第六章 插　值

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

$$
\begin{aligned}
S_i(x) &= a_i + b_i\left(x-x_i\right) + c_i\left(x-x_i\right)^2 + d_i\left(x-x_i\right)^3 \\
S_i'(x) &= b_i + 2c_i\left(x-x_i\right) + 3d_i\left(x-x_i\right)^2 \\
S_i''(x) &= 2c_i + 6d_i\left(x-x_i\right)
\end{aligned}
$$

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

可得 $a_i = y_i$

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

3,由 $S_i'\left(x_{i+1}\right) = S_{i+1}'\left(x_{i+1}\right)$ 推出

$$
\begin{aligned}
S_i'\left(x_{i+1}\right) &= b_i + 2c_i\left(x_{i+1}-x_i\right) + 3d_i\left(x_{i+1}-x_i\right)^2 = b_i + 2c_i h + 3d_i h^2 \\
S_{i+1}'\left(x_{i+1}\right) &= b_{i+1} + 2c_i\left(x_{i+1}-x_{i+1}\right) + 3d_i\left(x_{i+1}-x_{i+1}\right)^2 = b_{i+1}
\end{aligned}
$$

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 $2c_i+6h_id_i=2c_{i+1}$

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， $m_0 = 0 \quad m_n = 0$

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

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

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，

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

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

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，

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

由于

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

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

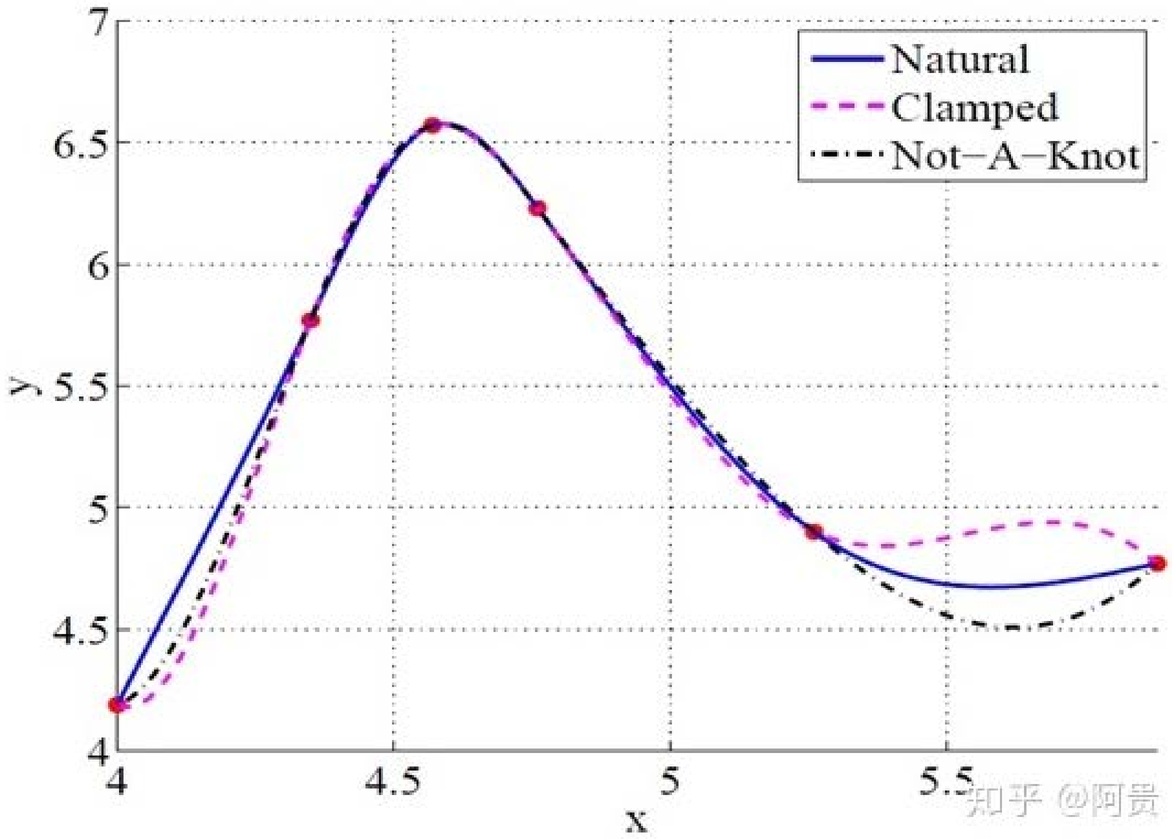
即

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

新的方程组系数矩阵可写为：

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

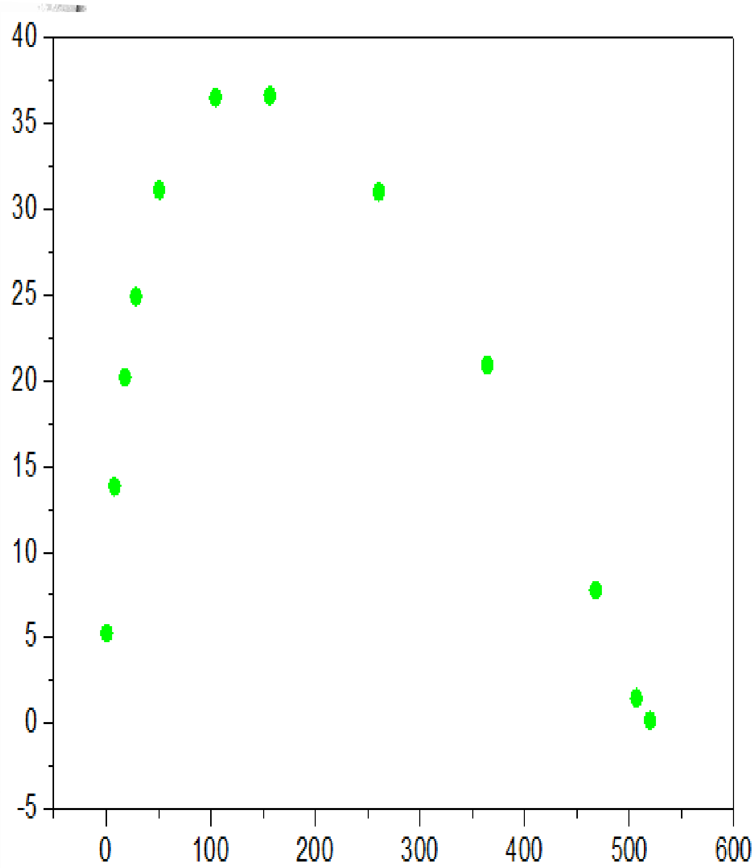
下图可以看出不同的端点边界对样条曲线的影响：



六、例

已知某直升飞机旋转机翼外形曲线上的部分坐标值如下：

x	0.52	8.0	17.95	28.65	50.65	104.6
y	5.28794	13.8400	20.2000	24.9000	31.1000	36.5000
x	156.6	260.7	364.4	468.0	507.0	520.0
y	36.6000	31.0000	20.9000	7.80000	1.50000	0.200000



两端点上的一阶导数值为

$$y'_1 = 1.86548\ ,\ y'_n = -0.046115$$

计算各结点处的一阶与二阶导数值,在区间[0.52,520.0]上的积分值。并且计算在下列八个插值点

4.0,14.0,30.0,60.0,130.0,230.0,450.0,515.0

处的函数值、一阶导数值与二阶导数值。

第一种边界条件的三次样条函数插值、微商与积分

一、功能

根据给定结点上的函数值及第一种边界条件，用三次样条函数计算各结点上的数值导数与积分，并对一元函数进行成组插值与成组微商。

二、方法说明

设已知函数 $y=f(x)$ 在给定结点

$$x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n$$

上的函数值

$$y_1, y_2, \cdots, y_{n-1}, y_n$$

以及两端点上的一阶导数值 $y'(x_1)$ 与 $y'(x_n)$。

计算其余 $n-2$ 个结点上的导数值 $y'(x_j)(j=2,3,\cdots,n-1)$ 的公式如下：

$$a_1 = 0 \ , \ b_1 = y'(x_1)$$

$$h_j = x_{j+1} - x_j, \ j = 1,2,\cdots,n-1$$

$$\alpha_j = h_{j-1}/(h_{j-1}+h_j), \ j = 2,3,\cdots,n-1$$

$$\beta_j = 3[(1-\alpha_j)(y_j - y_{j-1})/h_{j-1} + \alpha_j(y_{j+1}-y_j)/h_j]$$

$$j = 2,3,\cdots,n-1$$

$$a_j = -\alpha_j/[2+(1-\alpha_j)a_{j-1}],\ j=2,3,\cdots,n-1$$

$$b_j = [\beta_j-(1-\alpha_j)b_{j-1}]/[2+(1-\alpha_j)a_{j-1}],\ j=2,3,\cdots,n-1$$

$$y'(x_j)=a_j y'(x_{j+1})+b_j,\ j=n-1,n-2,\cdots,2$$

计算 n 个结点上的二阶导数值 $y''(x_j)(j=1,2,3,\cdots,n)$ 的公式如下：

$$y''(x_j) = 6(y_{j+1}-y_j)/h_j^2 - 2(2y'(x_j)+y'(x_{j+1}))/h_j$$

$$j=1,2,\cdots,n-1$$

$$y''(x_n) = 6(y_{n-1}-y_n)/h_{n-1}^2 + 2(2y'(x_n)+y'(x_{n-1}))/h_{n-1}$$

利用各结点上的数值导数与辛卜生公式可以得到插值区间 $[x_1,x_n]$ 上积分值的计算公式为

$$T = \int_{x_1}^{x_n} y(x)\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1}(x_{i+1}-x_i)(y_i+y_{i+1}) - \frac{1}{24}\sum_{i=1}^{n-1}(x_{i+1}-x_i)^3(y''_i+y''_{i+1})$$

其中 $y''_i = y''(x_i)$ 。

利用数值导数 $y'(x_i)(i=1,2,\cdots,n)$ 计算插值点 s 处的函数值与导数值的公式如下：

$$y(s)=\left[\frac{3}{h_i^2}(x_{i+1}-s)^2-\frac{2}{h_i^3}(x_{i+1}-s)^3\right]y_i+\left[\frac{3}{h_i^2}(s-x_i)^2-\frac{2}{h_i^3}(s-x_i)^3\right]_{y_{i+1}}$$
$$+h_i\left[\frac{1}{h_i^2}(x_{i+1}-s)^2-\frac{1}{h_i^3}(x_{i+1}-s)^3\right]y'(x_i)$$
$$-h_i\left[\frac{1}{h_i^2}(s-x_i)^2-\frac{1}{h_i^3}(s-x_i)^3\right]y'(x_{i+1})$$

$$y'(s)=\frac{6}{h_i}\left[\frac{1}{h_i^2}(x_{i+1}-s)^2-\frac{1}{h_i}(x_{i+1}-s)\right]y_i-\frac{6}{h_i}\left[\frac{1}{h_i^2}(s-x_i)^2-\frac{1}{h_i}(s-x_i)\right]y_{i+1}$$
$$+\left[\frac{3}{h_i^2}(x_{i+1}-s)^2-\frac{2}{h_i}(x_{i+1}-s)\right]y'(x_i)+\left[\frac{3}{h_i^2}(s-x_i)^2-\frac{2}{h_i}(s-x_i)\right]y'(x_{i+1})$$

$$y''(s)=\frac{1}{h_i^2}\left[6-\frac{12}{h_i}(x_{i+1}-s)\right]y_i+\frac{1}{h_i^2}\left[6-\frac{12}{h_i}(s-x_i)\right]y_{i+1}$$
$$+\frac{1}{h_i}\left[2-\frac{6}{h_i}(x_{i+1}-s)\right]y'(x_i)-\frac{1}{h_i}\left[2-\frac{6}{h_i}(s-x_i)\right]y'(x_{i+1})$$

其中 $s\in[x_i,x_{i+1}]$。

三、子程序语句

SUBROUTINE ESPL1(X,Y,N,DY1,DYN,XX,M,DY,DDY,S,DS,DDS,T,H)

四、形参说明

X,Y——均为双精度实型一维数组,长度为N,输入参数。存放给定N个结点值与函数值。

N——整型变量,输入参数。给定结点的个数。

DY1,DYN——均为双精度实型变量,输入参数。分别为第一个结点与最后一个结点的一阶导数值 $y'(x_1)$,$y'(x_n)$ 。

XX——双精度实型一维数组,长度为M,输入参数。存放指定的M个插值点值,要求 $x_1 < XX(j) < x_n(j=1,2,\cdots,M)$ 。

M——整型变量,输入参数。指定插值点的个数。

DY,DDY——均为双精度实型一维数组,长度为N,输出参数。返回N个给定结点处的一阶导数值 $y'(x_j)$ 与二阶导数值 $y''(x_j)(j=1,2,\cdots,N)$ 。

S,DS,DDS——均为双精度实型一维数组,长度为M,输出参数。分别返回M个指定插值点 $XX(j)$ $(j=1,2,\cdots,M)$ 处的函数值、一阶导数值与二阶导数值。

T——双精度实型变量,输出参数。返回插值区间 $[x_1,x_n]$ 上的积分值。

H——双精度实型一维数组,长度为N。本子程序的工作数组。

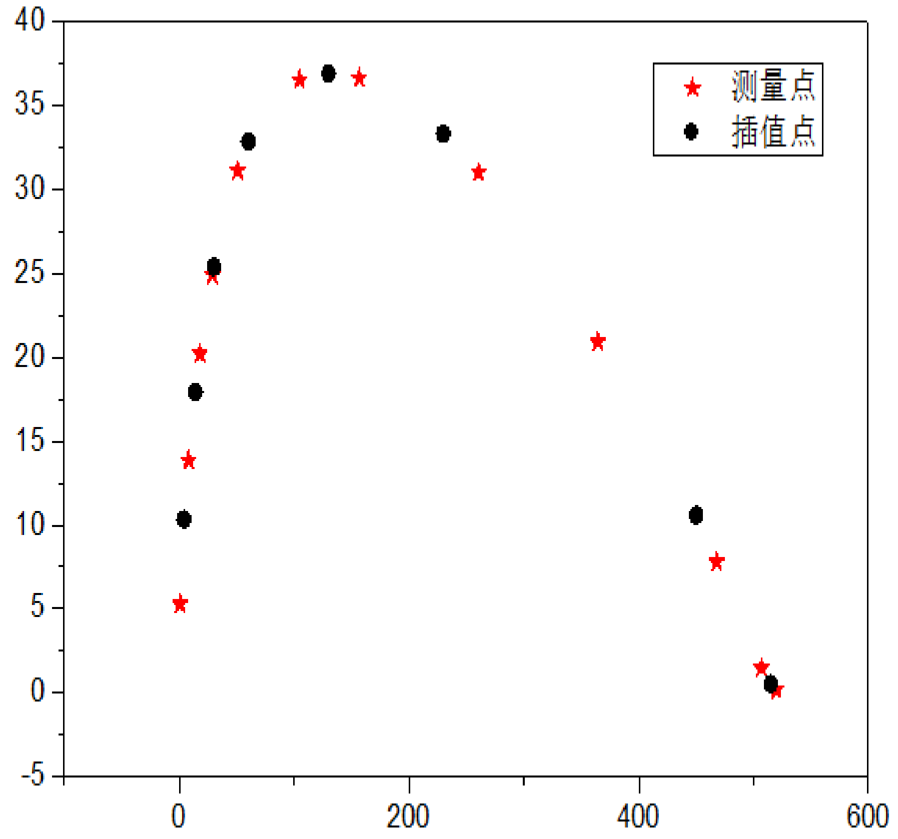
```
    PROGRM EXAMPLES05
    DIMENSION X(12),Y(12),XX(8),DY(12),DDY(12),H(12)
     DIMENSION S(8),DS(8),DDS(8)
     DOUBLE PRECISION X,Y,XX,DY,DDY,S,DS,DDS,T,DY1,DYN,H
     DATA X/0.52,8.0,17.95,28.65,50.65,104.6,156.6,    &
                   260.7,364.4,468.0,507.0,520.0/
     DATA Y/5.28794,13.84,20.2,24.9,31.1,36.5,36.6,      &
                  31.0,20.9,7.8,1.5,0.2/
     DATA XX/4.0,14.0,30.0,60.0,130.0,230.0,450.0,515.0/
     DY1=1.86548
     DYN=-0.046115
     N=12
     M=8
     CALL ESPL1(X,Y,N,DY1,DYN,XX,M,DY,DDY,S,DS,DDS,T,H)
     WRITE(*,10)
10   FORMAT(6X,'X(I)',10X,'Y(I)',10X,'DY(I)',9X,'DDY(I)')
     WRITE(*,20) (X(I),Y(I),DY(I),DDY(I),I=1,N)
20   FORMAT(1X,4D14.6)
     WRITE(*,30) T
30   FORMAT(1X,'T=',D15.6)
     WRITE(*,40)
40   FORMAT(6X,'XX(I)',9X,' S(I)',9X,'DS(I)',9X,'DDS(I)')
     WRITE(*,20) (XX(I),S(I),DS(I),DDS(I),I=1,M)
     END PROGRM
```

运行结果为

X(I)	Y(I)	DY(I)	DDY(I)
.520000D+00	.528794D+01	.186548D+01	-.279319D+00
.800000D+01	.138400D+02	.743662D+00	-.206327D-01
.179500D+02	.202000D+02	.532912D+00	-.217292D-01
.286500D+02	.249000D+02	.368185D+00	-.906091D-02
.506500D+02	.311000D+02	.208755D+00	-.543268D-02
.104600D+03	.365000D+02	.293142D-01	-.121944D-02
.156600D+03	.366000D+02	-.211539D-01	-.721639D-03
.260700D+03	.310000D+02	-.815142D-01	-.438021D-03
.364400D+03	.209000D+02	-.106449D+00	-.428873D-04
.468000D+03	.780000D+01	-.164223D+00	-.107244D-02
.507000D+03	.150000D+01	-.135256D+00	.255796D-02
.520000D+03	.200000D+00	-.461150D-01	.111560D-01

T=　.129044D+05

XX(I)	S(I)	DS(I)	DDS(I)
.400000D+01	.103314D+02	.110286D+01	-.158967D+00
.140000D+02	.179266D+02	.617882D+00	-.212939D-01
.300000D+02	.253889D+02	.356103D+00	-.883827D-02
.600000D+02	.328250D+02	.161373D+00	-.470249D-02
.130000D+03	.368774D+02	.142853D-02	-.976284D-03
.230000D+03	.332829D+02	-.667830D-01	-.521663D-03
.450000D+03	.105919D+02	-.146529D+00	-.893563D-03
.515000D+03	.556246D+00	-.936277D-01	.784907D-02



```
SUBROUTINE ESPL1(X,Y,N,DY1,DYN,XX,M,DY,DDY,S,DS,DDS,T,H)
      DIMENSION X(N),Y(N),XX(M),DY(N),DDY(N)
                DIMENSION S(M),DS(M),DDS(M),H(N)
      DOUBLE PRECISION X,Y,XX,DY,DDY,S,DS,DDS,H,DY1,DYN,
     *                                 T,H0,H1,BETA,ALPHA
      DY(1)=0.0
      H(1)=DY1
      H0=X(2)-X(1)
      DO 10 J=2,N-1
        H1=X(J+1)-X(J)
        ALPHA=H0/(H0+H1)
        BETA=(1.0-ALPHA)*(Y(J)-Y(J-1))/H0
        BETA=3.0*(BETA+ALPHA*(Y(J+1)-Y(J))/H1)
        DY(J)=-ALPHA/(2.0+(1.0-ALPHA)*DY(J-1))
```

```
      H(J)=(BETA-(1.0-ALPHA)*H(J-1))
      H(J)=H(J)/(2.0+(1.0-ALPHA)*DY(J-1))
      H0=H1
10  CONTINUE
    DY(N)=DYN
    DO 20 J=N-1,1,-1
20  DY(J)=DY(J)*DY(J+1)+H(J)
    DO 30 J=1,N-1
30  H(J)=X(J+1)-X(J)
    DO 40 J=1,N-1
      H1=H(J)*H(J)
      DDY(J)=6.0*(Y(J+1)-Y(J))/H1-
      *                2.0*(2.0*DY(J)+DY(J+1))/H(J)
40  CONTINUE
    H1=H(N-1)*H(N-1)
```

```
      DDY(N)=6.0*(Y(N-1)-Y(N))/H1+
     *              2.0*(2.0*DY(N)+DY(N-1))/H(N-1)
      T=0.0
      DO 50 I=1,N-1
         H1=0.5*H(I)*(Y(I)+Y(I+1))
         H1=H1-H(I)*H(I)*H(I)*(DDY(I)+DDY(I+1))/24.0
         T=T+H1
50    CONTINUE
      DO 70 J=1,M
         IF (XX(J).GE.X(N)) THEN
            I=N-1
         ELSE
            I=1
60          IF (XX(J).GT.X(I+1)) THEN
               I=I+1
```

```
        GOTO 60
    END IF
END IF
H1=(X(I+1)-XX(J))/H(I)
S(J)=(3.0*H1*H1-2.0*H1*H1*H1)*Y(I)
S(J)=S(J)+H(I)*(H1*H1-H1*H1*H1)*DY(I)
DS(J)=6.0*(H1*H1-H1)*Y(I)/H(I)
DS(J)=DS(J)+(3.0*H1*H1-2.0*H1)*DY(I)
DDS(J)=(6.0-12.0*H1)*Y(I)/(H(I)*H(I))
DDS(J)=DDS(J)+(2.0-6.0*H1)*DY(I)/H(I)
H1=(XX(J)-X(I))/H(I)
S(J)=S(J)+(3.0*H1*H1-2.0*H1*H1*H1)*Y(I+1)
S(J)=S(J)-H(I)*(H1*H1-H1*H1*H1)*DY(I+1)
DS(J)=DS(J)-6.0*(H1*H1-H1)*Y(I+1)/H(I)
DS(J)=DS(J)+(3.0*H1*H1-2.0*H1)*DY(I+1)
```

```
      DDS(J)=DDS(J)+(6.0-12.0*H1)*Y(I+1)/(H(I)*H(I))
      DDS(J)=DDS(J)-(2.0-6.0*H1)*DY(I+1)/H(I)
70    CONTINUE
      RETURN
      END
```