Capítulo 5

Interpolación

5.1. Introducción

El problema matemático de la interpolación es el siguiente: Dada un conjunto de n pares de valores (x_k, y_k) , encontrar una función $f(x)$ que cumpla $f(x_k) = y_k, k = 1, n$. Existen diversos métodos para encontrar dicha función. Los más conocidos son los métodos que interpolan $f(x)$ mediante un polinomio o una función racional (cociente de dos polinomios). En los últimos años, los métodos que utilizan funciones definidas a tramos (splines) han cobrado gran popularidad, justificada por su capacidad de reproducir formas complicadas y altamente variables. De hecho existe una activa investigación en splines.

Vamos a estudiar en primer lugar la interpolación polinómica. En este caso, dados n puntos, el grado más bajo del polinomio que pasa por los n puntos es $n - 1$ (salvo que dos o más puntos pertenezcan a un polinomio de grado más bajo). El Teorema Fundamental del Álgebra garantiza que este polinomio de grado $n - 1$ es único. Existen diversos métodos de determinar el polinomio interpolador, que dan por supuesto el mismo resultado. Unos métodos son más convenientes que otros, dependiendo del número de puntos en los que se desee conocer el polinomio interpolador.

5.2. Método de interpolación de Lagrange

Este método consiste en construir el polinomio interpolador de grado n que pasa por $n + 1$ puntos (x_i, y_i) de la forma

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x)y_i$$

donde las funciones $L_i(x)$ cumplen $L_i(x_k) = 0$ si $i \neq k$ y $L_i(x_i) = 1$. Esta propiedad garantiza $P_n(x_k) = y_k$. Las funciones $L_i(x)$ se construyen como:

$$L_i(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_1)(x_i - x_2) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)}$$

De su forma explícita, vemos que $L_i(x_i) = 1$ y que $L_i(x_k) = 0$ para $i \neq k$. Podemos escribir el polinomio interpolador de una función $f(x)$ en los puntos $x_0, x_1, \dots, x_n$ de forma compacta como:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$$

El método de Lagrange permite construir fácilmente de forma explícita, el polinomio interpolador. Dos de las interpolaciones más utilizados son las interpolaciones lineal y parabólica. Los correspondientes polinomios interpoladores son:

Lineal

$$P(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f_1 + \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f_0$$

Parabólica

$$P_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f_2$$

Sin embargo, cuando deseamos evaluar el polinomio interpolador en uno o varios puntos, el método de Lagrange no es conveniente ya que no da los coeficiente de cada grado, lo cual es necesario para aplicar el algoritmo de Horner. Sin embargo el método de Lagrange es fácil de entender, lo que justifica su valor pedagógico, y es de utilidad a la hora de elaborar un cierto número de demostraciones, como por ejemplo la fórmula del error cometido por el polinomio interpolador, que pasamos a demostrar a continuación.

Un aspecto importante es la determinación del error del polinomio interpolador $P_n(x)$ con respecto a la función interpolada $f(x)$, en el intervalo $[x_0, x_n]$. Sea x_s un punto arbitrario de este intervalo, en el que deseamos estimar el error. Construimos la función

$$g(x) = f(x) - P_n(x) - \prod_{j=0}^n \frac{(x - x_j)}{(x_s - x_j)} (f(x_s) - P_n(x_s))$$

que, por construcción, se anula en $x_0, x_1, \dots, x_n$ y x_s . Como $g(x)$ tiene $n + 2$ ceros y por el teorema de Rolle la derivada $g^{(1)}(x)$ tiene $n + 1$ ceros, la derivada $g^{(2)}(x)$ tiene n ceros y así sucesivamente hasta la derivada $g^{(n+1)}$ que tiene al menos un cero. Sea α este cero. Derivando $n + 1$ veces la anterior igualdad y sustituyendo $x = \alpha$ obtenemos (la derivada $n + 1$ de $P_n(x)$ es nula y la del polinomio de orden $n + 1$ del numerador del último término es $(n + 1)!$)

$$g^{(n+1)}(\alpha) = 0 = f^{(n+1)}(\alpha) - \frac{(n + 1)!}{\prod_{j=0}^n (x_s - x_j)} (f(x_s) - P_n(x_s))$$

con lo cual, concluimos que:

$$f(x_s) = P_n(x_s) + \prod_{j=0}^n (x_s - x_j) \frac{f^{(n+1)}(\alpha)}{(n + 1)!}$$

El punto α es desconocido, pero si podemos acotar la función $f^{(n+1)}(x)$ en el intervalo $[x_0, x_n]$ por el valor $f^{(n+1)}(x_m)$, donde x_m es el punto donde $f^{(n+1)}(x)$ alcanza el valor máximo, encontramos la cota de error en el intervalo $[x_0, x_n]$:

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{\left| \prod_{j=0}^n (x - x_j) f^{(n+1)}(x_m) \right|}{(n+1)!}$$

que es válida, independientemente del método empleado para obtener el polinomio interpolador.

5.3. Algoritmo de Neville

A veces no es necesario obtener la forma explícita del polinomio interpolador y basta con obtener su valor numérico en un punto dado. Además en este caso nos gustaría el poder aumentar el orden del polinomio interpolador a voluntad y parar cuando el error sea suficientemente pequeño. Para estos propósitos el algoritmo de Neville está especialmente indicado. El algoritmo de Neville está inspirado en la fórmula de interpolación lineal. La expresión

$$P(x) = \frac{x - x_0}{x_k - x_0} f_k - \frac{x - x_k}{x_k - x_0} f_0$$

pasa por los puntos (x_0, f_0) y (x_k, f_k) . Si, en lugar de f_k , ponemos en la anterior expresión un polinomio interpolador $P_{12\dots k}^{(k-1)}(x)$ que pasa por una serie de puntos $x_r, r = 1, 2, \dots, k$, y en lugar de f_0 , un polinomio interpolador $P_{01\dots k-1}(x)$ que pasa por $(x_r, f_r), r = 0, 1, \dots, k-1$, obtenemos

$$P(x) = \frac{x - x_0}{x_k - x_0} P_{12\dots k}^{(k-1)}(x) - \frac{x - x_k}{x_k - x_0} P_{01\dots k-1}^{(k-1)}(x)$$

Es obvio de la expresión anterior que, para los puntos comunes de interpolación $x_r, r = 1, 2, \dots, k-1$ de $P_0^{(k-1)}(x)$ y $P_k^{(k-1)}(x)$, se cumple

$$P(x_r) = \frac{x_r - x_0}{x_1 - x_0} f_r - \frac{x_r - x_1}{x_1 - x_0} f_r = f_r$$

y que además, $P(x_0) = P_{01\dots k-1}^{(k-1)}(x_0) = f_0$ y $P(x_k) = P_{12\dots k}^{(k-1)}(x_k) = f_k$. Por lo tanto podemos construir un polinomio de orden k a partir de dos polinomios de orden $k-1$, mediante la fórmula de interpolación lineal. El algoritmo de Neville utiliza este hecho, conjuntamente con una adecuada redistribución de los puntos de interpolación en una tabla, para calcular el valor del polinomio interpolador en un punto x . La tabla que se construye, en el caso de cuatro puntos, es

$$\begin{array}{ccccccc} x - x_0 & f_0 & & & & & \\ & & P_{01}^{(1)} & & & & \\ x - x_1 & f_1 & & P_{012}^{(2)} & & & \\ & & P_{12}^{(1)} & & P_{0123}^{(3)} & & \\ x - x_2 & f_2 & & P_{123}^{(2)} & & & \\ & & P_{23}^{(1)} & & & & \\ x - x_3 & f_3 & & & & & \end{array}$$

donde cada columna se obtiene de la anterior mediante la fórmula de interpolación lineal, que equivale a un producto cruzado entre la primera columna y la columna previa a la que calculamos. Concretamente:

$$\begin{aligned} P_{01}^{(1)}(x) &= \frac{1}{x_1 - x_0} [(x - x_0)f_1 - (x - x_1)f_0] \\ P_{012}^{(2)}(x) &= \frac{1}{x_2 - x_0} [(x - x_0)P_{12}^{(1)}(x) - (x - x_1)P_{01}^{(1)}(x)] \\ P_{0123}^{(3)}(x) &= \frac{1}{x_3 - x_0} [(x - x_0)P_{123}^{(2)}(x) - (x - x_3)P_{012}^{(2)}(x)] \end{aligned}$$

Vemos que cada término de la tabla se obtiene como la diferencia de los productos cruzados de vecinos inferior y superior en la columna inmediatamente anterior con la diferencia entre la abcisa de evaluación y la abcisa de interpolación en la primera columna correspondiente con el otro vecino, siguiendo la diagonal, dividida (la diferencia de productos cruzados) por la diferencia entre las diferencias de abcisas correspondientes superior e inferior de la primera columna. Podemos escribir el término general como sigue. Si denominamos $y_j = x - x_j$, tenemos:

$$P_{s \dots (s+i+1)}^{(i+1)} = \frac{1}{y_s - y_{s+i+1}} [y_s P_{s+1 \dots s+i+1}^{(i)} - y_{s+i+1} P_{s \dots s+i}^{(i)}]$$

El algoritmo de Neville es particularmente indicado en el caso de que se desee evaluar el polinomio interpolador en un único punto, o en un número muy reducido de puntos.

5.4. Método de Newton o de diferencias divididas

El método de Newton de diferencias divididas es otra forma de obtener el polinomio interpolador. En este método el polinomio interpolador se escribe de la forma

$$P_n(x) = a_0 + (x - x_0)a_1 + (x - x_0)(x - x_1)a_2 + \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})a_n$$

y el algoritmo proporciona una regla para obtener los coeficientes $a_0, a_1, \dots, a_n$. Imponiendo que el polinomio interpolador pase por los puntos de interpolación obtenemos

$$\begin{aligned} P_n(x_0) &= a_0 = f(x_0) \\ P_n(x_1) &= a_0 + (x_1 - x_0)a_1 = f(x_1) \\ P_n(x_2) &= a_0 + (x_2 - x_0)a_1 + (x_2 - x_0)(x_2 - x_1)a_2 = f(x_2) \\ &\vdots \\ P_n(x_n) &= a_0 + (x_n - x_0)a_1 + \dots + (x_n - x_0) \dots (x_n - x_{n-1})a_n = f(x_n) \end{aligned}$$

De estas ecuaciones, es obvio que a_0 depende sólo de x_0 , a_1 de x_0 y x_1 y así sucesivamente. Introducimos la nueva notación $a_0 \equiv f[x_0]$, $a_1 \equiv f[x_0, x_1]$, y así sucesivamente, con $f[x_0] = f(x_0)$, como se ve de la primera ecuación. Restando las dos primeras ecuaciones obtenemos

$$a_1 \equiv f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

Restando la segunda y la tercera ecuación obtenemos:

$$a_2 \equiv f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f(x_2) - f(x_1) - f[x_0, x_1](x_2 - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$$

Podemos proceder de igual modo para demostrar que

$$a_n \equiv f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}$$

aunque la forma más cómoda es por inducción. Suponemos que la expresión vale para a_{n-1} y construimos el polinomio de grado n , $Q_n(x)$, definido por

$$Q_n(x) = P'_{n-1}(x) + \frac{x - x_n}{x_n - x_0} [P'_{n-1}(x) - P_{n-1}(x)]$$

donde $P'_{n-1}(x)$ es el polinomio interpolador en $x_1, \dots, x_n$. Está claro de la definición de $Q_n(x)$ ¹ que para $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}$, $Q_n(x_i) = P'_{n-1}(x_i) = f(x_i)$, ya que $P'_{n-1}(x) - P_{n-1}(x)$ se anula en estos puntos. También en x_n se cumple que $Q_n(x_n) = P'_{n-1}(x_n) = f(x_n)$. En x_0 se cumple $Q_n(x_0) = P'_{n-1}(x_0) - [P'_{n-1}(x_0) - P_{n-1}(x_0)] = P_{n-1}(x_0) = f(x_0)$. Luego $Q_n(x)$ coincide con $P_n(x)$, ya que el polinomio interpolador es único, y su coeficiente en x^n es por lo tanto a_n . Como hemos supuesto que la fórmula de diferencias divididas es válida para $P_{n-1}(x)$ y $P'_{n-1}(x)$, entonces tenemos, identificando potencias en x^n en ambos lados, que el coeficiente en x^n de $Q_n(x)$ viene dado por:

$$a_n \equiv f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{1}{x_n - x_0} (a'_{n-1} - a_{n-1}) = \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_n] - f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}$$

relación que es el origen del nombre de diferencias divididas para los coeficientes a_n .

Podemos por lo tanto escribir el polinomio interpolador como,

$$P_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})$$

y la fórmula de aproximación a $f(x)$ con su término de error queda en la siguiente forma:

$$f(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) + \prod_{j=0}^n (x - x_j) \frac{f^{(n+1)}(x_m)}{(n+1)!}$$

El método de Newton permite obtener los coeficientes del polinomio interpolador fácilmente en forma de tabla, que damos abajo para el caso de 4 puntos.

x_0	f_0			
		$f[x_0, x_1]$		
x_1	f_1		$f[x_0, x_1, x_2]$	
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$
x_2	f_2		$f[x_1, x_2, x_3]$	
		$f[x_2, x_3]$		
x_3	f_3			

¹ $Q_n(x)$ es el resultado de aplicar el algoritmo de Neville a $P_{n-1}(x)$ y $P'_{n-1}(x)$.

El método de Newton es especialmente indicado en el caso de que deseemos realizar muchas evaluaciones del polinomio interpolador, ya que da el polinomio preparado para ser evaluado por el algoritmo de Horner. Otro aspecto particularmente conveniente es que, si deseamos aumentar el orden del polinomio interpolador, los coeficientes a_k ya calculados permanecen inalterados, es decir, no destruimos el trabajo ya realizado cuando deseamos aumentar el orden del polinomio interpolador. Se dice en este caso que los coeficientes a_k tienen la propiedad de *permanencia*.

En el caso de puntos igualmente espaciados, el polinomio de Newton toma una forma especialmente conveniente. Supongamos que tenemos una red de puntos espaciados un paso h , de forma que $x_n = x_0 + nh$. Tenemos que

$$f[x_0, x_1] = \frac{f_1 - f_0}{h}$$

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{2h} = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}$$

Si introducimos la notación de diferencias finitas $\Delta f_0 = f_1 - f_0$, $\Delta^2 f_0 = \Delta(\Delta f_0) = f_2 - f_1 - (f_1 - f_0) = f_2 - 2f_1 + f_0$ llegamos fácilmente por inducción al resultado

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{\Delta^n f_0}{n!h^n}$$

ya que

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0} = \frac{\frac{\Delta^{n-1} f_1}{(n-1)!h^{n-1}} - \frac{\Delta^{n-1} f_0}{(n-1)!h^{n-1}}}{nh} = \frac{\Delta(\Delta^{n-1} f_0)}{n!h^n} = \frac{\Delta^n f_0}{n!h^n}$$

El polinomio interpolador adquiere una forma particularmente simple en el caso de puntos igualmente espaciados. Si denotamos un punto arbitrario x , comprendido entre x_0 y x_n , como $x_0 + sh$, tenemos que el término j del polinomio interpolador se puede expresar como:

$$(x - x_0) \cdots (x - x_{j-1}) f[x_0, \dots, x_j] = sh \cdots (s - j + 1) h \frac{\Delta^j f_0}{j!h^j} = \frac{s!h^j}{j!(s-j)!} \frac{\Delta^j f_0}{h^j} = \binom{s}{j} \Delta^j f_0$$

Con esta extensión de los números combinatorios a números reales, podemos expresar el polinomio interpolador con su término de error en la siguiente forma extraordinariamente compacta:

$$P_n(x) = P_n(x_0 + sh) = \sum_{j=0}^n \binom{s}{j} \Delta^j f_0 + \binom{s}{n+1} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi)$$

5.4.1. Relación de las derivadas con las diferencias

Las derivadas de $f(x)$ y las diferencias finitas están íntimamente relacionadas. Para demostrarlo, vamos primero a expresar la función $f(x)$ en término de diferencias divididas. La expresión

$$f[x, x_0] = \frac{f(x_0) - f(x)}{x_0 - x}$$

podemos reescribirla como

$$f(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x, x_0]$$

A su vez, podemos escribir

$$f[x, x_0, x_1] = \frac{f[x_0, x_1] - f[x, x_0]}{x_1 - x}$$

que podemos reescribir como

$$f[x, x_0] = f[x_0, x_1] + (x - x_1)f[x, x_0, x_1]$$

y nos permite expresar $f(x)$ como

$$f(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x, x_0, x_1]$$

Repetiendo este proceso n veces, llegamos a la expresión

$$f(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})f[x_0, x_1, \dots, x_n] + (x - x_0) \cdots (x - x_n)f[x_0, x_1, \dots, x_n, x]$$

Los n primeros términos constituyen el polinomio interpolador, dado por la fórmula de Newton, y por lo tanto, el último término es el término de error. Tenemos por consiguiente la relación:

$$(x - x_0) \cdots (x - x_n)f[x_0, x_1, \dots, x_n, x] = (x - x_0) \cdots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(x_m)}{(n+1)!}$$

de donde deducimos la siguiente relación entre las diferencias divididas y las derivadas:

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n, x] = \frac{f^{(n+1)}(x_m)}{(n+1)!}$$

En el caso de puntos igualmente espaciados la anterior igualdad toma la forma:

$$\frac{\Delta^{n+1} f_0}{(n+1)!h^{n+1}} = \frac{f^{(n+1)}(x_m)}{(n+1)!}$$

Luego podemos escribir la siguiente relación entre las derivadas y las diferencias finitas:

$$\Delta^n f_0 = h^n f^{(n)}(x_m)$$

donde x_m es un punto del intervalo $[x_0, x_n]$. Cuando el intervalo $[x_0, x_n]$ se hace infinitamente pequeño, tenemos el siguiente límite cuando $x_n \rightarrow x_0$:

$$\lim_{x_n \rightarrow x_0} \Delta^n f_0 \rightarrow h^n f^{(n)}(x_0)$$

que nos dice que las diferencias y las derivadas de orden n son proporcionales en este límite.

5.5. Elección de los puntos de interpolación

El polinomio interpolador puede presentar comportamientos patológicos, en el sentido de que, cuando aumentamos el número de puntos de interpolación en un intervalo, la desviación máxima entre el polinomio y la función en dicho intervalo aumente con el grado del polinomio. Esto pasa con las funciones de Bernstein, $B(x) = |x|$, y Runge

$$R(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}$$

en el intervalo $[-1, 1]$. Cuando aumentamos el grado del polinomio interpolador de estas funciones con puntos igualmente espaciados, sucede que

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} |f(x) - P_n(x)| \longrightarrow \infty$$

Podemos preguntarnos cual es la mejor elección de los puntos de interpolación, en caso de que tengamos libertad para elegirlos. La respuesta es que el error se minimiza si se eligen los puntos de interpolación como los ceros de los polinomios de Chebychev, definidos por

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x))$$

De su definición, es obvio que los $T_n(x)$ sólo toman valores en el intervalo $[-1, 1]$, pues fuera de este intervalo la función $\arccos(x)$ no está definida. Como sus ceros están en el intervalo $[-1, 1]$, para una función $f(x)$ definida en un intervalo $[a, b]$ tenemos que realizar un cambio de variables a la variable t definida por $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$, de forma que $f(t)$ toma valores en $[-1, 1]$. Los valores de los ceros de los polinomios de Chebychev vienen dados por los valores de x que satisfacen

$$\cos(n\theta) = 0$$

donde $\theta = \arccos x$. Tenemos por lo tanto

$$n\theta = \frac{(2k+1)\pi}{2}$$

$$\theta = \frac{(2k+1)\pi}{2n}$$

por lo que los ceros x_n de $T_n(x)$ vienen dados por la expresión:

$$x_n = \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2n}\right)$$

Los polinomios de Chebychev satisfacen la relación de recurrencia

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

con $T_0(x) = 1$ y $T_1(x) = x$. Esta relación se puede demostrar fácilmente a partir de las relaciones trigonométricas

$$\begin{aligned}\cos(n+1)\theta &= \cos n\theta \cos \theta - \sin n\theta \sin \theta \\ \cos(n-1)\theta &= \cos n\theta \cos \theta + \sin n\theta \sin \theta\end{aligned}$$

Sumando ambas igualdades, y poniendo $\theta = \arccos x$, tenemos

$$\cos((n+1)\arccos x) = 2x \cos(n\arccos x) - \cos((n-1)\arccos x)$$

que da la anterior relación de recurrencia, teniendo en cuenta la definición de $T_n(x)$. De la relación de recurrencia se obtiene que el coeficiente del término principal de $T_n(x)$ es 2^{n-1} .

La razón de la idoneidad de los ceros de los polinomios de Chebychev como puntos de interpolación radica en que los polinomios de Chebychev son los polinomios con coeficiente principal 2^{n-1} con un menor valor máximo en $[-1,1]$. Esta afirmación es fácil de demostrar. Los polinomios de Chebychev alcanzan su valor máximo (+1 o -1), en $x = 1$, $x = -1$, y en los puntos que anulan sus derivadas ($T'(x) = 0$). Estos puntos vienen dados por

$$x_k = \cos \frac{k\pi}{n}$$

con $k = 1, 2, \dots, n-1$, por lo que tenemos que alcanzan su máximo valor absoluto en $n+1$ puntos, en los que alternan el signo. Si suponemos que un polinomio $Q_n(x)$, con el mismo coeficiente del término principal, es siempre menor en módulo que $T_n(x)$, entonces la diferencia $T_n(x) - Q_n(x)$, que es un polinomio de grado $n-1$ (los términos de grado n de ambos polinomios son iguales), debe de tomar valores con signos opuestos en todos los máximos (en valor absoluto) de $T_n(x)$, o sea en $n+1$ puntos. Como esta diferencia es una función continua, debe de anularse en n puntos. Pero un polinomio de grado $n-1$ que se anula en n puntos debe ser idénticamente nulo. Por lo tanto, no existe un polinomio de coeficiente principal 2^{n-1} que sea menor que $T_n(x)$ en $[-1,1]$. Consideremos ahora el término del error del polinomio interpolador

$$f(x) = P_n(x) + \prod_{j=0}^n (x-x_j) \frac{f^{(n+1)}(\alpha)}{(n+1)!}$$

El término $\prod_{j=0}^n (x-x_j)$ es $T_{n+1}(x)/2^n$ cuando los x_j se toman como los ceros de $T_n(x)$, ya que tiene los mismos ceros que $T_{n+1}(x)$ y debe coincidir con él, salvo una constante multiplicativa, y esta constante debe ser 2^{-n} para que el coeficiente del término principal sea 1. Por lo tanto, si se toman los puntos de interpolación en los ceros de los polinomios de Chebychev, el error de $P_n(x)$ viene dado por

$$f(x) = P_n(x) + \frac{T_{n+1}(x)}{2^n} \frac{f^{(n+1)}(\alpha)}{(n+1)!}$$

Por lo tanto, el término de error tiene la propiedad de $T_{n+1}(x)$ de tomar el menor valor absoluto posible, en $[-1,1]$, si despreciamos las variaciones debidas a $f^{(n+1)}(\alpha)$ (α depende del punto x en el que se calcula el error).

Cuando se interpolan las funciones de Bernstein y Runge en los ceros de los polinomios de Chebychev se obtiene que

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} |f(x) - P_n(x)| \longrightarrow 0 \quad n \rightarrow \infty$$

aunque la convergencia es lenta, en comparación con la que se obtiene para funciones de comportamiento “normal”.

5.6. Interpolación por splines

La interpolación polinomial tiene el inconveniente de que el polinomio interpolador puede oscilar fuertemente entre los puntos interpolados, como hemos visto en el apartado anterior. Para muchas aplicaciones prácticas interesa un algoritmo que proporcione una función interpoladora que se comporte suavemente. El modelo más sencillo es una interpolación lineal a tramos, constituida por rectas que unen los puntos interpolados. Sin embargo, este tipo de aproximación tiene una derivada discontinua en los puntos de interpolación. Para muchas aplicaciones prácticas, en las que se incluyen la resolución de ecuaciones diferenciales en las que intervienen funciones medidas experimentalmente, interesa una función aproximadora que tenga derivadas continuas hasta un orden dado, aparte de ser continua. El método de splines se basa en encontrar funciones que cumplan estas características. Se define un *spline de orden m* en una serie de $n + 1$ puntos de interpolación $\{(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)\}$ como un conjunto de n funciones $S_k(x)$ (frecuentemente polinomios de orden m) definidas en el intervalo $[x_k, x_{k+1}]$, que satisfacen

$$\begin{aligned} S_k(x_k) &= S_{k+1}(x_k) \\ S'_k(x_k) &= S'_{k+1}(x_k) \\ S''_k(x_k) &= S''_{k+1}(x_k) \\ &\vdots \\ S_k^{(m-1)}(x_k) &= S_{k+1}^{(m-1)}(x_k) \end{aligned}$$

Como veremos más abajo, hay que introducir en general condiciones de contorno adicionales en los extremos x_0 y x_n para que las funciones $S_k(x)$ estén unívocamente definidas. Los splines más utilizados son los cúbicos, debido a que son los más sencillos con derivada segunda continua, y por lo tanto son adecuados para aproximar funciones que intervienen en ecuaciones diferenciales de segundo orden. Si escribimos

$$S_k(x) = a_k + b_k(x - x_k) + c_k(x - x_k)^2 + d_k(x - x_k)^3$$

las dos primeras derivadas vienen dadas por

$$S'_k(x) = b_k + 2c_k(x - x_k) + 3d_k(x - x_k)^2$$

$$S''_k(x) = 2c_k + 6d_k(x - x_k)$$

La condición de que los splines pasen por los puntos de interpolación da $S_k(x_k) = a_k = y_k$, que nos dice que los coeficientes a_k son los valores de la función interpolada en los nodos. El significado de los otros coeficientes es obviamente $S'_k(x_k) = b_k$, $S''(x_k) = 2c_k$ y $S'''(x_k) = 6d_k$. Tenemos que las ecuaciones de continuidad de las funciones $S_k(x)$ y sus derivadas primera y segunda en los $n - 1$ puntos de interpolación intermedios x_{k+1} , $k = 0, \dots, n - 2$ (las condiciones de continuidad no se aplican a los extremos) dan

$$\begin{aligned} a_{k+1} &= a_k + b_k(x_{k+1} - x_k) + c_k(x_{k+1} - x_k)^2 + d_k(x_{k+1} - x_k)^3 \\ b_{k+1} &= b_k + 2c_k(x_{k+1} - x_k) + 3d_k(x_{k+1} - x_k)^2 \\ 2c_{k+1} &= 2c_k + 6d_k(x_{k+1} - x_k) \end{aligned}$$

que constituyen un sistema de $3(n - 1)$ ecuaciones para determinar los $3n$ coeficientes b_k, c_k y d_k . Una condición adicional es que el último spline pase por el último punto: $S_{n-1}(x_n) = y_n$. Necesitaremos por lo tanto dos condiciones adicionales para poder determinar todos los coeficientes. Daremos más adelante estas condiciones. Para simplificar la notación, introducimos la definición $h_k = x_{k+1} - x_k$. Podemos escribir las ecuaciones de continuidad anteriores como

$$\begin{aligned} \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} &= b_k + c_k h_k + d_k h_k^2 \\ b_{k+1} - b_k &= 2c_k h_k + 3d_k h_k^2 \\ c_{k+1} - c_k &= 3d_k h_k \end{aligned} \quad (5.1)$$

De las posibles formas de resolver el sistema de ecuaciones anterior, la más cómoda es despejar los coeficientes d_k y b_k de forma que obtengamos un sistema de ecuaciones para los coeficientes c_k . Si despejamos

$$d_k = \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k}$$

en la última ecuación y lo introducimos en la segunda ecuación, obtenemos

$$b_{k+1} - b_k = 2c_k h_k + 3 \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k} h_k^2 = (c_k + c_{k+1}) h_k \quad (5.2)$$

Necesitamos otra expresión independiente de $b_{k+1} - b_k$ para obtener una ecuación para los c_k . En la primera de las ecuaciones 5.1 podemos despejar b_k :

$$b_k = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - c_k h_k - d_k h_k^2 = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - c_k h_k - \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k} h_k^2 = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - \frac{2}{3} c_k h_k - \frac{1}{3} c_{k+1} h_k$$

y cambiando k por $k + 1$ obtenemos

$$b_{k+1} = \frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{2}{3} c_{k+1} h_{k+1} - \frac{1}{3} c_{k+2} h_{k+1}$$

Restando estas dos ecuaciones queda

$$b_{k+1} - b_k = \frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - \frac{1}{3} c_{k+2} h_{k+1} + \frac{1}{3} c_{k+1} h_k - \frac{2}{3} c_{k+1} h_{k+1} + \frac{2}{3} c_k h_k \quad (5.3)$$

Igualanddo esta expresión con la ecuación 5.2, obtenemos finalmente una relación entre los c_k :

$$\frac{1}{3}c_{k+2}h_{k+1} + \frac{2}{3}c_{k+1}(h_k + h_{k+1}) + \frac{1}{3}c_k h_k = \frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k}$$

Estas ecuaciones forman un sistema tridiagonal. Si definimos

$$v_{k+1} = 3 \left(\frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} \right)$$

tenemos que el sistema tridiagonal queda como

$$c_{k+2}h_{k+1} + 2c_{k+1}(h_k + h_{k+1}) + c_k h_k = v_{k+1}$$

cuya forma matricial es:

$$\begin{bmatrix} h_0 & 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & h_2 & 2(h_2 + h_3) & h_3 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_3 & 2(h_3 + h_4) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-3} & 2(h_{n-3} + h_{n-2}) & h_{n-2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{n-3} \\ v_{n-2} \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

que es un sistema de $n - 2$ ecuaciones para n incógnitas. Necesitamos dos ecuaciones adicionales para determinar los c_k . Estas dos ecuaciones se proporcionan mediante dos condiciones en cierta forma arbitrarias, pero de las que depende la calidad del ajuste. Las dos formas más usuales de proporcionar estas condiciones adicionales son:

1. La condición denominada *splines naturales*, que impone derivada nula en los extremos: $S''_0(x_0) = S''_{n-1}(x_n) = 0$.
2. La condición de *splines sujetos* (clamped), que fija la derivada en los extremos $S'_0(x_0) = f'(x_0)$ y $S'_{n-1}(x_n) = f'(x_n)$.

La condición de splines naturales implica $c_0 = c_n = 0$. El coeficiente c_n no pertenece a ninguno de los splines en $[x_0, x_n]$, sino a un spline arbitrario que comienza en el extremo x_n , pero la introducción de $S_n(x)$ permite extender las ecuaciones para los coeficientes c_k con una ecuación adicional

$$h_{n-2}c_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1})c_{n-1} = v_{n-1}$$

La condición $c_0 = 0$ nos permite eliminar la primera columna de la matriz del sistema 5.4. Con estas dos modificaciones, el sistema de ecuaciones queda de la forma:

$$\begin{bmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 \cdots & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & h_2 & 2(h_2 + h_3) & h_3 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & h_3 & 2(h_3 + h_4) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & h_{n-3} & 2(h_{n-3} + h_{n-2}) & h_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{n-2} \\ v_{n-1} \end{bmatrix}$$

que es un sistema de $n - 1$ ecuaciones con $n - 1$ incógnitas. Este sistema se puede resolver fácilmente por eliminación de Gauss. Cada paso de eliminación se aplica sólo a la fila inmediatamente inferior, ya que los elementos inferiores de la columna son nulos. El factor de eliminación de la segunda fila es

$$f_2 = -\frac{h_1}{2(h_0 + h_1)}$$

Después de la eliminación, la subdiagonal inferior se anula. El término en la diagonal toma un nuevo valor u_2 dado por

$$u_2 = 2(h_1 + h_2) - \frac{h_1^2}{2(h_0 + h_1)}$$

Los elementos u_k de la diagonal a partir de la segunda fila, después de la reducción, vienen dados por

$$u_{k+1} = 2(h_k + h_{k+1}) + h_k f_{k+1} = 2(h_k + h_{k+1}) - \frac{h_k^2}{u_k}$$

$$f_{k+1} = -\frac{h_k}{u_k}$$

y los términos independientes quedan como,

$$v'_{k+1} = v_{k+1} - \frac{h_k v_k}{u_k}$$

El sistema de ecuaciones, después de la reducción de Gauss, toma la forma:

$$\begin{bmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_2 & h_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & u_3 & h_3 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_4 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & u_{n-2} & h_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & u_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ v'_{n-2} \\ v'_{n-1} \end{bmatrix}$$

Este sistema se resuelve fácilmente por sustitución hacia atrás,

$$c_{n-1} = \frac{v'_{n-1}}{u_{n-1}}$$

$$c_k = \frac{v'_k - h_k c_{k+1}}{u_k}$$

con lo que determinamos todos los coeficientes c_k . A partir de los c_k , determinamos los coeficientes d_k mediante la relación

$$d_k = \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k}$$

Los coeficientes b_k se obtienen de la relación de recurrencia

$$b_{k+1} = b_k + (c_k + c_{k+1})h_k$$

con el valor inicial de b_0 determinado por la ecuación de continuidad de S_0 y S_1 en el primer nodo x_1 :

$$b_0 = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - d_0 h_0^2 = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - \frac{c_1}{3} h_0$$

donde hemos tenido en cuenta que $c_0 = 0$.

En el caso de splines sujetos, damos como datos adicionales los valores de f'_0 y f'_n (o estimaciones de los mismos). Tenemos por lo tanto $S'_0(x_0) = b_0 = f'_0$ y $S_{n-1}(x_n) = b_{n-1} + 2c_{n-1}h_{n-1} + 3d_{n-1}h_{n-1}^2 = f'_n$. La ecuación de continuidad en x_1 da

$$c_0 h_0 + d_0 h_0^2 = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - f'_0$$

La anterior expresión, introduciendo d_0 en función de c_0 y c_1 , queda como

$$\begin{aligned} c_0 h_0 + \frac{c_1 - c_0}{3h_0} h_0^2 &= \frac{a_1 - a_0}{h_0} - f'_0 \\ (2c_0 + c_1)h_0 &= 3 \left(\frac{a_1 - a_0}{h_0} - f'_0 \right) \end{aligned}$$

Análogamente, en el punto x_n imponemos la condición de que la derivada de $S_{n-1}(x)$ valga $f'_n(x_n)$:

$$b_{n-1} + 2c_{n-1}h_{n-1} + 3d_{n-1}h_{n-1}^2 = f'_n$$

De la condición de que el spline S_{n-1} pase por el extremo x_n obtenemos

$$b_{n-1} + c_{n-1}h_{n-1} + d_{n-1}h_{n-1}^2 = \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}}$$

Restando ambas ecuaciones eliminamos b_{n-1} con lo que obtenemos la relación,

$$c_{n-1}h_{n-1} + 2d_{n-1}h_{n-1}^2 = f'_n - \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}}$$

Poniendo d_{n-1} en función de los c_k ,

$$d_{n-1} = \frac{c_n - c_{n-1}}{3h_{n-1}}$$

obtenemos finalmente la ecuación adicional para c_n buscada:

$$(c_{n-1} + 2c_n)h_{n-1} = 3 \left(f'_n - \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}} \right)$$

Añadiendo al sistema de ecuaciones que determina los c_k las dos ecuaciones adicionales en los extremos inicial y final, tenemos que los c_k vienen dados por la solución de un sistema de $n + 1$ ecuaciones con $n + 1$ incógnitas:

$$\begin{bmatrix} 2h_0 & h_0 & 0 \cdots & 0 & 0 & 0 \\ h_0 & 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & h_{n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{n-1} & 2h_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_0 \\ v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{n-1} \\ v_n \end{bmatrix}$$

con

$$v_0 = 3 \left(\frac{a_1 - a_0}{h_0} - f'_0 \right)$$

$$v_n = 3 \left(f'_n - \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}} \right)$$

Para los otros valores de k , v_k viene dado por la misma expresión que en el caso de splines naturales:

$$v_k = 3 \left(\frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} \right)$$

Por lo tanto, en el caso de splines sujetos obtenemos un sistema de $n + 1$ ecuaciones con $n + 1$ incógnitas, que se resuelve como en el caso de splines lnaturales. La primera etapa de eliminación de Gauss da el sistema reducido

$$\begin{bmatrix} 2h_0 & h_0 & 0 \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_1 & h_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & u_2 & h_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & u_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_0 \\ v'_1 \\ v'_2 \\ \vdots \\ v'_{n-1} \\ v'_n \end{bmatrix}$$

con

$$u_1 = 2h_1 - \frac{3}{2}h_0$$

$$u_k = 2(h_{k-1} + h_k) - \frac{h_{k-1}^2}{u_{k-1}} \quad k = 1, \dots, n-1$$

$$u_n = 2h_{n-1} - \frac{h_{n-1}^2}{u_{n-1}}$$

$$v'_k = v_k - \frac{h_{k-1}v_{k-1}}{u_{k-1}}, \quad k > 0$$

Este sistema se resuelve por sustitución hacia atrás:

$$c_n = \frac{v'_n}{u_n}$$

$$c_k = \frac{v'_k - h_k c_{k+1}}{u_k}$$

con $v'_0 = v_0$ y $u_0 = 2h_0$. Los coeficientes b_k y d_k se determinan como en el caso de splines naturales.