1. Numerický výpočet derivace

Taylorovým rozvojem funkce se získá

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \ldots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(\xi_+)h^n \tag{1}$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \ldots + \frac{(-1)^n}{n!}f^{(n)}(\xi_-)h^n \tag{2}$$

Vyjádří-li se z rovnice 1 případně i 2 1. derivace a pak 2. derivace, vyjdou vzorce

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x+h)}{h} - \frac{1}{2}f''(\xi)h$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{1}{6}f'''(\xi)h^2$$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}f^{(4)}(\xi)h^2$$

lze tak odvodit i vzorce pro neekvidistantní intervaly, ovšem konvergují pomaleji.

$$f''(x) = \frac{f(x+h_1)h_2 - 2(h_1+h_2)f(x) + f(x-h_2)h_1}{\frac{1}{2}h_1h_2(h_1+h_2)} - \frac{1}{6}f^{(3)}(\xi)(h_1-h_2)$$

2. Numerický výpočet integrálu

Pokud má funkce spojitou k-tou derivace, pak

$$\sum_{i=1}^{n} f^{(k)}(\xi_i) = nf^{(k)}(\xi) \tag{3}$$

kde $\xi \in \langle \min_i \xi_i, \max_i \xi_i \rangle$

(1) Obdélníková formule

$$\int_{x-\frac{h}{2}}^{x+\frac{h}{2}} f(x)\,\mathrm{d}x = F\left(x+\frac{h}{2}\right) - F\left(x-\frac{h}{2}\right) =$$

$$= F(x) + F'(x)\frac{h}{2} + \ldots - F(x) + F'(x)\frac{h}{2} + \ldots = f(x)h + \frac{1}{24}f''(\xi_x)h^3$$

Rozdělením původního integrálu na n intervalů, aplikací odvozeného vzorce a vzorce 3 vyjde

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = h\sum_{i=1}^{n} f(x_i) + \frac{b-a}{24}h^2 f''(\xi)$$

(2) Lichoběžníková formule

$$\int_x^{x+h} f(x)\,\mathrm{d}x = F(x+h) - F(x) = F(x) + F'(x)h + \frac{1}{2}F''(x)h^2 + \ldots - F(x) =$$

$$= \frac{1}{2}(f(x) + f(x+h))h + \frac{1}{2}f'(x)h^2 + \frac{1}{6}f''(\xi_1)h^3 - \frac{1}{2}\left(f'(x)h^2 + \frac{1}{2}f''(\xi_2)h^3\right) =$$

$$= \frac{1}{2}(f(x) + f(x+h))h - \frac{1}{12}f''(\xi_x)h^3$$

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = h\left[\sum_{i=0}^{n} f(x_i) - \frac{1}{2}(f(x_0)+f(x_n))\right] + \frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi)$$

(3) Simpsonova formule

Napřed odvodíme vzorec pro integraci a potom pro chybu. Funkce f se na malém intervalu aproximuje polynomem 2. řádu $p(x) = ax^2 + bx + c$

$$\begin{aligned} f(x+h) &= ah^2 + bh + c \\ f(x) &= c \\ f(x-h) &= ah^2 - bh + c \end{aligned}$$

sečtením vzorců vyjde

$$\begin{aligned} 2ah^2 &= f(x+h) + f(x-h) - 2f(x) \\ c &= f(x) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_{-h}^{h} f(x)\ \mathrm{d}x \approx \int_{-h}^{h} ax^2 + bx + c &= \frac{h}{3}\left(2ah^2 + 6c\right) = \\ &= \frac{1}{3}\left(f(x+h) + f(x-h) + 4f(x)\right) h \end{aligned}$$

Chyba se určí stejným postupem jako u předchozích vzorců

$$\int_{-h}^{h} f(x)\ \mathrm{d}x = F(x+h) - F(x-h) = 2\left(f(x)h + \frac{1}{6}f''(x)h^3 + \frac{1}{120}f^{(4)}(\xi')h^5\right) =$$

$$= \frac{1}{3}\left(f(x+h) + f(x-h) + 4f(x)\right) h +$$

$$+\left(2f(x) + \frac{2}{6}f''(x)h^2 + \frac{2}{120}f^{(4)}(\xi')h^4 - \frac{1}{3}f(x+h) - \frac{1}{3}f(x-h) - \frac{4}{3}f(x)\right) h$$

První člen představuje hodnotu integrálu a 2. člen chybu. Chybu R upravíme Taylorovým rozvojem $f(x+h)$ a $f(x-h)$

$$R = \left(2f(x) + \frac{1}{3}f''(x)h^2 + \frac{1}{60}f^{(4)}(\xi')h^4 - 2f(x) - \frac{1}{3}f''(x)h^2 - \frac{1}{36}f^{(4)}(\xi'')h^4\right) h =$$

$$= -\frac{1}{90}f^{(4)}(\xi)h^5$$

Rozdělením intervalu na $2n$ dílů a sečtením tedy vyjde

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{h}{3}[f(x_0) &+ 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \ldots + \\ &+ 2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})] - \frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi). \end{aligned}$$