北海道放射線技術雑誌 (1984.08) 43～44号:105～107.

SPLINE関数の異常屈曲点に対する柔軟性の検討

西部茂美

SPLINE 関数の異常屈曲点に対する柔軟性の検討

旭川医科大学医学部附属病院放射線部
西部　茂美

1. はじめに

与えられた dose x_0, x_1, x_2, ……, x_n において，その response をそれぞれ $Y = y(x_k)$ ($k = 0$, 1 ………, n) とすると，これらの分点により閉区間〔a, b〕を分割した小区間を〔xj, xj+1〕($0 \leqq j \leqq n-1$) $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots\cdots < x_n = b$ とすると，分割された各小区間で $y(x)$ を近似する m 次多式の全体は区分多項式と呼ばれるが，その中でも閉区間〔a, b〕で 2 回連続微分可能な，3 次の区分多項式をスプライン関数と呼び，$S(x)$ と表わす。

2. spline[1]関数について

各 dose x_j での 2 次微係数 $S''(x_j)$ を A_j ($j = 0$, 1, ……, n) とすると，閉区間〔x_j, x_{j+1}〕において，2 次導関数 $S''(x)$ は線分であるから，ここで $x_{j+1} - x_j = h_j$ とすると，

$$S''(x) = A_j \cdot \frac{x_{j+1}-x}{h_j} + A_{j+1}\ \frac{x-x_j}{h_j} \cdots\cdots(1)$$

となる，(1)式を 2 回積分して，条件 $S(x_j) = y_j$，$S(x_{j+1}) = Y_{j+1}$ より積分定数を決めると，

$$S(x) = A_j \left\{ \frac{(x_{j+1}-x)^3}{6h_j} - \frac{x_{j+1}-x}{6} h_j \right\} + A_{j+1}\left\{ \frac{(x-x_j)^3}{6h_j} - \frac{(x-x_j)}{6} h_j \right\} + Y_j \cdot \frac{x_{j+1}-x}{h_j} + Y_{j+1} \cdot \frac{x-x_j}{h_j} \cdots\cdots(2)$$

となる。又，その 1 次導関数は，

$$S'(x) = A_j \left\{ -\frac{(x_{j+1}-x)^2}{2h_j} + \frac{h_j}{6} \right\} + A_{j+1}\left\{ \frac{(x-x_j)^2}{2h_j} - \frac{h_j}{6} \right\} + y_{j+1} - y_j$$

……(3)となる。

(1), (2)から区間〔a, b〕上で $S''(x)$ 及び $S(x)$ が連続であることは明らかで，S'[2](x) の右方・左方微分係数を求め，両者を等しいとおくと，

$$\frac{h_j}{6} \cdot A_{j-1} + \frac{h_j + h_{j+1}}{3} \cdot A_j + \frac{h_{j+1}}{6} \cdot A_{j+1} = \frac{y_{j+1}-y_j}{h_{j+1}} - \frac{y_j - y_{j-1}}{} \ (j = 1,\ 2,\ \cdots\cdots,$$

$n-1$)………(4)となり，(4)式によって，$S'(x)$ の連続性は満たされる。ここで，$M_j = \dfrac{h_{j+1}}{h_j + h_{j+1}}$，$V_j = 1 - M_j$ ($j = 2, 3, \cdots\cdots, n-1$) とおくと(4)は，

$$V_j \cdot A_{j-1} + 2A_j + M_j \cdot A_{j+1} = 6\,\frac{\left[\dfrac{(y_{j+1}-y_j)}{h_{j+1}}\right] - \left[\dfrac{(y_j - y_{j-1})}{h_j}\right]}{h_j + h_{j+1}} \cdots\cdots(5)$$

となる。

(5)式は，3 項方程式なので，行[3]列式を使い[3] 消去法によって次微分値を求める。それと端点条件ここでは A_0, A_n を強性的に 0 とおき，(2)式に代入し，spline 関数を構成し，あとは[4]カルダノ解により，未知の dose x を求める。以上が spline 関数の計算過程である。

3. 補正 spline 関数について

spline 関数を同いた場合にときどき生じる異常屈曲点をなくすために，spline 関数 $S(x)$ の 2 次微分値 $S''(x)$ を連続としたのに対し，$S''(x) - \beta^2 \cdot S(x)$ を連続としたものである。補正係数 β は，観測値のばらつきの程度により変化させ，$\beta = 0$ のとき spline 関数を構成するものである。いま $y(x)$ を 2 回連続微分可能として，spline 関数のときと同様に，分割した小区間を〔x_j, x_{j+1}〕($0 \leqq j \leqq n-1$) とする。又，x_j における観測値を $y(x_j) \doteq y_j$ とする。($j = 0$, 1，……，n）このとき，補正 spline 関数を S_β（x）とすると，spline 関数の場合と対応させると，S''_β（x）

$$-\beta^2 \cdot S_\beta(x) = [Y''(x_j) - \beta^2 \cdot y_j]\,\frac{x_{j+1}-x}{h_j}$$

$$+[Y''(x_{j+1}) - \beta^2 \cdot y_{j+1}]\,\frac{x-x_j}{h_j} \quad \cdots\cdots\cdots(6)$$

となり，ここで $Y''(x_j) = A_j$ とおく，(6)式は線型2階微分方程式で，その一般解は，$S_\beta(x) = b_1 \cdot e^{\beta x} + b_2 \cdot e^{-\beta x}$ であり，2回積分定数を定めると，

$$S_{\beta j}(x) = \frac{A_j \cdot \sinh[\beta(x_{j+1}-x)]}{\beta^2 \cdot \sinh(\beta h_j)}$$

$$+\frac{A_{j+1} \cdot \mathrm{simh}[\beta(x-x_j)]}{\beta^2 \cdot \sinh(\beta h_j)}$$

$$+\left[y_j - \frac{A_j}{B^2}\right] \cdot \frac{x_{j+1}-x}{h_j}$$

$$+\left[y_{j+1} - \frac{A_{j+1}}{\beta^2}\right]\frac{x-x_j}{h_j} \quad \cdots\cdots\cdots(7)$$

となる。（これで sin h 及び cos h は双曲線関数[5]のことである。）これが区間〔x_j，x_{j+1}〕における補正 spline 関数であり，(7)式を x で微分し，1次微分値が連続であるという条件 $S_{\beta j-1}'(x_j) = S_{\beta j}'(x_j)$ を用いると，

$$\left[\frac{1}{h_{j-1}} - \frac{\beta}{\sinh(\beta h_j)}\right] \cdot A_{j-1}$$

$$+\left[\frac{\beta \cdot \cosh(\beta h_{j-1})}{\sinh(\beta h_{j-1})} - \frac{1}{h_{j-1}}\right.$$

$$\left.+\frac{\beta \cdot \cosh(\beta h_j)}{\sinh(\beta h_j)} - \frac{1}{h_j}\right] \cdot A_j$$

$$+\left[\frac{1}{h_j} - \frac{\beta}{\sinh(\beta h_j)}\right] \cdot A_{j+1}$$

$$= \frac{y_{j+1}-y_j}{h_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}} \quad \cdots\cdots\cdots(8)$$

となり，(8)式と端点条件 $A_0 = A_n = 0$ とおき，A_j（j＝1，2，……，n－1）を求め，これを(7)式に代入して，補正 spline 関数を構成する。

4. 実際の観測値に対する補正 spline 関数の応用

Fig. 1 は4係数 logistic 関数処理をした，観測データと回帰データの相関が0.9999以上である IRI のデータを補正値 $\beta = 0.7$ として，補正 spline 関数処理したものである。Fig. 2 の下段の実線の曲線は，観測値 y の response を本来の値 $\frac{B}{B_0} = 44.45$ と変化させて，強性的に特異点を作り，$\beta = 0.7$ として処理を行ない，上段の曲線は x dose＝ 40の点を除外し補正 spline 処理を行なったものである。そこで，区間 x dose＝20～80までの各回帰値に対し，上段の推定回帰値とを加えて，2分する事により，中段の破線で示される推定回帰値を得た。この推定値は，本来の dose x＝ 40の点における y の response $\frac{B}{B_0}$ ＝ 49.7の点を通り，4係数 logistic 曲線と一致し，これは用手法で行なった曲線とも一致した。

B0(CPM)

11208
11476　C.V.= 1.181449480　%

NO.	ST.D-NODO	B/B0 (%)	COUNT(1)	COUNT(2)	C.V.(%)
1	5	93.7488979	10591	10675	0.394996
2	10	80.69123611	9355	8949	2.21609
3	20	64.64027508	7186	7477	1.98458
4	40	49.1756304	5472	5683	1.89152
5	80	33.82560395	3780	3893	1.47269
6	160	21.31899136	2441	2395	0.951199
7	320	13.88203139	1591	1558	1.04795

***********CALCULATION***********

M(UNDER TENSION F.)= 0.7

Y=A(J)*EXP(M*X(J))+B(J)*EXP(-M*X(J))+C(J)*X(J)+D(J)

(J)	A	B	C	D
1	7.86104E-04	-7.86104E-04	-2.78378	107.6678413
2	4.87219E-07	-4.87219E-07	-1.57763	95.6063502
3	1.85835E-13	-1.85835E-13	-0.757334	79.20025242
4	7.70988E-26	-7.70988E-26	-0.381063	64.14939073
5	1.78446E-50	-1.78446E-50	-0.155292	46.08775858
6	0	0	-0.045993	28.59980929

NO.	ST.D-NODO	*B/B0 (%)
1	5	93.77494977
2	10	79.8305845
3	20	64.05357264
4	40	48.90687073
5	80	33.66439858
6	160	21.24092929
7	320	13.88204929

R = 0.999958

ANALYSIS OF VARIANCE TABLE

SV	SS	DF	MS	F
ZENTAI				F(0.05)= 4.350
KAIKI				F(0.05)/3= 1.450
ZANSA	14.704	10.000	S↑2= 1.470	1.293 (NS)
FUTEKIGOU	2.380	3.000	MSL= 0.793	0.950 (NSL)
JUNGOSA	12.324	7.000	SE↑2= 1.761	0.104 (NF)

* F.T= 0.451　　IF F.T>F(0.05)/3 THEN RUN ASSAYS AGAIN !?

Fig. 1

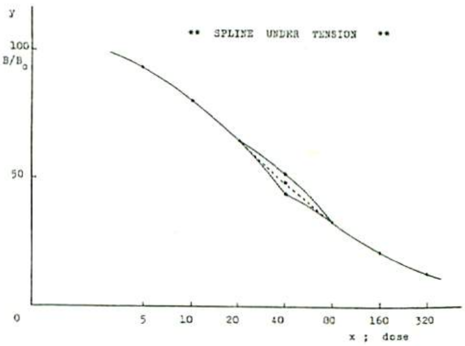

Fig. 2

5. 結　語

1. x doseの端点を除き，ある1点かばらついたときに，補正値βを変化させる。すなわち用手法とのばらつきの程度を調べることにより，特異点に対して補正推定回帰式を得た。

2. 4係数logistic関数で処理した観測値との相関が0.99949～0.9990までのデータに対しては，推定回帰式と観測値との間にいくぶんの解離がみられるが，もしもこのデータを採用する場合，反復最小二乗法を用い処理を行なっているので，これは用手法との値とほぼ一致するし，その値をさらに補正spline処理することにより，ある程度の応力をもたせた。

3. 今後よりいっそうの，ばらつきのあるデータに対しての推定回帰式の最良の方法を望む。

参考文献

1）Gluss, J.M "Smooth-curve interpolation ; A general : zed spline fit procedure", BIT, 6 (1966), PP.277～293

2）一松　信　微分方程式と解法，シリーズ新しい応用の数学15，教育出版，1976

3）戸川隼人　計算機のための数値計算，コンピュータテキスト5　サイエンス社

4）村勢一郎　代数学の演習，森北出版

5）泉　信一　共立数学公式，共立出版