Máster en Materiales y Sistemas Sensores para Tecnologías Medioambientales (Erasmus Mundus)

NOTAS DE CÁLCULO NUMÉRICO

Damián Ginestar Peiró

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DEL DISEÑO
UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA

Capítulo 1

Interpolación

1.1. Introducción

Frecuentemente, al realizar trabajos experimentales, la información respecto de cierta función desconocida o de difícil cálculo, $f(x)$, se tiene a partir de una tabla con valores numéricos de $f(x)$ para ciertos valores de x. Para una función representada de esta forma se necesita, a menudo, hallar el valor de $f(x)$ para un valor de x entre dos de los valores tabulados. Éste es el problema de la *interpolación directa*. De forma recíproca, podemos necesitar obtener el valor de x a partir de un valor de $f(x)$ situado entre dos valores tabulados. Éste es el problema de la *interpolación inversa*. El problema de determinar el valor de $f(x)$ en algún punto x que no esté situado entre dos valores de la tabla se denomina *problema de extrapolación*.

Trabajar sólo con la información de $f(x)$ que proporciona la tabla significa desconocer "casi todo" sobre $f(x)$, en particular si $f(x)$ es continua y derivable. En el desarrollo del tema se asumirá la hipótesis de continuidad y derivabilidad sobre la función $f(x)$. Una justificación para esto es que intentaremos resolver los problemas de interpolación y extrapolación aproximando la función "desconocida", $f(x)$, mediante una función polinómica o una función construida a partir de polinomios (splines).

La interpolación, con las hipótesis descritas es un procedimiento usualmente satisfactorio, sobre todo si los valores para los que se quiere calcular $f(x)$ están cerca de los valores tabulados.

Veamos a continuación algunos problemas prácticos que se pueden plantear.

1.1.1. Varios problemas prácticos

- La fertilización nitrogenada se ha realizado durante muchos años de forma indiscriminada debido en parte al bajo coste de los fertilizantes químicos y a la creencia de que una mayor fertilización implica una mayor producción. El aumento del coste, la evidencia de un óptimo en la dosis de N para una producción máxima y la constatación de que la contaminación por nitrato aumenta con la dosis de abonado nitrogenado, deberían conducir a una práctica más racional del abonado nitrogenado.

  Los datos proporcionados corresponden a una experiencia con maíz y muestran la relación entre fertilización (kg Nfert/ha), el contenido de nitrógeno en suelo y en la planta (kg N/ha), y la producción (tm/ha).

  Tabla 1.1.-

Nfertilizante aplicado (kg N/ha)	N en planta (Kg/ha)	N en suelo (Kg/ha)	Producción (t/ha)
0	20	15	1.2
110	120	20	6.5
230	220	110	9.3
350	230	230	9.0
460	235	340	8.5
570	210	560	8.0

  Por otra parte las dosis óptimas de N dependen del manejo del agua. En la experiencia anterior también se midió la lixiviación (lavado hacia capas más profundas del suelo) de nitrato en función de la dosis de fertilizante nitrogenado y del volumen de drenaje:

  Tabla 1.2.-

	Lixiviación de nitrato (kg N/ha)		
Nfertilizante aplicado (kg N/ha)	drenaje alto	drenaje medio	drenaje alto
0	38	25	18
95	42	30	19
180	60	40	21
360	138	95	50

- En la siguiente tabla se muestra el cálculo de la extracción diaria de nitrógeno en el cultivo de cítricos a partir de los datos conocidos de las necesidades mensuales

Tabla 1.3.-

Meses	Nextraido kgN/ha kgN/ha	extraccione mensuales/totales	Fracción total de N extraido	Fracción del año
1	2.44	0.012	0.012	0.083
2	4.07	0.02	0.032	0.166
3	6.11	0.03	0.062	0.25
4	12.22	0.06	0.122	0.333
5	23.21	0.114	0.236	0.416
6	34.61	0.17	0.406	0.5
7	42.75	0.21	0.616	0.583
8	36.65	0.18	0.796	0.666
9	22.39	0.11	0.906	0.75
10	10.18	0.05	0.956	0.833
11	6.11	0.03	0.986	0.916
12	2.85	0.014	1.000	1.000

- Veamos ahora la curva de demanda de N por el cultivo como una función de la fracción del tiempo.

  Debido a los problemas que supone la ingestión de aguas con un elevado contenido en nitratos por parte del ser humano (la OMS propone que en agua potable no se sobrepase los 50 ppm), y puesto que parece que en la contaminación de los acuíferos tiene una importancia crucial el exceso de la fertilización nitrogenada aportada por la agricultura intensiva, se realizó un ensayo de laboratorio con vistas a considerar la evolución de mineralización, proceso por el cual el N orgánico (proveniente de residuos vegetales, abonos ...) se transforma en N mineral (NO3- y NH4+), que se produce en el suelo de una parcela de Vinalesa con vistas a considerar estos aportes en el balance total de N y así al considerar este aporte disminuir la fertilización disminuyendo de esta forma la contaminación de los acuíferos. Los datos obtenidos para un ensayo a 25 grados C y a la humedad determinada fueron los siguientes:

Tabla 1.4.-

Tiempo (días)	Nmin (mg/kg)
7	9.466
14	8.211
27	15.590
41	17.615
55	20.215
83	21.734

Según la bibliografía la evolución de la mineralización se ha ajustado a funciones lineales ($Nmin = N0 + kt$) , exponenciales de primer orden ($Nmin = N0(1 - \exp(-kt))$), potenciales ($Nmin = ht^k$).

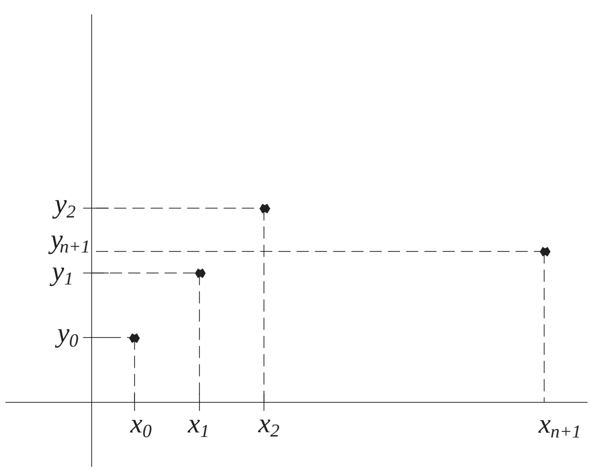
1.2. Interpolación lineal

Supongamos que se tiene una tabla de datos

Tabla 1.5.-

x_0	x_1	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	x_{n+1}
y_0	y_1	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	y_{n+1}

que gráficamente se pueden representar, por ejemplo, de la forma



Pretendemos conocer el valor que toma la variable y para un valor de x que no está recogido en la tabla. Por ejemplo, sea $x \in [x_i, x_{i+1}]$. Para aproximar el valor de y se supone que se encuentra en la recta que une los puntos (x_i, y_i) y (x_{i+1}, y_{i+1}). Esta recta tiene por ecuación

$$\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} = \frac{y - y_i}{y_{i+1} - y_i} \ ,$$

o sea, el valor de y correspondiente al valor x es

$$y = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i) = y_i \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} + y_{i+1} \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \ . \tag{1.1}$$

Podemos escribir una función interpoladora, $I(x)$, que sea válida para todos los puntos comprendidos entre los puntos extremos de la tabla haciendo uso de la función característica,

$$\chi_{[x_i, x_{i+1}]} = \begin{cases} 1 & x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & x \notin [x_i, x_{i+1}] \end{cases} \ .$$

De este modo, para los puntos de la tabla 1.5 se puede escribir

$$\begin{aligned} I(x) \quad = \quad & \left(y_0 \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \right) \chi_{[x_0, x_1]} + \\ & + \left(y_1 \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} + y_2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \right) \chi_{[x_1, x_2]} + \\ & \vdots \\ & + \left(y_n \frac{x_{n+1} - x}{x_{n+1} - x_n} + y_{n+1} \frac{x - x_n}{x_{n+1} - x_n} \right) \chi_{[x_n, x_{n+1}]} \ . \end{aligned}$$

Introduciendo las funciones

$$\psi_i(x) = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \chi_{[x_{i-1}, x_i]} + \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \chi_{[x_i, x_{i+1}]} \ ,$$

podemos escribir

$$I(x) = y_0 \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} \chi_{[x_0, x_1]} + \sum_{i=1}^{n} y_i \psi_i(x) + y_{n+1} \frac{x - x_n}{x_{n+1} - x_n} \chi_{[x_n, x_{n+1}]} \ , \tag{1.2}$$

que es el interpolante lineal asociado a la tabla 1.5.

1.3. Polinomio interpolador de Lagrange

Supongamos conocidos los valores de una función $f(x)$ en $n+1$ puntos distintos x_0, x_1, ... x_n, que supondremos ordenados de menor a mayor. Esta información la representamos en la siguiente tabla:

Tabla 1.6.- Tabla de simple entrada para la función f.

x	x_0	x_1	$\cdots$	x_n
$f(x)$	f_0	f_1	$\cdots$	f_n

Nuestro problema es obtener, aproximadamente, el valor de $f(x)$ en un punto arbitrario $x \in [x_0, x_n]$. Para resolverlo, construiremos un polinomio $L_n(x)$ de grado menor o igual que n que cumpla que

$$L_n(x_i) = f_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n,$$

es decir, que en los puntos x_i toma los valores de la tabla. A $L_n(x)$ se le denomina *polinomio interpolador* de la función $f(x)$ en los puntos $x_0, x_1, \ldots, x_n$ que, a su vez, se llaman *nodos de interpolación* de la función f. Una posible forma de resolver el problema sería el plantear un polinomio de grado n

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n \ ,$$

con coeficientes a_i, $i = 0, 1, \ldots, n$ indeterminados tal que $P_n(x_i) = f_i \ \ i = 0, 1, \ldots, n$. Esto significa que obtener el polinomio interpolador es equivalente a resolver el sistema de ecuaciones

$$\begin{array}{c} a_0 + a_1 x_1 + \ldots + a_n x_1^n = f_1 \ , \\ a_0 + a_1 x_2 + \ldots + a_n x_2^n = f_2 \ , \\ \vdots \\ a_0 + a_1 x_n + \ldots + a_n x_n^n = f_n \ . \end{array}$$

Esta forma de afrontar el problema es, desde el punto de vista práctico, poco operativa.

El siguiente resultado proporciona una forma explícita del polinomio interpolador buscado.

Teorema 1.1 (Polinomio interpolador de Lagrange) *Dada la tabla 1.6, se considera el polinomio*

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} P_{n,i}(x)\, f_i$$

donde

$$P_{n,i}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)},$$

con $i = 0, 1, \ldots, n$. *Este polinomio es un polinomio interpolador para la función* $f(x)$.

Demostración.
En primer lugar, el polinomio $L_n(x)$ *tiene grado menor o igual que* n *puesto que es combinación lineal de los polinomios* $P_{n,i}(x)$, *y éstos tienen grado menor o igual que* n. *Por otra parte, observemos que*

$$P_{n,i}(x_k) = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x_k - x_j}{x_i - x_j} = \begin{cases} 1 \text{ si } k = i \\ 0 \text{ si } k \neq i \end{cases},$$

de donde

$$L_n(x_i) = P_{n,i}(x_i)\, f_i = f_i,\ \ i = 0, 1, \ldots, n.$$

El polinomio obtenido en el teorema 1.1 se conoce con el nombre de polinomio interpolador de Lagrange. Sería más propio decir que está representado en la forma de Lagrange ya que, como probaremos en la siguiente proposición, el polinomio interpolador de una función $f(x)$ es único.

Proposición 1.1 *Dada la tabla 1.6, el polinomio interpolador de la función* $f(x)$ *es único.*

Demostración.
Supongamos que existe otro polinomio interpolador de $f(x)$, *es decir, existe un polinomio* $L_n^*(x)$ *de grado menor o igual que* n, *tal que*

$$L_n^*(x_i) = f_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

Consideramos el polinomio $Q_n(x) = L_n(x) - L_n^*(x)$ *elcual tendrá, a lo sumo, grado* n. *Este polinomio verifica*

$$Q_n(x_i) = L_n(x_i) - L_n^*(x_i) = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

Por lo tanto $Q_n(x)$ *es un polinomio de grado menor o igual que* n *con* $n+1$ *raíces distintas, de donde* $Q_n(x)$*es el polinomio idénticamente nulo. En consecuencia* $L_n(x) = L_n^*(x)$.

Nota 1.1

- *Hay otras formas de escribir el polinomio interpolador de una función $f(x)$ en $n+1$ puntos. No obstante, hay que recordar que la única diferencia será de aspecto puesto que el polinomio interpolador es único.*

- *Si se sabe que la función $f(x)$ es un polinomio de grado menor o igual que n, $L_n(x) = f(x)$.*

- *Para el cálculo práctico del polinomio interpolador de Lagrange no hay necesidad alguna de que los nodos estén ordenados.*

- *En vista de que un polinomio interpolador depende linealmente de los valores f_i de la función f, el polinomio interpolador de la suma de dos funciones en $n+1$ puntos $x_0, x_1, \ldots, x_n$ es igual a la suma de los polinomios interpoladores.*

Ejemplo 1.1 *Consideremos los datos dados por la tabla*

Tabla 1.7.-

x	0,3	1	2	3
$f(x)$	1,35	2,718	7,389	20,086

que corresponde a algunos valores que toma la función $f(x) = e^x$. El polinomio interpolador, en la forma de Lagrange, viene dado por

$$\begin{aligned} L_3(x) &= \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0{,}3-1)(0{,}3-2)(0{,}3-3)}1{,}35 + \\ &+ \frac{(x-0{,}3)(x-2)(x-3)}{(1-0{,}3)(1-2)(1-3)}2{,}718 + \\ &+ \frac{(x-0{,}3)(x-1)(x-3)}{(2-0{,}3)(2-1)(2-3)}7{,}389 + \\ &+ \frac{(x-0{,}3)(x-1)(x-2)}{(3-0{,}3)(3-1)(3-2)}20{,}086\ . \end{aligned}$$

Para obtener, por ejemplo, una aproximación al valor de $f(0{,}44)$, calculamos $L_3(0{,}44) = 1{,}608$. El valor exacto de $f(x)$ es $1{,}553$. Observamos las gráficas, superpuestas, de e^x y $L_3(x)$ en la figura 1.1.

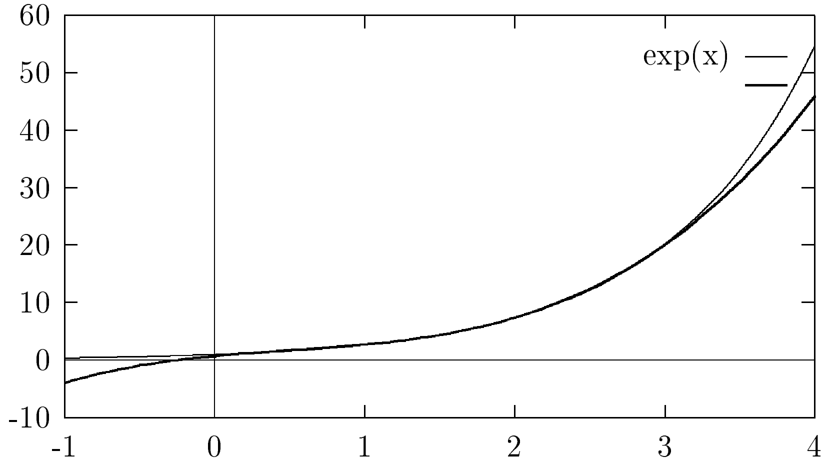


Fig. 1.1.- Gráficas de e^x y $L_3(x)$.

En el siguiente ejemplo se puede observar que el polinomio interpolador no siempre proporciona buenos resultados.

Ejemplo 1.2 *Consideramos la tabla*

x	0	3	5	9
$f(x)$	0	0,141	$-0{,}959$	0,412

correspondiente a algunos valores de la función $f(x) = \operatorname{sen}(x)$*. Si calculamos el polinomio interpolador en la forma de Lagrange, obtenemos*

$$\begin{aligned} L_3(x) &= \frac{(x-3)(x-5)(x-9)}{(0-3)(0-5)(0-9)}0 + \frac{(x-0)(x-5)(x-9)}{(3-0)(3-5)(3-9)}0{,}141 + \\ &+ \frac{(x-0)(x-3)(x-9)}{(5-0)(5-3)(5-9)}(-0{,}959) + \frac{(x-0)(x-3)(x-5)}{(9-0)(9-3)(9-5)}0{,}412. \end{aligned}$$

De la observación de las gráficas de $\operatorname{sen}(x)$ *y de* $L_3(x)$ *(véase la figura 1.2) se deducen las grandes diferencias entre la función aproximadora* $(L_3(x))$ *y la función a aproximar* $(\operatorname{sen}(x))$*.*

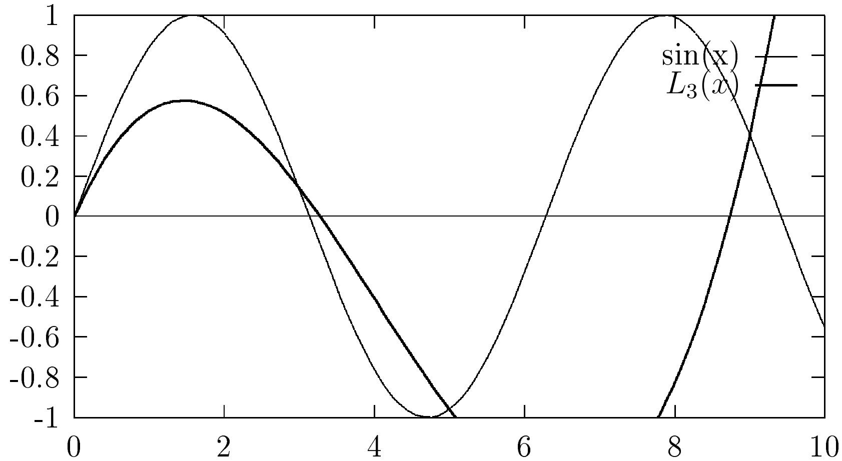


Fig. 1.2.- Gráficas de sen(x) y $L_3(x)$.

1.4. Polinomio interpolador de Newton

A partir de los datos de la Tabla 1.5, vamos a obtener una nueva forma de expresar el polinomio interpolador para la función $f(x)$. Antes será interesante demostrar el siguiente resultado.

Proposición 1.2 *Sea f una función de la cual se conocen sus valores en $n+2$ valores reales distintos*

$$f(x_i) = f_i,\ i = 0, 1, \ldots, n+1.$$

Consideremos los polinomios interpoladores de f en los nodos $x_0, x_1, \ldots, x_n$ y $x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}$ a los cuales llamamos $L_n(x)$ y $L_{n+1}(x)$ respectivamente. Entonces, existe una constante $c_n \neq 0$ tal que

$$L_{n+1}(x) = L_n(x) + c_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\ .$$

Demostración. *Observemos que el polinomio*

$$L_n(x) + c_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\ ,$$

coincide con $L_n(x)$, y por lo tanto con $f(x)$ en los puntos $x_0, x_1, \ldots, x_n$, para cualquier valor de c_n. Además, este polinomio es de grado $n+1$ a lo sumo.

Elegiremos c_n de forma que

$$f_{n+1} = L_n(x_{n+1}) + c_n(x_{n+1} - x_0)(x_{n+1} - x_1)\cdots(x_{n+1} - x_n)\ ,$$

de modo que

$$c_n = \frac{f_{n+1} - L_n(x_{n+1})}{(x_{n+1} - x_0)(x_{n+1} - x_1)\cdots(x_{n+1} - x_n)}.$$

Vamos a construir, de forma recursiva, un polinomio interpolador para la función f en los puntos $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

1. Definimos $N_0(x) = f_0$.

2. Teniendo en cuenta la demostración de la proposición 1.2 definimos

$$N_1(x) = N_0(x) + c_1(x - x_0),\ \text{con}\ c_1 = \frac{f_1 - N_0(x_1)}{(x_1 - x_0)}.$$

3. En general, calculamos

$$N_k(x) = N_0(x) + \sum_{i=1}^{k} c_i(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})$$

con

$$c_i = \frac{f_i - N_{i-1}(x_i)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\cdots(x_i - x_{i-1})}.$$

para $k = 2, 3, \ldots, n$.

Llamaremos polinomio interpolador *en la forma de Newton* al polinomio

$$N_n(x) = N_0(x) + \sum_{i=1}^{n} c_i(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})\ ,$$

que se construye mediante el proceso recursivo descrito. Notar que

$$N_{k+1}(x) = N_k(x) + c_k(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1}).$$

Evidentemente $L_n(x) = N_n(x)$ aunque la forma de Newton permite aprovechar la información que se tiene al añadirse un nuevo nodo de interpolación.

1.5. Caso particular de nodos igualmente espaciados

1.5.1. Diferencias finitas

En muchos casos los nodos de interpolación pueden aparecer equidistantes entre sí o igualmente espaciados, es decir,

$$x_j = x_0 + j\,h, \quad j = 0, 1 \ldots, n.$$

Sea $h \in \mathbb{R}$ constante y una función real $f(x)$. Llamaremos *diferencia de orden 1* de la función f, y se representa por $=$ $\Delta f(x)$, a la siguiente expresión

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$$

Las diferencias de órdenes superiores se definen de forma recursiva:

$$\Delta^{k+1} f(x) = \Delta(\Delta^k f(x)), \quad k = 1, 2, \ldots.$$

Por convenio se considerará $\Delta^0 f(x) = f(x)$. Las diferencias sucesivas de una función $f(x)$ se pueden representar y calcular de forma sencilla mediante la siguiente tabla:

x	$f(x)$	$\Delta f(x)$	$\Delta^2 f(x)$	$\Delta^3 f(x)$	$\Delta^4 f(x)$
x_0	f_0				
		$\Delta f(x_0)$			
x_1	f_1		$\Delta^2 f(x_0)$		
		$\Delta f(x_1)$		$\Delta^3 f(x_0)$	
x_2	f_2		$\Delta^2 f(x_1)$		$\Delta^4 f(x_0)$
		$\Delta f(x_2)$		$\Delta^3 f(x_1)$	$\vdots$
x_3	f_3		$\Delta^2 f(x_2)$	$\vdots$	$\vdots$
		$\Delta f(x_3)$		$\vdots$	$\vdots$
x_4	f_4	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$

Ejemplo 1.3 *Si calculamos la tabla de diferencias sucesivas correspondiente a la tabla de valores*

x	0,5	1	1,5	2	2,5	3
$f(x)$	1,65	1,03	0,74	0,61	0,53	0,45

obtenemos

x_i	f_i	Δf	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$	$\Delta^4 f$	$\Delta^5 f$
0,5	1,65					
		−0,62				
1	1,03		0,33			
		−0,29		−0,17		
1,5	0,74		0,16		0,06	
		−0,13		−0,11		0,00
2	0,61		0,05		0,06	
		−0,08		−0,05		
2,5	0,53		0,00			
		−0,08				
3	0,45					

1.5.2. Polinomio interpolador de Newton para puntos igualmente espaciados

Si en la forma de Newton del polinomio interpolador suponemos que los puntos están igualmente espaciados, es decir

$$x_j = x_0 + j\,h, \quad j = 0, 1 \ldots, n.$$

se obtiene

$$c_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{(x_0 + h) - x_0} = \frac{\Delta f(x_0)}{h}$$

$$\begin{aligned}
c_2 &= \frac{f(x_2) - f(x_0) - c_1(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \\
&= \frac{f(x_2) - f(x_0) - \frac{\Delta f(x_0)}{h}(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \\
&= \frac{\frac{f(x_2) - f(x_0)}{x_2 - x_0} - \frac{\Delta f(x_0)}{h}}{x_2 - x_1} = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1) + f(x_1) - f(x_0)}{2h} - \frac{\Delta f(x_0)}{h}}{h} = \\
&= \frac{\Delta f(x_1) + \Delta f(x_0) - 2\Delta f(x_0)}{2h^2} = \frac{\Delta f(x_1) - \Delta f(x_0)}{2h^2} = \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2h^2}.
\end{aligned}$$

En general, se obtiene por inducción

$$c_k = \frac{\Delta^k f(x_0)}{h^k\,k!},$$

de donde la forma de Newton del polinomio interpolador quedaría del siguiente modo

$$\begin{aligned} N_n(x) &= f(x_0) + \frac{\Delta f(x_0)}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{h^2\, 2!}(x - x_0)(x - x_1) + \ldots \\ &\quad \ldots + \frac{\Delta^n f(x_0)}{h^n\, n!}(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})\ . \end{aligned}$$

Nótese que los coeficientes $c_i,\ i = 1, 2, \ldots, n$ se obtienen, de forma sencilla, a partir de la tabla de diferencias sucesivas de la función.

Ejemplo 1.4 *Dada la tabla de datos y los elementos subrayados de la tabla de diferencias* $(\Delta^k f(x_0))$ *del ejemplo 1.3, se construye muy fácilmente el polinomio interpolador en la forma de Newton*

$$\begin{aligned} N_5(x) &= 1{,}65 + \frac{(-0{,}62)}{0{,}5}(x - 0{,}5) + \frac{0{,}33}{0{,}5^2\, 2!}(x - 0{,}5)(x - 1) + \\ &+ \frac{(-0{,}17)}{0{,}5^3\, 3!}(x - 0{,}5)(x - 1)(x - 1{,}5) + \\ &+ \frac{0{,}06}{0{,}5^4\, 4!}(x - 0{,}5)(x - 1)(x - 1{,}5)(x - 2)\ . \end{aligned}$$

1.6. Interpolación inversa y extrapolación

1.6.1. Interpolación inversa

Dada una tabla de puntos, el problema de la interpolación inversa consiste, simplemente, en determinar para un valor dado de la función $f(x)$ la correspondiente x. Cualquiera de las formas de interpolación expuestas permite afrontar este problema, simplemente hay que considerar a la f como variable independiente y a x como variable dependiente. La interpolación inversa puede tener gran interés como método para contrastar los resultados obtenidos al resolver un problema de interpolación directa.

1.6.2. Extrapolación

La utilización de los polinomios interpoladores para calcular aproximaciones con valores no situados entre nodos de la tabla 1.5 da, en general, resultados bastante desastrosos. Solamente se obtienen buenos resultados en la extrapolación para casos muy particulares de funciones. Por ejemplo, consideremos la tabla 1.5 donde f_i tiende a un límite f cuando i crece. Supongamos, además, que la sucesión $\{f - f_i\}$ es una progresión geométrica. Entonces, para tres valores consecutivos f_{k-1}, f_k, f_{k+1}, se tiene que

$$(f - f_{k-1})(f - f_{k+1}) = (f - f_k)^2,$$

y de aquí

$$f = f_{k+1} - \frac{(f_{k+1} - f_k)^2}{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}.$$

Esta fórmula se conoce como fórmula de extrapolación δ^2 de Aitken y más que como fórmula general de extrapolación, se utiliza para acelerar la convergencia en ciertos métodos iterativos.

1.7. Splines

Podemos pensar que, dada una nube de puntos, basta calcular el polinomio interpolador para obtener una aproximación aceptable de la función. Pero cuando el número de puntos de la tabla a ajustar es elevado, este proceso es computacionalmente, costoso y el resultado obtenido no suele ser bueno.

Otro método que se utiliza es la aproximación mediante Splines. Aquí se sigue la filosofía de que la aproximación obtenida será una función que pase por todos los puntos dados por la tabla y que esta función estará construida a partir de polinomios de grado a elegir, pero no muy alto en la práctica. Supongamos que se quieren aproximar, a partir de los datos de la tabla 1, los valores de una función $f(x)$, donde se supondrá que los puntos $a = x_0 \leq x_1 \leq \ldots \leq x_n = b$ definen una partición del intervalo $[a, b]$.

Definición 1.1 *Dado un intervalo* $[a, b] \subset \mathbb{R}$ *y una partición* $\mathcal{P}$ *de este intervalo*

$$a = x_0 \leq x_1 \leq \ldots \leq x_n = b\ ,$$

llamaremos spline de orden k *asociado a la partición, a la función* $S(x)$ *definida del siguiente modo*

$$S(x) = S_i(x) \quad \forall x \in [x_{i-1}, x_i], \quad i = 1, \ldots, n$$

donde $S_i(x)$ *son polinomios de grado* k*, que satisfacen:*

$$\begin{matrix} S_i(x_{i-1}) = f_{i-1} \\ S_i(x_i) = f_i \end{matrix} \qquad i = 1, \ldots, n \tag{1.3}$$

y además,
$$\left\{\begin{array}{l} S_i'(x_i) = S_{i+1}'(x_i) \\ \vdots \\ S_i^{k-1)}(x_i) = S_{i+1}^{k-1)}(x_i) \end{array}\right. \qquad i = 1, \ldots, n-1 \ . \tag{1.4}$$
A k se le llama grado del spline.

Los splines más utilizados en la práctica, son los splines de grado 3 o cúbicos, o sea, un conjunto de polinomios

$$S_i(x) = a_i x^3 + b_i x^2 + c_i x + d_i \quad i = 1, \ldots, n \ ,$$

que cumplen las condiciones anteriores. Veamos cómo podemos determinar estos polinomios.

Las condiciones (1.3) y (1.4), para los splines cúbicos, quedan de la forma:

$$\begin{array}{c} S_i(x_{i-1}) = f_{i-1} \\ S_i(x_i) = f_i \end{array} \quad i = 1, \ldots, n \ ,$$

$$\begin{array}{c} S_i'(x_i) = S_{i+1}'(x_i) \\ S_i''(x_i) = S_{i+1}''(x_i) \end{array} \quad i = 1, \ldots, n-1 \ ,$$

Hemos de determinar $4n$ coeficientes y se tienen $2n + 2(n-1) = 4n - 2$ condiciones. Harán falta, pues, dos condiciones extra que se suelen obtener imponiendo que $S_1''(x_0) = A$ y $S_n''(x_n) = B$, donde A y B son dos números reales. (En el caso que $A = B = 0$, el spline obtenido se llama spline natural).

Para obtener los polinomios, partimos de que $S_i''(x)$ son polinomios de grado 1 que cumplen $S_i''(x_i) = S_{i+1}''(x_i)$, $i = 1, \ldots, n-1$. Así

$$S_i''(x) = M_{i-1}\frac{(x_i - x)}{(x_i - x_{i-1})} + M_i\frac{(x - x_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})}, \quad i = 1, \ldots, n \ . \tag{1.5}$$

Efectivamente

$$\begin{aligned} S_i''(x_i) &= M_i \qquad\qquad (1.6) \\ S_{i+1}''(x_i) &= M_i\frac{(x_{i+1} - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} + M_{i+1}\frac{(x_i - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} = M_i \ . \end{aligned}$$

Tendremos que calcular sólo $M_1, \ldots, M_{n-1}$ ya que la expresión (1.5) nos permite afirmar que

$$A = S_1''(x_0) = M_0 \ ,$$

y la expresión (1.6)

$$B = S_n''(x_n) = M_n \ .$$

Integrando la expresión (1.5) obtenemos

$$S_i(x) = M_{i-1}\frac{(x_i - x)^3}{6(x_i - x_{i-1})} + M_i\frac{(x - x_{i-1})^3}{6(x_i - x_{i-1})} + \alpha_i x + \beta_i \ ,$$

donde α_i y β_i son constantes de integración que se determinan imponiendo

$$\begin{array}{ll} S_i(x_{i-1}) = f_{i-1} & \\ S_i(x_i) = f_i & \quad i = 1, \ldots, n \ , \end{array}$$

con lo que se obtiene:

$$\begin{array}{l} \alpha_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \frac{1}{6}(M_i - M_{i-1})(x_i - x_{i-1}) \\ \beta_i = f_i - \alpha_i x_i - \frac{1}{6}M_i(x_i - x_{i-1})^2 \ . \end{array}$$

Introduciendo la notación $h_i \equiv x_i - x_{i-1}$ podemos escribir:

$$\begin{aligned} S_i(x) \quad = \quad & \frac{M_{i-1}}{6h_i}(x_i - x)^3 + \frac{M_i}{6h_i}(x - x_{i-1})^3 + (f_i - \frac{1}{6}M_i h_i^2)\frac{(x - x_{i-1})}{h_i} + \\ & + (f_{i-1} - \frac{1}{6}M_{i-1}h_i^2)\frac{(x_i - x)}{h_i} \ . \qquad (1.7) \end{aligned}$$

Falta calcular los M_i, para ello, se hace uso de la condición que nos queda $S_i(x_i) = S_{i+1}(x_i) \quad i = 1, \ldots, n-1$ obteniendo el sistema de ecuaciones

$$a_i M_{i-1} + M_i + c_i M_{i+1} = d_i \ ,$$

donde los coeficientes vienen dados por las expresiones

$$a_i = \frac{h_i}{2(h_i + h_{i+1})} \ ; \quad c_i = \frac{h_{i+1}}{2(h_i + h_{i+1})} \ ,$$

$$d_i = \frac{1}{2(h_i + h_{i+1})}\left\{\frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} - \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i}\right\} \ .$$

Este sistema es uns sistema tridiagonal, cuya matriz de coeficientes es de la forma:

$$[A] = \begin{bmatrix} 1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & 1 & c_2 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & & a_{n-1} & 1 \end{bmatrix} \ ,$$

y, una vez resuelto, basta sustituir en (1.7) para obtener los distintos polinomios del spline cúbico.

Ejemplo 1.5 *Consideremos la tabla de valores*

Tabla 1.8.-

x	0	1	2	3	4	5
$f(x)$	0	1	4	9	16	25

cuyos puntos representamos en la figura 1.3.

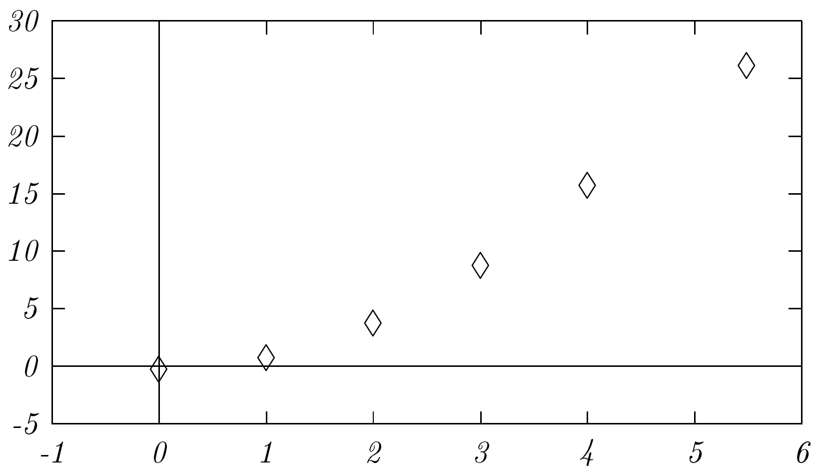


Fig. 1.3.- *Gráfica de los puntos de la tabla 1.2.*

Suponiendo que $M_0 = M_5 = 0$ *y teniendo en cuenta que* $h_j = 1$, $j = 1, \ldots, 5$, *calculamos los valores* $a_i = 0{,}25$, $c_i = 0{,}25$, $d_i = 0{,}5$, $i = 1, \ldots, 4$, *que dan lugar a la matriz*

$$[A] = \begin{bmatrix} 1 & c_1 & 0 & 0 \\ a_2 & 1 & c_2 & 0 \\ 0 & a_3 & 1 & c_3 \\ 0 & 0 & a_4 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0{,}25 & 0 & 0 \\ 0{,}25 & 1 & 0{,}25 & 0 \\ 0 & 0{,}25 & 1 & 0{,}25 \\ 0 & 0 & 0{,}25 & 1 \end{bmatrix}.$$

Resolvemos el sistema

$$[A] \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ M_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \end{bmatrix}$$

y obtenemos

$$\begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ M_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}421 \\ 0{,}316 \\ 0{,}316 \\ 0{,}421 \end{bmatrix}.$$

Sustituyendo en (1.7) obtenemos el spline

$$\begin{aligned}
S_1(x) &= \frac{0{,}421}{6}x^3 + (1 - \frac{0{,}421}{6})x \ , \\
S_2(x) &= \frac{0{,}421}{6}(2-x)^3 + \frac{0{,}316}{6}(x-1)^3 + (4 - \frac{0{,}316}{6})(x-1) \\
&\quad + (1 - \frac{0{,}421}{6})(2-x) \ , \\
S_3(x) &= \frac{0{,}316}{6}(3-x)^3 + \frac{0{,}316}{6}(x-2)^3 + (9 - \frac{0{,}316}{6})(x-2) \\
&\quad + (4 - \frac{0{,}316}{6})(3-x) \ , \\
S_4(x) &= \frac{0{,}316}{6}(4-x)^3 + \frac{0{,}421}{6}(x-3)^3 + (16 - \frac{0{,}421}{6})(x-3) \\
&\quad + (9 - \frac{0{,}316}{6})(4-x) \ , \\
S_5(x) &= \frac{0{,}421}{6}(5-x)^3 + 25(x-4) + (16 - \frac{0{,}421}{6})(5-x) \ .
\end{aligned}$$

En la Figura 1.4, representamos los puntos de la tabla junto con la gráfica del spline obtenido.

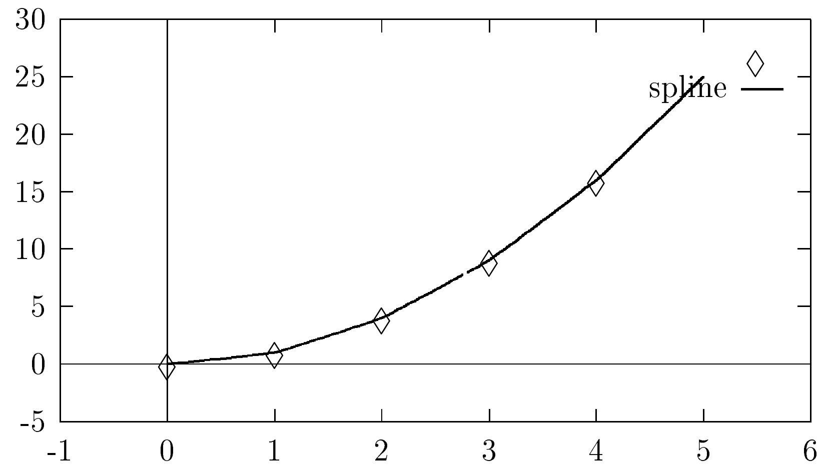


Fig. 1.4.- Puntos de la tabla 1.8 y el spline obtenido.

1.8. Ejercicios

1. ¿Cuál es el polinomio de interpolación de la función $f(x) = 1$ en los puntos $x_0, x_1, \ldots x_n$?.

2. Calcular un polinomio interpolador tal que en los puntos $x_0 = -1$, $x_1 = 0$ y $x_2 = 1$ tome los mismos valores que la función $f(x) = 3^x$.

3. Escribir un polinomio de grado no mayor que 2 que tome los valores 1, 2, -1 en los puntos 0, 1, -2.

4. Dada la tabla

x	0	1	2	3	4
$f(x)$	-1	2	13	44	107

determinar el polinomio interpolador de Newton asociado a estos datos.

5. Dada la tabla

x	-2	1	2	4
$f(x)$	25	-8	-15	-23

determinar el polinomio interpolador de Lagrange asociado a estos datos, dar una estimación de $f(0)$.

6. Calcular el polinomio interpolador de Newton para la función tabulada

x	2	4	6	8
$f(x)$	3	11	27	50

Si sabemos a posteriori que $f(10) = 83$, determinar el nuevo polinomio interpolador de Newton.

7. Se tiene la siguiente tabla de datos

x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
$\mathrm{Si}(x)$	0	0.19956	0.39646	0.58813	0.77210	0.94608

donde $\mathrm{Si}(x)$ es la función 'seno integral' dada por

$$\mathrm{Si}(x) = \int_0^x \frac{\mathrm{sen}(t)}{t}\, dt \ .$$

Calcular el polinomio interpolador correspondiente a los puntos de la tabla y obtener el valor de x tal que $\mathrm{Si}(x) = 0{,}45$.

8. La presión y el volumen de una masa gaseosa están ligados por cierta función. Con los siguientes datos obtenidos experimentalmente

Presión	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
Volumen	1.65	1.03	0.74	0.61	0.53

   a) Determinar un polinomio interpolador de grado menor o igual que 4 para estos datos.

   b) Utilizar la información del apartado anterior para determinar un polinomio que tome el valor 0.45 para el volumen a una presión de 3.

   c) Calcular volumen aproximado para una presión de 0.6. Estudiar esta aproximación utilizando ambos polinomios.

9. La tabla adjunta muestra las puntuaciones de Álgebra y Física de 5 estudiantes

Álgebra	7.5	8	9.3	6.5	8.7
Física	8.2	7.8	8.6	7.2	9.1

   a) Hallar un polinomio de grado a lo sumo 4 que interpole estos valores.

b) Calcular la nota que, aproximadamente, se espara que obtenga un alumno de Física si en Álgebra tiene un 7.

10. El número de bacterias por unidad de volumen presentes en un cultivo después de un número determinado de horas, viene dado por

Horas	0	2	4	6
Bacterias	32	65	132	275

a) Hallar un polinomio interpolador de grado 3 a lo sumo para estos datos.

b) A posteriori se analiza también el cultivo para diferentes tiempos, obteniendo

Horas	1	3	5
Bacterias	47	92	190

Calcular el polinomio interpolador para esta tabla, de grado menor o igual que 2.

c) Tomando todos los datos, construir el polinomio interpolador de grado máximo.

d) Comparar los distintos valores que se obtienen al considerar un periodo de tiempo igual a dos horas y media.

11. Construir un spline cúbico natural para aproximar $f(x) = \cos(\pi x)$ usando los valores dados por $f(x)$ en $x = 0, 0{,}25, 0{,}5, 0{,}75, 1{,}0$. Integrar el spline en el intervalo $[0, 1]$, y comparar con el reslutado

$$\int_0^1 \cos(\pi x)\, dx = 0.$$

Usar la derivada del spline para aproximar $f'(0{,}5)$ y $f''(0{,}5)$.

12. Calcular el spline cúbico que aproxime a la función $f(x) = 3xe^x - e^{2x}$ en $x = 1{,}03$, utilizando los datos de la siguiente tabla

x	1.0	1.02	1.04	1.06
$f(x)$	0.76578939	0.79536678	0.82268817	0.84752226