1 Plantejament del problema

El problema general de la interpolació se'ns planteja quan tenim una funció tabulada (avaluada en un nombre determinat de punts) i volem avaluar-la en un punt que no és a la taula. Per exemple, abans de l'aparició de les calculadores i els ordinadors personals, s'empraven habitualment taules de logaritmes i de funcions trigonomètriques; quan es necessitava el valor de la funció f en un punt x que no era a la taula, es feia una interpolació, per exemple, lineal, identificant els punts x_k , x_{k+1} de la taula tals que $x_k < x < x_{k+1}$ i construint el segment entre els punts $(x_k, f(x_k))$ i $(x_{k+1}, f(x_{k+1}))$.

El problema de la interpolació està, doncs, íntimament lligat amb el de cercar les millors aproximacions de funcions "complicades" (difícils d'avaluar) mitjançant corbes "senzilles". Els polinomis ocupen un lloc destacat per la seva senzillesa i, a més, el teorema de Weierstrass ens assegura que, donada una funció contínua f sobre un interval [a,b], sempre podem trobar un polinomi p tal que el valor |f(x)-p(x)| sigui tan petit com es desitgi per a qualsevol $x \in [a,b]$. Això fa que els polinomis siguin les primeres funcions a considerar en una interpolació, la qual cosa ens porta a la teoria d'interpolació polinòmica.

Els n+1 punts diferents x_0, \ldots, x_n on coneixem el valor exacte de la funció f els anomenem nodes d'interpolació, i siguin $y_k = f(x_k)$ per a $k = 0, \ldots, n$ els valors que pren f en aquests nodes. Ens proposem trobar un polinomi de grau n que coincideixi amb f en els nodes x_0, \ldots, x_n ; aquest polinomi l'anomenarem polinomi d'interpolació de f en x_0, \ldots, x_n . Sota unes condicions adequades, podrem considerar que aquest polinomi avaluat en x (on x pertany a l'interval definit per x_0, \ldots, x_n) serà una bona aproximació de f(x).

Anem a demostrar l'existència i unicitat del polinomi d'interpolació $p(x) = a_0 + a_1x + \ldots + a_nx^n$. Si imposem les n+1 condicions $p(x_k) = y_k$ per a $k = 0, \ldots, n$ obtenim n+1 equacions amb n+1 incògnites (els coeficients a_i del polinomi). Aquest sistema d'equacions, escrit en forma matricial, és

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

La matriu M de coeficients d'aquest sistema és una matriu de Vandermonde quadrada d'ordre n+1, i sabem que té per determinant

$$\det M = \prod_{0 \le i < j \le n} (x_j - x_i),$$

per tant, com els nodes d'interpolació són diferents, aquest determinant és diferent de zero i el sistema és de Cramer, això és, existeix M^{-1} i el sistema és compatible determinat. Això

prova, doncs, que existeix un únic polinomi de grau menor o igual que n que interpola f en els punts x_0, \ldots, x_n .

2 Fórmula de Lagrange per a la interpolació

El càlcul del polinomi d'interpolació es pot fer de diverses maneres. El primer que se'ns pot acudir és resoldre el sistema d'equacions citat abans, però estaríem fent més càlculs dels necessaris, perquè sovint no ens cal conèixer explícitament tots els coeficients del polinomi, i l'únic que volem és avaluar-lo en un o dos punts desconeguts. Veiem ara un mètode de càlcul que ens estalviarà operacions.

Com abans, siguin x_0, \ldots, x_n els nodes d'interpolació, i $y_k = f(x_k)$ els valors que pren en els nodes la funció a interpolar. Definim els polinomis mònics $q_k(x)$ de grau n, per a $k = 0, \ldots, n$, com aquells que s'anul·len en tots els nodes excepte en x_k , això és,

$$q_k(x) = (x - x_0) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_n) = \prod_{\substack{j=0 \ j \neq k}}^n (x - x_j).$$

Llavors formem el polinomi

$$p(x) = \frac{y_0}{q_0(x_0)} q_0(x) + \frac{y_1}{q_1(x_1)} q_1(x) + \ldots + \frac{y_n}{q_n(x_n)} q_n(x), \tag{1}$$

que és de grau menor o igual que n en ser una combinació lineal dels $q_k(x)$. A més, per la manera com s'ha construït, observem que $p(x_k) = y_k$ per a tot k = 0, ..., n, de manera que p(x) és el polinomi d'interpolació en $x_0, ..., x_n$. Els polinomis $L_k(x) = q_k(x)/q_k(x_k)$ s'anomenen polinomis de Lagrange relatius als nodes $x_0, ..., x_n$, i llavors p(x) es pot reescriure de la forma

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k L_k(x),$$

que es coneix com fórmula de Lagrange per al polinomi d'interpolació. Observem que l'avantatge de calcular els $L_k(x)$ és que aquests no depenen de la funció a interpolar, només depenen dels nodes x_k . Això fa que un cop calculats per a uns nodes determinats, puguin ser usats per interpolar qualsevol funció en aquests nodes. En el cas particular que interpolem la funció constant f(x) = 1 en els nodes x_0, \ldots, x_n , és evident que el polinomi d'interpolació és la pròpia f (això és, p(x) = 1), i posant aquestes dades en la fórmula de Lagrange obtenim una important relació que verifiquen els polinomis de Lagrange:

$$1 = \sum_{k=0}^{n} L_k(x).$$

3 Anàlisi de l'error

Ens proposem ara estimar l'error que es comet en fer una interpolació polinòmica. Sigui $P_n(x)$ el polinomi d'interpolació de f(x) en els punts x_0, \ldots, x_n i sigui $R_n(x)$ el residu o error comès al prendre $P_n(x)$ per f(x), això és, $R_n(x) = f(x) - P_n(x)$. Evidentment, R_n és una funció que s'anul·la en els n+1 nodes, de manera que podem escriure

$$R_n(x) = C(x)(x - x_0) \dots (x - x_n)$$

per a una certa funció C(x). Fixem ara un punt $x \in [x_0, x_n]$, diferent de tots els nodes, i definim, per a aquest x fixat, la funció

$$F(t) = f(t) - P_n(t) - C(x)(t - x_0) \dots (t - x_n).$$

Aquesta funció s'anul·la per a tots els nodes $t=x_k$ i també per a t=x, de manera que té n+2 zeros diferents en l'interval $[x_0,x_n]$. Segons el teorema de Rolle, la seva derivada F'(t) tindrà n+1 zeros diferents en $[x_0,x_n]$; per la mateixa raó, F''(t) tindrà n zeros diferents en $[x_0,x_n]$, i seguint el mateix raonament arribem a la conclusió que la derivada d'ordre n+1, $F^{(n+1)}(t)$, tindrà un zero en $[x_0,x_n]$, que anomenarem η . Ara bé, tenint en compte que la derivada d'ordre n+1 d'un polinomi de grau n és zero i que $\frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}t^{n+1}}(t-x_0)\dots(t-x_n)=\frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}t^{n+1}}t^{n+1}=(n+1)!$, tenim

$$0 = F^{(n+1)}(\eta) = f^{(n+1)}(\eta) - C(x)(n+1)!,$$

de manera que $C(x) = f^{(n+1)}(\eta)/(n+1)!$ i la fórmula del residu $R_n(x)$ queda

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}(x - x_0) \dots (x - x_n)$$

per a algun $\eta \in [x_0, x_n]$. Cal notar la gran semblança d'aquesta fórmula amb la del residu del polinomi de Taylor. El valor $f^{(n+1)}(\eta)$ és desconegut (entre altres coses, perquè no coneixem el valor de η), i el que es fa és trobar una fita de $f^{(n+1)}(x)$ en $[x_0, x_n]$ per obtenir, d'aquesta forma, una fita per a $R_n(x)$.

4 Mètode de les diferències dividides de Newton

La fórmula de Lagrange per obtenir el polinomi d'interpolació és útil quan els nodes són fixos, però si s'afegeixen nous nodes (per exemple, els que obtenim en fer successives interpolacions per obtenir millors aproximacions a la funció f) cal refer tots els càlculs. Newton

va idear un mètode amb el qual es poden afegir nous nodes tot aprofitant la feina ja feta. Concretament, va veure que el polinomi d'interpolació P_n en els nodes x_0, \ldots, x_n podia obtenir-se fàcilment a partir del P_{n-1} per als nodes x_0, \ldots, x_{n-1} . En efecte, el polinomi $P_n(x) - P_{n-1}(x)$ és de grau menor o igual que n i té arrels x_0, \ldots, x_{n-1} , per tant podem escriure'l com

$$P_n(x) - P_{n-1}(x) = A_n(x - x_0) \dots (x - x_{n-1}), \tag{2}$$

on A_n és el coeficient de x^n , i per tant coincidirà amb el coeficient de x^n de $P_n(x)$ (ja que P_{n-1} és de grau estrictament inferior a n). Però $P_n(x)$ és el mateix que en l'equació (1), i com en aquesta equació tots els $q_k(x)$ són polinomis mònics de grau n, podem concloure que

$$A_n = \frac{y_0}{q_0(x_0)} + \ldots + \frac{y_n}{q_n(x_n)}.$$

Aquestes constants A_1, A_2, \ldots, A_n tenen una especial importància i reben el nom de diferències dividides dels punts $(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)$. Ens hi referirem amb la següent notació:

$$A_k = f[x_0, \dots, x_k].$$

Amb aquesta notació i emprant la relació (2), podem escriure els successius polinomis d'interpolació com:

$$P_0(x) = y_0 = f[x_0],$$

$$P_1(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0),$$

$$P_2(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1),$$
...
$$P_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \dots (x - x_{n-1}).$$

En general, si x_{i_1}, \ldots, x_{i_k} és un subconjunt de k nodes, definirem $f[x_{i_1}, \ldots, x_{i_k}]$ com el coeficient principal del polinomi d'interpolació en aquests k nodes. Veiem ara uns resultats que ens permetran calcular d'una forma eficient aquestes diferències dividides.

Lema d'Aitken. Sigui f una funció contínua en un interval I i siguin $\{x_0, \ldots, x_n\} \subset I$. Per a cada subconjunt $S \subseteq \{x_0, \ldots, x_n\}$ sigui $P_S(x)$ el polinomi d'interpolació de f ens els nodes que són elements de S. Si $x_i, x_j \in S$ amb $i \neq j$, llavors

$$P_S(x) = \frac{(x - x_j)P_{S - \{x_j\}}(x) - (x - x_i)P_{S - \{x_i\}}(x)}{x_i - x_j}.$$

DEMOSTRACIÓ. Sigui m+1 el nombre d'elements de S. Hem de comprovar que el membre dret d'aquesta expressió, que anomenarem P(x), és un polinomi de grau menor o igual que m i que per a tot $x_k \in S$ es té $P(x_k) = f(x_k)$. La primera cosa és evident, perquè tant $P_{S-\{x_i\}}$ com $P_{S-\{x_i\}}$ tenen grau menor o igual a m-1 en ser polinomis d'interpolació en

m nodes, i en multiplicar-los per un polinomi de grau 1 s'obté un polinomi de grau menor o igual que m. D'altra banda,

$$P(x_i) = P_{S-\{x_i\}}(x_i) = f(x_i), \quad P(x_j) = P_{S-\{x_i\}}(x_j) = f(x_j),$$

i per a qualsevol altre $x_k \in S$ amb k diferent de i, j,

$$P(x_k) = \frac{(x_k - x_j)P_{S - \{x_j\}}(x_k) - (x_k - x_i)P_{S - \{x_i\}}(x_k)}{x_i - x_j} = \frac{(x_k - x_j)f(x_k) - (x_k - x_i)f(x_k)}{x_i - x_j} = f(x_k)\frac{(x_k - x_j) - (x_k - x_i)}{x_i - x_j} = f(x_k). \quad \Box$$

Teorema. Siguin x_0, \ldots, x_n nodes d'interpolació diferents, i siguin $i, j \in \{0, \ldots n\}$ amb $i \neq j$. Llavors la n-èsima diferència dividida $f[x_0, \ldots, x_n]$ pot calcular-se com

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{f[x_0, \dots, \hat{x_j}, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, \hat{x_i}, \dots, x_n]}{x_i - x_j},$$

on l'arc circumflex indica que s'ha omès el node sobre el qual es troba.

DEMOSTRACIÓ. Només cal aplicar el lema d'Aitken prenent $S = \{x_0, \dots, x_n\}$ i igualar els coeficients principals dels polinomis que apareixen a ambdues bandes de la igualtat.

A la pràctica, per calcular les diferències dividides emprant aquest resultat, es disposen en forma de taula triangular, i es van calculant progressivament per columnes. Mostrem un exemple amb 5 nodes:

$$x_0$$
 $f[x_0]$ $f[x_0, x_1]$ $f[x_1, x_2]$ $f[x_1, x_2]$ $f[x_1, x_2]$ $f[x_1, x_2]$ $f[x_1, x_2]$ $f[x_1, x_2, x_3]$ $f[x_2, x_3]$ $f[x_2, x_3]$ $f[x_2, x_3]$ $f[x_3]$ $f[x_2, x_3, x_4]$ $f[x_2, x_3, x_4]$ $f[x_3, x_4]$ $f[x_3, x_4]$ $f[x_4]$

Així, per exemple, $f[x_2, x_3] = \frac{f[x_2] - f[x_3]}{x_2 - x_3}$, o $f[x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_2, x_3]}{x_1 - x_3}$, etcètera. D'aquesta manera queda clar que si s'afegís un nou node al final de la taula, x_5 , $f[x_5]$, podem aprofitar tota la feina feta per calcular $f[x_4, x_5]$, $f[x_3, x_4, x_5]$... i així successivament fins acabar obtenint $f[x_0, \ldots, x_5]$. També convé observar que amb la definició donada de les diferències dividides no importa l'ordre dels nodes x_k , de manera que es poden afegir nous nodes a la taula sense preocupar-nos d'haver-los d'escriure ordenadament.

5 Interpolació mitjançant splines

Quan es cerca el polinomi d'interpolació amb un nombre elevat de nodes (per tant, un polinomi de grau elevat), i sobretot si els nodes són equiespaiats, és habitual que el polinomi produeixi grans oscil·lacions prop dels extrems de l'interval d'interpolació, cosa que es coneix com fenomen de Runge. Per evitar-ho, sorgeix la idea d'interpolar per diferents funcions en intervals adjacents, imposant condicions de contorn sobre cada interval per assegurar la continuïtat, derivabilitat, etc. Aquestes funcions a trossos reben el nom de splines. Aquesta tècnica té els seus fonaments en unes varetes de fusta que feien servir antigament els artesans per modelar corbes suaus i estèticament agradables, que passessin per uns punts fixats. Les teories físiques sobre l'elasticitat demostren que la vareta adopta la forma d'un polinomi cúbic entre cada parell de nodes consecutius; això ens porta a estudiar els splines cúbics, que a més resulten ser els més senzills. En general, les funcions spline són molt usades en el disseny assistit per ordinador (CAD); un exemple en són les corbes de Bézier.

Siguin, doncs, $x_0 < \ldots < x_n$ nodes d'interpolació en què coneixem els valors $y_k = f(x_k)$. L'objectiu és trobar n polinomis de tercer grau $p_1(x), \ldots, p_n(x)$ que conformin un spline que interpoli en els n+1 nodes i que verifiqui:

- 1. Sigui continu, això és, $p_k(x_k) = y_k$ i $p_k(x_{k-1}) = y_{k-1}$ (k = 1, ..., n).
- 2. Tingui derivada contínua, això és, $p_k'(x_k) = p_{k+1}'(x_k)$ (k = 1, ..., n-1).
- 3. Tingui curvatura (2a derivada) contínua: $p_k''(x_k) = p_{k+1}''(x_k)$ (k = 1, ..., n-1).

Veiem que tenim 4n-2 condicions per determinar els 4n coeficients desconeguts dels n polinomis cúbics. Necessitem dues condicions addicionals, que s'acostumen a imposar sobre els extrems x_0, x_n de l'spline. S'utilitzen diversos criteris, però els més naturals solen ser aquests tres: imposar que la curvatura sigui zero en els extrems $(p''_1(x_0) = p''_n(x_n) = 0)$, o bé que la 2a derivada en els extrems coincideixi amb la dels nodes adjacents $(p''_1(x_0) = p''_1(x_1)$ i $p''_n(x_n) = p''_n(x_{n-1})$, o bé que el pendent en els extrems sigui igual a uns valors prefixats $(p'_1(x_0) = y'_0 \text{ i } p'_n(x_n) = y'_n)$.

Per al càlcul eficient dels polinomis p_k s'escriuen de la forma $p_k(x) = a_k(x - x_k)^3 + b_k(x - x_k)^2 + c_k(x - x_k) + d_k$, de manera que en imposar la primera condició de pas pels nodes $(p_k(x_k) = y_k)$ s'obté immediatament $d_k = y_k$ per a cada k = 1, ..., n. Si anomenem $h_k = x_k - x_{k-1}$ i imposem la condició de continuïtat $p_k(x_{k-1}) = y_{k-1}$, obtenim les n equacions

$$a_k h_k^3 + b_k h_k^2 + c_k h_k = y_k - y_{k-1}$$

per a $k=1,\ldots,n$. El següent pas consisteix a expressar els coeficients a_k,b_k,c_k en funció d'unes noves variables s_k definides per $s_k=p_k''(x_k)$ $(k=1,\ldots,n)$ i $s_0=p_1''(x_0)$. Un cop fets els càlculs, i després d'haver imposat la condició de continuïtat de la derivada, s'obté un sistema de n-1 equacions lineals en les n+1 incògnites s_0,\ldots,s_k (n'ometem els detalls). Les dues equacions que falten per aconseguir un sistema quadrat s'obtenen de qualsevol dels criteris que hem citat abans sobre els extrems x_0,x_n . En qualsevol dels casos s'arriba a un sistema quadrat d'ordre n+1 en què la matriu de coeficients és simètrica, tridiagonal i amb diagonal dominant. Això últim assegura que el sistema tingui una única solució i, a més, sigui senzill de resoldre.

6 Interpolació òptima. Polinomis de Txebixev

Tornem a considerar el problema de la interpolació mitjançant un únic polinomi de grau n, $P_n(x)$, però ara des d'una altra perspectiva: ens proposar trobar la millor aproximació a la funció f en un interval [a, b], de manera que tenim llibertat per triar els nodes d'interpolació $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$. Recordem que l'error comès en aproximar f per P_n ve donat per l'expressió

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}(x-x_0)\dots(x-x_n),$$

per a algun $\eta \in [x_0, x_n]$. Si suposem que $|f^{(n+1)}(\eta)| \leq M$ per a tot $x \in [a, b]$, llavors una fita de $R_n(x)$ en [a, b] és

$$|R_n(x)| \le \frac{M}{(n+1)!} \max_{x \in [a,b]} |(x-x_0)\dots(x-x_n)|,$$

i la nostra millor estratègia consistirà a escollir els nodes $x_k \in [a, b]$ tals que la quantitat

$$\max_{x \in [a,b]} |(x - x_0) \dots (x - x_n)|$$

sigui mínima. Als nodes $x_k \in [a, b]$ que ho compleixin els anomenarem nodes d'interpolació òptima de grau n en [a, b], i com que no depenen de la funció a aproximar, un cop trobats es podran usar per aproximar qualsevol funció en [a, b].

Observem que el problema es pot replantejar com el de trobar un polinomi mònic de grau n+1 que tingui n+1 zeros en [a,b] i que el màxim valor absolut que pren en [a,b] sigui el més petit possible. A més, el problema es pot reduir a l'interval [-1,1] i després traslladar els resultats a [a,b] aplicant una homotècia que transformi [-1,1] en un interval de l'amplada de [a,b] (per tant, una homotècia de raó r=(b-a)/2) seguida d'una translació que el

desplaci a [a, b] (que equival a sumar (a + b)/2). Els polinomis de Txebixev ens donaran la solució. Vegem, abans, un lema:

Lema. Per a tot $n \in \mathbb{N}$, $\cos n\alpha$ es pot expressar com una combinació lineal de les potències $\cos^k \alpha$ per a $k = 0, \ldots, n$.

DEMOSTRACIÓ. Prenem la fórmula de De Moivre $\cos n\alpha + i \sin n\alpha = (\cos \alpha + i \sin \alpha)^n$. En desenvolupar el membre dret amb el binomi de Newton i quedar-nos amb la part real, ens queden sumands de la forma $\binom{n}{2k}(-1)^k \cos^{n-2k}\alpha \sin^{2k}\alpha$, i en virtut de la identitat $\sin^2 \alpha = 1 - \cos^2 \alpha$ podem expressar qualsevol potència parella de $\sin \alpha$ en funció de $\cos \alpha$. \square

Definició. El polinomi de Txebixev de grau n, $T_n(x)$, és aquell els coeficients del qual són els de les potències $\cos^k \alpha$ en l'expressió de $\cos n\alpha$ en termes de $\cos \alpha$. Dit d'una altra manera, $T_n(\cos \alpha) = \cos n\alpha$.

Així per exemple, $T_0(x)=1$, $T_1(x)=x$, $T_2(x)=2x^2-1$ perquè $\cos 0\alpha=1$, $\cos 1\alpha=\cos \alpha$, $\cos 2\alpha=2\cos^2\alpha-1$. La importància d'aquests polinomis radica en el següent resultat:

Teorema. Els nodes d'interpolació òptima de grau n en [-1,1] són els n+1 zeros del polinomi de Txebixev de grau n+1, $T_{n+1}(x)$.

Ometem la demostració. El teorema dóna implícitament la informació que tots els zeros de $T_{n+1}(x)$ es troben a [-1,1]. Això és senzill de veure perquè $T_{n+1}(\cos\alpha) = \cos(n+1)\alpha$ i per tant $\cos\alpha \in [-1,1]$. Els zeros seran, per tant, aquells $x_k = \cos\alpha_k$ tals que $\cos(n+1)\alpha_k = 0$, és a dir,

$$(n+1)\alpha_k = \frac{\pi}{2} + k\pi \Rightarrow \alpha_k = \frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)} \Rightarrow x_k = \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)}\right), \ k = 0, \dots, n.$$

És fàcil veure que el coeficient principal de $T_{n+1}(x)$ és 2^n , i per tant $\frac{1}{2^n}T_{n+1}(x)$ és el polinomi mònic de grau n+1 que té n+1 zeros en [-1,1] i que el màxim valor absolut que pren en aquest interval és el més petit possible. A més, tenint en compte que $T_{n+1}(x)$ pren els mateixos valors que un cosinus, assolirà els valors extrems 1 i -1, i per tant $\left|\frac{1}{2^n}T_{n+1}(x)\right| \leq \frac{1}{2^n}$ en [-1,1]. Amb tot això, i tenint en compte el que s'ha dit abans per passar de l'interval [-1,1] a un interval arbitrari [a,b], tenim la següent fita de l'error comès en interpolar prenent els n+1 nodes d'interpolació òptima:

$$|R_n(x)| \le \frac{2M}{(n+1)!} \left(\frac{b-a}{4}\right)^{n+1},$$

on M és una fita de $|f^{(n+1)}(x)|$ en [a,b], i els nodes d'interpolació òptima són

$$y_k = \frac{b-a}{2}\cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)}\right) + \frac{a+b}{2}.$$