生成函數的求和法

蔡聰明

有許多方法可以求得公式 $\sum_{k=1}^{n} k^2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$。本文我們展示較罕見的生成函數法, 它融合了代數與微積分的演算, 非常有趣。

大家都熟知下面的公式:

$$1^2+2^2+\cdots+n^2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1) \quad (1)$$

對於任意自然數 n 都成立。許多書都把它拿來當作數學歸納法的練習題或例題。我們證明如下:

(i) 當 $n=1$ 時, (1) 式變成

$$1^2 = \frac{1}{6}\times 1\times 2\times 3$$

這顯然成立。

(ii) 假設 $n=k$ 時, (1) 式成立, 即假設

$$1^2+2^2+\cdots+k^2 = \frac{1}{6}k(k+1)(2k+1) \quad (2)$$

成立, 我們要證明: 當 $n=k+1$ 時, (1) 式也成立。

將 (2) 式兩邊同加 $(k+1)^2$, 得到

$$\begin{aligned} &1^2+2^2+\cdots+k^2+(k+1)^2 \\ =&\frac{1}{6}k(k+1)(2k+1)+(k+1)^2 \end{aligned} \quad (3)$$

經過計算, 上式的右項可變形爲 $\frac{1}{6}(k+1)(k+2)(2k+3)$。從而, (3) 式變成

$$\begin{aligned} &1^2+2^2+\cdots+k^2+(k+1)^2 \\ =&\frac{1}{6}(k+1)(k+2)(2k+3) \end{aligned}$$

此式恰好是 (1) 式在 $n=k+1$ 的情形。因此, 當 $n=k+1$ 時, (1) 式亦成立。

由數學歸納法, 我們就完成了 (1) 式的證明。(i) 表示 $n=1$ 是起始點, (ii) 表示由 $n=k$ 可推出 $n=k+1$ 的遞移機制, 兩者合起來就可及於所有的自然數。

習題: 試用數學歸納法證明

$$1^3+2^3+3^3+\cdots+n^3 = [\frac{1}{2}n(n+1)]^2 \quad (4)$$

利用數學歸納法證明給定的公式, 在證明完畢之後, 筆者相信每個人都會覺得意猶未盡, 似乎還缺少更根本的東西: 公式是如何探尋、猜測出來的?

換言之, 我們不只是要會「被動地」驗證別人找到的公式 (或定理), 更要會自己「主動地」去找尋公式, 得到發現規律的喜悅。採用科學哲學的術語來說, 我們要從「驗證的層

次」(the context of justification), 深入到核心的「發現的層次」(the context of discovery)。兩個層次都兼顧, 學習或了解才算完全, 才能進一步講究欣賞和品味。

據筆者所知, 發現公式 (1) 的方法不下 20 多種, 本文僅介紹其中的生成函數法 (method of generating function, 又叫做母函數法)。在組合學、機率論與統計學中, 這是一個很重要的方法, 應用非常廣泛。

當我們欲求一個數列 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 的各項或其和 $a_0+a_1+\cdots+a_n$ 時, 爲了利用代數演算的有力工具, 我們考慮多項式

$$g(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n \tag{5}$$

叫做數列 (a_k) 的生成函數。通常我們可以求得 $g(x)$ 的一個精簡表達式, 再令 $x=1$, 就得到

$$g(1)=a_0+a_1+\cdots+a_n \tag{6}$$

我們舉實例來說明。爲了探求 $1^2+2^2+\cdots+n^2$, 考慮多項式

$$f(x)=1+x+x^2+\cdots+x^n \tag{4}$$

作一次微分, 乘以 x, 再作一次微分, 再乘以 x, 就得到

$$\begin{aligned} &x^2f''(x)+xf'(x)\\ &=1^2x+2^2x^2+\cdots+n^2x^n \end{aligned} \tag{7}$$

這恰好是數列 $0, 1^2, 2^2, \ldots, n^2$ 的生成函數:

$$g(x)=0+1^2x+2^2x^2+\cdots+n^2x^n \tag{8}$$

我們必須化簡上式, 進一步求得

$$g(1)=1^2+2^2+\cdots+n^2 \tag{9}$$

爲此, 我們由代數公式

$$1+x+x^2+\cdots+x^n=\frac{x^{n+1}-1}{x-1} \tag{10}$$

出發, 作一次微分, 乘以 x, 得到

$$\begin{aligned} &x+2x^2+\cdots+nx^n\\ &=\frac{nx^{n+2}-(n+1)x^{n+1}+x}{(x-1)^2} \end{aligned}$$

再作一次微分並且化簡, 得到

$$\begin{aligned} &1^2+2^2x+3^2x^2+\cdots+n^2x^{n-1}\\ &=\frac{[n(n+2)x^{n+1}-(n+1)^2x^n+1](x-1)^2-2(x-1)[nx^{n+2}-(n+1)x^{n+1}+x]}{(x-1)^4}\\ &=\frac{n^2x^{n+2}-(2n^2+2n-1)x^{n+1}+(n+1)^2x^n-x-1}{(x-1)^3} \end{aligned}$$

兩邊同乘以 x, 得到

$$\begin{aligned} &1^2x+2^2x^2+3x^3+\cdots+n^2x^n\\ &=\frac{n^2x^{n+3}-(2n^2+2n-1)x^{n+2}+(n+1)^2x^{n+1}-x^2-x}{(x-1)^3} \end{aligned} \tag{11}$$

此式雖然是對於 $x \neq 1$時, 皆成立, 但我們可以考慮當 $x \to 1$ 時, 它的極限值。

對 (11) 式取極限 $\lim_{x\to 1}$, 再連用三次的羅必達規則 (L'Hôpital's rule), 我們得到

$$
\begin{aligned}
&1^2+2^2+3^2+\cdots+n^2\\
&=\lim_{x\to 1}\frac{n^2x^{n+3}-(2n^2+2n-1)x^{n+2}+(n+1)^2x^{n+1}-x^2-x}{(x-1)^3}\\
&=\lim_{x\to 1}\frac{n^2(n+3)x^{x+2}-(n+2)(2n^2+2n-1)x^{n+1}+(n+1)^3x^n-2x-1}{3(x-1)^2}\\
&=\lim_{x\to 1}\frac{n^2(n+3)(n+2)x^{n+1}-(n+1)(n+2)(2n^2+2n-1)x^n+n(n+1)^3x^{n-1}-2}{6(x-1)}\\
&=\lim_{x\to 1}\frac{1}{6}[n^2(n+3)(n+2)(n+1)x^n-n(n+1)(n+2)(2n^2+2n-1)x^{n-1}\\
&\qquad+(n-1)n(n+1)^3x^{n-2}]\\
&=\frac{1}{6}[n^2(n+3)(n+2)(n+1)-n(n+1)(n+2)(2n^2+2n-1)+(n-1)n(n+1)^3]\\
&=\frac{1}{6}n(n+1)[n(n+3)(n+2)-(n+2)(2n^2+2n-1)+(n-1)(n+1)^2]\\
&=\frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)=\frac{1}{3}n(n+\frac{1}{2})(n+1)
\end{aligned}
$$

注意到, 在上述演算中, 我們應用了餘式定理來判別: 當 x 趨近於 1 時, 分子趨近於 0, 故可以使用羅必達規則。

因此, 我們採用生成函數的方法, 不但找到而且證明了公式 (1)。至此, 我們就可以心安理得地寫出結論:

定理: 對於任意自然數 n, 恆有

$$1^2+2^2+3^2+\cdots+n^2=\frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$$

從「數的演算」(算術) 到更高層的「式的演算」(代數), 這是數學的進展。顯然, 高層的「式的演算」可以掌握底層的「數的演算」, 這是勢有必至, 理有必然的事。本文所述的探索過程, 就是一個好例子。

原則上, 我們可以利用上述的生成函數法, 對於任意 $p\in\mathbb{N}$ 求得所有 $1^p+2^p+\cdots+n^p$ 的公式, 只是當 $p\geq 3$ 時, 計算量會越來越大。

習題: 我們觀察到下面的特例

$$
\begin{aligned}
&1+2+\cdots+n=\frac{1}{2}n(n+1)\\
&=\frac{1}{2}n^2+(n\text{的一次式}) \qquad (12)\\
&1^2+2^2+\cdots+n^2=\frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)\\
&=\frac{1}{3}n^3+(n\text{的二次式}) \qquad (13)
\end{aligned}
$$

$$1^3+2^3+\cdots+n^3=[\frac{1}{2}n(n+1)]^2$$
$$=\frac{1}{4}n^4+(n\text{的三次式}) \quad (14)$$

於是由歸納法, 我們猜測

$$1^p+2^p+\cdots+n^p$$
$$=\frac{1}{p+1}n^{p+1}+(n\text{的 } p \text{ 次式}) \quad (15)$$

試用數學歸納法證明 (15) 式對所有自然數 p 皆成立。(對 $p\in\mathbb{N}$ 作歸納證明, 而不是對 n)

為什麼會出現 $1^2+2^2+\cdots+n^2$ 的求和問題呢?

這個問題大致有三個起源: 根據數學史記載, 高斯 (Gauss, 1777-1855) 小時候就會利用首尾相加的辦法巧算出

$$1+2+3+\cdots+100=5050$$

推而廣之, 得到三角形數的公式

$$1+2+3+\cdots+n=\frac{1}{2}n(n+1) \quad (16)$$

進一步, 我們自然就想到平方數的求和問題。

其次, 求算積分 $\int_0^1 x^2dx$, 也會出現平方數的求和問題。將區間 [0,1]分割成 n 等分:

$$0<\frac{1}{n}<\frac{2}{n}<\cdots<\frac{n-1}{n}<1$$

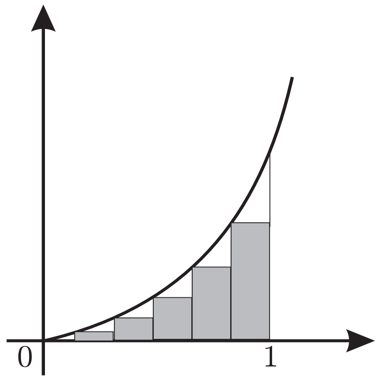
對每一分割小段分別取左、右端點當樣本點, 再求各矩形面積之和, 就得到不足的近似面積, 參見圖一,

$$L_n=\sum_{k=1}^{n}(\frac{k-1}{n})^2\cdot\frac{1}{n}$$
$$=\frac{1}{n^3}[1^2+2^2+\cdots+(n-1)^2] \quad (17)$$

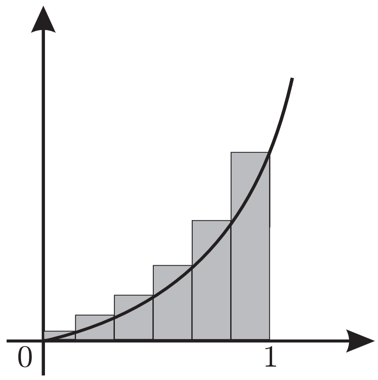
與過剩的近似面積, 參見圖二,

$$U_n=\sum_{k=1}^{n}(\frac{k}{n})^2\cdot\frac{1}{n}=\frac{1}{n^3}[1^2+2^2+\cdots+n^2] \quad (18)$$

而眞正的面積 $\int_0^1 x^2dx$ 介於 L_n 與 U_n 之間。



圖一



圖二

由 (13) 式可得

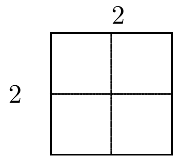
$$\lim_{n\to\infty}L_n=\frac{1}{3}=\lim_{n\to\infty}U_n$$

從而

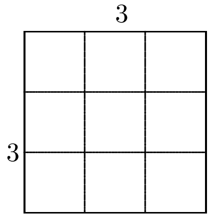
$$\int_0^1 x^2dx=\frac{1}{3}$$

同理, 由 (15) 式可得

$$\int_0^1 x^pdx=\frac{1}{p+1}, \quad p\in\mathbb{N}$$



圖三



圖四

第三個起源: 如圖三, 在 2×2 型的正方形中, 含有 2×2 型的正方形1個, 1×1 型的正方形4個, 總共有 $1^2+2^2=5$ 個正方形。在圖四的 3×3 型正方形中, 含有 3×3 型的正方形1個, 2×2 型的正方形4個, 1×1 型的正方形9個, 總共有 $1^2+2^2+3^2=14$ 個正方形。試問: $n\times n$ 型正方形一共含有幾個正方形? 又 $n\times n\times n$ 型的立方體一共含有多少個立方體? 退化爲一維線段或推廣爲 n 維空間的情形又如何?

總結上述, 從問題的起源, 到探索過程, 得到發現, 再提出證明, 整個合起來才形成一條求眞理之路 (the way of truth)。數學含有最豐富的題材, 可以讓人親身體驗這種求眞理之路, 這是數學值得追尋的主要理由。

—本文作者任教於台灣大學數學系—

中央研究院周鴻經獎學金得獎名單

嚴健彰	(台灣大學)	陳憲揚	(清華大學)
余正道	(台灣大學)	張紫郁	(文通大學)
夏俊雄	(台灣大學)	黃耀弘	(中興大學)
陳昭蓉	(師範大學)	陳美如	(彰化師大)
陳怡眞	(政治大學)	蔡炅男	(成功大學)
劉孔驪	(中央大學)	蔣志祥	(中山大學)

附註:「中央研究院周鴻經獎學金」申請資格及辦法請參見本刊封底裡頁「中央研究院周鴻經獎學金章程」。