtälöä (5.30) derivoimalla

$$g'(x) = b_0 h(x) h'(x) \quad \Rightarrow \quad h'(x) = \frac{g'(x)}{b_0 h(x)} = \frac{g'(x)}{b_0(x - x_0)} \frac{1}{\sqrt{I(x)}}.$$

Tässä

$$g'(x) = g'(x) - g'(x_0) = \int_0^1 g''(r(x-x_0) + x_0) dx = (x - x_0) \int_0^1 g''(r(x-x_0) + x_0) dr,$$

joten $g'(x)/(x - x_0) < 0$ oletusten mukaan, ja nähdään siis myös, että $h'(x) > 0$. Ottamalla raja $x \rightarrow x_0$ saadaan $h'(x) \rightarrow g''(x_0)/(b_0\sqrt{I(x_0)}) = 1 = h'(x_0)$, joten h on jatkuvasti derivoituva funktio, jolle $h'(x) > 0$ kaikilla $x \in (a, b)$. \square

Morsen lemmän tuottamasta funktiosta $h(x)$ on hyötyä, sillä nyt voidaan tehdä muuttujanvaihto $t = h(x)$ alkuperäiseen integraaliin

$$F(T) := \int_a^b f(x) e^{Tg(x)} dx, \quad T > 0,$$

koska $h'(x) > 0$ koko integrointivälillä. Koska h on tällöin aidosti kasvava, pätee tällöin $h(a) < h(x_0) = 0 < h(b)$, sillä $a < x_0 < b$. Uudeksi integrointiväliksi saadaan siis $[-\alpha, \beta]$, määrittelemällä $\alpha := -h(a)$, $\beta := h(b)$, jotka ovat molemmat positiivisia. Lisäksi h :lla on olemassa käänteisfunktio h^{-1} , jolle pätee $h^{-1}(0) = x_0$ ja funktion $x(t) = h^{-1}(t)$ derivaatta on $1/h'(h^{-1}(t))$. Merkitään nyt kaavan (5.30) vakioita $g_0 := g(x_0)$ ja $c_0 := -g''(x_0) > 0$, jolloin pätee siis $g(x) = g_0 - \frac{c_0}{2}h(x)^2 = g_0 - \frac{c_0}{2}t^2$. Näin ollen muuttujanvaihto tuottaa integraalin

$$F(T) = \int_{-\alpha}^{\beta} f(h^{-1}(t)) e^{Tg_0 - \frac{1}{2}c_0 T t^2} \frac{1}{h'(h^{-1}(t))} dt.$$

Rajalla $T \rightarrow \infty$ eksponenttitermi pyrkii pitämään t :n arvot mahdollisimman lähellä nollaa, joten tehdään vielä uusi muuttujanvaihto $u = t\sqrt{c_0 T}$, josta saadaan

$$F(T) = \int_{-\alpha\sqrt{c_0 T}}^{\beta\sqrt{c_0 T}} G(u(c_0 T)^{-\frac{1}{2}}) e^{Tg_0 - \frac{1}{2}u^2} \frac{1}{\sqrt{c_0 T}} du, \quad G(t) := \frac{f(h^{-1}(t))}{h'(h^{-1}(t))}.$$

Tämän jälkeen voidaan melko vähäisin oletuksin⁶ funktiosta $f(x)/h'(x)$ ottaa tässä raja-arvo $T \rightarrow \infty$ integrandissa seuraavasti

$$e^{-g_0 T} (c_0 T)^{\frac{1}{2}} F(T) = \int_{-\alpha\sqrt{c_0 T}}^{\beta\sqrt{c_0 T}} G\left(u(c_0 T)^{-\frac{1}{2}}\right) e^{-\frac{1}{2}u^2} du \xrightarrow{T \rightarrow \infty} G(0) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}u^2} du.$$

Jäljelle jäävä integraali voidaan laskea Γ -funktion avulla, sillä sen integrandi on parillinen ja muuttujanvaihdolla $v = \frac{1}{2}u^2$ siitä saadaan

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}u^2} du = 2 \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{2}u^2} du = 2 \int_0^{\infty} e^{-v} \frac{1}{\sqrt{2v}} dv = \sqrt{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{2\pi}.$$

(Parillisten ja parittomien funktioiden yli integrointia on kerrattu Luvussa 5.5.2.) Toisaalta $G(0) = f(h^{-1}(0))/h'(h^{-1}(0)) = f(x_0)/h'(x_0) = f(x_0)$, joten funktion F johtavaksi asymptoottiseksi käytökseksi saadaan

$$F(T) \approx f(x_0) e^{g(x_0)T} \sqrt{\frac{2\pi}{-g''(x_0)T}} \quad (T \rightarrow \infty).$$

Tätä kutsutaan **satulapisteaaprosimaation johtavaksi termiksi**.

Huomataan, että johtavan asymptoottisen käytöksen laskemiseksi ei tarvitse edes ratkaista kuvausta h . Tämä onkin yksi syy, miksi yleensä lopetetaankin approksimaation laskeminen tähän. Jos funktiot f ja h ovat mielivaltaisen monta kertaa derivoituvia, niin voidaan satulapisteaaprosimaatiota tarkentaa täydeksi (asymptoottiseksi) sarjakehitelmäksi käyttäen funktion $G(t) = f(h^{-1}(t))/h'(h^{-1}(t))$ Taylorin polynomiapproksimaatioita. Tällöin voidaan nimittäin integrandiin sijoittaa kaava

$$G(t) = \sum_{k=0}^n \frac{G^{(k)}(0)}{k!} t^k + R_n(t; 0),$$

josta saadaan toistamalla yllä olevat laskut kullakin n lopputulokseksi

$$F(T) \sim \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ parillinen}}}^{\infty} \frac{G^{(k)}(0)}{k!} 2^{\frac{k+1}{2}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right) e^{g(x_0)T} (c_0 T)^{-\frac{k+1}{2}} \quad (T \rightarrow \infty),$$

sillä kaikille parittomille k on $\int_{-\infty}^{\infty} u^k e^{-\frac{1}{2}u^2} du = 0$, koska integrandi on tällöin pariton funktio muuttujassa u , ja parillisille k pätee

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^k e^{-\frac{1}{2}u^2} du = 2 \int_0^{\infty} u^k e^{-\frac{1}{2}u^2} du = 2 \int_0^{\infty} (2v)^{\frac{k}{2}} e^{-v} \frac{1}{\sqrt{2v}} dv = 2^{\frac{k+1}{2}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right).$$

Käyttämällä Γ -funktion tunnettuja arvoja puoliluvuilla, saadaan tästä vielä hieman siistimpi esitys kaksoiskertomaa $((2n)!! = (2n)(2n-2)\cdots 2)$ käyttäen

$$F(T) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{G^{(2n)}(0)}{(2n)!!} (-g''(x_0)T)^{-n} e^{g(x_0)T} \sqrt{\frac{2\pi}{-g''(x_0)T}} \quad (T \rightarrow \infty).$$

Esimerkki 5.15 (Stirlingin kaava) Laske asymptoottinen approksimaatio kertomalle $n!$, kun $n \rightarrow \infty$.

⁶(MAT) Esimerkiksi riittää, että löytyy vakio $C > 0$, jolla $|f(x)/h'(x)| \leq C$ kaikilla $x \in (a, b)$. Tällöin voidaan raja-arvo ottaa suoraan integrandista soveltaen dominoidun konvergenssin lausetta funktioon $\mathbb{1}_{\{-\alpha\sqrt{c_0 T} < u < \beta\sqrt{c_0 T}\}} G(u(c_0 T)^{-\frac{1}{2}}) e^{-\frac{1}{2}u^2}$, käyttäen majoranttia $C e^{-\frac{1}{2}u^2}$.

Ratkaisu: Koska $n! = \Gamma(n+1)$, voidaan tämä johtaa tutkimalla funktion arvoja, kun $z \rightarrow \infty$ reaaliakselia pitkin. Voidaan käyttää integraalimääritelmää, jonka mukaan

$$\Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} t^n e^{-t} dt = \int_0^{\infty} e^{-t+n \ln t} dt.$$

Muutetaan tämä ensin satulapistemuotoon tekemällä muuttujanvaihto $t = nx$, jolloin $\ln t = \ln n + \ln x$, ja saadaan siis

$$\Gamma(n+1) = n e^{n \ln n} \int_0^{\infty} e^{n(-x+\ln x)} dx.$$

Jäljellä oleva integraali on tässä luvussa tarkasteltua muotoa, kun määritellään $f(x) = 1$ ja $g(x) = \ln x - x$. Tällöin

$$g'(x) = \frac{1}{x} - 1 \quad \text{ja} \quad g''(x) = -\frac{1}{x^2},$$

joten $g''(x) < 0$ kaikilla $x > 0$, ja $g'(x) = 0$ täsmälleen silloin, kun $x = 1$. Näin ollen voidaan suoraan soveltaa yllä johdettuja kaavoja, ja sijoittamalla $x_0 = 1$, $g(1) = -1$, $g''(1) = -1$, saadaan johtavaksi approksimaatioksi

$$n! \approx n e^{n \ln n} e^{-n} n^{-\frac{1}{2}} \sqrt{2\pi} = n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}. \quad (5.31)$$

Tätä tulosta kutsutaan **Stirlingin kaavaksi**. Asymptoottisen kehitelmän seuraavasta termistä saadaan arvio virheellekin:

$$n! = n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n} (1 + O(n^{-1})).$$

Useamman satulapisteen reaalinen tapaus

Tarkastellaan vielä lisää tapausta, jossa polku γ kulkee reaaliakselia pitkin pisteestä a pisteeseen b , ja eksponentissa oleva g on reaalinen ja kahdesti jatkuvasti derivoituva. Tähän tapaukseen voidaan soveltaa edellistä satulapisteapproksimaatiota sopivasti valittuihin integrointiväleihin.

1. Etsitään funktion g *aidot lokaalit maksimit* eli pisteet x_i , joissa $g'(x_i) = 0$ ja $g''(x_i) < 0$.
2. Koska g'' on jatkuva, löytyy jokaista pistettä x_i kohti jokin väli (a_i, b_i) , jossa $g'' < 0$.
3. Tällöin voidaan siis soveltaa satulapisteapproksimaatiota jokaiselle välille erikseen ja saadaan

$$F(T) \approx \sum_i f(x_i) e^{g(x_i)T} \sqrt{\frac{2\pi}{-g''(x_i)T}} \quad (T \rightarrow \infty).$$

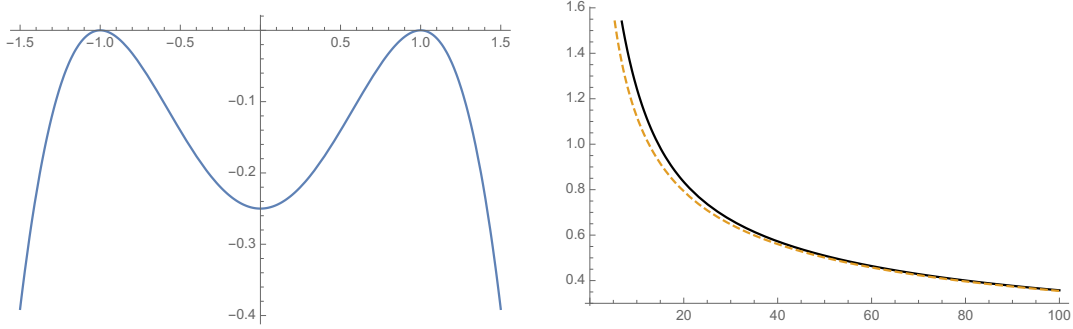
Näin tehdyssä approksimaatiossa olisi hyvä lisäksi saada jokin estimaatti myös välien (a_i, b_i) ulkopuolelle jäävälle integraalin osalle. Koska näillä väleillä ei ole aitoja lokaaleja maksimeita, tuottavat ne tyypillisesti eksponentiaalisesti pienemmän kontribuution integraaliin verrattuna globaalin maksimin tuottamaan osuuteen, mutta asia olisi aina hyvä tarkistaa erikseen.

Esimerkki 5.16 Satulapisteapproksimaatio ”kaksoishuippupotentiaalille” eli funktiolle

$$F(T) := \int_{-\infty}^{\infty} e^{Tg(x)} dx, \quad T > 0, \quad \text{kun } g(x) := -\frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{4}.$$

Ratkaisu: Nyt $g'(x) = -x^3 + x$ ja $g''(x) = -3x^2 + 1$. Näin ollen g :llä on kaksi lokaalia maksimia pisteissä $x_{\pm} := \pm 1$ ja lokaali minimi pisteessä $x = 0$, ks. Kuva 5.2. Koska $g(\pm 1) = 0$ ja $g''(\pm 1) = -2$, saadaan satulapisteapproksimaatio

$$F(T) \approx \sum_{\sigma=\pm 1} e^{g(\sigma)T} \sqrt{\frac{2\pi}{-g''(\sigma)T}} = 2\sqrt{\frac{2\pi}{2T}} = \sqrt{\frac{4\pi}{T}}.$$



Kuva 5.2: (Vasen kuva) Esimerkin 5.16 eksponentin $g(x)$ kuvaaja. (Oikea kuva) Esimerkin 5.16 integraalin $F(T)$ ja sen satulapisteapproksimaation (katkoviiva) kuvaajat.

Sen ulkopuolelle jää integraali yli arvojen, joille $g''(x) \geq 0$, eli arvojen $|x| \leq 1/\sqrt{3}$. Tällä välillä saa g maksiminsa välin laidoilla, eli $g(x) \leq g(1/\sqrt{3}) = -\frac{1}{9}$, joten tästä tuleva kontribuutio on suuruudeltaan

$$\int_{-1/\sqrt{3}}^{1/\sqrt{3}} e^{Tg(x)} dx \leq \frac{2}{\sqrt{3}} e^{-T\frac{1}{9}}.$$

Koska tämä termi on $o(T^{-n})$ kaikilla n , on tämä termi pienempi kuin mikään satulapisteiden ympäristöjen asymptoottisen kehittämän termi. Kuvassa 5.2 on piirretty funktion $F(T)$ ja sen satulapisteapproksimaation $\sqrt{4\pi/T}$ kuvaajat.

(Lisä) Yleistetty reaalinen tapaus

Joskus törmää tilanteeseen, jossa satulapisteet ovat degeneroituja, eli $g''(x_0) = 0$. Tällöin on mahdollista kuitenkin yleistää yllä olevaa muuttujanvaihdon ideaa, jos eksponentissa oleva reaali-funktio g saadaan muotoon $g(x) = g_0 - |h(x)|^{2p}$, joillakin $p > 0$, $g_0 \in \mathbb{R}$ ja funktiolla h , jolle $h'(x) > 0$, kun $a < x < b$, ja $h(a) < 0 < h(b)$. (Näin käy esimerkiksi polynomille $g(x) = g_0 - x^4$, jolloin $x^4 = |x|^4$ ja voidaan valita $h(x) = x$ ja $p = 2$.) Tällöin voidaan integraaliin

$$F(T) := \int_a^b f(x) e^{Tg(x)} dx, \quad T > 0,$$

tehdä muuttujanvaihto $u = h(x)T^q$, $q := \frac{1}{2p} > 0$, jossa $x = h^{-1}(T^{-q}u)$. Kun merkitään $\alpha := -h(a) > 0$, $\beta := h(b) > 0$, saadaan siis

$$F(T) = \int_{-\alpha T^q}^{\beta T^q} G(T^{-q}u) e^{Tg_0 - |u|^{2p}} du, \quad G(t) := \frac{f(h^{-1}(t))}{h'(h^{-1}(t))}.$$

Koska h on aidosti kasvava ja jatkuva funktio, joka alkaa negatiivisesta arvosta ja päättyy positiiviseen arvoon, löytyy sille tasan yksi nollakohta $x_0 \in (a, b)$, ja siten $h^{-1}(0) = x_0$. Kun $T \rightarrow \infty$, on $T^{-q}t \rightarrow 0$ ja siten myös $h^{-1}(T^{-q}t) \rightarrow x_0$ kaikilla t . Tämän jälkeen voidaan tyypillisesti ottaa tässä raja-arvo $T \rightarrow \infty$ suoraan integrandissa seuraavasti

$$e^{-g_0 T} T^q F(T) = \int_{-\alpha T^q}^{\beta T^q} G(T^{-q}u) e^{-|u|^{2p}} du \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{f(x_0)}{h'(x_0)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|u|^{2p}} dt.$$

Tässä oleva integraali voidaan laskea Γ -funktion avulla, sillä sen integrandi on parillinen ja muuttujanvaihdolla $u = t^{2p}$ siitä saadaan

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-|t|^{2p}} dt = 2 \int_0^{\infty} e^{-t^{2p}} dt = 2 \int_0^{\infty} e^{-u} \frac{u^{-1+1/(2p)}}{2p} du = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2p}\right)}{p}.$$

Tästä saadaan funktion F johtavaksi asymptoottiseksi käytökseksi

$$F(T) \approx \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2p}\right)}{p} \frac{f(x_0)}{h'(x_0)} e^{g_0 T} T^{-\frac{1}{2p}} \quad (T \rightarrow \infty).$$

Tulosta voi myös tarvittaessa tarkentaa täydeksi (asymptoottiseksi) sarjakehitelmäksi käyttäen funktion G Taylorin polynomiaprossimaatiota. Tällöin voidaan nimittäin integrandiin sijoittaa

$$G(t) = \sum_{k=0}^n \frac{G^{(k)}(0)}{k!} t^k + R_n(t; 0),$$

josta saadaan toistamalla yllä olevat laskut kullakin k lopputulokseksi

$$F(T) \sim \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ parillinen}}}^{\infty} \frac{G^{(k)}(0)}{k!} \frac{\Gamma\left(\frac{k+1}{2p}\right)}{p} e^{g_0 T} T^{-\frac{k+1}{2p}} \quad (T \rightarrow \infty),$$

sillä tässäkin parittomille k on $\int_{-\infty}^{\infty} u^k e^{-|u|^{2p}} du = 0$.

Lisää yleistyksiä löytyy esimerkiksi lähteestä [7, Luku 7.7].

5.5.2 Liite: Parillisten ja parittomien funktioiden yli integrointi

Määritelmä 5.17 *Funktio $f(x)$ on **parillinen**, jos $f(-x) = f(x)$, ja **pariton**, jos $f(-x) = -f(x)$.*

Aina, kun $R > 0$, pätee

- Jos f on *parillinen*,

$$\int_{-R}^R f(x) dx = 2 \int_0^R f(x) dx, \quad \text{ja} \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 2 \int_0^{\infty} f(x) dx.$$

- Jos f on *pariton*,

$$\int_{-R}^R f(x) dx = 0, \quad \text{ja} \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 0.$$

Nämä kaikki tulokset seuraavat suoraan alla olevasta muuttujanvaihdosta, joka pätee ilman mitään oletuksia funktion f parillisuudesta:

$$\int_{-R}^R f(x) dx = \int_{-R}^0 f(x) dx + \int_0^R f(x) dx = \int_0^R f(-y) dy + \int_0^R f(x) dx = \int_0^R (f(x) + f(-x)) dx.$$

5.5.3 Analyttiset kompleksiarvoiset satulapisteintegraalit

Esimerkki 5.18 (Vapaan hiukkasen asymptoottinen käytös) Aloitetaan kirjoittamalla Schrödingerin yhtälön ratkaisu (5.29) satulapistemuotoon, eli funktion

$$F(T) := \int_{\gamma} f(z) e^{Tg(z)} dz \quad T \geq 0,$$

avulla sopivasti f ja g valitsemalla. Yksinkertaistetaan ensin tehtävää muuttujanvaihtoja hyväksi käyttäen. Oletetaan, että $x \in \mathbb{R}$, $t > 0$ ja määritellään kuten yhtälössä (5.29)

$$\psi_t(x) := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{i(px - t\frac{1}{2m}p^2)} \widehat{\psi}_0(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{i\frac{t}{m}(p\frac{mx}{t} - \frac{1}{2}p^2)} \widehat{\psi}_0(p).$$

Jos $x < 0$, voidaan jäljelle jäävään integraaliin tehdä muuttujanvaihto $q = -p$, josta saadaan

$$\psi_t(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} e^{i\frac{t}{m}(-\frac{mx}{t}q - \frac{1}{2}q^2)} \widehat{\psi}_0(-q).$$

Näin ollen on kaikissa tapauksissa

$$\psi_t(x) = F(T) := \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\gamma_{-R \rightarrow R}} f(z) e^{Tg(z)} dz,$$

jossa $T := t/m > 0$ ja määritellään vakion $\alpha := \left| \frac{mx}{t} \right| \geq 0$ avulla

$$g(z) := i \left(\alpha z - \frac{1}{2} z^2 \right), \quad f(p) := \frac{1}{2\pi} \begin{cases} \widehat{\psi}_0(p), & \text{kun } x > 0, \\ \widehat{\psi}_0(-p), & \text{kun } x < 0. \end{cases}$$

Oletetaan, että $\widehat{\psi}_0(p)$ on reaaliakselilla määritelty funktio, jolla on analyyttinen jatke koko kompleksitasoon. Tällöin myös $f(z) = \widehat{\psi}_0(\pm z)/(2\pi)$ on kokonainen funktio. Jäljelle jää satulapistointegraalin $F(T)$ asymptotiikkaan ratkaiseminen, kun $T \rightarrow \infty$ ja $\alpha \geq 0$ on kiinnitetty vakio. Tästä saadaan funktion $\psi_t(x)$ asymptoottinen käytös arvolla $x = m^{-1}\alpha t = O(t)$, kun $t \rightarrow \infty$.

Satulapisteapproksimaatiota varten huomataan, että

$$g'(z) = i(\alpha - z) \quad \text{ja} \quad g''(z) = -i.$$

Näin ollen g :llä on tasan yksi satulapiste, $z_0 = \alpha$, joka sijaitsee reaaliakselilla ja tässä pisteessä $g''(z_0) = -i = -e^{i\varphi_0}$, kun $\varphi_0 := \text{Arg}(-g''(z_0)) = \frac{\pi}{2}$. Koska g on toisen asteen polynomi, on sen toisen asteen Taylorin polynomiapproksimaatio eksakti, eli pätee

$$g(z) = g(z_0) + \frac{1}{2}g''(z_0)(z - z_0)^2 = i\frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{1}{2}e^{i\varphi_0}(z - \alpha)^2,$$

minkä näkee toki suoralla laskullakin. Näin ollen,

$$e^{Tg(z)} = e^{Tg(z_0)} e^{-\frac{T}{2}e^{i\varphi_0}(z - z_0)^2}, \quad (5.32)$$

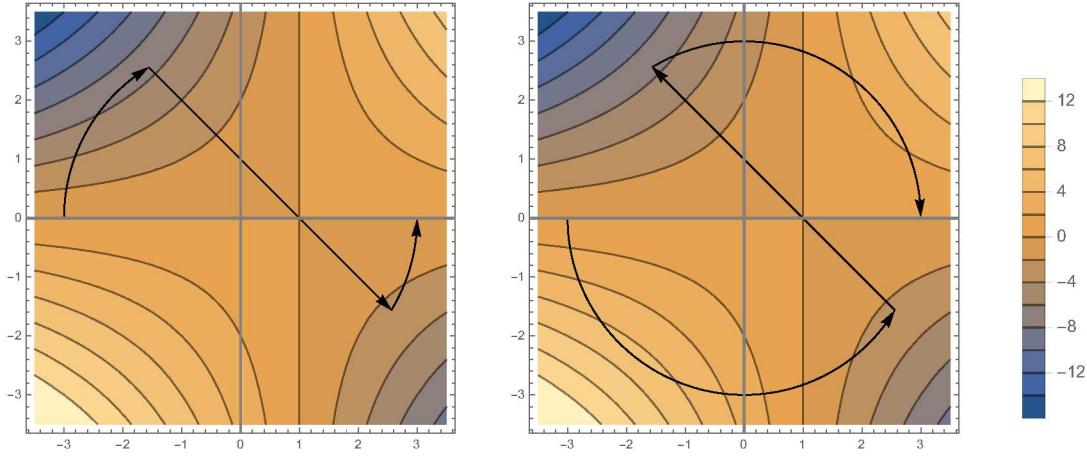
jossa $T > 0$.

Jatkoa varten tarkastellaan hetken ajan kaavan (5.32) funktiota yleisellä argumentilla $\varphi_0 := \text{Arg}(-g''(z_0))$. Huomataan, että vastaava integraali muuttuu reaalisena satulapistemuotoon, jossa $e^{-\frac{T}{2}e^{i\varphi_0}(z - z_0)^2} = e^{-\frac{T}{2}y^2}$, jos siinä valitaan integrointikäyräksi suora $z = \gamma_0(y) = z_0 + e^{i\varphi_0}y$, $y \in [-R, R]$, ja kulma φ toteuttaa

$$1 = e^{i\varphi_0} (e^{i\varphi})^2 = e^{i(\varphi_0 + 2\varphi)} \Leftrightarrow \varphi = -\frac{\varphi_0}{2} + \pi n, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Näistä ratkaisuista saadaan sijoituksella polkuun γ_0 aikaiseksi tasan kaksi eri polkua γ_1 ja γ_2 , jotka vastaavat valintoja $\varphi = \varphi_1 := -\frac{\varphi_0}{2}$ ja $\varphi = \varphi_2 := \pi + \varphi_1$ (muut ratkaisut ovat joko muotoa $\varphi = \varphi_1 + 2\pi n$ tai $\varphi = \varphi_2 + 2\pi n$, jollakin $n \in \mathbb{Z}$, joista ensimmäiselle pätee $e^{i\varphi} = e^{i\varphi_1}$ ja toiselle $e^{i\varphi} = e^{i\varphi_2}$). Lisäksi $e^{i\varphi_2} = e^{i\pi}e^{i\varphi_1} = -e^{i\varphi_1}$, joten nähdään, että polku γ_2 on itse asiassa polun γ_1 käänteispolku, sillä $\gamma_2(y) = z_0 - e^{i\varphi_0}y = \gamma_1(-y)$. Poluista γ_1 ja γ_2 sanotaan, että ne kulkevat satulapisteen läpi **nopeimman vähenemisen suuntaan** eli ”**satulapistereittä pitkin**”. Koska yllä on valittu φ_0 argumentin päähaarasta, pätee sille $\varphi_0 \in]-\pi, \pi[$, joten $\varphi_1 \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$. Erikoistapauksessa $\varphi_0 = \pi$ saadaan $\varphi_1 = -\frac{\pi}{2}$, joten $e^{i\varphi_1} = -i$ ja polku $\gamma_1(y) = z_0 - iy$, $y \in [-R, R]$, kulkee satulapisteen läpi imaginääriakselin suuntaisesti ylhäältä alaspäin. Muuten on $|\varphi_1| < \frac{\pi}{2}$, jolloin $\cos \varphi_1 > 0$ ja polun γ_1 x -koordinaatti kompleksitasossa toteuttaa $\text{Re } \gamma_1(y) = \alpha + y \cos(\varphi_1)$. Tässä tapauksessa siis γ_1 kulkee kompleksitasossa satulapisteen läpi vasemmalta oikealle, kun y saa arvot $-R \rightarrow R$.

Sijoittamalla tähän $\varphi_0 = \frac{\pi}{2}$ saadaan $\varphi_1 = -\frac{\pi}{4}$ ja sitä vastaava polku γ_1 , joka kulkee satulapisteen läpi 45° kulmassa vasemmalta oikealle, sekä sen käänteispolku γ_2 . Koska sekä f että g ovat kokonaisia funktioita, voi Cauchyn lausetta ja sen seurausta Lauseessa 1.41 soveltaa koko



Kuva 5.3: Esimerkin 5.18 satulapisteapproksimaatioon liittyvien polkujen kuvaajia ($\alpha = 1$, $R = 3$). Molempien kuvaajien taustana on satulapistefunktion reaalisosan $\operatorname{Re} g(x+iy)$ korkeuskäyräkuvaaja: eri värejä vastaavat arvot löytyvät kuvien oikealta puolelta. (Vasen kuva) Kuvaaja satulapistereitin γ_1 sisältävälle integrointipolulle $\tilde{\gamma}_1$, joka kulkee pääasiassa funktion $\operatorname{Re} g$ negatiivisten arvojen kautta. (Oikea kuva) Kuvaaja satulapistereitin γ_2 sisältävälle integrointipolulle $\tilde{\gamma}_2$, joka kulkee myös funktion $\operatorname{Re} g$ positiivisten arvojen kautta.

kompleksitasossa. Alkuperäinen integrointipolku $\gamma_{-R \rightarrow R}$ kulkee satulapisteen $z_0 = \alpha$ läpi reaaliakselia pitkin ja se kannattaa nyt muuntaa kulkemaan satulapisteen läpi jompaakumpaa satulapistereittiä pitkin. Molemmat vaihtoehdot voi tehdä täydentämällä joko polku γ_1 tai polku γ_2 sopivasti R -säteistä ympyränkaarta pitkin kulkevilla poluilla, jotka yhdistävät polkujen päätepisteet alkuperäisen polun $\gamma_{-R \rightarrow R}$ päätepisteisiin. Näin saadaan kaksi polkua $\tilde{\gamma}_1$ ja $\tilde{\gamma}_2$, Kuvan 5.3 osoittamilla tavoilla.

Tavoitteena on, että lisätyt ympyränkaarta pitkin kulkevat integraalit häviäisivät rajalla $R \rightarrow \infty$. Kuten kuvasta 5.3 nähdään, kulkee polku $\tilde{\gamma}_2$ sellaisen alueen läpi, jossa $\operatorname{Re} g$ on positiivinen, ja osoittautuukin, että yllä vaadittu häviämisehto ei toteudu polulle $\tilde{\gamma}_2$. Toisaalta, koska pisteissä $z = Re^{is}$, $s \in [0, 2\pi]$, on

$$g(z) = i \left(\alpha Re^{is} - \frac{1}{2} R^2 e^{i2s} \right) \Rightarrow \operatorname{Re} g(z) = R^2 \sin s \left(\cos s - \frac{\alpha}{R} \right).$$

Tämän avulla voi todistaa, että polkuun γ_1 lisätyt ympyränkaaren pätkät eivät tuota mitään raja-arvoon $R \rightarrow \infty$, kunhan f säilyy riittävän rajoitettuna integraalien sisällä (vrt. Jordanin lemma). Tällöin saadaan siis

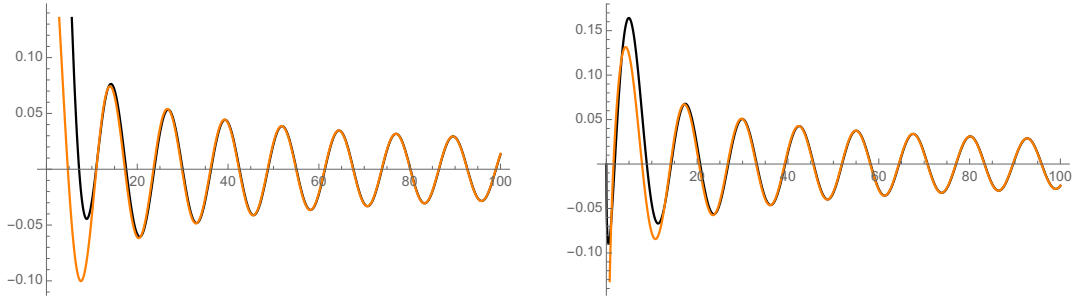
$$F(T) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\gamma_1} f(z) e^{Tg(z)} dz = \int_{-\infty}^{\infty} f(z_0 + e^{i\varphi_1} y) e^{Tg(z_0)} e^{-\frac{1}{2} T y^2} e^{i\varphi_1} dy,$$

jossa neliöjuuren päähaaraa käyttäen voidaan kirjoittaa

$$e^{i\varphi_1} = e^{-i\frac{\varphi_0}{2}} = \frac{1}{e^{i\frac{\varphi_0}{2}}} = \frac{1}{\sqrt{-g''(z_0)}}.$$

sillä $|-g''(z_0)| = 1$. Jäljelle jäävään integraaliin (tai sen reaali- ja imaginääriosaan erikseen) voidaan soveltaa reaalista satulapisteapproksimaatiota, joka antaa kun $T \rightarrow \infty$,

$$F(T) \approx f(z_0) \frac{1}{\sqrt{-g''(z_0)}} e^{Tg(z_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{T}} = f(z_0) e^{Tg(z_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{-g''(z_0)T}}. \quad (5.33)$$



Kuva 5.4: Satulapisteapproksimaation (5.33) (oranssi käyrä) ja vastaavan numeerisesti lasketun integraalin arvot (musta käyrä), kun $f(z) = 1/(1 + 8(z - 2)^2)$ ja $\alpha = 1$. (Vasen kuva) Reaaliosa, kun $T \in [0, 100]$. (Oikea kuva) Imaginääriosia, kun $T \in [0, 100]$.

Kuvassa 5.4 on verrattu satulapisteapproksimaation tarkkuutta erälle integroituvalla funktiolla f . Tämä voidaan vielä täydentää asymptoottiseksi sarjaksi käyttäen funktion f Taylorin sarjaa ja aiempia tuloksia

$$F(T) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(2n)}(z_0)}{(2n)!!} (-g''(x_0)T)^{-n} e^{Tg(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{-g''(x_0)T}} \quad (T \rightarrow \infty)$$

Tästä saadaan Schrödingerin yhtälön ratkaisulle asymptoottinen approksimaatio sijoittamalla $T = t/m$, $z_0 = \alpha = m|x|/t$ ja $f(z) = (2\pi)^{-1} \hat{\psi}_0(\sigma z)$, jossa σ on paikan x merkki. Tuloksena on, kun $t \rightarrow \infty$, ja vaihtaan rajalla kiinteänä pidettäväksi suureeksi $v_0 := \sigma\alpha/m = x/t$, joka vastaa vakionopeutta,

$$\psi_t(x)|_{x=v_0 t} \approx \hat{\psi}_0(mv_0) e^{it \frac{1}{2} m v_0^2} \frac{1}{\sqrt{i 2\pi t/m}} \quad (t \rightarrow \infty).$$

Tästä nähdään, että alkutilaan liittyvän funktion $\hat{\psi}_0(p)$ voi ajatella kuvaavan hiukkasen alkutilan liikemäärän jakaumaa. Nimittäin, jos funktio on esimerkiksi keskittynyt arvon $p_0 \in \mathbb{R}$ kohdalle, saadaan yllä olevasta approksimaatiosta jotain merkittävää vain, jos $mv_0 \approx p_0$, eli $x \approx p_0 t/m$. Tämä on analoginen origosta lähtevän liikemäärän p_0 omaavan vapaan klassisen hiukkasen kanssa, jonka rata on $x(t) = p_0 t/m$. Huomataan myös, että aaltofunktion oskillaatiot, termi $e^{it \frac{1}{2} m v_0^2}$, liittyy suoraan vastaavan klassisen hiukkasen energiaan, joka on $E_0 := \frac{1}{2m} p_0^2 \approx \frac{1}{2} m v_0^2$.

Yleinen kompleksinen satulapisteapproksimaatio saadaankin aina laskettua yllä olevia ideoita seuraten. Sen voi tiivistää seuraavaksi algoritmiksi: lähdetään liikkeelle funktiosta

$$F(T) := \int_{\gamma} f(z) e^{Tg(z)} dz \quad T \geq 0,$$

jossa f ja g on analyyttisiä, polku γ kulkee niiden analyyttisyysalueessa ja ollaan kiinnostuneita rajasta $T \rightarrow \infty$. Tällöin saadaan aikaiseksi hyvä approksimaatio etenemällä seuraavasti:

1. Etsitään kaikki funktion g **kriittiset pisteet** eli z_0 , joilla $g'(z_0) = 0$.
2. Valitaan näistä vain ne, jotka ovat **ei-degeneroituneita** eli poistetaan joukosta kaikki ne pisteet, joissa $g''(z_0) = 0$.
3. Muokataan Cauchyn lauseen avulla integrointipolku γ poluksi $\tilde{\gamma}$ tavoitteena, että
 - polkua $\tilde{\gamma}$ pitkin $\operatorname{Re} g(z)$ on mahdollisimman pieni;
 - polku $\tilde{\gamma}$ kulkee vähintään yhden ei-degeneroituneen kriittisen pisteen läpi.

Tämän jälkeen voidaan polkua $\tilde{\gamma}$ edelleen muokata siten, että se kulkee jokaisen satulapisteen z_0 läpi ”satulapistereittä pitkin”. Tarkemmin voidaan vaatia, että arvoilla $z = \tilde{\gamma}(t_0 + y)$, kun $|y|$ on riittävän pieni ja t_0 on valittu siten, että $\tilde{\gamma}(t_0) = z_0$, pätee

$$e^{Tg(z)} = e^{Tg(z_0)} e^{-\frac{\alpha T}{2} y^2},$$

jossa $\alpha = |-g''(z_0)| > 0$. Osoittautuu, että tämä satulapistereitti on joko muotoa γ_1 tai γ_2 edellisessä esimerkissä, ja pisteen yli kulkevan viivaintegraalin arvolla on tässäkin tapauksessa approksimaatio

$$(\pm 1)f(z_0)e^{Tg(z_0)}\sqrt{\frac{2\pi}{-g''(z_0)T}},$$

jossa valitaan merkki ”+”, jos satulapiste z_0 ylitetään ”normaalisuuntaan” (*vasemmalta oikealle tai pystysuoraan ylhäältä alas*), ja muuten siihen valitaan ”-” (ensimmäinen tapaus liittyy polkuun γ_1 ja toinen tapaus sen käänteispolkuun γ_2). Näin ollen voidaan johtava termi satulapisteapproksimaatiossa kirjoittaa suoraan jopa ilman tarkkaa polun $\tilde{\gamma}$ tuntemista,

$$F(T) = \int_{\gamma} f(z)e^{Tg(z)} dz \approx \sum_{z_0} (\pm 1)f(z_0)e^{Tg(z_0)}\sqrt{\frac{2\pi}{-g''(z_0)T}} \quad (T \rightarrow \infty),$$

jossa oleva summa lasketaan kaikkien polulla $\tilde{\gamma}$ sijaitsevien satulapisteiden z_0 yli ja tätä vastaavaksi merkiksi valitaan ”+”, jos satulapiste ylitetään ”normaalisuuntaan” ja muuten se on ”-”. Lisäksi on hyvä muistaa, että **tässä olevassa neliöjuuressa valitaan aina päähaaran arvo**.

Tulosta voi tarkentaa täydeksi asympotoottiseksi sarjaksi, mutta tällöin olisi myös kompleksisessä tapauksessa hyvä tarkistaa, että satulapisteiden ulkopuolelle jäävä integrointikäyrän osa ei tuota mitään suurempaa kontribuutiota kuin asympotoottisen sarjan termit. Korjaustermien laskeminen on kuitenkin usein hyvin hankalaa, sillä ne tulevat riippumaan yllä olevasta satulapisteepolusta $\tilde{\gamma}$. Tarkempia yksityiskohtia löytyy seuraavasta valinnaisesta luvusta.

5.5.4 (Lisä) Satulapistealgoritmin tarkempi perustelu

Lähdetään liikkeelle tilanteesta, jossa polku γ on jo muokattu kulkemaan jonkin ei-degeneroituneen satulapisteen z_0 kautta ja näytetään, että se voidaan muokata tämän pisteen ympäristössä muotoon, josta satulapisteapproksimaatio saadaan suoraan laskettua. Muokkaaminen tullaan tekemään Kuvan 5.3 tavalla jossain äärellisäteisessä kiekossa. Näin ollen sen kiekon reunoja kiertävä osa ei välttämättä suoraan olekaan eksponentiaalisen pieni vaikka se tyypillisesti onkin pienempi kuin satulapisteapproksimaation johtava termi. *Jos kompleksisesta satulapisteapproksimaatiosta on tarkoitus käyttää myös korjaustermejä*, olisi tärkeää pystyä suoraan valitsemaan käyrä γ siten, että se kulkee alla rakennettavaa satulapistereittä kiekon sisällä. Tätä varten annetaan lopussa myös yhtälöitä, joista reitin voi periaatteessa ratkaista.

Tutkitaan siis viivaintegraalia

$$F(T) := \int_{\gamma} f(z)e^{Tg(z)} dz \quad T \geq 0,$$

ja oletetaan, että polku γ kulkee pisteen z_0 kautta, jossa pätee $g'(z_0) = 0$ ja $g''(z_0) \neq 0$. Tarkemmin vaaditaan, että käyrän parametriväli (a, b) sisältää pisteen $t_0 \in (a, b)$, jossa $\gamma(t_0) = z_0$. Oletetaan lisäksi, että f ja g ovat analyyttisiä alueessa Ω , joka sisältää pisteen z_0 . Satulapistereitin etsiminen tehdään käyttäen kompleksiarvoista versiota Luvussa 5.5.1 mainitusta Morsen lemmasta, jonka todistuskin on hyvin samanlainen.

Lause 5.19 (Morsen lemma) *Olkoon $g \in H(\Omega)$ ja $z_0 \in \Omega$ sen ei-degeneroitunut kriittinen piste: $g'(z_0) = 0$ ja $g''(z_0) \neq 0$. Tällöin löytyy jokin pisteen z_0 ympäristö $U \subset \Omega$, ja sinä määritelty kääntyvä analyyttinen kuvaus $h : U \rightarrow B_{\varepsilon}(0)$ johonkin avoimeen kiekkoon $B_{\varepsilon}(0)$ siten, että $h(z_0) = 0$, $h'(z_0) = 1$ ja*

$$g(z) = g(z_0) + \frac{1}{2}g''(z_0)h(z)^2, \quad z \in U. \quad (5.34)$$

TODISTUS (MAT) Merkitään $b = g''(z_0) \neq 0$. Kuten reaalisisä tapauksessa, myös kompleksifunktiolle pätee osittaisintegroinnilla johdettavissa oleva identiteetti

$$g(z) = g(z_0) + \frac{b_0}{2}(z - z_0)^2 I(z),$$

kun määritellään

$$I(z) := \int_0^1 \frac{2}{b_0} g''(r(z - z_0) + z_0)(1 - r) dr.$$

Koska $I(z_0) = 1$ ja I on jatkuva, löytyy pisteen z_0 ympäristöstä alue $V \subset \Omega$, jossa $\operatorname{Re} I(z) > 0$. Lisäksi I on analyyttinen alueessa V , joten myös yhdistetty funktio $\sqrt{I(z)}$ on analyyttinen siinä, ja voidaan määritellä analyyttinen funktio

$$h(z) := (z - z_0)\sqrt{I(z)}, \quad z \in V,$$

jolle kaava (5.34) pätee. Lisäksi $h(z_0) = 0$ ja ketjusäännön perusteella $h'(z_0) = \sqrt{I(z_0)} = 1$. Tämän jälkeen analyyttisten funktioiden käänteiskuvauslauseesta [3, Lause 10.30] seuraa, että löytyy pisteen z_0 ympäristö $W \subset V$, jossa h on injektio ja sen kuvajoukko on kompleksitason avoin joukko. Koska $h(z_0) = 0$, kuuluu origo tähän kuvajoukkoon, joten löytyy $\varepsilon > 0$, jolla myös kiekko $B_\varepsilon(0)$ sisältyy kuvajoukkoon. Määritellään $U := h^{-1}(B_\varepsilon(0))$ ja rajoitetaan funktio h tähän avoimeen joukkoon U , jolloin saadaan aikaiseksi kaikki lauseen ehdot toteuttava funktio. \square

Kuten edellisen luvun esimerkissä, määritellään nyt $\alpha := |-g''(z_0)|$, $\varphi_0 := \operatorname{Arg}(-g''(z_0))$ ja olkoon φ joko $\varphi_1 = -\frac{\varphi_0}{2}$ tai $\varphi_2 = \pi + \varphi_1$, jolloin pätee $e^{i\varphi_0} (e^{i\varphi})^2 = 1$. Tämän jälkeen voidaan määritellä

$$\tilde{\gamma}(t_0 + y) := h^{-1}(e^{i\varphi} y),$$

aina kun $|y| < \varepsilon$, ja kaikissa näissä pisteissä on yhtälön (5.34) mukaan

$$g(\tilde{\gamma}(t_0 + y)) = g(z_0) + \frac{1}{2}g''(z_0)h(\tilde{\gamma}(t_0 + y))^2 = g(z_0) - \frac{1}{2}\alpha e^{i\varphi_0} (e^{i\varphi} y)^2 = g(z_0) - \frac{1}{2}\alpha y^2.$$

Tämä on siis toivottua satulapistemuotoa. Jos R toteuttaa ehdon $0 < R \leq \varepsilon$, saadaan välin $]-R, R[$ yli otetusta viivaintegraalista

$$\int_{\tilde{\gamma}} f(z)e^{Tg(z)} dz = \int_{-R}^R f(\tilde{\gamma}(t_0 + y))e^{Tg(z_0)} e^{-T\frac{1}{2}\alpha y^2} \tilde{\gamma}'(t_0 + y) dy = e^{Tg(z_0)} \int_{-R}^R G(y)e^{-\frac{1}{2}\alpha T y^2} dy,$$

jossa

$$G(y) := \tilde{\gamma}'(t_0 + y)f(\tilde{\gamma}(t_0 + y)).$$

Luvun 5.5.1 tekniikoin saadaan tästä siis johtava satulapisteapproksimaatio

$$\int_{\tilde{\gamma}} f(z)e^{Tg(z)} dz \approx e^{Tg(z_0)} G(0) \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha T}},$$

ja vastaava täysi asymptoottinen sarja

$$\int_{\tilde{\gamma}} f(z)e^{Tg(z)} dz \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{G^{(2n)}(0)}{(2n)!!} (\alpha T)^{-n} e^{Tg(z_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha T}} \quad (T \rightarrow \infty).$$

Johtavassa termissä esiintyy $G(0) = \tilde{\gamma}'(0)f(\tilde{\gamma}(0))$, jossa $\tilde{\gamma}(0) = h^{-1}(0) = z_0$ ja polun derivaatta voidaan laskea käyttäen analyyttisen funktion käänteisfunktion derivaatan kaavaa

$$\tilde{\gamma}'(0) = \frac{1}{h'(h^{-1}(0))} e^{i\varphi} = \frac{1}{h'(z_0)} e^{i\varphi} = e^{i\varphi}.$$

Tässä $e^{i\varphi} = \pm e^{i\varphi_1}$, jossa miinusmerkki valitaan käyrää γ_2 vastaavassa tapauksessa $\varphi = \varphi_2 = \pi + \varphi_1$. Näin ollen

$$\tilde{\gamma}'(0) = \pm e^{-i\frac{\varphi_0}{2}} = \pm \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{-g''(z_0)}},$$

kuten edellisessäkin Luvussa kävi. Johtava satulapisteepproksimaatio voidaan siis kirjoittaa neliojuuren päähaaraa käyttäen muodossa

$$\int_{\tilde{\gamma}} f(z) e^{Tg(z)} dz \approx \pm f(z_0) e^{Tg(z_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{-g''(z_0)T}},$$

Annettu satulapisteen kautta kulkeva käyrä γ voidaan nyt muuntaa kulkemaan joko polkua γ_1 (vastaa polkua $\tilde{\gamma}$, kun $\varphi = \varphi_1$ yllä) tai polkua γ_2 (vastaa polkua $\tilde{\gamma}$, kun $\varphi = \varphi_2$ yllä) pitkin, jossa ensimmäisessä tapauksessa saadaan johtavaan approksimaatioon plusmerkki ja toisessa miinusmerkki.⁷ Kumpi näistä käyristä täytyy tähän valita, riippuu alkuperäisen polun tulosuunnasta. Kuten yleisessä reaaliosassa tapauksessa, ei satulapisteepproksimaatio sano mitään siitä kuinka suuri satulapisteen ympäristön ulkopuolelle jäävän integraalin arvo on, vaan se täytyy arvioida tarvittaessa erikseen.

Palataan vielä lopuksi optimaalisen satulapistepolun $\tilde{\gamma}$ etsimiseen. Se toteuttaa jossain nollan ympäristössä ehdon $g(\tilde{\gamma}(t_0 + y)) = g(z_0) - \frac{1}{2}\alpha y^2$. Ottamalla tästä imaginääriosaa, nähdään että täytyy päteä

$$\operatorname{Im} g(\tilde{\gamma}(t_0 + y)) = \operatorname{Im} g(z_0),$$

eli **optimaalista käyrää pitkin satulapisteen läpi kuljettaessa säilyy funktion g imaginääriosaa vakiona**. Yllä olevaa yhtälöä voikin käyttää ratkaisemaan optimaalinen satulapistekäyrä. Kannattaa kuitenkin huomata, että yhtälöllä $\operatorname{Im} g(\gamma(t)) = \operatorname{Im} g(z_0)$ on aina kaksi ratkaisua, joista toinen syntyy suurimman kasvun reitistä, jolle $g(\gamma(t_0 + y)) = g(z_0) + \frac{1}{2}\alpha y^2$ (vastaa valintaa $\varphi = \frac{\pi - \varphi_0}{2}$). Reaaliosan avulla voi vastaavasti etsiä optimaalista käyrää ratkaisemalla differentiaaliyhtälö

$$\frac{d^2}{dy^2} \operatorname{Re} g(\tilde{\gamma}(t_0 + y)) = -\alpha = -|g''(z_0)|$$

alkuarvoilla $\tilde{\gamma}(t_0) = z_0$ ja $\tilde{\gamma}'(t_0) = e^{i\varphi}$.

5.5.5 (Lisä) Eulerin–Maclaurinin summakaava

Integraaleja voidaan aina approksimoida summilla käyttäen Riemannin summia (https://en.wikipedia.org/wiki/Riemann_sum): valitaan esimerkiksi tasavälien pisteitä, jotka jakavat integrointivälin osiin, ja korvataan funktion f arvot kullakin välillä vakiolla, joka voi olla esimerkiksi f :n päätepisteessä saama arvo. Esimerkiksi käyttämällä integrointivälin $[a, b]$ jakoa tasaväleihin, joita on n kappaletta, saadaan näin approksimaatio

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \sum_{j=1}^n f(a + (j-1)h), \quad h := \frac{b-a}{n} > 0. \quad (5.35)$$

Tätä kaavaa voi käyttää myös toiseen suuntaan, eli approksimoida suuria summia integraaleilla, niin kuin integraalitestissä Lauseessa 2.20 tehtiin.

Yllä olevan suoraviivaista menetelmää voi parantaa monilla tavoin olettamalla jotain lisää integrandista f . Yksi yllättävänkin tehokas tapa, **Eulerin–Maclaurinin summakaava**, löytyy silloin, kun f on useita kertoja jatkuvasti derivoituva, esimerkiksi analyyttinen tai sileä funktio. Tätä kaavaa käytetään molempiin yllä mainittuihin suuntiin: sekä parantamaan tarkkuutta

⁷(MAT) Muuntamista varten voidaan rajoittaa tarpeeksi pieneen arvon t_0 ympäristöön ja sen jälkeen ”kääntää” sen suunta joko käyrän γ_1 tai käyrän γ_2 suuntaiseksi, kuten Kuvassa 5.3 tehdään. Ainoa poikkeus tähän olisi, että polku saapuu satulapisteseen ja kääntyy siinä välittömästi takaisin. Tällöin emme kuitenkaan sano, että polku kulkee satulapisteen ”läpi”.

annetun integraalin arvon numeerisessa laskennassa ja approksimoimaan suuren summan, esimerkiksi jonkin sarjan osasumman, arvoa integraalien ja derivaattojen avulla. Summakaavan johtava termi saadaan jakamalla (5.35) välin pituudella h , ja korjaustermit sisältävät funktion f ja sen derivaattojen arvoja välin päätepisteissä:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n f(a + (j-1)h) &= \frac{1}{h} \int_a^b f(x) dx - \frac{1}{2} [f(b) - f(a)] + \frac{1}{12} h [f'(b) - f'(a)] \\ &+ A_4 h^3 [f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)] + \dots + A_{2m} h^{2m-1} [f^{(2m-1)}(b) - f^{(2m-1)}(a)] + R_{2m+1}, \end{aligned} \quad (5.36)$$

jossa $m \in \mathbb{N}$ on summakaavan aste ja sitä vastaava **jäännöstermi** toteuttaa seuraavat arviot

$$|R_{2m+1}| \leq \frac{2h^{2m}}{(2\pi)^{2m+1}} \int_a^b |f^{(2m+1)}(x)| dx. \quad (5.37)$$

Näissä kaavoissa esiintyvät vakiot ovat muotoa

$$A_{2k} := \frac{B_{2k}}{(2k)!}, \quad (5.38)$$

jossa B_n ovat **Bernoullin lukuja** (https://en.wikipedia.org/wiki/Bernoulli_number), joista lukua B_1 lukuun ottamatta parittomat ovat nollia ja parillisten merkki vuorottelee:

$$B_2 = \frac{1}{6}, \quad B_4 = -\frac{1}{30}, \quad B_6 = \frac{1}{42}, \quad B_8 = -\frac{1}{30}, \quad B_{10} = \frac{5}{66}, \quad \dots$$

Eulerin–Maclaurinin summakaava annetaan usein muodossa (tässä $B_1 := -\frac{1}{2}$ ja $h := \frac{b-a}{n}$)

$$\sum_{j=1}^n f(a + (j-1)h) = \frac{1}{h} \int_a^b f(x) dx + \sum_{k=1}^{2m} \frac{B_k}{k!} h^{k-1} [f^{(k-1)}(b) - f^{(k-1)}(a)] + R_{2m}.$$

Kuten muissakin tämän luvun esimerkeissä, ei tässä kaavassa yleensä kannata ottaa $m \rightarrow \infty$ vaan optimoida asteen m valintaa jäännöstermiä minimoimalla. Tyypillisesti kaava tuottaakin approksimaatioita asympotoottisina sarjoina.

Kaavan voi löytää lähtemällä liikkeelle sopivista funktioiden f ja $h^k f^{(k)}$, $k = 0, 1, \dots, n$, liittyvistä Taylorin polynomiapproksimaatioista ja summaamalla näitä sopivasti vakioita A_k käyttäen. Tämän luvun lopussa on liite, jossa on tästä vähän enemmän yksityiskohtia. Jäännöstermin arvion (5.37) johtaminen on huomattavasti hankalampaa, mutta siitä löytyy lisätietoja esim. Wikipediasta (https://en.wikipedia.org/wiki/Euler%E2%80%93Maclaurin_formula) ja sen lähdeviitteistä.

Esimerkki 5.20 Lasketaan 12 desimaalin tarkkuudella summan $\sum_{k=100}^{999} \frac{1}{k}$ numeerinen arvo.

Ratkaisu: Summa saadaan suoraan Eulerin–Maclaurinin kaavan muotoon valitsemalla $n = 900$, $a = 100$, $b = 1000$ ja $f(x) = 1/x$. Tällöin $h = 1$ ja funktion f viisi ensimmäistä derivaattaa ovat

$$f'(x) = -\frac{1}{x^2}, \quad f''(x) = \frac{2}{x^3}, \quad f^{(3)}(x) = -\frac{6}{x^4}, \quad f^{(4)}(x) = \frac{24}{x^5}, \quad f^{(5)}(x) = -\frac{120}{x^6}.$$

Valitsemalla $m = 2$ eli käyttämällä neljää ensimmäistä termiä Eulerin–Maclaurinin kehittelmästä saadaan tehdyille virheelle estimaatin (5.37) avulla arvioksi

$$|R_{2m}| \leq \frac{2}{(2\pi)^5} \int_a^b \frac{120}{x^6} dx = \frac{15}{2\pi^5} \int_{100}^{1000} \frac{1}{x^5} dx \leq \frac{3}{2 \cdot 3^5} 10^{-10} = \frac{1}{162} 10^{-10} < 0.7 \cdot 10^{-12}.$$

Saadaan siis tulokseksi

$$\begin{aligned} \sum_{k=100}^{999} \frac{1}{k} &\approx \int_{100}^{1000} \frac{1}{x} dx - \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1000} - \frac{1}{100} \right] - \frac{1}{12} \left[\frac{1}{10^6} - \frac{1}{10^4} \right] + \frac{6}{720} \left[\frac{1}{10^{12}} - \frac{1}{10^8} \right] \\ &= \ln \frac{1000}{100} + \frac{9}{2 \cdot 10^3} + \frac{99}{12 \cdot 10^6} - \frac{9999}{120 \cdot 10^{12}} \approx 2.307\,093\,342\,910\,721(700). \end{aligned}$$

Numeerinen summaus antaa arvoksi 15 desimaalin tarkkuudella

$$\sum_{k=100}^{999} \frac{1}{k} \approx 2.307\,093\,342\,910\,725.$$

Havaintaan, että virhearviokin osui kohtuullisen hyvin kohdalleen.

Liite: Eulerin–Maclaurinin summakaavan johto

Helpotetaan tehtävää käyttämällä apufunktiota $F(y) := f(a + yh)$, jolloin tavoitteena on arvioida summaa $\sum_{j=0}^{n-1} F(j)$. Oletetaan, että F on m kertaa jatkuvasti derivoitua ja määritellään

$$g_0(y) := \int_0^y F(x)dx, \quad g_k(y) := F^{(k-1)}(y), \quad 1 \leq k \leq m+1.$$

Havaitaan, että derivointi kasvattaa tässä funktion ”astetta” k yhdellä, eli $g'_0(y) = g_1(y) = F(y)$, $g'_1(y) = g_2(y)$, ... Yleisestikin pätee siis $g_k^{(\ell)}(y) = g_{k+\ell}(y)$, kunhan $k + \ell \leq m$. Kehitetään kukin funktioista g_k Taylorin polynomiksi asteeseen $\ell = m - k$ saakka pisteessä $y = j$: Taylorin lauseen mukaan on

$$g_k(y) = g_k(j) + \sum_{\ell=1}^{m-k} \frac{g_k^{(\ell)}(j)}{\ell!} (y-j)^\ell + R_{k,m-k}(y; j),$$

jossa jäännöstermi toteuttaa

$$R_{k,m-k}(y; j) := \int_j^y \frac{g_k^{(m-k+1)}(t)}{(m-k)!} (y-t)^{m-k} dt.$$

Sijoittamalla arvoksi $y = j+1$ ja käyttämällä yllä mainittuja derivaattojen laskusääntöjä saadaan siis

$$g_k(j+1) - g_k(j) = \sum_{\ell=1}^{m-k} \frac{g_{k+\ell}(j)}{\ell!} + \int_j^{j+1} \frac{g_{m+1}(t)}{(m-k)!} (j+1-t)^{m-k} dt.$$

Valitaan kullekin yhtälölle tässä vaiheessa mielivaltainen kerroin A_k , $k = 0, 1, 2, \dots, m$, ja lasketaan ne kertomisen jälkeen yhteen. Tästä saadaan

$$\sum_{k=0}^m A_k [g_k(j+1) - g_k(j)] = \sum_{k=0}^m A_k \sum_{i=k+1}^m \frac{g_i(j)}{(i-k)!} + \int_j^{j+1} \sum_{k=0}^m A_k \frac{g_{m+1}(t)}{(m-k)!} (j+1-t)^{m-k} dt.$$

Vaihtamalla summausjärjestystä nähdään, että

$$\sum_{k=0}^m A_k \sum_{i=k+1}^m \frac{g_i(j)}{(i-k)!} = \sum_{i=1}^m g_i(j) \sum_{k=0}^{i-1} A_k \frac{1}{(i-k)!}.$$

Määritelläänkin nyt $A_0 := 1$ ja lasketaan loput kertoimet, $\ell = 1, 2, \dots$, rekursiivisesti kaavalla

$$A_\ell = - \sum_{k=0}^{\ell-1} \frac{A_k}{(\ell+1-k)!}.$$

Tällöin

$$\sum_{i=1}^m g_i(j) \sum_{k=0}^{i-1} A_k \frac{1}{(i-k)!} = g_1(j) = F(j),$$

joten ottaen huomioon, että $g_0(j+1) - g_0(j) = \int_j^{j+1} F(x)dx$, tällä valinnalla pätee

$$F(j) = \int_j^{j+1} F(x)dx + \sum_{k=1}^m A_k [F^{(k-1)}(j+1) - F^{(k-1)}(j)] + (-1)^{m+1} \int_j^{j+1} F^{(m)}(t) \frac{B_m(t-j)}{m!} dt,$$

johon ilmestyviä funktioita $B_m(x)$ kutsutaan Bernoullin polynomeiksi

$$B_m(x) := \sum_{k=0}^m A_k \frac{m!}{(m-k)!} (-1)^m (1-x)^{m-k}.$$

Näin ollen,

$$\sum_{j=0}^{n-1} F(j) = \int_0^n F(x) dx + \sum_{k=1}^m A_k \left[F^{(k-1)}(n) - F^{(k-1)}(0) \right] + R_m,$$

jossa jäännöstermi voidaan kirjoittaa helposti integraalina käyttäen polynomien B_m periodista jatketta $P_m(x) := B_m(x - [x])$, kun $[x]$ tarkoittaa reaaliluvun x kokonaislukuosaa,

$$R_m := (-1)^{m+1} \int_0^n F^{(m)}(x) \frac{P_m(x)}{m!} dx.$$

Jäännöstermiin estimointiin tarvitaan ylärajaa Bernoullin polynomeille välillä $[0, 1]$. Tähän löytyy viitteitä Wikipediasta. Lopuksi päästään tästä luvun alussa annettuihin kaavoihin, kun huomataan, että $F^{(k)}(y) = h^k f^{(k)}(a + yh)$, joten $F^{(k)}(0) = h^k f^{(k)}(a)$ ja $F^{(k)}(n) = h^k f^{(k)}(b)$.