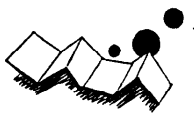


解説



スプライン関数†

秦野 和郎††

1. ま え が き

未知の関数を近似するのに、特に離散点でデータが与えられたようなときに従来から多項式、三角多項式が主として使われてきた。大抵の目的にこれらで満足しうる結果を得られるし、何よりも計算が容易であるという大きな特長がある。また、手計算で中間の結果をみながら計算をするときにはそれほど次数を高くする訳ではないのでこれらで十分である。

しかし計算機が広く使われるようになってきて事情が幾分変ってきた。Rungeの現象とか、Gibbsの現象とかいったような単なる理屈であって現実には起りそうもないように思える現象を多くの人が経験するようになった。計算機を使う人は数学の専門家ばかりではないからこれらの関数の数学的背景に特別の考慮を払う訳ではなく、単に要求にまかせて使うだけであるから理解に苦しむ結果が出ると戸惑ってしまう（筆者もそれを経験した一人である）。

計算が簡単にできるからといって多項式の次数をやたらに上げるべきではない。しかし全体を滑らかに結びたいと思うとそれでは要求に応えきれなくなってしまう。

このような目的に今日ではスプライン補間がよいと言われている。

それではスプライン補間とはどのような補間法か？ また、スプライン関数とはどのような関数か？

当り障りのない解釈は製図道具の spline (batten と呼ばれる。しな定規) をあまり力を加えないで使うときの数学的モデルと解釈することである。このように解釈すると、スプライン関数とは、区分的3次式で2次導関数まで連続な関数となりスプライン補間はそのような関数による補間という事になる。すなわち、製図道具の spline を

i) 与えられた点を通り ii) 折れ曲がらない（導関数は至る所で連続）ようにし iii) 両端で適当に角度をきめるようにしてやるか、あるいは特別の細工はしないことにするかはどちらでもよいがともかく、上のような条件で使うとそれは歪エネルギーが最小になるような姿態をとる。小変形の範囲内では歪エネルギーは曲率の近似すなわち2次導関数の自乗積分に比例する。この数学的モデルが3次スプライン補間と呼ばれるものである。

スプライン関数という言葉のを誰もが上のような関数のことと解釈していれば、それはそんなに難しい関数ではない筈である。しかし今日、文献をひもとくと、B-spline, G-spline, L-spline, Lg-spline, pLg-spline, Polynomial spline, deficient spline, Chebyshevian spline, trigonometric spline, 等々、数え上げたらきりがないほどスプラインの前につく形容詞が多い。これらの名前が関数のある表現に対してつけられることもあるが、しかしスプラインの種類が多い事も事実である。そして大抵のスプライン関数は、製図道具の spline とはほとんど関係がないと言ってもよい。文献によっては「区分的にある微分方程式を満たし（各区間ごとに方程式が異なっても差支えない）適当な滑らかさを持つ関数もスプライン関数の仲間である」としている⁸⁾。製図道具の spline からこのような関数を想像することは難しい。なぜここまでスプライン関数が拡張されてしまうのか、その背景を探ってみるのも無意味ではないと思う。

本稿ではある種のスプライン関数の持つ、最小ノルム性という性質に注目してその背景の一端を紹介する。

2. スプライン関数の多様性

本章では3次スプライン補間を出発点として、ある種のノルムを最小にするという考え、すなわち変分法的な側面からスプライン関数をどのように拡張しうるかを、主として文献4), 5) を中心にして概説する。な

† On Spline Functions by Kazuo HATANO (Department of Information Science, Faculty of Engineering, Fukui University).

†† 福井大学工学部情報工学科

お、記号を厳密に区別すると長くなってしまうので混乱を招かない範囲内で記号を重複した意味で使うことがある。

2.1 3次スプライン

[定義 2.1] 実軸上の有界閉区間 $I=[a, b]$ の分割を

$$\Delta: a=x_0 < x_1 < \dots < x_n=b \quad (2.1)$$

とする。このとき $D \equiv d/dx$ として

$$\begin{cases} \Delta \text{ の各部分区間 } (x_i, x_{i+1}) \text{ で } D^4 S(x)=0 \\ S(x) \in C^2[a, b] \end{cases} \quad (2.2)$$

をみたす実関数 $S(x)$ の全体を Δ の上で定義される 3 次のスプライン関数と定義し $S^{(2)}(\Delta)$ と書く。

与えられた実関数 $f(x) \in C^4[a, b]$ に対して

$$\begin{cases} S(x_i) = f(x_i): i=0, 1, \dots, n \\ S'(x_0) = f'(x_0), \quad S'(x_n) = f'(x_n) \end{cases} \quad (2.3)$$

をみたす $S^{(2)}(\Delta)$ の要素 $S(x)$ を $f(x)$ に対する 3 次の Type-I スプライン⁴⁾ (complete cubic spline interpolant⁶⁾ と呼ばれる) と定義し $S_A(f; x)$ と書く。また、

$$\begin{cases} S(x_i) = f(x_i): i=0, 1, \dots, n \\ S''(x_0) = S''(x_n) = 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

をみたす $S^{(2)}(\Delta)$ の要素 $S(x)$ を $f(x)$ に対する 3 次の Type-II' スプライン⁴⁾ (natural* cubic spline interpolant⁶⁾ と呼ばれる) と定義し、 $\tilde{S}_A(f; x)$ と書く。

これらは最小曲率性と呼ばれる次の性質を持っている。

[定理 2.1] $n \geq 1$ として、

$$\begin{cases} R(x_i) = f(x_i): i=0, 1, \dots, n \\ R(x) \in C^1[a, b], \quad R''(x) \in L^2[a, b]** \end{cases} \quad (2.5)$$

をみたす実関数 $R(x)$ の全体を $K^{(2)}[a, b]$ とする。さらに、 $K^{(2)}[a, b]$ の部分集合として式 (2.5) および、

$$R'(x_0) = f'(x_0), \quad R'(x_n) = f'(x_n) \quad (2.6)$$

をみたす $R(x)$ の全体を $K_I^{(2)}[a, b]$ とする。

このとき任意の $R(x) \in K_I^{(2)}[a, b]$ に対して

$$\int_a^b \{S_A''(f; x)\}^2 dx \leq \int_a^b \{R''(x)\}^2 dx \quad (2.7)$$

である。また、任意の $R(x) \in K^{(2)}[a, b]$ に対して、

$$\int_a^b \{\tilde{S}_A''(f; x)\}^2 dx \leq \int_a^b \{R''(x)\}^2 dx \quad (2.8)$$

* この名前は多分に誤解を与えがちな名前である。名前から想像するとこの関数が視覚的に自然な曲線を与えるような印象を受けるが事実はそうではない。両端付近に不自然な振動が現われることを多くの著者が指摘している。

** 自乗可積分の意。すなわち $\int_a^b \{R''(x)\}^2 dx \leq M < \infty$

である。さらに $S_A(f; x)$ は $R(x) \in K_I^{(2)}[a, b]$ の中で、 $\|R''(x)\|_2 = \int_a^b \{R''(x)\}^2 dx$ を最小とする許され得る唯一の関数である。また、 $\tilde{S}_A(f; x)$ は $R(x) \in K^{(2)}[a, b]$ の中で $\|R''(x)\|_2$ を最小とする許され得る唯一の関数である (証明は 2.2 節の証明で $m=2$ とおけばよい)。

このことは言い換えると、 $S_A(f; x)$ は Dirichlet 型境界条件、式 (2.6) のもとにおける $K^{(2)}[a, b]$ の中で $\|R''(x)\|_2$ の最小解であることを意味する。また、 $\tilde{S}_A(f; x)$ は自然な境界条件のもとにおける $K^{(2)}[a, b]$ の中で $\|R''(x)\|_2$ の最小解であることを意味する。

ここでは触れないが上のような最小化問題の解として $S_A(f; x)$ 、 $\tilde{S}_A(f; x)$ を具体的に構成することができる。

2.2 奇数次の多項式スプライン

さて、上の結果を次のように拡張できないかと考えてみよう。

$f(x) \in C^{2m}[a, b]$ を与えられた実関数とし、 $n \geq m-1$ として

$$\begin{cases} R(x_i) = f(x_i): i=0, 1, \dots, n \\ R(x) \in C^{m-1}[a, b], \quad R^{(m)}(x) \in L^2[a, b] \end{cases} \quad (2.9)$$

をみたす $R(x)$ の全体を $K^{(m)}[a, b]$ とする。

このとき Dirichlet 型の境界条件

$$\begin{cases} R^{(\alpha)}(x_0) = f^{(\alpha)}(x_0) \\ R^{(\alpha)}(x_n) = f^{(\alpha)}(x_n) \end{cases} : \alpha=1, 2, \dots, m-1 \quad (2.10)$$

のもとにおいて $R(x) \in K^{(m)}[a, b]$ の中で $\|R^{(m)}(x)\|_2$ を最小にする解は存在するか？ また、自然な境界条件のもとにおいて $R(x) \in K^{(m)}[a, b]$ の中で $\|R^{(m)}(x)\|_2$ を最小にする解は存在するか？

これらの解はいずれも一意的に存在し、それぞれ次に定義する $2m-1$ 次の Type-I スプライン⁴⁾、Type-II' スプライン⁴⁾ になる。

[定義 2.2]

$$\begin{cases} \Delta \text{ の各部分区間 } (x_i, x_{i+1}) \text{ で } D^{2m} S(x)=0 \\ S(x) \in C^{2m-2}[a, b] \end{cases} \quad (2.11)$$

をみたす実関数 $S(x)$ の全体を Δ の上で定義される $2m-1$ 次 (order $2m$) のスプライン関数と定義し、 $S^{(m)}(\Delta)$ と書く。このとき

$$\begin{cases} S(x_i) = f(x_i): i=0, 1, \dots, n \\ \begin{cases} S^{(\alpha)}(x_0) = f^{(\alpha)}(x_0) \\ S^{(\alpha)}(x_n) = f^{(\alpha)}(x_n) \end{cases} : \alpha=1, 2, \dots, m-1 \end{cases} \quad (2.12)$$

をみたす $S^{(m)}(\Delta)$ の要素 $S(x)$ を $f(x)$ に対する $2m-1$ 次の Type-I スプラインと定義し $S_A(f; x)$ と書く。

また,

$$\begin{cases} S(x_i) = f(x_i) : i=0, 1, \dots, n \\ S^{(\alpha)}(x_0) = S^{(\alpha)}(x_n) = 0 : \alpha = m, m+1, \dots, 2m-2 \end{cases} \quad (2.13)$$

をみたす $S^{(m)}(\mathcal{A})$ の要素 $S(x)$ を $f(x)$ に対する $2m-1$ 次の Type-II' スプラインと定義し $\tilde{S}_A(f; x)$ と書く.

次に Type-I スプラインが式 (2.10) の条件のもとに $R(x) \in K^{(m)}[a, b]$ の中で $\|R^{(m)}(x)\|_2^2$ を最小にする唯一の関数であることを証明する.

[証明 2.1] まず

$$\begin{aligned} \{R^{(m)}(x)\}^2 &= \{R^{(m)}(x) - S_A^{(m)}(f; x)\}^2 \\ &\quad + \{S_A^{(m)}(f; x)\}^2 + 2S_A^{(m)}(f; x)\{R^{(m)}(x) \\ &\quad - S_A^{(m)}(f; x)\} \end{aligned} \quad (2.14)$$

である. 次に,

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b S_A^{(m)}(f; x)\{R^{(m)}(x) - S_A^{(m)}(f; x)\} dx \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} S_A^{(m)}(f; x)\{R^{(m)}(x) \\ &\quad - S_A^{(m)}(f; x)\} dx \end{aligned} \quad (2.15)$$

と置く. 部分積分を反復適用すると

$$\begin{aligned} I_i &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} S_A^{(m)}(f; x)\{R^{(m)}(x) - S_A^{(m)}(f; x)\} dx \\ &= \sum_{\alpha=0}^{m-1} (-1)^\alpha \left[S_A^{(m+\alpha)}(f; x)\{R^{(m-1-\alpha)}(x) \right. \\ &\quad \left. - S_A^{(m-1-\alpha)}(f; x)\} \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \\ &\quad + (-1)^m \int_{x_i}^{x_{i+1}} S_A^{(2m)}(f; x)\{R(x) \\ &\quad - S_A(f; x)\} dx \end{aligned} \quad (2.16)$$

が得られる. ここで $S_A(f; x)$, $R(x) \in K^{(m)}[a, b]$ のみたす条件式, (2.9), (2.11), 式 (2.12) の第一式を使うと,

$$\begin{aligned} I &= \sum_{i=0}^{n-1} I_i = \sum_{\alpha=0}^{m-1} (-1)^\alpha S_A^{(m+\alpha)}(f; x_n) \\ &\quad \times \{R^{(m-1-\alpha)}(x_n) - S_A^{(m-1-\alpha)}(f; x_n)\} \\ &\quad - \sum_{\alpha=0}^{m-1} (-1)^\alpha S_A^{(m+\alpha)}(f; x_0) \\ &\quad \times \{R^{(m-1-\alpha)}(x_0) - S_A^{(m-1-\alpha)}(f; x_0)\} \end{aligned} \quad (2.17)$$

となる. さらに式 (2.10), 式 (2.12) の第二式を使うと, $I=0$ となることが容易にわかる. したがって,

$$\begin{aligned} \int_a^b \{R^{(m)}(x)\}^2 dx &= \int_a^b \{R^{(m)}(x) - S_A^{(m)}(f; x)\}^2 dx \\ &\quad + \int_a^b \{S_A^{(m)}(f; x)\}^2 dx \end{aligned} \quad (2.18)$$

である. この式から $\|R^{(m)}(x)\|_2^2$ は $R^{(m)}(x) = S_A^{(m)}(f; x)$ のとき最小となる.

次に, $R(x) \in C^{m-1}[a, b]$, $S_A(f; x) \in C^{2m-2}[a, b]$ であるから $R^{(m)}(x) = S_A^{(m)}(f; x)$ であれば区間 $[a, b]$ において,

$$R(x) = S_A(f; x) + \sum_{\alpha=0}^{m-1} A_\alpha (x-x_0)^\alpha \quad (2.19)$$

である. この式に, 式 (2.9), (2.10), (2.12) を適用すると $A_\alpha = 0 : \alpha = 0, 1, \dots, m-1$ となる. したがって, 式 (2.10) をみたす $R(x) \in K^{(m)}[a, b]$ の中で $S_A(f; x)$ は $\|R^{(m)}(x)\|_2^2$ を最小にし, また, これを最小にする $R(x)$ は $S_A(f; x)$ に限ることがわかる.

Type-II' スプラインについても同じようにして証明できる.

以上に述べたように, ある性質をもつ関数の中で, $\int_a^b \{R^{(m)}(x)\}^2 dx$ を最小にする関数は閉区間 $[a, b]$ において $2m-2$ 次導関数まで連続な $2m-1$ 次*の区分的多項式になることがわかった.

次に式 (2.9), (2.10) を少し変えて次のようにしてみよう. $f(x) \in C^{m-1}[a, b]$ を与えられた実関数とし,

$$k = (k_1, k_2, \dots, k_{n-1})^T : 1 \leq k_i \leq m^{**} \quad (2.20)$$

として,

$$\begin{cases} R^{(\alpha)}(x_i) = f^{(\alpha)}(x_i) : \alpha = 0, 1, \dots, k_i - 1; \\ \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \\ R(x) \in C^{m-1}[a, b], \quad R^{(m)}(x) \in L^2[a, b] \\ R^{(\alpha)}(x_0) = f^{(\alpha)}(x_0) \\ R^{(\alpha)}(x_n) = f^{(\alpha)}(x_n) : \alpha = 0, 1, \dots, m-1 \end{cases} \quad (2.21)$$

をみたす $R(x)$ の全体を $K^{(m)}[a, b]$ とする.

このとき $\|R^{(m)}(x)\|_2^2$ を最小とする $R(x) \in K^{(m)}[a, b]$ は一意に存在するか? また, 存在するならばどのような関数になるか?

これは次に定義されるような区分的 $2m-1$ 次式で, $x=x_i$ の付近で $2m-1-k_i$ 次導関数まで連続な関数となる.

[定義 2.3]

$$\begin{cases} \mathcal{A} \text{ の各部分区間 } (x_i, x_{i+1}) \text{ で } D^{2m}S(x) = 0 \\ S(x) \in C^{2m-1-k_i}(x_{i-1}, x_{i+1}) : i = 1, 2, \dots, n-1 \end{cases} \quad (2.22)$$

をみたす実関数 $S(x)$ の全体を $\mathcal{A}$ の上で定義される $2m-1$ 次の deficient spline⁴⁾ と定義し***, $S^{(m)}(\mathcal{A})$ と書く. このとき

* 式 (2.11) の $D^{2m}S(x)=0$ から order $2m$ のスプラインと呼ばれることが多い.

** incidence vector³⁾ と呼ばれる.

*** $S(x)$ は x_i において deficiency k_i であるという.

$$\begin{cases} S^{(\alpha)}(x_i) = f^{(\alpha)}(x_i) : \alpha=0, 1, \dots, k_i-1; \\ \quad i=1, 2, \dots, n-1 \\ S^{(\alpha)}(x_0) = f^{(\alpha)}(x_0) : \alpha=1, 2, \dots, m-1 \\ S^{(\alpha)}(x_n) = f^{(\alpha)}(x_n) \end{cases} \quad (2.23)$$

をみたす $S^{(m)}(\Delta)$ の要素 $S(x)$ を Type-I deficient spline⁴⁾ と定義し, $S_A(f; x)$ と書く.

$S_A(f; x)$ は $R(x) \in K^{(m)}[a, b]$ の中で

$$\int_a^b \{R^{(m)}(x)\}^2 dx$$

を最小にする. また, これを最小にする $R(x)$ は $S_A(f; x)$ に限る. 証明は [証明 2.1] と同じようにしてできる.

2.3 L-spline⁵⁾ (一般化されたスプライン⁴⁾)

以上のようにスプラインは $\int_a^b \{R^{(m)}(x)\}^2 dx$ を最小に

する関数から $\int_a^b \{R^{(m)}(x)\}^2 dx$ を最小にする関数へと拡張できることがわかった. 次に $R^{(m)}(x)$ すなわち, $D^m R(x)$ をより一般的な微分式で置き換えることができないかと考えてみよう.

$$\begin{cases} a_j(x) \in C^{m-1}[a, b] : j=0, 1, \dots, m \\ a_j^{(m)}(x) \in L^2[a, b] \\ a_m(x) \text{ は閉区間 } [a, b] \text{ で零にならない関数} \end{cases} \quad (2.24)$$

を使って order m の微分式 $L[u(x)]$ およびその形式的随伴微分式 $L^*[v(x)]$ を

$$L[u(x)] = \sum_{j=0}^m a_j(x) D^j u(x) \quad (2.25)$$

$$L^*[v(x)] = \sum_{j=0}^m (-1)^j D^j \{a_j(x) v(x)\} \quad (2.26)$$

と定義する*.

さて, $f(x) \in C^{m-1}[a, b]$ を与えられた実関数として式 (2.21) をみたす $R(x)$ の全体を $K_L^{(m)}[a, b]$ とする.

このとき次に定義する $S_A(f; x)$ は $\int_a^b \{L[R(x)]\}^2 dx$ を最小にする.

[定義 2.4]

$$\begin{cases} \Delta \text{ の各部分開区間 } (x_i, x_{i+1}) \text{ で } L^* L[S(x)] = 0 \\ S(x) \in C^{2m-1-k_i}(x_{i-1}, x_{i+1}) : i=1, 2, \dots, n-1 \\ S^{(2m)}(x) \in L^2[a, b] \end{cases} \quad (2.27)$$

をみたす $S(x)$ の全体を Δ の上で定義される L-spline と定義し, $S_L^{(m)}(x)$ と書く. このとき, 式 (2.23) をみたす $S_L^{(m)}(x)$ の要素 $S(x)$ を Type-I L-spline 補間⁵⁾ と定義し, $S_A(f; x)$ と書く. (一意存在性については文献 5) 参照)

* すべてが実なら $L^*[v(x)]$ は随伴微分式である. しかし $a_j(x)$ のみは実とは限定しない. 式 (2.26) で, $a_j(x)$ が実でないときでも $a_j(x)$ とはしない. 文献 3) p. 855 参照.

[定理 2.2] $S_A(f; x)$ は $R(x) \in K_L^{(m)}[a, b]$ の中で $\int_a^b \{L[R(x)]\}^2 dx$ を最小にする関数である.

[証明 2.2] $L[u(x)]$ に対する随伴双線型微分式を $P(u, v)$ とすると

$$P(u, v) = \sum_{j=0}^{m-1} D^{m-j-1} u(x) \sum_{k=0}^j (-1)^k D^k \{a_{m-j+k}(x) v(x)\} \quad (2.28)$$

である*. 式 (2.25), (2.26), (2.28) に関して

$$\begin{aligned} v(x) L[u(x)] - u(x) L^*[v(x)] \\ = DP(u(x), v(x)) \end{aligned} \quad (2.29)$$

が成り立つ. 上式で $u(x) = R(x) - S_A(f; x)$, $v(x) = L[S_A(f; x)]$ とおき, 両辺を x_i から x_{i+1} まで積分すると,

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} L[S_A(f; x)] \cdot L[R(x) - S_A(f; x)] dx \\ - \int_{x_i}^{x_{i+1}} \{R(x) - S_A(f; x)\} \{L^*[L[S_A(f; x)]]\} dx \\ = \left[P(R(x) - S_A(f; x), L[S_A(f; x)]) \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \end{aligned} \quad (2.30)$$

である. $i=0, 1, \dots, n-1$ に対して左辺第二項は, 式 (2.27) の第一式から零である. 次に

$$I_i = \left[P(R(x) - S_A(f; x), L[S_A(f; x)]) \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \quad (2.31)$$

とおいて $I = \sum_{i=0}^{n-1} I_i$ がどのような値をとるかを考えてみる. $j=0, 1, \dots, m-1$ に対して

$$\beta_j(x) = \sum_{k=0}^j (-1)^k D^k \{a_{m-j+k}(x) L[S_A(f; x)]\} \quad (2.32)$$

とおき, 式 (2.28) を使うと式 (2.31) は

$$I_i = \left[\sum_{j=0}^{m-1} (D^{m-j-1} \{R(x) - S_A(f; x)\}) \cdot \beta_j(x) \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \quad (2.33)$$

と書き改められる.

次に式 (2.24), (2.27) から

$$\begin{aligned} \beta_j(x_i-) = \beta_j(x_i+) : j=0, 1, \dots, m-1-k_i; \\ i=1, 2, \dots, n-1 \end{aligned} \quad (2.34)$$

である. さらに式 (2.21), (2.23) から

$$\begin{cases} R^{(\alpha)}(x_i-) - S_A^{(\alpha)}(f; x_i-) \\ = R^{(\alpha)}(x_i+) - S_A^{(\alpha)}(f; x_i+) \\ : \alpha=k_i, k_i+1, \dots, m-1 \\ R^{(\alpha)}(x_i) - S_A^{(\alpha)}(f; x_i) = 0 : \alpha=0, 1, \dots, k_i-1 \\ ; i=1, 2, \dots, n-1 \end{cases} \quad (2.35)$$

* 文献 2) p. 317, 問題 11, 文献 3) p. 855.

$$\begin{cases} R^{(\alpha)}(x_0) - S_{\lambda}^{(\alpha)}(f; x_0) = 0 \\ R^{(\alpha)}(x_n) - S_{\lambda}^{(\alpha)}(f; x_n) = 0 \end{cases} : \alpha = 0, 1, \dots, m-1 \quad (2.36)$$

が成り立つ。式 (2.34), (2.35), (2.36) を式 (2.33) に適用すると結局 $I=0$ となることがわかる。

以上の結果を式 (2.30) に適用すると、

$$\int_a^b L[R(x) - S_{\lambda}(f; x)] \cdot L[S_{\lambda}(f; x)] dx = 0 \quad (2.37)$$

が得られる。

さて、

$$\begin{aligned} \int_a^b \{L[R(x)]\}^2 dx &= \int_a^b \{L[R(x) - S_{\lambda}(f; x)]\}^2 dx \\ &+ \int_a^b \{L[S_{\lambda}(f; x)]\}^2 dx \\ &+ 2 \int_a^b L[R(x) - S_{\lambda}(f; x)] \cdot L[S_{\lambda}(f; x)] dx \end{aligned} \quad (2.38)$$

である。この式で右辺最後の項は式 (2.37) から零である。したがって $\int_a^b \{L[R(x)]\}^2 dx$ は $L[S(x)] = L[S_{\lambda}(f; x)]$ すなわち $L[R(x) - S_{\lambda}(f; x)] = 0$ のとき最小になる。

以上から少なくとも $S_{\lambda}(f; x)$ が $\int_a^b \{L[R(x)]\}^2 dx$ を最小にする関数であることがわかった。

$S_{\lambda}(f; x)$ が $\int_a^b \{L[R(x)]\}^2 dx$ を最小にする唯一の関数であるかどうかは微分演算子 L に依存する。すなわち、

$u(x) \in C^{m-1}[a, b]$, $u^{(m)}(x) \in L^2[a, b]$ (2.39) をみたす実関数 $u(x)$ の全体を $K_*^{(m)}[a, b]$ としたとき

$$\begin{cases} u^{(\alpha)}(x_i) = 0 : \alpha = 0, 1, \dots, k_i - 1; i = 1, 2, \dots, n-1 \\ u^{(\alpha)}(x_0) = u^{(\alpha)}(x_n) = 0 : \alpha = 0, 1, \dots, m-1 \end{cases} \quad (2.40)$$

を境界条件とする m 階の同次微分方程式

$$L[u(x)] = 0 \quad (2.41)$$

の解 $u(x) \in K_*^{(m)}[a, b]$ が $u(x) \equiv 0$ と一意的にきまるとき、 $S_{\lambda}(f; x)$ は $\int_a^b \{L[R(x)]\}^2 dx$ を最小にする唯一の関数である*。

L-spline の例として三角スプラインがしばしば文献にあらわれている。

$i = \sqrt{-1}$ を虚数単位として、

$$L[u(x)] = D(D+i)(D+2i)(D+3i)u(x) \quad (2.42)$$

とすると、

$$L^*L[u(x)] = D^2(D^2+1)(D^2+2^2)(D^2+3^2)u(x) \quad (2.43)$$

である。 $L^*L[u(x)] = 0$ の解は

$$u(x) = C_0 + C_1x + \sum_{j=1}^3 (A_j \cos jx + B_j \sin jx) \quad (2.44)$$

の形になる。特に $C_1=0$ とおけば $u(x)$ は 3 次の三角多項式になる。式 (2.27) の L-spline の定義から、区分的に式 (2.44) の形で与えられ、適当な滑らかさを持つ関数はスプライン関数である。

なお、三角スプラインは比較的近い将来、実用的に使われるようになるのではないと思われる。最近、Lyche, Winther⁹⁾ が三角差商を使って三角 B-spline を定義し、その線型結合として表現される三角スプラインを安定に計算する手法を提案している。

もう一つ、比較的よく知られているスプラインに、Schweikert の spline in tension¹¹⁾ がある。

$$L[u(x)] = D(D-\lambda)u(x) \quad (2.45)$$

とすると

$$L^*L[u(x)] = D^2(D^2-\lambda^2)u(x) = 0 \quad (2.46)$$

の解は、

$$u(x) = C_0 + C_1x + C_2e^{\lambda x} + C_3e^{-\lambda x} \quad (2.47)$$

の形になる。これは強いて言えば指数スプラインまたは双曲線スプラインという感じになる。

なお、これによる補間の FORTRAN プログラムが A. Cline¹²⁾ によって与えられている。

本章では、ある種のノルムを最小にするスプラインについて概説したが、この性質がスプラインの固有の性質ではない。何らかの形で定義された幾種かのスプラインの共通性を見い出すために展開されてきた議論であると思われるので一部に幾分かのぎこちなさがあるのは止むを得ない。

3. 多項式スプライン

本章では、主として文献 6), 7) を参考にし、スプライン関数を多項式スプラインに限ってその表現方法について述べる。その際、特に最小ノルム性という事にこだわらず任意の次数のスプラインという事にする。

さて、

$$\begin{cases} \Delta \text{ の各部分開区間 } (x_i, x_{i+1}) \text{ で } D^k S(x) = 0 \\ S(x) \in C^{k-1-\lambda_i}(x_{i-1}, x_{i+1}) : i = 1, 2, \dots, n-1 \\ 1 \leq \lambda_i \leq k : i = 0, 1, \dots, n \end{cases} \quad (3.1)$$

を満足する関数 $S(x)$ がどのように表現されるかを考えてみよう。

* 文献 4) p. 196, Theorem 6.5.1, 6.5.2

このとき

$$S(x) = \sum_{j=0}^{k-1} a_{i,j}(x-x_i)^j : x \in [x_i, x_{i+1})$$

$$: i=0, 1, \dots, n-1 \quad (3.2)$$

と書いたのでは $\lambda_i = k : i=1, 2, \dots, n-1$ のときを除いて従属なパラメータが出てくる。特に $\lambda_i = 1$ のときなら nk 個ある $a_{i,j}$ のうち $n+k-1$ 個の $a_{i,j}$ のみが独立で残りは全部従属パラメータになってしまう。大抵の目的にこれでは困る。いま、

$$f(x) = x_+^{k-1} = \begin{cases} x^{k-1} : x \geq 0 \\ 0 : x < 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

なる関数の振舞いを考えてみよう。 x で両辺を l 回微分すると

$$f^{(l)}(x) = \frac{(k-1)!}{(k-1-l)!} x_+^{k-1-l} \quad (3.4)$$

である。この式で、 $l=k-1$ として x を負から正に動かしてゆくと x が零を越える所で、零から $(k-1)!$ へと跳躍が起る。一方、

$$f^{(l)}(0-) = f^{(l)}(0+) : l=0, 1, \dots, k-2 \quad (3.5)$$

である。したがって $f(x) \in C^{k-2}(-\infty, \infty)$ であることが容易にわかる。

この関数を使って、 $\lambda_i = 1$ のとき $S(x)$ は

$$S(x) = \sum_{j=0}^{k-1} a_j(x-x_0)^j + \sum_{i=1}^{n-1} b_i(x-x_i)_+^{k-1} \quad (3.6)$$

と表現できる。すなわち、まず全体に $k-1$ 次の多項式（第一項）があって、 x が左から右へ動いてゆくと、 x_i を越えるたびに $b_i(x-x_i)_+^{k-1}$ なる項が加わって $k-1$ 次導関数に跳躍が生じてゆく（図を書いてみるとわかりやすい）。同じように λ_i のすべてが 1 でないとき $S(x)$ は

$$S(x) = \sum_{j=0}^{k-1} a_j(x-x_0)^j + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=0}^{\lambda_i-1} b_{i,j}(x-x_i)_+^{k-1-j} \quad (3.7)$$

の形で表現される。

これらの表現は多項式スプラインの性質を直観的に示す式ではあるが、 k, n が小さいときを除いて実用性に乏しい。その理由を考えるために $x_i = i : i=0, 1, \dots, n$ としてみよう。このとき $b_{1,j}(x-x_1)_+^{k-1-j}$ は $x=x_0$ の付近で、 b_1 の絶対値がよほど小さくない限りきわめて絶対値の大きい数字になることが容易にわかる（やはり図を書いてみるとわかりやすい）。もし、 $x=x_0$ の付近で $S(x)$ が並の大きさの数字をとらないといけなるとすると、それは猛烈な桁落ちを起して得られる数字の筈である。したがってこれらの表現は数値

的に不安定で実際の計算には使えない。この不都合は $(x-x_i)_+^{k-1}$ なる関数が大域的であることによる。

局所的な基底関数を構成する可能性を考えるために

$$B_i(x) = \sum_{j=i}^{i+k-1} b_j(x-x_j)_+^{k-1}(x-x_{i+k})_+^{k-1} \quad (3.8)$$

とおいてみて

$$B_i(x) \equiv 0 : x > x_{i+k} \quad (3.9)$$

となるように $b_j : j=i, i+1, \dots, i+k-1$ をきめることができないかと考えてみる。 $x > x_{i+k}$ において式 (3.8) の両辺 ($m-1$ 次の多項式である) を微分してみて、すべての次数の導関数を恒等的に零とおいてみると、 b_j を未知数とする k 個の方程式が得られる。一方、未知数 b_j の個数は k 個であるから b_j が一意に定まるかどうかはなお吟味を要するとしても少なくとも、式 (3.8) の形で

$$\begin{cases} B_i(x) \equiv 0 : x < x_i, x > x_{i+k} \\ B_i(x) \in C^{k-2}(-\infty, \infty) \end{cases} \quad (3.10)$$

を満足し恒等的に零ではないような $B_i(x)$ が存在することだけはわかる。これを差商を使って巧妙に構成したのが B-spline である。

B-spline およびその計算法を理解するには、差商に関する若干の知識を必要とする。

$f(x)$ の $x=x_0, x_1, \dots, x_k$ における k 次差商とは

$$\begin{cases} f[x_0, x_1, \dots, x_k] \\ = \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_k] - f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0} \\ f[x_0] = f(x_0) \end{cases} \quad (3.11)$$

により再帰的に定義されるものである。これに関して

(i)

$$\begin{cases} f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \sum_{j=0}^k \frac{f[x_j]}{\alpha_j^{(k)}} \\ \alpha_j^{(k)} = (x-x_0)(x-x_1)\dots \\ (x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\dots(x-x_k) \end{cases} \quad (3.12)$$

(ii) $f(x)$ が $k-1$ 次以下の多項式のとき

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = 0 \quad (3.13)$$

(iii)

$$\begin{aligned} f[x_0, x_1, \dots, x_k, \overbrace{x, x, \dots, x}^{r+1 \text{ 個}}] \\ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f[x_0, x_1, \dots, x_k, x+\varepsilon, \dots, x+r\varepsilon] \\ = \frac{1}{r!} \cdot \frac{d^r}{dx^r} f[x_0, x_1, \dots, x_k, x] \end{aligned} \quad (3.14)$$

(iv) $f(x) = u(x)v(x)$ のとき

$$\begin{aligned} f[x_0, x_1, \dots, x_k] \\ = \sum_{j=0}^k u[x_0, x_1, \dots, x_j] \cdot v[x_j, x_{j+1}, \dots, x_k] \end{aligned}$$

(3.15)

が成り立つ*。

B-splineを導入するためにまず次のような実軸上の有限閉区間 (c, d) の分割を考える。すなわち、

$$\Delta_n: c < \dots < t_{-1} < t_0 < t_1 < \dots < d \quad (3.16)$$

x をパラメータとして Δ_n の上で定義される関数

$$g_k(t; x) = (t - x)_+^{k-1} \quad (3.17)$$

の $t = t_j, t_{j+1}, \dots, t_{j+k}$ における k 次差商

$$M_{j,k}(x) = g_k[t_j, t_{j+1}, \dots, t_{j+k}; x] \quad (3.18)$$

を B-spline と定義する**。

式 (3.12), (3.17) を使うと式 (3.18) は

$$M_{j,k}(x) = \sum_{r=j}^{j+k} \frac{(t_r - x)_+^{k-1}}{A_r(k)} \quad (3.19)$$

の形になる。 $t_j \leq x$ のとき上式は t についての $k-1$ 次多項式の k 次差商であるから式 (3.13) から零である。また、 $t_{j+k} \leq x$ のとき式 (3.19) は恒等的に零であるような関数の k 次差商であるから零である。したがって $M_{j,k}(x)$ は $t_j < x < t_{j+k}$ においてのみ零でない(局所性)。

この局所性から有限個の $M_{j,k}(x)$ が線型独立であることはすぐにわかる。いま $-\infty < K < L < \infty$ として

$$s(x) = \sum_{j=K}^L C_j * M_{j,k}(x) \quad (3.20)$$

とおき、 $s(x)$ が恒等的に零すなわち、

$$s(x) \equiv 0 : x \in (c, d) \quad (3.21)$$

が成り立つための条件を考えてみよう。

$x = (t_K + t_{K+1})/2$ においては $M_{K,k}(x)$ のみが零でない。したがって式 (3.21) が成り立つためには、 $C_K^* = 0$ でなければならない。

次に $x = (t_{K+1} + t_{K+2})/2$ においては $M_{K,k}(x), M_{K+1,k}(x)$ のみが零でない。一方 $C_K^* = 0$ としているから式 (3.21) が成り立つためには $C_{K+1}^* = 0$ でなければならない。

この議論を続けてゆくと、式 (3.21) が成り立つためには結局 $C_j^* = 0 : j = K, K+1, \dots, L$ でなければならないことがわかる。したがって $M_{j,k}(x) : j = K, K+1, \dots, L$ は線型独立である。

さて、 Δ_n と Δ とに次のような対応をつけてすなわち、

$$t_j = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (x_j - \varepsilon) : j = 0, 1, \dots, n \quad (3.22)$$

* (i), (ii), (iii) は Hildebrand¹⁰⁾, pp. 38-41, (iv) の証明は幾分面倒であるが同じ本の p. 54, 問題 10 のヒントに従えばできる。または de Boor¹¹⁾, p. 5, (iv) (Leibnitz' formula)

** 実際の計算には正規化された B-spline $N_{j,k}(x) = (t_{j+k} - t_j) M_{j,k}(x)$ を使うのが好ましい。しかしここではこの関数に言及する余裕がない。

として、閉区間 $[x_0, x_n]$ で恒等的に零ではない $M_{j,k}(x)$ のみの線型結合を作ってみる(残りの t_j は式 (3.16) を満足する限り何でもよい)。

$$S(x) = \sum_{j=-k+1}^{n-1} C_j * M_{j,k}(x) \quad (3.23)$$

が式 (3.6) と同じ性質を持つ関数であることは式 (3.19) を代入して整理してみるとすぐにわかる。すなわち、式 (3.1) で定義される $S(x)$ は局所的な関数の線型結合で与えられる。

λ_i のすべてが 1 でないときには少し厄介な解釈が必要である。 Δ_n と Δ とに

$$\begin{cases} t_{A(j)-s} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \{x_j - (1+s)\varepsilon\} : \lambda_j - 1 \geq s \geq 0 \\ A(j) = \sum_{r=1}^j \lambda_r : 0 \leq j \leq n \end{cases} \quad (3.24)$$

なる対応をつけてみる(図を書いてみるとわかりやすい)。次に閉区間 $[x_0, x_n]$ において恒等的に零ではない $M_{j,k}(x)$ の線型結合を作ってみる。すなわち

$$S(x) = \sum_{j=-k+1}^{A(n-1)} C_j * M_{j,k}(x) \quad (3.25)$$

としてみる。この式に式 (3.12) を適用して次に式 (3.14) を適用する。その際、式 (3.19) に見られるように、 x が分子にあらわれるだけであることを考慮すると、式 (3.25) が式 (3.7) のような形になることを確認することは(長い式を度々書かなければならないが)それほど困難ではない。以上のように式 (3.1) で定義される $S(x)$ は式 (3.25) で与えられる*。

式 (3.23) と (3.25) を比較してみると B-spline による $S(x)$ の表現では λ_i によらず同じ形の式になることがわかる。さらに式 (3.24) では $\varepsilon \rightarrow +0$ としているが ε が小さな正数から 0 に収束したとき $M_{j,k}(x)$ の形が急激に変わる訳ではなく、連続的に変ってゆく。したがって ε を必ずしも極限値であると考えする必要はない。このように考えると $\lambda_i \neq 1$ のときにはごく接近させた λ_i 個の節点がある位置にあると考えてよく式 (3.23) と (3.25) とは数学的性質(連続性)が同じ式であると考えてよい。ただし、このとき $x \in [t_{A(j)-\lambda_{j+1}}, x_j]$ は測度零の点として $S(x)$ の定義域から除いておいた方がよい。

次に、 $M_{j,k}(x)$ のみたす漸化式を導く。

式 (3.15) で

$$\begin{cases} f(t) = g_k(t; x) \\ u(t) = g_{k-1}(t; x), \quad v(t) = t - x \end{cases} \quad (3.26)$$

* $\lambda_i \neq 1$ のとき x_i は λ_i 個の t_j が集積した点と見なされる。このことから x_i は多重度 λ_i の節点と呼ばれる。また、 $S(x)$ は多重節点を持つスプラインと呼ばれる。deficiency k_i と multiplicity k_i とは同じことである。

と試みる。 $v(t)$ の 2 次以上の差商が零であることを使うと

$$\begin{aligned} g_k[t_j, t_{j+1}, \dots, t_{j+k}; x] \\ = g_{k-1}[t_j, t_{j+1}, \dots, t_{j+k-1}; x] \cdot 1 \\ + g_{k-1}[t_j, t_{j+1}, \dots, t_{j+k}; x] \cdot (t_{j+k} - x) \end{aligned} \quad (3.27)$$

である。この式に、式 (3.18) を代入し少し書き直すと、

$$\begin{aligned} M_{j,k}(x) = \frac{x - t_j}{t_{j+k} - t_j} M_{j,k-1}(x) \\ + \frac{t_{j+k} - x}{t_{j+k} - t_j} M_{j+1,k-1}(x) \end{aligned} \quad (3.28)$$

が得られる。さらに (図を書いてみるとわかるが)、

$$M_{j,1}(x) = \begin{cases} 1/(t_{j+1} - t_j) : x \in [t_j, t_{j+1}) \\ 0 : x \in [t_j, t_{j+1}] \end{cases} \quad (3.29)$$

である。この 2 つの式から数値的にきわめて安定に、 $x \in [t_j, t_{j+1})$ における零ではない k 個の $M_{j,k}(x)$ を一挙に求めることができる。

多項式スプライン $S(x)$ に関する導関数とか積分、節点 x_i に関する導関数など、大抵の量は式 (3.28), (3.29) から計算することができる。しかしこれらの具体的な計算法に言及すると紙数を大幅に越えてしまうので割愛する。

4. むすび

第 2 章で、スプラインは、あるノルムを最小とするような関数であると解釈してきた。しかし、この制約はスプライン関数の固有の性質とはみなされていない。L-spline から最小ノルム性をとってしまうと、区分的に微分方程式をみたし、適当な滑らかさを持つ関数をスプラインと定義しても不自然ではない (Prenter⁶⁾, p. 104)。しかしここまでスプラインの定義を拡張してしまうと普通に使う大抵の関数はスプライン関数であるという事になってしまう。

多項式スプラインに限ってではあるが、先人がスプラインをどのように考えているのか、その一例を文献 6), p. 125-126 から抄訳して本稿の締め括りとしたい。

…スプラインの理論の初期の段階においては、order k のスプライン関数は、ある (有限または無限) 区間において $k-2$ 次導関数まで連続な order k の区分的多項式と定義されていた。言い換えれば “spline function” は単一の多項式になってしまわない範囲内で可能な限りの滑らかさを持つ区分的多項式を意味してい

たのである。しかし、この最高度の連続性を持たないような区分的多項式もまた、きわめて興味ある有用な関数であることがすぐにわかってきた。たとえば 3 次 Hermite 補間、3 次 Bessel 補間は時には 3 次 spline 補間より優れていることがある。或る人々は、この最高度 (無意味な場合、すなわち deficiency 零を除いて) の連続性を持たないような区分的多項式を deficient splines と呼んでいる。私はこの言葉を使わない。何とならばこの言葉は正当化できない価値判断を含んでいるからである。私はこのような関数を splines with multiple knots と呼んでいる。それはこのような関数は、単純節点 (つまり、元々のスプラインの節点) を持つスプラインから、いくつかの節点を一致させることによって得られると考えればよいからである。一中略—しかし、このように “spline” という言葉を拡張してくると、すべての区分的多項式がスプラインになってしまう。そして人はなぜ我々が “spline” という言葉にこだわっているのか不思議に思うであろう。

“spline” という言葉に特定の意味を持たせるために私は B-spline の線型結合をスプライン関数と定義する。このようにすると “spline” の概念は区分的多項式を見る特別な方法にすぎないという事になる。この方法は与えられた区分的多項式を見るとき、そのすぐ近くの単純節点を持つスプラインを見るときを特に容易にする。なぜかといえば B-spline はその $k+1$ 個の節点が変わってもほとんどその大きさを変えないからである。したがって B-spline が多重節点を持つとき、それとほとんど同じでしかも単純節点を持つ B-spline を見出すことはきわめて容易なことである：単に多重度 $r>1$ のそれぞれの節点を r 個のごく接近した単純節点で置き換えるだけでよい。

最後に本稿を書くきっかけを与えて頂いた日本大学、戸川隼人教授、寄稿をすすめて頂いた名古屋大学、福村晃夫教授、二宮市三教授、豊橋技科大、島脇純一郎教授、議論して頂いた福井大学、奥村彰二教授、佐藤義雄助手に深く感謝します。

参 考 文 献

- 1) 市田浩三・吉本富士市：スプライン関数とその応用，教育出版，p. 220 (1979)。
- 2) 寺澤寛一：自然科学のための数学概論，岩波書店，p. 722 (昭和 36 年)。
- 3) 日本数学会：岩波数学辞典，岩波書店，p. 1140 (1975)。
- 4) Ahlberg, J. H., Nilson, E. N. and Walsh, J. L. :

- The Theory of Splines and Their Applications, Academic Press, p. 284 (1967).
- 5) Schultz, M.H. and Varga, R.S.: L-splines, Numer. Math., Vol. 10, pp. 345-369 (1967).
 - 6) Carl de Boor: A Practical Guide to Splines, Springer-Verlag, p. 392 (1978).
 - 7) Carl de Boor: On Calculating with B-splines, J. Approx. Theory, Vol. 6 pp. 50-62 (1972).
 - 8) Prenter, P.M.: Splines and Variational Methods, John Wiley & Sons, p. 323 (1975).
 - 9) Lyche, T. and Winther, R.: A Stable Recurrence Relation for Trigonometric B-splines, J. Approx. Theory, Vol. 25, pp. 266-279 (1979).
 - 10) Hildebrand, F.B.: Introduction to Numerical Analysis, McGraw Hill, Bombay, New Delhi, p. 511 (1956).
 - 11) Schweikert, D.G.: An Interpolating Curve Using a Spline in Tension, J. Math. Physics, Vol. 45, pp. 312-317 (1966).
 - 12) Cline, A.: Scalar and Planar-valued Curve Fitting in One and Two Dimensional Spaces Using Splines under Tension, CACM, Vol. 17, pp. 218-223 (1974).

(昭和55年9月9日受付)
