MATLAB プログラミング 5
–補間–

大石進一

本章の内容

Matlab を用いれば，データとデータの間を曲線で補う，いわゆる補間も簡単に行うことができる。データを補間する方法として，雲形定規を用いて滑らかな曲線でデータを補間するスプライン補間を最初に学ぶ。次に，実験データから，経験則を導くときのように，データを説明するできるだけ簡単な経験式を導くための最小 2 乗法によるカーブフィッティングの方法を学ぶ。

スプライン補間

$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$ とする。区間 $[x_i, x_{i+1}]$ で m 次多項式で，区間 $[a, b]$ で $m-1$ 回連続微分可能な関数をスプライン関数という。一次のスプライン関数は折れ線である。

2次スプライン補間

スプラインという名に相応しい補間は2次スプライン関数による補間からである。
$n+2$ 個のデータを $h, d_0, d_2, \cdots, d_{n-1}, k$ とする。このとき，両端で $S(x_0) = h, S(x_n) = k$ を満たし，更に

$$S\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) = d_i, \ (i = 0, 1, \cdots, n-1) \qquad (1)$$

を満たす2次のスプライン関数は一意的に定まることが知られている。

3次スプライン関数

1. $x_i \leqq x \leqq x_{i+1},\ (i = 0, 1, 2, \cdots, n-1)$ のとき，$S(x)$ は x の3次多項式，
2. $S(x_i) = y_i,\ (i = 0, 1, 2, \cdots, n)$，
3. $a \leqq x \leqq b$ で2回連続微分可能

実は，これだけの条件では3次のスプライン関数は一意的には定まらない。あと2つ条件が必要であることが知られている。そこで，$S''(x)$ を端点で補外したりして2つの条件が追加され，3次のスプライン関数が決められる。Matlab はデフォールトでは，このようにして条件が自動的に追加されて，補間関数が決定されている。

例

簡単な例により，3 次のスプライン関数の決め方を見てみよう。3 次多項式

$$S(x) = a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4 \tag{2}$$

を考える。4 つの未知係数 a_0, a_1, a_2, a_3 を条件

$$S(1) = 1,\ S(2) = 2, S'(1) = 0, S'(2) = 0 \tag{3}$$

より決めよう。

例–続き

式 (3) は具体的にはつぎのような条件となる。

$$\begin{aligned} a_1 + a_2 + a_3 + a_4 &= 1 \\ 8a_1 + 4a_2 + 2a_3 + a_4 &= 2 \\ 3a_1 + 2a_2 + a_3 &= 0 \\ 12a_1 + 4a_2 + 1a_3 &= 0 \end{aligned} \tag{4}$$

例–続き 2–

連立一次方程式 (4) を Matlab で解こう。

```
>> A=[1 1 1 1;8 4 2 1;3 2 1 0;12 4 1 0]
>> b=[1;2;0;0];
>> a=A\b
a =
   -2.0000
    9.0000
  -12.0000
    6.0000
```

例–続き3–

多項式はMatlabでは

```
    [a_1 a_2 a_3 a_4]
```

と表される。そこで,

```
>> S=a'
S =
 -2.0000   9.0000   -12.0000   6.0000
```

と式(4)の解`a`を式(2)の形の多項式`S`に直す。Matlabでは多項式`S`の点xでの値は`plyval(S,x)`という命令で計算される。

例–続き 4–

これを使って，検算をしてみよう。

```
>> polyval(S,1)
ans =
    1.0000
>> polyval(S,2)
ans =
     2
```

また，Matlab では多項式 s の微分は polyder 命令を使って

```
>> q=polyder(S)
q =
  -6.0000    18.0000   -12.0000
```

と計算できる。

例–続き 5–

```
>> polyval(q,1)
ans =
     0
>> polyval(q,2)
ans =
     0
```

となって，確かに式 (3) の後半の 2 つの式が満たされていることがわかる。

3次のスプライン補間

$$f(x) = x * \sin(x) \tag{5}$$

を点 $x = 0, 1, 2, \cdots, 10$ でサンプリングしたデータにより，3次のスプライン関数を計算する。Matlab での計算は次のようになる。まず，サンプリングデータを計算する。

```
>> x=0:10;
>> y=sin(x).*x;
```

次に，3次のスプライン補間を計算する。

```
>> xx=0:0.1:10;
>> yy=spline(x,y,xx);
```

これを図に描く。

```
>> plot(x,y,'o',xx,yy)
```

得られた図

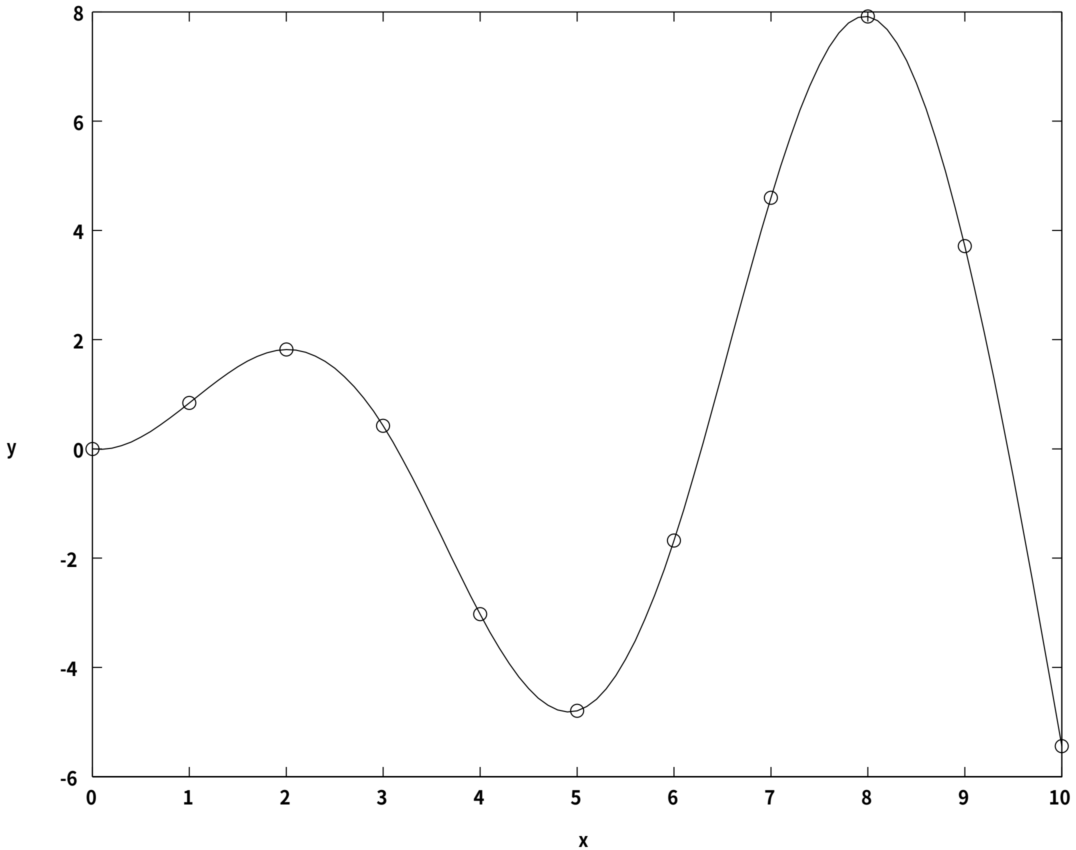

Figure 1: 3 次のスプライン補間の例 2

カーブフィッティング

- 今までは，与えられたデータの上を補間曲線が通ることを前提としていた。
- しかし，誤差のある観測データなど，必ずしもデータの上を補間曲線が通ることが必要でない場合もある。
- 例えば，実験から，経験法則を導く場合などがその例であろう。複雑な式で，データにぴったり合わせてしまうよりも，本質をつかんだ簡単な式を導出するほうが望ましい場合がある。
- ここではそのようなときに役に立つ最小２乗曲線によるデータの当てはめ法について学ぶ。

最小2乗直線

N 点のデータ $\{x_i, y_i\}_{i=1}^{N}$ を直線

$$y = ax + b \tag{6}$$

で近似しよう。誤差評価関数

$$E(a, b) = \sum_{i=-1}^{N} (ax_i + b - y_i)^2 \tag{7}$$

を考え，これが最小になるように，定数 a と b を決める。

続き

そのための必要条件として

$$\frac{\partial E(a,b)}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial E(a,b)}{\partial b} = 0 \tag{8}$$

を用いる。式 (8) を計算すると

$$\begin{aligned} S_{xx}a + S_x b &= S_{xy} \\ S_x a + Nb &= S_y \end{aligned} \tag{9}$$

を得る。

続き 2

ただし，S_{xx}, S_x, S_{xy}, S_y は定数で

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{N} x_i^2,\ S_x = \sum_{i=1}^{N} x_i,$$

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i,\ S_y = \sum_{i=1}^{N} y_i \tag{10}$$

である。式 (9) を解いて得られる a, b によって決まる直線 $y = ax + b$ を最小 2 乗直線という。また，式 (9) は正規方程式と呼ばれる。

例題

データ:

Table 1: 実験データ

x_i	1	2	5	7
y_i	2.2	2.8	6.1	8.2

asd

最小2乗直線の計算：
データの入力：

```
>> x=[1 2 5 7];
>> y=[2.2 2.8 6.1 8.2];
```

定数の計算：

```
>> Sxx=sum(x.^2);Sx=sum(x);
>> Sxy=sum(x.*y);Sy=sum(y);
```

続き

正規方程式を作る。

```
>> A=[Sxx Sx;Sx 4]
A =
     79     15
     15      4
>> b=[Sxy;Sy]
b =
   95.7000
   19.3000
```

これから正規方程式$Ax = b$を解く。

```
>> L=A\b
L =
     1.0253
     0.9802
```

続き 2

得られた最小 2 乗直線：

$$y = 1.0253x + 0.9802 \tag{11}$$