◇区分的多項式　（スプライン法）

与えられた全部の点を通る次数の高い式をラグランジュ法で求めるのは困難である．これは次数が高ければ高いほど式が複雑になるためである．
よって，全ての点を用いるのではなく，ある区間毎に分けてその区間ごとに式を求めることで全ての点を通る式を構成することを考える．これが区分的多項式であり，その代表的なものにスプライン法がある．
以下はそのスプライン法の説明である．

例えば区間ａ～ｂにおけるデータが以下のようにあるとする．
$a = x_0,\ x_1,\ x_2,\ \ldots\ x_{i-1},\ x_i, x_{i+1} = b$
ラグランジュなどによる方法は区間ａ～ｂの全ての点を通る単一の補間多項式であった．
ここで全区間ａ～ｂを
$[x_0,\ x_1][x_1,\ x_2]\ \ldots\ [x_{i-1},\ x_i][x_i,\ x_{i+1}]\ \ldots\ [x_{n-a},\ x_n]$
とする小区間として考え，小区間毎に次数の低い補間多項式を考える．
ここで，その補間関数，および，その微分がつなぎ目で滑らかになる様にするための関数を考える．この関数をスプライン関数という．

■２次スプライン補間

２次のスプライン関数は
$S_{i(x)} = a_i + b_i x + c_i x^2$
と表すことができる．
この２次のスプライン関数には以下の２つの条件が必要である．

【1】 $S_{i(x_i)} = y_i$ であること．ここで y_i はある x_i における関数値であり，この関数値は未知の関数 $f_{()}$ から求められる値である．なお，$S_{i(x_i)} = y_i$の式は未知の関数 $f_{()}$ で与えられた点 $x_0,\ x_1,\ x_2\ \ldots\ x_{n-a}$ において誤差が“０“であるという意味であり，言い換えると未知の関数で与えられた点とスプライン関数で与えられる点は一致しているということである．

【2】$S'_{i(x_i)} = S'_{i+1(x_i)}$であること．つまり，１次微分が各小区間のつなぎ目で連続であることが必要である．すなわち，

$$\underbrace{b_i x + 2\ \cdot c_i x_i}_{\text{前の小区間の微分値}} \ = \ \underbrace{b_{i+1} + c_{i+1} x_i}_{\text{後の小区間の微分値}}$$

■３次スプライン補間

スプライン補間は一般的に３次のものが使われることが多い．
基本的な考え方は２次と３次ではあまり変わらないが，３次は２次に比べて条件が若干増えている．

【1】$S_{i(x_i)} = y_i$ であること．これは２次と同じである．

【2】与えられた点では

$S'_{i(x_i)} = S'_{i+1(x_i)}$ および $S''_{i(x_i)} = S''_{i+1(x_i)}$であること．つまり，１次微分，および，２次微分において各点での各多項式の微分係数が一致することが必要である．
【3】両端の境界条件として

$$\left.\begin{array}{l} f''_{(x_1)} = f''_{(x_{n+1})} = 0 \quad \text{または} \\ f'_{(x_1)} = y'_1 \ \text{かつ}\ f'_{(x_{n+1})} = y'_{n+1} \end{array}\right\}$$

が与えられている．

これは両端の先には点が与えられておらず，故に両端に対する条件設定を考慮する必要があるためである．

以上３点が３次における条件である．

さて，区間 $[x_i,\ x_{i+1}]$ における３次の多項式を$S_{i(x)}$とすると

$$S_{i(x)} = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3 \quad \ldots \quad (1)$$

となる．最終的には式(1) における各係数a_i，b_i，c_i，d_i を求める．

まず，式(1) を１次微分すると

$$S'_{i(x)} = b_i + 2\cdot c_i(x-x_i) + 3\cdot d_i(x-x_i)^2 \quad \ldots \quad (2)$$

条件【1】より

$S_{i(x_i)} = a_i = f_{(x_i)} = y_i$

これは $(x_i - x_i) = 0$ **であり，結果として** a_i **しか残らないからである．**

$$S'_{i(x_i)} = b_i = f'_{(x_i)} = y'_i$$

同様に $(x_i - x_i) = 0$ **により** b_i **しか残らない．**

これらから式(1)(2)の $S_{i(x)}$ **および** $S'_{i(x)}$ **の式は**

$$S_{i(x)} = y_i + y'_i(x-x_i) + c_i(x-x_i)^2 + d_i(x-x_i)^3 \quad \ldots \quad (3)$$

$$S'_{i(x)} = y'_i + 2\cdot c_i(x-x_i) + 3\cdot d_i(x-x_i)^2 \quad \ldots \quad (4)$$

ここで，式(3)(4) を簡単化するために $h_i = x_i - x_{i-1}$ **とすると** $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$

であるから，よって式(3) の $S_{i(x)}$ **から** $S_{i(x_{i+1})}$ **を考えると，**

$$S_{i(x_{i+1})} = y_i + y'_i h_{i+1} + c_i h_{i+1}^2 + d_i h_{i+1}^3$$

となり，条件【1】を考慮すると $S_{i(x_i+1)} = y_{i+1}$ **となる．よって，係数** c_i **は**

$$c_i h_{i+1}^2 = y_{i+1} - y_i - y'_i h_{i+1} - d_i h_{i+1}^3$$

$$\therefore \quad c_i = \frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}^2} - \frac{y'_i}{h_{i+1}} - d_i h_{i+1} \quad \ldots \quad (5)$$

また，式(4)の $S'_{i(x)}$ **について同様に** $S'_{i(x_{i+1})}$ **について考えると**

$$S'_{i(x_{i+1})} = y'_i + 2\cdot c_i h_{i+1} + 3\cdot d_i h_{i+1}^2 \;=\; y'_{i+1} \quad \ldots \quad (6)$$

ここで，式(6) に式(5) の c_i **を代入すると**

$$\begin{aligned} S'_{i(x_{i+1})} &= y'_i + 2\left(\frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}^2} - \frac{y'_i}{h_{i+1}} - d_i h_{i+1}\right) h_{i+1} - 3\cdot d_i h_{i+1}3 \\ &= y'_i + 2\frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}} - 2\cdot y'_i - 2\cdot d_i h_{i+1}^2 + 3\cdot d_i h_{i+1}^2 \\ &= -y'_i + 2\frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}} + d_i h_{i+1}^2 = y'_{i+1} \end{aligned}$$

$$\therefore \quad d_i = \frac{y'_{i+1}+y'_i}{h_{i+1}^2} - 2\cdot\frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}{}^3} \quad \ldots \quad (7)$$

さて，２次微分においてもつなぎ目が連続である必要がある．ここで前の区間と現在の区間について考える．前の区間 $S_{i-1(x)}$ の２次微分を $S''_{i-1(x)}$ として求めるとき，

$$S''_{i-1(x)} = 2 \cdot c_{i-1} + 6 \cdot d_{i-1}(x - x_{i+1})$$

であり，ここで $x = x_i$ とすると

$$S''_{i-1(x_i)} = 2 \cdot c_{i-1} + 6 \cdot d_{i-1} h_i$$

となる．さらに現在の区間 $S_{i(x)}$ の２次微分を求め，$x = x_i$ とすると

$$S''_{i(x_i)} = 2 \cdot c_i$$

となる．条件【３】より $S''_{i-1(x_i)} = S''_{i(x_i)}$ であるから

$$2 \cdot c_{i-1} + 6 \cdot d_{i-1} h_i \ = \ 2 \cdot c_i \quad \ldots \quad (8)$$

である．これは，前の区間と現在の区間とのつなげ目が連続であることを表している．つまり，前の補間関数と現時点での補間関数とをある点で一致させていることになる．

式(8) について c_{i-1}，c_i および d_{i-1} について各々式(5)(7)を代入し，y'_i に関する新たな漸化式の形に整理する．

$$h_{i+1} y'_{i-1} + 2 \cdot (h_i + h_{i-1}) y'_i + h_i y_{i+1} = 3 \cdot \left[\underbrace{\frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}}_{\Delta f_i} h_{i+1} + \underbrace{\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}}}_{\Delta f_{i+1}} h_i \right] \quad \ldots \quad (9)$$

ここで未知の値は y'_{i-1}，y'_i，y'_{i+1} である．

上の漸化式は連立方程式の形で解くことができるが，もし区分の両端のどちらかにある場合には，境界条件【３】によって y'_1 と y'_{n+1} が与えられているので，その値を入れる．

ここで y'_i の係数を A_{ij} ，式(9) の右辺を B_i とし，連立方程式を行列で表すと以下のようになる．

$$
\begin{bmatrix}
A_{11} & A_{12} & A_{13} & & & & \\
& A_{22} & A_{23} & A_{24} & & & 0 \\
0 & & & \ddots & & & \\
& & & A_{n-1\,n-1} & A_{n-1\,n} & A_{n-1\,n+1}
\end{bmatrix}
\cdot
\begin{bmatrix}
y'_1 \\ y'_2 \\ \vdots \\ y'_{n+1}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
B_2 \\ B_3 \\ \vdots \\ B_n
\end{bmatrix}
$$

上式は未知数が２つ多いが，y_1，y_{n+1} に対しては条件【３】の境界条件を与えることで上式を解くことができる．

よって，d_i が決まれば式(5) より c_i も決まり，$b_i = y'_i$，$a_i = y_i$ なので，区間 $[x_i,\ x_{i+1}]$ の３次元多項式 $S_{i(x)}$ が求まることになる．

これを全ての区間において行うことで，全ての点を通る３次スプライン関数を求めることができる．

以上が３次スプライン関数における係数の導出方法の説明である．以下にこれらについてまとめた計算手順を示す．

■計算手順

(1) $a_i = y_i$

(2) 連立方程式の準備をする

[1] $h_i = x_i - x_{i-1}$

[2] $\Delta y_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}$，$\Delta y_{i+1} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}}$

[3] $3 \cdot (\Delta y_i h_{i+1} + \Delta y_{i+1} h_i)$

[1]〜[3]について全区間内の与えられたデータを用いて求める

(3) 連立方程式を行列式に変換し解く（ガウスの消去法等を用いる）．これによって，全ての y'_i が求まる．

(4) $b_i = y'_i$

(5) $c_i = (3 \cdot \Delta y_{i+1} - 2 \cdot y'_i - y'_{i+1}) \cdot h_{i+1}$

(6) $d_i = \frac{(y'_{i+1} + y'_{i+1} - 2 \cdot \Delta y_{i+1})}{h_{i+1}}$

以上で，ある区間におけるスプライン関数の式が求まる．補間値は求められた式に値を入力することで算出できる．