3. Численные методы математического анализа

Содержание этого раздела составляют некоторые численные методы, связанные с тремя классическими темами математического анализа:

- приближение заданной функции функцией из некоторого класса;
- дифференцирование;
- интегрирование.

Большую часть главы занимают параграфы, посвященные первой теме:
Пусть $f(x)$ - заданная (непрерывная) функция на отрезке $[a,b]$.
Необходимо приблизить (аппроксимировать, заменить) ее функцией из заданного класса вида $F(x, a_0, a_1, \ldots, a_n)$, где $a_0, a_1, \ldots, a_n$ - произвольные параметры.
Рассматриваются далее три варианта аппроксимации:
1) Интерполирование (точечное):
параметры $a_0, a_1, \ldots, a_n$ выбираются так, чтобы в ряде точек промежутка $[a,b]$ функция F принимала те же значения, что и в $f(x)$.
2) Среднеквадратичные приближения (квадратичная интерполяция):
параметры $a_0, a_1, \ldots, a_n$ выбираются так, чтобы минимизировать величину
$\int_a^b [f(x) - F(x, a_0, a_1, ..., a_n)]^2 dx$. В случае системы дискретных точек, в которых только рассматриваются значения $f(x)$, интеграл заменяется суммой по этим точкам.
3) Равномерные (наилучшие) приближения:
параметры $a_0, a_1, \ldots, a_n$ подчинены условию минимума выражения:
$\max\limits_{[a,b]} |f(x) - F(x, a_0, a_1, ..., a_n)|$
Основным классом, которому будут принадлежать $F(x, a_0, a_1, \ldots, a_n)$ в наших рассмотрениях, является множество многочленов.

3.1. Задача интерполяции. Многочлен Лагранжа

3.1.1. Постановка задачи

Пусть задана функция $y = f(x)$. Часто нахождение значений этой функции может оказаться трудоемкой задачей. Например, x - параметр в некоторой сложной задаче, после решения которой определяется значение $f(x)$, или $f(x)$ измеряется в дорогостоящем эксперименте. В этих случаях можно получить небольшую таблицу значений функции, но прямое нахождение ее значений при большом количестве значений аргумента нереально. В такой ситуации $f(x)$ заменяется приближенной формулой $g(x)$, которая в определенном смысле близка к функции $f(x)$. Близость обеспечивается введением в функцию $g(x)$ свободных параметров $a_0, a_1, \ldots, a_n$ и их соответствующим выбором.
Итак, известны значения функции $f(x)$ в точках $x_0, x_1, \ldots, x_n$
$y_i = f(x_i), i = 0, \ldots, n$. Потребуем, чтобы для некоторой функции
$g(x, a_0, a_1, \ldots, a_m)$
выполнялись равенства:

$$g(x_i, a_0, a_1, \ldots, a_m) = y_i \qquad i = 0, \ldots, n \tag{1}$$

Если (1) рассматривать как систему для определения $a_0, a_1, \ldots, a_m$, то этот способ называется интерполяцией (Лагранжевой). x_i - узлы интерполяции

Если g зависит от a_j нелинейно, то интерполяция нелинейная, иначе интерполяция линейная. В случае линейной интерполяции можно записать

$$g(x, a_0, \ldots, a_m) = \sum_{j=0}^{m} a_j \cdot \varphi_j(x) \tag{2}$$

(где $\varphi_j(x)$ - система линейно-независимых функций)

Подставим (2) в (1). Относительно a_j получаем линейную систему уравнений:

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \cdot \varphi_j(x_i) = y_i, \qquad i = 0, \ldots, n \tag{3}$$

Для того, чтобы задача интерполирования имела единственное решение, система функций φ_j должна для любых несовпадающих x_i удовлетворять условию:

$$\begin{vmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_0(x_1) & \ldots & \varphi_0(x_n) \\ \varphi_1(x_0) & \varphi_1(x_1) & \ldots & \varphi_1(x_n) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \varphi_n(x_0) & \varphi_n(x_1) & \ldots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix} \neq 0 \tag{4}$$

Система функций, удовлетворяющая условию (4), называется чебышевской.

3.1.2. Построение интерполяционного многочлена Лагранжа

Наиболее простой и (для многих случаев) удобной является система функций $\varphi_j(x) = x^j$, $j = 0, 1, \ldots n$. Функция $g(x, a_0, a_1, \ldots, a_n)$ при этом представляет собой многочлен степени n (интерполяционный многочлен) с коэффициентами $a_0, a_1, \ldots, a_m$.

Система уравнений (3) в этом случае имеет вид:

$$\sum_{j=0}^{n} a_j \cdot x_i^{\,j} = y_i, \qquad i = 0, \ldots, n \tag{5}$$

Определителем этой системы является отличный от нуля определитель

Вандермонда: $\begin{vmatrix} 1 & x_0 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \ldots & x_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{n \geq i > j \geq 0} (x_i - x_j) \neq 0$

Отсюда следует, что интерполяционный многочлен существует и единственен.

Непосредственное решение системы (5) для нахождения a_j уже при небольших n приводит к сильному искажению значений a_j. Получим

явный вид интерполяционного многочлена $\sum_{j=0}^{n} a_j \cdot x^j$, не решая систему (5).

Если $\Phi_{n,j}(x)$ многочлен степени n такой что $\Phi_{n,j}(x_i) = \delta_{i,j}$, то

$g_n(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j \cdot \Phi_{n,j}(x)$ - искомый интерполяционный многочлен степени n, т.к.

$$g_n(x_i) = \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot \Phi_{n,j}(x_i) = y_i.$$

Так как $\Phi_{n,j}(x_i) = 0$ при $i \neq j$, то $\Phi_{n,j}(x)$ делится на $x - x_i$ для любых $i \neq j$, то есть

$\Phi_{n,j}(x) = const \cdot \prod_{i \neq j} (x - x_i)$. Так как $\Phi_{n,j}(x_j) = 1$, то $const = \dfrac{1}{\prod_{i \neq j} (x_j - x_i)}$.

Таким образом,

$$g_n(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j \cdot \prod_{i \neq j} \frac{x - x_i}{x_j - x_i} \qquad (6)$$

Такая форма записи интерполяционного многочлена называется многочленом Лагранжа и обозначается, как правило, $L_n(x)$.

Существуют и другие формы записи того же самого интерполяционного многочлена.

3.1.3. Остаточный член

В узлах $x_0, x_1, \ldots, x_n$ многочлен Лагранжа совпадает с заданной функцией, в остальных точках в общем случае $L_n(x)$ не совпадает с $f(x)$ (кроме случая, когда $f(x)$ многочлен степени не выше n). Разность $f(x)$ - $L_n(x)$ - остаточный член. Запишем ее в виде $f(x) - L_n(x) = c \cdot \omega(x) + \psi(x)$.

При $x = x_i \quad i = 0,1,\ldots,n \quad \psi(x_i) = 0$. Найдем постоянную такую, чтобы $\psi(x) = 0$ в некоторой фиксированной точке x, в которой мы рассматриваем погрешность.

Относительно $f(x)$ будем предполагать $(n+1)$ кратную дифференцируемость.

Значение с, при котором $\psi(x) = 0$ существует и равно $c = \dfrac{f(x) - L_n(x)}{\omega_n(x)}$. Тогда функция $\psi(x) = f(x) - L_n(x) - c \cdot \omega_n(x)$ равна нулю по крайней мере в $(n+2)$ точках $x_0, \ldots, x_n, x$.

По теореме Ролля производная $\psi'(x)$ равна нулю по крайней мере в $(n+1)$ точках $\xi_0^{(1)}, \xi_1^{(1)}, \ldots, \xi_n^{(1)}$. Далее, $\psi''(x)$ равна нулю по крайней мере в n точках и т.д.

Для $(n+1)$ - производной получаем, что существует по крайней мере одна точка ξ такая, что $\psi^{(n+1)}(\xi) = 0$.

$\psi^{(n+1)}(x) = f^{(n+1)}(x) - c \cdot (n+1)!$

Отсюда получаем при $x = \xi$ $c = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$. В этом случае в точке x $\psi(x) = 0$, т.е. остаточный член в точке x имеет вид:

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot \omega_n(x)$$

Значение ξ зависит от x - точки, в которой рассматривается погрешность.
Оценка остаточного члена:

$$\left|R_n(x)\right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \cdot \left|\omega_n(x)\right| ,$$

где $M_{n+1} = \sup\limits_{[a,b]}\left|f^{(n+1)}(x)\right|$

Если $f(x)$ - многочлен степени не выше n , то $L_n(x) \equiv f(x)$

3.2. Минимизация остаточного члена

3.2.1. Постановка задачи

$R_n(x) = f(x) - L_n(x)$ - остаточный член формулы Лагранжа.
Для $R_n(x)$ получено выражение :

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot \omega_n(x) \tag{7}$$

Если интерполируется некоторое множество функций $y = f(x)$, то точность можно оценить величиной:

$$\sup_f \max_x \left|R_n(x)\right|$$

Эта величина зависит только от выбора узлов x_i.
Пусть

$$\left|f^{(n+1)}(x)\right| \le M$$

$$\max_x \left|R_n(x)\right| \le \frac{M}{(n+1)!} \cdot \max_x \left|\omega_n(x)\right|$$

Задача:
найти такие узлы x_i для которых величина

$$\max_x \left|\omega_n(x)\right| \tag{8}$$

минимальна.
Задача (8) есть задача об определении на $[a,b]$ многочлена степени $n+1$, все корни которого простые и лежат на $[a,b]$, наименее отклоняющегося от нуля.

3.2.2. Многочлены Чебышева

Пусть $x \in [-1,1]$. Рассмотрим функцию вида:

$$T_n(x) = \cos[n \cdot \arccos x] \tag{9}$$

При $n = 0$: $T_0(x) = 1$
При $n = 1$: $T_1(x) = x$,
При $n = 2$ используем тригонометрическое тождество
$T_2(x) = \cos(2 \cdot \arccos x) = \cos^2(\arccos x) - \sin^2(\arccos x) =$
$= 2 \cdot \cos^2(\arccos x) - 1 = -1 + 2 \cdot x^2$
Пусть $T_n(x)$ многочлен степени n. Получим рекуррентное соотношение, связывающее $T_{n-1}(x), T_n(x), T_{n+1}(x)$.
$\cos(n+1)\theta = \cos n\theta \cdot \cos\theta - \sin n\theta \cdot \sin\theta$

$\cos(n-1)\theta = \cos n\theta \cdot \cos\theta - \sin n\theta \cdot \sin\theta$
Сложим почленно эти равенства и перенесем $\cos(n-1) \cdot \theta$ в другую сторону.
Получим

$$\cos(n+1)\theta = 2 \cdot \cos n\theta \cdot \cos\theta - \cos(n-1) \cdot \theta \qquad (10)$$

Полагая в (10) $\theta = \arccos x$, получим

$$T_{n+1}(x) = 2 \cdot x \cdot T_n(x) - T_{n-1}(x) \qquad (11)$$

Из (11) следует, что T_{n+1} многочлен степени $n+1$. Коэффициент при x^{n+1} равен 2^n.
Корни многочлена Чебышева $T_n(x)$:

$$n \cdot \arccos x = \frac{\pi}{2} \cdot (1 + 2 \cdot m), \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$
$$x = \cos\frac{\pi \cdot (1 + 2 \cdot m)}{2 \cdot n} \qquad (12)$$

Формула (12) дает n различных значений x при $m = 0, 1, \ldots, n-1$. Значение x при других значениях m совпадает с одним из значений из указанных.
Например, при $m = n$ получаем то же значение, что и при $m = n-1$:
$x = \cos(\frac{\pi \cdot (1 + 2 \cdot n)}{2 \cdot n}) = \cos(\frac{\pi \cdot (1 + 2 \cdot (n-1))}{2 \cdot n}) = \cos(\frac{\pi \cdot (2 \cdot n - 1)}{2 \cdot n})$
Значения при $m = -k$ $(k = 1, 2, \ldots, n-1)$ совпадают со значениями при $m = k - 1$ и т.д.
$\max|T_n(x)|$ на отрезке [-1,1] равен 1. Он достигается в $n+1$ точках, когда $n \cdot \arccos x = \pi \cdot m$.

$$x = \cos\frac{\pi \cdot m}{n}, \quad m = 0, 1, \ldots, n \qquad (13)$$

Покажем, что среди всех многочленов степени n со старшим коэффициентом 1 многочлен $\frac{1}{2^{n-1}} \cdot T_n(x)$ наименее отклоняется от нуля на отрезке [-1,1].

$$\sup_{[-1,1]}|T_n(x)| = \frac{1}{2^{n-1}}$$

Покажем, что для любого $P_n(x)$ со старшим коэффициентом 1

$$\sup_{[-1,1]}|P_n(x)| \geq \frac{1}{2^{n-1}}.$$

Разность $\frac{1}{2^{n-1}} \cdot T_n(x) - P_n(x)$ есть многочлен степени $n-1$. В точках

$x_m = \cos\frac{\pi \cdot m}{n}$ $m = 0,1,\ldots,n$ $T_n(x)$ принимает поочередно значения +1, -1. Если

$\left|P_n(x)\right| < \frac{1}{2^{n-1}}$, то разность в точках x_m будет принимать поочередно положительные и отрицательные значения и будет иметь n нулей (между значениями x_m). Получаем противоречие.

3.2.3. Минимизация оценки остаточного члена

Пусть $y = f(x)$ приближена на отрезке $[a,b]$ интерполяционным многочленом степени n. Оценка остаточного члена:

$$\left|R_n(x)\right| \le \frac{M}{(n+1)!} \cdot \max\left|\omega_n(x)\right|.$$

Величина $\max\left|\omega_n(x)\right|$ на отрезке [-1,1] будет минимальна, если $\omega_n(x)$ окажется многочленом $\frac{1}{2^{n-1}} \cdot T_n(x)$. $\omega_n(x)$ совпадает с этим многочленом, если в качестве узлов интерполяции взять корни многочлена Чебышева $T_n(x)$, вычисляемые по формуле (12).

Сделаем замену $x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot z$, задающую отображение [-1, 1] в отрезок$[a,b]$. Отсюда $z = \frac{2 \cdot x - (b+a)}{b-a}$. Тогда $T_{n+1}(z) = T_{n+1}(\frac{2 \cdot x - (b+a)}{b-a})$ и многочлен $\frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2 \cdot n+1}} \cdot T_{n+1}(\frac{2 \cdot x - (b+a)}{b-a})$ является наименее уклоняющимся от нуля многочленом степени $n+1$ со старшим коэффициентом 1 на отрезке $[a,b]$. Нули определяются формулой

$$x_m = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot \cos\frac{\pi \cdot (2 \cdot m + 1)}{2 \cdot (n+1)} \quad m = 0,1,\ldots,n.$$

Если в качестве узлов интерполяции взять эти значения, то

$\omega_n(x) = \frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2 \cdot n+1}} \cdot T_{n+1}(\frac{2 \cdot x - (b+a)}{b-a})$ и для нее на отрезке $[a,b]$

$\sup\left|\omega_n\right| = \left\|\omega_n\right\| = \frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2 \cdot n+1}}$ - минимальная величина. Тогда оценка остаточного члена будет $\left|R_n\right| \le \frac{M \cdot (b-a)^{n+1}}{(b+1)! \cdot 2^{2 \cdot n+1}}$.

3.3. Интерполяционная формула Ньютона с разделенными разностями

Пусть имеется табулированная функция $y_i = f(x_i)$. Введем понятие разделенной разности.

Разделенные разности нулевого порядка совпадают со значениями самой функции.

Разделенные разности первого порядка $f(x_i, x_j) = \dfrac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}$

Разделенные разности второго порядка $f(x_i, x_j, x_l) = \dfrac{f(x_i, x_j) - f(x_j, x_l)}{x_i - x_l}$ и т.д.

Разделенные разности k - го порядка :

$$f(x_1, \ldots, x_{k+1}) = \frac{f(x_1, \ldots, x_k) - f(x_2, \ldots, x_{k+1})}{x_1 - x_{k+1}} \qquad (14)$$

Пусть $P_n(x)$ многочлен степени n. Разность $P_n(x) - P_n(x_0)$ обращается в нуль при $x = x_0$, следовательно, она делится на $x - x_0$. Тогда разделенная разность первого порядка $P_n(x, x_0) = \dfrac{P_n(x) - P_n(x_0)}{x - x_0}$ - многочлен степени $n-1$ относительно x (и относительно x_0, так как выражение симметрично относительно x и x_0).

Разность $P_n(x, x_0) - P_n(x_1, x_0)$ обращается в нуль при $x = x_1$, поэтому, разделенная разность второго порядка

$P_n(x, x_0, x_1) = \dfrac{P_n(x, x_0) - P_n(x_0, x_1)}{x - x_1}$ - многочлен степени $n-2$.

Аналогично, $P_n(x, x_0, x_1, x_2)$ - многочлен степени $n-3$ и т.д.

Разделенная разность порядка n: $P_n(x, x_0, \ldots, x_{n-1})$ - многочлен нулевой степени.

Разделенные разности более высокого порядка обращаются в нуль.

Значение $P_n(x, x_0, \ldots, x_{n-1})$ от x не зависит, тогда

$P_n(x, x_0, \ldots, x_{n-1}) = P_n(x_0, \ldots, x_n)$

Из определения разделенных разностей следует:

$P_n(x) = P_n(x_0) + (x - x_0) \cdot P_n(x, x_0)$

$P_n(x, x_0) = P_n(x_1, x_0) + (x - x_1) \cdot P_n(x, x_0, x_1)$

и т.д.

Отсюда получаем формулу для $P_n(x)$:

$$\begin{aligned} P_n(x) &= P_n(x_0) + (x - x_0) \cdot P_n(x_0, x_1) + (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot P_n(x_0, x_1, x_2) + \ldots \\ &+ (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1}) \cdot P_n(x_0, \ldots, x_n) \end{aligned} \qquad (15)$$

Разделенные разности в соответствии с рекуррентной формулой (14) выражаются через значения многочлена в узлах $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Если $x_0, x_1, \ldots, x_n$ - узлы интерполяции, $y_0, y_1, \ldots, y_n$ - значения интерполируемой функции в этих узлах, то они однозначно определяют интерполяционный многочлен степени n, значения которого в узлах совпадают с y_i. Тогда разделенные разности многочлена $P_n(x)$ совпадают с разделенными разностями функции $f(x)$.

Поэтому интерполяционный многочлен можно записать в форме:

$$\begin{aligned} L_n(x) &= f(x_0) + (x - x_0) \cdot f(x_0, x_1) + (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot f(x_0, x_1, x_2) + \ldots \\ &+ (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1}) \cdot f(x_0, \ldots, x_n) \end{aligned} \qquad (16)$$

Эта форма называется интерполяционным многочленом Ньютона с разделенными разностями.

Формула (17) более удобна для вычисления, чем запись интерполяционного многочлена в форме Лагранжа, т.к. добавление новых узлов интерполяции влечет вычисление только новых слагаемых, добавляемых к тому, что было вычислено с меньшим числом узлов. При использовании формы Лагранжа в этой ситуации требуется выполнять все вычисления заново.

3.4. Численное дифференцирование.

Каждая из рассмотренных ранее интерполяционных формул может быть использована для приближенного нахождения значений производных функции $y = f(x)$.

3.4.1. Использование интерполяционных многочленов с разделенными разностями.

Пусть $$f(x) = P_n(x) + R_n(x) \tag{18}$$

Дифференцируя формулу (18) m раз, получаем:

$$f^{(m)}(x) = P_n^{(m)}(x) + R_n^{(m)}(x) \tag{19}$$

$$f^{(m)}(x) \approx P_n^{(m)}(x) \tag{20}$$

Ðàññìàòðèâàÿ èíòåðïîëÿöèîííûé ìíîãî÷ëåí â ôîðìå Íüþòîíà è èñïîëüçóÿ îáîçíà÷åíèÿ $x - x_i = \alpha_i$, èìååì

$$P_n(x) = f(x_0) + \alpha_0 \cdot f(x_0,x_1) + \alpha_0 \cdot f(x_0,x_1,x_2) + \alpha_0 \cdot \alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot f(x_0,x_1,x_2,x_3) + \ldots$$

Òîãäà

$$P_n'(x) = f(x_0,x_1) + (\alpha_0 + \alpha_1) \cdot f(x_0,x_1,x_2) + (\alpha_0 \cdot \alpha_1 + \alpha_0 \cdot \alpha_2 + \alpha_1 \cdot \alpha_2) \cdot f(x_0,x_1,x_2,x_3) + \ldots$$

$$P_n''(x) = 2 \cdot f(x_0,x_1,x_2) + 2 \cdot (\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2) \cdot f(x_0,x_1,x_2,x_3) + \ldots$$

. . .

$$P_n^{(m)}(x) = m! \cdot f(x_0,x_1,\ldots,x_m) + \ldots$$

Îñòàâëÿÿ â ïðàâûõ ÷àñòÿõ ïîëó÷åííûõ ôîðìóë òîëüêî ïåðâûå ñëàãàåìûå, ìîæíî çàïèñàòü ñëåäóþùèå ïðîñòûå ïðèáëèæåííûå âûðàæåíèÿ äëÿ ïðîèçâîäíûõ :

$$f'(x) \approx f(x_0,x_1) = \frac{f(x_0) - f(x_1)}{x_0 - x_1}$$

$$f''(x) \approx 2 \cdot f(x_0,x_1,x_2) = 2 \cdot \left[\frac{f(x_0) - f(x_1)}{x_0 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_2)}{x_1 - x_2} \right] \cdot \frac{1}{x_0 - x_2}$$

....

$$f^{(m)}(x) \approx m! \cdot f(x_0,x_1,\ldots,x_m)$$

Ïóñòü $y = f(x)$ - äîñòàòî÷íî ãëàäêàÿ ôóíêöèÿ.

Èññëåäóåì ïîãðåøíîñòü ïðèáëèæåííûõ ôîðìóë ïðîèçâîäíûõ ïåðâîãî è âòîðîãî ïîðÿäêà.

Ïóñòü $x \in [x_0,x_1]$

$$f'(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} + R_1(x) \tag{21}$$

где $h = x_1 - x_0$, $R_1(x)$ - погрешность.

Заменяя значение функции в точке x_1 по формуле Тейлора

$f(x_1) = f(x_0) + h \cdot f'(\xi_1)$, где $\xi_1 \in [x_0, x_1]$,
получаем
$R_1(x) = f'(x) - f'(\xi_1)$.
Еще раз применяя формулу Тейлора, получаем
$R_1(x) = (x - \xi_1) \cdot f''(\bar{\xi}_1)$, где $\bar{\xi}_1 \in [x_0, x_1]$.
Таким образом, если функция $f(x)$ имеет ограниченную производную второго порядк, то погрешность в формуле (21) для любого $x \in [x_0, x_1]$ оценивается неравенством

$$\left|R_1(x)\right| \le h \cdot M_2 \tag{22}$$

где $M_2 = \sup\left|f''(x)\right|$, и при $h \to 0 \quad R_1(x) \to 0$.
В случае, когда x совпадает с одним из узлов интерполяции x_0 или x_1, можно получить больше информации о погрешности приближенного решения. Пусть $x = x_0$. Используя формулу Тейлора

$$f(x_1) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot h + f''(x_0) \cdot \frac{h^2}{2} + f'''(\xi) \cdot \frac{h^3}{3!}$$

из (21) получаем

$$R_1 = f''(x_0) \cdot \frac{h}{2} + f'''(\xi) \cdot \frac{h^2}{3!}.$$

При $h \to 0$ величина $f'''(\xi) \cdot \frac{h^2}{3!}$ (если третья производная функции $f(x)$ ограничена) бесконечно малая величина порядка h^2, т.е.

$$R_1(x_0) = \psi_1(x_0) \cdot h + O(h^2) \tag{23}$$

где $\psi_1(x_0) = \frac{1}{2} \cdot f'(x_0)$.
Формулу приближенного вычисления второй производной функции $f(x)$ рассмотрим для важного частного случая, когда $x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = h$. Возьмем $x \in [x_0, x_2]$. Тогда ее можно записать в виде

$$f''(x) = \left[f(x_2) - 2 \cdot f(x_1) + f(x_0)\right] \cdot \frac{1}{h^2} + R_2(x) \tag{24}$$

По формуле Тейлора

$$f(x_2) = f(x_1) + h \cdot f'(x_1) + \frac{h^2}{2} \cdot f''(\xi_1), \quad \xi_1 \in [x_1, x_2]$$

$$f(x_1) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot h + f''(x_0) \cdot \frac{h^2}{2} + f'''(\xi) \cdot \frac{h^3}{3!}, \ \xi_2 \in [x_0, x_1]$$

Подставляя эти выражения, получаем

$$R_2(x) = f''(x) - \frac{1}{2} \cdot \left[f''(\xi_1) + f''(\xi_2)\right] = \frac{1}{2} \cdot (x - \xi_1) \cdot f'''(\xi_3) + \frac{1}{2} \cdot (x - \xi_2) \cdot f(\xi_4)$$

Таким образом, если функция $f(x)$ имеет ограниченную производную третьего порядка, то погрешность формулы (24) для произвольной точки x оценивается следующим образом:

$$\left|R_2(x)\right| \le h \cdot M_3 \tag{25}$$

где $M_3 = \sup\left|f'''(x)\right|$.
Если $x = x_1$, то используя для значений $f(x_2)$ и $f(x_0)$ формулу Тейлора, заканчивающуюся членом с производной 4 - го порядка, получаем для погрешности выражение

$$R_2(x_1) = \frac{h^2}{12} \cdot f^{(4)}(x_1) + \frac{h^4}{6!} \cdot \left[f^{(6)}(\xi_1) + f^{(6)}(\xi_2) \right].$$

Таким образом, если функция имеет ограниченную производную 6-го порядка, то

$$R_2(x_1) = \psi_2(x) \cdot h^2 + O\left(h^4\right) \qquad (26)$$

3.4.3. Оценка погрешности по методу Рунге.

Погрешность приближенного решения во многих задачах, когда одним из определяющих параметров алгоритма является положительная величина h - шаг сетки, можно записать в виде:

$$R(x,h) = \psi(x) \cdot h^p + o(h^p) \qquad (27)$$

В частности, в таком виде записываются формулы (23) и (26) для погрешностей приближенного дифференцирования со значениями $p=1$ и $p=2$.
На сетке с шагом $r \cdot h$ при конечном r имеем:

$$R(x, r \cdot h) = \psi(x) \cdot (r \cdot h)^p + o((r \cdot h)^p) \qquad (28)$$

$o(h^p) = o\left((r \cdot h)^p\right)$

Пренебрегая в формулах (27) и (28) величинами $o(h^p)$ (т.е. рассматривая только старший член погрешности), из (1) и (2) находим:

$$\psi(x) = \frac{R(x, r \cdot h) - R(x,h)}{(r \cdot h)^p - h^p} \qquad (29)$$

Так как $R(x,h) = u(x) - y(x,h)$, где $u(x)$ - точное значение искомой величины, а $y(x,h)$ ее приближение, полученное на сетке с шагом h, то из (29) получаем

$$\psi(x) = \frac{y(x,h) - y(x,r,h)}{(r \cdot h)^p - h^p} \qquad (30)$$

а подставив это в (27), получаем приближенную формулу для погрешности, которая называется первой формулой Рунге:

$$\left|R(x,h)\right| \approx \frac{\left|y(x,h) - y(x, r \cdot h)\right|}{r^p - 1} \qquad (31)$$

Эта формула дает величину погрешности с точностью до членов порядка $o(h^p)$.
Принципиальное отличие этой формулы от оценок погрешности типа $(n+2)$, $(n+5)$ в том,что формула Рунге использует только полученные приближенные решения и не требует оценок каких-либо величин исходной задачи. Чаще всего на практике отношение шагов сетки $r = 2$.

3.4.4. Уточнение приближенного решения.

Выражение (30) можно использовать для уточнения приближенной величины $y(x,h)$, т.к. добавление к ней $\psi(x)\cdot h^p$ дает новое приближение $\overline{y}(x,h)$, погрешность которого $\overline{R}(x,h)=u(x)-\overline{y}(x,h)=o(h^p)$.

$$\overline{y}(x,h)=y(x,h)+\frac{y(x,h)-y(x,r\cdot h)}{r^p-1}+o(h^p) \qquad (32)$$

Формула (32) называется второй формулой Рунге.

3.5. Сплайн - интерполяция

Рассмотрим решение задачи интерполяции на классе сплайнов - функций, которые широко используются в вопросах численного анализа, в машинной графике и в других областях.

3.5.1. Линейный интерполяционный сплайн

Пусть Δ - разбиение отрезка $[a,b]$.

Δ: $a=x_0<x_1<\ldots<x_n=b$, $y_i=f(x_i)$ - заданные значения.

Сплайном первой степени называется :непрерывная на отрезке $[a,b]$, линейная на каждом частичном промужутке $[x_i,x_{i+1}]$ функция. Его обозначенеие $S_1(x)$.

Интерполяционным для данной функции $f(x)$ называется сплайн, удовлетворяющий условиям $S_1(x_i)=y_i$, $i=0,\ldots,m$.

График линейного интерполяционного сплайна $S_1(x)$ - это ломаная, проходящая через заданные точки.

Пусть $x\in[x_i,x_{i+1}]$, $h_i=x_{i+1}-x_i$. Выражение для сплайна $S_1(x)$ на этом промежутке:

$$S_1(x)=y_i\cdot\frac{x_{i+1}-x}{h_i}+y_{i+1}\cdot\frac{x-x_i}{h_i}$$

Остаточный член : $R_1(x)=S_1(x)-f(x)$.

Оценка остаточного члена зависит от дифференцируемых свойств функции $f(x)$.

Пусть $f(x)\in C[a,b]$. Обозначение

$\omega_i(x)=\max\limits_{x',x''\in[x_i,x_{i+1}]}\left|y(x'')-y(x')\right|$ - колебание функции на $[x_i,x_{i+1}]$

$\omega(f)=\max\limits_{i}\omega_i(f)$

Справедлива следующая лемма:

Лемма (вариант теоремы о среднем):

Пусть $f(x)\in C[a,b]$. Если величины α,β одинакового знака, то существует $\xi\in[a,b]$ такое, что

$\alpha\cdot y(a)+\beta\cdot y(b)=(\alpha+\beta)\cdot y(\xi)$

С помощью этой леммы доказывается следующая теорема об оценке остаточного члена линейного интерполяциоонного сплайна.

Теорема

Если $y\in C[a,b]$, то $\|R_1\|\le\omega(f)$.

Действительно,

$R_1(x) - S_1(x) - f(x) = (1-t)\cdot y_i + t\cdot y_{i+1} - f(x)$, где $t = \dfrac{x - x_i}{h_i}$.

По приведенной выше лемме
$R_1(x) = f(\xi) - f(x)$, где $\xi \in [x_i, x_{i+1}]$
$|R_1| \le \omega_i(f) \le \omega(f)$
С улучшением гладкости функции $f(x)$ оценка погрешности ее интерполяции линейными сплайнами также улучшается. А именно,
если $y \in C^1[a,b]$, то $\|R_1\| \le \dfrac{\overline{h}}{2}\cdot\|f'(x)\|$, где $\overline{h} = \max\limits_i h_i$

Для $f(x) \in C^2[a,b]$ можно получить оценку $\|R_1\| \le \dfrac{\overline{h}^2}{8}\cdot\|f''(x)\|$.

Дальнейшее увеличение гладкости функции $f(x)$ не дает повышения порядка аппроксимаци. Происходит насыщение алгоритма.
Сходимость.
Пусть на $[a,b]$ задана последовательность сеток $\Delta_k : a = x_{k,0} < x_{k,1} < \ldots < x_{k,n} = b$, $k = 1,2,\ldots$, которая удовлетворяют условию $\overline{h_k} \to 0$ при $k \to \infty$. Для Δ_k строится интерполяционный сплайн $S_{1,\Delta_k}(x)$. Интерполяционный процесс сходится, если $\left\|S_{1,\Delta_k}(x) - f(x)\right\| \to 0$ при $k \to \infty$ для любой функции $f(x)$ из некоторого класса . Отсюда вытекает возможность интерполяции с наперед заданной точностью:

$$\forall\, \varepsilon \quad \exists \Delta_k : \quad \left\|S_{1,\Delta_k} - y\right\| \le \varepsilon.$$

Преимущество по сравнению с интерполяционными многочленами: из оценки погрешности следует сходимость.
Пусть $f(x) \in C[a,b]$. По доказанной теореме $\|R_1\| \le \omega(f)$.
По определению $\omega(f) \to 0$ при $\overline{h} \to 0$, поэтому процесс интерполяции линейными сплайнами сходится на множестве непрерывных функций по произвольной последовательности сеток Δ_k.

Если $f(x) \in C^l[a,b]$, $l = 1,2$, то $\|R_l\| \le \dfrac{\overline{h}^l}{2}\cdot \ge \left\|f^{(l)}(x)\right\| = O\left(\overline{h}^l\right)$. Сходимость порядка $O\left(\overline{h}^l\right)$.

3.5.2. Кубический интерполяционный сплайн

Пусть на $[a,b]$ задана сетка $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$, в узлах которой известны значения функции $y_i = f(x_i)$. Сплайн третьей степени $S_3(x)$, интерполирующий заданную функцию $f(x)$, определяется как функция, удовлетворяющая условиям:
1) $S_3(x) \in C^2[a,b]$
2) Для любого частичного промежутка $[x_i, x_{i+1}]$ $S_3(x)$ - многочлен третьей степени
3) $S_3(x_i) = y_i \;\; i = 0,\ldots,n$
Для задания $S_3(x)$ надо определить 4 коэффициента для каждого промежутка $[x_i, x_{i+1}]$, т.е. $4\cdot n$ параметров.

Условия 1) требуют чтобы во внутренних узлах сплайн и его производные до 2-го порядка были непрерывны.

$S^{(r)}(x_i - 0) = S^{(r)}(x_i + 0) \quad i = 1, \ldots, n-1 \quad r = 0,1,2$

Это дает $3n-3$ условия для определения параметров, еще $n+1$ условие содержится в 3).

Итого имеем $4n-2$ условия. Еще 2 условия, необходимые для однозначного определения сплайна, обычно задаются в виде граничных условий, т.е. условий в точках a и b.

Возьмем в качестве граничных условия

4) $S''(a) = S''(b) = 0$

Для построения кубического интерполяционного сплайна могут быть использованы различные подходы. Проведем построение сплайна, исходя из условий 1) - 4). Из 1) и 2) следует, что $S''(x)$ непрерывная функция, линейная на каждом $[x_i, x_{i+1}]$ т.е. $S''(x)$ - линейный сплайн.

Обозначив $S''(x_i) = M_i$, получаем

$$S''(x) = M_i \cdot \frac{x_{i+1} - x}{h_i} + M_{i+1} \cdot \frac{x - x_i}{h_i} \qquad (33)$$

для $x \in [x_i, x_{i+1}]$.

Интегрируя (5), получаем

$$S'(x) = -M_i \cdot \frac{(x_{i+1} - x)^2}{2 \cdot h_i} + M_{i+1} \cdot \frac{(x - x_i)^2}{2 \cdot h_i} + A \qquad (34)$$

$$S(x) = M_i \cdot \frac{(x_{i+1} - x)^3}{6 \cdot h_i} + M_{i+1} \cdot \frac{(x - x_i)^3}{6 \cdot h_i} + A \cdot x + B \qquad (35)$$

A и B - постоянные интегрирования.

Условия 3) дают:

$$\begin{aligned} S(x_i) &= \frac{M_i \cdot h_i^3}{6} + A \cdot x_i + B = y_i \\ S(x_{i+1}) &= \frac{M_{i+1} \cdot h_i^2}{6} + A \cdot x_{i+1} + B = y_{i+1} \end{aligned} \qquad (36)$$

Из (36) получаем:

$$A = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} + \frac{M_i - M_{i+1}}{6 \cdot h_i} \cdot h_i$$

$$B = y_i - \frac{M_i \cdot h_i^2}{6} - \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} \cdot x_i \frac{M_{i+1} - M_i}{6} \cdot h_i \cdot x_i$$

Подставляя A и B в (7), получаем:

$$S(x) = M_i \cdot \frac{(x_{i+1} - x)^3}{6 \cdot h_i} + M_{i+1} \cdot \frac{(x - x_i)^3}{6 \cdot h_i} + \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} \cdot (x - x_i) - \\ - \frac{-M_i + M_{i+1}}{6 \cdot h_i} \cdot h_i^2 \cdot (x - x_i) + y_i - \frac{M_i \cdot h_i^2}{6} \tag{37}$$

После преобразования

$$(y_{i+1} - y_i) \cdot \frac{x - x_i}{h_i} - \frac{M_{i+1} - M_i}{6} \cdot h^2 \cdot \frac{x - x_i}{h_i} = (y_{i+1} - \frac{M_{i+1}}{6} \cdot h_i^2) \cdot \frac{x - x_i}{h_i} +$$

$$+(y_i - \frac{M_i}{6} \cdot h_i^2) \cdot \frac{x_{i+1} - x}{h_i} - (y_i - \frac{M_i}{6} \cdot h_i^2)$$

из (37) получаем

$$S(x) = M_i \cdot \frac{(x_{i+1} - x)^3}{6 \cdot h_i} + M_{i+1} \cdot \frac{(x - x_i)^3}{6 \cdot h_i} + (y_{i+1} - \frac{M_{i+1}}{6} \cdot h_i^2) \cdot \frac{x - x_i}{h_i} + \\ +(y_i - \frac{M_i}{6} \cdot h_i^2) \cdot \frac{x_{i+1} - x}{h_i} \tag{38}$$

Из (34) получаем

$$S'(x) = -M_i \cdot \frac{(x_{i+1} - x)^2}{2 \cdot h_i} + M_{i+1} \cdot \frac{(x - x_i)^2}{2 \cdot h_i} + \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{M_{i+1} - M_i}{6} \cdot h_i \tag{39}$$

Из (39) находим односторонние пределы производной для узла x_i, $i = 1, \ldots, n-1$

$$S'(x_i - 0) = M_{i-1} \cdot \frac{h_{i-1}}{6} + M_i \cdot \frac{h_{i-1}}{3} + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} \tag{40}$$

$$S'(x_i + 0) = -M_i \cdot \frac{h_i}{3} - M_{i+1} \cdot \frac{h_i}{6} + \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} \tag{41}$$

Подставляя (40) и (41) в условие непрерывности $S'(x)$ в узле x_i получаем :

$$\frac{h_{i-1}}{6} \cdot M_{i-1} + \frac{h_{i-1} + h_i}{3} \cdot M_i + \frac{h_i}{6} \cdot M_{i+1} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} \tag{42}$$

$i = 1, 2, \ldots n-1$

Дополняя (42) равенствами из условия 4) : $M_0 = 0, \quad M_n = 0$, получаем систему уравнений относительно M_i вида :

$$A \cdot M = H \cdot F \tag{43}$$

с квадратной матрицей A.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{h_0 + h_1}{3} & \dfrac{h_1}{6} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{h_1}{6} & \dfrac{h_1 + h_2}{3} & \dfrac{h_2}{6} & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{h_2}{6} & \dfrac{h_2 + h_3}{3} & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \dfrac{h_{n-2} + h_{n-1}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и квадратной матрицей H

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ \dfrac{1}{h_0} & -\left(\dfrac{1}{h_0} + \dfrac{1}{h_1}\right) & \dfrac{1}{h_1} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{h_1} & -\left(\dfrac{1}{h_1} + \dfrac{1}{h_2}\right) & \dfrac{1}{h_2} & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & -\left(\dfrac{1}{h_{n-2}} + \dfrac{1}{h_{n-1}}\right) & \dfrac{1}{h_{n-1}} \\ & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Координатами вектора F являются значения $y_0, y_1, \ldots, y_n$.

Для матрицы A ненулевые элементы расположены на главной диагонали и двух соседних с ней. Такие матрицы называются трехдиагональными. Для A выполнено условие диагонального преобладания $|a_{ii}| > \sum\limits_{j=1, j \neq i}^{n} |a_{ij}|$.

Матрица с диагональным преобладанием невырождена. Следовательно, система (42) однозначно разрешима, т.е. существует единственный кубический интерполяционный сплайн. Кроме условий 4) - условий "свободного провисания" интерполяционной кривой в точках a и b, могут быть известны наклоны интерполяционной кривой в граничных точках. Тогда условия на границах имеют вид:

$$S'(a) = y_0{}', \quad S'(a) = y_n{}' \tag{44}$$

Могут быть использованы и другие варианты.

Вид граничных условий меняет некоторые элементы матрицы A, но в любом случае она остается матрицей с диагональным преобладанием.

Решение системы (43) с трехдиагональной матрицей A может быть найдено посредством специального варианта метода последовательного исключения неизвестных, который называется методом прогонки.

Относительно оценки погрешности и сходимости интерполяций кубическими сплайнами имеют место следующие результаты:

если $f(x) \in C[a,b]$, то $\|R_3\| \le c \cdot \omega(f)$, где $c = 1 + \dfrac{3}{4} \cdot \beta$, $\beta = \dfrac{\overline{h}}{\underline{h}} = \dfrac{\max h_i}{\min h_i}$,

если $f(x)\in C^r[a,b],\ r=1,2,3,4$, то оценка имеет вид для $\|R_3\|\le c\cdot\overline{h}^r\cdot\omega(f^{(r)})$.
Из этих оценок следует сходимость интерполяционного процесса на последовательности сеток Δ_k.

3.5.3. Метод прогонки.

Метод прогонки - реализация метода Гаусса исключения неизвестных для систем линейных уравнений с трехдиагональными матрицами. При этом в случае матриц с трехдиагональным преобладанием автоматически используется главный элемент, что обеспечивает устойчивость вычислений, т.е. гарантирует от накопления ошибок округления результатов арифметических действий.
Пусть требуется найти решение следующей системы линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} y_0=\chi_1\cdot y_1+\mu_1, \quad i=0 \\ a_i\cdot y_{i-1}-c_i\cdot y_i+b_i\cdot y_{i+1}=-g_i, \quad 1\le i\le n-1 \\ y_n=\chi_2\cdot y_{n-1}+\mu_2, \quad i=n \end{cases} \tag{45}$$

причем $a_i\ne 0,\ \ b_i\ne 0$ для всех $i=1,\dots,n-1$.
Матрица этой системы является трехдиагональной и имеет следующий вид:

$$\begin{bmatrix} 1 & -\chi_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & -c_1 & b_1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & . & . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_i & -c_i & b_i & \dots & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & . & . & . & . & \dots & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-1} & -c_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -\chi_2 & 1 \end{bmatrix}$$

Это квадратная матрица размера $(n+1)\cdot(n+1)$.
Предположим, что имеет место рекуррентное соотношение

$$y_i=\alpha_{i+1}\cdot y_{i+1}+\beta_{i+1} \tag{46}$$

с неопределенными коэффициентами α_{i+1},β_{i+1}.
Из соотношений (46) и соотношений (45) находим:

$$(a_i\cdot\alpha_i-c_i)\cdot y_i+\alpha_i\cdot\beta_i+b_i\cdot y_{i+1}=-g_i$$

Сравнивая получаемое отсюда выражение для y_i с формулами (46), получим рекуррентные формулы для прогоночных коэффициентов:

$$\alpha_{i+1}=\frac{b_i}{c_i-a_i\cdot\alpha_i},\ \ \beta_{i+1}=\frac{g_i+a_i\cdot\beta_i}{c_i-a_i\cdot\alpha_i},\ \ i=1,\dots,n-1.$$

Начальные значения $\alpha_1=\chi_1,\ \ \beta_1=\mu_1$ получим, сравнивая $y_0=\chi_1\cdot y_1+\mu_1$ и (46) при $i=0$.
Для нахождения граничного значения y_n запишем систему уравнений:

$$\begin{cases} y_n=\chi_2\cdot y_{n-1}+\mu_2 \\ y_{n-1}=\alpha_n\cdot y_n+\beta_n \end{cases}$$

Исключая из системы y_{n-1}, получим

$$y_n = \frac{\mu_2 + \chi_2 \cdot \beta_n}{1 - \chi_2 \cdot \alpha_n}.$$

Итак, формально получен следующий алгоритм решения системы (45), который называется методом прогонки.

Сначала осуществляется прямая прогонка, т.е. находятся прогоночные коэффициенты

$$\begin{cases} \alpha_1 = \chi_1, \quad \beta_1 = \mu_1 \\ \alpha_{i+1} = \dfrac{b_i}{c_i - a_i \cdot \alpha_i}, \quad \beta_{i+1} = \dfrac{g_i + a_i \cdot \beta_i}{c_i - a_i \cdot \alpha_i}, \quad i = 1,2,...,n-1 \end{cases} \tag{47}$$

Затем осуществляется обратная прогонка по формулам

$$y_n = \frac{\mu_2 + \chi_2 \cdot \beta_n}{1 - \chi_2 \cdot \alpha_n}, \quad y_i = \alpha_{i+1} \cdot y_{i+1} + \beta_{i+1}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1, 0 \tag{48}$$

3.6. Метод наименьших квадратов

При интерполировании используется условие равенства значений аппроксимирующей функции и данной функции в заданных точках - узлах интерполяции. Это означает, что значения функции в узлах должны быть заданы с высокой степенью точности. На практике часто возникает задача аппроксимации таблично заданной функции, значения которой известны приближенно. В этом случае используются другие способы аппроксимации. Наиболее распространенный из них - метод наименьших квадратов.

3.6.1. Подбор эмпирических формул

При обработке экспериментальных (опытных) данных нужно иметь в виду ошибки этих данных. Эти ошибки делятся на три категории:

- систематичесские
- случайные
- грубые.

Систематические ошибки могут быть вызваны условиями эксперимента, дефектами аппаратуры и т.п. Обычно они дают отклонение в одну сторону от истинного значения измеряемой величины. Эти ошибки можно устранить наладкой аппаратуры или введением соответствующих поправок.

Грубые ошибки явно искажают результаты измерений, они чрезмерно большие и обычно пропадают при повторении опыта. Измерения с такими ошибками отбрасываются и не учитываются при обработке результатов.

Случайные ошибки определяются большим числом факторов, которые не могут быть устранены, либо достаточно точно учтены при измерениях и обработке результатов. Они имеют несистематический характер и дают отклонения в ту и в другую сторону при повторении измерений. С вероятностной точки зрения математическое ожидание случайной ощибки равно нулю. С помощью статистической обработки результатов измерений можно найти закон распределения ошибок измерений, наиболее вероятный диапазон изменения искомой величины (доверительный интервал) и другие параметры. Рассмотрение этих вопросов выходит за рамки данного учебного курса. Здесь

ограничимся определением связи между исходными параметром x и искомой величиной y на основе таблицы значений $y_i = y(x_i)$, $i = 0,1,\ldots,n$.
Задача в том, чтобы найти функцию $f(x)$, значения которой при $x = x_i$ мало отличаются от опытных данных y_i. Такая функция $y = f(x)$ называется эмпирической формулой.
График эмпирической зависимости, вообще говоря, не проходит через заданные точки (x_i, y_i). Это приводит к тому, что экспериментальные данные в некоторой степени сглаживаются, а интерполяционная формула повторила бы все ошибки, которые есть в исходных данных.
Построение эмпирической формулы состоит из двух этапов:
1) подбор общего вида формулы
2) определение наилучших значений содержащихся в формуле параметров.
Иногда общий вид формулы известен из физических или иных соображений. В других случаях вид может быть произвольным, предпочтение отдается наиболее простым формулам, которые могут выбираться из геометрических соображений, после нанесения экспериментальных точек на координатную плоскость и сравнения полученной кривой с графиками известных функций.

Простейшая эмпирическая формула

$$y = k \cdot x + b \tag{49}$$

О применимости этой формулы можно судить по величинам $k_i = \dfrac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$.

Если $k_i \approx const$, то формула применима.
В ряде случаев к линейной зависимости могут быть сведены экспериментальные данные, когда их график в декартовой системе координат не является прямой. Это может быть достигнуто путем введения новых переменных :
$\xi = \varphi(x, y)$, $\eta = \psi(x, y)$, которые выбираются так, чтобы точки (ξ_i, η_i) лежали на прямой. Такое преобразование называется выравниванием данных.

Например, степенная зависимость $y = a \cdot x^b$, логарифмированием преобразуется к виду

$$\ln y = b \cdot \ln x + \ln a \tag{50}$$

Подбор параметров для выбранного типа эмпирической формулы.

Пусть выбрана эмпирическая формула типа

$$y = \varphi(x, a_0, \ldots, a_m) \tag{51}$$

где $a_0, a_1, \ldots a_m$ - неизвестные параметры.

Для выбора параметров можно применить метод средних, а именно условие равенства нулю суммы отклонений $\varepsilon_i = \varphi(x_i, a_0, \ldots, a_m) - y_i$ во всех точках

$$\sum_{i-0}^{n} \varepsilon_i = 0 \tag{52}$$

Имеем одно уравнение $m+1$ неизвестным. Для однозначной разрешимости разбиваем (52) систему, состоящую уравнений. Например,

$$\begin{cases} \varepsilon_0 + \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 0 \\ \varepsilon_3 + \varepsilon_4 + \varepsilon_5 + \varepsilon_6 = 0 \\ \dots \\ \varepsilon_{m-1} + \varepsilon_m = 0 \end{cases} \qquad (53)$$

Так как систему (53) можно составить по-разному, то и получаемые решения (значения параметров a_i) будут различными.

3.6.2. Среднеквадратичные приближения.

Однозначной задача определения параметров $a_0,\dots a_m$ станет, если рассматривать как показатель качества аппроксимации величину

$$\Phi = \sum_{i=0}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=0}^{n} \left[\varphi(x_i, a_0, \dots, a_m) - y_i \right]^2 \qquad (54)$$

и искать a_j, минимизирующие функцию $\Phi = \Phi(a_0, \dots, a_m)$.

Решение задачи о нахождении $a_0,\dots a_m$ в такой постановке называется методом наименьших квадратов.

В теории вероятностей показано, что полученные методом наименьших квадратов параметры наиболее вероятны, если отклонения ε_i подчиняются нормальному закону распределения. Необходимые условия минимума функции $\Phi(a_0,\dots,a_m)$ дают систему уравнений

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a_j} = 0,\ j = 0, \dots, m \qquad (55)$$

Важный частный случай: $\varphi = \sum_{j=0}^{m} a_j \cdot \varphi_j(x)$, где φ_j - линейно независимые функции. Тогда система уравнений (55) будет линейной.

На практике часто используются функции $\varphi_j = x^j$. Тогда

$\varphi = a_0 + a_1 \cdot x + \dots + a_m x^m$ - многочлен степени m.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a_0} = 2 \cdot \sum_{i=0}^{n} (a_0 + \dots + a_m \cdot x^m - y_i)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a_1} = 2 \cdot \sum_{i=0}^{n} (a_0 + \dots + a_m \cdot x^m - y_i) \cdot x_i$$

....

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a_m} = 2 \cdot \sum_{i=0}^{n} (a_0 + \dots + a_m \cdot x^m - y_i) \cdot x_i^m$$

Таким образом, получается система следующего вида:

$$\begin{cases} (n+1)\cdot a_0 + a_1\cdot\sum_{i=0}^{n} x_i + \ldots + a_m\cdot\sum_{i=0}^{n} x_i^m = \sum_{i=0}^{n} y_i \\ a_0\cdot\sum_{i=0}^{n} x_i + a_1\cdot\sum_{i=0}^{n} x_i^2 + \ldots + a_m\cdot\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} = \sum_{i=0}^{n} y_i\cdot x_i \\ \ldots\ldots\ldots \\ a_0\cdot\sum_{i=0}^{n} x_i^m + a_1\cdot\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} + \ldots + a_m\cdot\sum_{i=0}^{n} x_i^{2\cdot m} = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^m \end{cases} \qquad (56)$$

При $m = n$ полученный многочлен совпадает с интерполяционным многочленом Лагранжа.

3.7. Квадратурные формулы.

Постановка задачи численного интегрирования.

Пусть требуется вычислить

$$J = \int_a^b f(x)dx \qquad (57)$$

Если $F(x)$ - первообразная для $f(x)$, то $J = F(b) - F(a)$.
Часто получить выражение для первообразной не удается. Подинтегральная функция может быть задана в табличном виде. В этих случаях подинтегральную функцию заменяют на некоторую аппроксимирующую функцию, интеграл от которой легко вычисляется в элементарных функциях. Для аппроксимации подинтегральной функции часто используют интерполяцию. Во многих случаях формулы для приближенного вычисления интегралов (57) можно записать в виде

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i\cdot f(x_i) + R \qquad (58)$$

Формулы такого вида называются квадратурными.
$x_i \in [a,b]$ - узлы квадратурной формулы.
A_i - коэффициенты.
R - погрешность (остаточный член) квадратурной формулы.

3.7.1. Формула прямоугольников.

Построение.
Простейшая квадратурная формула получается при использовании интерполяционного многочлена нулевой степени.

Фиксируем $x_0 \in [a,b]$ и заменяем подинтегральную функцию $f(x)$ интерполяционным многочленом нулевой степени, который совпадает со значением $f(x_0)$: $f(x) \to f_0(x) = p(x_0)$. Тогда

$$\int_a^b f(x)dx = f(x_0)\cdot(b-a) + R \qquad (59)$$

Частные случаи:

$x_0 = a$ - формула левых прямоугольников
$x_0 = b$ - формула правых прямоугольников
$x_0 = \dfrac{a+b}{2}$ - формула средних прямоугольников.

Оценка погрешности.

Пусть существует $f'(x)$, непрерывная на $[a,b]$.
По формуле Тейлора: $f(x) - f_0(x) = (x - x_0)\cdot f'(\xi)$.
Интегрируя, получаем:

$$R = \int_a^b f(x)dx - f(x_0)\cdot(b-a) = \int_a^b (x - x_0)\cdot f'(\xi)\cdot dx \qquad (60)$$

Обозначим $M_1 = \max|f'(\xi)|$.
Используем вариант теоремы о среднем, который имеет вид:
если $f(x)$ непрерывна и $g(x)$ - интегрируема,
то $\int_a^b g(x)\cdot f(x)dx = f(\xi)\cdot\int_a^b g(x)\cdot dx$, где $a \le \xi \le b$.

Пусть $x_0 = a$. Имеем $R = f'(\xi)\cdot\dfrac{(b-a)^2}{2}$.

$$|R| \le \int_a^b (x-a)\cdot dx = M\cdot\frac{(b-a)^2}{2} \qquad (61)$$

Пусть $x_0 = b$. Имеем $R = -f'(\xi)\cdot\dfrac{(b-a)^2}{2}$ и оценка для $|R|$ будет того же вида (61).
Таким образом, (61) - оценка погрешности формул правых и левых прямоугольников.
Оценим погрешность для формулы средних прямоугольников.

Пусть существует $f''(x)$. По формуле Тейлора имеем:

$$f(x) - f(\frac{a+b}{2}) = (x - \frac{a+b}{2}) \cdot f'(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{2} \cdot (x - \frac{a+b}{2})^2 \cdot f''(\xi).$$

Интегрируя, получаем

$$R = (\int_a^b (x - \frac{a+b}{2}) \cdot dx) \cdot f'(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{2} \cdot \int_a^b (x - \frac{a+b}{2})^2 \cdot f''(\xi) \cdot dx$$

Так как, $\int_a^b (x - \frac{a+b}{2}) \cdot dx = \frac{1}{2} \cdot (x - \frac{a+b}{2})^2 \Big|_a^b = \frac{1}{2} \cdot \left[(\frac{b-a}{2})^2 - (\frac{a-b}{2})^2 \right] = 0$, то

$R = -f''(\tilde{\xi}) \cdot \frac{(b-a)^3}{24}$. Отсюда следует оценка

$$|R| \le \frac{M_2}{6} \cdot \left[x - \frac{a+b}{2} \right]^3 \Bigg|_a^b = M_2 \cdot \frac{(b-a)^3}{24} \qquad (62)$$

Для повышения точности квадратурных формул можно промежуток $[a,b]$ разбить точками $x_k = a + k \cdot h$, $k = 0,1,\ldots,n$, $h = \frac{b-a}{n}$ на частичные промежутки, к каждому из которых применяется формула прямоугольников

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) \cdot dx \approx h \cdot f(\alpha + k \cdot h),\ k = 0,1,\ldots,n-1,\ \alpha \in [x_0, x_1] \qquad (63)$$

Суммируя по k, получаем обобщенную формулу прямоугольников.

$$\int_a^b f(x) \cdot dx \approx h \cdot \sum_{k=0}^{n-1} f(\alpha + k \cdot h) \qquad (64)$$

при $\alpha = a$ - формула левых прямоугольников,
при $\alpha = a + h$ - формула правых прямоугольников,
при $\alpha = a + \frac{h}{2}$ - формула средних прямоугольников.

Оценка остаточного члена для обобщенной формулы получается на основе оценок (61) или (62) соответственно.
При $\alpha = a$, $\alpha = a + h$:

$$|R_n| \le \sum_{k=0}^{n-1} |R(f, \alpha, k)| = M_1 \cdot \frac{b-a}{2} \cdot h \qquad (65)$$

При $\alpha = a + \frac{h}{2}$: $|R_n| \le M_2 \cdot \frac{b-a}{24} \cdot h^2$

Из оценок (65) следует, что выбирая достаточно большоечисло точек разбиения (т.е. делая h достаточно малым) можно получить результат с необходимой точностью.

3.7.2. Формула трапеций.

Построение.

Аппроксимируем подинтегральную функцию интерполяционным многочленом 1-й степени

$$P_1(x) = f(a) + (f(b) - f(a)) \cdot \frac{x-a}{b-a} = f(a) \cdot \frac{b-x}{b-a} + f(b) \cdot \frac{x-a}{b-a}$$

Тогда

$$\int_a^b f(x) \cdot dx = \frac{1}{b-a} \cdot \int_a^b \left[f(a) \cdot (b-x) + f(b) \cdot (x-a) \right] \cdot dx + R = \frac{b-a}{2} \cdot (f(a) + f(b)) + R \qquad (66)$$

Геометрический смысл этой формулы - площадь трапеции, у которой одна из сторон это хорда, соединяющая точки графика $f(x)$, соответствующие $x = a$ и $x = b$.

Оценка погрешности.

Обозначим $d = b - a$. Тогда

$$R(d) = \int_a^{a+d} f(x) \cdot dx - \frac{d}{2} \cdot (f(a) + f(a+d)),\ R(0) = 0.$$

Дифференцируя по d, получаем:

$$R'(d) = f(a+d) - \frac{1}{2} \cdot (f(a) + f(a+d)) - \frac{d}{2} \cdot f'(a+d),\ R'(0) = 0.$$

$$R''(d) = \frac{1}{2} \cdot f(a+d) - \frac{1}{2} f(a+d) - \frac{d}{2} \cdot f''(a+d) = -\frac{d}{2} \cdot f''(a+d)$$

Теперь интегрируя по d, находим:

$$R'(d) = R'(0) - \int_0^d \frac{t}{2} \cdot f(a+t) \cdot dt$$

Используя теорему о среднем получаем: $R'(d) = -\frac{1}{2} \cdot f''(\xi_1) \cdot \frac{d^2}{2}$, где $a \le \xi_1 \le a+d$.

Еще раз интегрируя и применяя теорему о среднем, получаем

$$R(d) = R(0) - \frac{1}{4} \cdot \int_0^d t^2 \cdot f''(\xi_1) \cdot dt = -f''(\xi) \cdot \frac{d^3}{12}$$

Отсюда следует оценка погрешности квадратурной формулы трапеций:

$$|R| \le M_2 \cdot \frac{(b-a)^3}{12} \qquad (67)$$

При разбиении отрезка $[a,b]$ на n промежутков $[x_i, x_{i+1}]$ $(i = 0,\dots,n)$ длины $h = \frac{b-a}{n}$, получаем обобщенную формулу трапеций:

$$\int_a^b f(x) \cdot dx = \frac{h}{2} \cdot \left[f(a) + 2 \cdot f(a+h) + \ldots + 2 \cdot f(a + (n-1) \cdot h) + f(b) \right] + R \qquad (68)$$

Из (67) следует оценка погрешности обобщенной формулы

$$|R| \le M_2 \cdot \frac{h^3}{24} \cdot n = M_2 \cdot \frac{b-a}{12} \cdot h^2 \qquad (69)$$

3.8.3.Формула Симпсона (парабол).

Построение.
Аппроксимируем подинтегральную функцию $f(x)$ интерполяционным многочленом 2 - й степени, совпадающим с $f(x)$ в точках $a, \dfrac{a+b}{2} = c, b$.

$$P_2(x) = \frac{(x-c)\cdot(x-b)}{(a-c)\cdot(a-b)}\cdot f(a) + \frac{(x-a)\cdot(x-b)}{(c-a)\cdot(c-b)}\cdot f(c) + \frac{(x-a)\cdot(x-c)}{(b-a)\cdot(b-c)}\cdot f(b) \qquad (70)$$

Заменяя $\dfrac{x-a}{h} = t$, где $h = \dfrac{b-a}{2}$ и интегрируя (70), получаем

$$\int_a^b P_2(x)\cdot dx = h\cdot\int_0^2 P_2(a+h\cdot t)\cdot dt =$$

$$= h\cdot\left[f(a)\cdot\int_0^2\frac{(t-1)\cdot(t-2)}{2}\cdot dt - f(c)\cdot\int_0^2\frac{t\cdot(t-2)}{1}\cdot dt + f(b)\cdot\int_0^2\frac{t\cdot(t-1)}{2}\cdot dt \right] =$$

$$= h\cdot\left.\left[\frac{1}{2}\cdot f(a)\cdot(\frac{t^3}{3}-\frac{3}{2}\cdot t^2+2) - f(c)\cdot(\frac{t^3}{3}-t^2) + \frac{1}{2}\cdot f(b)\cdot(\frac{t^3}{3}-\frac{t^2}{2})\right]\right|_0^2 =$$

$$= h\cdot\left[\frac{1}{2}\cdot f(a)\cdot(\frac{8}{3}-2) - f(c)\cdot(\frac{8}{3}-4) + \frac{1}{2}\cdot f(b)\cdot(\frac{8}{3}-2)\right] = \frac{h}{3}\cdot\left[f(a)+4\cdot f(c)+f(b)\right]$$

Таким образом, квадратурная формула имеет вид:

$$\int_a^b f(x)\cdot dx = \frac{b-a}{6}\cdot\left[f(a)+4\cdot f(c)+f(b)\right] \qquad (71)$$

Она называется квадратурной формулой Симпсона или формулой парабол (т. к. дуга кривой $f(x)$ заменяется на дугу кривой второго порядка).

Оценка погрешности .
Для получения выражения остаточного члена, которое позволяет установить оценку погрешности, ирпользуется тот же прием последовательного дифференцировния, а затем интегрирования, что применялся в предыдущем случае. Введем обозначение $h = \dfrac{b-a}{2}$.

Последовательно получаем:

$$R(h) = \int_{c-h}^{c+h} f(x)\cdot dx - \frac{h}{3}\cdot\left[f(c-h)+4\cdot f(c)+f(c+h)\right],\ R(0)=0$$

$$R'(h) = f(c+h)+f(c-h)-\frac{1}{3}\cdot\left[f(c-h)+4\cdot f(c)+f(c+h)\right]+\frac{h}{3}\cdot\left[f'(c-h)-f'(c+h)\right] =$$

$$= \frac{2}{3}\cdot\left[f(c+h)+f(c-h)\right]-\frac{4}{3}\cdot f(c)+\frac{h}{3}\cdot\left[f'(c-h)-f'(c+h)\right],\quad R'(0)=0$$

$$R''(h) = \frac{2}{3}\cdot\left[f'(c+h)-f'(c-h)\right]+\frac{1}{3}\cdot\left[f'(c-h)-f'(c+h)\right]+\frac{h}{3}\cdot\left[-f''(c-h)-f''(c+h)\right] =$$

$$= \frac{1}{3}\cdot f'(c+h)-\frac{1}{3}\cdot f'(c-h)-\frac{h}{3}\cdot\left[f''(c-h)-f''(c+h)\right],\quad R''(0)=0$$

$$R'''(h)=\frac{1}{3}\cdot\left[f''(c+h)+f''(c-h)\right]-\frac{1}{3}\cdot\left[f''(c-h)+f''(c+h)\right]-\frac{h}{3}\cdot\left[f'''(c+h)-f'''(c-h)\right]=$$

$$=\frac{h}{3}\cdot\left[f'''(c+h)-f'''(c-h)\right]=\frac{2}{3}\cdot h^2\cdot f^{(4)}(\xi),\quad где\quad \xi\in[c-h,c+h]$$

Теперь интегрируем по h, учитывая что $R^{(k)}(0)=0$, $k=0,1,2,3$ и применяя каждый раз теорему о среднем:

$$R''(h)=-\frac{2}{3}\cdot\int_0^h t^2\cdot f^{(4)}(\xi)\cdot dt=-\frac{2}{3}\cdot f^{(4)}(\xi_1)\cdot\int_0^h t^2\cdot dt=-\frac{2}{9}\cdot h^3\cdot f^{(4)}(\xi_1)$$

$$R'(h)=-\frac{2}{9}\cdot\int_0^h t^3\cdot f^{(4)}(\xi_1)\cdot dt=-\frac{1}{18}\cdot f^{(4)}(\xi_2)\cdot h^4$$

Наконец

$$R(h)=-\frac{1}{18}\cdot\int_0^h t^4\cdot f^{(4)}(\xi_2)\cdot dt=-\frac{1}{90}\cdot f^{(4)}(\xi_3)\cdot h^5 \tag{72}$$

Отсюда, кстати, следует, что $R(h)=0$ для многочленов до 3 - й степени включительно. Из (72) получаем оценку погрешности формулы Симпсона:

$$\left|R\right|\le\frac{(b-a)^5}{2880}\cdot M_4,\quad\text{где}\quad M_4=\max_{[a,b]}\left|f^{(4)}(x)\right| \tag{73}$$

Разбивая промежуток $[a,b]$ на $n=2m$ равных частей точками $x_i=a+i\cdot h$, $h=\dfrac{b-a}{n}$

и применяя формулу (71) к каждому из частичных промежутков $[x_i,x_{i+2}]$ длины $2\cdot h$, $i=0,2,\ldots,2\cdot m$ получаем обобщенную формулу Симпсона:

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

$$+2\cdot f(a+2\cdot(m-1)h)+4\cdot f(a+(2\cdot m-1)\cdot h)+f(b))+R$$

Оценка погрешности этой формулы следует из (72):

$$\left|R\right|\le\frac{(b-a)\cdot h^4}{180}\cdot M_4 \tag{74}$$

3.7.4. Оценка погрешности численного интегрирования.

Оценки погрешности квадратурных формул, полученные в предыдущем разделе, дают представление о влиянии исходных данных задачи (подинтегральной функции, длины промежутка интегрирования) на величину погрешности.

В случае обобщенных квадратурных формул эти оценки содержат параметр h - длину каждого из равных частичных промежутков, на которые разбивается отрезок $[a,b]$. При $h\to 0$ (т.е. когда число частичных промежутков $n\to\infty$) погрешность каждой из этих квадратурых формул стремится к нулю. Причем скорость стремления к нулю (порядок малости относительно h) для разных квадратурных формул у этих оценок разная: от $O(h)$ у обобщенных формул левых (правых) прямоугольников до $O(h^4)$ у оценки погрешности обобщенной формулы Симпсона. Показатель степени h в этих оценках еще называют порядком точности квадратурной формулы. Практически использование оценок (65) , (69), (74) затруднено, а иногда и не возможно из-за наличия в них величин M_1, M_2, M_4 - верхних границ абсолюеных значений соответствующих произыодных подинтегральной функции.

Исходя из формул, выражающих остаточные члены квадратурных формул через значения производных подинтегральных функций, можно получить представление для остаточных членов вида (31), которые позволяют использовать для оценки погрешности интегрирования метод Рунге.

Например, выражение для остаточного члена формулы трапеций имеет вид:

$$R = -\frac{(b-a)^3}{12} \cdot f''(\xi).$$

Для остаточного члена обобщенной формулы трапеций получаем:

$R = \sum_{i=0}^{n-1} R_i = -\frac{h^2}{12} \cdot \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) \cdot h$, где $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$

$\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) \cdot h$ - это интегральная сумма для $\int_a^b f''(t) \cdot dt$, т.е.

$\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) \cdot h = \int_a^b f''(t) \cdot dt + E$, где E - это величина, стремяшаяся к нулю при $h \to 0$ ($n \to \infty$). Таким образом, для погрешности обобщенной формулы трапеций имеем формулу вида:

$$R = \psi \cdot h^2 + o(h^2), \text{ где } \psi = -\frac{1}{12} \cdot \int_a^b f''(t) \cdot dt \qquad (75)$$

Аналогично, для погрешности обобщенной формулы Симпсона выводится формула $R = \psi \cdot h^4 + o(h^4)$, где ψ выражается через интеграл от производной четвертого порядка подинтегральной функции. Тогда первая формула Рунге (31) дае оценку погрешности значения интеграла, вычисленного о обобщенной квадратурной формуле с шагом h (J_h) через это приближение и приближение, вычисленное с шагом $2 \cdot h$ ($J_{2 \cdot h}$):

для формулы трапеций $|R| \approx \frac{1}{3} \cdot |J_h - J_{2 \cdot h}|$,

для формулы Симпсона $|R| \approx \frac{1}{15} \cdot |J_h - J_{2 \cdot h}|$.