3. Формули чисельного диференціювання. Як було зазначено вище, для чисельного диференціювання функції треба спочатку її наблизити одним з інтерполяційних многочленів.

Чисельне диференціювання на основі інтерполяційної формули Лагранжа. Вважаємо, що на відрізку $[a, b]$ функція $f(x)$ задана таблицею значень у рівновіддалених вузлах інтерполювання, тобто маємо $x_{i+1} - x_i = h$, $i = \overline{1, n-1}$. У цьому випадку загальний вигляд інтерполяційного многочлена Лагранжа можна спростити. Введемо нову змінну t за формулою $t = \dfrac{x - x_0}{h}$. Тоді $x - x_i = x - x_0 - ih = h(t - i)$, $i = \overline{1, n}$ і $x_i - x_j = x_i - x_0 - jh = h(i - j)$, $i, j = \overline{1, n}$, $i \neq j$.

Після підстановки многочлен набере вигляду

$$L_n(x) = L_n(x_0 + th) = \sum_{i=0}^{n} \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} y_i \qquad (4)$$

Остання рівність є інтерполяційною формулою Лагранжа для рівновіддалених вузлів.

Далі вважаємо, що $f'(x) \approx L'_n(x)$. Продиференціюємо рівність (4) по x, не забуваючи, що після заміни в многочлені Лагранжа x є функцією від t. Оскільки $x = x_0 + th$, то $\dfrac{dx}{dt} = h$. Тому після диференціювання (див., наприклад, [3]) отримаємо

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} \sum_{i=0}^{n} \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \frac{d}{dt} \left[\frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} \right] \cdot y_i \qquad (5)$$

Остання наближена рівність є формулою чисельного диференціювання на основі інтерполяційної формули Лагранжа у випадку рівновіддалених вузлів.

Розглянемо частковий випадок формули (5). Нехай функція задана трьома табличними значеннями ($n = 2$). Тоді

$$f'(x) \approx L'_n(x) = \frac{1}{h} \left[\frac{1}{2}(2t-3)y_0 - (2t-2)y_1 + \frac{1}{2}(2t-1)y_2 \right]. \qquad (6)$$

Зокрема, якщо похідні знаходимо у вузлах інтерполювання, то отримаємо наступні вирази:

$$f'(x_0) = y'_0 \approx \frac{1}{2h}(-3y_0 + 4y_1 - y_2)\,, \qquad f'(x_1) = y'_1 \approx \frac{1}{2h}(-y_0 + y_2)\,,$$
$$f'(x_2) = y'_2 \approx \frac{1}{2h}(y_0 - 4y_1 + 3y_2)\,. \tag{7}$$

Приклад. Знайти наближене значення похідної функції в точці $x = 4$. Функція задана таблично $x_0 = 2$, $y_0 = 4$, $x_1 = 3$, $y_1 = -2$, $x_2 = 4$, $y_2 = 6$.

В нашому випадку $h = 1$. Скористаємося формулою (6)

$$f'(x) \approx \frac{4}{2}(2t - 3) + 2(2t - 2) + \frac{6}{2}(2t - 1) = 14t - 13.$$

Далі, $t = \dfrac{x - x_0}{h} = \dfrac{4 - 2}{1} = 2$, тому $f'(4) \approx 14 \cdot 2 - 13 = 15$.

Зауважимо, що для знаходження похідної можна було б скористатися третьою з формул (7), оскільки точка $x = 4$ – один з вузлів інтерполювання.

Чисельне диференціювання на основі інтерполяційних формул Ньютона. Запишемо для функції $f(x)$, що задана своїми значеннями в рівновіддалених вузлах, перший інтерполяційний многочлен Ньютона

$$f(x) \approx y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \cdots + \frac{t(t-1)\ldots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0,$$

де $t = \dfrac{x - x_0}{h}$, $h = x_{i+1} - x_i$.

Перепишемо цей поліном, відкривши дужки в чисельнику кожного доданку

$$f(x) \approx y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t^2 - t}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{t^3 - 3t^2 + 2t}{6}\Delta^3 y_0 +$$
$$\frac{t^4 - 6t^3 + 11t^2 - 6t}{24}\Delta^4 y_0 + \ldots$$

Зауважимо, що $\dfrac{df(x)}{dx} = \dfrac{df(x)}{dt} \cdot \dfrac{dt}{dx} = \dfrac{1}{h} \cdot \dfrac{df(x)}{dt}$. Продиференціюємо останню рівність по x двічі

$$f'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 + \frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3t^2-6t+2}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{2t^3-9t^2+11t-3}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots\right)$$

і

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 + (t-1)\Delta^3 y_0 + \frac{6t^2-18t+11}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots\right).$$

Аналогічно можна обчислити похідні вищих порядків.

Для того, щоб отримати значення похідних в точці, що лежить в кінці таблиці, треба скористатися другою інтерполяційною формулою Ньютона. Застосовуючи той же прийом, що і для випадку першої інтерполяційної формули, отримаємо

$$f'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_{n-1} + \frac{2t+1}{2}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{3t^2+6t+2}{6}\Delta^3 y_{n-3} + \frac{2t^3+9t^2+11t+3}{12}\Delta^4 y_{n-4} + \ldots\right)$$

і

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_{n-2} + (t+1)\Delta^3 y_{n-3} + \frac{6t^2+18t+11}{12}\Delta^4 y_{n-4} + \ldots\right).$$

Формули чисельного диференціювання значно спрощуються, якщо значення похідних обчислюється у вузлах інтерполювання. Наприклад, в точці $x = x_0$ (для неї $t = 0$) отримаємо

$$f'(x) = y'_0 \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \ldots\right) \tag{8}$$

і

$$f''(x) = y''_0 \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12}\Delta^4 y_0 - \ldots\right). \tag{9}$$

Приклад. Нехай функція задана таблично. Потрібно знайти похідні $f'(0{,}01)$ і $f''(0{,}01)$.

Складемо таблицю скінчених різниць

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$
0,01	1,519	4,512	2,854	-0,221
0,02	6,031	7,366	2,633	
0,03	13,397	9,999		
0,04	23,396			

У нашому випадку $h = 0{,}01$. Скориставшись формулами (8) і (9) отримаємо

$$f'(0{,}01) \approx \frac{1}{0{,}01}\left(4{,}512 - \frac{2{,}854}{2} - \frac{0{,}221}{3}\right) = 301{,}13334\,,$$

$$f''(0{,}01) \approx \frac{1}{(0{,}01)^2}\,(2{,}854 + 0{,}221) = 30750\,.$$