Задача 5.

Требуется вывести формулу численного дифференцирования второго порядка для нахождения второй производной функции $f(x)$ с помощью разложения в базисные многочлены Лагранжа, предполагая, что даны значения функции $f(x)$ в узлах x_1 и $x_1 \pm h$, где h – некоторая константа, обозначающая шаг.

Решение:

Рассмотрим функцию $f(x) \in C^n[a;b]$ и n различных узлов$x_1, x_2, \dots, x_n$.Тогда разложение $f(x)$ в базисные полиномы Лагранжа имеет вид:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i(x) + \frac{\prod_{i=1}^{n}(x - x_i)}{n!} f^{(n)}\big(\xi(x)\big) \tag{1}$$

Найдем вторую производную этой функции:

$$f''(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i''(x) + \left(\frac{\prod_{i=1}^{n}(x - x_i)}{n!} f^{(n)}\big(\xi(x)\big)\right)'' \tag{2}$$

Вспомним, что вторая производная для произведения двух функций имеет следующий вид:

$$(f \cdot g)_x'' = \sum_{k=0}^{2} C_2^k f^{(2-k)} g^{(k)} = f''g + 2f'g' + fg'' \tag{3}$$

Тогда с учетом выражения (3) найдем вторую производную остаточного члена $\left(\frac{\prod_{i=1}^{n}(x-x_i)}{n!} f^{(n)}\big(\xi(x)\big)\right)''$ и дадим ей обозначение $R_n(x)$:

$$R_n(x) = \frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{\prod_{i=1}^{n}(x - x_i)}{n!}\right] f^{(n)}\big(\xi(x)\big) + 2\frac{d}{dx}\left[\frac{\prod_{i=1}^{n}(x - x_i)}{n!}\right] f^{(n+1)}\big(\xi(x)\big) + \left[\frac{\prod_{i=1}^{n}(x - x_i)}{n!}\right] f^{(n+2)}\big(\xi(x)\big). \tag{4}$$

При подстановке $x = x_j$, получим следующие упрощения:

$$\frac{\prod_{i=1}^{n}(x_j - x_i)}{n!} = 0;$$

$$\frac{d}{dx}\left[\frac{\prod_{i=1}^{n}(x - x_i)}{n!}\right] = \frac{\prod_{i=1, i\neq j}^{n}(x_j - x_i)}{n!}; \qquad (5)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{\prod_{i=1}^{n}(x - x_i)}{n!}\right] = 2\,\frac{\sum_{k=1}^{n}\prod_{i=1, i\neq k, i\neq j}^{n}(x_j - x_i)}{n!}$$

Тогда $R_n(x)$ можно переписать для $x = x_j$, сократив некоторые выражения:

$$R_n(x_j) = \frac{2}{n!}\sum_{k=1}^{n}\prod_{i=1, i\neq k, i\neq j}^{n}(x_j - x_i)\, f^{(n)}(\xi(x)) + \frac{2}{n!}\prod_{i=1, i\neq j}^{n}(x_j - x_i)\, f^{(n+1)}(\xi(x)) \qquad (4)$$

Соединив все выше полученные выводы для $R_n(x)$, получим выражение численного дифференцирования для второй производной в n узлах:

$$f''(x_j) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i''(x_j) + \frac{2}{n!}\sum_{k=1}^{n}\prod_{i=1, i\neq k, i\neq j}^{n}(x_j - x_i)\, f^{(n)}(\xi(x)) + \frac{2}{n!}\prod_{i=1, i\neq j}^{n}(x_j - x_i)\, f^{(n+1)}(\xi(x))$$

Теперь найдем вторую производную для нашего случая в $n = 3$ точках.

$$f''(x_j) = f(x_1)\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)}\right]_{x=x_j} + f(x_2)\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}\right]_{x=x_j} + f(x_3)\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{(x - x_2)(x - x_1)}{(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)}\right]_{x=x_j} + R_n(x_j)$$

В результате получим:

$$f''(x_j) = f(x_1)\frac{2}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} + f(x_2)\frac{2}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}$$
$$+ f(x_3)\frac{2}{(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)} + R_n(x_j)$$

В точках $x_1,\ x_2 = x_1 + h,\ x_3 = x_1 - h$ соответственно будем иметь:

$$f''(x_1 - h) = -f(x_1)\frac{2}{h^2} + f(x_1 + h)\frac{2}{2h^2} + f(x_1 - h)\frac{2}{2h^2} + R_n''(x_1 - h)$$
$$f''(x_1) = -f(x_1)\frac{2}{h^2} + f(x_1 + h)\frac{2}{2h^2} + f(x_1 - h)\frac{2}{2h^2} + R_n''(x_1)$$
$$f''(x_1 + h) = -f(x_1)\frac{2}{h^2} + f(x_1 + h)\frac{2}{2h^2} + f(x_1 - h)\frac{2}{2h^2} + R_n''(x_1 + h)$$

Видим, что вторая производная в точках $x_1,\ x_2 = x_1 + h,\ x_3 = x_1 - h$ отличается только остаточным членом. Найдем его в этих точках:

$$R_n''(x_1 - h) = -hf'''(\xi(x))$$
$$R_n''(x_1) = -h^2 f^{(4)}(\xi(x))$$
$$R_n''(x_1 + h) = hf'''(\xi(x))$$

Остаточные члены для граничных точек $x_2 = x_1 + h,\ x_3 = x_1 - h$ получились первого порядка точности, в то время как центральный узел получился второго порядка, что логично.

Таким образом, мы получили формулу численного дифференцирования второго порядка для второй производной функции $f(x)$ с помощью разложения в базисные многочлены Лагранжа:

$$f''(x_1) = \frac{f(x_1 + h) - 2f(x_1) + f(x_1 - h)}{h^2} - h^2 f^{(4)}(\xi(x))$$