三次样条（cubic spline）插值

阿贵
在西安上学

当已知某些点而不知道具体方程时候，最经常遇到的场景就是做实验，采集到数据的时候，我们通常有两种做法：拟合或者插值。拟合不要求方程通过所有的已知点，讲究神似，就是整体趋势一致。插值则是形似，每个已知点都必会穿过，但是高阶会出现龙格库塔现象，所以一般采用分段插值。今天我们就来说说这个分段三次样条插值。

顾名思义，分段就是把区间[a,b]分成n个区间 $[(x_0,x_1),(x_1,x_2),...,(x_{n-1},x_n)]$,共有n+1个点，其中两个端点 $x_0=a,x_n=b$ 。三次样条就是说每个小区间的曲线是一个三次方程，三次样条方程满足以下条件：

1，在每个分段小区间 $[x_i,x_{i+1}]$ 上， $S(x)=S_i(x)$ 都是一个三次方程

2，满足插值条件，即 $S(x_i)=y_i\quad(i=0,1,...,n)$

3, 曲线光滑，即 $S(x)$, $S'(x)$, $S''(x)$ 连续

则这个三次方程可以构造成如下形式：

$y=a_i+b_ix+c_ix^2+d_ix^3$ 这种形式,我们称这个方程为三次样条函数 $S_i(x)$ 。

从 $S_i(x)$ 可以看出每个小区间有四个未知数（ a_i,b_i,c_i,d_i ），有n个小区间，则有4n个未知数，要解出这些未知数，则我们需要4n个方程来求解。

求解

我们要找出4n个方程来求解4n个未知数

首先，由于所有点必须满足插值条件， $S(x_i)=y_i\quad(i=0,1,...,n)$ ，除了两个端点，所有n-1个内部点的每个点都满足 $S_i(x_{i+1})=y_{i+1}\quad S_{i+1}(x_{i+1})=y_{i+1}$ 前后两个分段三次方程，则有2(n-1)个方程，再加上两个端点分别满足第一个和最后一个三次方程，则总共有2n个方程；

其次，n-1个内部点的一阶导数应该是连续的，即在第 i 区间的末点和第 i+1 区间的起点是同一个点，它们的一阶导数应该也相等，即 $S'_i(x_{i+1})=S'_{i+1}(x_{i+1})$ 则有n-1个方程

另外，内部点的二阶导数也要连续，即 $S''_i(x_{i+1})=S''_{i+1}(x_{i+1})$,也有n-1个方程

现在总共有4n-2个方程了，还差两个方程就可以解出所有未知数了，这两个方程我们通过边界条件得到。

有三种边界条件：自然边界，固定边界，非节点边界

1，自然边界（Natural Spline）：指定端点二阶导数为0， $S''(x_0)=0=S''(x_n)$

2, 固定边界（Clamped Spline）: 指定端点一阶导数，这里分别定为A和B。即
$S'_0(x_0)=A,\quad S'_{n-1}(x_n)=B$

3, 非扭结边界(Not-A-Knot Spline): 强制第一个插值点的三阶导数值等于第二个点的三阶导数值，最后第一个点的三阶导数值等于倒数第二个点的三阶导数值. 即
$S'''_0(x_0)=S'''_1(x_1)\quad and\quad S'''_{n-2}(x_{n-1})=S'''_{n-1}(x_n)$

具体推导

$$S_i(x)=a_i+b_i(x-x_i)+c_i(x-x_i)^2+d_i(x-x_i)^3$$
$$S'_i(x)=b_i+2c_i(x-x_i)+3d_i(x-x_i)^2$$
$$S''_i(x)=2c_i+6d_i(x-x_i)$$

1, 由 $S_i(x_i)=a_i+b_i(x_i-x_i)+c_i(x_i-x_i)^2+d_i(x_i-x_i)^3=y_i$

可得 $a_i=y_i$

2，用 $h_i=x_{i+1}-x_i$ 表示步长，由 $S_i(x_{i+1})=y_{i+1}$ 推出
$a_i+h_ib_i+h_i^2c_i+h_i^3d_i=y_{i+1}$

3,由 $S'_i(x_{i+1})=S'_{i+1}(x_{i+1})$ 推出

$$S'_i(x_{i+1})=b_i+2c_i(x_{i+1}-x_i)+3d_i(x_{i+1}-x_i)^2=b_i+2c_ih+3d_ih^2$$
$$S'_{i+1}(x_{i+1})=b_{i+1}+2c_i(x_{i+1}-x_{i+1})+3d_i(x_{i+1}-x_{i+1})^2=b_{i+1}$$

可得

4，由 $S_i''(x_{i+1})=S_{i+1}''(x_{i+1})$ 推出 $2c_i+6h_id_i=2c_{i+1}$

设 $\boldsymbol{m_i}=\boldsymbol{S_i''}(\boldsymbol{x_i})=2\boldsymbol{c_i}$ 则 $2c_i+6h_id_i=2c_{i+1}$ 改写为 $m_i+6h_id_i=m_{i+1}$

可得

$d_i=\frac{m_{i+1}-m_i}{6h_i}$

5，现在 a_i,c_i,d_i 都可以表示成二阶导的关系式，将其代入到
$a_i+h_ib_i+h_i^2c_i+h_i^3d_i=y_{i+1}$ 可得

$b_i=\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}-\frac{h_i}{2}m_i-\frac{h_i}{6}(m_{i+1}-m_i)$

6，将 a_i,b_i,c_i,d_i 代入 $b_i+2h_ic_i+3h_i^2d_i=b_{i+1}$ 可得

$h_im_i+2(h_i+h_{i+1})m_{i+1}+h_{i+1}m_{i+2}=6\left[\frac{y_{i+2}-y_{i+1}}{h_{i+1}}-\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}\right]$

这样我们可以构造一个以m为未知数的线性方程组。

1）在自然边界条件时， $m_0=0\quad m_n=0$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & & \cdots & 0 \\ h_0 & 2(h_0+h_1) & h_1 & 0 & & \\ 0 & h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & \\ 0 & 0 & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\ 0 & \cdots & & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_n \end{bmatrix}$$

$$=6\begin{bmatrix} 0 \\ \frac{y_2-y_1}{h_1}-\frac{y_1-y_0}{h_0} \\ \frac{y_3-y_2}{h_2}-\frac{y_2-y_1}{h_1} \\ \frac{y_4-y_3}{h_3}-\frac{y_3-y_2}{h_2} \\ \vdots \\ \frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}}-\frac{y_{n-1}-y_{n-2}}{h_{n-2}} \\ 0 \end{bmatrix}$$

可以看出，左侧的系数矩阵为**严格对角占优矩阵**。即：每一行中对角元素的值的模 > 其余元素值的模之和。故线性方程组有唯一解，且雅克比迭代法、高斯-赛德尔迭代法和0<ω≤1的超松弛迭代法均收敛。

2）在夹持边界条件时，

$$\begin{aligned} S_0'(x_0)=A \Longrightarrow\quad & b_0=A \\ \Longrightarrow A=\frac{y_1-y_0}{h_0}-\frac{h_0}{2}m_0-\frac{h_0}{6}(m_1-m_0) \\ \Longrightarrow 2h_0m_0+h_0m_1=6\left[\frac{y_1-y_0}{h_0}-A\right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & S_{n-1}'(x_n)=B \quad\Rightarrow\quad b_{n-1}=B \\ & \quad\Rightarrow\quad h_{n-1}m_{n-1}+2h_{n-1}m_n=6\left[B-\frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}}\right] \end{aligned}$$

将上述两个公式带入方程组，新的方程组左侧为

$$\begin{bmatrix} 2h_0 & h_0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ h_0 & 2(h_0+h_1) & h_1 & 0 & & \vdots \\ 0 & h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & h_{n-1} & 2h_{n-1} \end{bmatrix}$$

3）在非扭结边界条件时，

$$\begin{aligned} & S_0'''(x_0)=S_1'''(x_1) \\ & S_{n-2}'''(x_{n-2})=S_{n-1}'''(x_{n-1}) \end{aligned}$$

由于

$S_i'''(x)=6d_i$，并且 $d_i=\frac{m_{i+1}-m_i}{6h_i}$

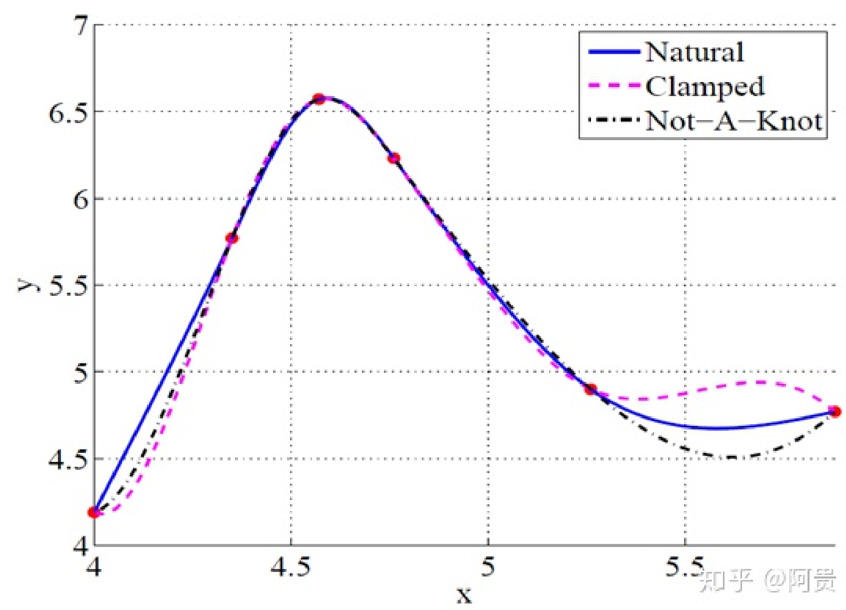
$d_0=d_1\quad d_{n-2}=d_{n-1}$

即

$$\begin{aligned} & h_1(m_1-m_0)=h_0(m_2-m_1) \\ & h_{n-1}(m_{n-1}-m_{n-2})=h_{n-2}(m_n-m_{n-1}) \end{aligned}$$

$$
\begin{bmatrix}
-h_1 & h_0+h_1 & -h_0 & \cdots & \cdots & 0 \\
h_0 & 2(h_0+h_1) & h_1 & 0 & & \vdots \\
0 & h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & \vdots \\
\vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
0 & \cdots & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\
0 & \cdots & \cdots & -h_{n-1} & h_{n-2}+h_{n-1} & -h_{n-2}
\end{bmatrix}
$$

下图可以看出不同的端点边界对样条曲线的影响：



算法总结

假定有n+1个数据节点

(x_0, y_0)，(x_1, y_1)，$(x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$

1，计算步长 $h_i = x_{i+1} - x_i$

2，将数据节点和指定的首位端点条件带入矩阵方程

3，解矩阵方程，求得二次微分值 m_i 。该矩阵为三对角矩阵，常见解法为高斯消元法，可以对系数矩阵进行LU分解，分解为单位下三角矩阵和上三角矩阵。即
$B = Ax = (LU)x = L(Ux) = Ly$

4，计算样条曲线的系数：

$a_i = y_i$

$b_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{h_i}{2} m_i - \frac{h_i}{6}(m_{i+1} - m_i)$

$c_i = \frac{m_i}{2}$

$d_i = \frac{m_{i+1} - m_i}{6h_i}$

5，在每个子区间 $x_i \le x \le x_{i+1}$ 中，创建方程

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

参考：

cnblogs.com/flysun027/p...

cnblogs.com/xpvincent/a...

发布于 2019-04-18 22:00

插值 数值分析