

Análisis Experimental sobre Interpolación de Funciones y Búsqueda de Raíces

Autor

Tomás Lottersberger

10 de septiembre de 2024

Resumen

En este informe serán desarrollados y comparados algunos métodos de interpolación de funciones y búsqueda de raíces a través de experimentarlos en distintas funciones dadas. Se analizará el comportamiento de estos métodos cuando se toman puntos equispaciados y también cuando se utiliza un criterio para elegir estratégicamente dichos puntos en donde se minimice el error de la función interpoladora respecto a la función original.

1. Introducción

Entre los métodos numéricos, hay dos áreas especialmente relevantes y ampliamente utilizadas debido a su diversidad de aplicaciones prácticas y su alta precisión: la interpolación de funciones y las estrategias de búsqueda de raíces.

La interpolación de funciones se emplea para estimar valores de una función cuya fórmula exacta no se conoce, pero de la cual se tienen puntos específicos (o nodos). A través de la interpolación, es posible aproximarse a los valores de la función en los intervalos entre estos nodos. Esto es particularmente útil para estimar valores intermedios de un sensor, especialmente cuando no es factible obtener un exceso de datos debido a las características del objeto medido o por el alto costo computacional.

Por otro lado, las estrategias de búsqueda de raíces son métodos que permiten encontrar, de manera aproximada, los ceros de una función evaluándola a lo largo de su dominio. Dependiendo del método, se puede requerir más o menos información de la función, así como ciertas condiciones previas para que funcione. Estas estrategias son útiles en diversas situaciones, como la identificación de raíces, la estimación de cuándo una función alcanza un valor determinado, o la detección de intersecciones entre dos funciones.

En el informe se aplicarán distintos métodos de interpolación en varios escenarios, se analizarán los resultados obtenidos y se evaluará el error en cada caso. El objetivo es aprender a utilizar las herramientas que ofrecen los métodos numéricos para una y dos variables, enten-

der el impacto de usar nodos equispaciados y no equispaciados, y encontrar raíces en dos variables para identificar intersecciones de trayectorias. Para ello, se plantean cuatro situaciones.

1.1. Función de una variable $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

$$f_a(x) = -0.4 \cdot \tanh(50x) + 0.6$$

1.2. Función de dos variables $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} f_b(\mathbf{x}) = & 0.75 \cdot \exp\left(-\frac{(9x_1 - 2)^2}{4} - \frac{(9x_2 - 2)^2}{4}\right) \\ & + 0.75 \cdot \exp\left(-\frac{(9x_1 + 1)^2}{49} - \frac{(9x_2 + 1)^2}{10}\right) \\ & + 0.5 \cdot \exp\left(-\frac{(9x_1 - 7)^2}{4} - \frac{(9x_2 - 3)^2}{4}\right) \\ & - 0.2 \cdot \exp\left(-\frac{(9x_1 - 7)^2}{4} - \frac{(9x_2 - 3)^2}{4}\right) \end{aligned}$$

1.3. Trilateración de posiciones

La trilateración es una técnica geométrica para determinar la posición de un objeto conociendo su distancia a distintos puntos de referencia.

En este caso, estudiaremos la trayectoria de una partícula de la cual solo tenemos la información sobre la posición de tres sensores que la detectan y mediciones de ella en distintos instantes de tiempo. La posición de la partícula puede recuperarse resolviendo ecuaciones del tipo

$$\sqrt{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2 + (z - z_1)^2} = d_1$$

$$\sqrt{(x - x_2)^2 + (y - y_2)^2 + (z - z_2)^2} = d_2$$

$$\sqrt{(x - x_3)^2 + (y - y_3)^2 + (z - z_3)^2} = d_3$$

Dichas métricas serán sometidas a métodos que permitan obtener una noción de la trayectoria exacta de la partícula.

2. Métodos pre-existentes

2.1. Interpolación de Lagrange

La interpolación de Lagrange es una interpolación que crea un polinomio de Lagrange. Para crear este polinomio se utilizan $n+1$ nodos (o puntos) $(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n))$, y se calcula el único polinomio $P_n(x)$ de grado hasta n que pasa por todos los nodos dados.

El polinomio se define de la siguiente forma:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) L_{n,i}(x)$$

Donde las bases de Lagrange $L_{n,i}(x)$ se definen como:

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

Las bases de Lagrange $L_{n,i}(x)$ son polinomios de grado n que valen 1 en x_i y se anulan en $x_j \forall j \in \{0, 1, \dots, n\}, j \neq i$. La idea detrás de multiplicar las bases de Lagrange por el valor de la función es que se arme en el intervalo interpolado un polinomio con valores acordes a lo que uno esperaría ver en una función suave.

2.2. Interpolación con Splines Cúbicos

En este tipo de interpolación, en vez de crear un polinomio único que pase por todos los puntos, se genera una función a trozos, que con $n+1$ nodos genera n polinomios de un grado k , uno por cada intervalo entre los puntos. Estos polinomios están obligados a pasar por los puntos que definen su intervalo. Esto hace que los polinomios que son vecinos entre sí, igualen su valor en el nodo que comparten, asegurando así que la función sea continua. Siguiendo esta misma lógica, uno puede condicionar a los polinomios vecinos a coincidir en la derivada, la segunda derivada, y así sucesivamente. Esto hace que para cada k derivada igual, $S(x) \in C^k$.

Los splines cúbicos son splines con polinomios de grado 3. Esta categoría es especialmente extendida ya que es la cantidad mínima de grados con la que se puede plantear un sistema de ecuaciones. Siendo $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ los nodos para interpolar:

$$S_i(x) = a_i(x-x_i)^3 + b_i(x-x_i)^2 + c_i(x-x_i) + d_i, \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

$$S_i(x_i) = y_i$$

$$S_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$$

$$S'_i(x_i) = S'_{i-1}(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

$$S''_i(x_i) = S''_{i-1}(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

Lo que permite este sistema de ecuaciones es que todos los polinomios vecinos entre sí compartan punto, primera derivada y segunda derivada, lo que convierte a la función polinómica a trozos en una C^2 .

El inconveniente con este sistema de ecuaciones es que uno necesita dos condiciones más

para poder despejar las variables. Además, algunos requisitos no están definidos para los polinomios extremos $S_0(x)$ y $S_{n-1}(x)$. Para solucionar estos dos problemas, se imponen algunas de las siguientes dos igualdades.

Splines Naturales

$$S_0''(x_0) = S_{n-1}''(x_n) = 0$$

Splines Restringidos

$$S_0'(x_0) = f'(x_0), S_{n-1}'(x_n) = f'(x_n)$$

En la práctica, se suelen usar splines naturales ya que simplifican el sistema de ecuaciones y no dependen del conocimiento de la derivada de la función en los extremos. Es por esto que se utilizarán splines naturales.

2.3. Interpolación Bilineal o 2D

Es un método que utilizamos para interpolar funciones de R^2 usando una combinación de interpolaciones lineales. Suele aplicarse a funciones muestrales en mallas rectilíneas en 2D, pero también sirve para funciones definidas en otras mallas.

No es lineal, dado que es producto de dos funciones lineales. Primero se empieza interpolando en una dirección y luego en otra. De este modo, cada paso es lineal pero en su conjunción no.

Supongamos que se quiere encontrar el valor de la función desconocida f en el punto (x, y) . Se asume que conocemos el valor de f en los cuatro puntos $Q_{11} = (x_1, y_1)$, $Q_{12} = (x_1, y_2)$, $Q_{21} = (x_2, y_1)$ y $Q_{22} = (x_2, y_2)$.

Primero, se interpola linealmente en la dirección x .

$$f(x, y_1) = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} f(Q_{11}) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(Q_{21})$$

$$f(x, y_2) = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} f(Q_{12}) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(Q_{22})$$

Luego, se evalúa en la dirección y para obtener la estimación deseada:

$$f(x, y) = \frac{y_2 - y}{y_2 - y_1} f(x, y_1) + \frac{y - y_1}{y_2 - y_1} f(x, y_2)$$

$$= \frac{(f(Q_{11}))(x_2 - x)(y_2 - y) + f(Q_{21})(x - x_1)(y_2 - y))}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}$$

$$+ \frac{(f(Q_{12}))(x_2 - x)(y - y_1) + f(Q_{22})(x - x_1)(y - y_1))}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}$$

$$= \frac{1}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} \begin{bmatrix} x_2 - x & x - x_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(Q_{11}) & f(Q_{12}) \\ f(Q_{21}) & f(Q_{22}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_2 - y \\ y - y_1 \end{bmatrix}$$

Se obtiene el mismo resultado intercambiando los ejes (interpolando en el eje y , y luego evaluando para generar la nueva interpolación en el eje x).

2.4. Método de Newton-Raphson

Este es uno de los métodos de búsqueda de raíces. A partir de un valor inicial aproximado, se genera una sucesión que converge hacia la raíz de la función. La sucesión se define de la siguiente manera:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Donde $f'(x_n)$ es la derivada de la función en el punto x_n . La idea detrás de este método es utilizar la tangente en el punto actual para estimar el siguiente punto en la sucesión. Este método es especialmente eficaz cuando la función es suave y la estimación inicial está cerca de la raíz.

Este método es fácilmente generalizable a más dimensiones, tanto del dominio como de la imagen. En el caso de una función $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, el método queda expresado con la ecuación

$$\begin{bmatrix} x_{1,n+1} \\ x_{2,n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1,n} \\ x_{2,n} \end{bmatrix} - \left[J_f \left(\begin{bmatrix} x_{1,n} \\ x_{2,n} \end{bmatrix} \right) \right]^{-1} \cdot f \left(\begin{bmatrix} x_{1,n} \\ x_{2,n} \end{bmatrix} \right)$$

Donde J_f es el Jacobiano de la función f .

3. Método propuesto

3.1. Elección de nodos en \mathbb{R}

3.1.1. Nodos equispaciados

La elección de nodos equispaciados es utilizada para distribuir los puntos de interpolación de manera uniforme en un intervalo dado, facilitando la aproximación de la función. Esta es la forma más simple y directa de seleccionar nodos y es útil en muchas situaciones. Para poder tomar puntos equispaciados, se necesitan los extremos del intervalo $[a, b]$, y seguir la siguiente fórmula:

$$x_i = a + i \frac{b-a}{n}, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

En la realidad, la selección de puntos equispaciados generalmente no se realiza deliberadamente, sino que los datos naturalmente están dispuestos de esta manera.

3.1.2. Fenómeno de Runge

El fenómeno de Runge se refiere al efecto de oscilaciones no deseadas en la interpolación polinómica cuando se aumenta el grado del polinomio. Este fenómeno puede influir en la precisión de la interpolación, y traer grandes complicaciones a la hora de aplicar algún método numérico.

3.1.3. Polinomios de Chebyshev

Son una familia de polinomios ortogonales cuyas raíces son los nodos que minimizan el fenómeno de Runge.

En el intervalo $(-1, 1)$ son ortogonales a la función peso $w(x) = (1 + x^2)^{-1/2}$ que asigna diferentes grados de importancia a las aproximaciones en ciertas partes del intervalo. Pone mayor énfasis en los extremos del intervalo.

Los nodos se encuentran hallando las raíces de los polinomios, donde N es la cantidad de nodos que se desea obtener:

$$x_k = \cos\left(\frac{(2k-1)\pi}{2N}\right), k = 1, \dots, N$$

Una vez que se obtiene la cantidad deseada de nodos, si uno quiere trabajar con un intervalo distinto al $[-1, 1]$, se llevan los nodos al intervalo $[a, b]$ mediante $X_k = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} X_k$

3.2. Elección de nodos en \mathbb{R}^2

En el contexto de la elección de nodos en \mathbb{R}^2 , los principios son similares a los de \mathbb{R} . Para nodos equispaciados, se puede crear una cuadrícula de puntos equispaciados en el plano, pero esto puede conducir a un fenómeno de Runge más pronunciado. Los nodos de Chebyshev, que distribuyen los puntos de interpolación de manera no uniforme, concentrándose en los extremos del dominio, pueden ayudar a minimizar este fenómeno. Tal como dice el Teorema de No Free Lunch, no existe un algoritmo de optimización que sea universalmente superior para todos los tipos de problemas, lo que puede implicar un compromiso entre la precisión de la interpolación y la complejidad computacional.

3.3. Criterios de error

3.3.1. Error Mediano Absoluto

El error mediano absoluto es una métrica que se utiliza para medir la precisión de una inter-

polación, obteniendo la mediana de los errores absolutos entre la función original y la interpolada. Es una medida confiable del error, ya que no se ve influenciada por valores atípicos. Aunque podría parecer conveniente usar el error promedio para esta estimación, en la práctica este enfoque puede no ser útil, ya que los valores extremos pueden distorsionar el promedio. Por esta razón, en el ámbito de la ingeniería, la mediana se considera una opción más adecuada.

$$error_{mediano} = \text{mediana}(|f(x_i) - P(x_i)|)$$

$$i \in Dom(P) - \{x_0, \dots, x_n\}$$

3.3.2. Error Máximo Absoluto

El error máximo absoluto se utiliza como un criterio para identificar el mayor error en valor absoluto entre la función original y la interpolación, ofreciendo una idea sobre la precisión de la aproximación. Proporciona una medida del peor escenario de error.

$$error_{máximo} = \max_{x_i} |f(x_i) - P(x_i)|,$$

$$i \in Dom(P) - \{x_0, \dots, x_n\}$$

4. Experimentación

En esta sección, se presentarán los resultados obtenidos de analizar los diferentes métodos numéricos propuestos en los estudios de caso que se plantearon al comienzo de este informe.

4.1. En función de una variable

4.1.1. Interpolación de Lagrange

Haciendo uso de nodos equispaciados, mediante el método de interpolación de Lagrange conseguimos una aproximación a la función

$f_a(x)$, aunque esto nos causase el fenómeno de Runge en aquellos puntos donde la función "ground truth" sea más cambiante y ello no pueda verse en la interpolación, por éste motivo es que luego se utilizaron los polinomios de Chebyshev, con los cuales se pudo determinar con más precisión cuáles puntos no equispaciados son más convenientes para realizar la interpolación.

En la figura 1 se puede observar la función original (ground truth) y las diferentes interpolaciones realizadas teniendo en cuenta las observaciones hechas anteriormente.

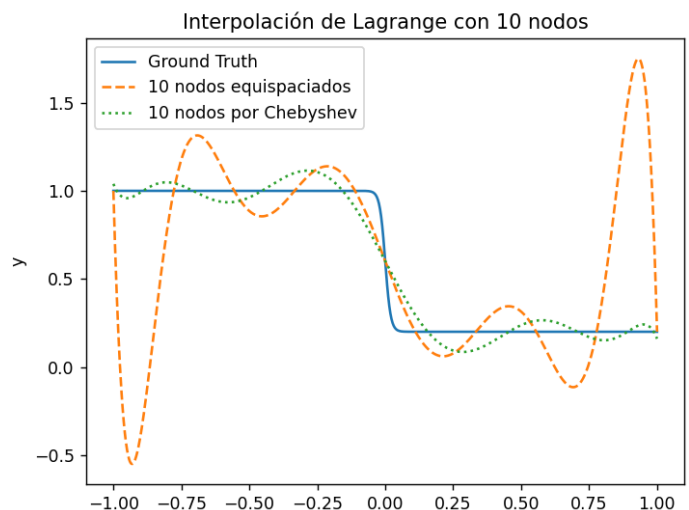


Figura 1: Comparación entre la función ground truth y las interpolaciones de Lagrange realizadas con nodos equispaciados y nodos determinados a través de los polinomios de Chebyshev.

En la figura 2 se puede observar la diferencia que hay entre la selección aleatoria de nodos equispaciados y la utilización de un método como el de los polinomios de Chebyshev para dicha selección.

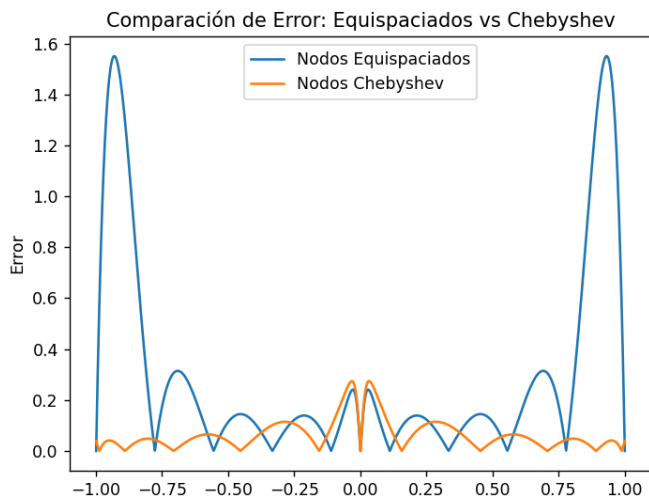


Figura 2: Comparación entre los errores ocurridos para la interpolación de Lagrange al usar nodos equipaciados y nodos determinados por los polinomios de Chebyshev.

4.1.2. Interpolación con Splines Cúbicos

Además de la interpolación de Lagrange, otro método numérico utilizado fueron los splines cúbicos. Uno asumiría que, así como en la interpolación de Lagrange, los splines cúbicos, al también ser polinomios, se verían beneficiados de utilizar nodos no equipaciados como los de Chebyshev, pero esto no es verdad. A diferencia de la interpolación de Lagrange, los splines no suman grados a los polinomios a medida que se tienen más puntos, por lo que no sufren del fenómeno de Runge. Además, cada polinomio de los splines se arma en función de sus vecinos, por lo que utilizar nodos no equipaciados lo único que causa es mayor error entre los nodos más alejados del intervalo.

En la figura 3 se puede observar que, si bien hay una leve mejora al usar los nodos determinados por los polinomios de Chebyshev, no es una diferencia considerable como la que había al usar la interpolación de Lagrange.

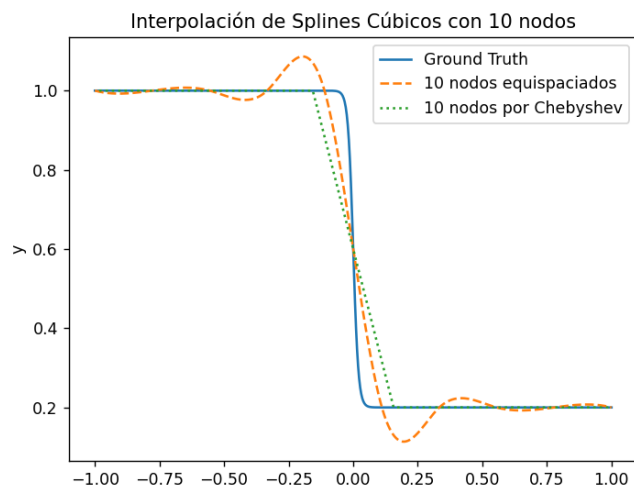


Figura 3: Comparación entre la función ground truth y las interpolaciones de Splines Cúbicos realizadas con nodos equipaciados y nodos determinados a través de los polinomios de Chebyshev.

4.2. En función de dos variables

El análisis de las interpolaciones fue extendido a funciones con múltiples variables, con el caso de $f_b(\mathbf{x})$.

La interpolación que se utilizará en este apartado se basa en splines, por lo que Chebyshev no resultará eficiente en este caso de estudio. La razón por la cual se puede afirmar que los splines serán subóptimos radica en la forma en que se generan las interpolaciones con dos variables. Primero se realiza la interpolación en un eje y luego en el otro. En la primera aproximación, se presenta el error mencionado en la sección anterior, y el nuevo spline cúbico no se basará en nodos de alta calidad, lo que aumentará aún más ese error.

Lo que se realizó fue una interpolación bilinear. La ventaja de interpolar linealmente es que es el método más barato computacionalmente, por lo que aproxima más rápido y se permiten una mayor cantidad de nodos.

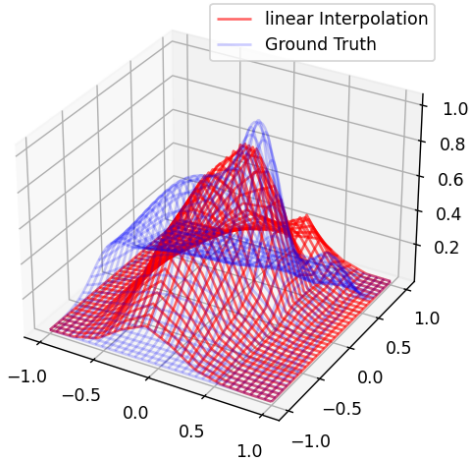


Figura 4: Gráfico 3D de la función ground truth y de la interpolación bilinear realizada.

La desventaja de este enfoque es que no representa la función con gran exactitud, lo que genera un error significativo (ver Figura 5) en intervalos donde la derivada tiene un gran valor absoluto. Sin embargo, sigue siendo un método útil para una aproximación inicial.

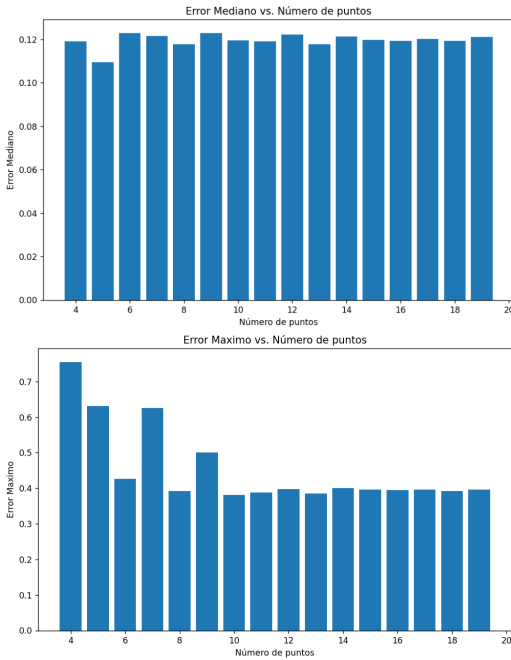


Figura 5: Histograma con los errores medianos y máximos detectados en base a la cantidad de nodos equispaciados.

4.3. Trayectoria de la partícula

Teniendo en cuenta que se cuenta con un sistema de ecuaciones no-lineal del cual se puede extraer la posición de la partícula en distintos instantes de tiempo, puede resolverse iterativamente mediante el método analizado anteriormente de Newton-Raphson, para esto se hará uso del método *newton* de la librería de Python *scipy.optimize*, el cual utiliza un x_0 estimativo que se ha determinado en el origen. El proceso se repite para todas las mediciones de distancia. Cada estimación inicial se puede mejorar utilizando la solución anterior como la nueva estimación inicial, lo que ayuda a estabilizar el proceso iterativo.

Una vez que se obtienen las posiciones (x, y, z) de la partícula para diferentes mediciones, se aplican splines cúbicos para generar una trayectoria continua que suavice los puntos discretos.

Comparación de Trayectorias en 3D

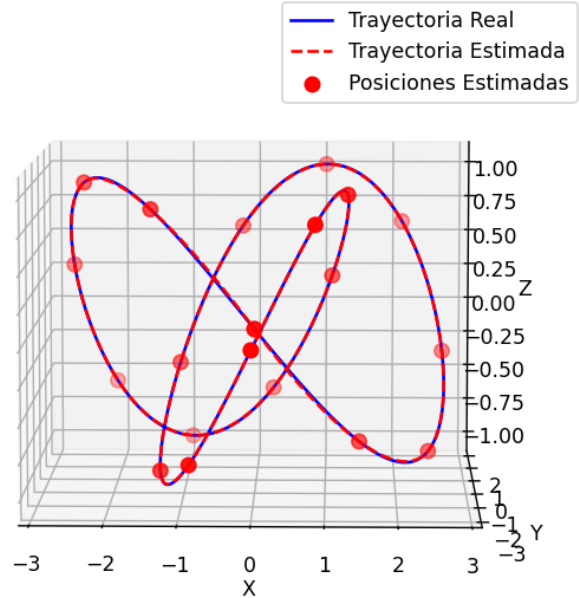


Figura 6: Comparación entre la trayectoria "ground truth" y la estimada a través de interpolar con splines cúbicos los puntos obtenidos a través de la resolución del sistema de ecuaciones no-lineales.

En la figura 6 se puede observar que la trayectoria estimada es muy buena, ya que la interpolación resulta distar muy poco de la trayectoria real de la partícula, este error ocurre, como vemos en la figura 7, en los extremos del intervalo de tiempo, aún así se presentan en una escala muy baja ya que son del orden de 10^{-3} .

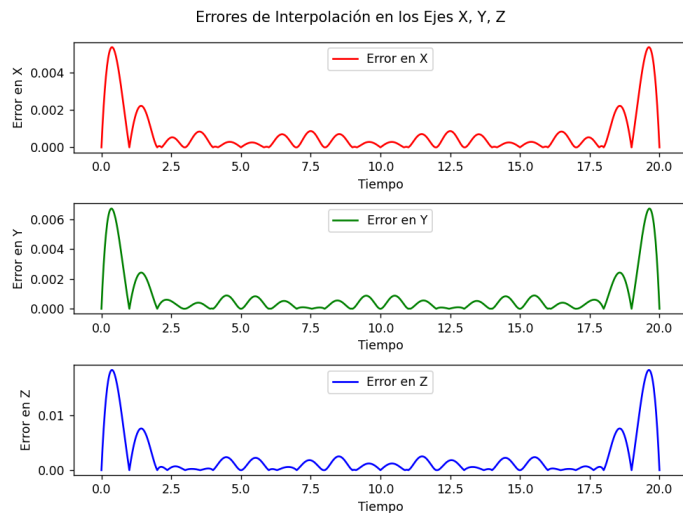


Figura 7: Error de la interpolación por splines cúbicos de la trayectoria estimada respecto al tiempo en que se mueve la partícula.

5. Conclusiones

En este estudio, se examinaron en detalle diversas técnicas y métodos de interpolación numérica. Mediante un análisis exhaustivo y una serie de experimentos se logró una comprensión sólida de las fortalezas, limitaciones y aplicaciones de cada enfoque en diferentes contextos prácticos. Uno de los descubrimientos más importantes fue la relevancia de elegir correctamente el método de interpolación y la distribución de los nodos. Se observó que, en general, a mayor cantidad de nodos, se obtiene una mejor aproximación de la función objetivo. Sin embargo, esta tendencia no se cumple en el caso de la inter-

polación de Lagrange con nodos equiespaciados, donde el fenómeno de Runge puede causar oscilaciones significativas y disminuir la precisión, especialmente en los extremos del intervalo. Para abordar este problema, se utilizaron con éxito los nodos de Chebyshev, que están distribuidos de manera no uniforme y están diseñados específicamente para minimizar el error en esta interpolación. Esta estrategia demostró ser efectiva, reduciendo drásticamente el error asociado al polinomio de Lagrange y permitiendo obtener aproximaciones más precisas. A pesar de esto, los splines cúbicos ofrecieron mejores resultados que el polinomio de Lagrange, incluso al usar nodos de Chebyshev. Una posible razón es que las funciones no polinómicas difícilmente pueden representarse con un único polinomio, y resulta más razonable afirmar que, dentro de ciertos intervalos, se asemejan a un polinomio específico, pero en el siguiente subintervalo, probablemente se parezcan más a otro polinomio diferente.

En la reconstrucción de trayectorias a partir de mediciones dispersas, el método de Newton-Raphson ha demostrado ser una solución eficaz para calcular intersecciones, ya que puede aplicarse fácilmente a cualquier cantidad de dimensiones. Un aspecto interesante que surge al interpolar una trayectoria paramétrica utilizando splines cúbicos de manera coordinada es que la derivada de la función f se obtiene de manera sencilla, ya que solo es necesario derivar cada coordenada por separado, lo cual la librería Scipy hace de forma automática. Aunque esto pueda parecer poco relevante, f puede interpretarse como la velocidad del vehículo en cada instante, y f' como la aceleración. Esto resulta extremadamente útil en ciertos contextos de ingeniería, ya que, con un conjunto limitado de puntos, es posible estimar no solo la trayectoria del vehículo, sino también su velocidad y aceleración.

En cuanto a las limitaciones y posibles desarrollos futuros, es importante reconocer que los

métodos de interpolación tienen un alcance limitado y pueden enfrentar dificultades al aproximar funciones con características particulares, como discontinuidades o cambios bruscos. En esos casos, podría ser necesario explorar técnicas alternativas o complementarias.

6. Bibliografía

1. Burden, R. L., Faires, J. D., & Burden, A. M. (2015). Numerical analysis.
2. Wikipedia. (s.f.). Bilinear interpolation. https://en.wikipedia.org/wiki/Bilinear_interpolation
3. Wikipedia. (s.f.). Newton's method in optimization. https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_method_in_optimization
4. Runge, Carl (1901), "Über empirische Funktionen und die Interpolation zwischen äquidistanten Ordinaten", Zeitschrift für Mathematik und Physik, 46: 224–243. www.archive.org
5. NumPy. <https://numpy.org/devdocs/>
6. matplotlib.pyplot. https://matplotlib.org/3.5.3/api/_as_gen/matplotlib.pyplot.html
7. scipy.interpolate. <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/interpolate.html>
8. scipy.optimize. <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/optimize.html>