4.- Aproximación Funcional e Interpolación

4.1 Introducción

Una de las mayores ventajas de aproximar información discreta o funciones complejas con funciones analíticas sencillas, radica en su mayor facilidad de evaluación y manipulación.
Las funciones de aproximación se obtienen por combinaciones lineales de elementos de familias de funciones denominadas elementales. En general tendrán la forma:

$$a_0 g_0(x) + a_1 g_1(x) + \ldots + a_n g_n(x)$$

en donde a_i, $0 \le i \le n$, son constantes por determinar y $g_i(x)$, $0 \le i \le n$ funciones de una familia particular. Los monomios en x (x^0, x, x^2, …) constituyen la familia o grupo más empleado; sus combinaciones generan aproximaciones del tipo polinomial

$$a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n$$

El grupo conocido como funciones de Fourier

$$1,\ sen\ x,\ cos\ x,\ sen\ 2x,\ cos\ 2x,\ \ldots,$$

Al combinarse linealmente, genera aproximaciones del tipo

$$a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_i \cos ix + \sum_{i=1}^{n} b_i senix$$

El grupo de funciones exponenciales

$$1, e^x, e^{2x}, \ldots$$

También puede usarse del modo siguiente

$$\sum_{i=0}^{n} a_i e^{ix}$$

De estos tres tipos de aproximaciones funcionales, las más comunes por su facilidad de manejo en evaluaciones, integraciones, derivaciones, etc., son las aproximaciones polinomiales.

Sea una función $f(x)$ dada en forma tabular

Puntos	0	1	2	…	n
X	x_0	x_1	x_2	…	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	…	$f(x_n)$

Tabla 4.1.

Para aproximar a f(x) por medio de un polinomio de tipo 4.2, se aplica alguno de los criterios siguientes: el del ajuste exacto o el de mínimos cuadrados.

La técnica del ajuste exacto consiste en encontrar una función polinomial que pase por los puntos dados en la tabla. El método de mínimos cuadrados consiste en hallar un polinomio que pase entre los puntos y que satisfaga la condición de minimizar la suma de las desviaciones (di) elevadas al cuadrado; es decir, que se cumpla:

$$\sum_{i=0}^{n}(d_i)^2 = mínimo$$

Cuando la información tabular de que se dispone es aproximada hasta cierto número de cifras significativas, por ejemplo las tablas de logaritmos o de funciones de Bessel, se recomienda usar ajuste exacto. En cambio si la información tiene errores considerables, como en el caso de datos experimentales, no tiene sentido encontrar un polinomio que pase por esos puntos sino más bien que pase entre ellos; entonces, el método de mínimos cuadrados es aplicable.

Una vez que se obtiene el polinomio de aproximación, éste puede usarse para obtener puntos adicionales a los existentes en la tabla, mediante su evaluación, lo que se conoce como interpolación. También puede derivarse o integrarse a fin de obtener información adicional de la función tabular.

A continuación se describen distintas formas de aproximar con polinomios obtenidos por ajuste exacto y su uso en la interpolación.

4.2 Aproximación polinomial simple

Supóngase que se tienen las siguientes tablas

Puntos	0	1	2	3	4	5	6
T(°C)	56.5	78.6	113.0	144.5	181.0	205.0	214.5
P(atm)	1	2	5	10	20	30	40

Tabla 4.2 Temperatura de ebullición de la acetona a diferentes presiones.

Puntos	0	1	2	3
T(°C)	56.5	113.0	181.0	214.5
P(atm)	1	5	10	40

Tabla 4.3 Temperatura de ebullición de la acetona a diferentes presiones.

Supóngase que sólo se tiene la segunda tabla (4.3) y se desea calcular la temperatura de ebullición de la acetona a 2atm de presión.

Una forma muy común de resolver este problema es sustituir los puntos (0) y (1) en la ecuación de la línea recta: $p(x) = a_0 + a_1x$, de tal modo que resultan dos ecuaciones con dos incógnitas que son a_0 y a_1. Con la solución del sistema se consigue una aproximación de primer grado, lo que permite efectuar interpolaciones lineales; es decir se sustituye el punto (0) en la ecuación de la línea recta y se obtiene

$56.5 = a_0 + 1*a_1$

y al sustituir el punto (1)

$113 = a_0 + 5*a_1$

Sistema que al resolverse da

$a_0 = 4.375$ y $a_1 = 14.125$

Por lo tanto, estos valores generan la ecuación

$p(x) = 42.375 + 14.125x$

La ecuación resultante puede emplearse para aproximar la temperatura cuando la presión es conocida. Al sustituir la presión $x = 2$ atm se obtiene una temperatura de 70.6°C. A este proceso se le conoce como interpolación.

Gráficamente la tabla 4.3 puede verse como una serie de puntos (0), (1), (2) y (3) en un plano P vs T, en donde si se unen con una línea los puntos (0) y (1), por búsqueda gráfica se obtiene T ≈ 70.6 °C, para P= 2 atm.

En realidad, esta interpolación sólo ha consistido en aproximar una función analítica desconocida [T=f(P)] dada en forma tabular por medio de una línea recta que pasa por los puntos (0) y (1).

Si se quisiera una aproximación mejor al valor verdadero de la temperatura buscada, podrían unierse más puntos de la tabla con una curva suave (sin picos), por ejemplo tres (0), (1) y (2) y gráficamente obtener T correspondiente a P = 2 atm.

Analíticamente el problema se resuelve al aproximar la función desconocida [T=f(P)] con un polinomio que pase por los tres puntos (0), (1) y (2). Este polinomio es una parábola y tiene la forma general

$$p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

Donde los parámetros a0, a1 y a2 se determinan sustituyendo cada uno de los tres puntos en la ecuación anterior es decir

$$56.5 = a_0 + a_1 1 + a_2 1^2$$

$$113 = a_0 + a_1 5 + a_2 5^2$$

$$181 = a_0 + a_1 20 + a_2 20^2$$

Al resolver el sistema se obtiene

A0= 39.85, a1=17.15, a2=-0.50482

De tal modo que la ecuación polinomial queda

$$p_2(x) = 39.85 + 17.15x - 0.50482x^2$$

Y puede emplearse para aproximar algún valor de la temperatura correspondiente a un valor de presión. Por ejemplo si x = 2 atm, entonces

$$T \approx p_2(2) = 39.85 + 17.15(2) - 0.50482(2) \approx 72.1°C$$

La aproximación a la temperatura “correcta” es obviamente mejor en este caso.

Obsérvese que ahora se ha aproximado la función desconocida [T=f(P)] con un polinomio de segundo grado (parábola) que pasa por los tres puntos más cercanos al valor buscado. En general, si se desea aproximar una función con un polinomio de grado n, se necesitan n+1 puntos, sustituidos en la ecuación polinomial de grado n:

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n$$

Generan un sistema de n+1 ecuaciones lineales en las incognitas ai, i= 0,1,2,…n.

Una vez resuelto el sistema se sustituyen los valores de ai en la ecuación con lo cual se obtiene el polinomio de aproximación polinomial simple.

Por otro lado, como se dijo al principio de este capítulo, puede tenerse una función conocida pero muy complicad, por ejemplo

$$f(x) = kx \ln x + \frac{1}{x}\sum_{m=0}^{\infty} c_m x^m$$

o

$$f(x) = \left(\frac{2}{x}\right)^{\frac{1}{2}} \sin x$$

La cual conviene, para propósitos prácticos, aproximar con otra función más sencilla, como polinomio. El procedimiento es generar una tabla de valores mediante la función original y a partir de dicha tabla aplicar el método descrito arriba.

4.3 Polinomios de Lagrange

El método de aproximación polinomial requiere la solución de un sistema de ecuaciones algebraicas lineales que, cuando el grado del polinomio es alto, puede presentar inconvenientes. Existen otros métodos de aproximación polinomial en que no se requiere resolver un sistema de ecuaciones lineales y los cálculos se realizan directamente, entre éstos se encuentra el de aproximación polinomial de Lagrange.

Se parte nuevamente de una función desconocida $f(x)$ dada en forma tabular y se asume que un polinomio de primer grado puede escribirse:

$$p(x) = a_0(x - x_1) + a_1(x - x_0) \qquad (4.x)$$

donde x_1 y x_0 son los argumentos de los puntos conocidos $[x_0, f(x_0)]$, $[x_1, f(x_1)]$ y a_0 y a_1 son dos coeficientes por determinar. Para encontrar el valor de a_0, se hace $x = x_0$ en la ecuación anterior que al despejar da :

$$a_0 = \frac{p(x_0)}{(x_0 - x_1)} = \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_1)} \qquad (4.x)$$

y para hallar el valor de a_1, se sustituye el valor de x con el de x_1, con lo que resulta

$$a_1 = \frac{p(x_1)}{(x_1 - x_0)} = \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_0)} \tag{4.x}$$

de tal modo que al sustituir las ecuaciones nos queda

$$p(x) = \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_1)}(x - x_1) + \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_0)}(x - x_0) \tag{4.x}$$

o en forma más compacta

$$p(x) = L_0(x) f(x_0) + L_1(x) f(x_1) \tag{4.x}$$

en donde

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \text{ y } L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \tag{4.x}$$

de igual manera, un polinomio de segundo grado puede escribirse

$$p_2(x) = a_0(x - x_1)(x - x_2) + a_1(x - x_0)(x - x_2) + a_2(x - x_0)(x - x_1) \tag{4.x}$$

de donde x_0, x_1 y x_2 son los argumentos correspondientes a los tres puntos conocidos $[x_0, f(x_0)]$, $[x_1, f(x_1)]$ y $[x_2, f(x_2)]$; los valores de a_0, a_1 y a_2 se encuentran sustituyendo $x = x_0$, $x = x_1$ y $x = x_2$ respectivamente, en la ecuación anterior para obtener:

$$a_0 = \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}, \quad a_1 = \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \text{ y } a_2 = \frac{f(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \tag{4.x}$$

Cuyo remplazo en dicha ecuación genera el siguiente polinomio

$$p_2(x) = L_0(x) f(x_0) + L_1(x) f(x_1) + L_2(x) f(x_2) \tag{4.x}$$

donde:

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}, \quad L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \text{ y } L_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

Por inducción el lector puede obtener polinomios de tercer, cuatro o n-ésimo grado; este último queda como se indica a continuación

$$p_n(x) = L_0(x) f(x_0) + L_1(x) f(x_1) + \ldots + L_n(x) f(x_n)$$

Donde

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)\ldots(x_0 - x_n)}$$

$$L_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)...(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)...(x_1-x_n)}$$

.

.

.

$$L_n(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)...(x_n-x_{n-1})}$$

que en forma más compacta y útil para programarse quedaría

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i)$$

donde

$$L_i(x) = \prod_{j=0, j\neq 1}^{n} \frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)}$$

Al combinarse linealmente con $f(x)$, los polinomios $L_i(x)$, denominados polinomios de Lagrange, generan una aproximación polinomial de Lagrange a la información dada en forma tabular.

4.4 Diferencias Divididas

Por definición de derivada en el punto x_0 de una función analítica $f(x)$ se tiene

$$f'(x) = \lim_{x \to x_o} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \qquad (4.x)$$

Sin embargo cuando la función es definida de forma tabular la ecuación 4.x no se puede aplicar. En este caso la derivada solo puede obtenerse de manera aproximada. Por ejemplo si se desea la derivada en el punto x, tal que $x_0 < x < x_1$, entonces esta se puede obtener a traves de la siguiente ecuación:

$$f'(x) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}, \; x_0 < x < x_1 \qquad (4.x)$$

El lado derecho de 4.x se conoce como la *primera diferencia dividida* de $f(x)$ respecto a los argumentos x_0 y x_1, y se denota generalmente por:

$$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \qquad (4.x)$$

La relación entre la primera diferencia dividida y la primera derivada queda establecida por el teorema del valor medio

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f'(\xi), \; \xi \in (x_1, x_2)$$

Siempre y cuando f(x) satisfaga las condiciones de aplicabilidad de dicho teorema.

Para obtener aproximaciones a derivadas de orden más alto, se usa nuevamente el concepto de diferencias divididas. Así la segunda diferencia dividida quedaria como:

$$f[x_0,x_1,x_2]=\frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0} \quad (4.x)$$

La tercera diferencia dividad como:

$$f[x_0,x_1,x_2,x_3]=\frac{f[x_1,x_2,x_3]-f[x_0,x_1,x_2]}{x_3-x_0} \quad (4.x)$$

De esta manera la diferencia dividida de orden *i* es:

$$f[x_0,x_1,x_2,..,x_i]=\frac{f[x_1,x_2,..,x_i]-f[x_0,x_1,..,x_{i-1}]}{x_i-x_0} \quad (4.x)$$

De aquí se puede observar que:
a) Se requieren i + 1 puntos
b) El numerador es la resta de dos diferencias de orden *i* -1 y el denominador es la resta de los argumentos no comunes en el numerador

4.5 Aproximación polinomial de Newton

Sea $f(x)$ una función dada en forma tabular:

Puntos	0	1	2	…	n
X	x_0	x_1	x_2	…	x_n
$f(x)$	$f[x_0]$	$f[x_1]$	$f[x_2]$	…	$f[x_n]$

Se desea aproximar a $f(x)$ por medio de un polinomio de grado uno que pase por los puntos (0) y (1). Dicho polinomio puede ser representado por:

$$p(x)=a_0+a_1(x-x_0) \quad (4.x)$$

env donde x_0 es la abscisa de punto (0) y a_0 y a_1 son constantes por determinar. Para encontrar el valor de a_0 se hace $x = x_0$ de donde $a_0 = p(x_0) = f[x_0]$ y a fin de encontrar el valor de a_1 se hace $x = x_1$, de donde $a_1 = (f[x_1] - f[x_0])/(x_{1} - x_0)$ o sea la primera diferencia dividida $f[x_0, x_1]$.

Al sustituir los valores con estas constantes en la ecuación anterior queda:

$$p(x)=f[x_0]+(x-x_0)f[x_0,x_1] \quad (4.x)$$

O sea un polinomio de primer grado en términos de diferencias divididas

Si se desea aproximar f(x) por un polinomio de grado 2, entonces se requieren tre puntos (0), (1) y (2), y p(x) tiene la forma:

$$p_2(x)=a_0+a_1(x-x_0)+a_2(x-x_0)(x-x_1) \quad (4.x)$$

De donde x_0 y x_1 vuelven a ser las abscisas de los puntos (0) y (1) y a_0, a_1 y a_2 son constantes por determinar. Procediendo como en el caso anterior se tiene:

$$\text{si } x = x_0, \quad a_0 = p_2(x_0) = f[x_0] \qquad (4.x)$$

$$\text{si } x = x_1, \quad a_1 = \frac{f[x_0] - f[x_1]}{x_1 - x_0} = f[x_{0,} x_1] \qquad (4.x)$$

$$\text{si } x = x_2, \quad a_2 = \frac{f[x_2] - f[x_0] - (x_2 - x_0)\dfrac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \qquad (4.x)$$

Al desarrollar algebraicamente el numerado y el denominador de a_2 se llega a

$$a_2 = \frac{\dfrac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1} - \dfrac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0} = f[x_{0,} x_{1,} x_2] \qquad (4.x)$$

Que es la segunda diferencia dividida respecto a $x0$, x1 y x2

Con la sustitución de estos coeficientes en la ecuación anterior se obtiene

$$p_2(x) = f[x_0] + (x - x_0) f[x_{0,} x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_{0,} x_{1,} x_2] \qquad (4.x)$$

Que es un polinomio de segundo grado en términos de diferencias divididas

Por inducción se establece que en general para un polinomio de grado n en la forma

$$p_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \ldots + a_n(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n - \qquad (4.x)$$

Y que pasa por los puntos (0), (1), (2),..., (n); los coeficientes a_0, a_1,..., a_n están dados por:

$$a_0 = f[x_0] \qquad (4.x)$$

$$a_1 = f[x_{0,} x_1] \qquad (4.x)$$

$$a_2 = f[x_{0,} x_{1,} x_2] \qquad (4.x)$$

.

.

.

$$a_n = f[x_{0,} x_{1,} x_{2,} \ldots, x_n] \qquad (4.x)$$

Esta arpoximación polinomial se conoce como aproximación polinomial de Newton, la cual se puede esprexar sinteticamente como

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i) \tag{4.x}$$