

对于下列积分式:

$$I_n = \frac{1}{e} \int_0^1 x^n \cdot e^x dx$$

我们有:

$$I_0 = \frac{1}{e} \int_0^1 e^x dx = 1 - \frac{1}{e},$$

$$I_n = \frac{1}{e} \int_0^1 x^n \cdot d(e^x) = \frac{1}{e} \left(x^n \cdot e^x \Big|_0^1 - \int_0^1 e^x \cdot nx^{n-1} dx \right) = 1 - nI_{n-1}.$$

我们可以依据上述递推式以及初始值 I_0 ,求得 $I_i, (i = 1, 2, 3, \dots, 20)$.

但是这样运行出来的程序, I_{20} 是一个负值,这显然不可能,这时我们意识到这个算法存在精度问题;

如果我们将源程序中的double改换为long double,会发现结果仍然是负值.

这时我们来分析一下误差的大致增长情况,由递推式 $I_n = 1 - nI_{n-1}$ 可以知道,虽然负号的存在会使得每次递推抵消掉一部分误差,但从大体上看,误差的增长率是阶乘级别的.事实上根据和准确值的对比,可以发现,从 I_{12} 开始就存在不少于 10^{-6} 的误差,那么到 I_{20} 误差的累积量可与 $\frac{20!}{12!} \times 10^{-6}$ 同阶,这样的误差是不可以忽略的.

这里有一种非常经典的处理方式,即我们先通过数值积分的手段,求出 I_{20} 的近似值,误差记作 δ_{20} ,这时我们反过来利用递推式,倒推出前面的各项: $I_{n-1} = \frac{1 - I_n}{n}$,可以证明:

$$\delta_n \leq \frac{n!}{20!} \cdot \delta_{20} \leq \delta_{20}, (0 \leq n \leq 20)$$

只要 I_{20} 的误差满足要求,则前面各项的误差都必然满足要求,因为倒推过程中,各项误差在不断减小.

计算 I_{20} 的方法:

一种是计算黎曼和,原理即为:

$$\int_0^1 f(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f\left(\frac{i}{n}\right) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f\left(\frac{i}{N}\right)$$

另一种常用的高效手段是: 自适应辛普森积分

令 $F(x) = \int_0^x f(x) dx$,则有 $\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$.

记 $h = \frac{b-a}{2}, m = \frac{a+b}{2}$, 首先我们考察下列泰勒展开式:

$$F(b) = F(m) + h \cdot f(m) + \frac{h^2}{2} \cdot f'(m) + \frac{h^3}{6} f''(m) + O(h^4) \quad (1)$$

$$F(a) = F(m) - h \cdot f(m) + \frac{h^2}{2} \cdot f'(m) - \frac{h^3}{6} f''(m) + O(h^4) \quad (2)$$

$$f(b) = f(m) + h \cdot f'(m) + \frac{h^2}{2} \cdot f''(m) + O(h^3) \quad (3)$$

$$f(a) = f(m) - h \cdot f'(m) + \frac{h^2}{2} \cdot f''(m) + O(h^3) \quad (4)$$

$$3 \times ((1) - (2)) - h \times ((3) + (4)) :$$

$$3(F(b) - F(a)) - (f(a) + f(b)) \cdot h = 4h \cdot f(m) + O(h^4) \quad (5)$$

$$(5) \Rightarrow \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a) = \frac{f(a) + 4f(m) + f(b)}{3} \cdot h + O(h^4)$$

$$\therefore \int_a^b f(x) dx = \frac{f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)}{6} \cdot (b-a) + O(h^4)$$

利用 $\frac{1}{6} (f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)) \cdot (b-a)$ 来近似计算 $\int_a^b f(x)dx$ 精度要比利用 $f(\frac{a+b}{2}) \cdot (b-a)$ 好很多
这里再使用自适应的分治算法去计算区间 $[L, R]$ 上的定积分, 精度 ϵ :

1. 取 $[L, R]$ 中点 $M = \frac{L+R}{2}$;
2. 分别利用上述计算公式计算区间 $[L, M]$ 上的积分近似值 S_1 , 区间 $[M, R]$ 上的积分近似值 S_2 , 区间 $[L, R]$ 上的积分近似值 S ;
3. 计算差值 $\delta = |S_1 + S_2 - S|$;
4. 如果 $\delta < \epsilon$, 则返回 S 作为结果;
5. 否则递归计算 $[L, M], [M, R]$ 上精度为 $\frac{\epsilon}{2}$ 的积分近似值, 相加后返回.

但这样其实还有一些不常见的特殊情况, 比如说: 考察函数: $f(x) = \sin^2 \pi x$ 在区间 $[0, 4]$ 上的积分:

用上面的算法计算, 会因为: $f(0) = f(1) = f(2) = f(3) = f(4) = 0$ 而得出积分值等于 0 的荒谬结果.

为了避免这样的问题, 我们可以有一个简单粗暴的办法, 在上述的第 4 步中, 额外加一条判断, 限定区间长度 $R-L$ 必须小于给定的值; 因为误差值是区间长度的四阶小量, 所以保证区间长度足够小, 即可保证误差足够小.

当然这里还存在另一种调整方式: 对于区间 $[L, R]$ 取的分割点 M 不一定要是中点, 这里如果加入随机化处理, 就有利于避免被特殊数据针对.

但实际上, 面对大多数情况, 上面的自适应辛普森积分是可以高效地给出正确结果的.