

用 Spline 函数拟合实验数据

王 丽 政

本文叙述了 Spline 和 B-Spline 的定义及其性质; 介绍用三次 Spline 拟合多家实验数据的方法和计算程序。

一、引 言

在拟合实验数据过程中, 当曲线形状不甚复杂时, 可用正交多项式

$$g(x) = \sum_{j=1}^N C_{kj} T_j(x).$$

作拟合, 此时的基底是正交多项式 $T_j(x)$; 当曲线形状复杂或者自变量涉及的范围很宽时, 再用此法就不适合了, 在这种情况下, 通常采用具有局部性质的 Spline 函数作拟合, 即令拟合函数为:

$$S(x) = \sum_{i=1}^N A_i BS_{ik}(x).$$

此时的基底 $BS_{ik}(x)$ 是“标准化”B-Spline, 它具有较好的灵活性和稳定性, 并具备了一般说来足够的光滑度, 而且比较简单。

本工作首先叙述 Spline 和 B-Spline 的定义及其性质, 然后介绍用三次 Spline 拟合多家实验数据的方法和计算程序。

二、多项式 Spline 函数和它的 B-Spline 基底

在区间 $[\alpha, \beta]$ 作一个分割:

$$(t_0) = \alpha < t_1 < t_2 < \cdots < t_N < \beta = (t_{N+1}). \quad (1)$$

(1) 称为多项式 Spline 的一组节点。以此为节点的 $(k-1)$ 次 Spline 函数 $S(x)$ 满足:

〈i〉 对于 $i=1, 2, \cdots, N+1$, 在每个开区间 (t_{i-1}, t_i) 内是一个次数 $\leq (k-1)$ 的多项式;

〈ii〉 在开区间 (α, β) 有 $(k-2)$ 次连续函数。

因此对于形如(1)的每组节点, 这样一类的 Spline 函数构成具有 $(N+k)$ 个自由参数的线性空间, 它的基底一般取便于计算的 B-Spline。

在拟合实验数据中, 通常使用的 B-Spline 是“标准化”B-Spline, 它定义为:

$$BS_{ik} = (t_{i+k} - t_i) g_k(t_i, t_{i+1}, \cdots, t_{i+k}; x), \quad (2)$$

其中

$$g_k(S, x) = (S - x)_+^{k-1} = (\max\{S - x, 0\})^{k-1}$$

$$= \begin{cases} (S-x)^{k-1} & S > x, \\ 0 & S \leq x. \end{cases} \quad (3)$$

是截断幂函数。 $g_k(t_i, t_{i+1}, \dots, t_{i+k}; x)$ 表示函数 $g_k(S, x)$ 在 $t_i, t_{i+1}, \dots, t_{i+k}$ 的 k 阶差商, 即

$$g_k(t_i, t_{i+1}, \dots, t_{i+k}; x) = \sum_{j=0}^k \frac{(t_{i+j}-x)_+^{k-1}}{\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^k (t_{i+j}-t_{i+i})}. \quad (4)$$

可见在区间 (t_i, t_{i+k}) 内 $BS_{ik}(x)$ 取严格正值 (即 $BS_{ik}(x) > 0$), 而在其外边恒等于零。

在本工作中, 取 $k=4$, 即用三次 B-Spline, 其表达式为:

$$BS_{i4}(x) = (t_{i+4}-t_i) \cdot \sum_{j=0}^4 \frac{(t_{i+j}-x)_+^{j-1}}{D(t_{i+j})}. \quad (5)$$

由上述性质知:

$$BS_{i4}(x) = (t_{i+4}-t_i) \cdot \begin{cases} 0, & x \leq t_i \\ \frac{(t_{i+1}-x)^3}{D(t_{i+1})} + \frac{(t_{i+2}-x)^3}{D(t_{i+2})} + \frac{(t_{i+3}-x)^3}{D(t_{i+3})} + \frac{(t_{i+4}-x)^3}{D(t_{i+4})}, & t_i \leq x < t_{i+1} \\ \frac{(t_{i+2}-x)^3}{D(t_{i+2})} + \frac{(t_{i+3}-x)^3}{D(t_{i+3})} + \frac{(t_{i+4}-x)^3}{D(t_{i+4})}, & t_{i+1} \leq x < t_{i+2} \\ \frac{(t_{i+3}-x)^3}{D(t_{i+3})} + \frac{(t_{i+4}-x)^3}{D(t_{i+4})}, & t_{i+2} \leq x < t_{i+3} \\ \frac{(t_{i+4}-x)^3}{D(t_{i+4})}, & t_{i+3} \leq x < t_{i+4} \\ 0, & x \geq t_{i+4} \end{cases} \quad (6)$$

其中

$$D(t_{i+j}) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^4 (t_{i+j}-t_{i+i}) \quad j=0, 1, \dots, 4.$$

在这里必须提及, B-Spline 可以表示成以下两种形式^[1]:

$$BS_{i4}(x) = (t_{i+4}-t_i) \sum_{j=0}^4 \frac{(t_{i+j}-x)_+^3}{D(t_{i+j})} = (t_{i+4}-t_i) \sum_{j=0}^4 \frac{(x-t_{i+j})_+^3}{D(t_{i+j})}. \quad (7)$$

我们在以下可以看到, 这给计算 $BS_{i4}(x)$ 提供了方便。

根据 Curry 和 Schoenberg^[2] 的定理, 任何一个以 (1) 为节点的 3 次 Spline $S(x)$, 可以唯一地表示成 $N+4=G$ 个 $BS_{i4}(x)$ 的线性组合:

$$S(x) = \sum_{i=1}^G A_i BS_{i4}(x). \quad (8)$$

为了得到 $(N+4)$ 个 B-Spline, 我们在区间 $[\alpha, \beta]$ 两端各加入 4 个连续节点, 为:

$$t_{-3} \leq t_{-2} \leq t_{-1} \leq t_0 = \alpha, \beta = t_{N+1} \leq t_{N+2} \leq t_{N+3} \leq t_{N+4},$$

在具体的计算中, 一般取等号形式^[3,4], 即

$$t_{-3} = t_{-2} = \dots = \alpha, \beta = t_{N+1} = \dots = t_{N+4}. \quad (9)$$

三、用 B-Spline 拟合实验数据——固定节点问题 (线性问题)

本工作只叙述用固定节点的 B-Spline 拟合实验数据问题, 至于非线性问题 (即自由节点问题), 在另一工作中叙述。

如果节点是固定的, 设有一组实验点 x_1, x_2, \dots, x_M 及相应的测量值 y_1, y_2, \dots, y_M , 一般情况下, 用三次 Spline 函数作数据拟合是直接的线性最小二乘问题。也即要求, 在给出的一组固定节点条件下, 按(8)式构造 $S(x)$, 其中系数 A_i 由使

$$F = \sum_{i=1}^M d_i [y_i - S(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^M d_i \left[y_i - \sum_{l=1}^G A_l BS_{il}(x_i) \right]^2.$$

达到极小得到, 这里 d_i 是 y_i 的权函数。

在核数据拟合中, 我们经常碰到的是多家多点的拟合问题, 并且由于每家及每个实验点的可靠性不一致, 而有不同的权重, 因此 F 的表达式略有不同, 在本工作中, 我们采用的是[5]所给出 F 表达式:

$$F = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \left[\sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} \{y_{ik} - S(x_{ik})\}^2 - \sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} \{y_{ik} - S(x_{ik})\}^2 \cdot \left\{ \sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} + \sum_k^{-2} \right\}^{-1} \right]. \quad (10)$$

这里用到的符号跟[5]完全一样, 按众所周知的最小二乘原理, A_i 满足如下方程组:

$$\sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^G A_l \left\{ \frac{\left[\sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} BS_l(x_{ik}) \right] \cdot \left[\sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} BS_m(x_{ik}) \right]}{\sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} + \sum_k^{-2}} - \sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} BS_l(x_{ik}) \cdot BS_m(x_{ik}) \right\} = \sum_{k=1}^K \left\{ \frac{\left[\sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} y_{ik} \right] \cdot \left[\sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} BS_m(x_{ik}) \right]}{\sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} + \sum_k^{-2}} - \sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} y_{ik} BS_m(x_{ik}) \right\} \quad (11)$$

$$m = 1, 2, \dots, G.$$

其矩阵形式为:

$$CA = T. \quad (12)$$

在这里要注意, 为使 C 是对称正定, 必须在(11)式左右端各乘以 (-1) , 这样在计算点 x' 的方差时便为:

$$\sigma^2(x') = \mathbf{B}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{B}. \quad (13)$$

其中

$$\mathbf{B}^T = [BS_1(x'), \dots, BS_G(x')].$$

根据 Spline 理论, 在 x' 处只有 4 个 BS_i 不为零。若 $t_i \leq x' < t_{i+1}$, 则只有 $BS_i(x')$, $BS_{i+1}(x')$, $BS_{i+2}(x')$, $BS_{i+3}(x')$ 不为零, 因此, (13) 式的具体表达式为:

$$\sigma^2(x') = \begin{cases} \sum_{v=i}^{i+3} \sum_{u=1}^{v+3} C_{vu}^{-1} BS_u(x') BS_v(x'), & v \leq 4 \\ \sum_{v=i}^{i+3} \sum_{u=v-3}^{v-1} C_{vu}^{-1} BS_v(x') BS_u(x'), & v > 4, t_{i-1} \leq x' < t_i. \end{cases} \quad (14)$$

为了判断拟合的好坏程度, 一般还附带算出

$$S\chi^2 = \frac{\sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^{n_k} (\Delta y_{ik})^{-2} [y_{ik} - b_k - S(x_{ik})]^2}{\sum_{k=1}^K n_k - (N + 4)}. \quad (15)$$

如果 $S\chi^2$ 达到极小, 则表示节点的选择为最佳。

同时, 还算出对应于节点区间 $[t_{i-1}, t_i]$ 中的 χ_i^2 :

$$\chi_i^2 = \sum_{p=1}^R [y_{ip} - b_{ip} - S(x_{ip})]^2 / (R - 1), \quad (16)$$

其中 R 为该区域的实验点数。如果 χ_i^2 的值过大, 则应根据实验点的分布调节节点。

四、数学问题的解

1. 线性方程组的解和矩阵的求逆

(11) 式是关于 A_i 的线性方程组的问题, 其系数矩阵可以证明是对称、正定的^[6]。由于系数矩阵的特殊性质, 我们采用 LDL^T 分解法^[6] 求解。用这个方法的好处是比通常的 Gauss 消去法节省一半的内存和运算量。

我们可以将系数矩阵 \mathbf{C} 分解成下列形式:

$$\mathbf{C} = \mathbf{L} \mathbf{D} \mathbf{L}^T. \quad (17)$$

计算分解式(18)中矩阵 \mathbf{L} 与 \mathbf{D} 的元素 l_{qs} 和 d_s 的公式为:

$$\begin{cases} d_s = C_{ss} - \sum_{h=1}^{s-1} l_{sh}^2 d_h, \\ l_{qs} = (C_{qs} - \sum_{h=1}^{s-1} l_{qh} \cdot l_{sh} \cdot d_h) / d_s, \quad q = s+1, s+2, \dots, G, \end{cases} \quad (18)$$

$$s = 1, 2, \dots, G.$$

为了节省乘法运算及存储单元, 可以令:

$$\tilde{C}_{qs} = l_{qs} \cdot d_s,$$

并将计算次序改为按行计算 \mathbf{L} 的元素, 从上式即可得如下计算公式:

$$\begin{cases} \tilde{C}_{qs} = C_{qs} - \sum_{h=1}^{s-1} \tilde{C}_{qh} \cdot l_{sh}, & l_{qs} = \tilde{C}_{qs} / d_s, \quad s=1, 2, \dots, q-1, \\ d_q = C_{qq} - \sum_{h=1}^{q-1} \tilde{C}_{qh} \cdot l_{qh}. & q=1, 2, \dots, G. \end{cases} \quad (19)$$

求得矩阵 L 和 D 后, 解方程组 $CA=T$ 即可分三步完成:

〈i〉解下三角形方程组 $LZ=T$, 得出向量 Z ;

〈ii〉计算向量 W 的各分量:

$$W_f = z_f / d_f; \quad f=1, 2, \dots, G.$$

〈iii〉解上三角形方程组 $L^T A = \bar{W}$, 即得到方程组的解。矩阵的逆, 通过同时解 $(N+4)$ 个有特殊形式的右端的方程组来得到。

2. 一个给定点上的 B-Spline 函数的计算

由 Spline 的性质知, 对每一个给定点, 只有 4 个 B-Spline 不为零, 为此我们对基本公式(5)经过一系列简化得到如下便于一次同时算出的形式。为程序实现上的需要, 把节点重新编号并统一记为:

$$\begin{aligned} X_1 = X_2 = X_3 = X_4 &= \alpha, \\ X_{4+i} &= t_i, \\ X_{N+5} = X_{N+6} = X_{N+7} = X_{N+8} &= \beta. \end{aligned}$$

当 $t_{i-1} \leq x_i < t_i$, 这时 x_i 所属的节点区间为 (X_{i+3}, X_{i+4}) , 而 4 个不为零的 B-Spline 为:

$$\left\{ \begin{aligned} BS_i(x_i) &= \frac{(X_{i+4} - x_i)^3}{(X_{i+4} - X_{i+3})(X_{i+4} - X_{i+2})(X_{i+4} - X_{i+1})}, \\ BS_{i+1}(x_i) &= \frac{(X_{i+5} - x_i)^2(x_i - X_{i+3})}{(X_{i+4} - X_{i+3})(X_{i+5} - X_{i+3})(X_{i+5} - X_{i+2})} + \\ &\quad + \frac{(X_{i+4} - x_i)(x_i - X_{i+2})(X_{i+5} - x_i)}{(X_{i+4} - X_{i+3})(X_{i+4} - X_{i+2})(X_{i+5} - X_{i+2})} + \\ &\quad + \frac{(X_{i+4} - x_i)^2(x_i - X_{i+1})}{(X_{i+4} - X_{i+3})(X_{i+4} - X_{i+2})(X_{i+4} - X_{i+1})}, \\ BS_{i+2}(x_i) &= \frac{(x_i - X_{i+3})^2(X_{i+6} - x_i)}{(X_{i+4} - X_{i+3})(X_{i+5} - X_{i+3})(X_{i+6} - X_{i+3})} + \\ &\quad + \frac{(x_i - X_{i+3})(X_{i+5} - x_i)(x_i - X_{i+2})}{(X_{i+4} - X_{i+3})(X_{i+5} - X_{i+3})(X_{i+5} - X_{i+2})} + \\ &\quad + \frac{(X_{i+4} - x_i)(x_i - X_{i+2})^2}{(X_{i+4} - X_{i+3})(X_{i+4} - X_{i+2})(X_{i+5} - X_{i+2})}, \\ BS_{i+3}(x_i) &= \frac{(x_i - X_{i+3})^3}{(X_{i+4} - X_{i+3})(X_{i+5} - X_{i+3})(X_{i+6} - X_{i+3})}, \end{aligned} \right. \quad (20)$$

这里第一、四表达式, 由定义及(7)式直接给出, 第二、三式从定义出发, 按(7)式经过一系列推导得到, 我们以第二式为例推导如下(第三式与此相仿, 不赘述):

当 $X_{i+3} \leq x_i < X_{i+4}$,

$$BS_{i+1}(x_i) = (X_{i+5} - X_{i+1}) \left[\frac{(X_{i+5} - x_i)^3}{\prod_{j=4}^4 (X_{i+1+j} - X_{i+5})} + \frac{(X_{i+4} - x_i)^3}{\prod_{j=3}^4 (X_{i+1+j} - X_{i+4})} \right].$$

我们逐项处理如下:

$$\begin{aligned}
 \frac{(X_{l+5}-X_{l+1})(X_{l+5}-x_i)^3}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq 4}}^4 (X_{l+1+j}-X_{l+5})} &= \frac{(X_{l+5}-x_i)^3(X_{l+5}-X_{l+1})}{(X_{l+5}-X_{l+1})(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+3})(X_{l+5}-X_{l+4})} \\
 &= \frac{(X_{l+5}-x_i)^3(X_{l+4}-X_{l+3})}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+3})(X_{l+5}-X_{l+4})(X_{l+4}-X_{l+3})} \\
 &= \frac{(X_{l+5}-x_i)^3(X_{l+4}-X_{l+5}+X_{l+5}-X_{l+3})}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+3})(X_{l+5}-X_{l+4})(X_{l+4}-X_{l+3})} \\
 &= \frac{(X_{l+5}-x_i)^2(X_{l+5}-X_{l+3}+X_{l+3}-x_i)}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+3})(X_{l+4}-X_{l+3})} + \\
 &\quad + \frac{(X_{l+5}-x_i)^3}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+4})(X_{l+4}-X_{l+3})} \\
 &= \frac{(X_{l+5}-x_i)^2}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+4}-X_{l+3})} + \frac{(X_{l+5}-x_i)^2(x_i-X_{l+3})}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+3})(X_{l+4}-X_{l+3})} + \\
 &\quad + \frac{(X_{l+5}-x_i)^2(X_{l+5}-X_{l+4}+X_{l+4}-x_i)}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+4})(X_{l+4}-X_{l+3})} \\
 &= \frac{(X_{l+5}-x_i)^2(x_i-X_{l+3})}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+3})(X_{l+4}-X_{l+3})} + \\
 &\quad + \frac{(X_{l+5}-x_i)^2(X_{l+4}-x_i)}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+4})(X_{l+4}-X_{l+3})} \\
 \frac{(X_{l+5}-X_{l+1})(X_{l+4}-x_i)^3}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq 3}}^4 (X_{l+1+j}-X_{l+4})} &= \frac{(X_{l+5}-X_{l+1})(X_{l+4}-x_i)^3}{(X_{l+4}-X_{l+1})(X_{l+4}-X_{l+2})(X_{l+4}-X_{l+3})(X_{l+5}-X_{l+4})} \\
 &= \frac{(X_{l+4}-x_i)^3(X_{l+5}-X_{l+4}+X_{l+4}-X_{l+1})}{(X_{l+4}-X_{l+1})(X_{l+4}-X_{l+2})(X_{l+4}-X_{l+3})(X_{l+5}-X_{l+4})} \\
 &= \frac{(X_{l+4}-x_i)^3}{(X_{l+4}-X_{l+1})(X_{l+4}-X_{l+2})(X_{l+4}-X_{l+3})} - \\
 &\quad - \frac{(X_{l+4}-x_i)^3}{(X_{l+4}-X_{l+2})(X_{l+4}-X_{l+3})(X_{l+5}-X_{l+4})} \\
 &= \frac{(X_{l+4}-x_i)^2(X_{l+4}-X_{l+1}+X_{l+1}-x_i)}{(X_{l+4}-X_{l+1})(X_{l+4}-X_{l+2})(X_{l+4}-X_{l+3})} - \\
 &\quad - \frac{(X_{l+4}-x_i)^2(X_{l+4}-X_{l+5}+X_{l+5}-x_i)}{(X_{l+4}-X_{l+2})(X_{l+4}-X_{l+3})(X_{l+5}-X_{l+4})} \\
 &= \frac{(X_{l+4}-x_i)^2(x_i-X_{l+1})}{(X_{l+4}-X_{l+1})(X_{l+4}-X_{l+2})(X_{l+4}-X_{l+3})} - \\
 &\quad - \frac{(X_{l+4}-x_i)^2(X_{l+5}-x_i)}{(X_{l+4}-X_{l+2})(X_{l+4}-X_{l+3})(X_{l+5}-X_{l+4})}.
 \end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned}
 BS_{l+1}(x_i) &= \frac{(X_{l+5}-x_i)^2(x_i-X_{l+3})}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+3})(X_{l+4}-X_{l+3})} + \\
 &\quad + \frac{(X_{l+5}-x_i)^2(X_{l+4}-x_i)}{(X_{l+5}-X_{l+2})(X_{l+5}-X_{l+4})(X_{l+4}-X_{l+3})} -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{(X_{l+4} - x_i)^2 (X_{l+5} - x_i)}{(X_{l+4} - X_{l+2})(X_{l+4} - X_{l+3})(X_{l+5} - X_{l+4})} + \\
& + \frac{(X_{l+4} - x_i)^2 (x_i - X_{l+1})}{(X_{l+4} - X_{l+1})(X_{l+4} - X_{l+2})(X_{l+4} - X_{l+3})} \\
& = \frac{(X_{l+5} - x_i)^2 (x_i - X_{l+3})}{(X_{l+5} - X_{l+2})(X_{l+5} - X_{l+3})(X_{l+4} - X_{l+3})} + \\
& + \frac{(X_{l+4} - x_i)(x_i - X_{l+2})(X_{l+5} - x_i)}{(X_{l+4} - X_{l+2})(X_{l+4} - X_{l+3})(X_{l+5} - X_{l+2})} + \\
& + \frac{(X_{l+4} - x_i)^2 (x_i - X_{l+1})}{(X_{l+4} - X_{l+1})(X_{l+4} - X_{l+2})(X_{l+4} - X_{l+3})}.
\end{aligned}$$

五、程序和结果

用 Spline 函数拟合实验数据, 主要的计算量是 B-Spline 的计算, 本程序的特点是根据 Spline 的性质按(20)式将每个实验点 (和计算点) 的 4 个不为零的 B-Spline, 一次同时算出并存贮在一组单元里, 这样可以大大减少运算量和存贮量, 使得在小机器 DJS-21 上也能对实验点数较多的问题作拟合。

本工作编制程序后, 在 DJS-21 机上先后计算了如下具有代表性的例子:

- (1) 计算 A. Horsley^[5] 的 3 个具体实例, 结果完全符合。
- (2) 多家有阈能点的方案, 并与正交多项式^[7]计算结果比较。
- (3) 南京大学伍必和老师提供的实验点少、曲线复杂的方案, 用多种节点组进行试算。
- (4) ²³⁵U 中子散射截面(单家)拟合。
- (5) 实验点数多的氡的全截面拟合 (333 个实验点, 146 个计算点), 仅用 9 分钟时间。

在本工作中, 庄友祥同志帮助准备了 A. Horsley^[5] 中的 3 个实例; 于宝生、刘继才等同志提供了一些实验数据, 用以考验本工作, 作者在此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] T. N. E. Greville, *Theory and Application of Spline Functions*, 1969.
- [2] David L. B. Jupp, *SIAM J. Numer. Anal.*, **15**, 328 (1978).
- [3] Corl de Boor, *J. Approx. Theory*, **6**, 50 (1972).
- [4] Corl de Boor, LA-4728-MS (1971).
- [5] A. Horsley et al., *Nucl. Instrum. Methods*, **62**, 29 (1968).
- [6] 冯康等, 数值计算方法, 国防工业出版社, 1978 年。
- [7] 王丽政等, 原子能科学技术, **3**, 325 (1980).