神戸市立工業高等専門学校
電気工学科／電子工学科
専門科目「数値解析」

2017.5.19

曲線の推定2

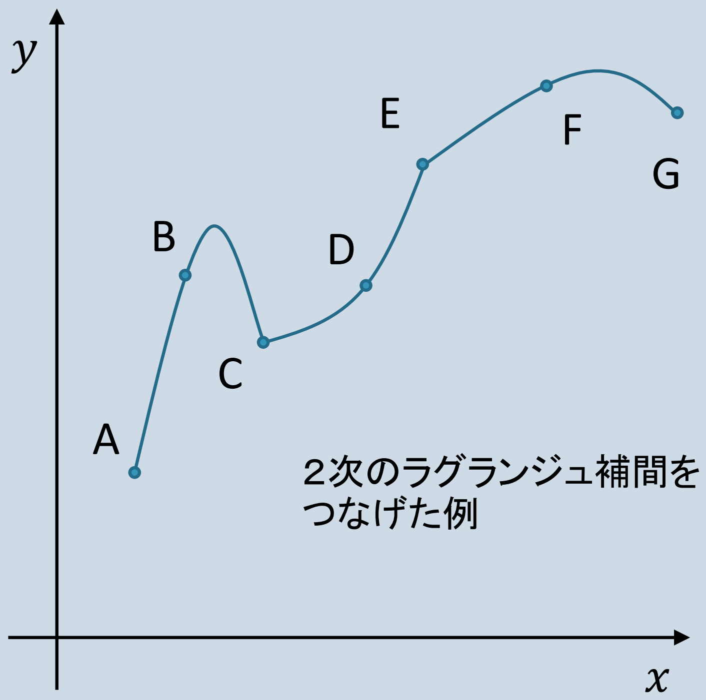
山浦 剛（tyamaura@riken.jp）

講義資料ページ

- http://climate.aics.riken.jp/members/yamaura/numerical_analysis.html

ラグランジュ補間の欠点

- ラグランジュ補間は与えられた点が多い場合、誤差が大きくなることがある（ルンゲ現象）
  - 高次導関数のほうが誤差が大きくなるため、ラグランジュ補間は低次の補間にとどめておくべき
- 回避策として、区分をずらしながら、低次のラグランジュ補間を行う
  - ３点ずつ、２次のラグランジュ補間を行っていく
- 問題点
  - 隣り合う区間の境界で、曲線が不連続になる
  - 高次の微分係数の計算ができない
  - あまり望ましい曲線とは言えない
- 「スプライン補間」を考える

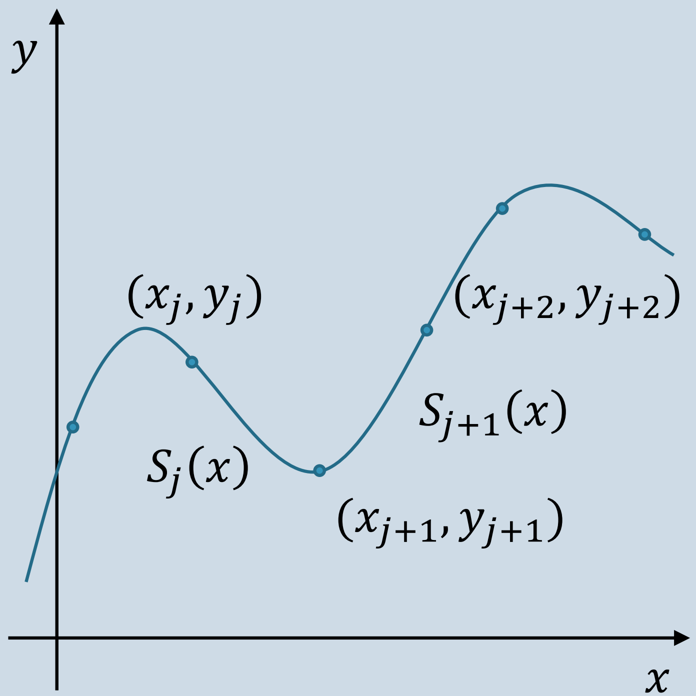


スプライン補間

- XY平面内にN+1個の点$(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_N, y_N)$ が与えられたとき、これらの点を全て通る曲線をxの3次の多項式を用いて、曲線 $y = S(x)$ の形で生成する。
  - ただし、$\mathrm{x}_0 < \mathrm{x}_1 < \mathrm{x}_2 < \cdots < \mathrm{x}_\mathrm{N}$ とする
- $x_j \leq x \leq x_{j+1}$ の区間で$S(x) = S_j(x)$ となる関数が与えられているとする。
  - $S_j(x) = a_j\left(x - x_j\right)^3 + b_j\left(x - x_j\right)^2 + c_j\left(x - x_j\right) + d_j \quad (j = 0,1,2, \ldots, N)$
- この3次の多項式$S(x)$ を「3次スプライン」と呼ぶ。
- 3次スプライン$S(x)$ に対し、以下の条件を与え、この4つの定数a_j, b_j, c_j, d_j を定める。
  1. 曲線$y = S(x)$ は連続であり、点$\left(x_j, y_j\right)$ $\{j = 0,1,2, \ldots, N\}$ を全て通る
  2. 区間の境目、すなわち$x = x_j$ $\{j = 0,1,2, \ldots, N-1\}$ で、$y = S(x)$ の1階微分係数および2階微分係数が連続である

スプライン補間

- 条件１より、
  1. $S_j(x_j) = y_j$ $\{j = 0,1,2, \dots, N-1\}$
  2. $S_j(x_{j+1}) = y_{j+1}$ $\{j = 0,1,2, \dots, N-1\}$
- 条件２より、
  1. $S_j'(x_{j+1}) = S_{j+1}'(x_{j+1})$ $\{j = 0,1,2, \dots, N-2\}$
  2. $S_j''(x_{j+1}) = S_{j+1}''(x_{j+1})$ $\{j = 0,1,2, \dots, N-2\}$
- この4つの条件を用いて定数a_j, b_j, c_j, d_j を定める。



スプライン補間

- $x = x_j$ における$S(x)$の2階微分係数を、次のように表す
  - $S''(x_j) = u_j \qquad \{j = 0,1,2,\dots,N\}$
  - 2階微分係数を一意にu_j と定義するので、条件2-2を満たす
- 3次スプラインの多項式から、この2階微分係数は次のように定まる
  - $S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j(x - x_j)^2 + c_j(x - x_j) + d_j$
  - $S_j''(x) = 6a_j(x - x_j) + 2b_j \qquad \{j = 0,1,2,\dots,N-1\}$
- ここで、b_j が次のように決まる
  - $S_j''(x_j) = 2b_j = u_j$
  - $b_j = \frac{u_j}{2} \qquad \{j = 0,1,2,\dots,N-1\}$

スプライン補間

- さらに、a_j が決まる
  - $S_j''(x_{j+1}) = 6a_j(x_{j+1} - x_j) + 2b_j = u_{j+1}$
  - $a_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{6(x_{j+1} - x_j)}$ $\{j = 0,1,2, \ldots, N-1\}$
- 条件1-1から、d_j が決まる
  - $d_j = y_j$ $\{j = 0,1,2, \ldots, N-1\}$
- 条件1-2を3次スプラインの多項式に適用し、c_j が決まる
  - $S_j(x_{j+1}) = a_j(x_{j+1} - x_j)^3 + b_j(x_{j+1} - x_j)^2 + c_j(x_{j+1} - x_j) + d_j = y_{j+1}$
  - $c_j = \frac{y_{j+1} - d_j}{x_{j+1} - x_j} - a_j(x_{j+1} - x_j)^2 - b_j(x_{j+1} - x_j) = \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{1}{6}(u_{j+1} - u_j)(x_{j+1} - x_j) - \frac{u_j}{2}(x_{j+1} - x_j)$
  - $c_j = \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{1}{6}(u_{j+1} + 2u_j)(x_{j+1} - x_j)$ $\{j = 0,1,2, \ldots, N-1\}$

スプライン補間

- 3次スプラインの多項式から、1階微分係数が決まる
  - $S_j'(x) = 3a_j(x - x_j)^2 + 2b_j(x - x_j) + c_j$
  - $S_j'(x_{j+1}) = 3a_j(x_{j+1} - x_j)^2 + 2b_j(x_{j+1} - x_j) + c_j$
  - $S_{j+1}'(x) = 3a_{j+1}(x - x_{j+1})^2 + 2b_{j+1}(x - x_{j+1}) + c_{j+1}$
  - $S_{j+1}'(x_{j+1}) = c_{j+1}$
- 条件2-1を適用する
  - $3a_j(x_{j+1} - x_j)^2 + 2b_j(x_{j+1} - x_j) + c_j = c_{j+1} \qquad \{j = 0,1,2,\ldots,N-2\}$

スプライン補間

- この式に、a_j, b_j, c_j, c_{j+1} を代入する
  - $\frac{u_{j+1}-u_j}{2(x_{j+1}-x_j)}(x_{j+1}-x_j)^2 + u_j(x_{j+1}-x_j) + \frac{y_{j+1}-y_j}{x_{j+1}-x_j} - \frac{1}{6}(u_{j+1}+2u_j)(x_{j+1}-x_j) = \frac{y_{j+2}-y_{j+1}}{x_{j+2}-x_{j+1}} - \frac{1}{6}(u_{j+2}+2u_{j+1})(x_{j+2}-x_{j+1})$
  - $3(u_{j+1}-u_j)(x_{j+1}-x_j) + 6u_j(x_{j+1}-x_j) - (u_{j+1}+2u_j)(x_{j+1}-x_j) + (u_{j+2}+2u_{j+1})(x_{j+2}-x_{j+1}) = 6\left\{\frac{y_{j+2}-y_{j+1}}{x_{j+2}-x_{j+1}} - \frac{y_{j+1}-y_j}{x_{j+1}-x_j}\right\}$
  - $(x_{j+1}-x_j)\{3(u_{j+1}-u_j) + 6u_j - (u_{j+1}+2u_j)\} + (u_{j+2}+2u_{j+1})(x_{j+2}-x_{j+1}) = 6\left\{\frac{y_{j+2}-y_{j+1}}{x_{j+2}-x_{j+1}} - \frac{y_{j+1}-y_j}{x_{j+1}-x_j}\right\}$
  - $(x_{j+1}-x_j)(2u_{j+1} + u_j) + (u_{j+2}+2u_{j+1})(x_{j+2}-x_{j+1}) = 6\left\{\frac{y_{j+2}-y_{j+1}}{x_{j+2}-x_{j+1}} - \frac{y_{j+1}-y_j}{x_{j+1}-x_j}\right\}$
  - $(x_{j+1}-x_j)u_j + 2(x_{j+1}-x_j)u_{j+1} + 2(x_{j+2}-x_{j+1})u_{j+1} + (x_{j+2}-x_{j+1})u_{j+2} = 6\left\{\frac{y_{j+2}-y_{j+1}}{x_{j+2}-x_{j+1}} - \frac{y_{j+1}-y_j}{x_{j+1}-x_j}\right\}$
  - $(x_{j+1}-x_j)u_j + 2(x_{j+2}-x_j)u_{j+1} + (x_{j+2}-x_{j+1})u_{j+2} = 6\left\{\frac{y_{j+2}-y_{j+1}}{x_{j+2}-x_{j+1}} - \frac{y_{j+1}-y_j}{x_{j+1}-x_j}\right\}$ $\{j = 0,1,2,\dots,N-2\}$

スプライン補間

- これを $j = 0,1,2, \dots , N - 2$ まで並べる
  - $$\begin{cases} h_0 u_0 + 2(h_0 + h_1)u_1 + h_1 u_2 = v_1 \\ h_1 u_1 + 2(h_1 + h_2)u_2 + h_2 u_3 = v_2 \\ \cdots \\ h_{N-2} u_{N-2} + 2(h_{N-2} + h_{N-1})u_{N-1} + h_{N-1} u_N = v_{N-1} \end{cases}$$
- ここで、h_j, v_j は次のように定義される
  - $h_j = x_{j+1} - x_j$ 　　　$\{j = 0,1,2, \dots , N - 1\}$
  - $v_j = 6\left\{\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}}\right\}$ 　　　$\{j = 1,2,3, \dots , N - 1\}$

スプライン補間

- 未知変数u_jが全部で$u_0 \sim u_N$までの$N+1$個存在する
- 一方、方程式は$N-1$個しかない
  - 未知変数の数に対し、方程式の数が足りない
  - 未知変数u_jを一意に決めることができない
- 条件を2つ加え、未知変数u_jを決定する
- 曲線の両端の点(x_0, y_0) (x_N, y_N)における曲線の振る舞いを決める ⇒ 境界条件
- 境界条件は様々なものが存在する
  - ここでは、「曲線の傾きの変化率をゼロとする」境界条件を採用する

スプライン補間

- 曲線の傾きの変化率がゼロ　⇒　2階微分係数がゼロ
  - $S''(x_0) = S''(x_N) = 0$
- これは即ち、条件2-2より、次のようになる
  - $S_0''(x_0) = S_{N-1}''(x_N) = 0$
- この境界条件でのスプラインを「自然スプライン」と呼ぶ
- この境界条件から、曲線の両端の点でのu_j が決まる
  - $S''(x_j) = u_j$
  - $u_0 = u_N = 0$

スプライン補間

- この境界条件を考慮して、方程式を行列で表現する
  - $$\begin{bmatrix} 2(h_0+h_1) & h_1 & & & \mathbf{0} \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & h_{N-3} & 2(h_{N-3}+h_{N-2}) & h_{N-2} \\ \mathbf{0} & & & h_{N-2} & 2(h_{N-2}+h_{N-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{N-2} \\ v_{N-1} \end{bmatrix}$$
  - u_1～u_{N-1} に関する連立一次方程式
- このh に関する係数行列は「3重対角行列」という、特殊な形をしている
  - 3重対角行列をもつ連立1次方程式は専用の解法が存在し、プログラムで素早く解くことができる

スプライン補間のアルゴリズム

1. $N+1$個の点$(x_j, y_j)\{j=0,1,2,\ldots,N\}$が与えられる
2. 3次スプライン$S(x)$を区分的に決定する
   - $S(x)=S_j(x)=a_j(x-x_j)^3+b_j(x-x_j)^2+c_j(x-x_j)+d_j \qquad (x_j \le x \le x_{j+1})$
3. $S''(x_j)=u_j\{j=0,1,2,\ldots,N\}$とおく
4. 曲線の両端における境界条件を$S''(x_0)=S''(x_N)=0$とする
5. 連立1次方程式を解き、$u_1 \sim u_{N-1}$を求める
6. $u_1 \sim u_{N-1}$から4つの定数a_j, b_j, c_j, d_jを求める
   - 3次スプライン$S(x)$が求められる

スプライン補間の精度

- 領域$a \le x \le b$で、点$(x_j, y_j)\{j = 0,1,2,\ldots,N\}$が与えられ、$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_N = b$とする
- 隣り合う点の間隔の最大値をhとする
  - $h = \max_{0 \le j \le N-1} (x_{j+1} - x_j)$
- 全ての点を通る関数$f(x)$を考える
  - $y_j = f(x_j) \qquad \{j = 0,1,2,\ldots,N\}$
- このときの自然スプライン$S(x)$と関数$f(x)$の誤差
  - $|f(x) - S(x)| \le \frac{13}{48} \max_{a \le \xi \le b} \left| f^{(2)}(\xi) \right| \times h^2$
  - これは自然スプライン$S(x)$で関数$f(x)$を近似したとき、領域$a \le x \le b$で点の数を増やすと、最悪でもその誤差はh^2に比例して小さくなることを示す
  - ラグランジュ補間とは異なり、点の数を増やすほどに近似の精度が良くなっていく