

Nullstellensuche mit quadratischer Interpolation

Manfred Brill

13. Juni 2006

1 Ausgangssituation

Die Bestimmung von Nullstellen einer stetigen Funktion mit Hilfe von quadratischer Interpolation geht davon aus, dass wir bereits drei Punkte, eine „Klammer“, gefunden haben, die die folgenden Eigenschaften erfüllen:

$$\begin{aligned}a &< b < c, \\f(a) \cdot f(c) &< 0, \\|f(b)| &< |f(a)|, |f(b)|.\end{aligned}$$

Das bedeutet, dass a und c die Voraussetzungen des Zwischenwertsatzes erfüllen. Damit muss zwischen im Intervall $(a; c)$ eine Nullstelle liegen. Und b ist die zur Zeit beste Näherung für diese Nullstelle.

Jetzt setzen wir ein quadratisches Polynom an, das die gegebenen drei Punkte interpoliert; sinnvoller Weise gleich als Polynom in $x - b$:

$$p(x) = A(x - b)^2 + B(x - b) + C.$$

Der Algorithmus bestimmt die Polynomkoeffizienten A , B , C und mit deren Hilfe eine Nullstelle des Polynoms. Diese wird mit zwei der bisher verwendeten Punkte als neue Klammer eingesetzt.

Die Symbole in der Herleitung orientieren sich an [Bri05]. Weitere Quellen für diesen Algorithmus sind [Sch86] und [PFTV93] (dort wird er als Verfahren zur Minimierung von stetigen Funktionen beschrieben).

2 Herleitung des Algorithmus

Die Unbekannten A , B und C können wir aus den Interpolationsbedingungen bestimmen; im ersten Ansatz haben wir die drei linearen Gleichungen

$$\begin{aligned}A(a - b)^2 + B(a - b) + C &= f(a), \\C &= f(b), \\A(c - b)^2 + B(c - b) + C &= f(c).\end{aligned}$$

Also können wir gleich $C = f(b)$ ablesen, die beiden anderen Gleichungen lauten dann

$$A(a - b)^2 + B(a - b) = f(a) - f(b), \tag{1}$$

$$A(c - b)^2 + B(c - b) = f(c) - f(b). \tag{2}$$

Wir lösen Gleichung (2) nach B auf und erhalten:

$$B = \frac{f(a) - f(b)}{a - b} - A(a - b). \quad (3)$$

Gleichung (3) setzen wir in Gleichung (1) ein und erhalten dann einen Ausdruck für A :

$$A = \frac{(f(a) - f(b))(c - b) - (f(c) - f(b))(a - b)}{(a - b)(a - c)(c - b)}.$$

Schwarz führt in [Sch86] bei der Beschreibung dieses Algorithmus die Größen

$$\begin{aligned} h_1 &= c - b, \\ h_2 &= a - b, \\ d_1 &= f(c) - f(b), \\ d_2 &= f(a) - f(b) \end{aligned}$$

ein; dann gilt

$$A = \frac{h_1 d_2 - h_2 d_1}{h_1 h_2 (h_2 - h_1)}. \quad (4)$$

Für B gilt dann

$$\begin{aligned} B &= \frac{f(a) - f(b)}{a - b} - A(a - b) \\ &= \frac{(f(a) - f(b))(a - c)(c - b) - (f(a) - f(b))(c - b)(a - b) + (f(c) - f(b))(a - b)^2}{(a - b)(a - c)(c - b)}; \end{aligned}$$

mit den Größen, die für A eingeführt wurden gilt

$$B = \frac{h_2^2 d_1 - h_1^2 d_2}{h_1 h_2 (h_2 - h_1)}. \quad (5)$$

Für die Fälle $A = 0, B \neq 0$ und $A \neq 0, B = 0$ kann auch eine Nullstelle bestimmt werden. Der Fall $A = B = 0$ tritt nur dann auf, wenn $f(a) = f(b) = f(c)$ ist, den wir vernachlässigen können.

Nullstellenbestimmung durch quadratische Interpolation

Gegeben sind eine auf einem Intervall $[a; c]$ stetige Funktion f mit $f(a) \cdot f(c) < 0$ und ein Punkt $b \in [a; c]$ mit $|f(b)| \leq |f(a)|, |f(b)| \leq |f(c)|$. Wählen Sie eine Abbruchgenauigkeit $\varepsilon > 0$.

Schritt 1: Berechnen Sie $h_1 = c - b, h_2 = a - b, d_1 = f(c) - f(b), d_2 = f(a) - f(b)$, und

$$A = \frac{h_1 d_2 - h_2 d_1}{h_2 h_1 (h_2 - h_1)}, B = \frac{h_2^2 d_1 - h_1^2 d_2}{h_2 h_1 (h_2 - h_1)}, C = f(b)$$

Berechnen Sie die Nullstellen h_1, h_2 des Polynoms $Ah^2 + Bh + C$. Bestimmen Sie als h die Nullstelle h_i mit $h_i \in [a; c]$; falls dies von beiden Nullstellen erfüllt ist, verwenden Sie diejenige, für die $|f(b + h_i)|$ minimal ist. Im Fall $A = 0$ setzen Sie $h = -\frac{C}{B}$, im Fall $A \neq 0, B = 0$ setzen Sie $h = \sqrt{-\frac{C}{A}}$.

Schritt 2: Ist $|f(b + h)| < \varepsilon$, dann stoppen Sie, $b + h$ ist eine Näherung der gesuchten Nullstelle. Sonst bilden Sie aus den vier Punkten $a, b, b + h, c$ eine neue Klammerung und gehen zu Schritt 1.

Für das Beispiel $f(x) = e^x - 5x + 1$ und der Anfangsklammer $a = 0$, $c = 1$ und $b = 0,5$ findet man in Tabelle 1 den Verlauf des Algorithmus. Bereits im zweiten Schritt, also der Berechnung von x_5 , wird ein Funktionswert kleiner als 10^{-6} berechnet.

Tabelle 1: Verlauf der quadratischen Interpolation für $f(x) = e^x - 5x + 1$

n	x_n	Klammerung	$f(x_n)$	h
1	0,0		2,0	
2	1,0		-1,282	
3	0,5		0,149	
4	0,545 739	1,3,2	-0,003	0,045 739
5	0,544 878	3,4,2	$7 \cdot 10^{-7}$	$8,6 \cdot 10^{-4}$

Aus [Sch86] ist das Beispiel in Tabelle 2, das man auch in der ersten Auflage von [Bri05] findet. Wir suchen die Lösung der Gleichung

$$\cos(x) \cosh(x) + 1 = 0.$$

Die beiden ersten Näherungen $x_0 = 1,8$, $x_1 = 1,9$ wählen wir so, dass wieder $f(x_0)f(x_1) < 0$ gilt, der Zwischenwertsatz garantiert eine Nullstelle zwischen diesen beiden Werten. Für x_2 wählen wir willkürlich das arithmetische Mittel, danach können wir die quadratische Interpolation anwenden und erhalten den folgenden Verlauf:

Tabelle 2: Verlauf der quadratischen Interpolation für $f(x) = \cos(x) \cosh(x) + 1$

n	x_n	A	B	C	h
0	1,8			$2,9398 \cdot 10^{-1}$	
1	1,9			$-1,04917 \cdot 10^{-1}$	
2	1,85	-2,98082	-3,98893	$1,0198 \cdot 10^{-1}$	$2,5096 \cdot 10^{-2}$
3	1,8750955	-3,03752	-4,13855	$3,54376 \cdot 10^{-5}$	$8,56276 \cdot 10^{-6}$
4	1,87510407	-3,01939	-4,13814	$2,9 \cdot 10^{-9}$	$7,008 \cdot 10^{-10}$
5	1,875104069				

Literatur

- [Bri05] BRILL, MANFRED: *Mathematik für Informatiker, 2. Auflage*. Hanser, 2005.
- [PFTV93] PRESS, WILLIAM, FLANNERY, BRIAN, TEUKOLSKY, SAUL und VETTERLING, WILLIAM: *Numerical Recipes in C – The Art of Scientific Computation*. Cambridge University Press, 1993.
- [Sch86] SCHWARZ, HANS RUDOLF: *Numerische Mathematik*. Teubner, 1986.