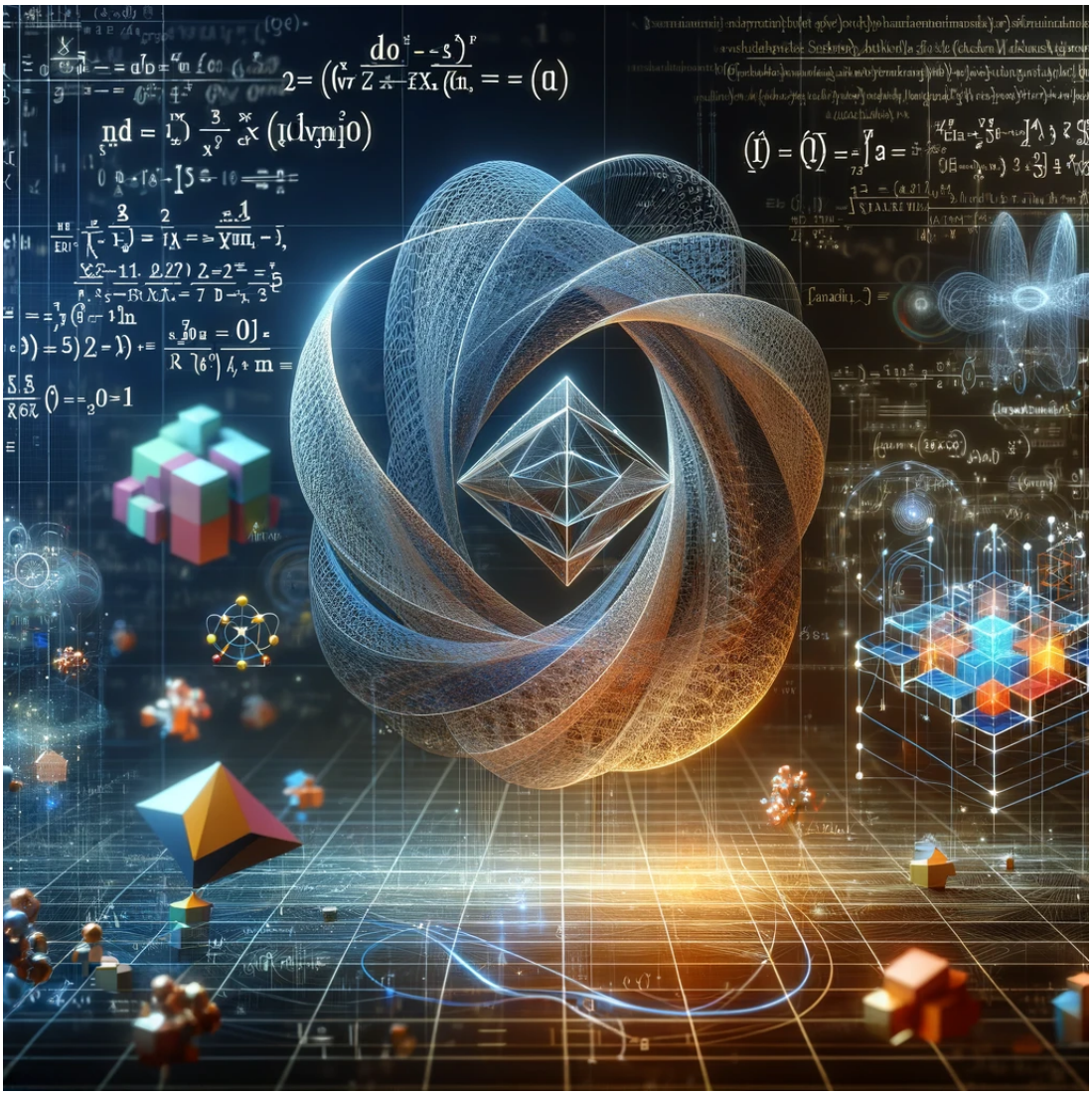
Informe Bloque III

Computación Científica

Aingeru García Blas

Índice

0. Introducción



Llegamos al final de la asignatura. Ha sido un viaje fascinante a lo largo del mundo de la Computación Científica. Me ha encantado, me ha permitido descubrir una veriedad herramientas las cuales guardo en mi *toolbox*; métodos que son de gran utilidad en el análisis y procesamiento de datos. Por ejemplo, desde la serie de (Súper) Taylor, que nos ha permitido realizar aproximaciones de funciones con una gran eficiencia, evitando operaciones de derivación de alto coste computacional (ó *muchos flops*), hasta los métodos de iteración, que han expuesto su potencia a la hora de buscar raíces mediante aproximaciones sucesivas. La extrapolación de Richardson, el método de Aitken; son ejemplos que me han encantado, ilustrativos y muy interesantes sobre cómo podemos mejorar resultados ó acelerar los procesos de convergencia.

En ésta última parte, nos adentramos en un nuevo terreno estudiando mecanismos como el de Newton y las diferencias divididas - técnica de interpolación que nos permite leer entre lineas - ver qué nos quieren decir las funciones, en base a los datos observados. Gracias a la asignatura y el profesor, me he aventurado a investigar y probar cosas nuevas, como se podrá apreciar en el segundo ejercicio. Gracias por todo.

1. Newton y las diferencias divididas

Enunciado:
Considera la función $f(x)$ definida por los siguientes datos:

$$\begin{aligned} f(-1) &= 1, \\ f(3) &= 4, \\ f(4) &= 2. \end{aligned}$$

Se busca construir un polinomio que interpole a $f(x)$.

(a) Si se añade un dato adicional, $f(5) = 10$, determina cuál sería el nuevo polinomio de interpolación.

(b) Aproxima el valor de $f(3{,}5)$ utilizando primero el polinomio interpolador de grado 2, P_2, y después encuentra el polinomio de grado 3, P_3. Realizar esta tarea de manera eficiente empleando el método de las diferencias divididas.

1.1. Interpolación Polinomial: Leer entre lineas

En este ejercicio, primero encontraremos un polinomio de grado 2, $P_2(x)$, que se ajuste a los tres puntos dados. Luego, lo ampliamos añadiendo un punto adicional para obtener un polinomio de grado 3, $P_3(x)$. Gracias a éste proceso, se podrá apreciar cómo las diferencias divididas son una herramienta eficiente para *tejer* estos puntos juntos en una función. Veremos cómo estas herramientas nos permiten **leer entre líneas**, ya que, con unos valores que la función toma en ciertos puntos, estos mecanismos nos van a proporcionar una descripción de *la historia que cuentan* sobre la relación entre los puntos.

Con lo que, para encontrar un polinomio que interpole a una función $f(x)$ dada por ciertos datos, vamos a utilizar el **método de las diferencias divididas de Newton**, tal y como se ha visto en clase.

1.2. Construyendo los polinomios de interpolación

Vamos a intentar encontrar el polinomio interpolador de Newton $P_2(x)$ de grado 2 que pasa por los tres puntos dados: $(-1, 1)$, $(3, 4)$ y $(4, 2)$ y después, el de grado 3 con el nuevo dato.

¿Cómo se construyen dichos polinomio?

$$P(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_{n-1}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-2})$$

donde a_0, a_1, a_2, a_{n-1} son las diferencias divididas que vamos a calcular a continuación, a partir de los puntos dados por el enunciado.

Luego, para hallar los polinomios de grados 2 y 3:

$$P_2(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$
$$P_3(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + f[x_0, x_1, x_2, x_3](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

Organicemos primero los datos y *montemos* el árbol de las diferencias divididas:

x_i	$f(x_i)$
-1	1
3	4
4	2

$$\begin{array}{cccc} 1 & & & \\ & f[x_0, x_1] & & \\ 4 & & f[x_0, x_1, x_2] & \\ & f[x_1, x_2] & & \\ 2 & & & \end{array}$$

Las diferencias divididas se calculan de la siguiente manera:

$$f[x_0] = f[-1] = 1$$
$$f[x_1] = f[3] = 4$$
$$f[x_2] = f[4] = 2$$

$$f[-1, 3] = \frac{f[3] - f[-1]}{3 - (-1)} = 0{,}75$$
$$f[3, 4] = \frac{f[4] - f[3]}{4 - 3} = -2{,}0$$
$$f[-1, 3, 4] = \frac{f[3, 4] - f[-1, 3]}{4 - (-1)} = -0{,}55$$

Ahora, como ya hemos visto cómo se construye el polinomio, veamos cómo nos queda para nuestro caso particularizado.

El Polinomio de grado 2 $P_2(x)$

$$P_2(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

Con lo que tenemos que el polinomio interpolador de grado 2 es:

$$P_2(x) = 1 + 0{,}75(x + 1) - 0{,}55(x + 1)(x - 3)$$

Agregando un nuevo dato x_3

Añadimos el punto $x_3 = 5$, donde $f[x_3] = f[5] = 10$ y recalculamos las diferencias divididas:

x_i	$f(x_i)$
-1	1
3	4
4	2
5	10

$$
\begin{array}{cccc}
1 & & & \\
 & f[x_0,x_1] & & \\
4 & & f[x_0,x_1,x_2] & \\
 & f[x_1,x_2] & & f[x_0,x_1,x_2,x_3] \\
2 & & f[x_1,x_2,x_3] & \\
 & f[x_2,x_3] & & \\
10 & & &
\end{array}
$$

Con lo que ahora tenemos los siguientes datos:

$$
\begin{aligned}
f[x_0] = f[-1] &= 1 \\
f[x_1] = f[3] &= 4 \\
f[x_2] = f[4] &= 2 \\
f[x_3] = f[5] &= 10
\end{aligned}
$$

y haciendo los cálculos al igual que en el apartado anterior, tenemos:

$$
\begin{aligned}
f[4,5] &= 8{,}0 \\
f[3,4,5] &= 5{,}0 \\
f[-1,3,4,5] &= 0{,}925
\end{aligned}
$$

El Polinomio de grado 3 $P_3(x)$

$$P_3(x) = f(x_0) + f[x_0,x_1](x-x_0) + f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1) + f[x_0,x_1,x_2,x_3](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$$

Ahora que disponemos de los datos suficientes, podemos *montar* el polinomio de grado 3, quedando el mismo tal que así:

$$P_3(x) = 1 + 0{,}75(x+1) - 0{,}55(x+1)(x-3) + 0{,}925(x+1)(x-3)(x-4)$$

1.3. Aproximaciones

Vamos a aproximar la función $f(3{,}5)$ utilizando los polinomios $P_2(x)$ y $P_3(x)$.

Si los colocamos juntos los dos polinomios, como era de esperar, podemos observar el hecho de que $P3$ se forma partiendo de $P2$:

$$P_2(x) = 1 + 0{,}75(x+1) - 0{,}55(x+1)(x-3)$$
$$P_3(x) = 1 + 0{,}75(x+1) - 0{,}55(x+1)(x-3) + 0{,}925(x+1)(x-3)(x-4)$$

Así que podemos expresarlos y calcularlos de la siguiente manera, ya particularizados a la aproximación qeu deseamos hacer a 3.5:

$$P_2(3{,}5) = 1 + 0{,}75(3{,}5+1) - 0{,}55(3{,}5+1)(3{,}5-3) = 3{,}1375$$
$$P_3(3{,}5) = P_2(3{,}5) + 0{,}925(3{,}5+1)(3{,}5-3)(3{,}5-4) = 2{,}096875$$

`Conclusión`

Haciendo éste ejercicio, he podido observar cómo el método de Newton se podría caracterizar, entre otras cosas, por construir polinomios interpoladores de maenra incremental. Esto nos permite añadir nuevos puntos o datos sin necesidad de empezar desde cero - extendemos el polinomio anterior (se vuelve a dar; *«nuevo término es igual al anterior más el complementario»*.

También se pude observar cómo al ir incrementando el grado del polinomio, se ofrecen aproximaciones más precisas (al igual que con el polinomio de Taylor - más términos, más precisión). Esto muestra la eficacia de las diferencias divididas de Newton en la interpolación polinomial y en la aproximación de valores; lo que nos revela conexiones que a primera vista, no podemos ver. Es decir, nos permite, una vez más, *leer entre lineas*.

2. Otras posibilidades: el polinomio de Hermite

Enunciado:

Considera el siguiente conjunto de datos y condiciones derivadas para una función desconocida $y(x)$, así como el siguiente polinomio:

x_i	$y(x_i)$	$y'(x_i)$
3	8	2
2	5	-
1	1	1

$$P(x) = 2 + 2(x-1) + (x-1)^2 + (-1)(x-1)^3$$

1. Se pide encontrar el polinomio de interpolación, $P(x)$, que se ajuste a estos datos.

2. Utilizar el polinomio encontrado para aproximar el valor de la función en $x = 1{,}5$.

2.1. Método de resolución

Tras investigar un poco, he decidido que, aunque este problema podría resolverse utilizando diferencias divididas para construir un polinomio de Newton, voy a optar por una resolución alternativa: mediante el polinomio interpolador de Hermite. El profesor mencionó algo brevemente sobre él y su relación con la asignatura de Cálculo - lo que anoté para mirar posteriormente, con lo que mi curiosidad me llevó a investigar sobre el tema. Empecé visitando recursos como este, de la universidad de Cornell, o, por supuesto, Wikipedia (Hermite Polynomials), o incluso videos como éste. En estos y otros sitios de Internet, he apreciado un factor común que dice que, el polinomio interpolardor de Hermite, extiende el concepto de interpolación polinómica para incluir no solo los valores de la función en ciertos puntos, sino también los valores de sus derivadas - es justo lo que tenemos en éste ejercicio, quereos un polinomio osculador.

Pero, al costarme ver una aplicación directa con las fórmulas y explicaciones tan complejas y, considerando que los CDs de la **Enciclopedia Encarta** yacen ahora en las olvidadas profundidades de un trastero, decidí pedirle ayuda a la Inteligencia Artificial: ChatGPT, para ver si me sería posible construir un polinomio general por mi mismo. Detallo los pasos más abajo. '*All in all*', internet, bien utilizado, es maravilloso y puede ser un grandísimo soporte para reforzar los estudios y, el conocimiento.

Durante la exposición del enunciado en clase, se mencionó que se podía utilizar calculadora, con lo que, ¿qué mejor calculadora que un **computador**? Gracias a las lecciones en clase, los comentarios del profesor, los cuadernillos y un poco de curiosidad e interés que me llevó a investigar a través de los vastos horizontes de internet; se me ocurrió realizar el ejercicio de una manera un poco diferente, para dar colofón final a la asignatura y hacer uso del computador para los cálculos. Al fin y al cabo, estamos en Computación Científica.

Con lo que, ilustraré ciertas partes de los cálculos con código en el lenguaje de programación `Python`, que tanto nos han hecho usar en diferentes asignaturas de éste tercer año (Modelos abstractos de Cómputo, Minería de Datos etc). Haré uso de la librería Sympy, la cual simplifica radicalmente los cálculos y nos permite el uso de *álgebra simbólica* para la resolución.

2.2. Construcción del polinomio de Hermite

Como he comentado, para el paso de construir mi polinomio de Hermite, pedí ayuda a ChatGPT. Veamos los pasos que me ha indicado:

1. **Identificar Condiciones**: Determine el número de condiciones (valores de función y derivadas) en los puntos dados.
2. **Establecer el Grado del Polinomio**: El grado del polinomio debe ser al menos igual al número total de condiciones menos uno.
3. **Formular el Polinomio**: Comience con un término constante y añada términos para cada nueva condición, asegurándose de que cada término nuevo sea cero en todos los puntos anteriores y contribuya a la nueva condición.
4. **Asegurar la Independencia de los Términos**: Cada nuevo término debe ser independiente de los anteriores, lo que se logra mediante factores como $(x - x_i)$.

Entonces, gracias a esto y siguiendo los pasos se puede encontrar como polinomio general:

$$P(x) = a + b(x-1) + c(x-1)^2 + d(x-1)^2(x-2) + e(x-1)^2(x-2)(x-3)$$

El polinomio es **osculador**; está diseñado para coincidir con una función y su derivada en uno o varios puntos. Con lo que, vamos bien.

2.3. Las 5 condiciones y la derivada.

- $f(1) = 1$, $f'(1) = 1$
- $f(2) = 5$
- $f(3) = 8$, $f'(3) = 2$

Como se ha comentado previamente, al tener 5 condiciones, se necesita un polinomio de grado 4 o menor (*si tienes n condiciones, necesitas un polinomio de grado n-1 como máximo para satisfacerlas*).

Veamos cómo calcular la derivada del polinomio del enunciado con Sympy:

```
from sympy import symbols, diff

# Defino las variables simbólicas, que serán los coeficinetes del px interpolador.
x, a, b, c, d, e = symbols('x a b c d e')

# Defino el px interpolador mencionado anteriormente
px = a + b*(x-1) + c*(x-1)**2 + d*(x-1)**2*(x-2) + e*(x-1)**2*(x-2)*(x-3)

# y obtengo su derivada, de cara a las condiciones.
px_derivada = diff(px, x)
```

Tras ejecutar y hacer un `print` para visualizar el output, obtenemos como derivada:

$$\begin{aligned} P'(x) = b &+ 2c(x-1) + d(2x-2)(x-2) + d(x-1)^2 \\ &+ e(2x-2)(x-1)^2(x-3) \\ &+ e(x-1)^2(x-2)(x-3) \\ &+ e(x-1)^2(x-2)^2 \end{aligned}$$

Paso 2: Aplicación de las Condiciones

Recordemos las condiciones de las que disponemos:

1. $P(1) = 1$.
2. $P'(1) = 1$.
3. $P(2) = 5$.
4. $P(3) = 8$.
5. $P'(3) = 2$.

Tengo el polinomio general, y tengo datos para la función y su derivada en varios puntos, luego puedo evaluar en el polinomio (y el derivado) en esos puntos e igualar al valor de la función que ya conocemos.

Para $f(1) = 1$

Sustituimos $x = 1$ en $P(x)$:

$$a = 1$$

Para $f'(1) = 1$

Calculamos la derivada de $P(x)$ y luego sustituimos $x = 1$:

$$b = 1$$

Para $f(2) = 5$

Sustituimos $x = 2$ en $P(x)$:

$$a + b + c = 5$$

Para $f(3) = 8$

Sustituimos $x = 3$ en $P(x)$:

$$a + 2b + 4c + 4d = 8$$

Y por último,

Para $f'(3) = 2$

Sustituimos $x = 3$ en la derivada de $P(x)$:

$$b + 4c + 8d + 4e = 2$$

Paso 3: Resolución del Sistema de Ecuaciones

Ahora, tras haber obtenido las ecuaciones, las voy a representar mediante un sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{cases} a - 1 = 0 \\ b - 1 = 0 \\ a + b + c - 5 = 0 \\ a + 2b + 4c + 4d - 8 = 0 \\ b + 4c + 8d + 4e - 2 = 0 \end{cases}$$

He resuelto haciendo uso de la librería Sympy el sistema de ecuaciones formado, con objeto de encontrar los coeficientes a, b, c, d, y e del polinomio.

```python
from sympy import Eq, solve

# Continuo con varibles del anterior fragmento de codigo
# y únicamente agrego imports nuevos, se asume que
# symbols y diff están ya importados etc

# Establezco las condiciones
condiciones = [
    Eq(px.subs(x, 1), 1),     # P(1) = 1
    Eq(px_derivada.subs(x, 1), 1), # P'(1) = 1
    Eq(px.subs(x, 2), 5),     # P(2) = 5
    Eq(px.subs(x, 3), 8),     # P(3) = 8
    Eq(px_derivada.subs(x, 3), 2)  # P'(3) = 2
]

# Resuelvo para obtener los coeficiente
coeficientes = solve(condiciones, (a, b, c, d, e))
```

Si hacemos un `print` de la variable `coeficientes`, veremos que los coeficientes encontrados son:

$$\begin{aligned} a &= 1, \\ b &= 1, \\ c &= 3, \\ d &= -\frac{7}{4}, \\ e &= \frac{3}{4}. \end{aligned}$$

Al fin, podemos retomar el polinomio de Hermite y sustituir los coeficientes encontrados. Obtenemos:

$$P(x) = 1 + (x-1) + 3(x-1)^2 - \frac{7}{4}(x-1)^2(x-2) + \frac{3}{4}(x-1)^2(x-2)(x-3)$$

Paso 4: Evaluación del Polinomio

Ya sólo faltaría evalúar el polinomio en $P(1,5)$:

```
# Evalúo P(1.5) usando el polinomio interpolador px y
# los coeficientes obtenidos
px_evaluado = px.subs(coeficientes).subs(x, 1.5)
resultado = px_evaluado.evalf()
print("P(1.5) =", resultado)
```

Con lo que, si hacemos `print("P(1.5) =", resultado)`el valor para `P(1.5)` es **2.609375**

2.4. Ejemplo de ejecución del script

Figura 1: Ejecución del script (resultado esquina inferior izquierda)

He subido el código a un repositorio de mi cuenta de GitHub y puede encontrarse en el siguiente enlace:

https://github.com/geru-scotland/computacion-cientifica/blob/master/interpolacion_hermite.py

`Conclusión`

En éste último ejercicio, ha destacado la utilidad y eficiencia del polinomio de Hermite en la interpolación. He combinado habilidades matemáticas con programación mediante Python y Sympy para lograr, tanto ajustar un polinomio a un conjunto de datos y sus derivadas, como demostrar la aplicación práctica de la teoría matemática en el cálculo computacional.

Gracias a ésta técnica de interpolación, se puede apreciar como se pueden conseguir aproximaciones precisas en ciertas zonas o puntos donde no disponemos de datos. No es magia, ¡son matemáticas!

«Las matemáticas son el lenguaje que describe los procesos del universo»

–Julian Zapiain

28 de Diciembre de 2023