一

最佳样条拟合

路见可

二

在航空、造船、汽车制造等工业部门中，经常遇到所谓光顺问题，即给定一组型值以及一定的端点条件，要求用一合乎设计要求的样条曲线来拟合，使近似地通过所给型值点并满足端点条件。由于对光顺的要求和理解不一致（最通常的是对曲线的凹凸性与曲率变化的均匀性符合一定的条件），更兼有各种各样的光顺方法，例如能量法[1,2,8]、回弹法[3]、磨光法[4]等，所以光顺的结果与效果也各不一样，甚至孰好孰坏的标准也不能明显确定。

我们这里将在能量法的基础上，提出最佳样条拟合的概念，即在型值一定的误差范围内，在某种意义下最佳的样条曲线拟合。带误差的函数拟合问题在工程实际和数理统计中都很重要[5]，这也应该是函数逼近论中的一个重要课题。

在本文中，"最佳"是从"能量最小"这一要求转化而来，将证明这种最佳样条拟合函数的存在和唯一，并指出求出这一函数的切实可行而又极为经济的方法。

一 问题的提法

设在已知区间$[a, b]$上给定了一组结点

$$\Delta:\quad a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b \tag{1.1}$$

和一组型值

$$y_1,\ \cdots,\ y_{n-1} \tag{1.2}$$

以及一组允许误差

$$\delta_1,\ \cdots,\ \delta_{n-1}(\delta_j>0); \tag{1.3}$$

此外，还给定了一组固定的端点条件，如

$$y\Big|_{x=a}=y_0,\quad y\Big|_{x=b}=y_n,\quad y'\Big|_{x=a}=y'_0,\quad y'\Big|_{x=b}=y'_n. \tag{1.4}$$

我们给出下面的

定义 考虑以(1.1)为结点的三次样条函数族 $\mathbf{C}$，$\mathbf{C}$ 中的函数 $S(x)$ 满足端点条件(1.4)，且

$$|S(x_i)-y_i|\leqslant\delta_i \qquad (i=1,\ \cdots,\ n-1). \tag{1.5}$$

对 $S(x)$ 定义其拟模数

$$\|S(x)\|=\sqrt{\int_a^b S''(x)^2dx}. \tag{1.6}$$

C 中的函数 $S^*(x)$，如能使下一不等式成立：

$$\|S^*(x)\|\leqslant\|S(x)\|,\ 对任何\ S(x)\in\mathbf{C}, \tag{1.7}$$

称为在所提条件下，**C** 类中的最佳（三次）样条函数或称 **C** 类中的最佳样条拟合。

这样定义的最佳样条函数，在实际上极为有用。在小挠度情况下，这一 $S^*(x)$ 显示了既符合误差要求(1.5)，又使函数图象的曲率（平方的）变化达到了最佳的均匀性；也就是，它代表了在允许误差范围内能量最小的样条。

二 几 何 准 备

我们以后的论证将用到 n 维欧氏空间 $\boldsymbol{R}^n$ 中的一些几何性质①，在此简单地加以论述。

$\boldsymbol{R}^n$ 中凸体的概念是熟知的。我们称 $\boldsymbol{R}^n$ 中的一（n 维）凸体 K 为**强凸的**，如果对任何 $X,\ Y\in\partial K$（K 的边界），点

$$\lambda X+\mu Y \quad (\lambda+\mu=1,\ \lambda>0,\ \mu>0) \tag{2.1}$$

恒为 K 的内点。

我们有下面的引理：

引理 1 设 $\boldsymbol{R}^n$ 中两个凸体 K，H 相互**切触**，即 $K\cap H\neq\phi$，但不包含 K 和 H 的任何内点。如果 K，H 中至少有一个是强凸的，则 K，H 只有唯一的一个公共点（切触点）。

证 设 K 是强凸的，且 K，H 有两个不同的公共点 X，Y，则(2.1)中的点都是 K，H 的公共点，它们必然又是 K 的内点。与假设矛盾。

设点集 $E\subset\boldsymbol{R}^n$，点 $P\bar{\in}E$. 定义

$$\Omega_P(E)=\{Y\,|\,Y\in E,\ 但\ \lambda P+\mu Y\bar{\in}E,\ 其中\ \lambda+\mu=1,\ \lambda>0,\ \mu\geqslant0\}$$

为 P 点关于集 E 的**可见子集**。

引理 2 设 K，H 如引理 1，它们的切触点设为 Y，则对于任何 $P(\neq Y)\in K$，恒有 $Y\ni\Omega_P(H)$.

证 因闭线段 $\overline{PY}\subset K$，所以除 Y 点外，$\overline{PY}$ 上其余各点都不属于 H，即 $Y\in\Omega_P(H)$.

引理 2 实际上并不要求 H 是凸的。

我们还要讨论 $\boldsymbol{R}^n$ 中一点 P 关于一 n 维(闭)长方体 K^n 的可见子集 $\Omega_P(K^n)$，当然已设 $P\bar{\in}K^n$. 记 K^n 的 n 对对面为 K_i^{n-1}，$K_i'^{n-1}$ $(i=1,\ \cdots,\ n)$，它们都是 $n-1$ 维长方体；它们所在的 $n-1$ 维超平面分别记为 π_i^{n-1}，$\pi_i'^{n-1}$.

---

① 本节中的论述，事实上对 n 维仿射空间来说也成立。

引理 3 设某点 $P\bar{\in}K_i^{n-1}$，而存在 K_i^{n-1} 的一内点 X，使 $X\in\Omega_P(K^n)$，则整个 $K_i^{n-1}\subset\Omega_P(K^n)$。

证 由于 X 为 K_i^{n-1} 的内点，故以 X 为中心，充分小的 ε 为半径的 n 维球体 S^n 被平面 π_i^{n-1} 分为两个半球体 S_1^n，S_2^n，其中 $S_1^n\subset K^n$，S_2^n 与 P 位于 π_i^{n-1} 的同侧，而与 K^n 位于异侧。由于 π_i^{n-1} 把 R^n 分为两个凸体，所以 K_i^{n-1} 上的一切点都 $\in\Omega_P(K^n)$。

引理 4 如 K^n 的某 $n-r$ 维边界面 $k^{n-r}(1<r\leqslant n)$ 上存在着点 $X\in\Omega_P(K^n)$，则至少存在 K^n 的一个 $n-1$ 维边界面 $k^{n-1}\supset k^{n-r}$，使得 $k^{n-1}\subset\Omega_P(K^n)$。

证 同引理 3 作球体 S^n。在 K^n 的过 X 的一切 $n-1$ 维边界面 k^{n-1} 所属的 $n-1$ 维平面中必至有一个 π^{n-1} 使 P 与 $S^n\cap K^n$ 分别位于异侧，从而 $k^{n-1}\subset\Omega_P(K^n)$。

推论 $\Omega_P(K^n)$ 为一闭集，由 ∂K^n 的某些 $n-1$ 维边界面的并组成。

引理 5 如 $P\bar{\in}K^n$，那么，1° 如果 P 位于 π_i^{n-1} 与 $\pi_i'^{n-1}$ 组成的闭带形域 R_i 中，则 K_i^{n-1}，$K_i'^{n-1}$ 的所有内点都不属于 $\Omega_P(K^n)$；2° 如果 P 不在 R_i 中，则当 P 与 $\pi_i'^{n-1}$ 的两侧时，$K_i^{n-1}\subset\Omega_P(K^n)$，否则，$K_i'^{n-1}\subset\Omega_P(K^n)$；3° $\Omega_P(K^n)$ 由上面 2° 中一切含于 $\Omega_P(K^n)$ 的 $n-1$ 维面的并组成。

1°，2° 极为明显，3° 可由以上的一些结果直接推得。

三 最佳样条拟合的存在和唯一

我们现在来证明下面的主要定理。

定理 1 $\mathbf{C}$ 类中满足条件(1.7)的样条函数 $S^*(x)$ 存在并且唯一。

为了简化证明，我们把问题稍稍变更一下。作一三次函数 $y=T(x)$ 满足端点条件(1.4)，$T(x)$ 唯一地存在，且 $T(x)\in\mathbf{C}$。记

$$T(x_i)=\tau_i,\ y_i-\tau_i=\eta_i \qquad (i=1,\ \cdots,\ n-1).$$

对于任一 $S(x)\in\mathbf{C}$，令

$$S_0(x)=S(x)-T(x).$$

于是所有 $S_0(x)$ 构成的函数类 $\mathbf{C}_0$ 是这样的三次样条函数类，其中的函数 $S_0(x)$ 仍以(1.1)为结点，满足零端点条件：

$$S_0(a)=S_0(b)=S_0'(a)=S_0'(b)=0, \tag{3.1}$$

且

$$|S_0(x_i)-\eta_i|\leqslant\delta_i \qquad (i=1,\ \cdots,\ n-1). \tag{3.2}$$

注意

$$\|S(x)\|^2=\|S_0(x)+T(x)\|^2=\|S_0(x)\|^2+\|T(x)\|^2, \tag{3.3}$$

这是因为，

$$\int_a^b T''(x)S_0''(x)dx=T''(x)S_0''(x)\Big|_a^b-\int_a^b S_0'(x)T'''(x)dx$$

$$=-T'''\int_a^b S_0'(x)dx=0,$$

其中 $T''' = T'''(x)$ 为一常数的缘故。

由于 $\|T(x)\|$ 是一与 $S''(x)$ 无关的常数，故若 $S^*(x)$ 在 $\mathbf{C}$ 类中满足(1.7)，则相应的

$$S_0^*(x) = S^*(x) - T(x)$$

在 $\mathbf{C}_0$ 类中满足：

$$\|S_0^*(x)\| \leqslant \|S_0(x)\| \qquad (\text{对任何 } S_0(x) \in \mathbf{C}_0); \tag{3.4}$$

反过来也是如此。

这样一来，定理 1 就等价于

定理 2 $\mathbf{C}_0$ 类中的函数 $S_0^*(x)$ 使(3.4)成立者必存在且唯一。

证 设

$$B_1(x),\ \cdots,\ B_{n-1}(x)$$

分别为相应于结点 $x_1, \cdots, x_{n-1}$ 的基样条[6]，即

$$B_i(x_j) = \delta_{ij},\ B_i'(a) = B_i'(b) = 0, \qquad (i = 1, \cdots, n-1;$$
$$j = 0, 1, \cdots, n)$$

其中 δ_{ij} 为 Kronecker 记号。在 $\mathbf{C}_0$ 中任一函数 $S_0(x)$ 可写为

$$S_0(x) = \sum_{i=1}^{n-1} c_i B_i(x),$$

其中 c_i 为一些常数。所以

$$J_0 = \|S_0(x)\|^2 = \sum_{i,j=1}^{n-1} B_{ij} c_i c_j, \tag{3.5}$$

其中

$$B_{ij} = \int_a^b B_i''(x) B_j''(x) dx, \tag{3.6}$$

且(B_{ij})为一正定对称矩阵。把 c_i 看作 R^{n-1} 空间中的流动坐标，则对任何 $\lambda > 0$，

$$\sum_{i,j=1}^{n-1} B_{ij} c_i c_j \leqslant \lambda \tag{3.7$_\lambda$}$$

为 R^{n-1} 中的一超椭球体 E_λ，它是 R^{n-1} 中的一强凸体。$\{E_\lambda\}(\lambda > 0)$ 构成一族中心在原点的位似超椭球体。

R^{n-1} 中的 $n-1$ 维超长方体：

$$|c_i - \eta_i| \leqslant \delta_i \qquad (i = 1, \cdots, n-1)$$

$(c_1, \cdots, c_{n-1}$ 为流动坐标)是一凸体。

当 $O \in K^{n-1}$ 时，即 $|\eta_i| \leqslant \delta_i (i = 1, \cdots, n-1)$ 时，可以取 $S_0^*(x) \equiv 0$，这时 $J_0^* = \|S_0^*(x)\|^2 = 0$ 当然达到最小值，而且它明显是唯一的解。

现设 $O \bar{\in} K^{n-1}$。于是当 λ 充分小时，$E_\lambda \cap K^{n-1} = \phi$。令 λ 单调增加，则必存在一最小的 $\lambda = \lambda_0$，使 E_{λ_0} 与 K^{n-1} 切触。由引理 1，这个切触点 C^* 是唯一的，设其坐标为 $c_1^*, \cdots, c_{n-1}^*$。于是

$$S_0^*(x)=\sum_{i=1}^{n-1} c_i^* B_i(x) \tag{3.8}$$

便是 $\mathbf{C}_0$ 类中满足条件(3.4)的唯一的样条函数。

定理 2 从而定理 1 得证，且定理 1 中的 $S^*(x)=S_0^*(x)+T(x)$。

四 最佳样条函数的实际求法

现在我们来指出最佳样条函数 $S_0^*(x)$ 的实际求法，亦即要求出 C^* 点的各个坐标 c_1^*，…，c_{n-1}^* 的方法。在几何上，实际上就是要求与 K^{n-1} 相切触的椭球体 $(3.7)_\lambda$(决定 λ)，并找出其切触点 C^*。

前已指出，如 $O\in K^{n-1}$，换句话说，令

$$y_i^-=\eta_i-\delta_i,\ y_i^+=\eta_i+\delta_i \qquad (i=1,\ \cdots,\ n-1), \tag{4.1}$$

如果对所有 i，$y_i^-\leqslant 0\leqslant y_i^+$，则 $S_0^*(x)\equiv 0$，即所有 $c_i^*=0$，而不必进行讨论了。

设 $O\bar{\in}K^{n-1}$。如对某一 i，$y_i^-\leqslant 0\leqslant y_i^+$，则由引理 5，1°知，$K_i^{n-2}$，$K_i'^{n-2}$ 的内域都不在 $\Omega_0(K^{n-1})$ 中，即 C^* 点也不在这里，但仍可能在其较低维的边界面上。这种较低维边界面可不必在这里考虑，而可以作为下面考虑的其它 $n-2$ 维的低维边界面而讨论；因为如果包含该低维边界面的所有 $n-2$ 维面的内域都不在 $\Omega_0(K^{n-1})$ 中时，它本身也不会在 $\Omega_0(K^{n-1})$ 中，从而无考虑的必要。由上所述，C^* 必在这样的边界面 K_i^{n-2} 之一上，其中 y_i^- 与 y_i^+ 同号，且 K_i^{n-2} 是含在 $n-2$ 维平面 $\pi_i^{n-2}:c_i=h_i$ 中者，这里暂记

$$h_i=\begin{cases} y_i^- & \text{如果 } 0<y_i^-<y_i^+, \\ y_i^+ & \text{如果 } 0>y_i^+>y_i^-. \end{cases} \tag{4.2}$$

对每一这种附标 i，我们求作与平面 π_i^{n-1} 相切触的椭球体$(3.7)_\lambda$，设切触点为 $C[i]$，并设相应的 $\lambda=\lambda_i$ (求法见后)。注意 $C[i]$ 可能 $\in K_i^{n-2}\subset K^{n-1}$，也可能不是。如果对某个 i，$C[i]\in K_i^{n-2}$，则显然 C^* 就是 $C[i]$（由存在和唯一性，这种点只会有一个）。如果所有的 $C[i]\bar{\in}K_i^{n-2}$，就说明 C^* 不在 K^{n-1} 的任何 $n-2$ 维边界面上，而在更低维的面上。

如属后一情况（这时必然 $n>2$），我们就取上述诸 λ_i 中的最小者，设为 $\lambda^1=\lambda_{i_1}$，它所相应的椭球体$(3.7)_{\lambda^1}$ 必整个在 K^{n-1} 之外，从而所要求的点 C^* 相应的 λ^* 必定大于 λ^1，亦即 $C^1=C[i_1]$ 必在所求的与 K^{n-1} 切触的椭球体的内部，从而 $C^*\in\Omega_{C^1}(K^{n-1})$。设 $C^1=(y_1^1,\ \cdots,\ y_{n-1}^1)$。如果对某一 i，$y_i^-\leqslant y_i^1\leqslant y_i^+$，则在 $n-2$ 维平面 $\pi_i^{n-2}:c_i=y_i^-$ 和 $\pi_i'^{n-2}:c_i=y_i^+$ 上的 $n-2$ 维边界面 K_i^{n-2} 与 $K_i'^{n-2}$ 的内域中都不会有 C^*，而对于其较低维边界面基于前述同样理由可不必考虑。如对某一 $y_i^1\bar{\in}[y_i^-,\ y_i^+]$，则取 y_i^- 与 y_i^+ 中离 y_i^1 较近者记作 h_i（已不用(1.2)中的记号）。记平面 $\pi_i^{n-2}:c_i=h_i$，其上的 $K_i^{n-2}\in\Omega_{C^1}(K^{n-1})$，于是 C^* 可能在 K_i^{n-2} 的 $n-3$ 维边界面上。把它的每一个 $n-3$ 维边界面 K_{ij}^{n-3} 写出来，它落在 $n-3$ 维平面 $\pi_{ij}^{n-3}:c_i=h_i$，$c_j=y_j^-$（或 y_j^+）上$(i\neq j)$；当然，对那些不在 $\Omega_0(K^{n-1})$ 中的 $n-3$ 维边界面可不必考虑。对于每个有上述性质的附标 i 都作同样的考虑。结果，我们得到了若干个 K_{ij}^{n-3}，C^* 必定在它们的并集上。对每一个这种 K_{ij}^{n-3} 所属的平面 π_{ij}^{n-3}，求作

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

(3.7)，中与它相切触的椭球体，设切触点为 $C[i,\ j]$，相应的 $\lambda=\lambda_{ij}$（求法见后）。如这些点 $C[i,j]$ 中至少有一个 $\in K_{ij}^{n-3}\subset K^{n-1}$，则其中相应于最小的 $\lambda=\lambda_{ij}$ 那一个点 $C[i,\ j]$ 即为所求点 C^*。如所有的 $C[i,\ j]\bar{\in}K_{ij}^{n-3}$，则表明点 C^* 必在更低维的 K^{n-1} 的边界面上。

如属后一情况（这时必然 $n>3$），就取 $\lambda=\lambda_{ij}$ 中最小的那一个，并记相应的 $C[i,j]=C^2$。因此，$C^*\in\Omega_{C^2}(K^{n-1})$，而 C^* 必在从 C^2 所能看到的 K^{n-1} 的 $n-4$ 维边界面上。令 $C^2=(y_1^2,\ \cdots,\ y_{n-1}^2)$。对某一 i，如 $y_i^-\leqslant y_i^2\leqslant y_i^+$，则 $K_i'^{n-2}$ 的内域不在 $\Omega_{C^2}(K^{n-1})$ 中，因此可不必考虑它及其边界面。如对某一 $y_i^2\bar{\in}[y_i^-,\ y_i^+]$，则又取 y_i^-，y_i^+ 中离 y_i^2 较近者记作 h_i，并记平面 π_i^{n-2}：$c_i=h_i$，因此 C^* 可能在 π_i^{n-2} 的 $n-4$ 维边界面上。把所有这种 $n-4$ 维边界面写出来，例如 $K_{ijk}^{n-4}\subset\pi_{ijk}^{n-4}$，其中 π_{ijk}^{n-4} 为 $n-4$ 维平面：$c_i=h_i$，$c_j=y_j^-$（或 y_j^+），$c_k=y_k^-$（或 y_k^+），i，j，k 均不等。对一切这种 i 都这样做。求出与 π_{ijk}^{n-4} 切触的椭球体(3.7)$_\lambda$，求出 $\lambda=\lambda_{ijk}$，切触点为 $C[i,j,k]$（求法见后）。如其中某些个点 $C[i,j,k]\in K_{ijk}^{n-4}$，则其中使 λ_{ijk} 最小者相应的 $C[i,\ j,k]$ 就是所求点 C^*；否则的话，C^* 就在 K^{n-1} 的更低维的边界面上。

如此继续下去，不断降维，最后必可求出点 C^*。

这样，在上述过程中，剩下唯一需要解决的问题是：已给 $x_{i_1}<\cdots<x_{i_m}(m<n-1)$ 处的型值 h_{i_1}，h_{i_m}，要求在 $\mathbf{C}_0$ 类中满足条件 $S(x_{i_j})=h_{i_j}(j=1,\ \cdots,\ m)$ 的函数 $S(x)$ 所形成的子类 $\boldsymbol{D}_0$ 中，求出 $S_0(x)$ 使 $\|S_0(x)\|$ 在 $\boldsymbol{D}_0$ 中达到最小值。但 $S_0(x)$ 显然就是以 $a=x_0<x_{i_1}<\cdots<x_{i_m}<x_n=b$ 为结点、以 h_{i_1}，$\cdots$，h_{i_m} 为 x_{i_1}，$\cdots$，x_{i_m} 处的型值，且满足零端点条件(3.1)的样条函数（注意，不以(1.1)中的其余 x_i 点为结点！），因为，根据熟知的结果，在更广泛的函数类 $\boldsymbol{K}^2(a,b)=\{f(x)\}$ 中，凡满足条件 $f(x_{i_j})=h_{i_j}(j=1,\cdots,m)$ 以及零端点条件(3.1)者，上述 $S_0(x)$ 相应的 $\|S_0(x)\|$ 达到最小值（此处记号及结果见[7]，定理3.4.3)，而现在考虑的 $\boldsymbol{D}_0$ 类只是 $\boldsymbol{K}^2(a,b)$ 的一个子类。

至此，点 C^* 及其坐标 $(c_1^*,\cdots,c_{n-1}^*)$ 的求法就完全清楚了。特别注意，上面求 C^* 的过程实际上并不要求算出各基样条 $B_i(x)$ 及相应的矩阵 (B_{ij})，而只要用到一些插值样条的公式，所以计算起来特别简便。

此外注意，我们把问题从 $\mathbf{C}$ 类化为 $\mathbf{C}_0$ 类，只是为了使行文和说理简便，从理论上讲并非必要。

五 几 点 说 明

1. 在所给的误差(1.3)中，可以允许某些 $\delta_j=0$。这时表示限定样条函数通过 (x_j,y_j) 点。这时求 C^* 点的方法完全一样，不过一开始就可固定相应的 y_j，从而在较低维的长方体上考虑问题。

2. 虽然在 x_j 处型值允许最大误差是 δ_j，但在实际问题中，往往不希望过多的点型值修改达到最大允许值。因此在应用本法时，可以先适当缩小 δ_j 的数值，求出相应的最佳样条函数；如果发现在某些结点处函数性态不合设计要求，可逐步放大这些点（或其邻近点）的相应 δ_j 值，再进行计算。如果直到已达到最大允许误差，仍有不符合设计要求的点，就说明原始型值给得不恰当应进行修改（也可一开始就先检验这一点；如符合要求，再看能否找

到误差较小的符合要求的样条函数）。应用本法时，这种“坏点”很容易找出来。

3． 如在端点条件(1.4)中，导数条件改为自然样条条件：$y''\Big|_{x=a}=y''\Big|_{x=b}=0$，本文结果与方法完全可以成立。

4． 本文方法与结果可以很容易地推广到一般的奇次样条函数上来。

5． 对允许误差的要求(1.5)在某些情况下要改为形如

$$\sum_{i=1}^{n-1}|S(x_i)-y_i|^2\leqslant\delta, \tag{5.1}$$

其中 δ 为确定的正数，甚至改为

$$\sum_{i=1}^{n-1}\rho_i|S(x_i)-y_i|^2\leqslant\delta, \tag{5.2}$$

其中 $\rho_i>0$ 为给定的权。这时定理1的结论仍是对的，因为(5.1)或(5.2)在 R^{n-1} 中都是强凸体。但第四段中求 C^* 点的方法就不再适用了。

参 考 文 献

［1］ 武汉大学数学系数学放样小组，用剖面线法进行船体线型光顺计算，数学的认识与实践，1974，第3期，52～63.

［2］ 忻元龙，曲线的拟合和光顺，复旦大学学报（自然科学版），1975，第2期，103～110.

［3］ 浙江大学等，回弹法（尚未公开发行）。

［4］ 齐东旭、田自贤、张玉心、冯家斌，曲线拟合的数值磨光法，数学学报，第18卷(1975)，第2期，173～184.

［5］ Meyer S. L., Data Analysis for Scientists and Engineers, 1975, Wiley, N. Y.--London—Sydney—Torento.

［6］ 复旦大学数学系，曲线与曲面，1977，科学出版社，北京。

［7］ Ahlberg J. H., Nilson E. N., Walsh J. L., The Theory of Splines and their Applications, 1967, Acad. Press, N. Y. & London.

［8］ 熊一奇、路见可、黄志远、杨文茂，关于网格的光顺，武汉大学学报（自然科学版），1978，第3期，9—22.