

三次样条 (cubic spline) 插值



阿贵

在西安上学

854 人赞同了该文章

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 $[(x_0,x_1),(x_1,x_2),\dots,(x_{n-1},x_n)]$,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 $S(x_i)=y_i\quad(i=0,1,\dots,n)$

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， $S(x_i)=y_i\quad(i=0,1,\dots,n)$ ，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

可得

$$b_i + 2h_i c_i + 3h_i^2 d_i = b_{i+1}$$

4, 由 $S''_i(x_{i+1}) = S''_{i+1}(x_{i+1})$ 推出 $2c_i + 6h_i d_i = 2c_{i+1}$

设 $m_i = S''_i(x_i) = 2c_i$ 则 $2c_i + 6h_i d_i = 2c_{i+1}$ 改写为 $m_i + 6h_i d_i = m_{i+1}$

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 $a_i + h_i b_i + h_i^2 c_i + h_i^3 d_i = y_{i+1}$ 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 $b_i + 2h_i c_i + 3h_i^2 d_i = b_{i+1}$ 可得

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

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, $m_0 = 0 \quad m_n = 0$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & & \cdots & 0 \\ h_0 & 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 & & \\ 0 & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & 0 & \\ 0 & 0 & h_2 & 2(h_2 + h_3) & h_3 & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \cdots & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & h_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_n \end{bmatrix} = 6 \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{y_2-y_1}{h_1} - \frac{y_1-y_0}{h_0} \\ \frac{y_3-y_2}{h_2} - \frac{y_2-y_1}{h_1} \\ \frac{y_4-y_3}{h_3} - \frac{y_3-y_2}{h_2} \\ \vdots \\ \frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{y_{n-1}-y_{n-2}}{h_{n-2}} \\ 0 \end{bmatrix}$$

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,

$$\begin{aligned} S'_0(x_0) = A &\implies b_0 = A \\ &\implies A = \frac{y_1 - y_0}{h_0} - \frac{h_0}{2} m_0 - \frac{h_0}{6} (m_1 - m_0) \\ &\implies 2h_0 m_0 + h_0 m_1 = 6 \left[\frac{y_1 - y_0}{h_0} - A \right] \end{aligned}$$

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

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,

$$S'''_0(x_0) = S'''_1(x_1)$$

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

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

即

$$h_1 \left(m_1 - m_0 \right) = h_0 \left(m_2 - m_1 \right)$$
$$h_{n-1} \left(m_{n-1} - m_{n-2} \right) = h_{n-2} \left(m_n - m_{n-1} \right)$$

新的方程组系数矩阵可写为：

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

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

$$\left(x_{\{0\}}, y_{\{0\}}\right), \quad \left(x_{\{1\}}, y_{\{1\}}\right), \quad \left(x_{\{2\}}, y_{\{2\}}\right),$$
$$\dots, \left(x_{\{n\}}, y_{\{n\}}\right)$$

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：

$$a_i=y_i$$

$$b_{\{i\}}=\frac{y_{\{i+1\}}-y_{\{i\}}}{h_{\{i\}}}-\frac{h_{\{i\}}}{2} m_{\{i\}}-\frac{h_{\{i\}}^3}{6}\left(m_{\{i+1\}}-m_{\{i\}}\right)$$

$$c_i=\frac{m_{\{i\}}}{2}$$

$$d_{\{i\}}=\frac{m_{\{i+1\}}-m_{\{i\}}}{6 h_{\{i\}}}$$

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

$$g_{\{i\}}(x)=a_{\{i\}}+b_{\{i\}}\left(x-x_{\{i\}}\right)+c_{\{i\}}\left(x-x_{\{i\}}\right)^2+d_{\{i\}}\left(x-x_{\{i\}}\right)^3$$

参考：

cnblogs.com/flysun027/p...

cnblogs.com/xpvincent/a...