



Centrum voor Wiskunde en Informatica
Centre for Mathematics and Computer Science

H.J.J. te Riele

Rekenen aan de Riemann hypothese

The Centre for Mathematics and Computer Science is a research institute of the Stichting Mathematisch Centrum, which was founded on February 11, 1946, as a nonprofit institution aiming at the promotion of mathematics, computer science, and their applications. It is sponsored by the Dutch Government through the Netherlands Organization for the Advancement of Research (N.W.O.).

Rekenen aan de Riemann hypothese

H.J.J. te Riele
Centrum voor Wiskunde en Informatica
Postbus 4079, 1009 AB Amsterdam

Abstract

De uit 1859 daterende Riemann hypothese speelt een belangrijke rol in de theorie van de priemgetallen. Tot op heden is niemand er in geslaagd dit vermoeden te bewijzen, of er een tegenvoorbeeld voor te vinden.

In dit rapport wordt uiteengezet hoe men, reeds met eenvoudige hulpmiddelen zoals een programmeerbare pocketcalculator, de Riemann hypothese in een eindig gedeelte van de zgn. kritieke strip numeriek kan verifiëren. Alle formules en constanten die men hiervoor nodig heeft worden gegeven. Ter verduidelijking is een uitgewerkt voorbeeld toegevoegd.

1980 Mathematics Subject Classification (1985 Revision): 11M26.

1987 CR Categories: F.2.1. *65V05*

Key Words and Phrases: Riemann hypothesis, Euler-Maclaurin formula, Riemann-Siegel formula, Gram's Law.

Notitie NM-N9002
Centrum voor Wiskunde en Informatica
Postbus 4079, 1009 AB Amsterdam

1 Inleiding

In 1859 publiceerde Bernhard Riemann in de *Monatsberichte der Königlichen Preussischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin* een artikel getiteld: *Ueber die Anzahl der Primzahlen unter einer gegebenen Grösse*. Hierin formuleerde hij (o.a.) zijn beroemd geworden *Riemann hypothese*, die een belangrijke rol speelt in de theorie van de priemgetallen. Wat dit precies inhoudt zal in §2 uit de doeken worden gedaan. Riemann voegde er nog aan toe dat hij, na enkele vergeefse pogingen, het zoeken naar een bewijs had gestaakt, omdat hij dit voor het doel, waarvoor hij zijn artikel had geschreven, niet nodig had.

De Riemann hypothese komt voor in een in 1900 door Hilbert opgestelde lijst van problemen die hij als de belangrijkste onopgeloste wiskundige problemen van zijn tijd beschouwde. Tot op heden is niemand er in geslaagd een bewijs of een weerlegging van de Riemann hypothese te geven.

In §3 van deze bijdrage zullen we nader ingaan op *numerieke berekeningen* die men kan uitvoeren om de Riemann hypothese gedeeltelijk te verifiëren of om een tegenvoorbeeld te vinden, als dit mocht bestaan. Hierbij is ons eerste doel de lezer een indruk te geven van de wiskundige technieken die daarbij een rol spelen. Het is in dit kort bestek niet mogelijk om een volledige, op zich zelf staande, behandeling te geven van het betreffende onderwerp. Voor details en historische gegevens kan men het boek van H.M. Edwards: *Riemann's Zeta Function* (Academic Press, 1974) raadplegen. Wel geven we de formules en constanten die men nodig heeft om zelf, bv. met behulp van een pc, de Riemann hypothese in een gedeelte van de kritieke strip te verifiëren. Ter verduidelijking is een uitgewerkt voorbeeld toegevoegd.

Opmerking: Mijn collega Jan van de Lune verdient dank voor het kritisch doorlezen en becommentariëren van dit rapport.

2 De Riemann zeta-functie en de Riemann hypothese

Beschouw de functie $\zeta(s) := \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s}$, waarbij $s = \sigma + it$ een complex getal is. Als $\sigma > 1$, dan convergeert de reeks, en is $\zeta(s)$ dus netjes gedefiniëerd. Riemann slaagde er in om met behulp van een techniek, die we nu *analytische voortzetting* noemen, aan te tonen dat er een unieke functie bestaat die samenvalt met $\zeta(s)$ voor $\sigma > 1$, en die analytisch is in het gehele complexe vlak, behalve in het punt $s = 1$ (waar de functie een pool van de orde 1 heeft). Deze functie staat bekend als de *Riemann zeta-functie*. Als we definiëren

$$\xi(s) := \frac{1}{2}s(s-1)\zeta(s)\Gamma(s/2)\pi^{-s/2} \quad (1)$$

waarbij Γ de gamma-functie is, d.w.z. de uitbreiding van de faculteitsfunctie $n!$ ($\Gamma(n+1) = n!$ voor positieve gehele getallen n), dan geldt de *functionaalverge-*

lijking

$$\xi(s) = \xi(1-s). \quad (2)$$

Hieruit kan, met behulp van bekende eigenschappen van de gamma-functie, worden afgeleid dat $\zeta(s) = 0$ voor $s = -2n$, $n = 1, 2, \dots$. Dit zijn de zgn. *triviale* nulpunten van de zeta-functie.

Maar $\zeta(s)$ heeft meer nulpunten. Deze liggen in de zgn. kritieke strip $0 \leq \sigma \leq 1$. Dat er *buiten* de kritieke strip geen andere dan de triviale nulpunten liggen kan men als volgt inzien. De zgn. *Euler product formule* luidt:

$$\sum_{n=1}^{\infty} n^{-s} = \prod_p (1 - p^{-s})^{-1},$$

waarbij het product loopt over alle priemgetallen $p = 2, 3, 5, \dots$. Merk op dat we hier een relatie hebben tussen, enerzijds, de natuurlijke getallen en, anderzijds, de priemgetallen. De geldigheid ervan kan als volgt worden ingezien. Als we ieder van de factoren aan de rechterkant schrijven als

$$(1 - p^{-s})^{-1} = 1 + p^{-s} + p^{-2s} + \dots$$

dan is hun product, formeel gesproken, een som van termen van de vorm $(p_1^{n_1} p_2^{n_2} \dots p_r^{n_r})^{-s}$ waarbij $p_1, \dots, p_r$ verschillende priemgetallen zijn en $n_1, \dots, n_r$ natuurlijke getallen. Gebruikmakend van de hoofdstelling van de rekenkunde (die zegt dat ieder natuurlijk getal op precies één manier kan worden geschreven als het product van priemgetallen) plus enkele convergentie-overwegingen, concluderen we dat het product in de Euler product formule gelijk is aan $\sum_n n^{-s}$. De Euler product formule is geldig in het rechter-halfvlak $\sigma > 1$. Daar is het product absoluut convergent, en geen der factoren is daar gelijk aan 0, dus $\zeta(s) \neq 0$. Uit de functionaalvergelijking volgt dan dat $\zeta(s)$ in het halfvlak $\sigma < 0$ geen andere nulpunten dan de triviale heeft. De triviale nulpunten van $\zeta(s)$ "neutraliseren" de enkelvoudige polen die de gamma-functie heeft in de negatieve gehele getallen, en zijn dus geen nulpunten van $\xi(s)$.

Maar nu naar de nulpunten in de kritieke strip. Men kan aantonen dat de functie $\xi(\frac{1}{2} + is)$ een *gehele functie van de orde 1* en, bovendien, *even* is. Dergelijke functies hebben volgens de algemene theorie der gehele functies (van Hadamard) oneindig veel nulpunten. Omdat $\xi(s)$ geen nulpunten buiten de kritieke strip heeft, moeten deze nulpunten, en dus ook de niet-triviale nulpunten van $\zeta(s)$, in de kritieke strip $0 \leq \sigma \leq 1$ liggen. De preciese ligging van deze nulpunten is onderwerp van veel onderzoek geweest. Aangezien

$$(1 - 2^{1-s})\zeta(s) = 1 - \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} - \dots > 0 \quad (0 < s < 1)$$

en $\zeta(0) = -\frac{1}{2}$, geldt dat $\zeta(s)$ geen nulpunten op de reële as tussen 0 en 1 heeft. Verder geldt $\zeta(\bar{s}) = \overline{\zeta(s)}$, zodat de complexe nulpunten symmetrisch liggen

ten opzichte van de reële as. De functionaalvergelijking impliceert verder dat deze nulpunten óf op de lijn $\sigma = \frac{1}{2}$ liggen, óf dat ze in paren voorkomen die symmetrisch liggen t.o.v. deze lijn.

In zijn artikel uit 1859 beweerde Riemann dat *het zeer waarschijnlijk is dat al deze nulpunten óp de lijn $\sigma = \frac{1}{2}$ liggen*. Dit is de beroemde Riemann hypothese. Niemand is er tot op heden in geslaagd deze te bewijzen of te weerleggen.

De nulpunten van $\zeta(s)$ die *boven* de reële as liggen worden aangeduid met $\rho_1, \rho_2, \dots$, waarbij $\rho_j = \sigma_j + it_j$ (en $t_j > 0$). Bij het tellen van deze nulpunten wordt rekening gehouden met de multipliciteit (een evt. dubbel nulpunt telt dus voor twee); bovendien worden ze zó geordend dat $0 \leq t_j \leq t_{j+1}$ (en $\sigma_j \leq \sigma_{j+1}$ als $t_j = t_{j+1}$) voor $j \geq 1$.

We zullen nu nader ingaan op het verband dat er bestaat tussen de ligging van de complexe nulpunten van de Riemann zeta-functie en de verdeling van de priemgetallen. Als een getal-theoreticus de verdeling van de priemgetallen probeert te begrijpen, dan is de volgende functie van belang: het *aantal* priemgetallen $\leq x$, aangeduid met $\pi(x)$. Gauss ontdekte al in 1792 of 1793 (gebruikmakend van tabellen van priemgetallen) dat de dichtheid van de priemgetallen in de buurt van x ongeveer gelijk aan $1/\log x$ is, en dat de zgn. logaritmische integraal

$$\text{li}(x) = \int_2^x \frac{dt}{\log t}$$

een goede benadering van de functie $\pi(x)$ is. Hoe goed? Kan het bv. zo zijn dat, voor iedere $\theta > 0$, het verschil tussen $\pi(x)$ en $\text{li}(x)$ begrensd is door een constant veelvoud van x^θ (voor alle voldoende grote x)? In standaard notatie: geldt misschien dat, voor $x \rightarrow \infty$,

$$\pi(x) = \text{li}(x) + \mathcal{O}(x^\theta)?$$

Het volgende is bekend: als $\pi(x) = \text{li}(x) + \mathcal{O}(x^\theta)$, voor $x \rightarrow \infty$, dan heeft $\zeta(s)$ geen nulpunten in het halfvlak $\sigma > \theta$. Omgekeerd: als $\zeta(s) \neq 0$ voor $\sigma > \theta$, dan geldt, voor $x \rightarrow \infty$,

$$\pi(x) = \text{li}(x) + \mathcal{O}(x^\theta \log x).$$

We zien hier dat uit een aanname over de verdeling van de priemgetallen conclusies getrokken kunnen worden over de horizontale verdeling van de nulpunten van de zeta-functie, en omgekeerd.

Wat is nu precies bekend over de ligging van $\rho_1, \rho_2, \dots$? Recente numerieke berekeningen hebben aangetoond dat de eerste 1.500.000.000 van deze nulpunten inderdaad alle op de lijn $\sigma = \frac{1}{2}$ liggen en dat hetzelfde geldt voor lange reeksen van achtereenvolgende nulpunten in de buurt van de nulpunten met rangnummer 10^{18} , 10^{19} en 10^{20} . Wat onze *theoretische* kennis betreft het volgende. De beroemde *Priemgetalstelling* zegt dat $\pi(x) \sim x/\log x$, voor $x \rightarrow \infty$. Men kan laten zien dat dit equivalent is met de uitspraak dat $\zeta(s)$ geen nulpunten op de lijn $\sigma = 1$ (en dus ook niet op de lijn $\sigma = 0$) heeft. Deze grens heeft men nooit

essentiële kunnen verbeteren, d.w.z., met onze huidige kennis kunnen we niet uitsluiten dat er complexe nulpunten van $\zeta(s)$ zijn die willekeurig dicht bij de lijn $\sigma = 1$ liggen. Wel weten we dat de meeste nulpunten dicht bij de kritieke lijn ($\sigma = \frac{1}{2}$) liggen in de zin dat bij elke $\epsilon > 0$ een $\delta = \delta(\epsilon) < 1$ hoort zodanig dat het aantal nulpunten $\beta + i\gamma$ met $0 < \gamma \leq T$ en $|\beta - \frac{1}{2}| > \epsilon$ kleiner is dan T^δ . Deze bovengrens is kleiner dan het *totale* aantal nulpunten $\beta + i\gamma$ met $0 < \gamma \leq T$, aangeduid met $N(T)$. Hiervoor geldt namelijk:

$$N(T) \sim \frac{T}{2\pi} \log \frac{T}{2\pi} - \frac{T}{2\pi} + \mathcal{O}(\log T), \quad T \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Wat betreft de nulpunten op de lijn $\sigma = \frac{1}{2}$ is het volgende bekend: tenminste twee-vijfde deel van alle complexe nulpunten van $\zeta(s)$ ligt op de lijn $\sigma = \frac{1}{2}$.

3 Numerieke verificatie van de Riemann hypotheese

3.1 Wiskundige achtergrond

Met behulp van het bekende Newton-proces is het mogelijk om een complex nulpunt van $\zeta(s)$ numeriek te benaderen. Hiermee kan echter niet *bewezen* worden dat zo'n nulpunt op de lijn $\sigma = \frac{1}{2}$ ligt, omdat iedere drijvende komma-computerberekening, hoe nauwkeurig ook uitgevoerd, een resultaat met een eindige precisie aflevert. Gelukkig kan het probleem anders geformuleerd worden zodanig dat het wél mogelijk is te bewijzen dat complexe nulpunten precies op de kritieke lijn liggen, en wel op de volgende wijze.

In de vorige paragraaf hebben we gezien dat de niet-triviale nulpunten van $\zeta(s)$ juist de nulpunten zijn van de functie $\xi(s)$. Uit (2) en $\xi(\bar{s}) = \overline{\xi(s)}$ volgt

$$\xi\left(\frac{1}{2} + it\right) = \xi\left(\frac{1}{2} - it\right) = \overline{\xi\left(\frac{1}{2} + it\right)},$$

zodat, voor reële t , $\xi(\frac{1}{2} + it)$ *reëelwaardig* moet zijn. Dus de complexe nulpunten van $\xi(s)$ die op de lijn $\sigma = \frac{1}{2}$ liggen kunnen bepaald worden door *tekenwisselingen* van (de continue functie) $\xi(\frac{1}{2} + it)$ op te sporen. Verder is het gebruikelijk (en handig!) om $\xi(\frac{1}{2} + it)$ nog te delen door de reële grootheid

$$\frac{1}{2}(-t^2 - \frac{1}{4})|\Gamma(\frac{1}{4} + \frac{it}{2})\pi^{-\frac{1}{4} - \frac{it}{2}}|.$$

De zo ontstane functie wordt aangeduid met $Z(t)$ en er geldt, gebruikmakend van (1):

$$Z(t) = \frac{\xi(1/2 + it)}{\frac{1}{2}(-t^2 - \frac{1}{4})|\Gamma(\frac{1}{4} + \frac{it}{2})\pi^{-\frac{1}{4} - \frac{it}{2}}|} = \frac{\Gamma(\frac{1}{4} + \frac{it}{2})}{|\Gamma(\frac{1}{4} + \frac{it}{2})|} \frac{\pi^{-\frac{1}{4} - \frac{it}{2}}}{|\pi^{-\frac{1}{4} - \frac{it}{2}}|} \zeta(\frac{1}{2} + it)$$

$$= e^{i\Im \log \Gamma(\frac{1}{4} + \frac{it}{2})} \pi^{-it/2} \zeta(\frac{1}{2} + it).$$

Deze functie is, net zoals $\zeta(\frac{1}{2} + it)$, reëelwaardig voor reële t en zijn nulpunten corresponderen precies met de nulpunten van $\zeta(s)$ op de kritieke lijn. Verder is $Z(t)$ continu, zodat, als we kunnen *bewijzen* dat er tussen twee waarden van t een tekenwisseling van Z optreedt, we hiermee het bestaan van een nulpunt (van oneven multipliciteit) van $\zeta(s)$ op de lijn $\sigma = \frac{1}{2}$ hebben aangetoond.

Als we schrijven

$$Z(t) = e^{i\theta(t)} \zeta(\frac{1}{2} + it),$$

dan is $\theta(t)$ continu, en

$$\theta(t) = \Im \log \Gamma(\frac{1}{4} + \frac{it}{2}) - \frac{t}{2} \log \pi$$

met $\theta(0) = 0$. In §3.2 zullen we twee manieren beschrijven om de waarde van $Z(t)$ te berekenen. Met behulp van de formule van Stirling voor $\log \Gamma(s)$ kan men de volgende asymptotische ontwikkeling voor $\theta(t)$ afleiden:

$$\theta(t) = \frac{t}{2} \log \frac{t}{2\pi} - \frac{t}{2} - \frac{\pi}{8} + \sum_{k=1}^n \frac{|B_{2k}|(1 - 2^{1-2k})}{4k(2k-1)} t^{1-2k} + r_n(t), \quad (4)$$

waarbij $B_2 = 1/6$, $B_4 = -1/30$, $B_6 = 1/42$, $B_8 = -1/30$, ... de Bernoulli-getallen zijn, en

$$|r_n(t)| < \frac{(2n)!}{(2\pi)^{2n+2} t^{2n+1}} + \exp(-\pi t),$$

voor alle $t > 0$ en $n \geq 0$. De functie $\theta(t)$ heeft een minimum van ongeveer $-3,53$ in de buurt van $t = 2\pi$, en is monotoon stijgend voor $t \geq 7$. Voor $m \geq -1$ definiëren we het m -de *Gram-punt* g_m als de unieke oplossing $x \in [7, \infty)$ van de vergelijking

$$\theta(x) = m\pi.$$

Na Riemann was J. Gram de eerste die zich heeft beziggehouden met de numerieke verificatie van de hypothese van Riemann. Hij berekende de eerste 15 nulpunten van $\zeta(s)$ op de lijn $\sigma = \frac{1}{2}$. Hij slaagde er ook in te bewijzen dat zijn lijst *alle* (tien) nulpunten in het gebied $0 \leq t \leq 50$ bevatte waaruit de juistheid van de Riemann hypothese voor dit gebied volgt. Een belangrijke observatie die Gram deed was dat $Z(t)$ steeds van teken wisselt tussen twee opeenvolgende Gram-punten (hierboven gedefiniëerd). Iets precieser geformuleerd:

$$\text{sign } Z(g_n) = (-1)^n. \quad (5)$$

Een Gram-punt waarvoor (5) geldt heet "goed", anders "fout". "Gram's law" zegt nu dat alle Gram-punten goed zijn, hoewel men tegenwoordig weet dat deze "wet" oneindig vaak niet geldt! Wel is het zo dat *gemiddeld* tussen twee

openvolgende Gram-punten precies één nulpunt van $Z(t)$ ligt. Als men de Riemann hypothese in een gegeven eindig gedeelte van de kritieke strip zou willen bewijzen, dan is dit is een uiterst handige vuistregel voor de keuze van t -waarden voor het onderzoek naar tekenwisselingen van $Z(t)$. Men kan dit ook wat precieser formuleren: zij

$$S(t) := N(t) - 1 - \frac{\theta(t)}{\pi} \quad (6)$$

waarbij $N(t)$ is zoals gedefiniëerd boven formule (3). Dan geldt Gram's law daar waar $|S(t)| < 1$. Uit numerieke berekeningen blijkt dat dit het geval is in meer dan 70% van het gebied waar de eerste 1.500.000.000 complexe nulpunten van $\zeta(s)$ liggen. In de rest van dit gebied geldt bijna overal dat $|S(t)| < 2$. Nergens is tot nu toe waargenomen dat $|S(t)| > 3$, hoewel bekend is dat $S(t)$ willekeurig groot kan worden!

We hebben gezien hoe we in een eindig deel van de kritieke strip nulpunten van $\zeta(s)$ kunnen opsporen, die *op* de kritieke lijn liggen. Als we nu zouden kunnen bewijzen dat dit *alle* nulpunten zijn die in het betreffende deel van de kritieke strip liggen, dan hebben we bewezen dat hier de Riemann hypothese juist is. De volgende stelling van Littlewood en Turing helpt ons hier: als $Z(t)$ tenminste $n + 1$ nulpunten heeft tussen $t = 0$ en een goed Gram-punt $t = g_n$, en als voor ieder volgend goed Gram-punt $t = g_{n+j}$, $j = 1, \dots, k$, met $k \approx (\log g_n)^2/163$, $Z(t)$ tenminste $n + j + 1$ tekenwisselingen in het interval $[0, g_{n+j}]$ heeft, dan heeft $\zeta(s)$ *ten hoogste* $n + 1$ nulpunten waarvan het imaginaire deel in het interval $[0, g_n]$ ligt. In het geval dat de k Gram-punten g_{n+j} , $j = 1, \dots, k$ niet allemaal goed zijn kan men een variant van de stelling van Littlewood en Turing gebruiken; hier gaan we verder niet op in. In ieder geval kan men de Riemann hypothese verifiëren tot een (goed) Gram-punt g_n door $n + 1$ tekenwisselingen van $Z(t)$ in het interval $[0, g_n]$ op te sporen, en door een voldoende groot aantal tekenwisselingen tussen $t = g_n$ en enkele volgende Gram-punten op te sporen.

3.2 De formules van Euler-Maclaurin en van Riemann-Siegel

In §3.1 hebben we gezien dat nulpunten van $\zeta(s)$ op de kritieke lijn opgespoord kunnen worden met behulp van tekenwisselingen van de reëelwaardige functie

$$Z(t) = e^{i\theta(t)} \zeta\left(\frac{1}{2} + it\right). \quad (7)$$

Hiertoe is het natuurlijk wel nodig dat we het teken van $Z(t)$ met *wiskundige zekerheid* kunnen bepalen. Dat betekent dat, als we $Z(t)$, en daarmee zijn teken, op een computer willen uitrekenen, we ook een analyse moeten maken van alle fouten die hierbij kunnen optreden. Bij de asymptotische ontwikkelingen die we in deze paragraaf geven, zal dan ook steeds een bovengrens worden

gegeven voor de fout die we begaan door deze ontwikkeling af te breken na een eindig aantal termen. Afrondfouten (door de computer gemaakt) kunnen geanalyseerd worden met behulp van zogenaamde achterwaartse fouten-analyse volgens Wilkinson. Omdat deze fouten in het algemeen klein zijn ten opzichte van andere fouten, zullen we daaraan hier geen aandacht besteden.

In §3.1, formule (4), hebben we al een formule voor $\theta(t)$ gegeven. Met behulp van de volgende *Euler-Maclaurin* formule kan men $\zeta(s)$ tot elke gewenste nauwkeurigheid uitrekenen, mits m en n geschikt gekozen worden:

$$\zeta(s) = \sum_{j=1}^{n-1} j^{-s} + \frac{1}{2}n^{-s} + \frac{n^{1-s}}{s-1} + \sum_{k=1}^m T_{k,n}(s) + E_{m,n}(s), \quad (8)$$

waarbij

$$T_{k,n}(s) = \frac{B_{2k}}{(2k)!} n^{1-s-2k} \prod_{j=0}^{2k-2} (s+j) \quad (9)$$

en

$$|E_{m,n}(s)| < \left| T_{m+1,n}(s) \frac{s+2m+1}{\sigma+2m+1} \right| \quad (10)$$

voor alle $m \geq 0$, $n \geq 1$, en $\sigma = \Re s > -(2m+1)$. Als deze formule voor $s = \frac{1}{2} + it$ wordt gebruikt, dan kan men $n \approx t/2\pi$ kiezen. Het is ook voldoende om $n = \mathcal{O}(t)$ en $m = \mathcal{O}(t)$ te kiezen. De hoeveelheid rekenwerk is dus, ruwweg, evenredig met t .

De *Riemann-Siegel* formule is een (soort) asymptotische ontwikkeling voor $Z(t)$. Voor grote waarden van t is deze formule veel efficiënter dan de Euler-Maclaurin formule, omdat het benodigde rekenwerk $\mathcal{O}(t^{1/2})$ is in plaats van $\mathcal{O}(t)$.

Zij $\tau := t/(2\pi)$, $m := \lfloor \tau^{1/2} \rfloor$, en $z := 2(\tau^{1/2} - m) - 1$. Dan wordt de Riemann-Siegel formule met $n+1$ termen gegeven door

$$\begin{aligned} Z(t) = & 2 \sum_{k=1}^m k^{-1/2} \cos[t \log k - \theta(t)] + \\ & + (-1)^{m+1} \tau^{-1/4} \sum_{i=0}^n \Phi_i(z) (-1)^i \tau^{-i/2} + R_n(\tau), \end{aligned} \quad (11)$$

waarbij

$$R_n(\tau) = \mathcal{O}(\tau^{-(2n+3)/4})$$

voor $n \geq -1$ en $\tau > 0$. Hierbij zijn de $\Phi_i(z)$ bepaalde gehele functies die kunnen worden uitgedrukt in termen van de afgeleiden van

$$\Phi_0(z) := \Phi(z) = \frac{\cos[\pi(4z^2+3)/8]}{\cos(\pi z)}.$$

Er geldt bijvoorbeeld

$$\Phi_1(z) = \Phi^{(3)}(z)/(12\pi^3)$$

en

$$\Phi_2(z) = \Phi^{(2)}(z)/(16\pi^2) + \Phi^{(6)}(z)/(288\pi^4).$$

Voor $R_n(\tau)$, $n = 0, 1, 2, 3$, en $\tau > 32$ ($t > 200$) gelden de bovengrenzen: $|R_n(\tau)| < d_n \tau^{-(2n+3)/4}$ met $d_0 = 0,032$, $d_1 = 0,0054$, $d_2 = 0,00045$ en $d_3 = 0,0005$.

Als we nu $\Phi_i(z)$ schrijven als machtreeks in z , dus

$$\Phi_i(z) := \sum_{j=0}^{\infty} c_{ij} z^j,$$

dan blijkt dat Φ_i voor i even een *even*, en voor i oneven een *oneven* machtreeksontwikkeling heeft. De coëfficiënten c_{ij} van $\Phi_i(z)$ zijn, voor $i = 0, 1, 2$ en 3 , gegeven in Tabel 1.

Tabel 1. Coëfficiënten c_{ij} van $\Phi_i(z)$

j	$c_{0,j}$	$c_{1,j+1}$	$c_{2,j}$	$c_{3,j+1}$
0	0.3826834323651	0.0268251026284	0.0051885428303	0.0013397160907
2	0.4372404680775	-0.0137847734264	0.0003094658388	-0.0037442151364
4	0.1323765754803	-0.0384912504822	-0.0113359410782	0.0013303178920
6	-0.0136050260477	-0.0098710662991	0.0022330457420	0.0022654660765
8	-0.0135676219701	0.0033107597609	0.0051966374089	-0.0009548499999
10	-0.0016237253231	0.0014647808578	0.0003439914408	-0.0006010038459
12	0.0002970535373	0.0000132079406	-0.0005910648427	0.0001012885829
14	0.0000794330088	-0.0000592274870	-0.0001022997255	0.0000686573345
16	0.0000004655612	-0.0000059802426	0.0000208883922	-0.0000005985367
18	-0.0000014327252	0.0000009641322	0.0000059276655	-0.0000033316599
20	-0.0000001035485	0.0000001833473	-0.0000001642384	-0.0000002191929
22	0.0000000123579	-0.0000000044671	-0.0000001516120	0.0000000789088
24	0.0000000017881	-0.0000000027096	-0.0000000059078	0.0000000094147
26	-0.0000000000339	-0.0000000000779	0.0000000020912	-0.0000000009570
28	-0.0000000000163	0.0000000000234	0.0000000001782	-0.0000000001876
30	-0.0000000000004	0.0000000000016	-0.0000000000162	0.0000000000044
32	0.0000000000001	-0.0000000000001	-0.0000000000024	0.0000000000022

3.3 Een uitgewerkt voorbeeld

De berekeningen die we hier zullen beschrijven zijn uitgevoerd op een HP 41/C programmeerbare pocketcalculator. De machine-nauwkeurigheid is ongeveer 10 decimale cijfers.

Om een eerste indruk te krijgen van hoe de Euler-Maclaurin formule in de praktijk werkt, berekenen we $\zeta(2)$ ($=\pi^2/6$) in ongeveer 6 cijfers nauwkeurig. Volgens (10) geldt $|E_{m,n}(2)| < |T_{m+1,n}(2)|$, dus de fout wordt begrensd door de eerste weggelaten B_{2k} -term. We berekenen nu eerst enkele termen van de rij $(2+0)(2+1)\cdots(2+2k-2)B_{2k}/(2k!) = B_{2k}$ en onderzoeken hoe groot we n moeten kiezen om $T_{k,n}(2) = B_{2k}n^{-1-2k}$ voldoende klein te krijgen. Er geldt $B_2 = 1/6$, $B_4 = -1/30$, $B_6 = 1/42$, en voor $k = 3$, $n = 5$ vinden we $|T_{3,5}(2)| = |B_6|5^{-7} \approx 3,05 \times 10^{-7}$ als bovengrens voor de fout. We kiezen daarom in (8) $n = 5$ en $m = 3$, en we vinden

$$\zeta(2) \approx 1^{-2} + 2^{-2} + 3^{-2} + 4^{-2} + \frac{1}{2}5^{-2} + 5^{-1} + B_25^{-3} + B_45^{-5} = 1,644933777.$$

Omdat $\pi^2/6 = 1,644934067$, is de werkelijke fout ongeveer gelijk aan $2,9 \times 10^{-7}$.

We beschouwen nu het geval dat s complex is, nl. $s = \frac{1}{2} + it$. Voor deze s -waarden moeten we immers $\zeta(s)$ uitrekenen als we de Riemann hypothese willen verifiëren. Het probleem is weer hoe m en n te kiezen om de fout $E_{m,n}(s)$ voldoende klein te krijgen. We zullen een *schatting* voor de bovengrens $|T_{m+1,n}(s) \frac{s+2m+1}{\sigma+2m+1}|$ van de fout $|E_{m,n}(s)|$ in (10) afleiden en vervolgens een eenvoudige relatie tussen m en n geven, die moet gelden als we die bovengrens gelijkstellen aan 10^{-4} . Dat we hier met (redelijke) schattingen, en niet met wiskundige (on)gelijkheden werken, is niet bezwaarlijk, omdat we de fout altijd achteraf kunnen controleren aan de hand van de laatste berekende term $T_{m,n}(s)$ in (8).

Het quotient $|B_{2k}|/(2k!)$ kan goed benaderd worden door $2(2\pi)^{-2k}$. Dan geldt, voor $s = \frac{1}{2} + it$,

$$\begin{aligned} & \left| T_{m+1,n}(s) \frac{s+2m+1}{\sigma+2m+1} \right| \\ & \approx \left| \frac{2}{(2\pi)^{2m+2}} \frac{n^{1-s}}{\sigma+2m+1} \frac{s(s+1)\cdots(s+2m+1)}{n^{2m+2}} \right| \\ & = \frac{n^{1/2}}{m+3/4} \frac{|s(s+1)\cdots(s+2m+1)|}{(2\pi n)^{2m+2}}. \end{aligned}$$

Voor $s = \frac{1}{2} + it$ en $j = 0, 1, \dots, m$ geldt

$$|(s+j)(s+2m+1-j)| < (t+j+\frac{1}{2})(t+2m+\frac{3}{2}-j) < (t+m+1)^2.$$

We vervangen nu $|s(s+1)\cdots(s+2m+1)|$ door $(t+m+1)^{2m+2}$ en vinden

$$\left| T_{m+1,n} \frac{s+2m+1}{\sigma+2m+1} \right| \approx \frac{n^{1/2}}{m+3/4} \left(\frac{t+m+1}{2\pi n} \right)^{2m+2}.$$

Stellen we $n^{1/2}/(m+3/4) \approx 1$, dan volgt uit

$$\left| T_{m+1,n} \frac{s+2m+1}{\sigma+2m+1} \right| \approx 10^{-A}$$

dat

$$n \approx (2\pi)^{-1} 10^{A/(2m+2)} (t+m+1). \quad (12)$$

Hierin hebben we nog de vrijheid om m (of n) te kiezen. Deze keuze zou men kunnen laten afhangen van de hoeveelheid beschikbaar geheugen of door de rekentijd die het kost om de $n-1$ termen j^{-s} en de m termen $T_{k,n}(s)$ in (8) uit te rekenen.

Tabel 2. Enkele waarden van $\zeta(\frac{1}{2} + it)$, berekend m.b.v. de Euler-Maclaurin formule (8)

t	n	m	$\Re\zeta(\frac{1}{2} + it)$	$\Im\zeta(\frac{1}{2} + it)$	$ T_{m,n}(\frac{1}{2} + it) $
10	13	3	1,544895206	-0,115336411	$3,00 \times 10^{-6}$
18	20	3	2,329154979	-0,188866043	$4,65 \times 10^{-6}$
23	24	3	1,445707171	0,160826377	$5,67 \times 10^{-6}$
27	21	4	2,254257768	1,210094412	$1,13 \times 10^{-6}$
31	23	4	0,524309247	0,341340206	$1,48 \times 10^{-6}$

We hebben $\zeta(\frac{1}{2} + it)$ uitgerekend voor een vijftal waarden van t (Tabel 2). We kozen $A = 6$ om tenminste een nauwkeurigheid van 6 decimale cijfers te verkrijgen, en $m = 3$ of $m = 4$ in (12). De laatste kolom geeft de absolute waarde van de laatst berekende term $T_{m,n}(\frac{1}{2} + it)$: dit is een voorzichtige schatting van de fout, die wordt begrensd door de laatste *weggelaten* term, dus $T_{m+1,n}(\frac{1}{2} + it)$.

We laten nu zien hoe we de Riemann hypothese kunnen verifiëren voor de eerste drie complexe nulpunten van $\zeta(s)$. We gaan daartoe eerst een drietal tekenwisselingen van $Z(t)$ opsporen. We bepalen de eerste vijf Grampunten g_m , $m = -1, 0, 1, 2, 3$, door de vergelijkingen $\theta(x) = m\pi$ met behulp van het Newton-proces op te lossen. Voor $\theta(x)$ kiezen we de benadering (vgl. (4))

$$\theta(x) = \frac{x}{2} \left(\log \frac{x}{2\pi} - 1 \right) - \frac{\pi}{8}.$$

We vinden:

$$g_{-1} \approx 9,7; \quad g_0 \approx 17,8; \quad g_1 \approx 23,2; \quad g_2 \approx 27,7; \quad g_3 \approx 31,7.$$

Het is niet nodig om *precies* in de Grampunten g_m het teken van $Z(t)$ te bepalen: we hoeven slechts voldoende tekenwisselingen van $Z(t)$ te vinden. We kiezen de waarden $t = 10, 18, 23$ en 27 en berekenen $\theta(t)$ m.b.v. (4), met $n = 2$. Dit is ruim voldoende om een nauwkeurigheid van 10 cijfers te bereiken. De gevonden waarden van $\theta(t)$ staan gegeven in Tabel 3.

Tabel 3. Enkele waarden van $Z(t)$, berekend t.b.v. de verificatie van de Riemann hypothese in $[0, 27]$

t	$\theta(t)$	$Z(t) = \exp[i\theta(t)]\zeta(1/2 + it)$
10	-3,067074401	-1,549194528 (- 0,000000046i)
18	0,080910762	2,336799799 (- 0,000000018i)
23	3,030804025	-1,454625158 (+ 0,000000077i)
27	5,790529875	2,558516478 (+ 0,000000036i)
31	8,847680142	-0,625630341 (- 0,000000006i)

Tabel 4. Enkele benaderde waarden van $Z(t)$, berekend m.b.v. de Riemann-Siegel formule (11)

t	n	$Z(t)$	$ R_n(t) <$
31	0	-0,621902047	$9,67 \times 10^{-3}$
	1	-0,625027743	$7,35 \times 10^{-4}$
	2	-0,625613234	$2,76 \times 10^{-5}$
	3	-0,625625584	$1,38 \times 10^{-5}$
$g_{126} = 282,4547208$	0	-0,028139123	$1,85 \times 10^{-3}$
	1	-0,027587431	$4,64 \times 10^{-5}$
	2	-0,027629837	$5,77 \times 10^{-7}$
	3	-0,027629439	$9,56 \times 10^{-8}$
$g_{127} = 284,1044764$	0	-1,428819403	$1,84 \times 10^{-3}$
	1	-1,428242632	$4,61 \times 10^{-5}$
	2	-1,428283725	$5,71 \times 10^{-7}$
	3	-1,428283352	$9,44 \times 10^{-8}$

Gebruikmakend van de in Tabel 2 gegeven waarden van $\zeta(\frac{1}{2} + it)$ kunnen we nu $Z(t)$ uitrekenen. De gevonden waarden vindt men in kolommen 3 en 4 van Tabel 3. Deze moeten *reëel* zijn, maar door de rekenonnauwkeurigheid vinden we ook een klein imaginair deel. Dit geeft een goede indruk van de rekenfout die is gemaakt bij de berekening van $\zeta(\frac{1}{2} + it)$ met behulp van de Euler-Maclaurin formule, en deze fout is ook goed in overeenstemming met de gevonden bovengrens voor de fout in de berekende waarde van $\zeta(\frac{1}{2} + it)$ (laatste kolom van Tabel 2).

Om tenslotte de stelling van Littlewood en Turing (vermeld aan het eind van §3.1) toe te passen berekenen we ook nog $Z(t)$ voor t in de buurt van (en iets *kleiner* dan) g_3 , en het resultaat vindt men ook in Tabel 3.

Het is duidelijk, dat er tussen g_{-1} en g_2 tenminste 3 tekenwisselingen van $Z(t)$ liggen, en dat er nog minstens één extra tekenwisseling in het interval $[g_2, g_3]$ ligt. Hieruit concluderen we dat de Riemann hypothese juist is voor de eerste drie complexe nulpunten van $\zeta(s)$. Hun imaginaire delen liggen tussen $t = 0$ en $t = 27$. Men kan deze natuurlijk ook nauwkeurig uitrekenen, maar dat is niet nodig als men alleen wil bewijzen dat complexe nulpunten van $\zeta(s)$ reëel deel gelijk aan $\frac{1}{2}$ hebben. Voor de volledigheid geven we hier nog de waarden van de eerste drie complexe nulpunten, afgerond op 4 cijfers achter de komma:

$$\rho_1 = \frac{1}{2} + 14,1347i; \quad \rho_2 = \frac{1}{2} + 21,0220i; \quad \rho_3 = \frac{1}{2} + 25,0109i.$$

Tot slot geven we nog enkele voorbeelden van het gebruik van de Riemann-Siegel formule (11). We berekenen $Z(t)$ in de punten $t = 31$, $t = g_{126}$ en $t = g_{127}$, voor $n = 0, 1, 2$ en 3 (Tabel 4). De gegeven bovengrenzen voor de fout gelden weliswaar voor $t > 200$, maar voor $t = 31$ kunnen we een vergelijking maken met de waarde die we met behulp van de Euler-Maclaurin formule hebben gevonden. De Riemann-Siegel formule blijkt ook voor $t < 200$ een redelijke precisie af te leveren. Het punt $t = g_{126}$ is het eerste Gram-punt waarvoor Gram's law niet geldt (vgl. (5)).