问题的设定

有 $n+1$ 个数据点：$(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$

在每个区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上构造三次多项式连接

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$$

$$i = 0, \ldots, n-1$$

一共有 n 段样条函数，每一段有 4 个未知系数

样条的插值条件

条件 1：插值通过端点，即（$2n$ 条）

$$S_i(x_i) = y_i, \quad S_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$$

条件 2：一阶导数连续（$n-1$ 条）

$$S_i'(x_{i+1}) = S_{i+1}'(x_{i+1})$$

条件 3：二阶导数连续（$n-1$ 条）

$$S_i''(x_{i+1}) = S_{i+1}''(x_{i+1})$$

条件 4：自然边界条件

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

核心部分系数计算公式推导

令 $h_i = x_{i+1} - x_i$，$\delta_i = (y_{i+1} - y_i) / h_i$

三次样条的二阶导数计算公式为

$$S_i''(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_i)$$

有 $S_i''(x_i)=2c_i$ $\quad S_i''(x_{i+1})=2c_i+6d_i(x_{i+1}-x_i)=2c_i+6d_ih_i$

故 $\quad 2c_{i+1}=2c_i+6d_ih_i \Rightarrow \underline{d_i=(c_{i+1}-c_i)/3h_i}$ ※

在计算一阶导数计算公式前先进行前置公式推导

$$b_i=\delta_i-\frac{h_i}{3}(2c_i+c_{i+1})$$

由题知 $S_i(x_{i+1})=y_{i+1}$，因此

$$y_{i+1}=a_i+b_ih_i+c_ih_i^2+d_ih_i^3$$

又∵ $S_i(x_i)=y_i$，则 $a_i=y_i$，有

$$y_{i+1}=y_i+b_ih_i+c_ih_i^2+d_ih_i^3$$

$$\Rightarrow \delta_i=\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}=b_i+c_ih_i+d_ih_i^2$$

∵ $d_i=(c_{i+1}-c_i)/3h_i$，则 $d_ih_i^2=\frac{c_{i+1}-c_i}{3}h_i$

$$\Rightarrow \delta_i=b_i+c_ih_i+\frac{c_{i+1}-c_i}{3}h_i=\underline{b_i+\frac{2}{3}c_ih_i+\frac{1}{3}c_{i+1}h_i}$$

至此 b_i 被 c_i 表示了

计算三次样条的一阶计算公式。

由于在 x_i $(i=1,\dots,n-1)$ 导数连续，有 $S_{i-1}'(x_i)=S_i'(x_i)$

$S_i'(x)=b_i+2c_i(x-x_i)+3d_i(x-x_i)^2$，故

$S_{i-1}'(x_i)=b_{i-1}+2c_{i-1}h_{i-1}+3d_{i-1}h_{i-1}^2$

$S_i'(x_i)=b_i$

$$\Rightarrow b_i=b_{i-1}+2c_{i-1}h_{i-1}+3d_{i-1}h_{i-1}^2 \qquad (1)$$

又∵ $$b_i=\delta_i-\frac{h_i}{3}(2c_i+c_{i+1}) \qquad (2)$$

$$b_{i-1} = \delta_{i-1} - \frac{h_{i-1}}{3}(2c_{i-1} + c_i) \qquad (3)$$

将(2)(3)代入(1)中有

$$\delta_i - \frac{h_i}{3}(2c_i + c_{i+1}) = \delta_{i-1} - \frac{h_{i-1}}{3}(2c_{i-1} + c_i) + 2c_{i-1}h_{i-1} + 3d_{i-1}h_{i-1}^2 \qquad (4)$$

又 $d_{i-1} = \dfrac{c_i - c_{i-1}}{3h_{i-1}} \Rightarrow 3d_{i-1}h_{i-1}^2 = h_{i-1}(c_i - c_{i-1})$

$$(4) \Rightarrow \delta_i - \frac{h_i}{3}(2c_i + c_{i+1}) = \underbrace{\delta_{i-1} - \frac{h_{i-1}}{3}(2c_{i-1} + c_i) + 2c_{i-1}h_{i-1} + h_{i-1}(c_i - c_{i-1})}_{\Downarrow}$$

$$\delta_{i-1} + \frac{h_{i-1}}{3}c_{i-1} + \frac{2}{3}h_{i-1}c_i$$

$$\Downarrow$$

$$3\delta_i - h_i(2c_i + c_{i+1}) = 3\delta_{i-1} + h_{i-1}c_{i-1} + 2h_{i-1}c_i$$

$$\Rightarrow h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_i + h_{i-1})c_i + h_i c_{i+1} = 3(\delta_i - \delta_{i-1}) \qquad (i = 1, \cdots, n-1)$$

⇓ 根据此公式建立线性矩阵

根据设计有n段多项式，即 $\delta_0, \dots, \delta_{n-1}$，系数为 $c_0, \cdots, c_{n-1}$

但 b_{n-1} 需要依赖于 c_n，因此设计矩阵有 n+1 个系数 c 且 $c_0 = 0$，$c_n = 0$

加了满足自然曲线条件

矩阵A为（假设有5个点）

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_0 & 2(h_1+h_0) & h_1 & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 2(h_2+h_1) & h_2 & 0 \\ 0 & 0 & h_2 & 2(h_3+h_2) & h_3 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix}}_{c} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 3(\delta_1 - \delta_0) \\ 3(\delta_2 - \delta_1) \\ 3(\delta_3 - \delta_2) \\ 0 \end{bmatrix}}_{rhs}$$

$\Rightarrow \; c = A^{-1} \cdot rhs$

$$\begin{cases} d_i = (c(i+1) - c(i)) / 3h_i \\ b_i = \delta_i - h_i (2c_i + c(i+1)) / 3 \end{cases}$$

代求即可