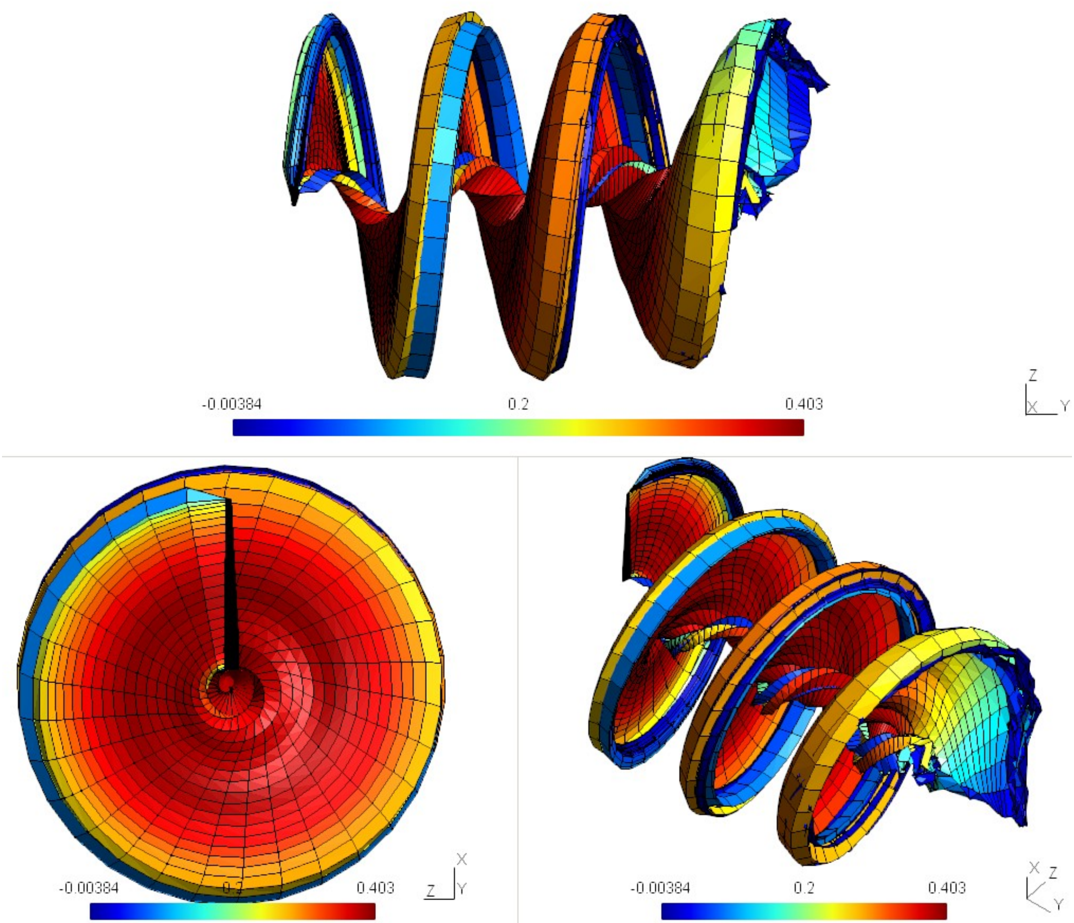
FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES



Elementos de Cálculo Numérico (M212)

Unidad 4: Interpolación y aproximación de funciones

http://fcen.uncuyo.edu.ar/elementos-de-calculo-numerico

Unidad 4: Interpolación y aproximación de funciones

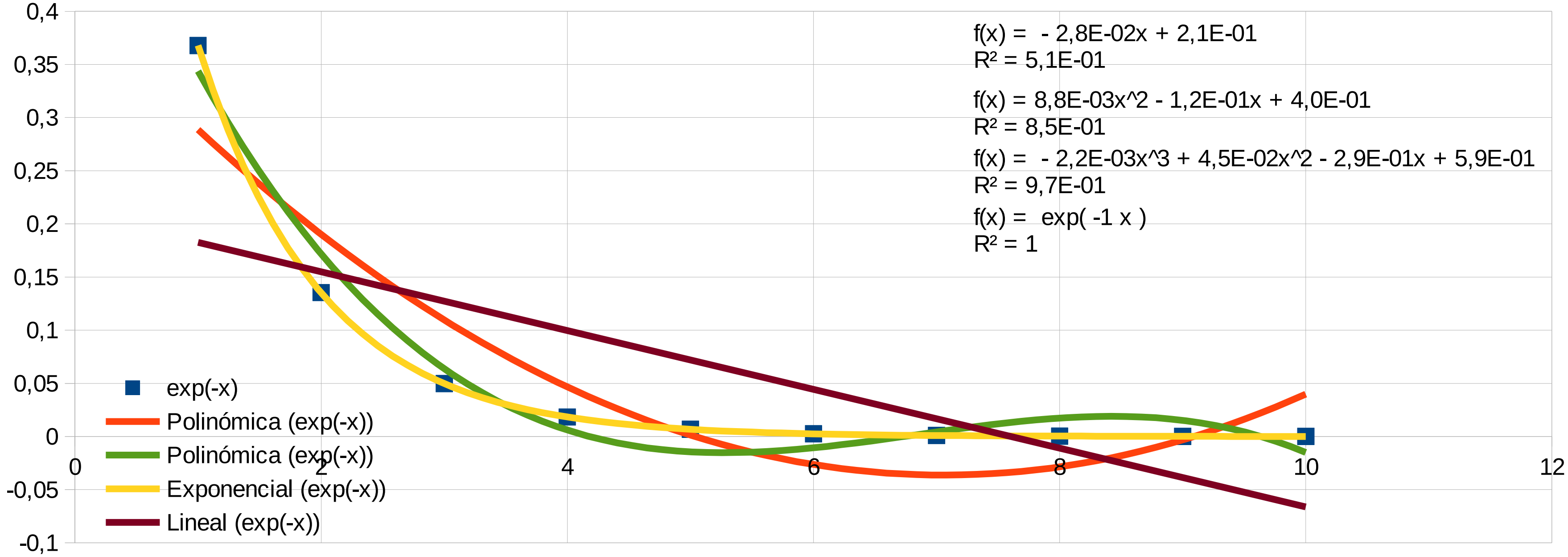
Temario

- Interpolación y ajuste de funciones
- Interpolación polinomial
- Interpolación polinomial directa
- Interpolación por polinomios de Lagrange
- Interpolación por polinomios de Newton
- Interpolación mediante splines cúbicos
- Ajuste de funciones por mínimos cuadrados

Interpolación y ajuste de funciones

Problema de interpolación: Se busca un polinomio **que pase por** N puntos conocidos. Existen varios métodos para determinar los coeficientes del **polinomio "interpolante"**. El máximo grado del polinomio es N-1. Si se usan muchos términos (>9), el polinomio produce oscilaciones.

Problema de ajuste: Se busca una función **que pase "cerca"** de todos los puntos. Puede ser cualquier función, e.g, regresión lineal, polinomial, exponencial, etc. Aunque no pase exactamente por los puntos, el ajuste acota el error máximo global.



Interpolación polinomial directa

Supongamos que **conocemos N+1 puntos** $(x_0,y_0),(x_1,y_1),\ldots,(x_N,y_N)$ de cierta curva $y=f(x)$ donde las abscisas se distribuyen dentro del intervalo [a,b] de manera que $a \leq x_0 < x_1 < \ldots < x_N \leq b$

Vamos a construir un polinomio P(x) de grado N que pase por los puntos. Cuando $x_0<x<x_N$ el valor obtenido por P(x) se conoce como valor **interpolado**, mientras que si $x<x_0$ o $x>x_N$ el valor se llama **extrapolado**.

Para hallar los N+1 coeficientes del polinomio, se **evalúa el polinomio en cada punto** y se resuelve en forma simultánea el sistema de ecuaciones lineales (SEL).

Interpolación polinomial directa

$$P_n(x)=A_0+A_1x+A_2x^2+\ldots+A_nx^n=\sum_{k=0}^{n}a_kx^k$$

$$A_0+A_1x_0+A_2x_0^2+\ldots+A_nx_0^n=y_0$$
$$A_0+A_1x_1+A_2x_1^2+\ldots+A_nx_1^n=y_1$$
$$\vdots$$
$$A_0+A_1x_n+A_2x_n^2+\ldots+A_nx_n^n=y_n$$

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ & & & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{bmatrix}\cdot\begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}\rightarrow[X]\cdot A=Y$$

Los coeficientes se encuentran **resolviendo el SEL** como se vio en la unidad 3.

La matriz resultante se llama "Vandermonde" y suele ser **muy mal condicionada**.

Interpolación por polinomios de Lagrange

FCEN FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

En vez de utilizar la "base" $\{x^0, x^1, x^2, \ldots, x^N\}$ para construir el polinomio, se utilizan los polinomios de Lagrange.

$$l_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n} \frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)} = \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})(x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})(x_i - x_n)}$$

$$\begin{bmatrix} l_0(x_0)=1 & l_1(x_0)=0 & l_2(x_0)=0 & \ldots & l_n(x_0)=0 \\ 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \rightarrow [\mathrm{I}] \cdot \mathrm{A} = \mathrm{Y} \rightarrow A_i = y_i$$

No hay que resolver el SEL

$$P_n(x) = \sum_{k}^{n}{}_{0}\, y_k l_k(x)$$

Interpolación por polinomios de Lagrange

Ejemplo 1

x	y
1,5	3
3	4

$$l_0(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq 0}}^{1}\frac{(x-x_k)}{(x_1-x_k)}=\frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}=\frac{(x-3)}{(1{,}5-3)}$$

$$l_1(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq 1}}^{1}\frac{(x-x_k)}{(x_1-x_k)}=\frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}=\frac{(x-1{,}5)}{(3-1{,}5)}$$

$$P_n(x)=\sum_{0}^{n}{}_k\, y_k l_k(x)=y_0 l_0(x)+y_1 l_1(x)=3\frac{(x-3)}{(1{,}5-3)}+4\frac{(x-1{,}5)}{(3-1{,}5)}$$

Interpolación por polinomios de Lagrange

Ejemplo 2

x	y
1,5	3
3	4
4,5	3,5

$$l_0(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq 0}}^{2}\frac{(x-x_k)}{(x_1-x_k)}=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}=\frac{(x-3)(x-4{,}5)}{(1{,}5-3)(1{,}5-4{,}5)}$$

$$l_1(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq 1}}^{2}\frac{(x-x_k)}{(x_1-x_k)}=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}=\frac{(x-1{,}5)(x-4{,}5)}{(3-1{,}5)(3-4{,}5)}$$

$$l_2(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq 2}}^{2}\frac{(x-x_k)}{(x_1-x_k)}=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}=\frac{(x-1{,}5)(x-3)}{(4{,}5-1{,}5)(4{,}5-3)}$$

$$P_n(x)=\sum_{0}^{2}{}_k\, y_k l_k(x)=y_0 l_0(x)+y_1 l_1(x)+y_2 l_2(x)$$

Al agregar un punto se deben recalcular todos los polinomios...

Interpolación por polinomios de Newton

Para construir el polinomio se utilizan los polinomios de Newton que se determinan de forma recursiva.

$$\begin{aligned} n_0(x) &= 1 \\ n_i(x) &= n_{i-1}(x)(x-x_{i-1}) \end{aligned} \rightarrow \begin{aligned} n_0(x) &= 1 \\ n_1(x) &= 1(x-x_0) \\ n_2(x) &= 1(x-x_0)(x-x_1) \end{aligned}$$

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + a_3(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) + \ldots$$

$$\begin{bmatrix} n_0(x_0)=1 & n_1(x_0)=0 & n_2(x_0)=0 & \ldots & n_n(x_0)=0 \\ 1 & (x_1-x_0) & 0 & \ldots & 0 \\ 1 & (x_2-x_0) & (x_2-x_0)(x_2-x_1) & \ldots & 0 \\ & & & & \vdots \\ 1 & (x_n-x_0) & (x_n-x_0)(x_n-x_1) & \ldots & (x_n-x_0)\ldots(x_n-x_{n-1}) \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \rightarrow [L] \cdot A = Y$$

Interpolación por polinomios de Newton

El SEL se resuelve con sustitución hacia adelante y los coeficientes resultantes se conocen como las "**diferencias divididas**" de Newton

$$A_0(x)=Y_0$$

$$A_1(x)=\frac{(y_1-y_0)}{(x_1-x_0)}=\Delta y_1$$

$$A_2(x)=\frac{\frac{(y_2-y_0)}{(x_2-x_0)}-\frac{(y_1-y_0)}{(x_1-x_0)}}{(x_2-x_1)}=\frac{\Delta y_2-\Delta y_1}{(x_2-x_1)}=\Delta^2 y_2$$

$$A_3(x)=\frac{\Delta^2 y_3-\Delta^2 y_2}{(x_3-x_2)}=\Delta^3 y_3$$

Interpolación por polinomios de Newton

Para calcular a mano es mejor tabular los resultados y sistematizar el cálculo de la siguiente forma:

x_0	y_0				
x_1	y_1	Δy_1			
x_2	y_2	Δy_2	$\Delta^2 y_2$		
x_3	y_3	Δy_3	$\Delta^2 y_3$	$\Delta^3 y_3$	
x_4	y_4	Δy_4	$\Delta^2 y_4$	$\Delta^3 y_4$	$\Delta^4 y_4$

$$P_n(x) = y_0 + \Delta y_1 (x - x_0) + \Delta y_2^2 (x - x_0)(x - x_1) + \ldots$$

$$\ldots + \Delta y_3^3 (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) + \Delta y_4^4 (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) + \ldots$$

Interpolación por polinomios de Lagrange

FCEN FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Ejemplo 2

x	y
1,5	3
3	4
4,5	3,5

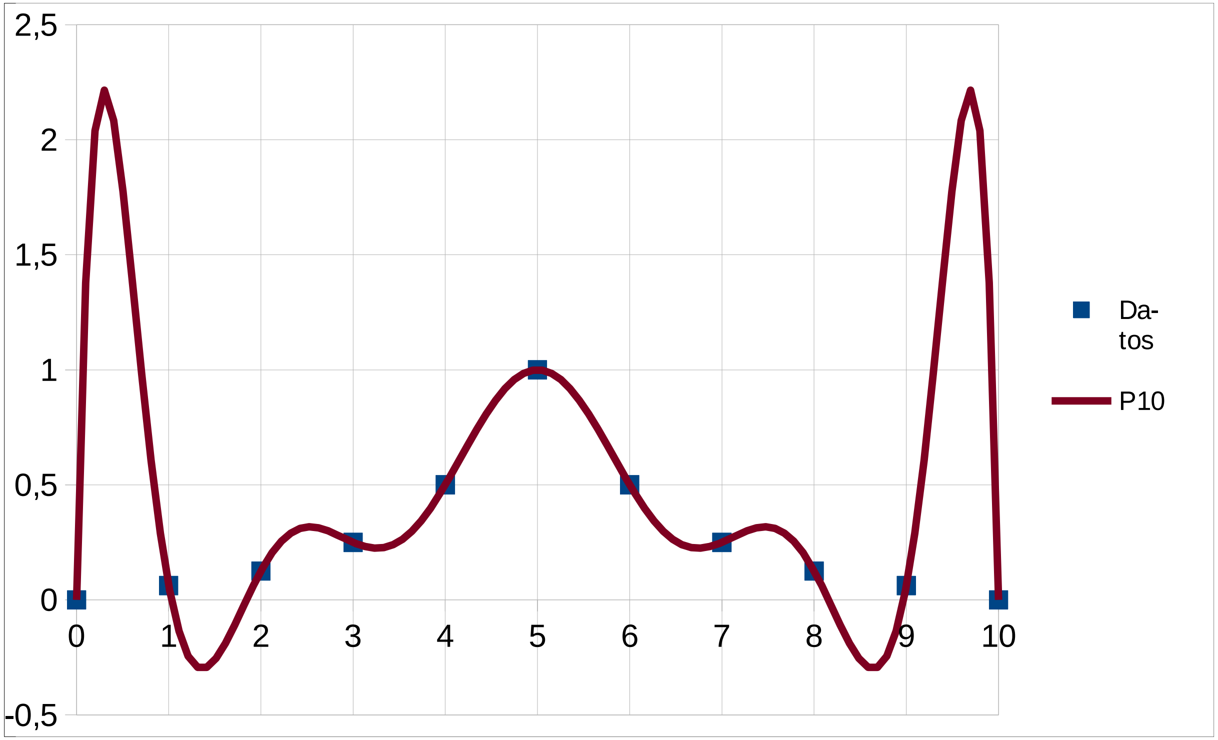
x	y	Δy	Δ^2y
1,5	3		
3	4	+(4-3)/(3-1,5) =0,6667	
4,5	3,5	+(3,5-3)/(4,5-1,5) =0,1667	+(0,1667-0,6667)/(4,5-3) =-0,3333

$$P_n(x)=3+0,6667(x-1,5)-0,3333(x-1,5)(x-3)$$

Interpolación polinomial

Una de las desventajas de las interpolaciones polinomiales vistas es que para **polinomios de órdenes altos** (>4) se **producen oscilaciones** que por lo general no son realistas. Este efecto se llama **fenómeno de Runge** y muestra una falta de **convergencia** a medida que N tiene a infinito.

x	y
0	0
1	0,0625
2	0,125
3	0,25
4	0,5
5	1
6	0,5
7	0,25
8	0,125
9	0,0625
10	0



Interpolación mediante splines cúbicos

Cuando se cuenta con muchos puntos, es más efectivo **interpolar de a trozos** y unir polinomios interpolantes de bajo grado para evitar oscilaciones.

Definición:

Supongamos que tenemos N+1 puntos $\{(x_k,y_k)\}$ cuyas abscisas están **ordenadas de manera creciente**, con $a=x_0<x_1<\ldots<x_n=b$. Se dice que una función S(x) es una "**cercha**" ("**spline**" en inglés) **cúbica** interpoladora para dichos datos si existen **N polinomios cúbicos** $S_k(x)$, que podemos escribir en función de unos coeficientes s_{k0}, s_{k1}, s_{k2}, s_{k3} como:

$$S_k(x)=s_{k,0}+s_{k,1}(x-x_k)+s_{k,2}(x-x_k)^2+s_{k,3}(x-x_k)^3, \quad \text{para } x\in[x_k,x_{k+1}]\wedge k=0,1,\ldots,N-1$$

Y que cumplen las siguientes propiedades:

$$S(x_k)=y_k$$

$$S_k(x_{k+1})=S_{k+1}(x_{k+1})$$

$$S_k'(x_{k+1})=S_{k+1}'(x_{k+1})$$

$$S_k''(x_{k+1})=S_{k+1}''(x_{k+1})$$

Interpolación mediante splines cúbicos

Se denota como k_i a la derivada segunda en el "nudo i" (punto x_i).

Por la definición sabemos que los polinomios cúbicos tienen derivada segunda lineal y por lo tanto se pueden interpolar con polinomios de Lagrange entre dos puntos.

$$S''_{k(i,i+1)}(x) = k_i \, l_i(x) + k_{i+1} \, l_{i+1}(x) = \frac{k_i (x - x_{i+1}) - k_{i+1}(x - x_i)}{x_i - x_{i+1}}$$

siendo:

$$l_i(x) = \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} \quad , \quad l_{i+1}(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

Interpolación mediante splines cúbicos

Integrando dos veces...

$$S_{k(i,i+1)}(x) = \frac{k_i (x - x_{i+1})^3 - k_{i+1}(x - x_i)^3}{6(x_i - x_{i+1})} + A(x - x_{i+1}) + B(x - x_i)$$

Evaluando en x_i

$$S_{k(i,i+1)}(x_i) = y_i = \frac{k_i (x_i - x_{i+1})^3}{6(x_i - x_{i+1})} + A(x_i - x_{i+1})$$

Entonces se puede despejar A

$$A = \frac{y_i}{(x_i - x_{i+1})} - \frac{k_i}{6}(x_i - x_{i+1})$$

Analogamente evaluando en x_{i+1} se obtiene B

$$B = \frac{y_{i+1}}{(x_i - x_{i+1})} - \frac{k_{i+1}}{6}(x_i - x_{i+1})$$

Interpolación mediante splines cúbicos

Sustituyendo las constantes se obtiene la **expresión para la evaluación del polinomio interpolante**

$$S_{k(i,i+1)}(x)=\frac{k_i}{6}\left[\frac{(x-x_{i+1})^3}{x_i-x_{i+1}}-(x-x_{i+1})(x_i-x_{i+1})\right]-\frac{k_{i+1}}{6}\left[\frac{(x-x_i)^3}{x_i-x_{i+1}}-(x-x_i)(x_i-x_{i+1})\right]+\dots$$

$$\dots+\frac{y_i(x-x_{i+1})-y_{i+1}(x-x_i)}{x_i-x_{i+1}}$$

Para encontrar las k_i se utiliza la continuidad de la derivada primera en cada nudo

$$k_{i-1}(x_{i-1}-x_i)+2k_i(x_{i-1}-x_{i+1})+k_{i+1}(x_i-x_{i+1})=6\left(\frac{y_{i-1}-y_i}{x_{i-1}-x_i}-\frac{y_i-y_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\right)$$

Además se impone que la curvatura inicial k_0 y final k_N sea cero. Esta restricción se denomina "**condición natural**"

Interpolación mediante splines cúbicos

FCEN FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Ejemplo: usando interpolación por splines naturales cúbicos encontrar el valor de la función dada por la tabla, en x=1,5.

x	1	2	3	4	5
y	0	1	0	1	0

$$k_{i-1}(x_{i-1}-x_i)+2k_i(x_{i-1}-x_{i+1})+k_{i+1}(x_i-x_{i+1})=6\left(\frac{y_{i-1}-y_i}{x_{i-1}-x_i}-\frac{y_i-y_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\right)$$

$$0+4k_2+k_3=-12$$

$$k_2+4k_3+k_4=12$$

$$k_3+4k_4+0=-12$$

→Resolviendo el SEL: $k_2=k_4=-30/7\,,\,k_3=36/7$

El punto x=1,5 yace entre los puntos 1 y 2, entonces se evalúa $S_{k(1,2)}(x=1{,}5)$

$$S_{k(1,2)}(1{,}5)=\frac{k_1}{6}\left[\frac{(1{,}5-x_2)^3}{x_1-x_2}-(1{,}5-x_2)(x_1-x_2)\right]-\frac{k_2}{6}\left[\frac{(1{,}5-x_1)^3}{x_1-x_2}-(1{,}5-x_1)(x_1-x_2)\right]+\frac{y_1(1{,}5-x_2)-y_2(1{,}5-x_1)}{x_1-x_2}$$

$$S_{k(1,2)}(1{,}5)=\frac{k_1}{6}\left[-(1{,}5-x_2)^3+(1{,}5-x_2)\right]-\frac{k_2}{6}\left[-(1{,}5-x_1)^3+(1{,}5-x_1)\right]-y_1(1{,}5-x_2)-y_2(1{,}5-x_1)=0{,}7679$$

Ajuste por mínimos cuadrados

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Cuando se ajusta un conjunto de datos, **se aproxima la función desconocida** con otra que puede ser una función algebraica, exponencial, logarítmica, etc.

Al realizar la aproximación, **la función aproximante no pasa necesariamente por los puntos**.

El método es **muy útil para identificar líneas de tendencia** en nubes de puntos.

Sea f una función genérica con m parámetros: $f(x) = f(x; a_{1,} a_{2,} \dots, a_m)$
El método busca el mejor ajuste de los parámetros de la función respecto a los datos
Se observa la función del error cuadrático :

$$S(a_{1,} a_2, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^{n} [r_i]^2, \text{donde } r_i = y_i - f(x_i) \quad \text{se denomina residuo}$$

Y se minimiza para cada parámetro, es decir, $\dfrac{\partial S}{\partial a_k} = 0, k = 1,2, \dots, m$

En general se buscan ajustes con menos parámetros (m) que cantidad de puntos disponibles (n). Si m=n tendríamos una interpolación.

Ajuste por mínimos cuadrados

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Aplicación 1:

Ajuste de una recta (Regresión lineal)

$$f(x)=a+bx$$

$$S(a,b)=\sum_{i=1}^{n}(y_i-a-bx_i)^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial a}=\sum_{i=1}^{n}2(y_i-a-bx_i)(-1)=2\left(-\sum_{i=1}^{n}y_i+na+b\sum_{i=1}^{n}x_i\right)=0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b}=\sum_{i=1}^{n}2(y_i-a-bx_i)(-x_i)=2\left(-\sum_{i=1}^{n}x_iy_i+a\sum_{i=1}^{n}x_i+b\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)=0$$

Definiendo: $\bar{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i,\ \bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i$

se obtienen $a+\bar{x}b=\bar{y},\ a\bar{x}+\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)b=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_iy_i \rightarrow b=\frac{\sum y_i(x_i-\bar{x})}{\sum x_i(x_i-\bar{x})},\ a=\bar{y}-\bar{x}b$

Ajuste por mínimos cuadrados

Aplicación 2:

Ajuste de funciones algebraicas

$$f(x)=\sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x)$$

$$S(a,b)=\sum_{i=1}^{n}\left[y_i-\sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x_i)\right]^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_k}=-2\left\{\sum_{i=1}^{n}\left[y_i-\sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x_i)\right] f_k(x_i)\right\}=0 \rightarrow \sum_{j=1}^{m}\left[\sum_{i=1}^{n} f_j(x_i) f_k(x_i)\right] a_j=\sum_{i=1}^{n} y_i f_k(x_i)$$

En notación matricial resulta $Aa=b$

donde: $A_{kj}=\sum_{i=1}^{n} f_j(x_i) f_k(x_i),\ b_k=\sum_{i=1}^{n} y_i f_k(x_i)$

Ajuste por mínimos cuadrados

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Aplicación 3:

Ajuste de polinomios

$$f_j(x) = x^{j-1}$$

$$A_{kj} = \sum_{i=1}^{n} x_i^{j+k-2}, b_k = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i^{k-1}$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 & \dots & \sum x_i^m \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \dots & \sum x_i^{m+1} \\ & & & & \vdots \\ \sum x_i^{m-1} & \sum x_i^m & \sum x_i^{m+1} & \dots & \sum x_i^{2m-2} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \vdots \\ \sum y_i x_i^{m-1} \end{pmatrix}$$