Numerická integrace a derivování

Nechť f je funkce na intervalu $\langle a, b\rangle$, předpokládáme, že je spojitá. Chceme odhadnout integrál $I = \int\limits_a^b f(x)\,dx$ pomocí znalosti f v jistých „uzlových bodech“ $a \le x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{n-1} < x_n \le b$.

Obecný přístup: Zkombinujeme lineárně hodnoty $f(x_i)$, tedy budeme chtít použít $I \sim \sum\limits_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$, kde w_i jsou váhy. Samozřejmě budeme chtít vědět, jak moc se náš odhad liší od skutečné hodnoty, tedy získat nějaký (horní) odhad pro

$$\Big|\int\limits_a^b f(x)\,dx - \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)\Big|.$$

1. Newton-Cotesovy metody, řád metody

Názvem Newton-Cotes se označují metody, které aproximují funkce pomocí polynomů a využívají ekvidistanční rozvržení uzlových bodů (body jsou od sebe stejně vzdáleny). Jsou dva hlavní druhy, zde se budeme zabývat metodami uzavřenými, kdy $x_0 = a$ a $x_n = b$. Pokud se krajní body intervalu nevyužívají, říkáme tomu otevřené metody.

Základem uzavřených Newton-Cotesových metod je volba parametru $n \in I\!N$. Interval $\langle a, b\rangle$ se pak rozdělí na n stejných úseků o velikosti $h = \frac{b-a}{n}$, tedy $x_i = a + hi$ pro $i = 0, \ldots, n$. Číslu h se říká **krok metody** a výrazně vypovídá o kvalitě aproximace.

Obvykle se objevuje v odhadu pro chybu metody ve tvaru $C(b-a)\max|f^{(k)}|h^a$. Vzhledem k tomu, že očekáváme malá h (neboli velká n), tak čím větší a, tím menší chyba. Snažíme se tedy o co největší a, říkáme pak, že dotyčná metoda je **metoda řádu** a.

Odhad lze díky $h = \frac{b-a}{n}$ ekvivalentně přepsat do tvaru $C(b-a)^{a+1}\max|f^{(k)}|\frac{1}{n^a}$. Ten je praktický,pokud spočítáme aproximaci pro nějaké konkrétní n a dokážeme odhadnout chybu E, pak u metody řádu a platí, že zvýšíme-li počet dělení q-krát, tak se chyba zmenší q^a-krát, díky čemuž lze dopředu tipnout, jaké další dělení máme použít, abychom už dostali odhad se žádanou přesností.

Tyto odhady jsou horní, tedy pesimistické předpovědi. V praxi je často chyba výrazně menší (ale nedá se na to spoléhat).

1a. Obdélníková metoda (rectangle rule)

Na každém intervalu $\langle x_{i-1}, x_i\rangle$ nahradíme funkci vhodně zvolenou konstantou, vybranou podle hodnoty f v rámci tohoto intervalu. Protože chceme používat hodnoty funkce v uzlových bodech, máme pro panel nad $\langle x_{i-1}, x_i\rangle$ na výběr ze dvou kandidátů (hodnota v levém či pravém konci). Výsledné obsahy obdélníků pak sečteme a dostáváme pak vzorce

$$I \sim \sum_{i=0}^{n-1} hf(x_i) = h\sum_{i=0}^{n-1} f(a+hi) = R_l(n) \qquad \text{(metoda levých obdélníků)},$$
$$I \sim \sum_{i=1}^{n} hf(x_i) = h\sum_{i=1}^{n} f(a+hi) = R_r(n) \qquad \text{(metoda pravých obdélníků)}.$$

Při praktickém použití jsou rovnocenné. Tvrdíme, že tato metoda je lineárního řádu. Vyjádříme tento fakt několika tvrzeními rozličné síly a přesnosti.

Věta.
Uvažujme funkci f na intervalu $\langle a, b\rangle$, označme $M_1 = \max\limits_{x\in\langle a,b\rangle} |f'(x)|$. Pokud integrál $I = \displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ aproximujeme obdélníkovou metodou, tak máme následující odhady:
(i) $|I - R_l(n)|$ je asymptoticky (pro $h \to 0$) řádu $O(h)$, totéž platí pro $|I - R_r(n)|$.
(ii) $|I - R_l(n)| \le \frac{1}{2}(b-a)M_1 h = \frac{1}{2}(b-a)^2 M_1 \frac{1}{n}$, $\qquad |I - R_r(n)| \le \frac{1}{2}(b-a)M_1 h = \frac{1}{2}(b-a)^2 M_1 \frac{1}{n}$.
(iii) Existuje $\xi \in \langle a, b\rangle$ takové, že $I - R_l(n) = \frac{1}{2}(b-a)f'(\xi)h$,
také existuje $\xi \in \langle a, b\rangle$ takové, že $I - R_r(n) = \frac{1}{2}(b-a)f'(\xi)h$.

1b. Lichoběžníková metoda (trapezoid rule)

Na každém intervalu $\langle x_{i-1}, x_i\rangle$ (panelu) funkci nahradíme úsečkou, jmenovitě spojnicí hodnot na krajích. Její rovnice je

$$l(x) = f(x_{i-1}) + \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}(x - x_{i-1}).$$

Obsah pod takovouto úsečkou je obsahem lichoběžníka, jehož základny jsou právě hodnoty funkce v krajních bodech a výška je délka dotyčného malého intervalu, tedy $A = \frac{1}{2}h(f(x_{i-1}) + f(x_i))$. Dostáváme

$$\begin{aligned} I &\sim \tfrac{1}{2}h(f(x_0) + f(x_1)) + \tfrac{1}{2}h(f(x_1) + f(x_2)) + \cdots + \tfrac{1}{2}h(f(x_{n-1}) + f(x_n)) \\ &= \frac{1}{2}h\Big[\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\Big] = \frac{1}{2}h\Big[f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} 2f(x_i) + f(x_n)\Big] = T(n). \end{aligned}$$

Člověk by čekal, že takováto lomená čára z úseček bude aproximovat funkci f lépe než schodovitá funkce.

Věta.
Uvažujme funkci f na intervalu $\langle a, b\rangle$, označme $M_2 = \max\limits_{x\in\langle a,b\rangle} |f''(x)|$. Pokud integrál $I = \displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ aproximujeme lichoběžníkovou metodou, tak máme následující odhady:
(i) $|I - T(n)|$ je asymptoticky (pro $h \to 0$) řádu $O(h^2)$.
(ii) $|I - T(n)| \le \frac{1}{12}(b - a)M_2 h^2 = \frac{1}{12}(b - a)^3 M_2 \frac{1}{n^2}$.
(iii) Existuje $\xi \in \langle a, b\rangle$ takové, že $I - T(n) = \frac{-1}{12}(b - a)f''(\xi)h^2$.

Je to tedy opravdu metoda druhého řádu, což je oproti obdélníkové výrazný posun. Znamená to mimo jiné, že když zvětšíme počet dělení q-krát, tak se chyba zhruba zmenší q^2-krát.

Naznačíme důkaz.

Základem je odhadnout chybu na jednom panelu, pro zjednodušení přeznačíme body, zajímá nás integrál $\int\limits_c^{c+h} f(x)\,dx$. Nás bude posléze zajímat jeho hodnota při volbě $c = x_{i-1}$ a $y = h$.

Uvažujme jej jako funkci proměnné h, $F(h) = \displaystyle\int_c^{c+h} f(t)\,dt$. Má-li funkce f jistý počet derivací, bude jej mít i funkce F (dokonce o jednu víc), v ideálním případě bude mít F derivace všechny a můžeme počítat Taylorův rozvoj se středem $a = 0$:

$$\begin{aligned} F(h) &= F(0) + F'(0)h + \tfrac{1}{2}F''(0)h^2 + \tfrac{1}{3!}F'''(0)h^3 + \tfrac{1}{4!}F''''(0)h^4 + \tfrac{1}{5!}F'''''(0)h^5 + \cdots \\ &= 0 + f(c)h + \tfrac{1}{2}f'(c)h^2 + \tfrac{1}{3!}f''(c)h^3 + \tfrac{1}{4!}f'''(c)h^4 + \tfrac{1}{5!}f''''(c)h^5 + \cdots = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!}f^{(k-1)}(c)h^k. \end{aligned}$$

Jako alternativní odvození je možné si připomenout, že pro funkci $G(x) = \displaystyle\int_c^x f(t)\,dt$ máme Taylorův rozvoj ve tvaru

$$G(c + h) = G(0) + G'(0)h + \tfrac{1}{2}G''(0)h^2 + \tfrac{1}{3!}G'''(0)h^3 + \tfrac{1}{4!}G''''(0)h^4 + \tfrac{1}{5!}G'''''(0)h^5 + \cdots$$

Každopádně máme rozvoj pro integrál, ještě si přidáme rozvoje pro funkční hodnoty, které jsou k dispozici.

$$\begin{aligned} \int_c^{c+h} f(x)\,dx &= f(c)h + \tfrac{1}{2}f'(c)h^2 + \tfrac{1}{3!}f''(c)h^3 + O(h^4) \\ f(c + h) &= f(c) + f'(c)h + \tfrac{1}{2}f''(c)h^2 + \tfrac{1}{3!}f'''(c)h^3 + O(h^4) \\ f(c) &= f(c) \end{aligned}$$

Nesouhlasí stupně derivací a mocniny, proto poslední dva řádky vynásobíme číslem h.

$$\begin{aligned}\int\limits_c^{c+h} f(x)\,dx &= f(c)h + \tfrac{1}{2}f'(c)h^2 + \tfrac{1}{3!}f''(c)h^3 + O(h^4)\\ f(c+h)h &= f(c)h + f'(c)h^2 + \tfrac{1}{2}f''(c)h^3 + \tfrac{1}{3!}f'''(c)h^4 + O(h^5)\\ f(c)h &= f(c)h\end{aligned}$$

Hledáme lineární kombinaci $Af(c)h + Bf(c+h)h$ tak, aby u ní na pravé straně vznikly stejné první dva členy jako u integrálu. Vede to na dvě rovnice o dvou neznámých s řešením $A = B = \frac{1}{2}$, viz koeficienty u metody lichoběžníků. Odečtením příslušné kombinace posledních dvou řádků od prvního získáme

$$\int\limits_c^{c+h} f(x)\,dx - \tfrac{1}{2}h[f(c) + f(c+h)] = -\tfrac{1}{12}f''(c)h^3 + O(h^4)$$

$$\Longrightarrow \Big|\int\limits_c^{c+h} f(x)\,dx - \tfrac{1}{2}h[f(c) + f(c+h)]\Big| \le \frac{1}{12}M_2h^3 + O(h^4).$$

To je odhad chyby na jednom panelu při lichoběžníkové metodě. Po sečtení všech panelů se vzorec napravo vlastně násobí číslem $n = \frac{b-a}{h}$, čímž sdostáváme odhad chyby obdélníkové metody výrazem $\frac{1}{12}(b-a)M_2h^2 + O(h^3)$.

1c. Simpsonova metoda (Simpson's rule)

Pokud je n sudé, je možné sdružit úseky po dvou a proložit třemi body parabolu. Zde tedy základním panelem bude dvojice po sobě následujících intervalů. Naivně by se dalo čekat, že bude mít lepší šanci vystihnout chování funkce. Vzorec pro tuto parabolu pak lze integrovat, ale je to delší. Je jednodušší odvodit správné hodnoty pomocí porovnávání rozvojů.

Tentokráte budeme chtít použít tři body pro aproximaci integrálu přes panel $\langle c-h, c+h\rangle$, díky čemuž doufáme, že se nám podaří odstranit tři členy z Taylorova rozvoje tohoto integrálu. Když do Taylorova rozvoje pro funkci $F(h)$ dosadíme $-h$, dostaneme rozvoj pro $\displaystyle\int_c^{c-h} f(x)\,dx = -\int_{c-h}^{c} f(x)\,dx$, proto rozdíl $F(h) - F(-h)$ dává rozvoj pro $\displaystyle\int_{c-h}^{c+h} f(x)\,dx$. Máme tak k dispozici následující rozvoje (rozvoje pro funkce jsme rovnou pronásobili číslem h, víme, že se to bude hodit):

$$\begin{aligned}\int\limits_{c-h}^{c+h} f(x)\,dx &= 2f(c)h + \tfrac{2}{3!}f''(c)h^3 + \tfrac{2}{5!}f''''(c)h^5 + \cdots\\ hf(c+h) &= f(c)h + f'(c)h^2 + \tfrac{1}{2}f''(c)h^3 + \tfrac{1}{3!}f'''(c)h^4 + \tfrac{1}{4!}f''''(c)h^5 + \cdots\\ hf(c) &= f(c)h\\ hf(c-h) &= f(c)h - f'(c)h^2 + \tfrac{1}{2}f''(c)h^3 - \tfrac{1}{3!}f'''(c)h^4 + \tfrac{1}{4!}f''''(c)h^5 - \cdots\end{aligned}$$

Hledáme čísla A, B, C tak, aby $Af(c+h) + Bf(c) + Cf(c-h)$ mělo rozvoj, u kterého se co nejvíce důležitých členů shoduje s rozvojem pro integrál v prvním řádku. Protože máme tři proměnné, můžeme si dovolit tři požadavky:

$$\begin{aligned}(A+B+C)f(c)h &= 2f(c)h & & & A+B+C &= 2\\ (A-C)f'(c)h^2 &= 0 & &\Longrightarrow & A-C &= 0\\ (A+C)\tfrac{1}{2}f''(c)h^3 &= \tfrac{2}{3!}f''(c)h^3 & & & A+C &= \tfrac{2}{3}\end{aligned}$$

Vychází $A = C = \frac{1}{3}$, $B = \frac{4}{3}$. Odečtením máme pro jeden panel

$$\int\limits_{c-h}^{c+h} f(x)\,dx - \tfrac{1}{3}h[f(c-h) + 4f(c) + f(c+h)] = -\tfrac{1}{90}f''''(c)h^5 + O(h^7).$$

Tím jsme získali ideální vzorec pro aproximaci na jednom panelu.

Teď jsme v situaci, kdy interval $\langle a, b\rangle$ dělíme na n bodů $x_0 < \cdots < x_n$. Aby šel ten výše provedený trik udělat, musí být n sudé a bereme vždy dva sousedící úseky pro aproximaci. Hodnoty funkce $f(x_2)$, $f(x_4)$ atd. se pak budou potřebovat dvakrát, jednou pro dvojici panelů po levé straně, podruhé pro dvojici po pravé straně. Tím dostáváme následující odhad integrálu.

$$\begin{aligned} I &\sim \tfrac{1}{3}h\big[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\big] \\ &= \frac{1}{3}h\Big[f(x_0) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2k-1}) + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2k}) + f(x_n)\Big] = S(n). \end{aligned}$$

Výše jsme také odvodili odhad pro chybu na jednom panelu, pak stačí sečíst. Zde je třeba si uvědomit, že počet panelů není n, ale $\frac{n}{2}$. Na konci výpočtu opět používáme $\frac{n}{2} = \frac{b-a}{2h}$

$$\begin{aligned} \Big|\int_a^b f(x)\,dx - S(n)\Big| &\le \tfrac{1}{90}h^5 \sum_{i=1}^{n/2} |f''''(x_{2i-1})| + \tfrac{n}{2}O(h^7) \le \tfrac{1}{90}h^5\tfrac{n}{2}\max|f''''| + \tfrac{n}{2}O(h^7) \\ &= \tfrac{1}{180}(b-a)h^4M_4 + O(h^6). \end{aligned}$$

Tím jsme dokázali klíčové tvrzení.

Věta.
Uvažujme funkci f na intervalu $\langle a, b\rangle$, označme $M_4 = \max\limits_{x\in\langle a,b\rangle} |f''''(x)|$. Pokud integrál $I = \displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ aproximujeme Simpsonovou metodou, tak máme následující odhady:
(i) $|I - S(n)|$ je asymptoticky (pro $h \to 0$) řádu $O(h^4)$.
(ii) $|I - S(n)| \le \frac{1}{180}(b-a)M_4h^4 = \frac{1}{180}(b-a)^5M_4\frac{1}{n^4}$.
(iii) Existuje $\xi \in \langle a, b\rangle$ takové, že $I - S(n) = \frac{-1}{180}(b-a)f''''(\xi)h^4$.

Nečekané je, že Simpsonova metoda není řádu tři, ale čtyři. To ze Simpsonovy metody dělá velice mocný nástroj a z metod probíraných zde je tou nejpoužívanější, například ji mají zabudovány některé kalkulačky. Je to bonus za symetrii.

Alternativní odvození.

Když funkce aproximujeme polynomu určitého stupně k, tak se mimo jiné očekává, že při aproximaci polynomu stupně nejvýše k dostaneme právě tento polynom jako odpověď, tedy aproximace je přesná. Pak by tedy měla být přesná i aproximace integrálu.

Konkrétně u Simpsonovy metody hledáme konstanty w_i tak, aby pro polynomy nejvýše druhého stupně platila rovnost integrálu a odhadu. Tím je možné vytvořit rovnice, velice příjemné podoby dostaneme, když Simponovu metodu aplikujeme na interval $\langle -1, 1\rangle$ s uzlovými body $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 1$. Pak tedy chceme, aby pro $\deg(p) \le 2$ platilo

$$\int\limits_{-1}^{1} p(x)\,dx = w_0p(-1) + w_1p(0) + w_2p(1),$$

Použijeme to pro tři jednoduché polynomy:

$$\int_{-1}^{1} 1\,dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 1$$
$$\int_{-1}^{1} x\,dx = w_0 \cdot (-1) + w_1 \cdot 0 + w_2 \cdot 1$$
$$\int_{-1}^{1} x^2\,dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 0 + w_2 \cdot 1$$

neboli

$$\begin{aligned} 2 &= w_0 + w_1 + w_2 \\ 0 &= -w_0 + w_2 \\ \frac{2}{3} &= w_0 + w_2. \end{aligned}$$

Odtud $w_0 = \frac{1}{3}$, $w_1 = \frac{4}{3}$, $w_2 = \frac{1}{3}$, přesně jak jsme odvodili výše.
Je zjevné, že obdobná metoda by fungovala při aproximaci libovolným stupněm polynomu.

Vzhledem o stupeň lepší kvalitě Simpsonovy metody nemá moc smyslu konstruovat aproximaci prokládáním kubických křivek čtveřicemi bodů, jen by to vedlo na složitější vzorce, ale dala zase metodu řádu čtyři. Polynomy vyšších stupňů se také nepožívají, protože při aproximaci pomocí polynomů na ekvidistantních bodech dochází k obdobě Gibbsova jevu, kdy onen aproximující polynom začíná se zvyšujícím se stupněm divoce oscilovat, takže kvalita aproximace nakonec nevzroste tak, jak bychom očekávali. Naše přehlídka Newton-Cotesových metod zde tedy končí.

Poznámka: Všimněte si, že všechny probrané metody mají odhad integrálu ve tvaru $h \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$. Podle toho, jak chytře váhy w_i vybereme, dostáváme více či méně kvalitní odhad integrálu. Je zajímavé (a dá se dokázat), že rozumné volby vah vždy splňují $\sum_{i=0}^{n} w_i = n$. To je dáno tím, že při integrování konstantní funkce $f(x) = 1$ na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ chceme dostat 1.
$\triangle$

1d. Bonus: Simpsonovo 3/8 pravidlo

Thomasu Simpsonovi nestačilo, že vymyslel snad nejpoužívanější schéma, a odvodil pravidlo používající kubickou aproximaci. Tentokráte se již pracuje s panely skládajícími se ze tří polí, tedy používá se čtyř bodů. Chceme nulovou chybu pro polynomy až stupně tři, odtud použitím uzlů $-1, 0, 1, 2$ máme rovnice

$$\int_{-1}^{2} 1\,dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 1 + w_3 \cdot 1$$
$$\int_{-1}^{2} x\,dx = w_0 \cdot (-1) + w_1 \cdot 0 + w_2 \cdot 1 + w_3 \cdot 2$$
$$\int_{-1}^{2} x^2\,dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 0 + w_2 \cdot 1 + w_3 \cdot 4$$

a výsledek $w_0 = \frac{3}{8}$, $w_1 = \frac{9}{8}$, $w_2 = \frac{9}{8}$, $w_3 = \frac{3}{8}$. Dostáváme odhad

$$S_{3/8}(n) = \frac{3}{8}h\Big[f(x_0) + 3\sum_{i=1}^{n/3} f(x_{3i-2}) + 3\sum_{i=1}^{n/3} f(x_{3i-1}) + 2\sum_{i=1}^{n/3} f(x_{3i}) + f(x_n)\Big].$$

2. Romberg integration (Richardson extrapolation)

Richardsonova extrapolace je metoda, jak ze dvou odhadů, u kterých známe velikost chyby, získat odhad lepší kvality.

Předpokládejme tedy, že máme metodu, která odhaduje integrál I v závislosti na počtu dělení n jako I_n, a my pro ni máme odhad chyby ve tvaru ve tvaru $I - I_n \sim C\frac{1}{n^p} + O(1/n^q)$ pro $q > p$. Pak z „rovnic“ pro odhad chyby u I_n a I_{2n} tuto chybu eliminujeme:

$$\begin{aligned} I - I_n &= \frac{C}{n^p} + O(1/n^q) \\ I - I_{2n} &= \frac{C}{2^p n^p} + \frac{1}{2^q} O(1/n^q) \end{aligned} \implies \begin{aligned} \frac{C}{n^p} &= I - I_n + O(1/n^q) \\ \frac{C}{n^p} &= 2^p I - 2^p I_{2n} + O(1/n^q) \end{aligned} \implies I = \frac{2^p I_{2n} - I_n}{2^p - 1} + O(1/n^q).$$

Vidíme, že jsme získali odhad integrálu s chybou řádu h^q. Tomuto se říká Richardsonova extrapolace a lze ji použít i u jiných oblastí než výpočtu integrálu, prakticky všude, kde je rozumný odhad chyby, dochází pak k tomu, že se přechází k další mocnině h odhadu řádu chyby.

Z toho nám vyplývá, že pokud Richardsonovu extrapolaci použijeme na obdélníkovou metodu, tak získáme výsledek s chybou řádu h^2, z lichoběžníkové bychom získali h^3. Zajímavé je, že Simpsonova metoda i 3/8 Simsonova metoda (kubické aproximace) mají obě řád chyby h^4, ale pokud na ně použijeme Richardonovu extrapolaci, tak získáme řád chyby h^6 u Simpsona, ale jen h^5 i té druhé metody.

Známé rovnice lze využít ještě jedním zajímavým způbobem.

$$\begin{aligned} I &= \frac{2^p I_{2n} - I_n}{2^p - 1} + O(1/n^q) = \frac{(2^p - 1)I_{2n} + I_{2n} - I_n}{2^p - 1} + O(1/n^q) = I_{2n} + \frac{I_{2n} - I_n}{2^p - 1} + O(1/n^q) \\ &\implies I - I_{2n} = \frac{I_{2n} - I_n}{2^p - 1} + O(1/n^q). \end{aligned}$$

Pokud tedy u metody s chybou řádu p uděláme aproximace I_n a I_{2n}, pak se výraz $\frac{I_{2n} - I_n}{2^p - 1}$ dá použít jako rozumný odhad chyby pro I_{2n}. K čemu je to dobré? Spočítáme I_n a I_{2n}, zjistíme, že odhad chyby je E, ale požadovaná přesnost je e. Můžeme tipnout, že pokud zvětšíme n v poměru $\sqrt[p]{\frac{E}{e}}$ (viz řád chyby), tak se chyba zmenší v poměru $\frac{e}{E}$ a tedy by to už mohlo stačit.

Toto lze iterovat, například máme-li výsledky $I_n, I_{2n}, I_{4n}, \ldots, I_{2^m n}$, získáme z nich Rombergem výsledky $I^1_{2n}, \ldots, I^1_{2^m n}$, kterých je $m - 1$ a mají řád chyby q, takže vzorcem $I^2_{2N} = \frac{2^{2k} I^1_{2N} - I^1_N}{2^{2k} - 1}$ získáme $m - 2$ odhadů $I^2_{4n}, \ldots, I^2_{2^m n}$, s řádem chyby vyšším než q (u Simpsona takto skáčeme po sudých řádech), proto vzorcem $I^3_{2N} = \frac{2^{2^2 k} I^2_{2N} - I^2_N}{2^{2^2 k} - 1}$ získáme $m - 3$ odhadů $I^3_{8n}, \ldots, I^3_{2^m n}$ s řádem chyby ještě lepším atd., nakonec se můžeme dostat k jedinému odhadu s vysokým řádem chyby. Vzniká tak **Rombergova metoda** výpočtu integrálu.

Dostáváme tak vysokou přesnost, aniž bychom museli počítat funkci ve více bodech, což může být výhoda, pokud je výpočet hodnot funkce náročný.

Je možné nejen intervaly půlit, ale děli na více částí, tedy přejít $I_n \mapsto I_{qn}$. Iterační schéma je pak dáno vzorcem $\frac{q^p I_{qn} - I_n}{q^p - 1}$.

3. Gaussova metoda (Gaussian quadrature)

Rádi integrujeme polynomy, ale zmínili jsme, že u ekvidistančních bodů vede prokládání polynomů vyšších stupňů na velké oscilace. Řešení se nabízí, vzdát se stejnoměrného rozdělení. Máme tedy jiný úkol, pro dané n chceme vymyslet takové rozložení $n + 1$ bodů, aby po proložení polynomem stupně n vycházela co nejlepší aproximace funkce.

Vše je jednodušší, pokud substitucí převedeme integrál na interval $\langle -1, 1\rangle$. Můžeme tedy přesně zformulovat náš problem: Je dáno n, chceme v intervalu $\langle -1, 1\rangle$ najít body $x_0, x_1, \ldots, x_n$ a váhy $c_0, c_1, \ldots, c_n$ tak, aby aproximační vzorec $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \sim \sum c_i f(x_i)$ dával korektní výsledky pro polynomy až po řád $2n+1$.

Máme tedy $2n+2$ požadavků a $2n+2$ konstant ke zvolení, to vypadá optimisticky. Protože integrál i suma napravo jsou lineární vůči integrované funkci, stačí vlastně chtít shodu pro mocniny x^0 až x^{2n+1}, vznikne $2n+2$ rovnic o $2n+2$ neznámých. Zajímavou shodou okolností vycházejí jako x_i přesně kořeny ortogonálních polynomů (Legendreových) pro interval $\langle -1, 1\rangle$. Takže nejde o nic jednoduchého, co by si člověk snadno zapamatoval, jak ukazuje následující tabulka pro malá n.

n	x_i
	w_i
1	0
	2
2	$-\sqrt{\frac{1}{3}},\ \sqrt{\frac{1}{3}}$
	$1,\ 1$
3	$-\sqrt{\frac{3}{5}},\ 0,\ \sqrt{\frac{3}{5}}$
	$\frac{5}{9},\ \frac{8}{9},\ \frac{5}{9}$
4	$-\sqrt{3+2\sqrt{\frac{6}{5}}},\ -\sqrt{3-2\sqrt{\frac{6}{5}}},\ \sqrt{3-2\sqrt{\frac{6}{5}}},\ \sqrt{3+2\sqrt{\frac{6}{5}}}$
	$\frac{18-\sqrt{30}}{36},\ \frac{18+\sqrt{30}}{36},\ \frac{18+\sqrt{30}}{36},\ \frac{18-\sqrt{30}}{36}$
5	$-\frac{1}{3}\sqrt{5+2\sqrt{\frac{10}{7}}},\ -\frac{1}{3}\sqrt{5-2\sqrt{\frac{10}{7}}},\ 0,\ \frac{1}{3}\sqrt{5-2\sqrt{\frac{10}{7}}},\ \frac{1}{3}\sqrt{5+2\sqrt{\frac{10}{7}}}$
	$\frac{322-13\sqrt{70}}{900},\ \frac{322+13\sqrt{70}}{900},\ \frac{128}{225},\ \frac{322+13\sqrt{70}}{900},\ \frac{322-13\sqrt{70}}{900}$

Výhoda tohoto přístupu: Dává přesnější výsledky než Newton-Cotes se stejným počtem bodů u hladkých funkcí. Lze adaptovat na funkce s nespojitostmi.

Nevýhody: Obtížnější odhad chyby, nelze vylepšovat známé výsledky Rombergem. Složitější vzorce, což nevadí u počítačů, ale pro rychlé orientační výpočty to není to pravé.

4. Numerický odhad derivace

Pokud máme dánu funkci jen tabulkou hodnot (například jako výstup z numerického výpočtu), pak se k její derivaci jistě nedostaneme běžným způsobem. Nezbývá než ji odhadnout.

Podíváme-li se na Taylorův rozvoj

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + \tfrac{1}{2}f''(a)h^2 + \cdots,$$

hned vidíme, že $hf'(a) = f(a+h) - f(a) + O(h^2)$. Odtud snadno odvodíme, že

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} + O(h).$$

Podobně pomocí rozvoje pro $f(a-h)$ odvodíme, že $f'(a) = \frac{f(a)-f(a-h)}{h} + O(h)$. Když tyto dva rozvoje odečteme, tak dostáváme $f'(a) = \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} + O(h^2)$. Vidíme, že symetrická diference je tedy výrazně věrnější.

Pokud Taylorovy rozvoje pro $f(a+h)$ a $f(a-h)$ sečteme, dostaneme

$$f''(a) = \frac{f(a+h) + f(a-h) - 2f(a)}{h^2} + O(h^2).$$

Téměř jsme tak dokázali klíčové tvrzení.

Fakt.
Uvažujeme funkci f, která je třikrát spojitě diferencovatelná na nějakém ε-okolí U bodu a, nechť $h > 0$ splňuje $h < \varepsilon$. Pak platí následující aproximační vzorce pro $h \to 0$:

$$\begin{aligned}
f'(a) &= \frac{f(a+h) - f(a)}{h} + O(h), \qquad &&\text{dopředná diference}\\
f'(a) &= \frac{f(a) - f(a-h)}{h} + O(h), \qquad &&\text{zpětná diference}\\
f'(a) &= \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} + O(h^2), \qquad &&\text{symetrická diference}\\
f''(a) &= \frac{f(a+h) + f(a-h) - 2f(a)}{h^2} + O(h^2).
\end{aligned}$$

Takto se dá pokračovat, vylezou z toho obecné vzorce:

$$\begin{aligned}
f^{(k)}(a) &= \frac{1}{h^k}\sum_{i=1}^{k}(-1)^i\binom{k}{i}f(a+(k-i)h) + O(h) \qquad &&\text{(dopředná diference)},\\
f^{(k)}(a) &= \frac{1}{h^k}\sum_{i=1}^{k}(-1)^i\binom{k}{i}f(a-ih) + O(h) \qquad &&\text{(zpětná diference)},\\
f^{(k)}(a) &= \frac{1}{(2h)^k}\sum_{i=1}^{k}(-1)^i\binom{k}{i}f(a+(k-2i)h) + O(h^2) \qquad &&\text{(symetrická diference)}.
\end{aligned}$$

Vzorce uvedené výše nejsou jediné možné, ají se odvozovat vzorce s chybou libovolného řádu či pro speciální situace.

Příklad:
Pracujeme s funkcí, kterou známe v bodech $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, přičemž jde o ekvidistanční dělení s krokem velikosti h. Ve vnitřních bodech intervalu odhadujeme derivaci symetricou diferencí s chybou řádu h^2, rádi bychom získali stejně kvalitní odhad pro bod a.
Na to potřebujeme tři vstupní data, nabízejí se tyto rozvoje:

$$\begin{aligned}
f(a+2h) &= f(a) + 2f'(a)h + 2f''(a)h^2 + \tfrac{4}{3}f'''(a)h^3 + \tfrac{2}{3}f''''(a)h^4 + O(h^5)\\
f(a+h) &= f(a) + f'(a)h + \tfrac{1}{2}f''(a)h^2 + \tfrac{1}{6}f'''(a)h^3 + \tfrac{1}{24}f''''(a)h^4 + O(h^5)\\
f(a) &= f(a)
\end{aligned}$$

Když uvažujeme lineární kombinaci $Af(a+2h) + Bf(a+h) + Cf(a)$, tak na pravé straně u jednotlivých mocnin h máme následující výrazy:

$$\begin{aligned}
&[A+B+C]f(a),\\
&[2A+B]f'(a)h,\\
&\left[2A+\tfrac{1}{2}B\right]f''(a)h^2,\\
&\left[\tfrac{4}{3}A+\tfrac{1}{6}B\right]f'''(a)h^3.
\end{aligned}$$

Máme k dispozici tři konstanty, můžeme tedy chtít tři věci. Určitě budeme chtít, aby se na pravé straně objevila hledaná derivace, pokud možno v jednoduchém tvaru. Můžeme tedy chtít například toto: $[2A+B]f'(a)h = f'(a)h$. Jistě také budeme potřebovat vynulovat všechny členy s nižší mocninou u h, takový je tam jeden, tedy $[A+B+C]f(a) = 0$. Ještě máme jednu podmínku k dispozici, tak vynulujeme i mocninu h bezprostředně po té, která nás zajímá, abychom snížili výslednou chybu, tedy $\left[2A + \frac{1}{2}B\right] f''(a)h^2 = 0$. Dostáváme soustavu, kterou hravě vyřešíme:

$$\begin{aligned} A + B + C &= 0 \\ 2A + B &= 1 \implies A = -\tfrac{1}{2},\ B = 2,\ C = -\tfrac{3}{2}. \\ 2A + \tfrac{1}{2}B &= 0 \end{aligned}$$

Takže

$$\begin{aligned} -\tfrac{1}{2}f(a+2h) + 2f(a+h) - \tfrac{3}{2}f(a) = f'(a)h - \tfrac{1}{3}f'''(a)h^3 + O(h^4) = f'(a)h + O(h^3) \implies \\ \implies f'(a) = \frac{4f(a+h) - f(a+2h) - 3f(a)}{2h} + O(h^2). \end{aligned}$$

Máme tedy odhad pro $f'(a)$, který nepoužívá čísla menší než a. Obdobně dokážeme odvodit odhad pro $f'(b)$ využívající hodnot $f(b-2h)$, $f(b-h)$ a $f(b)$.
△