中華民國第65屆中小學科學展覽會
作品說明書

高級中等學校組　數學科

探究精神獎

050410

次方總和公式的拓展

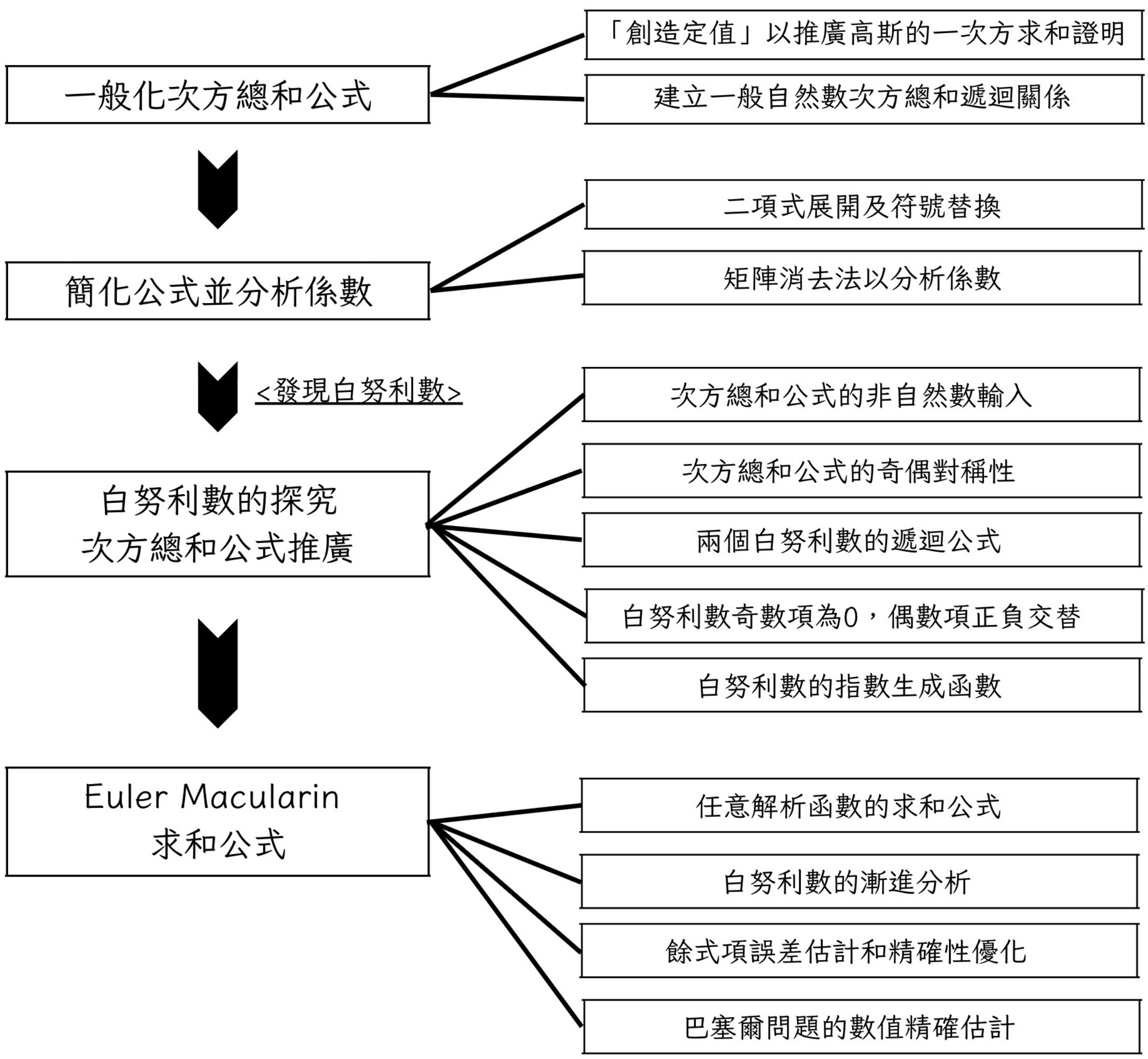
學校名稱： 臺中市私立華盛頓高級中學

作者：	指導老師：
高二 黃冠廷	吳宗翰

關鍵詞： 級數近似、數列分析、誤差估計

摘要

本研究以推導$S_m(n)=\sum_{k=1}^{n}k^m$一般自然數m次方總和的遞迴關係為起點，並進一步將其轉化為巴斯卡三角矩陣中的線性方程組。透過使用消去演算法，發現$S_m(n)$的多項式係數不論m皆由白努利數列控制。接著證明白努利數b_k的重要規律，推廣次方總和公式在非正整數的意義。再用次方總和公式來加總任何解析函數(平行加總泰勒級數)，整理得 Euler-Maclaurin 求和公式，然而此無窮級數通常會發散，透過數種技巧估計餘式項上界獲得最佳近似部分和，用以求巴爾賽問題(Basel Problem)的近似解至小數點後 18 位。



壹、研究動機

純粹是興趣，在國三時，我在已知高斯的自然數總和公式下，找出次方總和公式的一般公式（遞迴式）。而在高中再次接觸到相關內容時，不僅喚醒了我當初的回憶，更激發了對這個主題的熱情。藉著高中階段更成熟的數學工具與方法，我希望能進一步拓展原有的成果，並利用新的工具繼續延伸它。

我期待在少量的外界研究和幫助下，自主探究和解決問題。雖然，我知道這個主題大概率已經飽和了，很難發現全新的定理，儘管如此，仍希望能透過獨創的方法推論出既有的定理和公式，並讓我更深入理解數學的研究過程、提升分析與推導能力。

貳、研究目的

本次研究目的大致上可以分為以下四點：

一、尋找任意 m 次方總和 $S_m(n)$ 的遞迴式。

二、構造演算法優化 $S_m(n)$ 總和並探討係數的規律性。

三、推廣 $S_m(n)$ 總和公式到非正整數，並探討其係數與白努利數的關聯性。

四、推廣 $S_m(n)$ 至任意函數的連續總和並精準估計巴塞爾問題的收斂值。

參、研究設備及器材

一、桌上型電腦和智慧型手機及網際網路。

二、Microsoft Word、MathType 數學符號編輯軟體。

三、Youtube、StackExchange、Quora、Reddit、及 Google 搜尋引擎所含的其他網路資源。

四、Wolfram Alpha 數值計算機。

肆、研究過程及方法

一、尋找任意 *m* 次方總和的遞迴式

（一）回顧一次方總和公式並延伸出二次方總和公式

數學家高斯將自然數一次方和式子的首尾相加以得到「定值」，因此在推導二次方和公式時，我也試圖創造定值。我將數列首尾倒轉後與原數列相減，藉此生成平方差，因式分解出首項及末項之和（即為定值$n+1$）。

＃名詞符號定義＃

m 次方的總和：是指 1 到n的m次方的總和，其中$m,n\in N$，以符號「$S_m(n)$」表示。

即$S_m(n)=1^m+2^m+3^m+\cdots+(n-2)^m+(n-1)^m+n^m$；

並定義：$S_0(n)=1^0+2^0+3^0+\cdots+n^0=n$。

同時，以符號「$T_m(n)$」代表$S_m(n)-n^m$，並且$T_0(n)=n$。

【說明】

$$S_2(n)=1^2+2^2+3^2+\cdots+(n-2)^2+(n-1)^2+n^2$$

$$S_2(n)=n^2+(n-1)^2+(n-2)^2+\cdots+3^2+2^2+1^2$$

$$\begin{aligned}S_2(n)-S_2(n)&=(n^2-1^2)+[(n-1)^2-2^2]+[(n-2)^2-3^2]+\cdots+(1^2-n^2)\\&=(n+1)(n-1)+[(n-1)+2][(n-1)-2]+\cdots+(1+n)(1-n)\\&=(n+1)(\sum_{k=1}^{n}(n+1)-\sum_{k=1}^{n}2k)\\&=(n+1)[n(n+1)-2S_1]=0\end{aligned}$$

因 $n+1\neq 0 \Rightarrow S_1(n)=\frac{1}{2}n(n+1)$

【小結】

$S_2(n)$減去自己消失了，$S_1(n)$的產生是必然的，因為提出「定值$n+1$」的一次因式，剩下一次方的總和，回頭看高斯的$S_1(n)$推導，他在過程中也產生了$S_0(n)$，但被自然忽略變成n了，加上$S_1(n)$並無減去自己消失，因此得到$S_1(n)$與$S_0(n)$的關係式。

（二）由二次方總和公式再延伸至三次方總和公式

依上述分析，應該可以藉由找$S_3(n)$，同樣的找到$S_2(n)$、$S_1(n)$及$S_0(n)$的關係式，但上述的$S_2(n)$推導不能套用在$S_3(n)$，因為x^3-y^3沒有$x+y$的因式（只有次方是偶數才有該因式，這時$x=-y$為其根）。若要適用所有情況，就要使$x-y$（必然因式）為定值，於是在此嘗試製造出定值為$(k+1)-k=1$的差距。

【說明】

$$S_3(n)=1^3+2^3+3^3+\cdots+n^3$$

$$S_3(n)+(n+1)^3-1^3=2^3+3^3+\cdots+n^3+(n+1)^3$$

再相減：$[S_3(n)+(n+1)^3-1]-S_3(n)=\sum_{k=1}^{n}[(k+1)^3-k^3]$

$$=\sum_{k=1}^{n}([(k+1)-k][(k+1)^2+k(k+1)+k^2])$$

$$=3\sum_{k=1}^{n}k^2+3\sum_{k=1}^{n}k+\sum_{k=1}^{n}1$$

$$\Rightarrow (n+1)^3-1=3S_2(n)+3S_1(n)+S_0(n)$$

$$\Rightarrow S_2(n)=\frac{1}{3}[(n+1)^3-1-3\times\frac{1}{2}n(n+1)-n]$$

$$\Rightarrow S_2(n)=\frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$$

我們可以把上述推導的 3 次方以$m+1$次方代入再套用二項式定理，一般化得到任意正整數m次方總和遞迴式（證明m與上面具高度重複性，略），描述成定理 1：

【定理 1】

已知$S_m(n)=1^m+2^m+3^m+\cdots+(n-2)^m+(n-1)^m+n^m$，則

$$S_m(n)=\frac{1}{m+1}[(n+1)^{m+1}-1-\sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1}\cdot S_k)]$$

二、構造演算法優化$S_m(n)$總和並探討係數的規律性

（一）簡化公式：

首先，$(n+1)^{m+1}$項以二項式定理展開。

【說明】

$$S_m(n)=\frac{1}{m+1}[\sum_{k=0}^{m+1}(C_k^{m+1}\cdot n_k)-1-\sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1}\cdot S_k)]$$

$$=\frac{1}{m+1}[C_m^{m+1}n^m+C_{m+1}^{m+1}n^{m+1}+\sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1}\cdot n^k)-1-\sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1}\cdot S_k(n))]$$

$$=n^m+\frac{1}{m+1}(n^{m+1}-\sum_{k=0}^{m-1}[C_k^{m+1}\cdot(S_k(n)-n^k)]-1)$$

藉由觀察重複性和替換$T_m(n)=S_m(n)-n^m$

$$\Rightarrow T_m(n)=\frac{1}{m+1}[n^{m+1}-\sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1}\cdot T_k(n))-1]$$

$$\Rightarrow C_m^{m+1}T_m(n)=n^{m+1}-\sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1}\cdot T_k(n))-1$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot T_k(n))=n^{m+1}-1$$

因$S_0(n)=1^0+2^0+3^0+\cdots+n^0=n$，依原本定義，$T_0(n)=S_0(n)-n^0=n-1$，但若在此時改定義$T_0(n)=n$，則可得到極整齊的恆等式：$\sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot T_k(n))=n^{m+1}$。

透過此遞迴式，我計算了$T_0(n)$~$T_6(n)$如下（不少的計算量）：

$$\begin{cases}
T_0(n)=n\\
T_1(n)=\frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n\\
T_2(n)=\frac{1}{3}n^3-\frac{1}{2}n^2+\frac{1}{6}n\\
T_3(n)=\frac{1}{4}n^4-\frac{1}{2}n^3+\frac{1}{4}n^2+0n\\
T_4(n)=\frac{1}{5}n^5-\frac{1}{2}n^4+\frac{1}{3}n^3+0n^2-\frac{1}{30}n\\
T_5(n)=\frac{1}{6}n^6-\frac{1}{2}n^5+\frac{5}{12}n^4+0n^3-\frac{1}{12}n^2+0n\\
T_6(n)=\frac{1}{7}n^7-\frac{1}{2}n^6+\frac{1}{2}n^5+0n^4-\frac{1}{6}n^3+0n^2+\frac{1}{42}n
\end{cases}$$

【應用】

$$S_6(10)=1^6+2^6+3^6+...+10^6=1978405$$

$$S_6(10)=T_6(10)+10^6=(\frac{1}{7}10^7-\frac{1}{2}10^6+\frac{1}{2}10^5-\frac{1}{6}10^3+\frac{1}{42}10)+10^6=1978405$$

（二）$S_m(n)$ 多項式係數規律：

這裡可以觀察到許多規律，包含對各個 $T_m(n)$ 而言：

1. 依 n 的降冪排列的首項、次項、第四項、第六項總分別是 $\frac{1}{m+1}$、$-\frac{1}{2}$、0、0。
2. 每一同降冪順序項的正負號相同。

【說明】

欲透過一般化追朔其根源，然而，遞迴式極難處理，每一項都要從頭展開。若換個角度思考，正常的遞迴方式就是利用這個遞迴式列出 $m+1$ 個聯立方程式，然後重複用代換法。但如果我們使用矩陣的列運算來進行消去法，以 n^k 所對應的列向量進行整體運算，就可以直接求出目標 $T_m(n)$ 多項式的係數。

以下為用 T 的聯立遞迴式構成的矩陣方程式 $\vec{n}=P\vec{\mathrm{T}}$（$P$: Pascal Triangular Matrix, 巴斯卡三角矩陣），其中，P 是一個 $(m+1)*(m+1)$ 矩陣，定義 $P(j,k)$ 為 P 的第 j 列、第 k 行元素：$P(j,k)=\begin{cases} C_{k-1}^{j} & \text{if } j\ge k \\ 0 & \text{if } j<k \end{cases}$

$$\begin{bmatrix} n \\ n^2 \\ n^3 \\ n^4 \\ n^5 \\ \vdots \\ n^{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_0^1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ C_0^2 & C_1^2 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ C_0^3 & C_1^3 & C_2^3 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ C_0^4 & C_1^4 & C_2^4 & C_3^4 & 0 & \cdots & 0 \\ C_0^5 & C_1^5 & C_2^5 & C_3^5 & C_4^5 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ C_0^{m+1} & C_1^{m+1} & C_2^{m+1} & C_3^{m+1} & C_4^{m+1} & \cdots & C_m^{m+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0(n) \\ T_1(n) \\ T_2(n) \\ T_3(n) \\ T_4(n) \\ \vdots \\ T_m(n) \end{bmatrix}$$

以這個消去演算法求 $T_m(n)$ 如下：

定義 $E(k)=P(m+1,k)$ 為矩陣的最後一列（即欲消去之列，E 代表 Eliminate 消去）

1. 從列 $j=m$ 開始。
2. 將矩陣 P 的第 j 列乘上 $-\frac{E(j)}{C_{j-1}^{j}}=-\frac{E(j)}{j}$ 加至第 $m+1$ 列（第 $m+1$ 列即 E，目的為使 $E(j)$ 變 0）。
3. 紀錄當下 $-\frac{E(j)}{j}$ 的值，它是 n^k 的暫時係數。
4. 將 j 設為 $j-1$。

5. 若 $j \ge 0$，回到第 2 步繼續執行，否則 T_m 將暫時係數與 $\vec{n}$ 的內積乘上 $\frac{1}{C_m^{m+1}} = \frac{1}{m+1}$。

【舉例說明】（以求 $T_5(n)$ 為範例）

$$\begin{bmatrix} n \\ n^2 \\ n^3 \\ n^4 \\ n^5 \\ n^6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 6 & 4 & 0 & 0 \\ 1 & 5 & 10 & 10 & 5 & 0 \\ 1 & 6 & 15 & 20 & 15 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0(n) \\ T_1(n) \\ T_2(n) \\ T_3(n) \\ T_4(n) \\ T_5(n) \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{lcccccccc}
n^6 & \Rightarrow & 1 & 6 & 15 & 20 & 15 & 6 \\
+n^5 \times (-3) & \Rightarrow & -2 & -9 & -15 & -10 & 0 & 6 \\
+n^4 \times \frac{5}{2} & \Rightarrow & \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 & 0 & 6 \\
+n^3 \times 0 & \Rightarrow & \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 & 0 & 6 \\
+n^2 \times (-\frac{1}{2}) & \Rightarrow & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \\
+n \times 0 & \Rightarrow & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6
\end{array}$$

由以上可知 $6T_5(n) = n^6 - 3n^5 + \frac{5}{2}n^4 - \frac{1}{2}n^2$

$\Rightarrow T_5(n) = \frac{1}{6}n^6 - \frac{1}{2}n^5 + \frac{5}{12}n^4 - \frac{1}{12}n^2$。

【說明】

這裡證實了第一個規律，在 $T_m(n)$ 多項式中的 n^{m+1} 是基底列向量係數為 1，最後除以 $m+1$，因此係數必為 $\frac{1}{m+1}$。但同樣的，仍須解釋為何 n^m 項必是 $-\frac{1}{2}$，和連續兩次在同一輪一次消去兩排的現象，進行演算法的分析：

在此，矩陣 P 僅最後一列 E 在演算法過程會被修改，因此在分析中會記錄其每一步的狀態以 s 為消去步數，$s=0$ 為初始值（E_s 為 E 第 s 步的值）。另外，消去所乘上的係數也會被記錄，畢竟其代表 $T_m(n)$ 多項式的係數。

1. 演算法第一迴圈開始，$s=1$，$j=m$

n^m 的係數：$-\frac{E_{s=0}(m)}{m} = -\frac{C_{m-1}^{m+1}}{m} = -\frac{(m+1)!}{m(m-1)!2!} = (-\frac{1}{2})\frac{(m+1)!}{m!1!} = -\frac{1}{2}C_1^{m+1}$，

n^m的係數由與 m 獨立的$-\frac{1}{2}$和與 m 相關的C_1^{m+1}相乘而得，

這裡證實了第二個規律，n^m 項的係數永遠是$-\frac{1}{2}$，理由是$\dfrac{-\frac{1}{2}C_1^{m+1}}{m+1}=-\frac{1}{2}$，

令此與$s=1$時 m 獨立的係數為$a_1=-\frac{1}{2}$，它的重要性在於它適用於任何$T_m(n)$。

消去步驟：$E_1(k)=E_0(k)+a_1C_1^{m+1}P(m,k)=\begin{cases}C_{k-1}^{m+1}+a_1C_1^{m+1}C_{k-1}^{m} & \text{if } k\le m\\ C_{k-1}^{m+1} & \text{if } k>m\end{cases}$

其中，可以定義$a_0=1$使得$C_{k-1}^{m+1}+a_1C_1^{m+1}C_{k-1}^{m}=\sum_{t=0}^{1}a_tC_t^{m+1}C_{k-1}^{m+1-t}$ 。

2. 演算法第二迴圈，$s=2$ ，$j=m-1$

n^{m-1}的係數：$-\dfrac{E_{s=1}(m-1)}{m-1}=-\dfrac{\sum_{t=0}^{1}a_tC_t^{m+1}C_{m-2}^{m+1-t}}{m-1}$

$$=-\sum_{t=0}^{1}\left(a_t\cdot\frac{(m+1)!}{(m+1-t)!t!}\cdot\frac{(m+1-t)!}{(m-1)!(3-t)!}\right)=-\sum_{t=0}^{1}\left(a_t\cdot\frac{(m+1)!}{(m-1)!2!}\cdot\frac{3!}{t!(3-t)!}\cdot\frac{2!}{3!}\right)$$

$$=-\frac{1}{3}C_2^{m+1}\sum_{t=0}^{1}a_tC_t^3=\frac{1}{6}C_2^{m+1}$$

$$\Rightarrow a_2=\frac{1}{6}$$

$$E_2(k)=E_1(k)+a_2C_2^{m+1}P(m-1,k)$$

$$=\begin{cases}\sum_{t=0}^{1}a_tC_t^{m+1}C_{k-1}^{m+1-t}+a_2C_2^{m+1}C_{k-1}^{m-1}=\sum_{t=0}^{2}a_tC_t^{m+1}C_{k-1}^{m+1-t} & \text{if } k\ge m\\ E_1(k) & \text{if } k<m\end{cases}$$

$\Rightarrow$觀察規律，我的猜想如下：

對於任意正整數$s\le m$

$$E_s(k)=\begin{cases}\sum_{t=0}^{s}a_tC_1^{m+1}C_{k-1}^{m+1-t} & \text{if } k\le m+1-s\\ E_{s-1}(k) & \text{if } k>m+1-s\end{cases}$$

【證明】(數學歸納法)：

1. $s=1$在上方已被驗證。

2. 令此於$s=q-1$成立，則在$s=q$時，$j=m+1-q$ ，

n^{m+1-q} 的係數：

$$-\frac{E_{s=q-1}(m-1-q)}{m-1-q}=-\frac{\sum_{t=0}^{q-1}a_tC_t^{m+1}C_{m-q}^{m+1-t}}{m-1}=-\sum_{t=0}^{1}a_t\frac{(m+1)!}{(m+1-t)!t!}\frac{(m+1-t)!}{(m+1-q)!(q+1-t)!}$$

$$=-\sum_{t=0}^{1}a_t\frac{(m+1)!}{(m+1-q)!q!}\frac{(q+1)!}{t!(q+1-t)!}\frac{q!}{(q+1)!}=-\frac{1}{q+1}C_q^{m+1}\sum_{t=0}^{q-1}a_tC_t^{q+1}=a_qC_q^{m+1}$$

$$\Rightarrow a_q=-\frac{1}{q+1}\sum_{t=0}^{q-1}a_tC_t^{q+1}$$

$$E_q(k)=E_{q-1}(k)+a_qC_q^{m+1}P(m+1-q,k)$$

$$=\begin{cases}\sum_{t=0}^{q-1}a_tC_t^{m+1}C_{k-1}^{m+1-t}+a_qC_q^{m+1}C_{k-1}^{m+1-q}=\sum_{t=0}^{q}a_tC_t^{m+1}C_{k-1}^{m+1-t} & \text{if}\quad k\ge m+1-q\\ E_{q-1}(k) & \text{if}\quad k<m+1-q\end{cases}$$

在 $s=q$ 時成立，得證。

因此，我將論證結果整理並描述成下面的演算法。

【演算法】

定義 $E(k)=P(m+1,k)$ 為矩陣的最後一列（即欲消去之列，E 代表 Eliminate 消去），演算法操作如下：

(1)從列 $j=m$ 開始。

(2)將矩陣 P 的第 j 列乘上 $-\frac{E(j)}{C_{j-1}^{j}}=-\frac{E(j)}{j}$ 加至第 $m+1$ 列（第 $m+1$ 列即 E，目的為使 $E(j)$ 變 0）。

(3)紀錄當下 $-\frac{E(j)}{j}$ 的值，它是 n^k 的暫時係數。

(4)將 j 設為 $j-1$。

(5)若 $j\ge 0$，回到第 2 步繼續執行，否則 T_m 將暫時係數與 $\vec{n}$ 的內積乘上 $\frac{1}{C_m^{m+1}}=\frac{1}{m+1}$。

同時，$E(k)=P(m+1,k)$ 具有下面的遞迴關係：

$$E_s(k)=\begin{cases}\sum_{t=0}^{s}a_tC_1^{m+1}C_{k-1}^{m+1-t} & \text{if}\quad k\le m+1-s\\ E_{s-1}(k) & \text{if}\quad k>m+1-s\end{cases}\qquad \text{對於任意正整數 } s\le m \text{ 成立。}$$

接下來要說明，我發現的 a_n 就是在西元 1713 年被白努利發表的第一白努利數 b_n^-（b: *Bernoulli* 白努利），所以後續本研究會改用 b_n 來取代 a_n。

＃名詞符號定義＃

白努利數：b_k^+ 和 b_k^- 只有在 $k=1$ 時有區別，其餘的值都相同。即 $b_1^+=\frac{1}{2}$，$b_1^-=-\frac{1}{2}$，

上標未標記正負則預設為負。可以透過以下遞迴式取得：

$$b_m=-\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1}\cdot b_k)$$

與總和多項式的係數關係為

$$S_m(n)=\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot b_k^+\cdot n^{m+1-k})$$

例如，把 m 取為 1，有 $S_1(n)=1+2+3+...+n=\frac{1}{2}(b_0n^2+2b_1^+n)=\frac{1}{2}(n^2+n)$。

【說明】

$$b_m=-\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1}\cdot b_k)$$

$$\Rightarrow\sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot b_k)=0,\ m\neq 0\ ，\ b_0=1$$

一維序列 b_k 構成 $T_m(n)$ 多項式的係數。

$$\Rightarrow T_m(n)=\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot b_k\cdot n^{m+1-k})$$

我將論證結果描述成下面的定理 2。

【定理 2】

總和公式 S_m 的係數由共用項 b_k 組成：$T_m=S_m-n^m$，$T_m=\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot b_k\cdot n^{m+1-k})$，

其中 b_k 數列遞迴定義：$\sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot b_k)=0\ (m\neq 0),\ b_0=1$（即為白努利數 b_k^-）。

白努利數加快了總和公式尋找的一個冪次級，即原 $O(n^3)$ 加快至 $O(n^2)$，其原因是 $T_m(n)$ 的遞迴關係與 b_m 的遞迴關係所攜帶的資訊量一樣(所有 $T_m(n)$ 共用同個 b_k 數列)，但後者是純量運算，前者則是 $O(n)$ 向量（多項式係數）的運算。

三、推廣$S_m(n)$總和公式到非正整數，並探討白努利數的代數性質

（一）探討總和公式在非正整數的輸入

$S_m(n)$的原始次方總和公式意義$S_m(n)=\sum_{k=1}^{n}k^m$僅在$n\in\mathbb{N}$有意義，不過根據上節的推導，$S_m(n)$是個多項式，其應可接受任意實數的輸入，但論其意義，注意到$S_m(x)=S_m(x-1)+x^m$在$x>1$的整數代表著次方總和的遞迴關係式，事實上，由於$S_m(x)$是個$m+1$次多項式，又此遞迴關係式在$x>1$的所有整數成立，故由代數基本定理，$S_m(x)-S_m(x-1)-x^m$為零多項式，等式應在整個實數域成立，藉此，我們可以計算$S_m(0)=S_m(1-1)=S_m(1)-1^m=0$定為遞迴起始值，甚至不藉多項式計算負整數值。

【定理 3*】

> $S_m(n)$的多項式意義除了符合次方總和外（此定義僅適用於正整數），可視為滿足：
>
> $S_m(x)=S_m(x-1)+x^m$和$S_m(0)=0$ 。

【應用】

可由$S_m(x)=S_m(x-1)+x^m$及差分法，總和公式在任意α偏差仍可以使用：

$$\sum_{k=m+1}^{n}(k+\alpha)^p=S_p(n+\alpha)-S_p(m+\alpha)$$

舉例：

$$(-44.4)^3+(-43.4)^3+(-42.4)^3+...+(0.6)^3+(1.6)^3+...+(66.6)^3=?$$

$$\sum_{k=-45}^{66}(k+0.6)^3=S_3(66+0.6)-S_3(-46+0.6)=\frac{(66.6)^2(67.6)^2}{4}-\frac{(-45.4)^2(-44.4)^2}{4}$$
$$=4051539.072$$

接著探討定理 3*其逆定理的正確性。

【命題】

> 函數$f(x)$滿足$f(x)=f(x-1)+x^m,\ f(0)=0$是否蘊含著$f(x)=S_m(x)$

此命題即在探討上述函數方程式的解$S_m(n)$的唯一性，此命題為否定的。

【證明】

表示其中一解 $f(x)=S_m(x)+y_p(x)$

代入得 $S_m(x)+y_p(x)=S_m(x-1)+x^m+y_p(x-1)$ ，又因 $S_m(x)=S_m(x-1)+x^m$ ，使

$y_p(x)=y_p(x-1)$ ，這表示 $y_p(x)$ 可以是任意週期為 1 的且 $y_p(0)=0$ 的函數，而總和

公式是 $y_p(x)=0$ 的特殊解 $f(x)=S_m(x)$ ，無論 $y_p(x)$ 如何改變：

1. 整數值永遠不變。
2. $\sum_{k=m+1}^{n}(k+\alpha)^p=S_p(n+\alpha)-S_p(m+\alpha)$ 的值為差距為整數的值，也不變。

所以其實任何一解 $f(x)=S_m(x)+y_p(x)$ 都可以擔任「總和公式」。

綜合定理 3*和其逆定理的否定，描述成下面完整的定理 3。

【定理 3】

$S_m(n)$ 的多項式意義除了符合次方總和外（此定義僅適用於正整數），可視為滿足：

$S_m(x)=S_m(x-1)+x^m$ 。反過來， $f(x)=f(x-1)+x^m$ 的解形式必為 $f(x)=S_m(x)+p(x)$ ，其中， $p(x)$ 是個週期為 1 的週期函數。

（二）證明白努利數的關於除第 1 項以外的其他奇數項皆為零

根據計算，除了 $k=1$ 外的所有奇數 k，b_k 都是 0，若此性質得證，可獲得一半 b_k 的規律、翻倍計算 b_k 的速度。

【證明】

分離出奇數項，將 n 分別以1和 -1 代入再相減，即可消掉所有偶數項。

$$S_m(n)=\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot b_k^+\cdot n^{m+1-k})$$

$S_m(1)=1$ ，由定理 1， $S_m(-1)=S_m(0)-0^m=0$

$$1-0=S_m(1)-S_m(-1)=\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m-1}[C_k^{m+1}\cdot b_k^+\cdot(1+(-1)^{m-k})]$$

$$C_1^{m+1}\cdot b_1^+=\frac{m+1}{2}=\sum_{k=0}^{m-1}[C_k^{m+1}\cdot b_k^+\cdot\frac{1+(-1)^{m-k}}{2}]$$

其中$\frac{1+(-1)^{m-k}}{2}$，當$m-k$是奇數時，則其值等於 0，若為偶數，則等於 1。

觀察上式設$m=2j+1$時，若k是偶數，則$m-k$是奇數，b_k的偶數項消失，

式子兩邊同時減去b_1，則 $\sum_{l=1}^{j}(C_{2l+1}^{2j+2}\cdot b_{2l+1})=0$。

故可由強歸納法得到，$k=3$以上的所有奇數k，b_k都是 0。

我將所論證的結果，描述成下面的定理 4-1。

【定理 4-1】

白努利數b_k，除了$k=1$外的所有奇數k，其值都是 0。

（三）白努利數的生成函數

嘗試找$F(x)=\sum_{n=0}^{\infty}b_n x^n$的封閉式

$$F(x)=\sum_{n=0}^{\infty}b_n x^n=b_0+\sum_{n=1}^{\infty}(-\frac{1}{n+1}\sum_{k=0}^{n-1}C_k^{n+1}b_k)x^k=b_0-\sum_{k=0}^{\infty}(\frac{b_k}{k!}x^k\sum_{n=k+1}^{\infty}\frac{n!}{(n+1-k)!})x^{n-k}$$

$$=b_0-\sum_{k=0}^{\infty}(\frac{b_k}{k!}x^k\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n!}{(k+1)!})x^k=b_0-(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{b_k}{k!}x^k)(\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n!}{(k+1)!}x^k)$$

b_n的生成函數由常數扣掉$\frac{b_n}{n!}$的生成函數乘上一個以知係數的無窮級數。

推測$\frac{b_n}{n!}$的生成函數套用這些步驟能獲的包含自己的函數方程式，

重新定義$F(x)$為$\frac{b_n}{n!}$的生成函數且由相似過程可得：

$$F(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n=b_0-(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{b_k}{k!}x^k)(\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(k+1)!}x^k)$$

$$=b_0-F(x)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(k+1)!}x^k=b_0-\frac{e^x-x-1}{x}$$

$\Rightarrow F(x)=\frac{x}{e^x-1}$為$\frac{b_n}{n!}$的生成函數，或者說其為$b_k$的指數生成函數。

我將所論證的結果，描述成下面的定理 5。

【定理 5】

白努利數b_k的指數生成函數為$\frac{x}{e^x-1}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n$。

因為生成函數由基礎函數的封閉式組成，可以利用它的性質獲取許多白努利數的性質，將$F(x)$求導：

$$F'(x)=(\frac{x}{e^x-1})'=\frac{1}{e^x-1}-\frac{xe^x}{(e^x-1)^2}=\frac{1}{e^x-1}-\frac{x(e^x-1)}{(e^x-1)^2}-\frac{x}{(e^x-1)^2}$$

$$\Rightarrow F'(x)=\frac{F(x)}{x}-F(x)-\frac{F^2(x)}{x}$$

$$\Rightarrow F^2(x)=F(x)-xF(x)-xF'(x)$$

再以其級數表示

$$(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n)^2=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^{n+1}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}nx^{n-1+1}$$

展開平方項，提出常數項

$$(b_0)^2+\sum_{n=1}^{\infty}(\sum_{k=0}^{n}\frac{b_n}{n!}\frac{b_{n-k}}{(n-k)!})x^n=b_0+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{b_{n-1}}{(n-1)!}x^n-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{b_n}{(n-1)!}x^n$$

$$\Rightarrow\sum_{n=1}^{\infty}(\sum_{k=0}^{n}\frac{b_k}{k!}\frac{b_{n-k}}{(n-k)!})x^n=\sum_{n=1}^{\infty}(\frac{b_n}{n!}-\frac{b_{n-1}}{(n-1)!}-\frac{b_n}{(n-1)!})x^n$$

比較等式兩邊係數(其中$n>0$)

$$\sum_{k=0}^{n}\frac{b_k}{k!}\frac{b_{n-k}}{(n-k)!}=\frac{b_n}{n!}-\frac{b_{n-1}}{(n-1)!}-\frac{b_n}{(n-1)!}$$

同乘$n!$，並且$\frac{n!}{k!(n-k)!}=C_k^n$

$$\sum_{k=0}^{n}\mathrm{C}_k^n b_k b_{n-k}=b_n-nb_{n-1}-nb_n\Rightarrow\sum_{k=1}^{n-1}\mathrm{C}_k^n b_k b_{n-k}=(1-n-2)b_n-nb_{n-1}$$

假設偶數$2n\geq 2$，可以提出唯一的非零奇數項$b_1=-\frac{1}{2}$

$$\sum_{k=1}^{n-1}\mathrm{C}_{2k}^{2n}b_{2k}b_{2n-2k}+2n(-\frac{1}{2})b_{2n-1}\cdot 2=-(2n+1)b_{2n}-2nb_{2n-1}$$

$$\Rightarrow\sum_{k=1}^{n-1}\mathrm{C}_{2k}^{2n}b_{2k}b_{2n-2k}=-(2n+1)b_{2n}$$

我將所論證的結果，描述成下面的定理 6。

【定理 6】

當$n\in\mathbb{N}$，$b_{2n}=-\frac{1}{2n+1}\sum_{k=1}^{n-1}\mathrm{C}_{2k}^{2n}b_{2k}b_{2n-2k}$

因其總和內具對稱性

$$b_{4n}=-\frac{1}{4n+1}[C_{2n}^{4n}(b_{2n})^2+2\sum_{k=1}^{n-1}C_{2k}^{4n}b_{2k}b_{4n-2k}]$$
$$b_{4n-2}=-\frac{2}{4n-1}\sum_{k=1}^{n-1}C_{2k}^{4n-2}b_{2k}b_{4n-2-2k}$$

（四）證明白努利數的偶數項正負交替：

【定理 4-2】

當 $k\in\mathbb{N}$ ，則白努利數的偶數項 b_{2k} 會正負交替，其中 b_{4n-2} 為正、 b_{4n} 為負。

【證明】

假設對於所有正整數 $k<n$ ， $b_{4k-2}>0,\ b_{4k}<0$ ，則利用定理 6

$$b_{4n-2}=-\frac{1}{4n-1}\sum_{k=1}^{2n-2}C_{2k}^{4n-2}b_{2k}b_{4n-2-2k}$$

總和內，二項式係數恆正，且 $\begin{cases}2k\equiv 0\pmod 4\Rightarrow 4n-2-2k\equiv 2\pmod 4\\ 2k\equiv 2\pmod 4\Rightarrow 4n-2-2k\equiv 0\pmod 4\end{cases}$ ，因此根據假設

$b_{2k}b_{4n-2-2k}$ 恆為一個正數乘上一個負數，總和內恆負，故 $b_{4n-2}>0$ ，相似地

$$b_{4n}=-\frac{1}{4n+1}[\sum_{k=1}^{2n-1}C_{2k}^{4n}b_{2k}b_{4n-2k}] \quad 和 \quad \begin{cases}2k\equiv 0\pmod 4\Rightarrow 4n-2k\equiv 0\pmod 4\\ 2k\equiv 2\pmod 4\Rightarrow 4n-2k\equiv 2\pmod 4\end{cases}$$

$b_{2k}b_{4n-2k}$ 為兩個正數或兩個負數的乘積，故 $b_{4k}<0$

又 $b_2=\frac{1}{6}>0,\ b_4=-\frac{1}{30}<0$ 由強歸納法得證。

（五）探討 $S_m(x)$ 的對稱性：

在得知 $S_m(-1)=0$ 後，可以持續套用 $S_m(x-1)=S_m(x)-x^m$ 獲得其負整數值，得到對於正整數 n 而言， $S_m(-1-n)=\sum_{k=1}^{n}(-k)^m=(-1)^m\sum_{k=1}^{n}k^m=(-1)^m S_m(n)$ ，以下證明這個性質在所有實數 x 下滿足。

【證明】

令多項式 $g(x)=S_m(-1-x)-(-1)^m S_m(x)$ 其 deg 小於等於 $m+1$ ，然而根據上述，有無限多個正整數 x 使 $g(x)=0$ ，由代數基本定理， $g(x)$ 是零多項式。

故 $S_m(-1-x)=(-1)^m S_m(x)$ 總是成立，構成下面的引理 1-1。

【引理 1-1】

$S_m(x)$ 在 m 是偶和奇數時分別是以 $x=-\frac{1}{2}$ 中心的奇和偶函數。

四、推廣 $S_m(n)$ 至任意函數的連續總和並精準估計巴塞爾問題的收斂值

（一）利用 $S_m(n)$ 總和公式水平加總冪級數

解析函數可以用冪級數表示，連續加總時，每一項冪次都對應一個總和公式。

【引理 - 泰勒定理】

設 N 是一個正整數。如果定義在一個包含 a 的區間上的函數 f 在 a 點處 $N+1$ 次可導，

那麼對於這個區間上的任意 x ，都有：

$$f(x)=\sum_{k=0}^{N}\frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k+\int_a^x\frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}(x-t)^N\,dt$$

其中的多項式稱為函數在 a 處的泰勒展開式。

【說明】（此推導受參考資料影片的想法啟發，進一步嚴謹化其論點）

欲求 $S(n)=\sum_{x=1}^{n}f(x)$

套用泰勒定理，設 $a=0$ 且令 $c_k=\frac{f^{(k)}(0)}{k!}$

$$\Rightarrow f(x)=\sum_{k=0}^{N}c_kx^k+\int_0^x\frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}(x-t)^N\,dt$$

$$\Rightarrow S(n)=\sum_{x=1}^{n}[\sum_{k=0}^{N}c_kx^k+\int_0^x\frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}(x-t)^N\,dt]$$

令 $X=\sum_{x=1}^{n}\sum_{k=0}^{N}c_kx^k,\ Y=\sum_{x=1}^{n}\int_0^x\frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}(x-t)^N\,dt\Rightarrow S(n)=X+Y$

$$X=\sum_{x=1}^{n}\sum_{k=0}^{N}c_kx^k=\sum_{k=0}^{N}c_k\sum_{x=1}^{n}x^k=\sum_{k=0}^{N}c_kS_k(n)$$

$$=\sum_{k=0}^{N}\frac{c_k}{k+1}\sum_{j=0}^{k}C_j^{k+1}b_j^+n^{k+1-j}=\sum_{j=0}^{N}\frac{b_j^+}{j!}\sum_{k=j}^{N}\frac{c_kk!}{(k+1-j)!}n^{k+1-j}$$

注意到 $f(x)$ 的 $j-1$ 階導數：

$$f^{(j-1)}(x)=\sum_{k=j-1}^{N}\frac{c_kk!}{(k+1-j)}x^{k+1-j}+\int_0^x\frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}[(x-t)^N]^{(j-1)}\,dt$$

$$=c_{j-1}(j-1)!+\sum_{k=j}^{N}\frac{c_kk!}{(k+1-j)}x^{k+1-j}+\int_0^x\frac{f^{(N+1)}(t)}{(N-j+1)!}(x-t)^{N-j+1}\,dt$$

$$\Rightarrow \sum_{k=j-1}^{N} \frac{c_k k!}{(k+1-j)} x^{k+1-j} = f^{(j-1)}(x) - f^{(j-1)}(0) - \int_0^x \frac{f^{(N+1)}(t)}{(N-j+1)!}(x-t)^{N-j+1} dt$$

將上式設 $x = n$ 代入 X

$$X = \sum_{j=0}^{N} \frac{b_j^+}{j!}\{f^{(j-1)}(n) - f^{(j-1)}(0) - \int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{(N-j+1)!}(n-t)^{N-j+1} dt\}$$

令 $X_0 = \sum_{j=0}^{N} \frac{b_j^+}{j!}[f^{(j-1)}(n) - f^{(j-1)}(0)],\ X_1 = \sum_{j=0}^{N} \frac{b_j^+}{j!}[\int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{(N-j+1)!}(n-t)^{N-j+1} dt] \Rightarrow X = X_0 - X_1$

$$X_1 = \int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{(N+1)!} \sum_{j=0}^{N} \frac{(N+1)!}{j!(N+1-j)!} b_j^+ (n-t)^{N-j+1} dt = \int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!} S_N(n-t) dt$$

$$\begin{aligned} Y &= \sum_{x=1}^{n} \int_0^x \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}(x-t)^N dt = \sum_{x=1}^{n}\sum_{k=1}^{x} \int_{k-1}^{k} \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}(x-t)^N dt \\ &= \sum_{k=1}^{n}\sum_{x=k}^{n} \int_{k-1}^{k} \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}(x-t)^N dt = \sum_{k=1}^{n} \int_{k-1}^{k} \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}[\sum_{x=k}^{n}(x-t)^N] dt \\ &= \int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}[\sum_{x=\lfloor t \rfloor}^{n}(x-t)^N] dt = \int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}[S_N(n-t) - S_N(\lfloor t \rfloor - t)] dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S(n) &= X + Y = X_0 + (Y - X_1) \\ &= X_0 + \{\int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}[S_N(n-t) - S_N(\lfloor t \rfloor - t)] dt - \int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!} S_N(n-t) dt\} \\ &= X_0 - \int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!} S_N(\lfloor t \rfloor - t) dt \end{aligned}$$

令 $Y_0 = \int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!} S_N(\lfloor t \rfloor - t - 1) dt \Rightarrow S(n) = X_0 - Y_0$

因 $S_N(\lfloor t \rfloor - t) = T_N(\lfloor t \rfloor - t + 1) = (-1)^{N+1} T_N(t - \lfloor t \rfloor) = (-1)^{N+1} T_N(\{t\})$

$$\begin{aligned} Y_0 &= (-1)^{N+1} \int_0^n \frac{f^{(N+1)}(t)}{N!} T_N(\{t\}) dt \\ &= \frac{(-1)^{N+1}}{N!}\{[f^{(N)}(t) T_N(\{t\})]_0^n - \int_0^n f^{(N)}(t) T'_N(\{t\}) dt\} \end{aligned}$$

對於 n 是整數，$T_N(\{n\}) = T_N(\{0\}) = 0$ ，定義 $T'_N(x) = B_N(x)$

$$Y_0 = \frac{(-1)^N}{N!} \int_0^n f^{(N)}(t) B_N(\{t\}) dt\}$$

$$S(n) = X_0 - Y_0 = \sum_{k=0}^{N} \frac{b_j^+}{k!}[f^{(k-1)}(n) - f^{(k-1)}(0)] + \frac{(-1)^{N+1}}{N!} \int_0^n f^{(N)}(t) B_N(\{t\}) dt\}$$

此處 $k = 0$ 時， f 的「 -1 階導數」純粹只是滿足冪次求導規則，其實為反導數之差，即定積分，推得 Euler-Maclaurin 求和公式，描述成下面的定理 7。

【定理 7】

解析函數連續總和公式：

$$\sum_{x=1}^{n} f(x) = \int_0^n f(x)dx + \sum_{k=1}^{N} \frac{b_j^+}{k!}[f^{(k-1)}(n) - f^{(k-1)}(0)] + R_N$$

其中餘式項(Remainder) $R_N = \dfrac{(-1)^{N+1}}{N!}\int_0^n f^{(N)}(x)P_N(t)dx$

週期性白努利多項式 $P_N(x)$=$B_N(\{x\})$，$\{x\} = x - \lfloor x \rfloor$是一個週期為 1 的函數

白努利多項式 $B_N(x) = T'_N(x) = \sum_{k=0}^{N} C_k^N b_k x^{N-k}$ （Euler-Maclaurin 求和公式）

以下是個有趣的範例：$f(x) = \dfrac{1}{x^2}$，讓 $N \to \infty$，忽略餘式項

$$S = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^2} - \sum_{k=1}^{1}\frac{1}{k^2} + 1 = \lim_{n\to\infty} S(n) - S(1) + 1$$

$$= 1 + \int_1^{\infty}\frac{1}{x^2}dx + \sum_{k=1}^{\infty}(\frac{b_k^+}{k!}[\lim_{n\to\infty} f^{(k-1)}(n) - f^{(k-1)}(1)])$$

$$= 1 + \frac{1}{2} + \sum_{k=2}^{\infty}[\frac{b_k^+}{k!}(-1)^k]$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} b_k^+ = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} - \frac{1}{30} + \frac{1}{42} - \frac{1}{30} + \frac{5}{66} - \frac{691}{2730} + \cdots$$

此式指出白努利數b_k^+的總和是巴塞爾問題(Basel Problem)的解，但前提是此級數收斂，不過根據定理 9，白努利數為超指數增長，此級數發散，但在數學的某些領域，是有可能透過特殊方法和自定義規則總和發散級數的，是潛在巴塞爾問題的另一形式解，值得未來深入探討。

（二）探討 Euler-Maclaurin 級數的部分和

但若站在近似巴塞爾問題(Basel Problem)的角度上，則可以給 Euler-Maclaurin 級數的部分和一試，已知巴塞爾問題的解是$\dfrac{\pi^2}{6} \approx 1.6449$。

【說明】

以下列出白努利數的部分和（取小數點後 4 位）

1, 1.5, 1.6667, 1.6333, 1.6571, 1.6238, 1.6996, 1.4465

以$1+\dfrac{1}{2}+\dfrac{1}{6}-\dfrac{1}{30} \approx 1.6333$最接近，差 0.0116，$1+\dfrac{1}{2}+\dfrac{1}{6}-\dfrac{1}{30}+\dfrac{1}{42} \approx 1.6571$次近，

差 0.0122。觀察數據，誤差似乎是一個中間最小值，向兩邊擴大的函數，到某種程度誤差就會逐漸增大。另一個優化此近似的想法是正常求前幾項部分和，再用 Euler-Maclaurin 求和級數近似剩下的項：

$$S-S(n)=\sum_{k=n+1}^{\infty}\frac{1}{k^2}=\int_n^{\infty}\frac{dx}{x^2}+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{b_k^+}{k!}\left[\frac{d^{(k-1)}(x^{-2})}{d^{(k-1)}x}\right]_{x=n}^{\infty}$$

$$=\left[-x^{-1}\right]_{x=n}^{\infty}+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{b_k^+}{k!}\left[(-1)^{k-1}k!x^{-(k+1)}\right]_{x=n}^{\infty}$$

$$=n^{-1}+\sum_{k=1}^{\infty}b_k^+(-1)^k n^{-(k+1)}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{b_k}{n^{k+1}}$$

可以看出 n 越大，級數發散的越慢，於是我猜測誤差最小值在更後面的項數，整體上降低誤差，試 $n=2$ $(\frac{\pi^2}{6}\approx 1.64493)$

$$S=S(2)+\sum_{k=0}^{\infty}\frac{b_k}{2^{k+1}}=\frac{1}{1^2}+\frac{1}{2^2}+\sum_{k=0}^{\infty}\frac{b_k}{2^{k+1}}$$

【再探索】

部分和測試 $(1\le k\le 10)$

1.75, 1.625, 1.64583, 1.64479, 1.64498, 1.64491, 1.64495, 1.64491, 1.64495, 1.64490

$\Rightarrow$ 直到最後這一項（1.64490）誤差才稍微增加，才 $n=2$，準確度就提升至小數點後 4 位。確實，這個發散級數的部分和可以提供極為精確的近似。

（四）R_N 的上界估計 — 白努利多項式的對稱性及三角不等式

接著我要使用餘式項 R_N 計算誤差，直接計算 R_N 通常是不可能的，因為週期性白努利多項式（它並非多項式）的存在，於是使用上只能用估計的，在此保守地上界估計：

即 $\left|R_N\right|\le\frac{M_N}{N!}\left|\int_n^{m+1}f^{(N)}(x)dx\right|,\ \forall x\in R\Rightarrow\left|P_N(x)\right|\le M_N$

那麼來開始找 $\left|P_N(x)\right|$ 的上界，$P_N(x)$ 的值是 $B_N(x)=\sum_{k=0}^{N}C_k^N b_k x^{N-k}$，且 x 在[0, 1]內。

接著使用下面的引理 1-2。

【引理 1-2】(引理 1-1 的系理)

已知 $B_N(x)=\sum_{k=0}^{N}C_k^N b_k x^{N-k}$，則 $B_N(\frac{1}{2}+x)=(-1)^N B_N(\frac{1}{2}-x)$，即 $x=\frac{1}{2}$ 為 $\left|B_N(x)\right|$ 的對稱軸。

【證明】

由定理 5，$S_N(x-\frac{1}{2})=(-1)^{N+1}S_N(-\frac{1}{2}-x)$

由定理 3，$T_m(x)=S_m(x)-x^m=S_m(x-1)$。

推得 $T_N(x+\frac{1}{2})=(-1)^{N+1}T_N(\frac{1}{2}-x)$，又 $T_N'(x)=B_N(x)$：

$B_N(x+\frac{1}{2})=(-1)^N B_N(\frac{1}{2}-x)$ 得證。

因 $x=\frac{1}{2}$ 為 $|B_N(x)|$ 的對稱軸，所有 $\frac{1}{2}<x\le 1$ 的值域都可以對應到 $0<x\le\frac{1}{2}$，因此我最初的想法是以三角不等式估計，$x=\frac{1}{2}$ 是下面三角不等式的最大值：

$$B_N(x)=\sum_{k=0}^{N}C_k^N b_k x^{N-k}\le\sum_{k=0}^{N}\left|C_k^N b_k x^{N-k}\right|\le\sum_{k=0}^{N}\left|C_k^N b_k(\frac{1}{2})^{N-k}\right|$$

我試過用 $|b_n|$ 的漸近公式（後續會提到）進行估計，誤差頗大，這裡因篇幅就不詳述這繁瑣代數的過程。

高誤差的一關鍵原因是白努利數的偶數項是正負交替的，在三角不等式估計中視為恆正，遠高估了。並且事實上，由 $B_N(\frac{1}{2}+x)=(-1)^N B_N(\frac{1}{2}-x)$，$B_{2n+1}(\frac{1}{2})=0$，要改進這估計，要從本質分析 $B_N(x)$。

（五）R_N 的上界估計 — $B_k(x)$ 的極值

根據上述的探討，推知 $B_N(x)$ 在 $[0,\frac{1}{2}]$ 的極值只會出現在 $0,\frac{1}{2}$ 或其導數的零點。注意到 $B_N(x)$ 的導數 $B'_N(x)=nB_{N-1}(x)$（見 $B_N(x)=\sum_{k=0}^{N}C_k^N b_k x^{N-k}$），也就是說 $B'_N(x)$ 的零點會一一對應到 $B_{N-1}(x)$ 的零點，這我稱為 $B_N(x)$ 的零點連鎖效應。

【說明】

假設 $B_3(x)$ 在 $(0,\frac{1}{2})$ 有一零點，加上 $0,\frac{1}{2},1$ 和對稱特性，則在 $[0,1]$ 共有 5 個零點，相鄰零點的平均斜率為零，由中間值定理，$B_2(x)$ 在 $(0,1)$ 至少有 4 個零點，但其為 2 次函數，矛盾。

推廣：假設 $B_{2N-1}(x)$ 在 $(0,\frac{1}{2})$ 有一零點，那麼加上 $0,\frac{1}{2},1$ 和對稱在 $[0,1]$ 共有 5 個零點，相鄰零點的平均斜率為零，由中間值定理，$B_{2N-2}(x)$ 在 $(0,1)$ 至少有 4 個零點，同理推論 $B_{2N-3}(x)$ 在 $(0,1)$ 至少有 3 個零點，再加上 $0,1$ ，$B_{2N-3}(x)$ 在 $[0,1]$ 至少有 5 個零點，由歸納法推論任意 $B_{2k+1}(x)$ 在 $[0,1]$ 至少有 5 個零點，但 $B_3(x)$ 是 3 次函數，與推論矛盾，故由反證法得證：

(1) $B_{2k+1}(x)$ 在 $[0,1]$ 只有剛好 $0,\frac{1}{2},1$ ，3 個零點，而 $B_{2k}(x)$ 在 $(0,1)$ 剛好個 2 零點。

(2) $B_{2k+1}(x)$ 在 $(0,\frac{1}{2})$ 不變號，$B_{2k}(x)$ 在 $(0,\frac{1}{2})$ 是嚴格遞增或遞減。

我將所論證的初步結果，描述成下面的引理 2。

【引理 2】

已知 $B_N(x)=\sum_{k=0}^{N}C_k^N b_k x^{N-k}$ ，則 $\left|B_{2k}(x)\right|$ 在 $0<x<1$ 的最大值只出現在 $x=0$ 或 $\frac{1}{2}$ 。

而我們已知 $B_{2k}(0)=b_{2k}$ ，下一步是要找 $B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right)$ 。

【定理 5-2】

白努利多項式的指數生成函數為 $\frac{te^{xt}}{e^t-1}=\sum_{n=0}^{\infty}B_n(x)\frac{t^n}{n!}$

【證明】

略，其推導與白努利數的生成函數極相似，因白努利多項式有遞迴式：

$$B_m(n)=n^m-\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1}\cdot \mathrm{B}_k(n))$$

可由 T_m 遞迴式求導得到，前面也提到 T_m 的遞迴式與白努利數的遞迴式極相似。

【引理 3】

已知 $B_N(x)=\sum_{k=0}^{N}C_k^N b_k x^{N-k}$ ，則 $B_n(\frac{1}{2})==-(1-\frac{1}{2^{n-1}})\ b_n$ 。

【證明】

這利用了參考文獻中 multiplication theorem 的弱化版，使用定理 5-2 中的白努利多項式的生成函數。

$$\frac{te^{2xt}}{e^t-1}=\sum_{n=0}^{\infty}B_n(2x)\frac{t^n}{n!}=\frac{te^{2xt}(e^t+1)}{(e^t-1)(e^t+1)}=\frac{te^{2xt}(e^t+1)}{(e^{2t}-1)}=\frac{te^{(2x+1)t}}{(e^{2t}-1)}+\frac{te^{2xt}}{(e^{2t}-1)}$$

$$=\frac{1}{2}[\frac{2te^{(x+\frac{1}{2})(2t)}}{(e^{2t}-1)}+\frac{2te^{x(2t)}}{(e^{2t}-1)}]=\frac{1}{2}[\sum_{n=0}^{\infty}B_n(x+\frac{1}{2})\frac{(2t)^n}{n!}+\sum_{n=0}^{\infty}B_n(x)\frac{(2t)^n}{n!}]$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}2^{n-1}(B_n(x+\frac{1}{2})+B_n(x))\frac{t^n}{n!}$$

$$\Rightarrow\sum_{n=0}^{\infty}B_n(2x)\frac{t^n}{n!}=\sum_{n=0}^{\infty}[2^{n-1}(B_n(x+\frac{1}{2})+B_n(x))]\frac{t^n}{n!}$$

$$\Rightarrow B_n(2x)=2^{n-1}(B_n(x+\frac{1}{2})+B_n(x))$$

代入 $x=\frac{1}{2}$ ， $B_n(2\cdot\frac{1}{2})=2^{n-1}(B_n(\frac{1}{2}+\frac{1}{2})+B_n(\frac{1}{2}))$

$$\Rightarrow B_n(\frac{1}{2})=-B_n(1)(1-\frac{1}{2^{n-1}})=-(-1)^nB_n(0)(1-\frac{1}{2^{n-1}})$$

對於 $2n$ ， $B_{2n}(\frac{1}{2})=-(1-\frac{1}{2^{2n-1}})b_{2n}$ ；

對於 $2n+1$ ， $B_n(0)=0$ 所以 $B_{2n+1}(\frac{1}{2})=-(1-\frac{1}{2^{2n}})b_{2n}=0$ 也當然成立。

請注意 $\left|-(1-\frac{1}{2^{n-1}})b_n\right|\le|b_n|$ $(n\ge 0)$ 。

因為 $\left|B_{2n}(\frac{1}{2})\right|\le|B_{2n}(0)|$ ，所以 $|B_{2n}(0)|=|b_{2n}|$ 是我們唯一需要的上界。我將所論證的結果，整理並描述成下面的定理 8。

【定理 8】

已知 $R_N=\frac{(-1)^{N+1}}{N!}\int_n^{m+1}P_N(x)f^{(N)}(x)dx$ ，則 $|R_{2N}|$ 的上界估計： $|R_{2N}|\le\frac{|b_{2N}|}{(2N)!}\left|\int_n^{m+1}f^{(2N)}(x)dx\right|$ 。

（六） $|b_n|$ 的漸近分析及估計

但我們需要方法估計 $|b_k|$ 的大小，而這可以透過生成函數 $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n=\frac{x}{e^x-1}$ 看出，觀察 $\frac{x}{e^x-1}$ 在所有實數 x 都是有定義的，但這並不代表 $\frac{x}{e^x-1}$ 的收斂半徑是無限大，在複變分析中，冪級數收斂範圍的實部會受其在複數域的表現影響，此收斂範圍會以冪級數的中心點(在此為 0)向外擴張一個圓盤直到遇到任何一個奇異點，此奇異點與中心點的距離即收斂半徑， $\frac{z}{e^z-1}$ 離原點的最近奇異點位於 $z=\pm2\pi i$（此點無法以

極限賦值），因此$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n=\frac{x}{e^x-1}$的收斂半徑為$2\pi$，也代表$|b_n|$恰好被$\frac{(2\pi)^n}{n!}$控制。

我將所論證的結果，整理並描述成下面的定理 9。

【定理 9】

$|b_{2n}|$的漸近分析 $|b_{2n}|\sim C\frac{(2n)!}{(2\pi)^{2n}}$ 。

我寫了一個程式計算各個$C_n=\frac{(2\pi)^{2n}}{(2n)!}|b_{2n}|,\ n\geq 0$：

1, 3.2898, 2.1646, 2.0347, 2.0082, ..., 2.0000004(n = 15), ...

我猜測這個數列的極限是 2，並且除了C_0是 1、$C_1=\frac{\pi^2}{3}$，剩餘的項將遞減。

在此有一未證明猜想，這裡我們會假設$|b_{2n}|\leq\frac{\pi^2(2n)!}{3(2\pi)^{2n}}$永遠成立並藉此估計上界$|R_{2N}|$。

【猜想】

估計$|R_{2N}|$的上界為$|R_{2N}|\leq\frac{\pi^2}{3(2\pi)^{2N}}\left|\int_n^{m+1}f^{(2N)}(x)dx\right|$ 。

（七）精準估計巴塞爾問題的收斂值

回到巴塞爾問題，將$f(x)=\frac{1}{x^2}$和$f^{(N-1)}(x)=(-1)^{k-1}k!x^{-(k+1)}$代入上式：

$$|R_{2N}|\leq\frac{\pi^2}{3(2\pi)^{2N}}[(2N)!m^{-(2N+1)}]=\frac{\pi^2(2N)!}{(2\pi m)^{2N}3m}$$

此時$m=1$的最小誤差，$2N=6$估計誤差為 0.0385，是實際的332%。在$m=2$的最小誤差，$2N=12$估計誤差為 0.0000508，實際誤差約 0.00002，我認為這是實用的上界。

最後，我們來估計巴爾賽問題至雙精度浮點數（電腦程式常用的 64 位元浮點數），其具有 53 位元紀錄精確值的尾數，代表其精確度可至2^{-53}，約$1.11\cdot 10^{-16}$。

挑選 $m=14, N=7$ 代入誤差估計公式得 $1.2335\cdot 10^{-17}$，符合目標精確度。

$$\begin{aligned}S&\approx\sum_{k=1}^{13}\frac{1}{k^2}+\frac{1}{14}+\frac{1}{2\cdot 14^2}+\sum_{k=1}^{7}\frac{b_{2k}}{(2k)!}\frac{-(-1)^{2k-1}(2k)!}{14^{2k+1}}=\sum_{k=1}^{13}\frac{1}{k^2}+\frac{1}{14}+\frac{1}{2\cdot 14^2}+\sum_{k=1}^{7}\frac{b_{2k}}{14^{2k+1}}\\&=\frac{6055194307840610482432 67}{3681116726728541080780 80}\approx 1.6449340668482264366962392 2605536\end{aligned}$$

$\mathrm{S} \approx 1.6449340668482264366 96239$

$\frac{\pi^2}{6} \approx 1.6499340668482264364 72415$

近似與實際解相同至小數點後 18 位，誤差為 $2.23824 \cdot 10^{-19}$，比預計精確兩個數量級，回過頭看，如果用正常方法總和前 256 項：

$$\sum_{k=1}^{256} \frac{1}{k^2} \approx 1.641035436$$

只精確至小數點後兩位，這告訴我們 Euler-Maclaurin 求和公式在緩慢收斂級數的總和估計有多麼的強大。

伍、研究結果

定理 1

一般化次方總和公式 $S_m(n)$ 之遞迴式： $S_m(n) = \frac{1}{m+1}[(n+1)^{m+1} - 1 - \sum_{k=0}^{m-1}(C_k^{m+1} \cdot S_k(n))]$

演算法

定義 $E(k) = P(m+1,k)$ 為矩陣的最後一列（即欲消去之列，E 代表 Eliminate 消去），演算法操作如下：

(1)從列 $j = m$ 開始。

(2)將矩陣 P 的第 j 列乘上 $-\frac{E(j)}{C_{j-1}^{j}} = -\frac{E(j)}{j}$ 加至第 $m+1$ 列（第 $m+1$ 列即 E，目的為使 $E(j)$ 變 0）。

(3)紀錄當下 $-\frac{E(j)}{j}$ 的值，它是 n^k 的暫時係數。

(4)將 j 設為 $j-1$。

(5)若 $j \geq 0$ ，回到第 2 步繼續執行，否則 T_m 將暫時係數與 $\vec{n}$ 的內積乘上 $\frac{1}{m+1}$ 。

同時， $E(k) = P(m+1,k)$ 具有下面的遞迴關係：

$$E_s(k) = \begin{cases} \sum_{t=0}^{s} a_t C_1^{m+1} C_{k-1}^{m+1-t} & \text{if } \ k \leq m+1-s \\ E_{s-1}(k) & \text{if } \ k > m+1-s \end{cases}$$ 對於任意正整數 $s \leq m$ 成立

定理 2

總和公式$S_m(n)$的係數由共用項b_k組成：$T_m(n)=S_m(n)-n^m$，

$T_m(n)=\dfrac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot b_k\cdot n^{m+1-k})$，其中$b_k$數列遞迴定義：

$\sum_{k=0}^{m}(C_k^{m+1}\cdot b_k)=0\ (m\neq 0),\ b_0=1$（<u>白努利數$b_k^-$</u>）。

定理 3

$S_m(n)$的多項式意義除了符合次方總和外（此定義僅適用於正整數），可視為滿足：

$S_m(x)=S_m(x-1)+x^m$。反過來，$f(x)=f(x-1)+x^m$的解$f(x)$的形式必為

$f(x)=S_m(x)+p(x)$，其中，$p(x)$任意週期為 1 的函數。

定理 4

(1)白努利數b_k，除了$k=1$外的所有奇數k，其值都是 0。

(2)當$k\in N$，則白努利數的偶數項b_{2k}會正負交替，其中b_{4n}為負、b_{4n+2}為正。

定理 5

(1) b_n的指數生成函數為$\dfrac{x}{e^x-1}=\sum_{n=0}^{\infty}b_n\dfrac{x^n}{n!}$

(2) $B_n(x)$的指數生成函數 $\dfrac{te^{xt}}{e^t-1}=\sum_{n=0}^{\infty}B_n(x)\dfrac{t^n}{n!}$

引理 1

(1) $S_m(n)$在m是偶和奇數時分別是以$x=-\dfrac{1}{2}$中心的奇和偶函數。

(2) $B_m(n)$在m是偶和奇數時分別是以$x=\dfrac{1}{2}$中心的偶和奇函數。

定理 6

當$n\in\mathbb{N}$，$b_{2n}=-\dfrac{1}{2n+1}\sum_{k=1}^{n-1}\mathrm{C}_{2k}^{2n}b_{2k}b_{2n-2k}$

因其總和內具對稱性，公式可進一步變成：

$$b_{4n}=-\frac{1}{4n+1}[\mathrm{C}_{2n}^{4n}(b_{2n})^2+2\sum_{k=1}^{n-1}\mathrm{C}_{2k}^{4n}b_{2k}b_{4n-2k}],\quad b_{4n-2}=-\frac{2}{4n-1}\sum_{k=1}^{n-1}\mathrm{C}_{2k}^{4n-2}b_{2k}b_{4n-2-2k}$$

定理 7

解析函數連續總和公式：

$$\sum_{x=1}^{n} f(x) = \int_0^n f(x)dx + \sum_{k=1}^{N} \frac{b_j^+}{k!}[f^{(k-1)}(n) - f^{(k-1)}(0)] + R_N$$

其中餘式項(Remainder) $R_N = \dfrac{(-1)^{N+1}}{N!}\int_0^n f^{(N)}(x)P_N(t)dx$

週期性白努利多項式 $P_N(t)$=$B_N(\{x\})$ ，$\{x\} = x - \lfloor x \rfloor$是一個週期為 1 的函數

白努利多項式 $B_N(x) = T'_N(x) = \sum_{k=0}^{N} C_k^N b_k x^{N-k}$ （Euler-Maclaurin 求和公式）

引理 2

已知 $B_N(x) = \sum_{k=0}^{N} C_k^N b_k x^{N-k}$ ，則$\left|B_{2k}\left(x\right)\right|$在$0 < x < 1$的最大值只出現在$x = 0$或$\dfrac{1}{2}$ 。

引理 3

已知 $B_N(x) = \sum_{k=0}^{N} C_k^N b_k x^{N-k}$ ，則$B_n(\frac{1}{2}) = = -(1 - \frac{1}{2^{n-1}})\, b_n$

定理 8

已知$R_N = \dfrac{(-1)^{N+1}}{N!}\int_n^{m+1} P_N(x) f^{(N)}(x)dx$ ，則$|R_{2N}|$的上界估計：

$$|R_{2N}| \le \frac{|b_{2N}|}{(2N)!}\left|\int_n^{m+1} f^{(2N)}(x)dx\right|$$

定理 9

$|b_{2n}|$的漸近分析： $|b_{2n}| \sim C\dfrac{(2n)!}{(2\pi)^{2n}}$ ，C 是待定常數（猜想為 2）。

陸、討論

1. $S_m(n)$對 m 的一般化到所有實數：

以$m=\dfrac{1}{2}$為例，如果公式解是有限項的多項式：

$$\sum_{k=1}^{n}\sqrt{k}=\sum_{k=0}^{m}(c_k\cdot x^k)$$

則不可能，對於可能輸入的無限個正整數 n，等式左邊有無限種線性獨立的無理數，而右方至多$m+1$個（唯一來源是係數 c），連在指數 k 加上輔助項 r 也沒能改變困境，而對於別於有限多項式的解，則可以用 Euler-Maclaurin 求和公式。

2. 估計巴賽爾問題至雙精度浮點數（使用$m=14$，$2N=14$）：

正常方法總和前 256 項，只精確至小數點後兩位

$$\sum_{k=1}^{256}\frac{1}{k^2}\approx 1.641035436$$

使用 Euler-Maclaurin 求和公式近似：

$$\text{S}\approx\sum_{k=1}^{13}\frac{1}{k^2}+\frac{1}{14}+\frac{1}{2\cdot 14^2}+\sum_{k=1}^{7}\frac{b_{2k}}{(2k)!}\frac{-(-1)^{2k-1}(2k)!}{14^{2k+1}}=\sum_{k=1}^{13}\frac{1}{k^2}+\frac{1}{14}+\frac{1}{2\cdot 14^2}+\sum_{k=1}^{7}\frac{b_{2k}}{14^{2k+1}}$$

$$=\frac{605519430784061048243267}{368111672672854108078080}\approx 1.6449340668482264366962392260553 6$$

誤差上界為：$\dfrac{\pi^2(2N)!}{(2\pi m)^{2N}3m}=\dfrac{\pi^2(14)!}{(28\pi)^{14}42}\approx 1.2335\cdot 10^{-17}<2^{-53}(\approx 1.11\cdot 10^{-16})$

3. Euler-Maclaurin 求和公式使用上最佳參數選取

承上述，給定一 m，巴賽爾問題誤差估計$\dfrac{\pi^2(2N)!}{(2\pi m)^{2N}3m}$的整數輸入最小值發生在 $2N=2\lfloor\pi m\rfloor$，因為下一項將乘上新的 N 的$\dfrac{2N}{2\pi m}$，若$2N>2\pi m$，$\dfrac{2N}{2\pi m}>1$將增加比值。

所以估計最小誤差是$\dfrac{(2\lfloor\pi m\rfloor)!\pi^2}{(2\pi m)^{2\lfloor\pi m\rfloor}3m}$，在此使用數值計算機(wolfram alpha)進行測試：

$m = 3 \Rightarrow N = 9,\ \ 7.7800 \cdot 10^{-8}$

$m = 4 \Rightarrow N = 12,\ \ 1.2583 \cdot 10^{-10}$

$m = 5 \Rightarrow N = 15,\ \ 2.0969 \cdot 10^{-13}$

$m = 6 \Rightarrow N = 18,\ \ 3.6445 \cdot 10^{-16}$

$m = 7 \Rightarrow N = 21,\ \ 6.3400 \cdot 10^{-19}$

$m = 7$ 達標，使用 $N = 21$ ，但注意到 m 的對應計算量是 $O(m)$ ，而 N 會使所需白努利數增加和多項式取值為 $O(m^2)$ ，最小化 m 不是一個好優化計算量的好主意。

優化這個是一個複雜的問題，我會想像一個理想演算法是從任意 m, N 開始，往一個 m 和 N 的方向，再計算他的分數（考量精準度和計算量），再依照如梯度下降法前往潛在分數最大化區域，直到找到一組誤差夠小的 N, m。

柒、未來展望

期望未來能製作演算法分析總和算出最佳參數用以 Euler-Maclaurin 近似的演算法和優化誤差上界，和深入探究白努利數和黎曼函數的關係，及探究此牽扯到許多數論問題黎曼函數本身。

此外，我找到了 2 的負冪次權重的次方總和公式，即 $E_m(n) = \sum_{k=0}^{n} \frac{k^m}{2^k}$ ，具有公式：

$$E_m(n) = 2f_m - \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{m} C_k^m f_k (n+1)^{m-k}$$

其中 f_m 是富比尼數，具遞迴關係如下：

$$f_m = \sum_{k=0}^{m-1} C_k^m f_k,\ f_0 = 1$$

推導過程與此科展的白努利數推導相似，其 OEIS 代碼為 A000670，未找到上方記錄 2 的負冪次權重的次方總和公式的應用。由於篇幅關係，及我失敗的推廣 Euler Macularin 求和公式的富比尼數類比而未收錄，期望未來能完成研究。

捌、參考資料及其他

[1] Euler Maclaurin 求和公式的非嚴謹推導

https://youtu.be/fw1kRz83Fj0?si=XzHBvtH8yDPqhAPL

[2] $B_n(mx)$ multiplication theorem 的推導（用於 $B_N(\frac{1}{2})$ 值證明）

https://math.stackexchange.com/questions/1013616/proving-of-the-multiplication

[3] The Generalization of Faulhaber's Formula to Sums of Arbitrary Complex Powers

Raphael Schumacher: https://arxiv.org/abs/2103.08027

[4] 富比尼數 OEIS: https://oeis.org/A000670

【評語】050410

本作品通過作者的思路，重新證明了正整數次方和的公式。由於已知該公式各項係數與白努利數有直接關聯，因此作者重新證明了許多與白努利數相關的已知結果，如白努利數的非零項、白努利數的生成函數等等。並且以這些結果，給出計算π^2的方式，但這是已知結果。作者對內容掌握佳，也有一些自己的想法，獨立探索的能力強。但是不少所得到的結論是已知的經典結果，作品的獨立創見較為不足。

作品海報

次方總和公式的拓展

$$\sum k^n \longrightarrow \sum f(z) \quad \frac{z}{e^z-1}$$

$$\langle b_n \rangle \quad <3$$

摘要

本研究以推導 $S_m=\sum_{k=1}^{n}k^m$ 一般自然數 m 次方總和的遞迴關係為起點，並進一步將其轉化為巴斯卡三角矩陣中的線性方程組。透過使用消去演算法，發現的次方總和的多項式係數不論m皆由白努利數控制。接著證明白努利數b_k的重要規律，推廣次方總和公式在非正整數的意義，再用次方總和公式來加總任何解析函數(平行加總泰勒級數)，整理得 Euler-Maclaurin 求和公式，然而此無窮級數通常會發散，透過數種技巧估計餘式項上界獲得最佳近似部分和，用以求巴塞爾問題(Basel Problem)的近似解至小數點後 18 位。

壹、研究動機

純粹是興趣，在國三時，已知高斯的自然數總和公式，我找出次方總和公式的一般公式（遞迴式）。而在高中再次接觸到相關內容時，不僅喚醒了我當初的回憶，更激發了對這個主題的熱情。藉著高中階段更成熟的數學工具與方法，我希望能進一步拓展原有的成果，並利用新的工具繼續延伸它。

我期待在少量的外界研究和幫助下，自主探究和解決問題。雖然，我知道這個主題大概率已經飽和了，很難發現全新的定理，儘管如此，仍希望能透過獨創的方法推論出既有的定理和公式，並讓我更深入理解數學的研究過程、提升分析與推導能力。

貳、研究目的

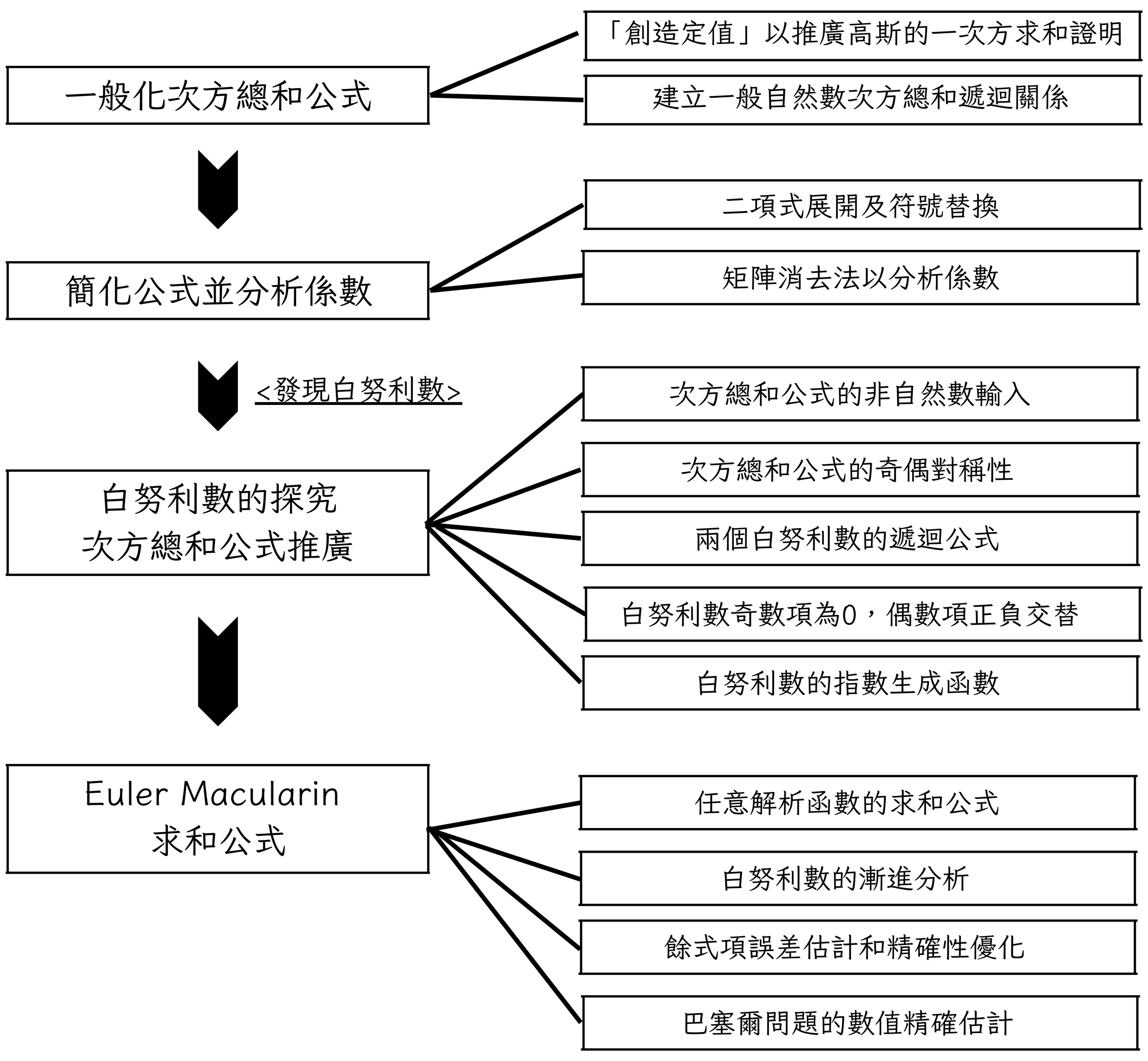
本次研究目的大致上可以分為以下四點：

一、尋找任意m次方總和 $S_m(n)$ 的遞迴式。

二、構造演算法優化 $S_m(n)$算法並探討係數的規律性並與白努利數連結。

三、推廣 $S_m(n)$總和公式到非正整數n，並證明白努利數的重要性質。

四、推廣 $S_m(n)$至任意函數的連續總和並精準估計巴塞爾問題的收斂值。



肆、研究過程及方法

一、一般化的次方總和遞迴公式

數學家高斯將自然數一次方和式子的首尾相加以得到「定值」，因此在推導m次方和公式時，我們用嘗試 x^m-y^m，製造「定值」因子 $(x-y)$，有效對 $S_m(n)$ 進行降次，偏移相減可以達到此效果（此處偏移為1）。

$$\begin{aligned}
S_m+(n+1)^m-1^m &= 2^m+3^m+\ldots+n^m+(n+1)^m\\
-)\qquad S_m &= 1^m+2^m+3^m+\ldots+n^m
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(n+1)^m-1^m &= \sum_{k=1}^{n}\left((k+1)^m-k^m\right)\\
&=(k+1-k)\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=0}^{m-1}\binom{m}{j}k^j
\end{aligned}$$

$\rightarrow$

$$\begin{aligned}
(n+1)^m-1^m &= \sum_{j=0}^{m-1}\binom{m}{j}\left(\sum_{k=1}^{n}k^j\right)\\
&=\sum_{j=0}^{m-1}\binom{m}{j}S_k(n)
\end{aligned}$$

從中得S_m遞迴式：

$$\boxed{S_m=\frac{1}{m+1}\left[(n+1)^{m+1}-1-\sum_{k=0}^{m-1}\binom{m+1}{k}S_k\right]}$$

二、簡化和優化公式

藉由觀察重複性和替換 $T_m=S_m-n^m$（除了 $T_0=n$），得到極整齊的恆等式（或遞迴式）：

$$\sum_{k=0}^{m}\binom{m+1}{k}T_k=n^{m+1}\quad 及\quad T_m=\frac{1}{m+1}\left[n^{m+1}-\sum_{k=0}^{m-1}\binom{m+1}{k}T_k\right]$$

解出 $T_0\sim T_m$ 相當於解線性方程組 $\vec{n}=P\vec{T}$：

$$\begin{pmatrix}n^1\\n^2\\n^3\\n^4\\n^5\\\vdots\\n^{m+1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\binom{1}{0}&0&0&0&0&\cdots&0\\\binom{2}{0}&\binom{2}{1}&0&0&0&\cdots&0\\\binom{3}{0}&\binom{3}{1}&\binom{3}{2}&0&0&\cdots&0\\\binom{4}{0}&\binom{4}{1}&\binom{4}{2}&\binom{4}{3}&0&\cdots&0\\\binom{5}{0}&\binom{5}{1}&\binom{5}{2}&\binom{5}{3}&\binom{5}{4}&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\\binom{m+1}{0}&\binom{m+1}{1}&\binom{m+1}{2}&\binom{m+1}{3}&\binom{m+1}{4}&\cdots&\binom{m+1}{m}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}T_0\\T_1\\T_2\\T_3\\T_4\\\vdots\\T_m\end{pmatrix}$$

$\rightarrow$

$T_0\sim T_6$（由反向代換法解出）

$$\begin{cases}
T_0=n\\
T_1=\frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n\\
T_2=\frac{1}{3}n^3-\frac{1}{2}n^2+\frac{1}{6}n\\
T_3=\frac{1}{4}n^4-\frac{1}{2}n^3+\frac{1}{4}n^2+0n\\
T_4=\frac{1}{5}n^5-\frac{1}{2}n^4+\frac{1}{3}n^3+0n^2-\frac{1}{30}n\\
T_5=\frac{1}{6}n^6-\frac{1}{2}n^5+\frac{5}{12}n^4+0n^3-\frac{1}{12}n^2+0n\\
T_6=\frac{1}{7}n^7-\frac{1}{2}n^6+\frac{1}{2}n^5+0n^4-\frac{1}{6}n^3+0n^2+\frac{1}{42}n
\end{cases}$$

1. 首項、次項、第四項、第六項總分別皆是 1/(m+1), 1/2, 0, 0
2. 每一同降冪順序項的正負號相同

注意到T_m的係數規律！

（以降冪排列）

Mission: 找到各個T_m間係數的關聯性

我們可以透過一般化T_m的算法獲取係數的關聯性，問題在於遞迴式極難處理，每一項都要從頭展開。但如果我們使用矩陣的列運算來進行消去法，以n^k所對應的列向量進行整體運算，就可以直接求出目標T_m多項式的係數。

消去演算法

定義 $E(k)=P(m+1,k)$ 為矩陣的最後一列（即欲消去之列，E 代表 Eliminate 消去）
1. 從列 $j=m$ 開始。
2. 將矩陣 P 的第 j 列乘上加至第m+1列(m+1列即E，目的為使 $E(j)$ 變 0)。
3. 紀錄當下 $-\frac{E(j)}{j}$ 的值，它是 n^k 的暫時係數。
4. 將 j 設為 $j-1$
5. 若 $j\geqslant 0$，回到第 2 步繼續執行，否則最後T_m是暫時係數與 $\vec{n}$ 的內積乘上 $\frac{1}{m+1}$。

步驟分析+數學歸納法

$$E_s(k)=\begin{cases}\sum_{t=0}^{s} a_t\binom{m+1}{t}\binom{k-1}{m+1-t} & \text{if } k\leq m+1-s\\ E_{s-1}(k) & \text{if } k>m+1-s\end{cases}$$

$$a_m=-\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m-1}\binom{m+1}{k}a_k$$

$$\boxed{T_m=\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}\binom{m+1}{k}a_k n^{m+1-k}}$$

紅框裡的式子非常重要！代表所有T_m都共用同一個a，代表T_m間係數有高度關聯（這使計算T_0~T_m的時間複雜度從$O(n^3)$降到$O(n^2)$，而這個數列是在西元 1713 年被白努利發表的第一白努利數b^-，後皆以b代表此數。在此以遞迴式計算白努利數：

$$\langle b_k\rangle=1,-\frac{1}{2},\frac{1}{6},0,-\frac{1}{30},0,\frac{1}{42},0,-\frac{1}{30},0,\frac{5}{66},0,-\frac{691}{2730},0,\frac{7}{6}$$

規律：
- 除了k=1外的所有奇數項都是0
- 除了k=0外的所有偶數項正負交替

分離出奇數項，將 n 分別以1和-1代入$S_m(n)$再相減，即可消掉所有偶數項

$$1-0=S_m(1)-S_m(-1)=\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m-1}\binom{m+1}{k}b_k^+\left(1+(-1)^{m-k}\right)$$

觀察上式m是奇數 $m=2j+1$ 時，若 k 是偶數，則 $1+(-1)^{m-k}=0$，b_k^+的偶數項消失，式子兩邊同時減去 $b_1^+=\frac{1}{2}$ 則對於每個自然數 j

$$\sum_{k'=1}^{j}\binom{2j+2}{2k'+2}b_{2k'+1}^+=0$$ 再由歸納法得證

（證明綱要）

(註：b^-和b^+的差別僅在第一項分別是 -1/2 和 1/2，因爲 $T_m=S_m-n^m$ ，使雙方的次項係數差一）

工具：白努利數的指數生成函數 $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n=\frac{x}{e^x-1}$
（用白努利數的遞迴關係式推導）

Classic route

1. 生成函數 $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n=\frac{x}{e^x-1}$
2. 以ix代入，使偶數項正負交替生成函數
3. 證明代入後的生成函數恆正or恆負
4. 代入ix, 2ix的生成函數線性組合得到 tan x 的生成函數 $\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{2^{2n}(2^{2n}-1)}{(2n)!}b_{2n}x^{2n-1}$
5. 由 $(\tan x)'=1+\tan^2 x$ 可證明 tan x 泰勒展開係數恆正

（證明綱要）

Alternative route (新的遞迴式)

1. 對 $F(x)=\frac{x}{e^x-1}$ 求導
2. 得到 $F^2(x)=F(x)-xF(x)-xF'(x)$
3. F以生成函數級數代入再比較係數再做整理得到 $(n\geqslant 1)$：

$$b_{2n}=-\frac{1}{2n+1}\sum_{k=1}^{n-1}\binom{2n}{2k}b_{2k}b_{2n-2k}$$

4. 再由歸納法證明偶數項正負交替

$$b_{4n-2}>0,\quad b_{4n}<0$$

（證明綱要）

#S_m 的非疊代定義（遞迴）：

對於正整數n而言 $S_m(n)=S_m(n-1)+n^m$ 總是成立，因為S_m是多項式，由代數基本定理，其也在所有實數x成立（另外可以證明滿足上述函數方程的解必定是S_m加上某週期為一的函數），以上將S_m的次方總和意義拓展到所有實數。

推論一　α偏差的次方總和

$$\sum_{k=m=1}^{n}(k+\alpha)^p=S_p(n+\alpha)-S_p(m+\alpha)$$

Ex. $(-44.4)^3+(-43.4)^3+\ldots+(0.6)^3+(1.6)^3+\ldots+(66.6)^3$

$$\sum_{k=-45}^{66}(k+0.6)^3=S_3(66+0.6)-S_3(-46+0.6)=\frac{(66.6)^2(67.6)^2}{4}-\frac{(-45.4)^2(-44.4)^2}{4}$$
$$=4051539.072$$

推論二　S_m的對稱性

$S_m(-1)=S_m(0)-0^m=0$

$S_m(-1-n)=\sum_{k=1}^{n}(-k)^m=(-1)^m S_m(n)$ （連續套用遞迴式）

對於正整數n而言，S_m奇或偶對稱於 $x=-\frac{1}{2}$，由代數基本定理，其也在所有實數x成立。

三、加總任何解析函數

解析函數可以用冪級數表示，連續加總時，每一項冪次都對應一個總和公式。

泰勒定理：設N是一個正整數。如果定義在一個包含a的區間上的函數f在a點處N+1次可導，那麼對於這個區間上的任意x，都有：

$$f(x)=\sum_{k=0}^{N}\frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k+\int_a^x\frac{f^{(N+1)}(t)}{N!}(x-t)^N dt$$

其中，左側的有限總和是泰勒展開式，右側的積分是餘式項，為了簡便說明，右欄是令N逼近無窮大並假設餘式項的總和的極限為0的非正式推導，包含餘式積分項的推導在此科展的作品說明書中，略些繁瑣。

$$S=\sum_{k=m}^{n}f(k)=\sum_{k=m}^{n}[\sum_{j=0}^{\infty}c_j(x-m+1)^k]$$
$$=\sum_{k=0}^{\infty}c_k\cdot S_k(n-m+1)$$
$$=\sum_{k=0}^{\infty}[c_k\cdot(\frac{1}{k+1}\sum_{j=0}^{k}[\binom{k+1}{j}\cdot b_j^+\cdot n^{k+1-j}])]$$
$$=\sum_{j=0}^{\infty}(\frac{b_j^+}{j!}\cdot\sum_{k=j}^{\infty}[c_k\cdot\frac{d^{j-1}}{d^{j-1}x}(x^k)]_{x=n-m+1})$$
$$=\sum_{k=0}^{\infty}(\frac{b_k^+}{k!}[f^{(k-1)}(n)-f^{(k-1)}(m-1)])$$

＊此處 $k=0$ 時， f的「 -1階導數」純粹只是滿足冪次求導規則，其實為反導數之差，即定積分。

另外，運用缺乏餘式項的公式常常會發散(白努利數超指數增長)

應用於巴塞爾問題	$S=1+\sum_{k=2}^{\infty}\frac{1}{k^2}$
→ 巴塞爾問題的解是白努利數b⁺的無窮總和 → 但此無窮總和發散	$=1+\int_1^{\infty}\frac{1}{x^2}dx+\sum_{k=1}^{\infty}(\frac{b_k^+}{k!}[\lim_{n\to\infty}f^{(k-1)}(n)-f^{(k-1)}(1)])$ $=1+\frac{1}{2}+\sum_{k=2}^{\infty}[\frac{b_k^+}{k!}(-1)^k]$ $=\sum_{k=0}^{\infty}b_k^+=1+\frac{1}{2}+\frac{1}{6}-\frac{1}{30}+\frac{1}{42}-\frac{1}{30}+\frac{5}{66}-\frac{691}{2730}+\cdots$

$1=1$

$1+\frac{1}{2}=1.5$

$1+\frac{1}{2}+\frac{1}{6}\approx 1.6667$

$1+\frac{1}{2}+\frac{1}{6}-\frac{1}{30}\approx 1.6333$

$1+\frac{1}{2}+\frac{1}{6}-\frac{1}{30}+\frac{1}{42}\approx 1.6571$

$1+\frac{1}{2}+\frac{1}{6}-\frac{1}{30}+\frac{1}{42}-\frac{1}{30}\approx 1.6238$

$1+\frac{1}{2}+\frac{1}{6}-\frac{1}{30}+\frac{1}{42}-\frac{1}{30}+\frac{5}{66}\approx 1.6996$

$1+\frac{1}{2}+\frac{1}{6}-\frac{1}{30}+\frac{1}{42}-\frac{1}{30}+\frac{5}{66}-\frac{691}{2730}\approx 1.4465$

以上的部分和在第四項1.6333最接近巴塞爾問題的解 $\frac{\pi^2}{6}\approx 1.6449$ 隨後即誤差增大至發散，但仍可一定程度看出部分和的參考價值，只需估計及降低其誤差。

包含餘式積分項的公式（Euler-Maclaurin 級數）：

$$\sum_{x=1}^{n}f(x)=\int_0^n f(x)dx+\sum_{k=1}^{N}\frac{b_j^+}{k!}\left[f^{(k-1)}(n)-f^{(k-1)}(0)\right]+R_N$$

其中餘式項(Remainder) $R_N=\frac{(-1)^{N+1}}{N!}\int_0^n f^{(N)}(x)P_N(x)dx$

週期性白努利多項式 $P_N(x)=B_N(\{x\})$，$\{x\}=x-[x]$

白努利多項式 $B_N(x)=T_N'(x)=\sum_{k=0}^{N}\binom{N}{k}b_kx^{N-k}$

另一個優化此近似的想法是正常求前幾項部分和，再用 Euler-Maclaurin 求和級數近似剩下的項：

$$S-S(n)=\sum_{k=n+1}^{\infty}\frac{1}{k^2}=\int_n^{\infty}\frac{dx}{x^2}+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{b_k^+}{k!}\left[\frac{d^{(k-1)}(x^{-2})}{d^{(k-1)}x}\right]_{x=n}^{\infty}$$

$$=\left[-x^{-1}\right]_{x=n}^{\infty}+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{b_k^+}{k!}\left[(-1)^{k-1}k!x^{-(k+1)}\right]_{x=n}^{\infty}$$

$$=n^{-1}+\sum_{k=1}^{\infty}b_k^+(-1)^kn^{-(k+1)}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{b_k}{n^{k+1}}$$

可以看出 n 越大，級數發散的越慢，於是我猜想誤差最小值在更後面的項數，整體上降低誤差。

Mission: 估計誤差並證實猜想

1. ML 不等式

$R_N=\frac{(-1)^{N+1}}{N!}\int_0^n f^{(N)}(x)P_N(x)dx$

包含 $P_N(x)=B_N(\{x\})$ 難以積分

若對於任意 $x\in[0,1)$，$|B_N(x)|\leqslant M_N$

$|R_N|\leqslant\frac{M_N}{N!}|\int_0^n f^{(N)}(x)dx|$

2. $B_N(x)$ 的對稱性

由S的對稱性和

$B_N(x)=T_N'(x)=(S_N(x)-x^m)'$

推得 $|B_N(x)|$ 對稱於 $x=\frac{1}{2}$

所以 $|B_N(x)|$ 於 $[0,1)$ 的值可對應到 $\left[0,\frac{1}{2}\right]$

＊可用三角不等式使用 $x=\frac{1}{2}$ 得到粗略的上界，但我們有更好的方式。

特性：$B_N(x)$ 導數自我相似

$B_N(x)=\sum_{k=0}^{N}\binom{N}{k}b_kx^{N-k}$

$\Rightarrow B_N'(x)=NB_{N-1}(x)$

3. $B_N(x)$ 的零點連鎖效應

由 $B_N(x)$ 導數自我相似，可知 $B_N'(x)$ 的零點會『繼承』至 $B_{N-1}(x)$

再由微分中值定理，任兩零點間必存在導數的零點

更多推論可知：若 $B_{2N+1}(x)$ 在 $\left(0,\frac{1}{2}\right)$ 具有零點，則每個 $B_{2k+1}(x)$ 會因為『繼承』和白努利數非一奇數項為0，而有至少5個零點，至 $B_3(x)$ 將導致矛盾。

$\Rightarrow B_{2N+1}(x)$ 在 $\left(0,\frac{1}{2}\right)$ 不具有零點

$\Rightarrow B_{2N}(x)$ 在 $\left(0,\frac{1}{2}\right)$ 單調

4. $|B_{2N}(0)|>|B_{2N}(1/2)|$

$B_{2N}(x)$ 在 $\left(0,\frac{1}{2}\right)$ 單調

$\Rightarrow|B_{2N}(x)|$ 最大值在 $x=0,\frac{1}{2}$

由參考文獻的白努利多項式乘積理論可以得到

$B_N\left(\frac{1}{2}\right)=\left(\frac{1}{2^{n-1}}-1\right)b_N$

而已知 $B_N(0)=b_N$

餘式項估計：

$M_{2N}=|b_{2N}|$

$|R_{2N}|\leqslant\frac{b_{2N}}{N!}|\int_0^n f^{(N)}(x)dx|$

實作: 估計巴賽爾問題至雙精度浮點數（$2^{-53}\approx 1.11\times 10^{-16}$）

首先，餘式項估計的 b_{2N} 也可被估計

特性：由 $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{b_n}{n!}x^n=\frac{x}{e^x-1}$ 的收斂半徑可以得到白努利數的漸進式

$|b_{2n}|\sim C\frac{(2n!)}{(2\pi)^{2n}}$　因為x=2πi是 $\frac{x}{e^x-1}$ 的奇異點，收斂半徑是2π

對於 $f(x)=\frac{1}{x^2}$，$|R_{2N}|\leq\frac{\pi^2}{3(2\pi)^{2N}}[(2N)!m^{-(2N+1)}]=\frac{\pi^2(2N)!}{(2\pi m)^{2N}3m}$

$m=14,N=7\ \Rightarrow R_{14}\leqslant 1.2335\times 10^{-17}\leqslant 1.11\times 10^{-16}$

$S=\sum_{k=1}^{13}\frac{1}{k^2}+\frac{1}{14}+\frac{1}{2(14^2)}+\sum_{k=1}^{7}\frac{b_{2k}}{(2k!)}\frac{-(-1)^{2k-1}(2k!)}{14^{2k+1}}$

$\approx 1.64493406684822643\underline{6696239}$

$\frac{\pi^2}{6}\approx 1.64993406684822643\underline{6472415}$

＊相同至小數點後18位，誤差為 2.23824×10^{-19}

＊如果用正常方法總和前 256 項 $\sum_{k=1}^{256}\frac{1}{k^2}\approx 1.641035436$，只精確至小數點後兩位

伍、未來展望

對於a的冪次權重的次方總和 ${}_aE_m(n)=\sum_{k=0}^{n}a^kk^m$

具有遞迴式 ${}_aE_m(n)=\left(\frac{a}{1-a}\right)\left[\sum_{k=0}^{m-1}\binom{m}{k}E_k-a^n(n+1)^m\right]$ 或 $\left(\frac{1}{a-1}\right)\left[\sum_{k=0}^{m-1}\binom{m}{k}(-1)^{m+1}E_k+a^{n+1}n^m+(-1)^{m+1}\right]$

前式和後式的 $\frac{a}{1-a}$ 和 $\frac{1}{a-1}$ 使 ${}_aE_m(n)$ 的一般式在大m時極為複雜，可分別帶入 $a=\frac{1}{2},2$ 大幅度簡化

如我找到 $a=\frac{1}{2}$ 的『一般式』，即 ${}_{1/2}E_m(n)=2f_m-\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{m}\binom{m}{k}f_k(n+1)^{m-k}$

其中 f_m 是 Fubini 數，具遞迴關係如下：

$f_0=1,\ f_m=\sum_{k=0}^{m-1}\binom{m}{k}f_k\quad(m=1,2,3,\dots)$

推導過程與此科展的白努利數推導相似，Fubini 數的 OEIS 代碼為 A000670，未找到上方記錄2的負冪次權重的次方總和公式的應用。由於篇幅關係，及我未能成功推廣 Euler Maclaurin 求和公式的 Fubini 數類比而未收錄，期望未來能完成研究。

另外，有鑑於Euler Maclaurin求和公式的誤差常常發散（白努利數的 $O(n!)$ 增長），希望製造專為總和特定函數（因為對於一般函數，Euler Maclaurin求和公式已經做的很好了）所做的快速收斂級數近似，如參考資料[3]對於任意複數次方的總和近似，我可以做像是任意複數權重的任意複數次方總和近似等等（應用於總和受指數衰退的函數或等角旋轉的向量模長函數）。

其他：

- 製作演算法分析總和算出最佳參數用在 Euler-Maclaurin 近似的演算法和優化誤差上界。
- 探究白努利數的數論性質（本科展僅觸及代數性質）。
- 創造出快速計算白努利數的演算法。

陸、參考資料及其他

[1] Euler Maclaurin 求和公式的非嚴謹推導： https://reurl.cc/lz7W6Q
[2] 白努利多項式乘積理論的推導： https://reurl.cc/knaez3
[3] The Generalization of Faulhaber's Formula to Sums of Arbitrary Complex Powers: https://arxiv.org/abs/2103.08027
[4] 富比尼數 OEIS: https://oeis.org/A000670