Interpolación

Sean $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función y $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a,b]$ tales que $x_i \neq x_j$ para todo $i \neq j$. Supongamos que los valores $y_i = f(x_i)$ con $i = 0, \ldots, n$ son conocidos (la función $f(x)$ no tiene por qué ser conocida para todo $x \in [a,b]$).

Por tanto, dados los puntos $\{(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)\}$, el objetivo es proporcionar un valor de y que mejor aproxime al valor exacto $f(x)$ y estudiar cómo de buena es dicha aproximación.

1. Polinomio interpolador de Lagrange

Se busca un polinomio $P(x)$ de grado mínimo tal que

$$P(x_i) = f(x_i), \qquad i = 0, \ldots, n.$$

Para ello, denotamos por $\mathscr{P}_n$ el conjunto de polinomios de la forma

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \ldots + a_1 x + a_0.$$

Dado un polinomio $P(x)$, definimos el grado de P como

$$\operatorname{grad}(P) = \max\{i : a_i \neq 0\}.$$

Teorema 1. *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ y $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a,b]$ tales que $x_i \neq x_j$ para todo $i \neq j$. Existe un único polinomio $P \in \mathscr{P}_n$ tal que*

$$P(x_i) = f(x_i), \qquad i = 0, \ldots, n.$$

Teorema 2 (Fórmula de interpolación de Lagrange)**.** *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ y $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a,b]$ tales que $x_i \neq x_j$ para todo $i \neq j$. Entonces el único polinomio $P \in \mathscr{P}_n$ que interpola f en $x_0, \ldots, x_n$ viene dado por*

$$P(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) L_j(x),$$

donde $L_j(x)$ son los polinomios básicos de Lagrange definidos como

$$L_j(x) = \prod_{k \neq j} \frac{x - x_k}{x_j - x_k} = \frac{(x - x_0)\cdots(x - x_{j-1})(x - x_{j+1})\cdots(x - x_n)}{(x_j - x_0)\cdots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\cdots(x_j - x_n)}$$

para $j = 0, \ldots, n$.

A continuación vemos cómo utilizar la regularidad de f estimar el error de interpolación

$$E(x) = f(x) - P(x).$$

Para ello utilizaremos los polinomios auxiliares

$$\Pi_n(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i).$$

Teorema 3 (Error de interpolación)**.** *Sea $f \in C^{n+1}([a,b])$ y $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a,b]$ tales que $x_i \neq x_j$ para todo $i \neq j$. Para $P \in \mathscr{P}_n$ el polinomio de interpolación de f en $x_0, \dots, x_n$ se cumple que*

$$E(x) = \frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \Pi_n(x),$$

donde $\xi_x \in I_x$ con I_x el menor intervalo cerrado que contiene al conjunto $\{x_0, x_1, \dots, x_n, x\}$.

En consecuencia, el error de interpolación puede estimarse como

$$|E(x)| \leq \frac{\text{máx}_{t \in [a,b]} |f^{n+1)}(t)|}{(n+1)!} (b-a)^n$$

para todo $x \in [a,b]$.

2. Fórmula de Newton para el polinomio interpolador de Lagrange

A continuación vemos una forma de calcular el polinomio interpolador de Lagrange que permiten ir añadiendo puntos para construir sucesivos polinomios de mayor grado y, por tanto, con menor error. Este método está basado en el uso de diferencias divididas:

Definición 4. Sean $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a,b]$ con $x_i \neq x_j$ para todo $i \neq j$. Se definen las diferencias divididas de f mediante la recurrencia

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+m}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_{i+m}] - f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+m-1}]}{x_{i+m} - x_i},$$

donde

$$f[x_i] = f(x_i).$$

Teorema 5 (Fórmula de interpolación de Newton)**.** *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ y $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a,b]$ tales que $x_i \neq x_j$ para todo $i \neq j$. El polinomio interpolador de Lagrange $P \in \mathscr{P}_n$ viene dado por*

$$\boxed{P(x) = f(x_0) + \sum_{i=1}^{n} f[x_0, x_1, \dots, x_i] \Pi_{i-1}(x)}$$

donde

$$\boxed{\Pi_{i-1}(x) = \prod_{k=0}^{i-1}(x - x_k)}$$

Además, para $x \notin \{x_0, \dots, x_n\}$ se tiene que el error de interpolación es

$$E(x) = f(x) - P(x) = f[x_0, x_1, \dots, x_n, x]\Pi_n(x).$$

Corolario 6. *Bajo las hipótesis del teorema anterior, si añadimos un nuevo punto $x_{n+1} \in [a, b]$ tal que $x_{n+1} \neq x_i$ para todo $i = 0, \dots, n$, entonces se puede construir un nuevo polinomio interpolador $\widetilde{P} \in \mathscr{P}_{n+1}$ que además pase por $(x_{n+1}, f(x_{n+1}))$ usando la fórmula*

$$\widetilde{P}(x) = P(x) + f[x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}]\Pi_n(x).$$

3. Interpolación por splines (cúbicos)

La idea de la interpolación por splines es subdividir el intervalo $[a, b]$ en varios intervalos y realizar en cada uno de ellos interpolación polinómica, de forma que la función resultante al "juntar" todos los subintervalos sea continua y suficientemente regular.

Definición 7. Sea $\Delta = \{a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b\}$ una partición del intervalo $[a, b]$ en subintervalos de la forma $[x_j, x_{j+1}]$ con $j = 0, \dots, n-1$. Se dice que una función $S : [a, b] \to \mathbb{R}$ es un spline de orden $k \in \mathbb{N}$ asociado a la partición Δ si:

i) $S \in C^{k-1}([a, b])$;

ii) $S\big|_{[x_j, x_{j+1}]}$ es un polinomio de grado menor o igual que k para cada $j = 0, \dots, n-1$;

Además, se dice que S es un spline de orden k interpolador de f asociado a la partición Δ si

$$S(x_i) = f(x_i)$$

para todo $i = 0, \dots, n$.

Por ejemplo, el spline interpolador S de orden $k = 1$ de una función f asociado a Δ es la función lineal a trozos que pasa por los puntos $(x_i, f(x_i))$.

Nos centramos en el caso $k = 3$: splines cúbicos. Un spline cúbico asociado a una partición Δ cumple

$$S\big|_{[x_j, x_{j+1}]} = \alpha_j + \beta_j(x - x_j) + \gamma_j(x - x_j)^2 + \delta_j(x - x_j)^3$$

para ciertos $\alpha_j, \beta_j, \gamma_j, \delta_j \in \mathbb{R}$ y para cada $j = 0, \ldots, n-1$. Es decir, tenemos que calcular un total de $4n$ incógnitas.

La condición de continuidad del spline implica lo siguiente:

$$\lim_{x \to x_j^-} S\big|_{[x_{j-1}, x_j]} = S(x_j) = \lim_{x \to x_j^+} S\big|_{[x_j, x_{j+1}]}, \qquad j = 1, \ldots, n-1,$$

de lo que se deducen las ecuaciones lineales

$$\alpha_{j-1} + \beta_{j-1}(x_j - x_{j-1}) + \gamma_{j-1}(x_j - x_{j-1})^2 + \delta_{j-1}(x_j - x_{j-1})^3 = \alpha_j.$$

De forma similar, dado que $S \in C^2([a,b])$, este argumento puede utilizarse con S' y S'':

$$\lim_{x \to x_j^-} S^{\ell)}\big|_{[x_{j-1}, x_j]} = S^{\ell)}(x_j) = \lim_{x \to x_j^+} S^{\ell)}\big|_{[x_j, x_{j+1}]}, \qquad j = 1, \ldots, n-1,$$

con $\ell = 1, 2$, lo que da lugar a las ecuaciones lineales

$$\beta_{j-1} + 2\gamma_{j-1}(x_j - x_{j-1}) + 3\delta_{j-1}(x_j - x_{j-1})^2 = \beta_j,$$

$$2\gamma_{j-1} + 6\delta_{j-1}(x_j - x_{j-1}) = 2\gamma_j,$$

para $j = 1, \ldots, n-1$. Esto da lugar a un total de $3n-3$ ecuaciones lineales con $4n$ incógnitas. Si además añadimos la condición de que S sea un spline interpolador que pase por los puntos de la forma (x_j, y_j) con $j = 0, \ldots, n$,

$$S(x_j) = y_j,$$

conseguimos un total de $4n-2$ ecuaciones lineales. Por tanto, dado que tenemos $4n$ incógnitas, es necesario añadir 2 ecuaciones lineales más para tener tantas ecuaciones como incógnitas y poder obtener una único spline cúbico interpolador.

Condición de Tipo I: La segunda derivada en los extremos de $[a,b]$ es cero, es decir

$$S''(a) = S''(b) = 0;$$

Condición de Tipo II: La primera derivada en los extremos de $[a,b]$ es toma valores $y_0', y_1' \in \mathbb{R}$, es decir

$$S'(a) = y_0' \qquad \& \qquad S'(b) = y_1';$$

Condición de Tipo III: El spline es periódico: los valores de S' y S'' en a coinciden con los de b, es decir

$$S(a) = S(b) \qquad \& \qquad S'(a) = S'(b).$$

Teorema 8. *Sea $\Delta = \{a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b\}$ una partición del intervalo $[a,b]$, y sean $y_0,\ldots,y_n \in \mathbb{R}$. Para cada una de las condiciones (Tipo I, II y III) existe un único spline cúbico S asociado a Δ tal que*

$$S(x_j) = y_j$$

para cada $j = 0,\ldots,n$.

Teorema 9. *Sea $\Delta = \{a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b\}$ una partición del intervalo $[a,b]$, y sean $y_0,\ldots,y_n \in \mathbb{R}$ tales que $y_j = f(x_j)$ para $j = 0,\ldots,n$ con $f \in C^4([a,b])$. Si S es un splin cúbico que interpola f asociado a la partición Δ, entonces existen $c_0, c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R}$ (independientes de Δ) tales que*

$$|f^{\ell)}(x) - S^{\ell)}(x)| \leq c_\ell \frac{\max_j |x_{j+1} - x_j|^{5-\ell}}{\min_j |x_{j+1} - x_j|} \max_{z\in[a,b]} |f^{4)}(z)|$$

para $\ell = 0,1,2,3$.

4. Cálculo de los coeficientes $\alpha_j, \beta_j, \gamma_j, \delta_j$ con $j = 0,\ldots,n-1$

Es posible expresar los coeficientes $\alpha_j, \beta_j, \gamma_j, \delta_j$ en función de los momentos $M_0, M_1, \ldots, M_n$ de S:

$$\boxed{\alpha_j = y_j} \quad \boxed{\beta_j = \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{2M_j + M_{j+1}}{6}(x_{j+1} - x_j)} \quad \boxed{\gamma_j = \frac{M_j}{2}} \quad \boxed{\delta_j = \frac{M_{j+1} - M_j}{6(x_{j+1} - x_j)}} \tag{1}$$

para $j = 0,\ldots,n-1$, donde los momentos vienen dados por

$$M_j = S''(x_j), \qquad j = 0,\ldots,n$$

Por otro lado, dado que

$$\lim_{x\to x_j^-} S'\big|_{[x_{j-1},x_j]} = S'(x_j) = \lim_{x\to x_j^+} S'\big|_{[x_j,x_{j+1}]}, \qquad j = 1,\ldots,n-1,$$

se deduce que los momentos verifican las ecuaciones

$$\boxed{\mu_j M_{j-1} + 2M_j + \lambda_j M_{j+1} = d_j} \tag{2}$$

con

$$\boxed{\lambda_j = \frac{x_{j+1} - x_j}{x_{j+1} - x_{j-1}}} \qquad \boxed{\mu_j = 1 - \lambda_j} \qquad \boxed{d_j = \frac{6}{x_{j+1} - x_{j-1}}\left(\frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}\right)}$$

para $j = 1, \dots, n-1$.

Falta por determinar dos ecuaciones más, que dependerán del tipo de condiciones que hayamos escogido:

Condición de Tipo I ($S''(a) = S''(b) = 0$): En este caso se tiene $M_0 = M_n = 0$ de forma trivial y elegimos

$$\boxed{\lambda_0 = d_0 = 0} \qquad \boxed{\mu_n = d_n = 0}$$

Condición de Tipo II ($S'(a) = y'_0$ & $S'(b) = y'_1$): Se toman

$$\boxed{\lambda_0 = 1} \qquad \boxed{d_0 = \frac{6}{x_1 - x_0}\left(\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} - y'_0\right)}$$

$$\boxed{\mu_n = 1} \qquad \boxed{d_n = \frac{6}{x_n - x_{n-1}}\left(y'_n - \frac{y_n - y_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}\right)}$$

Condición de Tipo III ($S(a) = S(b)$ & $S'(a) = S'(b)$): Se toman

$$\boxed{\lambda_n = \frac{x_1 - x_0}{x_1 - x_0 + x_n - x_{n-1}}} \qquad \boxed{\mu_n = 1 - \lambda_n}$$

$$\boxed{d_n = \frac{6}{x_1 - x_0 + x_n - x_{n-1}}\left(\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} - \frac{y_n - y_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}\right)}$$

Finalmente, podemos escribir las ecuaciones (2) en forma matricial:

Condiciones de Tipo I & II: $Au = d$ con

$$\boxed{A = \begin{pmatrix} 2 & \lambda_0 & & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & & \\ & \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & & \mu_n & 2 \end{pmatrix} \in \mathscr{M}_{n+1}(\mathbb{R}), \qquad u = \begin{pmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{pmatrix} \qquad \& \qquad d = \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}}$$

Condición de Tipo III (spline periódico): $A_p u = d_p$ con

$$\boxed{A_p = \begin{pmatrix} 2 & \lambda_1 & & & & \mu_1 \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & & \\ & \mu_3 & 2 & \lambda_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ \lambda_n & & & & \mu_n & 2 \end{pmatrix} \in \mathscr{M}_n(\mathbb{R}), \qquad u = \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{pmatrix} \qquad \& \qquad d_p = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}}$$

Las matrices A y A_p son invertibles. La idea es calcular los coeficientes de la matriz A (ó A_p) y resolver $Au = b$ para obtener los momentos $M_0, \ldots, M_n$. Finalmente, se calcularían los coeficientes α_j, β_j, γ_j y δ_j usando (1).