三次样条函数在数值计算中的应用

鄔传保　　俞　刚

（中国科学院力学研究所）

一、前　言

随着电子计算机的广泛应用，样条（Spline）函数理论及其应用[1]也就迅速地发展起来，并成为当今数值计算中的一个有力工具．

在数值计算中，对于非等步长的运算，如果采用常规的插值多项式来进行内插、数值微分或积分，是十分繁杂而又很不可靠[2]．而且，更为重要的是，分段插值只能保证函数的连续性，而不能保证曲线的光滑性．这对很多不仅要求函数本身连续，而且也同时要求其一阶导数甚至二阶导数都连续的问题来说是不合适的．比如高速飞行器的翼型、冲压发动机的进气道、风洞的喷管以及在各种叶轮机械上使用的叶片等，都是要求外形光滑的．采用样条函数来进行计算，就能克服上述毛病，并且计算简便、可靠．

三次样条函数是计算简单而又应用最多的一种样条函数．实践证明，它在函数内插和数值积分的基本运算过程中，是一非常有效的工具．特别是由于它具有强的收敛特性，因此，在数值微分中表现出来的优点就更为突出．

二、三次样条函数

样条函数的概念来源于绘图员在绘制曲线时使用的样条．这种绘图员样条是用木头或其他材料做成的，可随意弯曲．

绘图员为了将一组点（样点）连成一条光滑曲线，往往用样条先把相近的几点连起来，再把另外一些点也连起来，并使接头处保持光滑．这样逐段连接，就把所有的点连成了一条光滑曲线．

因此，所谓样条函数，就是将绘图员样条绘制的曲线进行数学模拟而得到的一种函数．进行这种数学模拟的根据，就是把绘图员样条当作弹性薄梁来处理．

我们知道，弹性薄梁在受力变形时，其弯矩 $M(X)$ 可以表为：

$$M(X) = EJ/R(X) \qquad (1)$$

其中 E 为杨氏模量，J 为几何惯性矩，$R(X)$ 为变形梁中性轴的曲率半径．在小挠度情况下，$R(X) = 1/Y''(X)$．因而

$$Y''(X) = M(X)/EJ \qquad (2)$$

其中 $Y''(X)$ 为变形梁中性轴的二阶导数．对一定的梁来说，E、J 皆为常数，$Y''(X) \propto M(X)$．

除了把样条看成弹性薄梁外，还把样条必须通过的各样点比拟为梁的简支点，由此可以得出一个重要的关系，即样条（梁）变形时的弯矩 $M(X)$，亦即其二阶导数 $Y''(X)$，在各样点（简支点）之间的变化是线性的．这从数学的观点来看，就是用变形梁的中性轴来代替绘图员的样条，同时用一分段的三次曲线来逼近中性轴．

三次样条函数的数学定义，可以这样来描述：设通过一组点的曲线 $Y = f(X)$ 在区间 $[a \leqslant X \leqslant b]$ 上连续，并具有二阶连续导数．如果能找到这样一个函数 $S(X)$，它在区间 $[a, b]$ 上也具有二阶连续导数，同时在每一个子区间 $[X_{j-1}, X_j]$ $(j = 1, 2, \cdots, N)$ 上都是三次曲线并满足 $S(X_j) = Y_j$ $(j = 0, 1, \cdots, N)$，则称函

数 $S(X)$ 为曲线 $Y=f(X)$ 的三次样条函数.

根据前面的讨论和样条函数的定义，就可以建立三次样条函数的表达式. 习惯上用 M_j 来表示 $S''(X_j)$，因为样条函数 $S(X)$ 的二阶导数 $S''(X)$ 在区间 $[X_{j-1}, X_j]$ 上连续而且呈线性变化，故可以写出：

$$S''(X)=M_{j-1}\frac{X_j-X}{h_j}+M_j\frac{X-X_{j-1}}{h_j} \quad (3)$$

其中 $h_j=X_j-X_{j-1}$ $(j=1,2,\cdots,N)$. 将方程 (3) 积分两次，并根据函数连续的条件，即 $S(X_{j-1})=Y_{j-1}$, $S(X_j)=Y_j$，确定积分常数后可得：

$$\begin{aligned}S(X)=&M_{j-1}\frac{(X_j-X)^3}{6h_j}+M_j\frac{(X-X_{j-1})^3}{6h_j}\\&+\left(Y_{j-1}-\frac{M_{j-1}h_j^2}{6}\right)\frac{X_j-X}{h_j}\\&+\left(Y_j-\frac{M_jh_j^2}{6}\right)\frac{X-X_{j-1}}{h_j}\end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned}S'(X)=&-M_{j-1}\frac{(X_j-X)^2}{2h_j}\\&+M_j\frac{(X-X_{j-1})^2}{2h_j}\\&+\frac{Y_j-Y_{j-1}}{h_j}-\frac{M_j-M_{j-1}}{6}h_j\end{aligned} \quad (5)$$

方程(4)就是三次样条函数在子区间 $[X_{j-1},X_j]$ $(j=1,2,\cdots,N)$ 上的表达式，而方程 (5) 和 (3) 分别为 $S(X)$ 在该区间上一阶和二阶导数的表达式. 这些方程中的系数 M_j 是未知待求的. 因此，必须首先求出系数 M_j 才能由方程 (3)—(5) 求得在整个区间 $[a, b]$ 上的三次样条函数及其导数.

为了求 M_j，可利用函数 $S(X)$ 在样点 X_j 上具有连续一阶导数的条件（函数值连续的条件在求积分常数时已用，二阶导数连续的条件在方程 (3) 中已自动满足). 我们用 $S'(X_j^-)$ 表示函数 $S(X)$ 在区间 $[X_{j-1}, X_j]$ 右端点 X_j 的一阶导数值，用 $S'(X_j^+)$ 表示函数 $S(X)$ 在区间 $[X_j, X_{j+1}]$ 左端点 X_j 的一阶导数值，根据方程 (5)可得：

$$\left.\begin{aligned}S'(X_j^-)&=\frac{h_j}{6}M_{j-1}+\frac{h_j}{3}M_j+\frac{Y_j-Y_{j-1}}{h_j}\\S'(X_j^+)&=-\frac{h_{j+1}}{3}M_j-\frac{h_{j+1}}{6}M_{j+1}\\&\quad+\frac{Y_{j+1}-Y_j}{h_{j+1}}\end{aligned}\right\} \quad (6)$$

因为函数 $S(X)$ 在样点 X_j 处的一阶导数连续，即 $S'(X_j^-)=S'(X_j^+)$，由此得到求解的系数 M_j 的方程：

$$\begin{aligned}&\frac{h_j}{6}M_{j-1}+\frac{h_j+h_{j+1}}{3}M_j+\frac{h_{j+1}}{6}M_{j+1}\\&\qquad=\frac{Y_{j+1}-Y_j}{h_{j+1}}-\frac{Y_j-Y_{j-1}}{h_j}\\&\qquad(j=1,2,\cdots,N-1)\end{aligned} \quad (7)$$

这是一个关于 $(N+1)$ 个未知量 M_j 的 $(N-1)$ 个线性方程组，需要给定两个边界条件才能求解.

常见的边界条件有三类：

1. 给定函数两端点 (X_0, X_N) 处的一阶导数值：$S'(X_0)=Y'_0$, $S'(X_N)=Y'_N$. 但这种形式的边界条件还不能直接用来求解方程(7)，将其代入方程(6)可得：

$$\left.\begin{aligned}2M_0+M_1&=\frac{6}{h_1}\left(\frac{Y_1-Y_0}{h_1}-Y'_0\right)\\2M_N+M_{N-1}&=\frac{6}{h_N}\left(Y'_N-\frac{Y_N-Y_{N-1}}{h_N}\right)\end{aligned}\right\} \quad (8)$$

2. 给定函数两端点处的二阶导数值：$S''(X_0)=Y''_0$, $S''(X_N)=Y''_N$. 或 $M_0=Y''_0$, $M_N=Y''_N$.

3. 若函数在区间 $[a, b]$ 上是周期函数，而基本周期又正好是 $b-a=X_N-X_0$，这时的边界条件为：$S'(X_0)=S'(X_N)$ 和 $S''(X_0)=S''(X_N)$.

方程(7)的求解，在计算机上有现成的标准过程可以选用. 对于非周期函数，我们参照文献[3]、[1]，导出了求解系数 M_j 的简单的递推公式：

$$M_j=\frac{D_j-C_jM_{j+1}}{B_j}(j=1,2,\cdots,N-1) \quad (9)$$

其中

$$\left.\begin{aligned} B_j &= \frac{h_j + h_{j+1}}{3} - \frac{h_j}{6}\frac{C_{j-1}}{B_{j-1}}, C_j = \frac{h_{j+1}}{6} \\ D_j &= \frac{Y_{j+1} - Y_j}{h_{j+1}} - \frac{Y_j - Y_{j-1}}{h_j} \\ &\quad - \frac{h_j}{6}\frac{D_{j-1}}{B_{j-1}} \end{aligned}\right\} \quad (10)$$

对应的边界条件，其一般形式为：

$$M_0 = \frac{D_0 - C_0 M_1}{B_0},\ M_N = \frac{D_N - C_N M_{N-1}}{B_N} \quad (11)$$

这里的系数 B_0、C_0, D_0 及 B_N、C_N 和 D_N 视具体给定的边界条件形式而定. 比如，给定 $M_0 = Y_0''$，则 $B_0 = 1$, $C_0 = 0$, $D_0 = Y_0''$. 又若给定 $S'(X_N) = Y_N'$，由方程(8)知

$$M_N = \frac{3}{h_N}\left(Y_N' - \frac{Y_N - Y_{N-1}}{h_N}\right) - \frac{M_{N-1}}{2},$$

这时 $B_N = 1$, $C_N = \frac{1}{2}$,

$$D_N = \frac{3}{h_N}\left(Y_N' - \frac{Y_N - Y_{N-1}}{h_N}\right),$$

依此类推.

样条函数 $S(X)$ 在区间 $[a, b]$ 上的积分，可以直接从方程(4)求得.

$$\int_{X_{j-1}}^{X_j} S(X)dX = \frac{Y_j + Y_{j-1}}{2} h_j - \frac{M_j + M_{j-1}}{24} h_j^3 \quad (12)$$

因此

$$\int_a^b S(X)dX = \sum_{j=1}^{N} \frac{Y_j + Y_{j-1}}{2} h_j - \sum_{j=1}^{N} \frac{M_j + M_{j-1}}{24} h_j^3 \quad (13)$$

这对于非等步长的积分是十分方便而又可靠的.

以上结果都是用二阶导数 M_j 作系数来表示的. 也可以用一阶导数 $m_j = S'(X_j)$ 作系数来表示样条函数. 从方程(5)可以导出这两种系数相互之间的关系，然后依次代入方程(4)、(5)和(3)，就得到用一阶导数 m_j 作系数表示的三次样条函数及其导数：

$$\begin{aligned} S(X) &= m_{j-1}\frac{(X_j - X)^2(X - X_{j-1})}{h_j^2} \\ &\quad - m_j\frac{(X - X_{j-1})^2(X_j - X)}{h_j^2} \\ &\quad + Y_{j-1}\frac{(X_j - X)^2[2(X - X_{j-1}) + h_j]}{h_j^3} \\ &\quad + Y_j\frac{(X - X_{j-1})^2[2(X_j - X) + h_j]}{h_j^3} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} S'(X) &= m_{j-1}\frac{(X_j - X)(2X_{j-1} + X_j - 3X)}{h_j^2} \\ &\quad - m_j\frac{(X - X_j)(2X_j + X_{j-1} - 3X)}{h_j^2} \\ &\quad + 6(X_j - X)(X - X_{j-1})\frac{Y_j - Y_{j-1}}{h_j^3} \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} S''(X) &= -2m_{j-1}\frac{2X_j + X_{j-1} - 3X}{h_j^2} \\ &\quad - 2m_j\frac{2X_{j-1} + X_j - 3X}{h_j^2} \\ &\quad + 6(X_j + X_{j-1} - 2X)\frac{Y_j - Y_{j-1}}{h_j^3} \end{aligned} \quad (16)$$

类似求解方程(7)的办法，我们也导出了求解系数 m_j 的递推公式：

$$m_j = \frac{d_j - c_j m_{j+1}}{b_j} \ (j = 1, 2, \cdots, N-1) \quad (17)$$

其中

$$\left.\begin{aligned} b_j &= \frac{h_j + h_{j+1}}{3} - \frac{h_{j+1}}{6}\frac{c_{j-1}}{b_{j-1}},\ c_j = \frac{h_j}{6} \\ d_j &= \frac{1}{2}\left(\frac{Y_j - Y_{j-1}}{h_j}h_{j+1} + \frac{Y_{j+1} - Y_j}{h_{j+1}}h_j\right) \\ &\quad - \frac{h_{j+1}}{6}\frac{d_{j-1}}{b_{j-1}} \end{aligned}\right\} \quad (18)$$

相应的边界条件为：

$$m_0 = \frac{d_0 - c_0 m_1}{b_0},\quad m_N = \frac{d_N - c_N m_{N-1}}{b_N} \quad (19)$$

其中各系数视所给边界条件的具体形式而定，若给定 $S''(X_0) = Y_0''$, $S''(X_N) = Y_N''$，则：

$$\left.\begin{aligned} 2m_0 + m_1 &= 3\left(\frac{Y_1 - Y_0}{h_1}\right) - \frac{h_1}{2}Y_0'' \\ 2m_N + m_{N-1} &= 3\left(\frac{Y_N - Y_{N-1}}{h_N}\right) + \frac{h_N}{2}Y_N'' \end{aligned}\right\} \quad (20)$$

这时边界条件（22）中的系数分别为 $b_0=b_N=1$，$c_0=c_N=\frac{1}{2}$，$d_0=\frac{3}{2}\left(\frac{Y_1-Y_0}{h_1}\right)-\frac{h_1}{2}Y_0''$，$d_N=\frac{3}{2}\left(\frac{Y_N-Y_{N-1}}{h_N}\right)+\frac{h_N}{2}Y_N''$. 余类推.

对于周期函数，求解系数 M_j 或 m_j 的递推公式比较复杂，况且，这种情况在实际计算中并不常见，我们也就不另介绍了.

三、问题讨论

前面，我们已经得到了分别用 M_j 和 m_j 作系数的两种形式的样条函数. 从推导过程来看，它们是完全等价的. 只要给定的边界条件一致，计算结果也应该是相同的. 所以，应用时原则上可任选一种.

关键的问题是如何恰当地给定求解样条函数系数时的边界条件. 这里所说的"边界条件"，实际上就是待求函数两端点处的一阶或二阶导数值. 我们知道，函数的导数是直接决定函数变化特性的参数. 如果不恰当地给定函数两端点的一阶或二阶导数，势必要影响（改变）函数在两端附近的变化趋势，从而使计算结果产生误差，严重时会使函数在两端附近出现不合理的跳动. 所以，在给定边界条件时，一定要力求准确、恰当.

前已述及，对于非周期函数，常见的边界条件有两种，即给定函数两端点的一阶或二阶导数值. 考虑到有两种形式的样条函数，根据方程(8)和(20)，这些边界条件的形式可以写成：

1）$m_0=Y_0'$，或

$$2M_0+M_1=\frac{6}{h_1}\left(\frac{Y_1-Y_0}{h_1}-Y_0'\right)$$

$m_N=Y_N'$，或

$$2M_N+M_{N-1}=\frac{6}{h_N}\left(Y_N'-\frac{Y_N-Y_{N-1}}{h_N}\right)$$

2）$M_0=Y_0''$，或

$$2m_0+m_1=3\left(\frac{Y_1-Y_0}{h_1}\right)-\frac{h_1}{2}Y_0''$$

$M_N=Y_N''$，或

$$2m_N+m_{N-1}=3\left(\frac{Y_N-Y_{N-1}}{h_N}\right)+\frac{h_N}{2}Y_N''$$

如能正确给定上述边界条件中的一种，就能得到满意的结果. 我们通过多种算例试算的结果也都证实了这一点. 但是，在有些情况下，对所求函数的特性并不十分清楚，因此，很难确切给定两端点的一阶或二阶导数值. 这就提出了如何近似给定边界条件的问题. 我们在试算过程中用到的近似边界条件有：

3）$M_0=M_1$，$M_N=M_{N-1}$. 这对应于一阶导数，等于给定：$m_0+m_1=2(Y_1-Y_0)/h_1$，$m_N+m_{N-1}=2(Y_N-Y_{N-1})/h_N$. 这种近似给法的含意是一目了然的，通过算例计算的结果表明，效果较好.

4）$M_0=M_N=0$，这相当于给定：

$$2m_0+m_1=3\left(\frac{Y_1-Y_0}{h_1}\right),$$

$$2m_N+m_{N-1}=3\left(\frac{Y_N-Y_{N-1}}{h_N}\right)$$

对于只求函数内插或一阶导数还是可以的，但用来求二阶导数或数值积分就不太合适了.

另外，以 $m_0=m_1$，$m_N=m_{N-1}$ 为近似边界条件，这相当于给定 $M_0+M_1=M_N+M_{N-1}+0$，对函数两端点的二阶导数这样人为的给定，显然是不恰当的. 试算的结果不理想.

有时，由于通过其他计算或分析，能确切给定函数一端的边界条件，比如 $m_0=Y_0'$；而函数另一端的边界条件不知道，这时的边界条件可以给为：

$$m_0=Y_0',\quad m_N+m_{N-1}=2\left(\frac{Y_N-Y_{N-1}}{h_N}\right)$$

或

$$2M_0+M_1=\frac{6}{h_1}\left(\frac{Y_1-Y_0}{h_1}-Y_0'\right),\ M_N=M_{N-1}$$

在具体应用样条函数进行数值计算时，我们用《BCY-TQ 16》算法语言编了一个统一的计算机子程序（见附录），可用来对多种函数同时进行内插，数值微分和积分. 实践表明，使用该程序进行计算是非常方便而又省时的.

最后，我们把讨论的一些问题归纳如下：

1. 三次样条函数在数值计算中是一非常有效的工具. 特别是利用一简单的计算机程序，就能对各种非等步长的函数，同时进行内插归

整、数值微分和积分的计算．而且证明是既简便而又省时、可靠．

2. 分别用系数 M_j 和 m_j 表示的样条函数是完全等价的，具体应用时可任选一种．

3. 必须正确地给定求解样条函数系数的边界条件，否则，会使计算结果出现大的误差，甚至产生不合理的跳动，但这种大的误差或跳动，一般都限制在函数的两端附近．

4. 当无法正确给定边界条件时，只要函数及其导数在两端点附近的变化不太剧烈，而选用的计算步长又足够小时，采用 $M_0=M_1, M_N=M_{N-1}$ 作为近似的边界条件是比较理想的．

参 考 文 献

[1] Ahlberg, J. H. Nilson, E. N., Walsh, T. L., The Theory of Splines and Their Applications, Academic press Inc., (London) Ltd. (1967).

[2] 清华大学，北京大学《计算方法》编写组，计算方法(上册)，科学出版社 (1974).

[3] Hearsey, R. M., Wennerstrom, A. J., A computer program for the specification of axial compressor airfoils, AD-756879.

附 录

BCY-TQ16 三次样条函数插值程序

```
页 01
行 01 始过程 SPL(X, Y, X_E, Y_E, N, Q, F);
行 02 值 N, Q; 场 X, Y, X_E, Y_E; 函数 F;
行 03 始场 M, B, C, D[0: N];
行 04 1⇒B[0]; −1⇒C[0]; 0⇒D[0];
行 05 对于 I = 1 到 N − 1 步长 1 执行
行 06 始 (X[I + 1] − X[I])/6⇒C[I];
行 07 (X[I + 1] − X[I])/3 − (X[I] − X[I − 1])
      *C[I − 1]/(6*B[I − 1])⇒B[I];
行 08 (Y[I + 1] − Y[I])/(X[I + 1] − X[I])
      − (Y[I] − Y[I − 1])/(X[I] − X[I − 1]) −
行 09 (X[I] − X[I − 1])*D[I − 1]/(6*B[I − 1])
      ⇒D[I] 终;
行 10 D[N − 1]/(B[N − 1] + C[N − 1])⇒M[N];
行 11 对于 I = N − 1 到 1 步长 −1 执行
行 12 (D[I] − C[I]*M[I + 1])/B[I]⇒M[I];
行 13 M[1]⇒M[0]; 对于 I = 0 到 Q 步长 1 执行
行 14 始 1⇒J; LA: 若 XE[I] > X[J] 则
行 15 始 J + 1⇒J; 转 LA 终
行 16 否则 F(X[J] − X[J − 1], X[J − 1], X[J],
行 17 Y[J − 1], Y[J], M[J − 1], M[J], XE[I])⇒YE[I]
      终终;
行 18 函数 F1(H, X1, X2, Y1, Y2, M1, M2, X);
行 19 (M1*(X2 − X)↑3 + M2*(X − X1)↑3)/(6*H)
行 20 +(X2 − X)*(Y1/H − M1*H/6) + (X − X1)
      *(Y2/H − M2*H/6)⇒F1;
页 02
行 01 函数 F2(H, X1, X2, Y1, Y2, M1, M2, X);
行 02 (M2*(X − X1)↑2 − M1*(X2 − X)↑2)/(2*H)
行 03 +(Y2 − Y1)/H − (M2 − M1)*H/6⇒F2;
行 04 函数 F3(H, X1, X2, Y1, Y2, M1, M2, X);
行 05 (M1*(X2 − X) + M2*(X − X1))/H⇒F3;
行 06 函数 F4(H, X1, X2, Y1, Y2, M1, M2, X);
行 07 (Y1 + Y2)*H/2 − (M1 + M2)*H↑3/24⇒F4 终;
```

(上接第 62 页)

时使用；而(44)、(45)二者是同一个含义．当不受条件限制时，应尽量采用最佳化设计．但是，由于材料和工艺条件的限制，特别是利用现成毛坯时，普遍式也有广泛的用途．

八、工程设计中的应用

在工程设计中，本文所有公式中的 τ_i 均应以相应筒体的允许剪切强度 $[\tau_i]$ 取代之．经常碰到的实际情况有三种．

1. 最佳化设计．此时可根据(45)求得总的外内直径比 $K_{最佳}$，按设计要求的内直径求得组合筒体的外直径．其它各层的尺寸可按(43)求得．最后可根据(28)、(33)估算各种过盈量．

2. 利用现成毛坯材料求最大工作压力．过盈量按 (28)、(33) 估算的最大工作压力可由(37)求得．

3. 利用现成容器对某种工作压力计算安全系数．可根据 (35) 或 (36) 求得热套压力．然后，按(24)求得各层内壁的最大剪应力，将其与相应各层的允许剪切强度比较，即得各层在工作状态下的安全度．

参 考 文 献

[1] Timoshenko, S., Goodier, J. N., Theory of Elasticity (1951).

[2] M. M. 弗洛宁柯——鲍罗第契主编，材料力学教程第二卷(中译本)，高等教育出版社 (1954).

[3] 高压设备，化工设备设计手册 (4)，上海人民出版社 (1973).

[4] Hoffman, O., Sachs, G., Introduction to the theory of Plasticity for Engineers 1953.

[5] L. E. 勃朗奈尔，E. H. 杨，(骤定一、谢端绶译)，化工容器设计，上海科学技术出版社 (1964).

[6] 超高压容器设计，兰州石油机械研究所译，1973.

[7] 压力容器——国外技术进展，通用机械研究所，1974.