Maple V 関連ドキュメント

武蔵工業大学 経営工学科 情報数理研究室

武蔵工業大学 経営工学科 情報数理工学研究室 [http://www.ie.musashi-tech.ac.jp/~katoh]

加藤 満 助教授　katoh@ie.musashi-tech.ac.jp

藤波 拓哉　huzinami@cityfujisawa.ne.jp

水出 洋　mizuide@ka2.so-net.ne.jp

阿部 貴亮　ab-e@tkc.att.ne.jp

他スタッフ 省略

3 次自然スプライン

1　接続条件

n 個の標本点 $(x_1,y_1),(x_2,y_2),\cdots,(x_n,y_n)$ が与えられたとき, 各区間 $[x_k,x_{k+1}]$ ごとに 3 次多項式 $P_k(x)$ (これを区分多項式という）を考え, 全体で滑らかにつながる 1 本の補間曲線 $P(x)$ を作ります. ただし, 両端の外側 ($x \le x_1$または $x_n \le x$) では, 区分多項式は 1 次式とします. このとき $P(x)$ は 3 次自然スプライン (cubic natural spline) といって, 後で述べる最適性を満足する補間曲線になります. この 3 次スプラインは実用上よく用いられます. このほかにもいろいろなスプラインが考案されています.
区間 $[x_k,x_{k+1}]$ の区分的多項式を次のようにおきましょう.

$$P_k(x) = A_k + B_k(x-x_k) + C_k(x-x_k)^2 + D_k(x-x_k)^3 \quad x \in [x_k,x_{k+1}] \quad (k=1,2,\cdots,n-1)$$

ただし, 両端の外側では次のような 1 次式と仮定します.

$$P_0(x) = A_0 + B_0(x-x_1) \quad x \in (-\infty,x_1], \qquad P_n(x) = A_n + B_n(x-x_n) \quad x \in [x_n,\infty)$$

ここで表式を簡明にするために, 節点 (ふしてん) x_k の差分と y_k の差分商を定義しておきます.

$$h_k = x_{k+1} - x_k, \qquad [y_k,\, y_{k+1}] = \frac{y_{k+1}-y_k}{x_{k+1}-x_k} \qquad (x_1 < x_2 < \cdots < x_n)$$

各標本点で隣接する区分多項式は. その点で 2 次微分係数まで一致させ滑らかに接続します.

接続条件

$x_0 = x_1,\quad y_0 = y_1,\quad x_{n+1} = x_n,\quad y_{n+1} = y_n,\quad P_{n+1}(x) = P_n(x)$ とすると,

$$\begin{array}{llll} (1) & P_k(x_k) = y_k & (3) & P_k'(x_{k+1}) = P_{k+1}'(x_{k+1}) \\ (2) & P_k(x_{k+1}) = y_{k+1} & (4) & P_k''(x_{k+1}) = P_{k+1}''(x_{k+1}) \quad (k=0,1,\cdots,n) \end{array}$$

★

上の接続条件から未知係数を求めてみましょう.
まず条件式 (1) から $\{A_k\}$ が得られます.

$$P_0(x_1) = y_1 = A_0, \qquad P_k(x_k) = y_k = A_k \qquad (k=1,2,\cdots,n)$$

(4) 式で $k=0$ として $C_1 = 0$ が得られ, さらに $k>0$ について次の関係式が導かれます.

$$P_k''(x_{k+1}) = P_{k+1}''(x_{k+1}) \quad \Longrightarrow \quad D_k = \frac{C_{k+1}-C_k}{3h_k} \qquad (k=1,2,\cdots,n-1)$$

また (2) 式の条件から $\{B_k\}$ が求められます.

$$\left\{ \begin{array}{rcl} P_k(x_{k+1}) & = & y_{k+1} \\ P_k(x_k) & = & y_k + B_k h_k + C_k h_k^2 + D_k h_k^3 \end{array} \right.$$

$$\Longrightarrow \quad B_k = [y_k,\, y_{k+1}] - (\,C_k + D_k h_k\,)\,h_k \qquad (k=1,2,\cdots,n-1)$$

(3) 式から $k=0,n$ について次式が得られ,

$$P_0'(x_1) = P_1'(x_1) \implies B_0 = B_1, \qquad P_{n-1}'(x_n) = P_n'(x_n) \implies B_n = B_{n-1} + C_{n-1}h_{n-1}$$

さらに $k=1,2,\cdots,n-1$ について

$$
\begin{aligned}
P_k'(x_{k+1}) &= B_k + C_k h_k + C_{k+1} h_k \\
&= [y_k, y_{k+1}] + \frac{h_k}{3}(C_k + 2C_{k+1}) \\
P_{k+1}'(x_{k+1}) &= B_{k+1} \\
&= [y_{k+1}, y_{k+2}] - \frac{h_{k+1}}{3}(2C_{k+1} + C_{k+2})
\end{aligned}
$$

となるので次の関係式が導かれます.

$$
h_k C_k + 2(h_k + h_{k+1}) C_{k+1} + h_{k+1} C_{k+2} = 3([y_{k+1}, y_{k+2}] - [y_k, y_{k+1}])
$$

$C_0 = C_1 = C_n = 0$ に注意して上式を行列表現すれば, 次のようになります.

$$
\begin{bmatrix}
2(h_1+h_2) & h_2 & & \\
h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1})
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} C_2 \\ C_3 \\ \vdots \\ C_{n-1} \end{bmatrix}
= 3
\begin{bmatrix}
[y_2, y_3] - [y_1, y_2] \\
[y_3, y_4] - [y_2, y_3] \\
\vdots \\
[y_{n-1}, y_n] - [y_{n-2}, y_{n-1}]
\end{bmatrix}
$$

この連立方程式の係数行列は狭義優対角 (strictly diagonal dominant) ですから正則行列となり, $\{C_k\}$ は一意に求められることになります.

狭義優対角行列

ここで狭義優対角行列 $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ というのは次式が成り立つもので,

$$
|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| \qquad (i = 1, 2, \cdots, n)
$$

かならず正則行列になります. なぜなら連立方程式 $\mathbf{Ax} = 0$ を考えると, $\mathbf{A}$ が正則でなければ $\mathbf{x} \neq 0$ の解が存在するので,

$$
|x_k| = \max_i |x_i| \neq 0, \qquad \mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T
$$

と置くと次のように優対角性に矛盾するからです.

$$
|a_{kk} x_k| = |a_{kk}||x_k| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} |a_{kj}||x_j| \qquad \Longrightarrow \qquad |a_{kk}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} |a_{kj}|
$$

★

2　計算アルゴリズム

上の連立方程式は第 1, n 行以外は各行が 3 変数の等式なので, 三項方程式と呼ばれています.
ここで次の三項方程式 ($\mathbf{Ax}=\mathbf{d}$) の一般的な解法を研究してみましょう. ただし, 係数行列 $\mathbf{A}$ の空白はゼロを表すとします.

$$\begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & & & \\ c_2 & a_2 & b_2 & & & \\ & c_3 & a_3 & b_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & c_n & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}$$

この係数行列は三重対角行列 (tridiagonal matrix) と呼ばれ, 固有値問題や偏微分方程式の数値解法などにも出てくる重要なタイプの行列です. さて $i=1$ のとき $a_1 \neq 0$ と仮定すると,

$$a_1x_1+b_1x_2=d_1 \qquad \Longrightarrow \qquad x_1=r_1-s_1x_2, \quad r_1=\frac{d_1}{a_1}, \quad s_1=\frac{b_1}{a_1}$$

が得られます. 同様にして $i=2$ のときおよび一般の場合は次のように導かれます.

$$c_2x_1+a_2x_2+b_2x_3=d_2 \qquad \Longrightarrow \qquad x_2=r_2-s_2x_3, \quad r_2=\frac{d_2-c_2r_1}{a_2-c_2s_1}, \quad s_2=\frac{b_2}{a_2-c_2s_1}$$
$$c_ix_{i-1}+a_ix_i+b_ix_{i+1}=d_i \qquad \Longrightarrow \qquad x_i=r_i-s_ix_{i+1}, \quad r_i=\frac{d_i-c_ir_{i-1}}{a_i-c_is_{i-1}}, \quad s_i=\frac{b_i}{a_i-c_is_{i-1}}$$

$i=n$ のときは次のようになります.

$$c_nx_{n-1}+a_nx_n=d_n \qquad \Longrightarrow \qquad x_{n-1}=\frac{d_n}{c_n}-\frac{a_n}{c_n}x_n$$

以上をまとめると, 次の三項方程式の計算アルゴリズムが得られます.

三項方程式のアルゴリズム

前進消去: 連立方程式を第 1 行から順に第 n 行まで次のように変形する.

$$\begin{bmatrix} 1 & s_1 & & & \\ & 1 & s_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & s_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{n-1} \\ r_n \end{bmatrix}$$

ただし, $r_1 = \dfrac{d_1}{a_1}, \quad s_1 = \dfrac{b_1}{a_1}, \quad r_i = \dfrac{d_i - c_i r_{i-1}}{a_i - c_i s_{i-1}}, \quad s_i = \dfrac{b_i}{a_i - c_i s_{i-1}} \quad (i = 2, 3, \cdots, n)$

後退代入: x_n から x_1 まで逆順に解を求めていく.

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 - s_1 x_2 \\ \vdots \\ r_{n-1} - s_{n-1} x_n \\ r_n \end{bmatrix}$$

ただし, $x_n = r_n, \quad x_{i-1} = r_{i-1} - s_{i-1} x_i \quad (i = n, n-1, \cdots, 2)$

★

上のアルゴリズムはガウス消去法を三項方程式に適用したものです. 連立方程式の係数行列が狭義優対角行列ですから, ガウス · ザイデル法などの反復解法を用いても解が得られます.

3 次自然スプラインは途中で上のアルゴリズムを利用して次のように計算できます.

三次自然スプラインのアルゴリズム

(1) **差分と差分商** $h_k = x_{k+1} - x_k, \quad [y_k, y_{k+1}] = \dfrac{y_{k+1} - y_k}{h_k} \quad (k = 1, 2, \cdots, n-1)$

(2) $\{C_k\}$ **の計算** 三項方程式のアルゴリズムを用いて C_k を求める.

$a_k = 2(h_k + h_{k+1}), \quad b_k = c_{k+1} = h_{k+1},$

$d_k = 3([y_{k+1}, y_{k+2}] - [y_k . y_{k+1}]),$

$C_{k+1} = x_k \quad (k = 1, 2, \cdots, n-2), \quad C_1 = C_n = 0$

(3) $\{D_k\}$ **の計算** $D_k = \dfrac{C_{k+1} - C_k}{3h_k} \quad (k = 1, 2, \cdots, n-1)$

(4) $\{B_k\}$ **の計算** $B_k = [y_k, y_{k+1}] - (C_k + D_k h_k) h_k \quad (k = 1, 2, \cdots, n-1),$

$B_0 = B_1, \quad B_n = B_{n-1} + C_{n-1} h_{n-1}$

(5) $\{A_k\}$ **の計算** $A_k = y_k \quad (k = 1, 2, \cdots, n), \quad A_0 = A_1$

★

3　数値例

ここで次のデータについて 3 次自然スプラインを求めてみましょう.

k	1	2	3	4	5
x	-3	-1	0	3	4
y	7	11	26	56	29

まず差分と差分商を計算します.

$$\begin{aligned}
h_1 &= x_2 - x_1 = 2, & [y_1, y_2] &= \frac{y_2 - y_1}{h_1} = 2 \\
h_2 &= x_3 - x_2 = 1, & [y_2, y_3] &= \frac{y_3 - y_2}{h_2} = 15 \\
h_3 &= x_4 - x_3 = 3, & [y_3, y_4] &= \frac{y_4 - y_3}{h_3} = 10 \\
h_4 &= x_5 - x_4 = 1, & [y_4, y_5] &= \frac{y_5 - y_4}{h_4} = -27
\end{aligned}$$

次に三項方程式の各係数を求めます.

$$\begin{aligned}
a_1 &= 2(h_1 + h_2) = 6, & b_1 &= c_2 = h_2 = 1, & d_1 &= 3([y_2, y_3] - [y_1, y_2]) = 39, \\
a_2 &= 2(h_2 + h_3) = 8, & b_2 &= c_3 = h_3 = 3, & d_2 &= 3([y_3, y_4] - [y_2, y_3]) = -15, \\
a_3 &= 2(h_3 + h_4) = 8, & & & d_3 &= 3([y_4, y_5] - [y_3, y_4]) = -111
\end{aligned}$$

これから下の左の連立方程式が得られ, 右のような C の解が求められます.

$$\begin{bmatrix} 6 & 1 & 0 \\ 1 & 8 & 3 \\ 0 & 3 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 39 \\ -15 \\ -111 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
C_1 &= 0, \\
C_2 &= x_1 = 6, \\
C_3 &= x_2 = 3, \\
C_4 &= x_3 = -15
\end{aligned}$$

上の解は下のように前進消去 · 後退代入で求めていきます.

	A			**d**	計算方法
	6	1	0	39	(1)
	1	8	3	-15	(2)
	0	3	8	-111	(3)
前	1	1/6	0	13/2	(4) $:= (1)/a_1$
	0	47/6	3	$-43/2$	(5) $:= (2) - c_2 \times (4)$
進	0	3	8	-111	(6) $:= (3)$
	1	1/6	0	13/2	(7) $:= (4)$
消	0	1	18/47	$-129/47$	(8) $:= (5)/a_2$
	0	0	322/47	$-4830/47$	(9) $:= (6) - c_3 \times (8)$
去	1	1/6	0	13/2	(10) $:= (7)$
	0	1	18/47	$-129/47$	(11) $:= (8)$
	0	0	1	-15	(12) $:= (9)/a_3$
	1	1/6	0	13/2	(13) $:= (10)$
後	0	1	0	3	(14) $:= (11) - s_2 \times (12)$
退	0	0	1	-15	(15) $:= (12)$
代	1	0	0	6	(16) $:= (13) - s_1 \times (14)$
入	0	1	0	3	(17) $:= (14)$
	0	0	1	-15	(18) $:= (15)$

次に D を計算します.

$$D_1 = \frac{C_2 - C_1}{3h_1} = 1, \quad D_2 = \frac{C_3 - C_2}{3h_2} = -1, \quad D_3 = \frac{C_4 - C_3}{3h_3} = -2, \quad D_4 = \frac{C_5 - C_4}{3h_4} = 5$$

C と D を用いて B が計算できます.

$$\begin{array}{lclcrlclcr} B_1 &=& [y_1, y_2] - (C_1 + D_1 h_1)\, h_1 &=& -2, & B_2 &=& [y_2, y_3] - (C_2 + D_2 h_2)\, h_2 &=& 10, \\ B_3 &=& [y_3, y_4] - (C_3 + D_3 h_3)\, h_3 &=& 19, & B_4 &=& [y_4, y_5] - (C_4 + D_4 h_4)\, h_4 &=& -17, \\ B_0 &=& B_1 \quad = \quad -2, & & & B_5 &=& B_4 + C_4 h_4 \quad = \quad -32 & & \end{array}$$

A は y で与えられます.

$$A_0 = A_1 = y_1 = 7, \quad A_2 = y_2 = 11, \quad A_3 = y_3 = 26. \quad A_4 = y_4 = 56, \quad A_5 = y_5 = 29$$

以上の計算によって, 次のようなスプライン曲線が得られます.

$$\begin{array}{lcll} P_0(x) &=& 7 - 2\,(x+3) & (\qquad\quad x \le \ -3\ ) \\ P_1(x) &=& 7 - 2\,(x+3) + (x+3)^3 & (\ -3 \ \le x \le \ -1\ ) \\ P_2(x) &=& 11 + 10\,(x+1) + 6\,(x+1)^2 - (x+1)^3 & (\ -1 \ \le x \le \ \ \ 0\ ) \\ P_3(x) &=& 26 + 19x + 3x^2 - 2x^3 & (\ \ \ 0 \ \le x \le \ \ \ 3\ ) \\ P_4(x) &=& 56 - 17\,(x-3) - 15\,(x-3)^2 + 5\,(x-3)^3 & (\ \ \ 3 \ \le x \le \ \ \ 4\ ) \\ P_5(x) &=& 29 - 32\,(x-4) & (\ \ \ 4 \ \le x \qquad\ ) \end{array}$$

4 spline コマンド

得られたスプライン曲線が正しいかどうかを, Maple のライブラリールーチンにある spline を使って検証してみましょう.

readline コマンドで spline ルーチンを呼び出し， 3 次スプラインを計算させると次のようになります. これが我々の計算で求めたスプラインと一致することは， P_1 から P_4 をそれぞれ展開させてみるとわかります.

また区間外の 1 次式 P_0 と P_5 を追加して， プロットすると図のような滑らかな曲線が得られます.

```
> readlib(spline):
  spline([-3,-1,0,3,4],[7,11,26,56,29],x,cubic);
```

$$\begin{cases} 28+25x+9x^2+x^3, & x<-1 \\ 26+19x+3x^2-x^3, & x<0 \\ 26+19x+3x^2-2x^3, & x<3 \\ -163+208x-60x^2+5x^3, & otherwise \end{cases}$$

```
> p1:=7-2*(x+3)+(x+3)^3; expand(p1);
```

$$p1 := 1-2x+(x+3)^3$$
$$28+25x+9x^2+x^3$$

```
> p2:=11+10*(x+1)+6*(x+1)^2-(x+1)^3; expand(p2);
```

$$p2 := 21+10x+6(x+1)^2-(x+1)^3$$
$$26+19x+3x^2-x^3$$

```
>  p3:=26+19*x+3*x^2-2*x^3; expand(p3);
```

$$p3 := 26+19x+3x^2-2x^3$$
$$26+19x+3x^2-2x^3$$

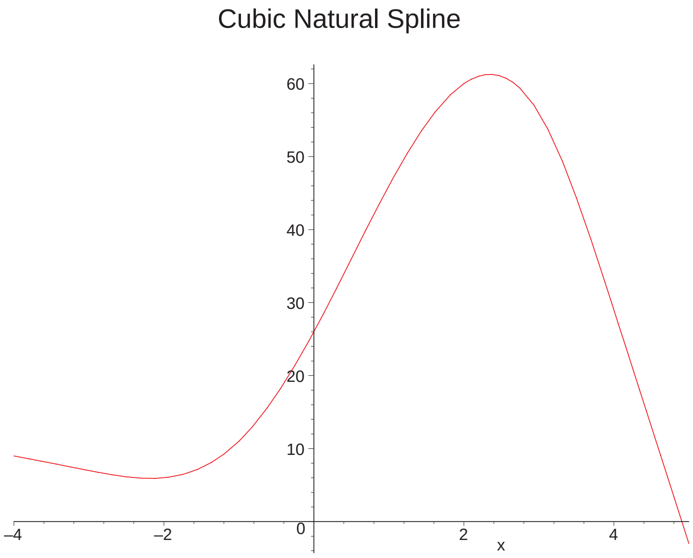
```
> p4:=56-17*(x-3)-15*(x-3)^2+5*(x-3)^3; expand(p4);
```

$$p4 := 107-17x-15(x-3)^2+5(x-3)^3$$
$$-163+208x-60x^2+5x^3$$

```
> p0:=7-2*(x+3); p5:=29-32*(x-4);
```

$$p0 := 1-2x$$
$$p5 := 157-32x$$

```
>  f:=x->piecewise(x<=-3,p0, x<=-1,p1, x<=0,p2,
  x<= 3,p3, x<= 4,p4, x<=5,p5):
  plot(f(x),x=-4..5, title=‘Cubic Natural Spline‘);
```


Cubic Natural Spline
60
50
40
30
20
10
0
–4
–2
2
4
x

5　最適性

スプライン関数は次の最適性を満足しております.

3 次自然スプラインの最適性

2 回連続微分可能な関数 $q(x)$ が,

$$q(x_k) = y_k \qquad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

を満足する任意の補間関数であるとき, 3 次自然スプライン $p(x)$ に対して次の不等式が成立する.

$$\int_{x_0}^{x_n} (p''(x))^2 dx \le \int_{x_0}^{x_n} (q''(x))^2 dx$$

＜証明＞

$$\begin{aligned}
&\int_{x_0}^{x_n} (\,q''(x)\,)^2\,dx \\
&= \int_{x_0}^{x_n} (\,q''(x) - p''(x) + p''(x)\,)^2\,dx \\
&= \int_{x_0}^{x_n} (\,q''(x) - p''(x)\,)^2\,dx + 2\int_{x_0}^{x_n} (\,q''(x) - p''(x)\,)\,p''(x)\,dx + \int_{x_0}^{x_n} (\,p''(x)\,)^2\,dx
\end{aligned}$$

ここで q', q'', p'' は連続で、 $p''' =$ 定数, $p''(x_0) = p''(x_n) = 0$ だから

$$\begin{aligned}
&\int_{x_0}^{x_n} (\,q''(x) - p''(x)\,)\,p''(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (\,q''(x) - p''(x)\,)\,p''(x)\,dx \\
&\quad = \sum_{k=0}^{n-1} \left[(\,q'(x) - p'(x)\,)\,p''(x)\right]_{x_k}^{x_{k+1}} - \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (\,q'(x) - p'(x)\,)\,p'''(x)\,dx \\
&\quad = \left[(\,q'(x_n) - p'(x_n)\,)\right]\,p''(x_n) - \left[(\,q'(x_0) - p'(x_0)\,)\right]\,p''(x_0) \\
&\quad\ \ - \sum_{k=0}^{n-1} p'''\,[(\,q(x_{k+1}) - p(x_k)\,) - (\,q(x_k) - p(x_k)\,)] = 0
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_n} (\,q''(x)\,)^2\,dx &= \int_{x_0}^{x_n} (\,q''(x) - p''(x)\,)^2\,dx + \int_{x_0}^{x_n} (\,p''(x)\,)^2\,dx \\
&\ge \int_{x_0}^{x_n} (\,p''(x)\,)^2\,dx \qquad \square
\end{aligned}$$

★

この定理は次のようなことを意味しております. すなわち, 曲線 $q(x)$ の任意の点 x における曲率 $q''(x)\,/\,(\,1 + (q'(x))^2)^{3/2}$ において, $q'(x)$ が十分小さいところでは曲率は $q''(x)$ と考えられます. そうすると 2 回連続微分可能な補間関数の中で, 3 次自然スプラインは, 曲率の二乗平均が最小である, という意味でもっとも滑らかな曲線であることを定理は示しております.