Numerische Methoden der Astronomie SS 2010 - Formelsammlung: Kubische Splines

S. Eggl
Institut für Astronomie - Universität Wien

1 Einleitung

Kubische Splines sind interpolierende Polynome dritten Grades die unter Kopplungsbedingungen (wie z.B. Stetigkeit gewisser Ableitungen) stückweise aneinandergereit werden, um eine Funktion über mehrere Teilintervalle bestmöglich approximieren zu können. Gegeben seien $n-1$ Teilintervalle zwischen den Stützstellen $x_1 < x_2 < x_3 ... < x_n$. Wir definieren einen kubischen Spline auf jedem Teilintervall k: $[x_k, x_{k+1}]$, $k = (2, ..., n-1)$, sodass:

$$f_k(x) = A_k(x-x_k)^3 + B_k(x-x_k)^2 + C_k(x-x_k) + D_k \tag{1}$$

Die Koeffizienten A_k, B_k, C_k, D_k gelten dabei für den Spline über dem k-ten Teilintervall. Setzt man nun die Randpunkte des Teilintervalls $[x_k, x_{k+1}]$ in Gleichung (1) ein, so erhält man folgende Relationen für die Funktionswerte y sowie für die ersten und zweiten Ableitungen y' und y'' des Splines:

$$\begin{aligned} y_k &= f_k(x_k) = D_k \\ y_{k+1} &= f_k(x_{k+1}) = A_k\Delta x_k^3 + B_k\Delta x_k^2 + C_k\Delta x_k + D_k \end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned} y'_k &= f'_k(x_k) = C_k \\ y'_{k+1} &= f'_k(x_{k+1}) = 3A_k\Delta x_k^2 + 2B_k\Delta x_k + C_k \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned} y''_k &= f''_k(x_k) = 2B_k \\ y''_{k+1} &= f''_k(x_{k+1}) = 6A_k\Delta x_k + 2B_k \end{aligned} \tag{4}$$

wobei $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$.

2 Spline-Kopplungsbedingungen

Die Art des Übergangs zwischen den Splines wird nun von den Kopplungsbedingungen an den Teilintervallgrenzen bestimmt.

2.1 Stetigkeit der ersten Ableitungen

Zunächst wollen wir die ersten Ableitungen der Splines an den Intervallgrenzen gleichsetzen, sodass "Knicke" vermieden werden.

$$f'_{k-1}(x_k) = f'_k(x_k)$$

Aus den Gleichungen (3) folgt somit die Kopplungsbedingung:

$$3A_{k-1}\Delta x_{k-1}^2 + 2B_{k-1}\Delta x_{k-1} + C_{k-1} = C_k \tag{5}$$

Da hierfür die Gleichungen (3) verwendet wurden, müssen nun die Gleichungen (2) und (4) zur Bestimmung der Koeffizienten $A_k, ..., D_k$ herangezogen werden.

$$\begin{aligned} A_k &= \frac{1}{6\Delta x_k}(y''_{k+1} - y''_k) \\ B_k &= \frac{1}{2}y''_k & k = (1, ..., n-1) \\ C_k &= \frac{\Delta y_k}{\Delta x_k} - \frac{1}{6}\Delta x_k(y''_{k+1} + 2y''_k) \\ D_k &= y_k \end{aligned} \tag{6}$$

mit $\Delta y_k = y_{k+1} - y_k$. Setzt man diese Ergebnisse nun in die Kopplungsbedingung (5) ein, so erhält man $n-2$ Gleichungen in den Unbekannten y''_n:

$$\boxed{\Delta x_{k-1}y''_{k-1} + 2(\Delta x_{k-1} + \Delta x_k)y''_k + \Delta x_k y''_{k+1} = 6\left(\frac{\Delta y_k}{\Delta x_k} - \frac{\Delta y_{k-1}}{\Delta x_{k-1}}\right)} \tag{7}$$

$$k = (2, ..., n-1)$$

Als Nebenergebnis können wir auch die konkreten Werte der ersten Ableitungen feststellen:

$$\begin{aligned} y'_k &= C_k = \frac{\Delta y_k}{\Delta x_k} - \frac{1}{6}\Delta x_k(y''_{k+1} + 2y''_k) \qquad k = (1, ..., n-1) \\ y'_n &= \frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}} + \frac{1}{6}\Delta x_{n-1}(2y''_n + y''_{n-1}) \end{aligned} \tag{8}$$

Gibt man nun y''_1 und y''_n als Randbedingungen vor, so lässt sich das Gleichungssystem (7) in Matrixform anschreiben (siehe Tabelle 1). Die zweiten Ableitungen y''_k stellen die Lösung des Gleichungssystems dar, welche man z.B. durch die Anwendung einer LU-Zerlegung der Koeffizientenmatrix erhält. Tatsächlich hängen die Koeffizientengleichungen (6) der k Splines lediglich von (x_k, y_k, y''_k) ab. Da x_k und y_k bereits festgelegt sind, kann die Form der Splines über die gefundenen y''_k eindeutig bestimmt werden.

Über die Gleichungen (8) lassen sich auch Randbedingungen der Form y'_1, y'_n mit diesem Schema in Einklang bringen:

$$\begin{aligned} 2\Delta x_1 y''_1 + \Delta x_1 y''_2 &= 6\left(\frac{\Delta y_1}{\Delta x_1} - y'_1\right) \\ \Delta x_{n-1}y''_{n-1} + 2\Delta x_{n-1}y''_n &= 6\left(y'_n - \frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}}\right) \end{aligned} \tag{9}$$

Da hier keine Anfangswerte für y''_1, y''_n bekannt sind, hat die resultierende Koeffizientenmatrix die Dimension $n \times n$ anstelle von $(n-2) \times (n-2)$. Die Gleichungen (9) stellen Zusammenhänge zwischen y''_1, y''_n und y'_1, y'_n her, und werden - wie in Tabelle 2 zu sehen - an die erste und letzte Zeile des Gleichungssystems angebunden.

2.2 Stetigkeit der zweiten Ableitungen

Natürlich können auch die zweiten Ableitungen der Splines an den Intervallgrenzen gleichgesetzen werden, um zu einer Kopplungsbedingung zu gelangen.

$$f''_{k-1}(x_k) = f''_k(x_k)$$

Dies hat zur Folge, dass die jeweiligen kubischen Splines nun nicht mehr durch Zahlentrippel der Form (x_i, y_i, y''_i) sondern durch (x_i, y_i, y'_i) mit $i = (1, ..., n)$ charakterisiert sind. Wir verwenden daher die Gleichungen (4) anstelle von (3) für die Kopplungsgleichung:

$$6A_{k-1}\Delta x_{k-1} + 2B_{k-1} = 2B_k \tag{10}$$

Nun müssen die Gleichungen (2) und (3) zur Bestimmung der Koeffizienten $A_k, ..., D_k$ herangezogen werden.

$$\begin{aligned}
A_k &= \frac{1}{\Delta x_k^2}(-2\frac{\Delta y_k}{\Delta x_k} + y'_{k+1} + y'_k) \\
B_k &= \frac{1}{\Delta x_k}(3\frac{\Delta y_k}{\Delta x_k} - y'_{k+1} - 2y'_k) \qquad k = (1, ..., n-1) \\
C_k &= y'_k \\
D_k &= y_k
\end{aligned} \tag{11}$$

Nach dem Einsetzen der Koeffizienten in die Kopplungsgleichung (10), erhält man analog zum vorigen Kapitel $n-2$ Spline Gleichungen - allerdings in den Unbekannten $y'_1, ..., y'_n$:

$$\boxed{\frac{1}{\Delta x_{k-1}}y'_{k-1} + 2\left(\frac{1}{\Delta x_{k-1}} + \frac{1}{\Delta x_k}\right)y'_k + \frac{1}{\Delta x_k}y'_{k+1} = \frac{3}{\Delta x_{k-1}}\frac{\Delta y_{k-1}}{\Delta x_{k-1}} + \frac{3}{\Delta x_k}\frac{\Delta y_k}{\Delta x_k}} \tag{12}$$

$$k = (2, ..., n-1)$$

Mit Hilfe der ursprünglichen Definition der Koeffizienten, z.B. Gleichung (4), können wir explizite Ausdrücke für die zweiten Ableitungen finden, falls diese benötig werden:

$$\begin{aligned}
y''_k &= \frac{2}{\Delta x_k}\left(3\frac{\Delta y_k}{\Delta x_k} - 2y'_k - y'_{k+1}\right) \qquad k = (1, .., n-1) \\
y''_n &= \frac{2}{\Delta x_{n-1}}\left(-3\frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}} + y'_{n-1} + 2y'_n\right)
\end{aligned} \tag{13}$$

Gibt man y'_1 und y'_n vor, haben die Kopplungsgleichungen (10) in Matrixschreibweise die in Tabelle 3 gezeigte Form. Auch in der Darstellung (x_k, y_k, y'_k) können zweite Ableitungen als Randbedingungen an den Außengrenzen des Gesamtintervalls angegeben werden. Analog zum vorigen Kapitel wird dabei die Koeffizientenmatrix mit den umgeformten Gleichungen (13) auf $n \times n$ erweitert.

$$\begin{aligned}
\frac{2}{\Delta x_1}y'_1 + \frac{1}{\Delta x_1}y'_2 &= \frac{3}{\Delta x_1}\frac{\Delta y_1}{\Delta x_1} - \frac{y''_1}{2} \\
\frac{1}{\Delta x_{n-1}}y'_{n-1} + \frac{2}{\Delta x_{n-1}}y'_n &= \frac{y''_n}{2} + \frac{3}{\Delta x_{n-1}}\frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}}
\end{aligned} \tag{14}$$

Das resultierende Gleichungssystem ist in Tabelle 4 zu sehen.

$$\begin{pmatrix} 2(\Delta x_1 + \Delta x_2) & \Delta x_2 & & & & \\ \Delta x_2 & 2(\Delta x_2 + \Delta x_3) & \Delta x_3 & & & \\ & \Delta x_3 & 2(\Delta x_3 + \Delta x_4) & \Delta x_4 & & \\ & & . & . & . & \\ & & & . & . & . \\ & & & & \Delta x_{n-2} & 2(\Delta x_{n-2} + \Delta x_{n-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_2'' \\ y_3'' \\ y_4'' \\ . \\ . \\ y_{n-1}'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6\left(\frac{\Delta y_2}{\Delta x_2} - \frac{\Delta y_1}{\Delta x_1}\right) - \Delta x_1 y_1'' \\ 6\left(\frac{\Delta y_3}{\Delta x_3} - \frac{\Delta y_2}{\Delta x_2}\right) \\ 6\left(\frac{\Delta y_4}{\Delta x_4} - \frac{\Delta y_3}{\Delta x_3}\right) \\ . \\ . \\ 6\left(\frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}} - \frac{\Delta y_{n-2}}{\Delta x_{n-2}}\right) - \Delta x_{n-1} y_n'' \end{pmatrix}$$

Tabelle 1: Gleichungen zur Ermittelung der zweiten Ableitungen von k Splines mit Randbedingungen y_1'', y_n''.

$$
\begin{pmatrix}
2\Delta x_1 & \Delta x_1 & & & & & & \\
\Delta x_1 & 2(\Delta x_1 + \Delta x_2) & \Delta x_2 & & & & & \\
 & \Delta x_2 & 2(\Delta x_2 + \Delta x_3) & \Delta x_3 & & & & \\
 & & \Delta x_3 & 2(\Delta x_3 + \Delta x_4) & \Delta x_4 & & & \\
 & & & . & . & . & & \\
 & & & & . & . & . & \\
 & & & & & \Delta x_{n-2} & 2(\Delta x_{n-2} + \Delta x_{n-1}) & \Delta x_{n-1} \\
 & & & & & & \Delta x_{n-1} & 2\Delta x_{n-1}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
y_1'' \\ y_2'' \\ y_3'' \\ y_4'' \\ . \\ . \\ y_{n-1}'' \\ y_n''
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
6\left(\frac{\Delta y_1}{\Delta x_1} - y_1'\right) \\
6\left(\frac{\Delta y_2}{\Delta x_2} - \frac{\Delta y_1}{\Delta x_1}\right) \\
6\left(\frac{\Delta y_3}{\Delta x_3} - \frac{\Delta y_2}{\Delta x_2}\right) \\
6\left(\frac{\Delta y_4}{\Delta x_4} - \frac{\Delta y_3}{\Delta x_3}\right) \\
. \\
. \\
6\left(\frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}} - \frac{\Delta y_{n-2}}{\Delta x_{n-2}}\right) \\
6\left(y_n' - \frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}}\right)
\end{pmatrix}
$$

Tabelle 2: Gleichungen zur Ermittelung der zweiten Ableitungen von k Splines mit Randbedingungen y_1', y_n'.

$$\begin{pmatrix} 2\left(\frac{1}{\Delta x_1}+\frac{1}{\Delta x_2}\right) & \frac{1}{\Delta x_2} & & & & \\ \frac{1}{\Delta x_2} & 2\left(\frac{1}{\Delta x_2}+\frac{1}{\Delta x_3}\right) & \frac{1}{\Delta x_3} & & & \\ & \frac{1}{\Delta x_3} & 2\left(\frac{1}{\Delta x_3}+\frac{1}{\Delta x_4}\right) & \frac{1}{\Delta x_4} & & \\ & & . & . & . & \\ & & & . & . & . \\ & & & & \frac{1}{\Delta x_{n-2}} & 2\left(\frac{1}{\Delta x_{n-2}}+\frac{1}{\Delta x_{n-1}}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y'_2 \\ y'_3 \\ y'_4 \\ . \\ . \\ y'_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{\Delta x_1}\frac{\Delta y_1}{\Delta x_1}+\frac{3}{\Delta x_2}\frac{\Delta y_2}{\Delta x_2}-\frac{1}{\Delta x_1}y'_1 \\ \frac{3}{\Delta x_2}\frac{\Delta y_2}{\Delta x_2}+\frac{3}{\Delta x_3}\frac{\Delta y_3}{\Delta x_3} \\ \frac{3}{\Delta x_3}\frac{\Delta y_3}{\Delta x_3}+\frac{3}{\Delta x_4}\frac{\Delta y_4}{\Delta x_4} \\ . \\ . \\ \frac{3}{\Delta x_{n-2}}\frac{\Delta y_{n-2}}{\Delta x_{n-2}}+\frac{3}{\Delta x_{n-1}}\frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}}-\frac{1}{\Delta x_{n-1}}y'_n \end{pmatrix}$$

Tabelle 3: Gleichungen zur Ermittelung der ersten Ableitungen von k Splines mit Randbedingungen y'_1, y'_n.

$$
\begin{pmatrix}
\frac{2}{\Delta x_1} & \frac{1}{\Delta x_1} & & & & & \\
\frac{1}{\Delta x_1} & 2\left(\frac{1}{\Delta x_1}+\frac{1}{\Delta x_2}\right) & \frac{1}{\Delta x_2} & & & & \\
 & \frac{1}{\Delta x_2} & 2\left(\frac{1}{\Delta x_2}+\frac{1}{\Delta x_3}\right) & \frac{1}{\Delta x_3} & & & \\
 & & \frac{1}{\Delta x_3} & 2\left(\frac{1}{\Delta x_3}+\frac{1}{\Delta x_4}\right) & \frac{1}{\Delta x_4} & & \\
 & & . & . & . & & \\
 & & & . & . & . & \\
 & & & & \frac{1}{\Delta x_{n-2}} & 2\left(\frac{1}{\Delta x_{n-2}}+\frac{1}{\Delta x_{n-1}}\right) & \frac{1}{\Delta x_{n-1}} \\
 & & & & & \frac{1}{\Delta x_{n-1}} & \frac{2}{\Delta x_{n-1}}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
y'_1 \\ y'_2 \\ y'_3 \\ y'_4 \\ . \\ . \\ y'_{n-1} \\ y'_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\frac{3}{\Delta x_1}\frac{\Delta y_1}{\Delta x_1} - \frac{y''_1}{2} \\
\frac{3}{\Delta x_1}\frac{\Delta y_1}{\Delta x_1} + \frac{3}{\Delta x_2}\frac{\Delta y_2}{\Delta x_2} \\
\frac{3}{\Delta x_2}\frac{\Delta y_2}{\Delta x_2} + \frac{3}{\Delta x_3}\frac{\Delta y_3}{\Delta x_3} \\
\frac{3}{\Delta x_3}\frac{\Delta y_3}{\Delta x_3} + \frac{3}{\Delta x_4}\frac{\Delta y_4}{\Delta x_4} \\
. \\
. \\
\frac{3}{\Delta x_{n-2}}\frac{\Delta y_{n-2}}{\Delta x_{n-2}} + \frac{3}{\Delta x_{n-1}}\frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}} \\
\frac{3}{\Delta x_{n-1}}\frac{\Delta y_{n-1}}{\Delta x_{n-1}} + \frac{y''_n}{2}
\end{pmatrix}
$$

Tabelle 4: Gleichungen zur Ermittelung der ersten Ableitungen von k Splines mit Randbedingungen y''_1, y''_n.

Referenzen:

Späth, H. : Spline-Algorithmen zur Konstruktion glatter Kurven und Flächen, (1983), R. Oldenbourg Verlag GmbH, München, ISBN 3-486-39473-8