Riemann ζ 函数的渐近分析与数值计算

林晓烁

中国科学技术大学数学科学学院

linxiaoshuo1225@mail.ustc.edu.cn

2023 年 6 月 24 日

内容

- Bernoulli 数与 Bernoulli 多项式
- Euler–Maclaurin 求和公式
- Riemann ζ 函数的数值计算方法

Bernoulli 数与 Bernoulli 多项式

定义 (Bernoulli 数)

通过幂级数

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} x^n$$

对 $n \in \mathbb{N}$ 定义 Bernoulli 数 B_n.

显然 $B_0 = 1$.

$$\begin{array}{ccccccc}
B_1 = -\frac{1}{2}, & B_2 = \frac{1}{6}, & \boxed{B_3 = 0}, & B_4 = -\frac{1}{30}, & \boxed{B_5 = 0}, \\
B_6 = \frac{1}{42}, & \boxed{B_7 = 0}, & B_8 = -\frac{1}{30}, & \boxed{B_9 = 0}, & B_{10} = \frac{5}{66}, \\
\boxed{B_{11} = 0}, & B_{12} = -\frac{691}{2730}, & \boxed{B_{13} = 0}, & B_{14} = \frac{7}{6}, & \boxed{B_{15} = 0}, \\
B_{16} = -\frac{3617}{510}, & \boxed{B_{17} = 0}, & B_{18} = \frac{43867}{798}, & \boxed{B_{19} = 0}, & B_{20} = -\frac{174611}{330}, & \cdots
\end{array}$$

除 B_1 外奇数项均为 0，而偶数项正负号交错出现.
相关的级数推导参见 Г. М. 菲赫金哥尔茨. 微积分学教程 [M]. 2. 高等教育出版社, 2006: 417-421. 注意其中对 Bernoulli 数的编号与这里采用的略有不同. 需具备数学分析 A3 知识.

Bernoulli 数与 Bernoulli 多项式

Bernoulli 多项式有多种等价定义，我们选用母函数定义法.

定义 (Bernoulli 多项式)

对任意 $x \in \mathbb{C}$，函数

$$F_x : \rho\mathbb{B} \to \mathbb{C}, \quad z \mapsto \frac{ze^{xz}}{e^z - 1}$$

是解析函数. 我们通过母函数

$$\frac{ze^{xz}}{e^z - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k(x)}{k!} z^k \quad (z \in \rho\mathbb{B}, x \in \mathbb{C})$$

来定义 Bernoulli 多项式 $B_k(x)$.

Bernoulli 数与 Bernoulli 多项式

Bernoulli 多项式的基本性质

(1) $B_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} B_k x^{n-k}$.

(2) $B_n(0) = B_n$.

(3) $B'_{n+1}(x) = (n+1)B_n(x)$.

(4) $B_n(x+1) - B_n(x) = nx^{n-1}$.

(5) $B_n(1-x) = (-1)^n B_n(x)$.

前 7 个 Bernoulli 多项式（含 $B_0(x)$）如下：

$$
\begin{aligned}
B_0(x) &= 1,\\
B_1(x) &= x - \frac{1}{2},\\
B_2(x) &= x^2 - x + \frac{1}{6},\\
B_3(x) &= x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{2}x,\\
B_4(x) &= x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30},\\
B_5(x) &= x^5 - \frac{5}{2}x^4 + \frac{5}{3}x^3 - \frac{1}{6}x,\\
B_6(x) &= x^6 - 3x^5 + \frac{5}{2}x^4 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{42}.
\end{aligned}
$$

我们后面关心的是它们在 $[0,1]$ 上的性质.

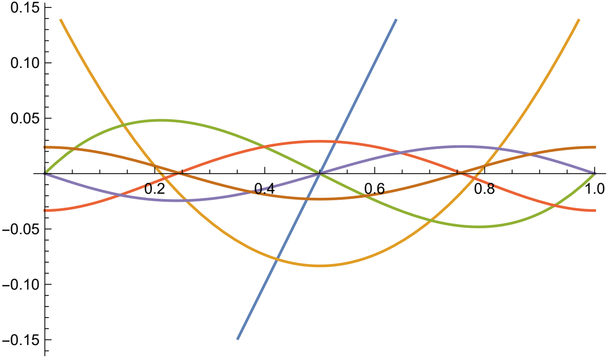


图: 前 6 个 Bernoulli 多项式（不含 $B_0(x)$）在 $[0,1]$ 上的图像

Euler–Maclaurin 求和公式

解析数论中渐近分析的基本手段

下面我们记 $\widetilde{B}_n$ 为函数 $B_n(x)|_{[0,1)}$ 在 $\mathbb{R}$ 上以 1 为周期的延拓，即

$$\widetilde{B}_n(x) := B_n(x - \lfloor x \rfloor), \quad x \in \mathbb{R}.$$

由前述性质可知，对 $n \geqslant 2$，$B_n(0) = B_n(1)$ 且 $\widetilde{B}_n \in \mathcal{C}^{n-2}(\mathbb{R})$.

定理 (Euler–Maclaurin 求和公式)

设 $a, b \in \mathbb{Z}$，$a < b$，$f \in \mathcal{C}^{2m+1}[a, b]$ $(m \in \mathbb{N}^*)$. 则

$$\sum_{k=a}^{b} f(k) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}[f(a) + f(b)] + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!} f^{(2k-1)}(x)\Big|_a^b + \frac{1}{(2m+1)!}\int_a^b \widetilde{B}_{2m+1}(x) f^{(2m+1)}(x)\,\mathrm{d}x.$$

证明参见 Amann H, Escher J. Analysis II[M]. 1. Birkhäuser Cham, 2008. 证明过程较繁琐，其核心在于分部积分法与 Bernoulli 多项式基本性质的反复配合使用. 需具备数学分析 A1 知识.

对 $s \in \mathbb{C}$，若 $\mathrm{Re}(s) > 1$，则由 Euler–Maclaurin 求和公式有

$$
\begin{aligned}
\zeta(s) &= \sum_{n=1}^{N-1} n^{-s} + \sum_{n=N}^{+\infty} n^{-s} \\
&= \sum_{n=1}^{N-1} n^{-s} + \int_N^{+\infty} x^{-s}\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}N^{-s} + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!} s(s+1)\cdots(s+2k-2)N^{-s-2k+1} \\
&\quad \underbrace{- \frac{s(s+1)\cdots(s+2m)}{(2m+1)!} \int_N^{+\infty} \widetilde{B}_{2m+1}(x) x^{-s-2m-1}\,\mathrm{d}x}_{\text{记为余项}R_{2m}}.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|R_{2m}| &= \left| \frac{s(s+1)\cdots(s+2m)}{(2m+1)!} \int_N^{+\infty} \widetilde{B}_{2m+1}(x) x^{-s-2m-1}\,\mathrm{d}x \right| \\
&= \left| \frac{s(s+1)\cdots(s+2m+1)}{(2m+2)!} \int_N^{+\infty} \left[B_{2m+2} - \widetilde{B}_{2m+2}(x) \right] x^{-s-2m-2}\,\mathrm{d}x \right| \\
&\leqslant \frac{|s(s+1)\cdots(s+2m+1)|}{(2m+2)!} \int_N^{+\infty} \left| B_{2m+2} - \widetilde{B}_{2m+2}(x) \right| x^{-\sigma-2m-2}\,\mathrm{d}x,
\end{aligned}
$$

其中 $\sigma = \mathrm{Re}(s)$.

注意到 $B_{2m+2}-\widetilde{B}_{2m+2}(x)$ 与 B_{2m+2} 同号，则有

$$
\begin{aligned}
&\int_N^{+\infty}\left|B_{2m+2}-\widetilde{B}_{2m+2}(x)\right| x^{-\sigma-2m-2}\,\mathrm{d}x\\
=&\int_N^{+\infty}(-1)^m\left[B_{2m+2}-\widetilde{B}_{2m+2}(x)\right] x^{-\sigma-2m-2}\,\mathrm{d}x\\
=&\left|B_{2m+2}\right|\int_N^{+\infty} x^{-\sigma-2m-2}\,\mathrm{d}x-\int_N^{+\infty}(-1)^m\widetilde{B}_{2m+2}(x)x^{-\sigma-2m-2}\,\mathrm{d}x\\
=&\frac{\left|B_{2m+2}\right|}{\sigma+2m+1}N^{-\sigma-2m-1}-\frac{\sigma+2m+2}{2m+3}\int_N^{+\infty}(-1)^m\widetilde{B}_{2m+3}(x)x^{-\sigma-2m-3}\,\mathrm{d}x\\
\leqslant&\left|\frac{B_{2m+2}}{\sigma+2m+1}\right|N^{-\sigma-2m-1}.
\end{aligned}
$$

最后就得到

$$
\begin{aligned}
|R_{2m}| &\leqslant \left| \frac{s(s+1)\cdots(s+2m+1)B_{2m+2}N^{-\sigma-2m-1}}{(2m+2)!(\sigma+2m+1)} \right| \\
&= \left| \frac{s+2m+1}{\sigma+2m+1} \right| \cdot \underbrace{\left| \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} s(s+1)\cdots(s+2m)N^{-s-2m-1} \right|}_{\text{恰好是舍掉的第一项的模长}}.
\end{aligned}
$$

上述方法不仅对 $\mathrm{Re}(s) > 1$ 成立. 从推导过程可见，只要 $\mathrm{Re}(s+2m+1) > 1$ 即适用. 另外，因为此处 m 是任意的，所以这也可以作为 $\zeta(s)$ 可以解析延拓至 $\mathbb{C}\backslash\{1\}$ 上（即除去极点 1 的整个复平面）的一种证明方式.

将 $s=2$ 代入前面的公式，

$$\zeta(2)=\sum_{n=1}^{N-1} n^{-2}+\int_{N}^{+\infty} x^{-2}\,\mathrm{d}x+\frac{1}{2}N^{-2}$$
$$+\sum_{k=1}^{m}\frac{B_{2k}}{(2k)!}2(2+1)\cdots(2+2k-2)N^{-2-2k+1}+R_{2m}.$$

现在的目标是选取比较大的 N 使 R_{2m} 在 m 不那么大时就在所需精度以内. 试取 $N=5, m=2$，代入前面的余项估计式，

$$|R_4|\leqslant\left|\frac{B_6}{6!}\cdot 2\cdot 3\cdot 4\cdot 5\cdot 6\cdot 5^{-7}\right|=\frac{1}{42\cdot 5^7}\approx 3.047619\times 10^{-7}.$$

于是在此误差范围内对 $\zeta(2)$ 的估计为

$$\zeta(2)\approx\sum_{n=1}^{4}\frac{1}{n^2}+\frac{1}{5}+\frac{1}{2\cdot 5^2}+\frac{1}{6\cdot 5^3}-\frac{1}{30\cdot 5^5}\approx\underbrace{1.64493}_{\text{精确位}}3778\sim\frac{\pi^2}{6}.$$

```python
def zeta_approx(s, N, m):
    part1 = 0
    for index in range(1, N):
        part1 += index ** (-s)
    part2 = N ** (1 - s) / (s - 1)
    part3 = 0.5 * N ** (-s)
    part4 = 0
    prod = 1
    for k in range(1, m + 1):
        prod = 1
        for l in range(0, 2 * k - 1):
            prod *= (s + l)
        part4 += (bernoulli(2 * k)[2 * k] / factorial(2 * k) * prod * N ** (-s - 2 * k + 1))
    approx = part1 + part2 + part3 + part4
    magnitude = abs(approx)
    prod *= ((s + 2 * m - 1) * (s + 2 * m))
    remainder = abs((s + 2 * m + 1) / (s.real + 2 * m + 1) * (
            bernoulli(2 * m + 2)[2 * m + 2] / factorial(2 * m + 2) * prod * N ** (-s - 2 * m - 1)))
    return approx, magnitude, remainder
```

图: 基于 Python 的数值计算方法实现

Riemann 猜想

Riemann ζ 函数的所有非平凡零点都位于复平面上 $\mathrm{Re}(s)=\frac{1}{2}$ 直线上.

我们用同样的方法在这条临界线上计算模长 $\left|\zeta\left(\frac{1}{2}+it\right)\right|$.

```python
from zeta_approx import zeta_approx as ap
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

plt.rc('font', size=14)
plt.rc('text', usetex=True)
t = np.arange(-50, 50, 0.001)
plt.plot(t, ap(0.5 + t * complex(0, 1), 30, 30)[1])
plt.xlabel(r"$t$", loc="right")
plt.ylabel(r"$\left|\zeta\left(\frac{1}{2}+it\right)\right|$", loc="top", rotation=0)
plt.grid(linestyle=':', linewidth=0.75)
plt.show()
```

图: 基于 Python 绘制 $\left|\zeta\left(\frac{1}{2}+it\right)\right|$ 的图像

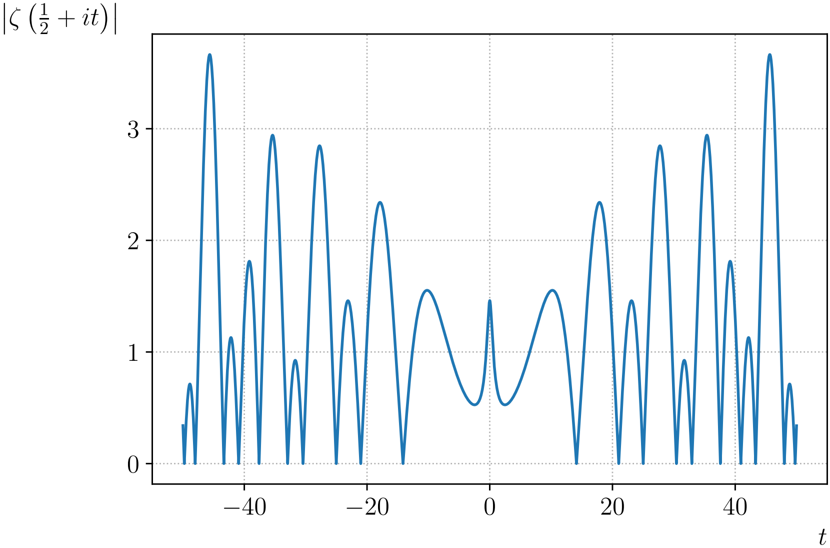


图: $\left|\zeta\left(\frac{1}{2}+it\right)\right|$ 在 $t \in [-50, 50]$ 上的图像

表: $\zeta(s)$ 在上半临界线的前 30 个零点（保留至小数点后 9 位）

n	t_n	n	t_n	n	t_n
1	14.134725142	11	52.970321478	21	79.337375020
2	21.022039639	12	56.446247697	22	82.910380854
3	25.010857580	13	59.347044003	23	84.735492981
4	30.424876126	14	60.831778525	24	87.425274613
5	32.935061588	15	65.112544048	25	88.809111208
6	37.586178159	16	67.079810529	26	92.491899271
7	40.918719012	17	69.546401711	27	94.651344041
8	43.327073281	18	72.067157674	28	95.870634228
9	48.005150881	19	75.704690699	29	98.831194218
10	49.773832478	20	77.144840069	30	101.317851006

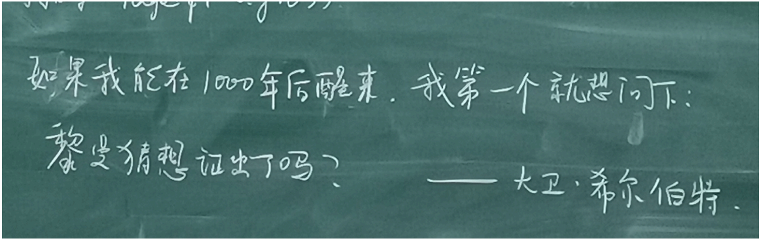
来源：Andrew Odlyzko: Tables of zeros of the Riemann zeta function

检验临界线上的第一个零点 $s=\frac{1}{2}+14.134725142i$（近似值）

```
s=0.5+14.134725142j
N=45
m=45
ζ((0.5+14.134725142j))的近似值为(-3.3085758525258635e-11+2.078153517326431e-10j)
模长为2.1043262064840111e-10
余项模长控制在3.3429298882175905e-77以内
```

从数量级可以认为这确实是 $\zeta(s)$ 的一个零点

完



——2022 年 11 月 26 日摄于第五教学楼教室