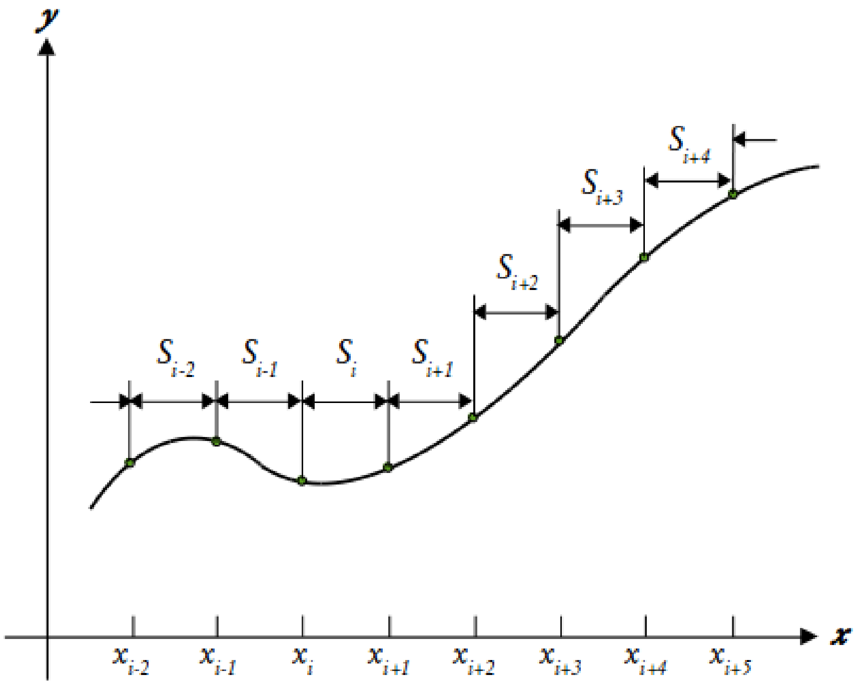
３次スプライン補間

補間する領域をデータ間隔 $[x_i, x_{i+1}]$ に区切り、その近傍の値を使い低次の多項式で近似することを考える際、それぞれの境界で導関数が連続になるように近似する方法がスプライン補間 (spline interpolation) であり、各区間での補間に使用する関数が３次関数であるため、「**３次スプライン補間**」と呼ばれている。（当然、２次も存在する）

与えられた $N+1$ 個のデータ点を $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_N, y_N)$、区間 $[x_i, x_{i+1}]$ で補間に使用する関数を $S_i(x)$ とすると、図は次のようになる。

【スプライン補間の区分】



1　区分多項式

区間 $[x_i, x_{i+1}]$ で補間に使う区分多項式 $S_i(x)$ は、次のように表せる。

$$S_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i \quad (i = 0, 1, 2, \cdots, N - 1) \tag{1}$$

そして、全体の関数の形にもっとも影響を少なくするために、両端 $x = x_0, x_N$ での二次導関数の値を 0、すなわ ち、

$$S''_0(x_0) = S''_{N-1}(x_N) = 0 \tag{2}$$

として考える。これは**自然スプライン**と呼ばれる。また、$x = x_i$ における二次導関数の値を v_i で表現することにする。

$$v_i = S''_j(x_i) \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N, \qquad j = i - 1, i) \tag{3}$$

さらに、以下の条件を考慮して連立方程式を生成し解くことで a_i, b_i, c_i, d_i を求める。

1. 全てのデータ点に対して各区分多項式 $S_i(x)$ の両端で値が決まるため、$2N$ 個の方程式ができる。
2. 各境界点の一次導関数は連続であること。これにより $N - 1$ 個の方程式ができる。
3. 各境界点の二次導関数は連続であること。これにより $N - 1$ 個の方程式ができる。

2　b_i の表現

式 (1) の二次導関数を求めると、

$$S''_i(x) = 6a_i(x - x_i) + 2b_i \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N - 1)$$

$x = x_i$ のとき、式 (3) の $v_i = S''_i(x_i)$ を代入すると b_i は次のようになる。

$$b_i = \frac{v_i}{2} \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N - 1) \tag{4}$$

3　a_i の表現

各境界点の二次導関数が連続であるという条件、すなわち $v_{i+1} = S''_i(x_{i+1})$ から、

$$v_{i+1} = S''_i(x_{i+1}) = 6a_i(x_{i+1} - x_i) + 2b_j \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N - 1)$$

これから a_i は次のようなる。

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{v_{i+1} - 2b_i}{6(x_{i+1} - x_i)} \\ &= \frac{v_{i+1} - v_i}{6(x_{i+1} - x_i)} \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N - 1) \end{aligned} \tag{5}$$

4　d_i の表現

当然ながら、全てのデータ点はそれぞれの区分多項式上にある。区分多項式の左端 x_i を考えると $S_i(x_i) = y_i$ である。式 (1) に代入すると d_i は次のようになる。

$$d_i = y_i \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N-1) \tag{6}$$

5　c_i の表現

d_i と同様 c_i も全てのデータ点がそれぞれの区分多項式上にあることから求められるが、今度は右端 x_{i+1} で考える。 $S_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$ なので、式 (1) に代入すると、次のようなる。

$$a_i(x_{i+1} - x_i)^3 + b_i(x_{i+1} - x_i)^2 + c_i(x_{i+1} - x_i) + d_i = y_{i+1} \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N-1)$$

これに式 (4), (5), (6) を代入すると c_i は次のようになる。

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{1}{x_{i+1} - x_i}\left\{y_{i+1} - a_i(x_{i+1} - x_i)^3 - b_i(x_{i+1} - x_i)^2 - d_i\right\} \\ &= \frac{1}{x_{i+1} - x_i}\left\{y_{i+1} - \frac{v_{i+1} - v_i}{6(x_{i+i} - x_i)}(x_{i+1} - x_i)^3 - \frac{v_i}{2}(x_{i+1} - x_i)^2 - y_i\right\} \\ &= \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{1}{6}(x_{i+1} - x_i)(2v_i + v_{i+1}) \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N-1) \end{aligned} \tag{7}$$

以上で、a_i, b_i, c_i, d_i が x_i, y_i, u_i で表現できたことになる。

6　連立方程式

各境界点の一次導関数が連続であるという条件から、

$$S_i'(x_{i+1}) = S_{i+1}'(x_{i+1}) \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N-2)$$

すなわち、式 (1) から、

$$3a_i(x_{i+1} - x_i)^2 + 2b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i = c_{i+1} \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N-2) \tag{8}$$

となる。この式 (8) に式 (4), (5), (7) を代入して x_i, y_i, v_i で表し、v_i の連立方程式にする。途中の計算は省略するが、最終的に次のようになる。

$$(x_{i+1} - x_i)v_i + 2(x_{i+2} - x_i)v_{i+1} + (x_{i+2} - x_{i+1})v_{i+2} = 6\left(\frac{y_{i+2} - y_{i+1}}{x_{i+2} - x_{i+1}} - \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}\right) \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N-2) \tag{9}$$

式 (2), (3) から $v_0 = v_N = 0$ であるので、式 (9) の連立一次方程式は次のような行列で表せる。

$$
\begin{pmatrix}
2(h_0+h_1) & h_1 & & & & & \\
h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & & & \text{\huge 0} & \\
 & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & & & \\
 & & & \ddots & & & \\
 & & & h_{i-1} & 2(h_{i-1}+h_i) & h_j & \\
 & \text{\huge 0} & & & & \ddots & \\
 & & & & & h_{N-2} & 2(h_{N-2}+h_{N-1})
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_j \\ \vdots \\ v_{N-1} \end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \vdots \\ w_j \\ \vdots \\ w_{N-1} \end{pmatrix} \tag{10}
$$

ただし、 $$h_i = x_{i+1} - x_i \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots, N-1)$$

$$w_i = 6\left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}\right) \qquad (i = 1, 2, 3, \cdots, N-1)$$

この連立一次方程式 (10) を解いて各データ点での二次導関数の値 v_i を求めた後、v_i を式 $(5), (4), (7), (6)$ に代入して a_i, b_i, c_i, d_i を求める。

区分多項式が求まるので、区分ごとに補間値も計算できることになる。