Мы можем не сомневаться в том, что получили правильную формулу. Выражение в правой части есть $f_0^2/h^2 = \Delta^2 f_{-1}/h^2$, и, согласно (10.4), оно равно значению $f''(\xi)$. У многочлена второй степени вторая производная постоянна, поэтому $f_0^2/h^2 = f''(\xi) \equiv f''(x)$ при любом x, в частности $f_0^2/h^2 = f''(0)$.

Построенная формула оказывается точной для любого многочлена третьей степени. Если подставим в левую и правую части (3) функцию $f(x) = x^3$, то в обеих частях получим нуль.

Оценим погрешность построенной выше приближенной формулы $f'(0) \approx (f(h) - f(-h))/(2h)$. В формуле Тейлора возьмем три члена разложения и остаточный член

$$f(h) = f(0) + hf'(0) + \frac{h^2}{2}f''(0) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_+), \quad 0 \leqslant \xi_+ \leqslant h,$$

$$f(-h) = f(0) - hf'(0) + \frac{h^2}{2}f''(0) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_-), \quad -h \leqslant \xi_- \leqslant 0.$$

Введем обозначение $R_k(f) = f^{(k)}(x_0) - \sum_{i=1}^{n} c_i f(x_i)$. Имеем

$$\begin{aligned}
R_1(f) &= f'(0) - \frac{f(h) - f(-h)}{2h} = \\
&= f'(0) - \left(f(0) + hf'(0) + \frac{h^2}{2}f''(0) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_+) - \right. \\
&\qquad \left. - \left(f(0) - hf'(0) + \frac{h^2}{2}f''(0) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_-)\right)\right) / (2h) = \\
&= f'(0) - \left(f'(0) + \frac{h^2}{6}\left(\frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2}\right)\right) = \\
&= -\frac{h^2}{6}\alpha, \qquad \alpha = \frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2}.
\end{aligned}$$

Значение α лежит между $f''(\xi_+)$ и $f''(\xi_-)$. Поэтому по теореме Ролля найдется ξ в пределах $[\xi_-, \xi_+]$ такое, что $\alpha = f'''(\xi)$. Таким образом, в итоге имеем

$$R_1(f) = -\frac{h^2}{6}f'''(\xi), \quad -h \leqslant \xi \leqslant h.$$

Рассмотрим приближенную формулу (3). Предположим сначала, что нам неизвестно, точна ли она для любого многочлена третьей степени. Беря в разложении Тейлора три члена

$$f(\pm h) = f(0) \pm hf'(0) + \frac{h^2}{2}f''(0) \pm \frac{h^3}{6}f'''(\xi_\pm),$$

получим

$$R_2(f) = f''(0) - \frac{f(h) - 2f(0) - f(-h)}{h^2} = f''(0) -$$
$$- \left[f(0) + hf'(0) + \frac{h^2}{2} f''(0) + \frac{h^3}{6} f'''(\xi_+) - 2f(0) + f(0) - hf'(0) + \right.$$
$$\left. + \frac{h^2}{2} f''(0) - \frac{h^3}{6} f'''(\xi_-) \right] h^{-2} = -\frac{h}{6}(f'''(\xi_+) - f'''(\xi_-)).$$

Если $f(x)$ — многочлен третьей степени, то $f'''(x) = \mathrm{const}$, поэтому $R_2(f) \equiv 0$. Таким образом, из выражения для погрешности мы увидели, что формула (3) точна для всех многочленов третьей степени. По теореме Лагранжа

$$f'''(\xi_+) - f'''(\xi_-) = (\xi_+ - \xi_-) f^{(4)}(\bar{\xi});$$

$\bar{\xi} \in [\xi_-, \xi_+]$. В то же время $\xi_+ \in [0, h]$, $\xi_- \in [-h, 0]$, откуда следует $0 \leqslant \xi_+ - \xi_- \leqslant 2h$. Таким образом, $\xi_+ - \xi_- = \theta \cdot 2h$, где $0 \leqslant \theta \leqslant 1$, и

$$R_2(f) = -\theta \frac{h^2}{6} f^{(4)}(\bar{\xi}), \quad 0 \leqslant \theta \leqslant 1.$$

Если в разложении Тейлора взять четыре слагаемых

$$f(\pm h) = f(0) \pm hf'(0) + \frac{h^2}{2} f''(0) \pm \frac{h^3}{6} f'''(0) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(\xi_\pm),$$

то получим выражение для погрешности

$$R_2(f) = -\frac{h^2}{12} \left(\frac{f^{(4)}(\xi_+) + f^{(4)}(\xi_-)}{2} \right).$$

Рассуждая, как и при выводе оценки погрешности для первой производной, имеем

$$R_2(f) = -\frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi), \quad -h \leqslant \xi \leqslant h.$$

Приведем ряд формул численного дифференцирования функций, заданных на сетке с постоянным шагом $x_n = x_0 + nh$:

$$\begin{aligned} f'(x_0) &\approx h^{-1} \sum_{j=1}^{n} \frac{(-1)^{j-1}}{j} f^j_{j/2}, R_1(f) = \frac{(-1)^n}{n+1} f^{(n+1)}(\xi) h^n; \\ f'(x_0) &\approx h^{-1} \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{j} f^j_{-j/2}, \qquad R_1(f) = \frac{1}{n+1} f^{(n+1)}(\xi) h^n. \end{aligned} \tag{4}$$

Это так называемые односторонние формулы численного дифференцирования. В первой формуле (4) все узлы удовлетворяют условию $x_k \geqslant x_0$, во второй $x_k \leqslant x_0$. Среди таких формул наиболее употребительны следующие:

$$n=1, \quad f'(x_0) \approx \frac{f^1_{1/2}}{h} = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h};$$

$$n=2, \quad f'(x_0) \approx \frac{1}{h}\left(f^1_{1/2} - \frac{1}{2}f^2_1\right) = \frac{-f(x_2)+4f(x_1)-3f(x_0)}{2h}$$

и

$$n=1, \quad f'(x_0) \approx \frac{f^1_{-1/2}}{h} = \frac{f(x_0)-f(x_{-1})}{h};$$

$$n=2, \quad f'(x_0) \approx \frac{1}{h}\left(f^1_{-1/2} + \frac{1}{2}f^2_{-1}\right) = \frac{3f(x_0)-4f(x_{-1})+f(x_{-2})}{2h}.$$

Такие приближения производных часто используются при решении дифференциальных уравнений для аппроксимации граничных условий. Приведем примеры симметричных формул:

$$f'\left(x_0+\frac{h}{2}\right) \approx h^{-1}\sum_{j=0}^{l-1}\frac{(-1)^j\left(\left(\frac{1}{2}\right)\cdot\left(\left(\frac{3}{2}\right)\cdots\left(\left(j-\frac{1}{2}\right)\right)^2\right.\right.}{(2j+1)!}f^{2j+1}_{1/2};$$

$$R_1(f) = (-1)^l\frac{\left(\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{3}{2}\right)\cdots\left(\left(l-\frac{1}{2}\right)\right)^2\right.}{(2l+1)!}f^{(2l+1)}(\xi)h^{2l}.$$

Наиболее употребительны следующие частные случаи:

$$l=1, \quad f'\left(x_0+\frac{h}{2}\right) \approx \frac{f^1_{1/2}}{h} = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}$$

(уже рассмотренный нами выше в других обозначениях);

$$l=2, \quad f'\left(x_0+\frac{h}{2}\right) \approx \frac{1}{h}\left(f^1_{1/2} - \frac{1}{24}f^3_{1/2}\right) = \frac{-f(2h)+27f(h)-27f(0)+f(-h)}{24h}.$$

Формулы для второй производной записываются в виде

$$f''(x_0) \approx h^{-2}\sum_{j=1}^{l}\frac{2(-1)^{j-1}((j-1)!)^2}{(2j)!}f^{2j}_0,$$

остаточный член

$$R_2(f) = \frac{2(-1)^l(l!)^2}{(2l+2)!}f^{(2l+2)}(\xi)h^{2l}.$$

Наиболее употребительны частные случаи:

$$l = 1, \quad f''(x_0) \approx \frac{f_0^2}{h^2} = \frac{f(h) - 2f(0) + f(-h)}{h^2};$$

$$l = 2, \quad f''(x_0) \approx \frac{1}{h^2}\left(f_0^2 - \frac{1}{12}f_0^4\right) =$$

$$= \frac{-f(2h) + 16f(h) - 30f(0) + 16f(-h) - f(-2h)}{12h^2}.$$

Для высших производных простейшую грубую аппроксимацию можно получить, воспользовавшись (10.4). При $0 \leqslant j \leqslant k$ имеем

$$R_k = f^{(k)}(x_j) - \frac{\Delta^k f_m}{h^k} = f^{(k)}(x_j) - f^{(k)}(\xi_{m,k}) = O(h).$$

Наиболее употребительные частные случаи: односторонние формулы численного дифференцирования

$$f^{(k)}(0) \approx \frac{\Delta^k f_0}{h^k} = \frac{f_{k/2}^k}{h^k}, \quad f^{(k)}(0) \approx \frac{\nabla^k f_0}{h^k} = \frac{f_{-k/2}^k}{h^k},$$

имеющие погрешность порядка $O(h)$, и симметричные формулы численного дифференцирования. При k четном

$$f^{(k)}(0) \approx f_0^k / h^k,$$

при k нечетном

$$f^{(k)}(0) \approx \frac{f_{1/2}^k + f_{-1/2}^k}{2h^k}.$$

Эти формулы имеют погрешность $O(h^2)$. При $k = 1,\ 2$ такими формулами как раз являются формулы, приведенные выше.

При выводе формул численного дифференцирования из приближенного равенства

$$f^{(k)}(x_0) \approx L_n^{(k)}(x_0)$$

оценку погрешности также можно получить, дифференцируя остаточный член в (5.1):

$$f^{(k)}(x_0) = L_n^{(k)}(x_0) + (f(x;\, x_1; \ldots; x_n)\omega_n(x))^{(k)}\Big|_{x_0}.$$

Для получения конкретной оценки надо воспользоваться правилом Лейбница и доказать равенство

$$(f(x;\, x_1; \ldots; x_n))^{(q)} = q!\, f(\underbrace{x; \ldots; x}_{q+1 \text{ раз}};\, x_1; \ldots; x_n).$$