

9

INTERPOLACE A APROXIMACE

Vzorová úloha 9.1 *Náhrada funkce $\exp(x)$*

Nalezněte interpolační polynom, který aproximuje funkci $\exp(x)$ v intervalu $\{0, 1\}$ tak, že v krajních bodech $x_1 = 0$ a $x_2 = 1$ souhlasí s touto funkcí ve funkčních hodnotách a hodnotách prvních derivací.

Řešení: Určíme stupeň interpolačního polynomu $m = 2 + 2 - 1 = 3$. Koeficienty c_1, c_2, c_3 a c_4 interpolačního polynomu $g(x) = c_1 + c_2 x + c_3 x^2 + c_4 x^3$ určíme po dosazení do rovnice podmínky. Na základě zadání lze úvodní rovnici vyjádřit ve tvaru

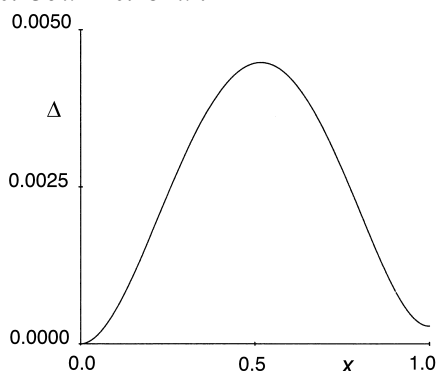
$$\exp(0) = 1 = c_1,$$

$$\exp'(0) = 1 = c_2,$$

$$\exp(1) = 2.718 = c_1 + c_2(1) + c_3(1)^2 + c_4(1)^3$$

$$\text{a } \exp'(1) = 2.718 = c_2 + 2c_3(1) + 3c_4(1)^2,$$

kde $\exp'(x) = d \exp(x)/dx$ je první derivace funkce $\exp(x)$. Z prvních dvou rovnic jsou $c_1 = 1$ a $c_2 = 1$. Zbývající koeficienty se vyčíslí ze dvou lineárních rovnic o dvou neznámých $0.718 = c_3 + c_4$, $1.718 = 2c_3 + 3c_4$. Řešením je $c_3 = 0.436$ a $c_4 = 0.282$. Interpolací polynom má pak tvar $g(x) = 1 + x + 0.436 x^2 + 0.282 x^3$.



Obr. 9.1 Graf chyby Δ aproximace funkce $\exp(x)$ polynomem $g(x)$.

Na obr. 9.1 je pro tento polynom znázorněn graf chyby aproximace $\Delta = \exp(x) - g(x)$.

Závěr: Úloha interpolace zde vede na úlohu hledání řešení soustavy lineárních rovnic.

Vzorová úloha 9.2 *Náhrada funkce $\exp(x)$*

Nalezněte interpolační polynom, který aproximuje funkci $\exp(x)$ a prochází uzly o hodnotách $x_1 = 0$, $x_2 = 0.5$ a $x_3 = 1$.

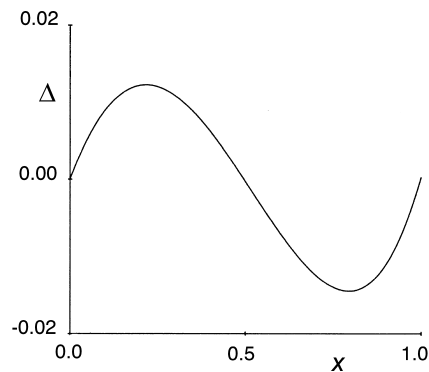
Řešení: Pro určení interpolačního polynomu druhého stupně využijeme Newtonovy formule.

Postupné diference			
x_i	y_i	První diference	Druhá diference
0	1		
		1.298	
0.5	1.649		0.84
		2.138	
1	2.718		

Postupné diference jsou v tabulce. Hledaný interpolační polynom má potom tvar

$$\begin{aligned} P(x) &= 1 + 1.298(x - 0) + 0.84(x - 0)(x - 0.5) = \\ &= 1 + 0.878x + 0.84x^2. \end{aligned}$$

Průběh chyby aproximace Δ funkce $f(x)$ tímto interpolačním polynomem je znázorněn na obr. 9.3.



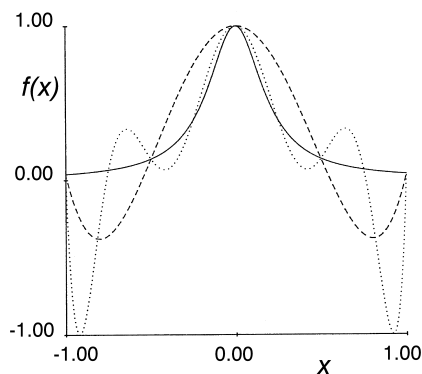
Obr. 9.3 Chyba Δ aproximace funkce $\exp(x)$ polynomem $P(x)$.

Závěr: Použití Newtonovy interpolační formule je s využitím tabulky proměnných diferencí jednoduché. Přidání dalšího bodu znamená pouze přidání dalšího členu do interpolační formule.

Vzorová úloha 9.3 *Aproximace racionální funkce*

Aproximujte funkci $f(x) = 1/(1 + 25x^2)$ interpolačními polynomy $L(x)$ na intervalu $\{-1, 1\}$ při volbě $n = 10$ (polynom stupně $m = 9$) a $n = 16$ (polynom stupně $m = 15$). Dělení uzlových bodů volte ekvidistantní.

Řešení: Programem ADSTAT byly určeny oba interpolační polynomy, které jsou spolu se skutečným průběhem $f(x)$ znázorněny na obr. 9.4.



Obr. 9.4 Interpolace funkce $f(x)$ (plnou čarou) polynomy 9. (čárkovaně) a 15. (tečkovaně) stupně.

Závěr: Použití interpolačních polynomů vyšších stupňů nemusí ještě znamenat zpřesnění aproximace funkce $f(x)$.

Vzorová úloha 9.4 *Hermitovská interpolace funkce $\exp(x)$*

Řešte vzorovou úlohu 9.1 využitím Hermitovské interpolační formule.

Řešení: Plyne, že $g_1(x) = \frac{x+1}{0+1} = 1+x$, $g_1'(x) = 1$,

$$g_2(x) = \frac{x}{1+0} = x, \quad g_2'(x) = 1$$

a dále platí $h_1(x) = [1+2x](x+1)^2$, $h_2(x) = [1-2(x-1)]x^2$ a

$$\bar{h}_1(x) = x(x+1)^2, \quad \bar{h}_2(x) = (x+1)x^2.$$

Po přímém dosazení vychází

$$H_3(x) = [1+2x](1-x)^2 + 2.718[1-2(x-1)]x^2 + x(1-x)^2 + 2.718(x-1)x^2 = 1+x+0.436x^2+0.282x^3.$$

Závěr: Polynom $H_3(x)$ je pochopitelně totožný s polynomm $g(x)$, nalezeným ve vzorové úloze 9.1.

Vzorová úloha 9.5 *Racionální interpolace funkce $\exp(x)$*

Nalezněte racionální interpolační polynom, který aproximuje funkci $\exp(x)$ a prochází uzly o hodnotách $x_1 = 0$, $x_2 = 0.5$ a $x_3 = 1$.

Řešení: Podle uvedeného postupu je

$$R_1(x_1) = b_1 = 1,$$

$$R_1(x_2) = 1.649,$$

$$R_1(x_3) = 2.718,$$

$$b_2 = R_2(x_2) = \frac{0.5 \cdot 0}{1.649 \cdot 1} = 0.7704,$$

pak

$$R_2(x_3) = \frac{1 \cdot 0}{2.718 \cdot 1} = 0.58207$$

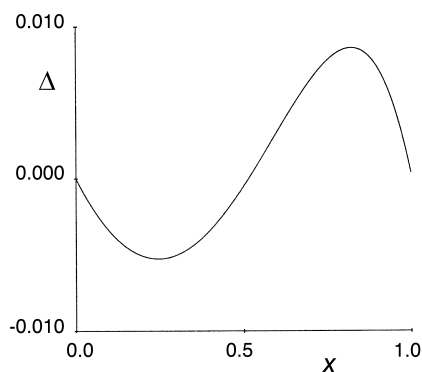
a konečně

$$b_3 = R_3(x_3) = \frac{1 \cdot 0.5}{0.582 \cdot 0.77} = 2.66.$$

Po úpravě vyjde

$$R(x) = \frac{b_1 b_2 b_3 (x - x_1) (x - x_2) + b_2 b_3 (x - x_1) + b_1 (x - x_2)}{b_2 b_3 (x - x_2)},$$

$$= \frac{1.659x + 2.5478}{2.5478 + x}.$$



Obr. 9.5 Graf chyby aproximace funkce $\exp(x)$ racionální lomenou funkcí.

Závěr: Na obr. 9.5 je znázorněn průběh chyby aproximace $\Delta = R(x) - \exp(x)$, vystihující kvalitu provedené aproximace.

Vzorová úloha 9.6 Lineární B-spline

Odvoďte tvar B-spline $B_{2,j}$ a zakreslete všechny spline patřící do intervalu $[\xi_{j-2}, \xi_j]$.

Řešení: Z definice je patrné, že $B_{2,j}$ je definováno na intervalu $\xi_{j-2} < \xi_{j-1} < \xi_j$ vztahem

$$B_{2,j} = \frac{(\xi_j - x) \cdot (\xi_{j+1} - x)}{\xi_j - \xi_{j+1}} + \frac{(\xi_{j+1} - x) \cdot (\xi_{j+2} - x)}{\xi_{j+1} - \xi_{j+2}},$$

$$+ \frac{(\xi_{j+2} - x)}{\xi_{j+1} - \xi_{j+2}} \left[\frac{1}{\xi_{j+1} - \xi_{j+2}} + \frac{1}{\xi_j - \xi_{j+1}} \right] (\xi_{j+1} - x) \cdot \frac{(\xi_j - x)}{\xi_j - \xi_{j+1}}.$$

Při určení $B_{2,j}(x)$ bylo použito rekurentního vztahu pro postupné diference

$$[\xi_{j-2}, \xi_{j-1}, \xi_j] \text{ g } \cdot \frac{[\xi_{j-1}, \xi_j] \text{ g } \& [\xi_{j-2}, \xi_{j-1}] \text{ g}}{\xi_j \& \xi_{j-2}} .$$

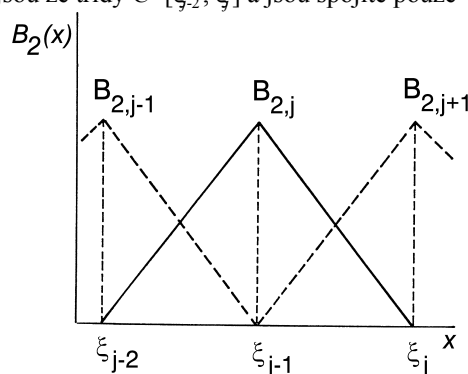
Přepišme si $B_{2,j}(x)$ jako funkce definované v intervalu $I_{j-1} = (\xi_{j-2}, \xi_{j-1})$ a $I_j = (\xi_{j-1}, \xi_j)$. Pro interval I_{j-1} platí

$$B_{2,j}(x) = 1 - \frac{x}{\xi_{j-1} \& \xi_{j-2}} \& \frac{\xi_{j-1}}{\xi_{j-1} \& \xi_{j-2}}, \quad \text{pro } \xi_{j-2} \# x \# \xi_{j-1} .$$

Jde o rovnici přímky nabývající v místě ξ_{j-2} hodnoty $B_{2,j}(\xi_{j-2}) = 0$ a v místě ξ_{j-1} hodnoty $B_{2,j}(\xi_{j-1}) = 1$. Pro interval I_j platí

$$B_{2,j}(x) = \frac{\xi_j}{\xi_j \& \xi_{j-1}} \& \frac{x}{\xi_j \& \xi_{j-1}}, \quad \text{pro } \xi_{j-1} \# x \# \xi_j .$$

Jde také o rovnici přímky nabývající v místě ξ_{j-1} hodnoty $B_{2,j}(\xi_{j-1}) = 1$ a v místě ξ_j hodnoty $B_{2,j}(\xi_j) = 0$. Ve smyslu definice je tedy $B_{m,j}$ pro $m = 2$ spline polynom $S_1(x)$ určený polynomy prvního stupně, které jsou ze třídy $C^0[\xi_{j-2}, \xi_j]$ a jsou spojitě pouze ve funkčních hodnotách.



Obr. 9.7 Elementární lineární B-spline.

Na obr. 9.7 je znázorněn B-spline $B_{2,j}(x)$ spolu se sousedním B-spline, které jsou nenulové na intervalu $[\xi_{j-2}, \xi_j]$.

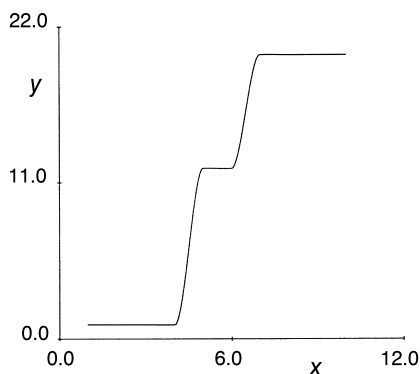
Závěr: Konstrukce B-spline je pro nízké hodnoty m možná přímo z definice. Při použití počítače je však výhodnější rekurentní formule.

Vzorová úloha 9.7 Lokální kubická interpolace stupňovité závislosti

Nalezněte lokální C^1 -kubickou interpolaci pro zadaná data s využitím derivací počítaných z rovnice pro veličinu d_i . Určete i hodnoty derivace a integrálu ve všech uzlových bodech.

Data: $n = 10$

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	1	1	1	1	12	12	20	20	20	20

Obr. 9.10 C^1 -interpolace využívající derivací .

Řešení: Byl určen průběh interpolační funkce pro případ bez omezení derivací. Výsledek je znázorněn na obr. 9.10. Při znalosti koeficientů c_1 až c_4 pro všechny lokální kubické polynomy je snadné určit analyticky jak první derivaci, tak i integrál v libovolném bodě intervalu $x_1 \neq x \neq x_n$. V tabulce 9.3 jsou uvedeny hodnoty první derivace a integrálu, odpovídající C^1 -interpolaci znázorněné pro uzlové body na obr. 9.10.

Tabulka 9.3 Hodnoty derivací a integrálu v uzlových bodech.

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Derivace	0	0	0	0.089	0.089	0.121	0.121	0	0	0
Integrál	0	1	2	2.99	9.49	21.5	37.5	57.5	77.5	97.5

Závěr: Z obr. 9.10 je patrné, že použití třibodové formule vede pro tento případ k závislosti zachovávající lokální monotónnost dat.

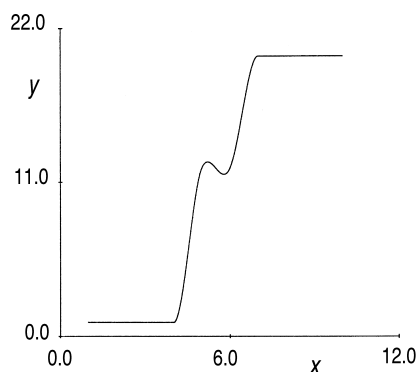
Vzorová úloha 9.8 Akimova interpolace schodovité závislosti

Pro data ze vzorové úlohy 9.7 nalezněte C^1 -interpolační formuli využitím Akimova vztahu pro derivace a vypočítejte derivace a integrály ve všech uzlových bodech.

Řešení: Byl vypočten průběh interpolační funkce pro případ bez omezení derivací (obr. 9.11). V tabulce jsou uvedeny hodnoty derivace a integrálu této závislosti v uzlových bodech. Je patrné, že v tomto případě již C^1 -interpolace neodpovídá lokálnímu chování dat. Úpravou derivací dle Fritche a Carlsona⁸ vyjdou všechna $d_i = 0$ a průběh interpolované závislosti je pak shodný s obr. 9.10.

Hodnoty derivací a integrálu v uzlových bodech.

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Derivace	0	0	0	0	4.63	4.63	0	0	0	0
Integrál	0	1	2	3	9.11	21.11	37.5	57.5	77.5	97.5

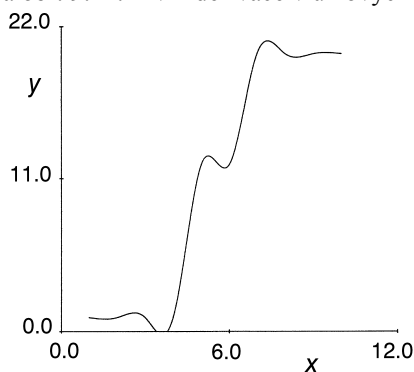
Obr. 9.11 C^1 -Akimova interpolace.

Závěr: Je patrné, že Akimova interpolace nezajišťuje souhlas s lokálním chováním dat. Tento problém lze snadno odstranit použitím technik pro úpravu derivací.

Vzorová úloha 9.9 Spline interpolace schodovité závislosti

Pro data uvedená ve vzorové úloze 9.7 nalezněte kubický spline s okrajovými podmínkami a vypočítejte první derivace v uzlových bodech.

Řešení: Využitím programu SPLINE byl určen průběh kubického interpolačního spline $S_3(x)$, který je zakreslen na obr. 9.12. První derivace v uzlových bodech jsou v tabulce.

Obr. 9.12 C^2 -kubický spline interpolace.

Hodnoty první derivace v uzlových bodech

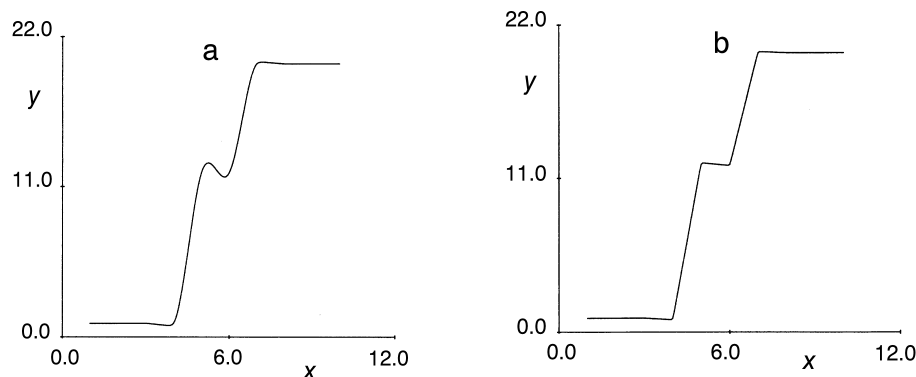
x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Derivace	0	0.56	-1.97	7.34	5.61	3.20	5.57	-1.5	0.429	-0.21

Závěr: Kubický spline tvoří všude tam, kde dochází k náhlým změnám křivosti interpolované závislosti, falešné extrémy.

Vzorová úloha 9.10 Interpolace pomocí spline pod napětím

Pro data uvedená ve vzorové úloze 9.7 nalezněte spline pod napětím $S_r(x)$ při volbě $\lambda = 50$ a dále při optimální volbě podle Rentropa.

Řešení: Byly určeny průběhy $S_T(x)$ pro optimální λ_i podle Rentropa (obr. 9.13a) a dále pro $\lambda_i = 50, i = 1, \dots, n$, (obr. 9.13b). V tabulce jsou uvedeny hodnoty první derivace v uzlových bodech.



Obr. 9.13 Interpolace pomocí spline pod napětím při (a) volbě λ_i dle Rentropa, (b) volbě $\lambda_i = 50, i = 1, \dots, n$.

Hodnoty první derivace v uzlových bodech

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Derivace (λ dle Rentropa)	0	0.004	-0.16	-2.7	6.6	3.82	1.91	-0.008	0.003	$-2 \cdot 10^{-4}$
Derivace ($\lambda = 50$)	0	0.004	-0.047	5.54	5.51	3.99	4.03	-0.034	$2 \cdot 10^{-4}$	$-4 \cdot 10^{-6}$

Při porovnání obr. 9.13 s 9.12 (spline pod napětím pro $\lambda = 0$) je patrné, že Rentropův postup vede v výrazném zvýšení hladkosti. Není však zajištěna lokální monotónnost interpolující funkce. Při veliké hodnotě napětí ($\lambda = 50$) může dojít až ke stavu, kdy se interpolující funkce jeví jako lineární lomená závislost a poloměry křivosti jsou příliš malé.

Závěr: Vhodnou volbou napětí λ_i lze tvar interpolujícího spline pod napětím "řídít" v širokých mezích.

Vzorová úloha 9.11 Aproximace funkce $\exp(x)$

Stanovte kvadratický aproximační polynom, který ve smyslu L_2 -normy nejlépe aproximuje funkci $\exp(x)$ v intervalu $(0, 2)$.

Řešení: Pro určení aproximační paraboly využijeme tabulky. Pro integrály I_0 až I_2 při $x^* = x - 1$ platí

$$I_0 = 0.5 \int_0^1 \exp(x) dx = \frac{\exp(2) - 1}{2} = 3.1945,$$

$$I_1 = 0.5 \int_0^1 x \exp(x) dx = [e^x (x - 1)]_0^2 + [e^x]_0^1 = 1,$$

$$I_2 = 0.5 \int_{-1}^1 x^2 \exp(x) dx = \frac{\exp(2) - 5}{2} = 1.1945$$

Použitím druhého řádku tabulky, pro $m = 3$, pak přímo dostaneme $b_1 = 2.70825$, $b_2 = 3$ a $b_3 = 1.45875$. Aproximační polynom má tvar $g(x^*) = 2.70825 + 3x^* + 1.45875x^{*2}$. Po zpětné transformaci na proměnnou x pak vyjde $g(x) = 1.167 + 0.08248x + 1.45875x^2$. Pro výpočet střední kvadratické odchylky je třeba ještě určit integrál

$$\int_0^2 \exp(2x) dx = 0.5 (\exp(4) - 1)$$

a pak dosadit do rovnice

$$SE = \sqrt{0.5 (\exp(4) - 1) + 2.70825^2 + 3.1945^2 + 3 + 1.45875^2 + 1.1945^2} = 0.0745$$

Závěr: Aproximace funkce $f(x)$ je při použití tabulky velmi jednoduchá. Vyžaduje pouze analytické či numerické určení integrálů.

Vzorová úloha 9.12 Čebyševova aproximace funkce $\exp(x)$

Stanovte Čebyševovu aproximaci funkce $\exp(x)$ v intervalu $[-1, 2]$ polynomem druhého stupně pro $n = 5$ bodů.

Řešení: V tabulce jsou uvedeny Čebyševovy uzly x_j^* , Z_j^* a hodnoty funkce $\exp(Z_j^*)$.

Zadání hodnot pro aproximace $\exp(x)$			
j	x_j^*	Z_j^*	$\exp(Z_j^*)$
1	-0.9511	0.0489	1.0502
2	-0.5878	0.4122	1.5102
3	0	1	2.7183
4	0.5878	1.5878	4.8929
5	0.9511	1.9511	7.0361

Plyne, že $T_0 = 1$, $T_1 = x$ a $T_2 = 2x^2 - 1$. Rovnice má konkrétní tvar

$$g(x) = c_0 + c_1 x + c_2 (2x^2 - 1)$$

$$\text{Z rovnic pak vyčíslíme } c_0 = \frac{1}{5} \sum_{j=1}^5 \frac{\exp(Z_j^*)}{5} = 3.4415$$

$$c_1 = 2 \sum_{j=1}^5 x_j^* \frac{\exp(Z_j^*)}{5} = 3.0725, \quad c_2 = 2 \sum_{j=1}^5 \frac{(2x_j^{*2} - 1) \exp(Z_j^*)}{5} = 0.7380$$

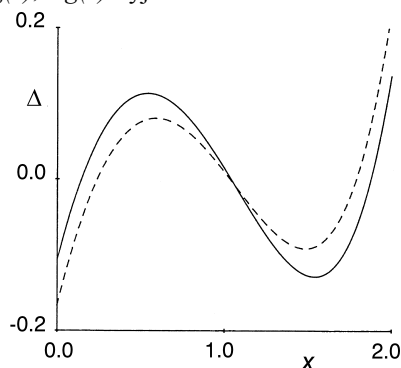
Po úpravách vyjde pro interval $[-1, 1]$ aproximační polynom

$$g(x) = 2.7035 + 3.0725x + 1.476x^2$$

Převedením do původního intervalu ($0 \neq x \neq 2$) dostáváme

$$g(x) = 1.107 + 0.1205x + 1.476x^2.$$

Střední kvadratická odchylka je rovna $SE = 0.0843$. Na obr. 9.14 je znázorněn průběh chyby aproximace $\Delta = \exp(x) - g(x)$, z $g(x)$ vyjádřené ve vzorové úloze 9.11.



Obr. 9.14 Chyba Δ aproximace $\exp(x)$ pomocí Čebyševovy (plná čára) a L_2 -aproximace (čárkovaně).

Z hlediska celkového přiblížení je lepší polynom určený z integrálního kritéria L_2 -aproximace. Čebyševovská aproximace však vede k minimální maximální odchylce.

Závěr: Pokud lze předem volit souřadnice aproximované funkce či závislosti na ose x , je snadné určit aproximační polynom optimální v minimaxním smyslu, tj. minimalizující maximální absolutní odchylku.

Vzorová úloha 9.13 Hledání nejlepšího poměru polynomů

Nalezení nejlepšího modelu poměru dvou polynomů, mezi stovkami všech možných transformačních modelů, se provede na základě kritéria dosažení co nejtěsnějšího proložení. Nalezený model je podroben detailní regresní analýze. Na nezávisle proměnnou x a závisle proměnnou y lze užit také rozličné transformace, čímž se paleta testovaných modelů rozšíří až na několik set. Obecný model poměru polynomů zapíšeme vztahem

$$g(y) \cdot \frac{a_0 + a_1 f(x) + a_2 f^2(x) + a_3 f^3(x) + a_4 f^4(x) + a_5 f^5(x)}{1 + b_1(x) + b_2 f^2(x) + b_3 f^3(x) + b_4 f^4(x) + b_5 f^5(x)} = g,$$

kde $g(y)$ a $f(x)$ představuje mocninné transformace y a x nebo logaritmy, odmocniny, atd. Neznámé parametry a_0, a_1, \dots, a_5 a b_1, b_2, \dots, b_5 jsou odhadovány z dat, g značí náhodnou chybu. Řada parametrů však může být nulových a model se pak zjednoduší.

Pravidla výstavby modelu: 1. První zásadou je nalézt model co nejjednodušší, s co nejmenším počtem neznámých parametrů. 2. Druhou zásadou je požadavek, aby testovaný model měl v čitateli vždy polynom nižšího stupně než má polynom ve jmenovateli.

Data: jsou uvedena v tabulce predikce; jde o popis dvou chromatografických pík.

Řešení:

Průběh minimalizačního procesu						
It.	Suma chyb		a_0	a_1	a_2	a_3
	λ	λ				
0	70.81162	0.00004	11.78766	-0.2798519	5.809555E-03	-4.172031E-05
1	70.73225	0.16	11.78725	-0.2798166	5.810308E-03	-4.172031E-05

..
9	70.50236	0.1048576	11.79268	-0.2795659	5.810308E-03	-4.172031E-05
10	70.49983	0.4194304	11.79228	-0.279557	5.810308E-03	-4.172031E-05

Bylo dosaženo maximálního počtu povolených iterací.

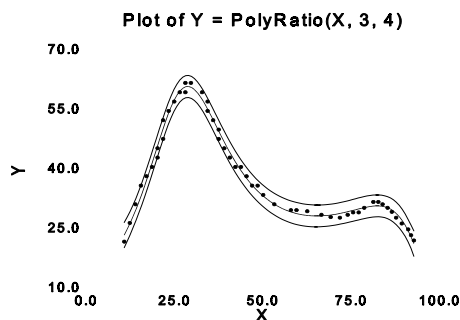
Odhady parametrů modelu				
Parametr	Odhad parametru	Asymptotická směr. odchylka	Dolní mez 95 % i. s.	Horní mez 95 % i. s.
a_0	11.79254	1.012715	9.750206	13.83488
a_1	-0.2795364	9.166186E-02	-0.4643901	-9.468261E-02
a_2	5.810308E-03	3.516727E-03	-1.281847E-03	1.290246E-02
a_3	-4.172031E-05	2.863182E-05	-9.946187E-05	1.602125E-05
b_1	-0.0783304	2.020337E-03	-8.240479E-02	-0.074256
b_2	2.391857E-03	4.689093E-05	2.297292E-03	2.486421E-03
b_3	-2.86472E-05	4.332001E-06	-3.738351E-05	-1.991088E-05
b_4	1.171313E-07	1.025966E-06	-1.951927E-06	2.186189E-06
Závisle proměnná: y				
Nezávisle proměnná: x				
Model:	$y = (a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3) / (1 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3 + b_4x^4)$			
R^2	0.990159			
Počet iterací: 10				
Model numericky: $((11.79254 - (0.2795364) * (x) + (5.810308E-03) * (x)^2 - (4.172031E-05) * (x)^3) / (1 - (0.0783304) * (x) + (2.391857E-03) * (x)^2 - (2.86472E-05) * (x)^3 + (1.171313E-07) * (x)^4))$				

Asymptotická korelační matice parametrů								
	a_0	a_1	a_2	a_3	b_1	b_2	b_3	b_4
a_0	1.000000	-0.668342	0.251252	-0.126446	0.045937	0.033491	-0.444426	0.769239
a_1	-0.668342	1.000000	-0.826039	0.725516	0.586512	-0.664699	-0.127771	-0.364811
a_2	0.251252	-0.826039	1.000000	-0.986996	-0.937223	0.967391	0.655601	0.217490
a_3	-0.126446	0.725516	-0.986996	1.000000	0.978499	-0.991658	-0.765633	-0.176658
b_1	0.045937	0.586512	-0.937223	0.978499	1.000000	-0.989097	-0.867018	-0.095811
b_2	0.033491	-0.664699	0.967391	-0.991658	-0.989097	1.000000	0.801153	0.123138
b_3	-0.444426	-0.127771	0.655601	-0.765633	-0.867018	0.801153	1.000000	-0.139159
b_4	0.769239	-0.364811	0.217490	-0.176658	-0.095811	0.123138	-0.139159	1.000000

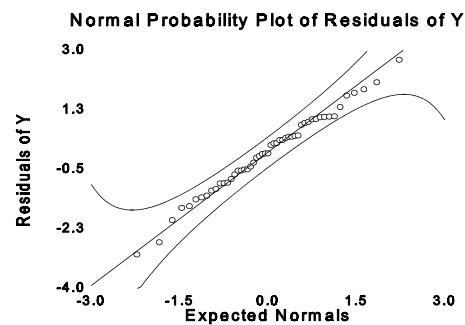
Je-li absolutní hodnota korelace vyšší než 0.95, je přesnost parametru podezřelá.

Predikované hodnoty a analýza klasických reziduí						
Řádek	x	y	Predikce y_p	Dolní mez 95.0% i. s.	Horní mez 95.0% i. s.	Reziduum
1	10.69182	21.76471	23.39933	20.2282	26.57045	-1.634617
2	12.26415	26.47059	26.25687	23.30506	29.20868	0.2137172
3	13.83648	31.17647	29.50871	26.70471	32.31271	1.667763
4	15.4088	35.88235	33.16126	30.38701	35.93551	2.721093
5	16.98113	38.23529	37.18533	34.38747	39.98318	1.04997
6	18.55346	40.58823	41.49773	38.6993	44.29615	-0.9094926
7	20.12579	42.94118	45.94416	43.17859	48.70974	-3.002987
8	20.12579	45.29412	45.94416	43.17859	48.70974	-0.6500469
9	21.69811	47.64706	50.29161	47.55496	53.02825	-2.644546

10	23.27044	54.70588	54.24173	51.50516	56.97831	0.4641487
11	24.84277	57.05882	57.47352	54.71762	60.22942	-0.4146998
12	26.41509	59.41177	59.71032	56.93428	62.48635	-0.2985483
13	27.98742	61.76471	60.78881	58.00365	63.57397	0.9758998
14	29.55975	61.76471	60.69903	57.92286	63.4752	1.065677
15	27.98742	59.41177	60.78881	58.00365	63.57397	-1.37704
16	21.69811	52.35294	50.29161	47.55496	53.02825	2.061334
17	32.7044	59.41177	57.6542	54.93171	60.37669	1.757568
18	34.27673	57.05882	55.19875	52.49294	57.90457	1.860069
19	34.27673	54.70588	55.19875	52.49294	57.90457	-0.4928702
20	35.84906	52.35294	52.45885	49.75431	55.16339	-0.1059121
21	37.42138	50.000	49.63521	46.9237	52.34673	0.364788
22	37.42138	47.64706	49.63521	46.9237	52.34673	-1.988152
23	38.99371	45.29412	46.8722	44.15504	49.58937	-1.578087
24	40.56604	42.94118	44.26291	41.54681	46.97902	-1.321735
25	42.13836	40.58823	41.86002	39.15155	44.56849	-1.271782
26	43.71069	40.58823	39.68738	36.98952	42.38524	0.9008505
27	45.28302	38.23529	37.74997	35.06122	40.43872	0.4853272
28	46.85535	35.88235	36.04123	33.35659	38.72587	-0.158876
29	48.42767	35.88235	34.54837	31.86112	37.23561	1.33399
30	50.000	33.52941	33.25569	30.5592	35.95218	0.273719
31	53.14465	31.17647	31.2057	28.47747	33.93393	-2.923354E-02
32	57.86164	29.70588	29.2488	26.47584	32.02176	0.4570828
33	59.43396	29.70588	28.84581	26.06691	31.62471	0.8600686
34	62.45283	29.41177	28.36928	25.59633	31.14223	1.042489
35	66.47799	28.52941	28.26572	25.5267	31.00475	0.2636867
36	73.92453	28.52941	29.31248	26.57718	32.04779	-0.7830742
37	81.16982	31.76471	30.7306	27.96259	33.49862	1.034105
38	78.59119	30.29412	30.34191	27.55837	33.12545	-4.778932E-02
39	77.01887	29.11765	30.00762	27.23381	32.78143	-0.8899736
40	75.44654	29.11765	29.65103	26.89622	32.40585	-0.5333864
41	69.09434	27.94118	28.47773	25.75909	31.19637	-0.5365493
42	71.71069	27.79412	28.87128	26.15429	31.58828	-1.077167
43	82.57861	31.76471	30.78054	28.0286	33.53248	0.9841667
44	83.78616	31.17647	30.67746	27.92962	33.4253	0.4990151
45	85.19497	30.29412	30.32524	27.55765	33.09282	-3.111753E-02
46	86.40252	29.26471	29.76715	26.96264	32.57165	-0.5024396
47	87.61006	27.79412	28.91596	26.07486	31.75706	-1.121842
48	89.22012	26.32353	27.23518	24.39041	30.07995	-0.9116499
49	91.03145	24.85294	24.48924	21.65272	27.32576	0.3637006
50	91.83648	23.38235	22.96273	20.02536	25.90011	0.4196216
51	92.64151	22.05882	21.2528	18.05387	24.45173	0.8060208



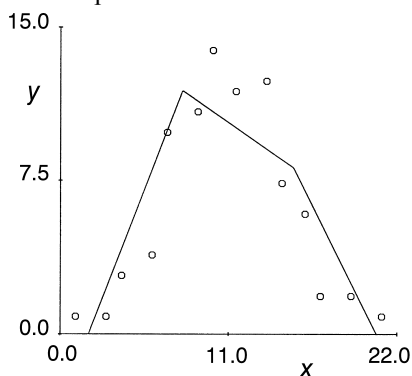
Obr. 9.15a Těsnost proložení experimentálních bodů modelem.

Obr. 9.15b $Q-Q$ graf reziduí.

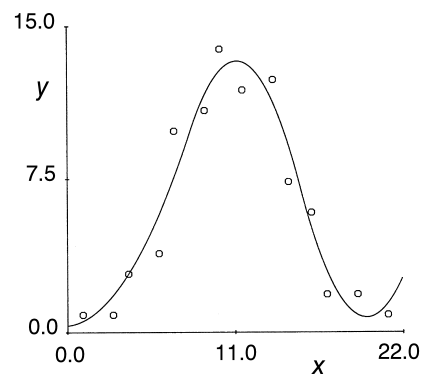
Závěr: Jelikož jsou pásy intervalu spolehlivosti predikce poměrně úzké a rovnoměrné, lze považovat nalezené odhady parametrů a regresní model za konečné.

Vzorová úloha 9.14 Aproximace píku

Aproximujte pik, zadaný diskrétními hodnotami, využitím lineární, kvadratické a kubické spline regrese pro případ, že v každém intervalu I_j má ležet pět bodů. Stanovte také plochu pod tímto pikem.



Obr. 9.17a Lineární spline aproximace.

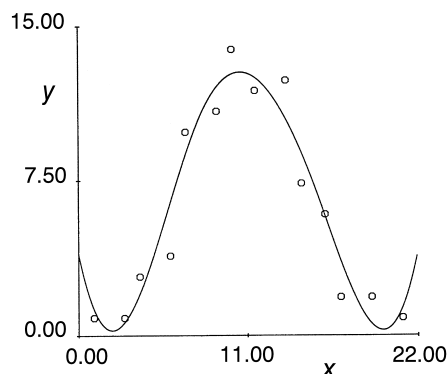


Obr. 9.17b Kvadratická spline aproximace.

Data: $n = 14$

x_i	1	3	4	6	7	9	10	11.5	13.5	14.5	16	17	19	21
y_i	1	1	3	4	10	11	14	12	12.5	7.5	6	2	2	1

Řešení: Výsledek C^0 -regrese s modelem ve tvaru lineárního spline je znázorněn na obr. 9.17a. Při znalosti koeficientů lineárního spline lze snadno analyticky určit integrál I od $x = 1$ do $x = 21$, $I = 130.269$. Výsledek C^1 -regrese s modelem ve tvaru kvadratického spline je znázorněn na obr. 9.17b. Stejným způsobem jako u lineárních spline byla určena plocha pod pikem $I = 126.068$. Na obr. 9.18 je znázorněn výsledek C^2 -regrese s modelem ve tvaru kubického spline. Plocha pod pikem je v tomto případě rovna $I = 111.43$.



Obr. 9.18 Kubická spline aproximace.

Závěr: I když není zvolené dělení ani počet uzlových bodů optimální, ukazuje tento příklad rozdíly mezi spline modely různých stupňů. Pro případ, kdy se požaduje určení derivace, je vhodné volit kvadratický či kubický model.

Vzorová úloha 9.15 Aplikace postupu úsekové polynomické regrese

Na datech úlohy S9.08 je třeba aproximovat body neasociativní závislosti a nalézt oba uzlové body zvratu u tří větví prokládané křivky typu lineární-lineární-lineární větve.

Data: použijeme data úlohy S9.08.

Řešení: Je uveden minimalizační proces postupného zjemňování odhadů neznámých parametrů a postupné snižování hodnoty minimalizované sumy čtverců reziduí U až k dosažení minima U_{\min} .

Průběh minimalizačního procesu sumy čtverců reziduí

Iterace	Suma čtverců				
	Reziduí	A	B	C	D
0	91978.17	13.73333	1.396706	0.0000	32.7044
1	128.7423	-22.38974	1.439365	-1.41563	32.7044
2	98.84669	-18.73867	1.417875	-1.451389	31.90939
3	97.88834	-18.97554	1.433407	-1.477436	31.87549
4	97.88829	-18.97609	1.43342	-1.477446	31.87606

Dosaženo konvergenčního kritéria.

Po dosažení minima sumy čtverců reziduí je tištěna tabulka nejlepších odhadů stanovovaných parametrů regresního modelu všech tří větví prokládané křivky a hodnoty bodů zvratu první a druhé větve a druhé a třetí větve křivky.

Odhady parametrů modelu

Parameter	Odhad parametru	Asympt. směr. odch.	Dolní mez 95% i. s.	Horní mez 95% i. s.
A	-18.97609	2.371069	-23.79468	-14.1575
B	1.43342	4.792372E-02	1.336028	1.530813
C	-1.477446	5.087956E-02	-1.580845	-1.374046
D	31.87606	0.5111715	30.83723	32.91488
E	1.428675	4.940346E-02	1.328275	1.529075
F	55.26949	0.4470693	54.36093	56.17804

Závisle proměnná:	y
Nezávisle proměnná:	x
Model:	$y = \text{Linear-Linear-Linear}(x)$
Koeficient determinace R^2:	0.975292
Rovnice modelu:	$-18.97609 + 1.43342 * x - 1.477446 * (x - 31.87606) * \text{SIGN}(x - 31.87606) + 1.428675 * (x - 55.26949) * \text{SIGN}(x - 55.26949)$
Odhadované parametry:	$y = a_1 + b_1 x$, když $x < \xi_1$, $y = a_2 + b_2 x$, když $\xi_1 < x \neq \xi_2$, $y = a_3 + b_3 x$, když $x > \xi_2$, kde $a_1 = 12.89089$, $a_2 = 107.0812$, $a_3 = -50.84307$, $b_1 = 1.482191$, $b_2 = -1.4727$, $b_3 = 1.384649$.
Hodnoty souřadnice x bodů zvratu:	$\xi_1 = 31.87606$ $\xi_2 = 55.26949$

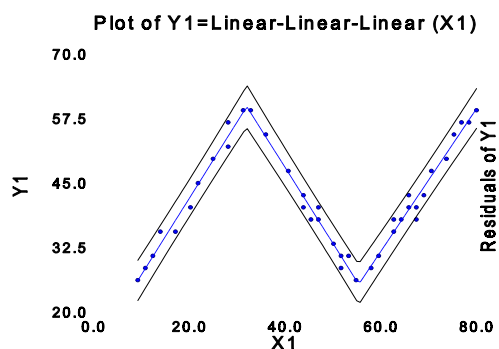
Dolní a horní mez 95% intervalu spolehlivosti odhadovaných parametrů byla vyčíslena dle vzorce pro velké výběry, platící pro více než 25 bodů. **Rovnice modelu** s odhady neznámých parametrů umožňuje predikovat závisle proměnnou y pro libovolné hodnoty nezávisle proměnné x . **Odhadované parametry** přináší rovnice přímek všech tří větví prokládané křivky a ukazuje na souřadnici x obou bodů zvratu $\xi_1 = 31.87606$ a $\xi_2 = 55.26949$.

Asymptotická korelační matice odhadů parametrů						
	A	B	C	D	E	F
A	1.000000	-0.859286	0.199576	0.127212	-0.628010	-0.671159
B	-0.859286	1.000000	-0.501307	-0.411324	0.453763	0.463477
C	0.199576	-0.501307	1.000000	-0.110813	-0.543587	0.394458
D	0.127212	-0.411324	-0.110813	1.000000	0.513127	-0.257576
E	-0.628010	0.453763	-0.543587	0.513127	1.000000	0.043351
F	-0.671159	0.463477	0.394458	-0.257576	0.043351	1.000000

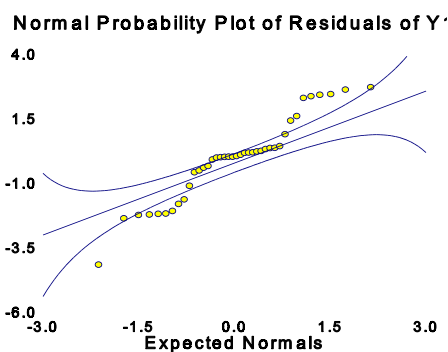
Jsou-li korelace vysoké, např. absolutní hodnota korelačního koeficientu je vyšší než 0.95, přesnost parametrů je podezřelá.

Predikované hodnoty a analýza reziduí						
Řádek	x	y	Predikovaná hodnota	Dolní mez 95 % i. s.	Horní mez 95 % i. s.	Reziduum
1	9.119497	26.47059	26.40772	22.50505	30.3104	6.286404E-02
2	10.69182	28.82353	28.73821	24.91603	32.5604	8.531865E-02
3	12.26415	31.17647	31.0687	27.31541	34.82199	0.1077657
4	13.83648	35.88235	33.39919	29.70256	37.09583	2.483162
5	16.98113	35.88235	38.06017	34.43795	41.6824	-2.177817
6	20.12579	40.58823	42.72115	39.11903	46.32327	-2.132915
7	21.69811	45.29412	45.05164	41.43882	48.66445	0.2424791
8	24.84277	50.0000	49.71262	46.03753	53.38771	0.2873817
9	27.98742	57.05882	54.3736	50.58421	58.16299	2.685227
10	27.98742	52.35294	54.3736	50.58421	58.16299	-2.020656
11	31.13208	59.41177	59.03458	55.08336	62.98579	0.3771898
12	32.7044	59.41177	58.91739	54.82736	63.00743	0.4943722
13	35.84906	54.70588	54.28626	50.40296	58.16956	0.4196204
14	40.56604	47.64706	47.33957	43.67289	51.00624	0.3074946
15	43.71069	42.94118	42.70843	39.11507	46.30179	0.2327485

16	43.71069	40.58823	42.70843	39.11507	46.30179	-2.120195
17	45.28302	38.23529	40.39286	36.81327	43.97246	-2.157569
18	46.85535	40.58823	38.0773	34.4959	41.65869	2.510936
19	46.85535	38.23529	38.0773	34.4959	41.65869	0.1579967
20	50.0000	33.52941	33.44617	29.81478	37.07755	0.0832449
21	51.57233	31.17647	31.1306	27.45165	34.80955	0.0458671
22	51.57233	28.82353	31.1306	27.45165	34.80955	-2.307069
23	53.14465	31.17647	28.81503	25.07418	32.55589	2.361433
24	54.71698	26.47059	26.49947	22.68307	30.31587	-2.888087E-02
25	57.86164	28.82353	29.27502	25.44972	33.10032	-0.4514848
26	59.43396	31.17647	31.45214	27.69921	35.20506	-0.2756702
27	62.57862	35.88235	35.80638	32.16622	39.44654	7.597418E-02
28	62.57862	38.23529	35.80638	32.16622	39.44654	2.428914
29	64.15094	38.23529	37.9835	34.38272	41.58427	0.2517979
30	65.72327	40.58823	40.16063	36.58738	43.73388	0.4276057
31	65.72327	42.94118	40.16063	36.58738	43.73388	2.780549
32	67.2956	40.58823	42.33775	38.77988	45.89562	-1.749516
33	67.2956	38.23529	42.33775	38.77988	45.89562	-4.102455
34	68.86793	42.94118	44.51487	40.96008	48.06966	-1.573693
35	70.44025	47.64706	46.69199	43.12796	50.25602	0.9550684
36	73.58491	50.0000	51.04623	47.42723	54.66524	-1.046234
37	75.15723	54.70588	53.22335	49.55917	56.88755	1.482527
38	76.72956	57.05882	55.40048	51.67984	59.12111	1.658346
39	78.30189	57.05882	57.5776	53.78976	61.36543	-0.5187755
40	79.87421	59.41177	59.75472	55.88948	63.61995	-0.3429533



Obr. 9.19a Proložení tří lineárních větví křivky úsekovou regresí a hledání 2 bodů zvratu.



Obr. 9.19b $Q-Q$ graf při analýze reziduí.

Závěr: Proložení tří lineárních větví nalezeným regresním modelem zadanými body je dostatečně těsné. Současně byly nalezeny i oba body zvratu ξ_1 a ξ_2 .

Vzorová úloha 9.16 Určení bodu ekvivalence u dvou větví titrační křivky

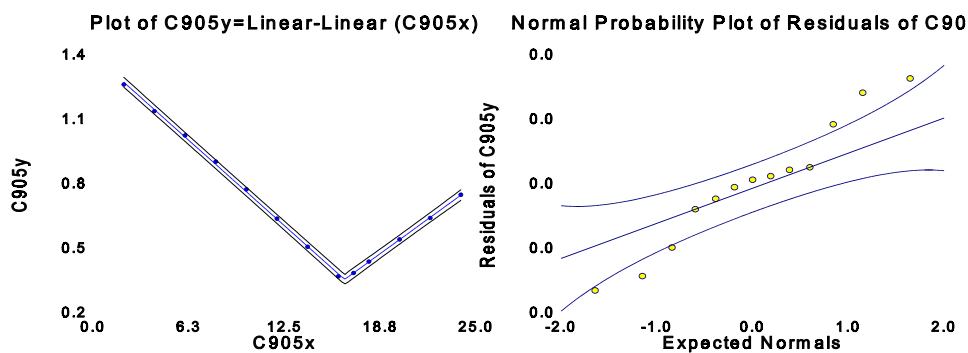
Na datech úlohy C9.05 je třeba určit bod ekvivalence, čili uzlový bod zvratu dvou větví titrační křivky v instrumentální analýze. Protože však okolí bodu ekvivalence může být i

nelineárního (zakřiveného) charakteru, je třeba vyšetřit, zda lze experimentálními body titrační závislosti aproximovat model s větvemi lineární-lineární, lineární-kvadratickou, kvadratickou-lineární a kvadratickou-kvadratickou. Titrační křivka se týká konduktometrické titrace 0.1 M kyseliny chlorovodíkové titrantem 0.1M hydroxidem sodným.

Data: použijeme data **úlohy C9.05**, kde x je objem přidávaného titračního činidla 0.1M NaOH a $y = (100 - a)/a$ a a je odečtená hodnota délky na odporovém můstku [mm].

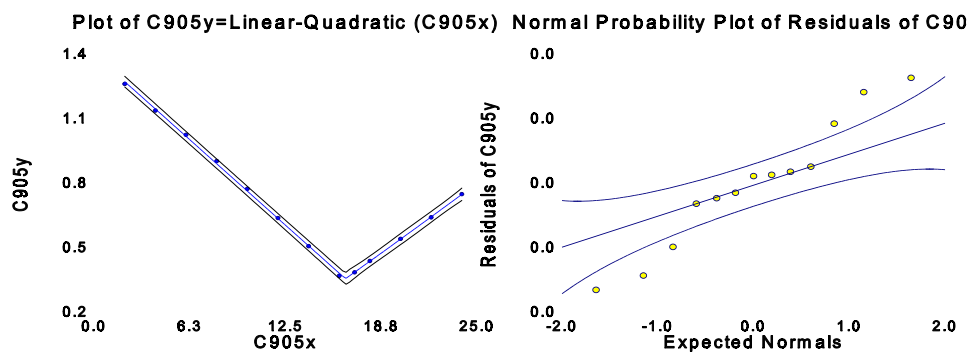
Řešení: Byly testovány čtyři regresní modely a výsledky přináší tabulka. Protože R^2 není dostatečné rozlišovací kritérium mezi testovanými modely, byla dána přednost grafické analýze klasických reziduí kvantil-kvantilovým $Q-Q$ grafem. Tento graf ověřuje normalitu reziduí, které je dosaženo jedině v případě správného regresního modelu.

Typ větví modelu regrese	Bod zvratu [ml]	Dolní mez 95% i. s. [ml]	Horní mez 95% i. s. [ml]	100 R^2	Model je
Lineární-lineární	16.414	16.239	16.588	99.935	Zamítnut
Lineární-kvadratická	16.402	16.152	16.652	99.935	Zamítnut
Kvadratická-lineární	16.285	16.214	16.355	99.993	Přijat
Kvadratická-kvadratická	16.273	16.174	16.371	99.993	Přijat



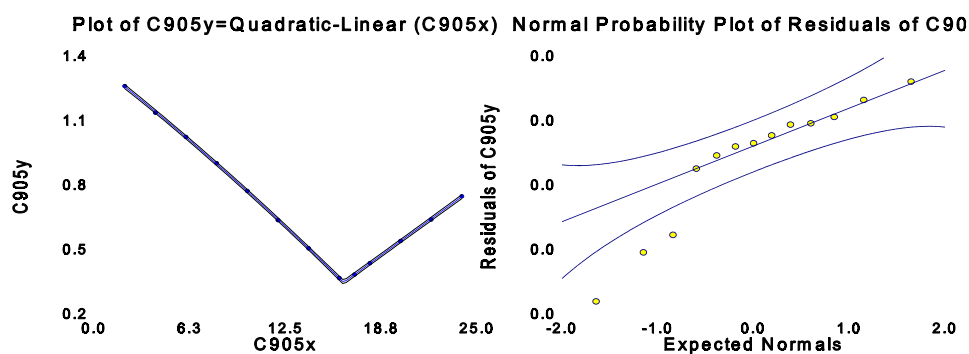
Obr. 9.20a Proložení dvou větví křivky úsekovou regresí typu lineární - lineární a hledání bodu zvratu.

Obr. 9.20b $Q-Q$ graf při analýze reziduí.



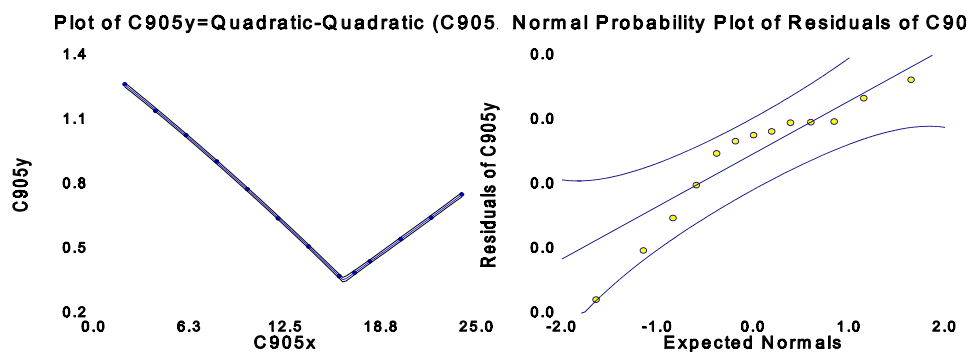
Obr. 9.21a Proložení dvou větví křivky úsekovou regresí typu lineární - kvadratická a hledání bodu zvratu.

Obr. 9.21b $Q-Q$ graf při analýze reziduí.



Obr. 9.22a Proložení dvou větví křivky úsekovou regresí typu kvadratická - lineární a hledání bodu zvratu.

Obr. 9.22b $Q-Q$ graf při analýze reziduí.



Obr. 9.23a Proložení dvou větví křivky úsekovou regresí typu kvadratická - kvadratická a hledání bodu zvratu.

Obr. 9.23b $Q-Q$ graf při analýze reziduí.

Závěr: Nejlepší regresní model je model s větvemi kvadratická-lineární s bodem ekvivalence (16.29 ± 0.07) ml.

Vzorová úloha 9.17 Vyhlazování píku algoritmem SPÄTH

Využitím Späthova algoritmu určete vyhlazující spline pro instrumentální data píku za

předpokladu, že:

a) váhy $\beta_i = 1, i = 1, \dots, n$.

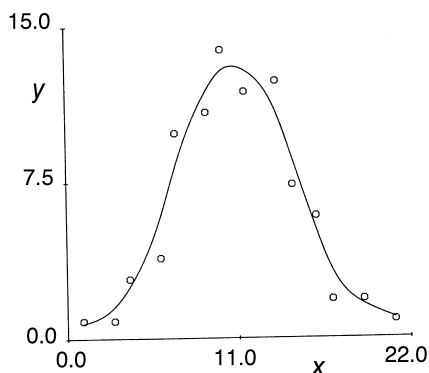
b) váhy $\beta_7 = \beta_9 = 100$ a ostatní $\beta_i = 1$, tj. případ, kdy má vyhlazující funkce procházet body č. 7 a č. 9.

Data: jsou uvedena v následující tabulce $\{x, y\}$.

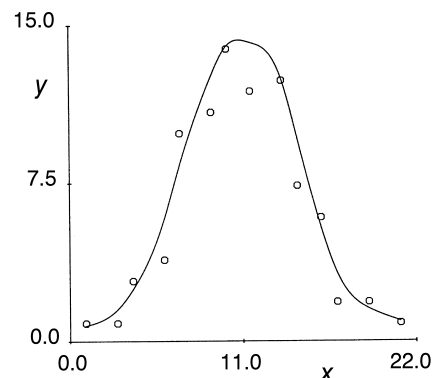
Řešení: Vyhlazující spline pro případ (a) je spolu s experimentálními body znázorněn na obr. 9.24 a pro případ (b) na obr. 9.25. V tabulce jsou uvedeny hodnoty vyhlazené funkce, první a druhé derivace a integrálu v jednotlivých bodech pro případ (a).

Vyhlazení derivace a integrál v zadaných bodech, kde $I(x_i) = \int_a^{x_i} g(x) dx$

x_i	y_i	$g(x_i)$	$g^{(1)}(x_i)$	$g^{(2)}(x_i)$	$I(x_i)$
1	1	0.729	0.210	0	0
3	1	1.511	0.753	0.543	2.058
4	3	2.496	1.176	0.304	4.026
6	4	5.809	2.314	0.834	11.951
7	10	8.282	2.375	-0.710	18.991
9	11	11.845	1.304	-0.361	39.475
10	14	12.857	0.608	-1.081	51.884
11.5	12	12.875	-0.407	-0.323	71.374
13.5	12.5	10.877	-1.36	-1.129	95.61
14.5	7.5	8.656	-2.379	0.091	105.42
16	6	5.226	-2.17	0.187	115.79
17	2	3.289	-1.564	1.025	120.0
19	2	1.61	-0.417	0.122	124.51
21	1	0.939	-0.295	0	127.024



Obr. 9.24 Kubický vyhlazovací spline
($\beta_i = 1, i = 1, \dots, n$).



Obr. 9.25 Kubický vyhlazovací spline
($\beta_7 = \beta_9 = 100; \beta_i = 1$ jinde).

Závěr: Volbou parametrů β_i lze měnit jak globální, tak i lokální vyhlazení dle předběžných znalostí o vyhlazované závislosti.

Vzorová úloha 9.18 Vyhlazování piků algoritmem REINSCH

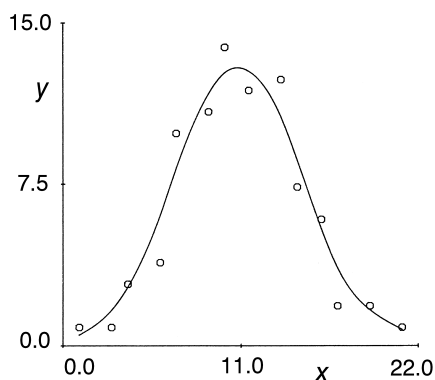
Využitím Reinschova algoritmu určete vyhlazující spline pro data uvedená ve vzorové úloze 9.17. Vypočítejte i hodnoty prvních dvou derivací a integrálu ve všech bodech x_i .

Data: jsou uvedena v následující tabulce $\{x, y\}$.

Řešení: Na základě předběžných experimentů bylo zvoleno $S = 18.72$. Výsledný vyhlazující spline je spolu s experimentálními body znázorněn na obr. 9.26. V tabulce jsou uvedeny hodnoty vyhlazené funkce, prvních dvou derivací a integrálu.

Vyhazení, derivace a integrál v zadaných bodech, kde $I(x_i) = \int_a^{x_i} g(x) dx$

x_i	y_i	$g(x_i)$	$g'(x_i)$	$g''(x_i)$	$I(x_i)$
1	1	0.505	0.43	0.0	0
3	1	1.653	0.862	0.432	2.014
4	3	2.72	1.26	0.363	4.168
6	4	6.088	2.093	0.47	12.648
7	10	8.226	2.144	-0.368	19.775
9	11	11.697	1.285	-0.492	39.985
10	14	12.675	0.61	-0.859	52.228
11.5	12	12.743	-0.439	-0.54	71.488
13.5	12.5	10.634	-1.745	-0.765	95.30
14.5	7.5	8.623	-2.159	-0.062	104.96
16	6	6.435	-2.159	0.256	115.479
17	2	3.526	-1.527	0.716	119.969
19	2	1.669	-0.598	0.213	124.954
21	1	0.756	-0.385	0.0	127.308



Obr. 9.26 Kubický vyhlazující spline $S = 18.72$.

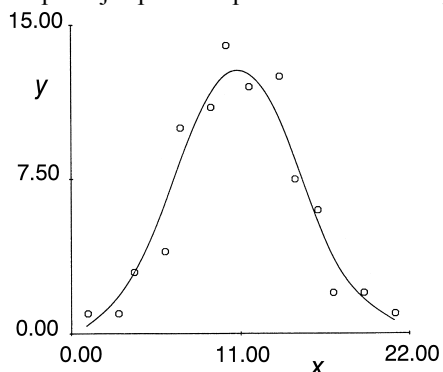
Závěr: Při znalosti reziduálního rozptylu, odpovídajícího rozptylu chyb σ^2 , lze volit $S = \sigma^2(n - 1)$. Jinak lze použitím Reinschova algoritmu dojít téměř ke stejným výsledkům jako Späthovým algoritmem.

Vzorová úloha 9.19 Optimální vyhlazení piku

Nalezněte optimální parametr vyhlazení pro data ze vzorové úlohy 9.17 při užití Silvermanova postupu.

Řešení: Bylo určeno $c_0 = 1.5 \cdot 10^5$. Při použití Späthova algoritmu bylo voleno $w_i = 1$, takže $\beta_i = 1/\alpha$. Pro určení optimálního parametru vyhlazení α byla volena metoda půlení intervalu pro logaritmické dělení $\ln \alpha$. Vyšlo $\alpha = 3.3446$, tj. $\beta_i = 0.2988$, $i = 1, \dots, n$. Průběh

optimálního vyhlazujícího spline je spolu s experimentálními body zobrazen na obr. 9.27.



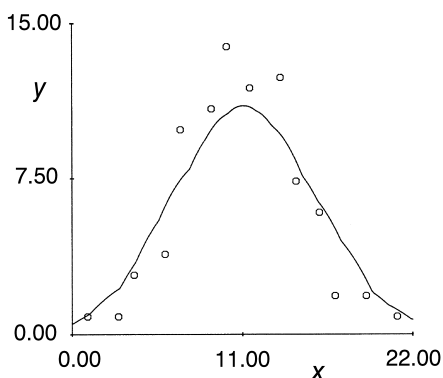
Obr. 9.27 Optimální vyhlazující spline.

Závěr: Aproximativní Silvermanův postup poskytuje při své jednoduchosti v praxi použitelné výsledky a je vhodný pro automatizovaný výběr vhodného parametru vyhlazení s využitím počítače.

Vzorová úloha 9.20 *Neparametrická regrese píku*

Nalezněte neparametrický regresní model $p(x)$ pro data ze vzorové úlohy 9.17 při využití rovnice modifikovaného vyhlazujícího neparametrického regresního modelu.

Řešení: Na obr. 9.28 je znázorněna modifikovaná neparametrická regrese pro $\delta = 5.9$, které bylo určeno na základě vizuálního porovnání výsledků pro několik hodnot δ .



Obr. 9.28 Neparametrická regrese.

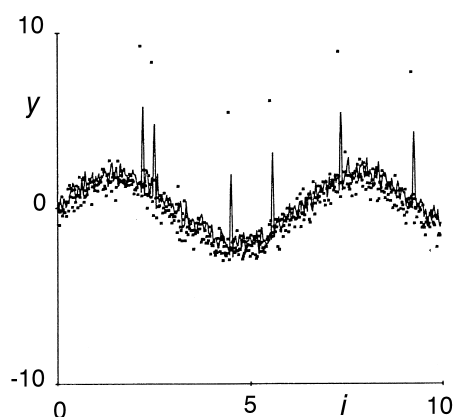
Závěr: Také jednoduchý model neparametrické regrese umožňuje numerické vyhlazení, jež vyhovuje praktickým potřebám.

Vzorová úloha 9.21 *Porovnání vlastností lineárních a nelineárních filtrů*

Na sinusoidálních datech, zatížených jak náhodnými normálně rozdělenými chybami, tak i hrubými chybami, ověřte vlastnosti Hippeho filtru, dále filtru 53H a filtru 3T.

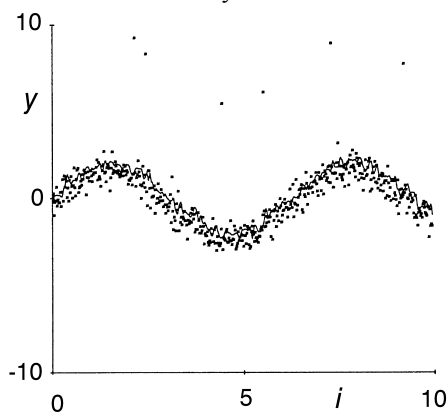
Data: $n = 50$. Pro stoupající hodnoty i byly generovány hodnoty závisle proměnné y_i dle

vzorce $y_i = 2 \sin(i) + 0.5 N(0, 1) + \delta R_i$, kde $N(0, 1)$ jsou náhodné veličiny s normálním rozdělením, nulovou střední hodnotou a jednotkovým rozptylem. R_i je náhodná veličina nabývající hodnot 0 a 1 v závislosti na hodnotách generátoru pseudonáhodných čísel a $\delta = 7.5$.

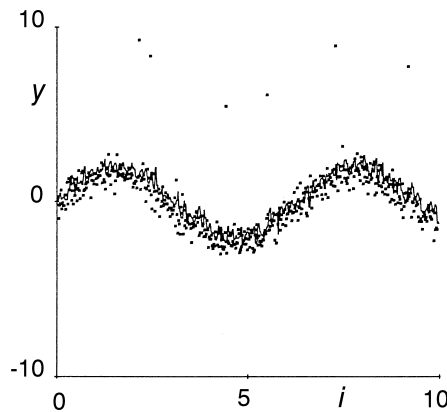


Obr. 9.29 Vyhazení pomocí Hippého filtru.

Řešení: Výsledky vyhlazení jsou uvedeny na obrázcích 9.29, 9.30 a 9.31. Pro ilustraci jsou hodnoty Z_i spojeny lineárními úseky. Obr. 9.29 ukazuje vyhlazení pomocí Hippého filtru. Je patrné, že hrubé chyby způsobují značné překmitávání a ani vyhlazení pro gaussovské chyby není příliš dokonalé. Obr. 9.30 ukazuje vyhlazení pomocí nelineárního filtru 53H. Je patrná necitlivost na přítomnost hrubých chyb. Obr. 9.31 ukazuje vyhlazení pomocí nelineárního filtru 3T. Také zde neovlivňují hrubé chyby proces filtrace. Vznikají však lokální lineární úseky.



Obr. 9.30 Výsledek vyhlazení filtrem 53H.

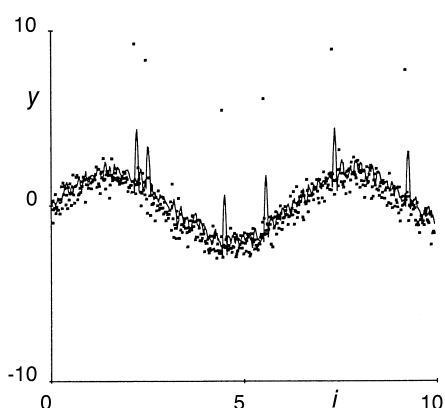


Obr. 9.31 Výsledek vyhlazení filtrem 3T.

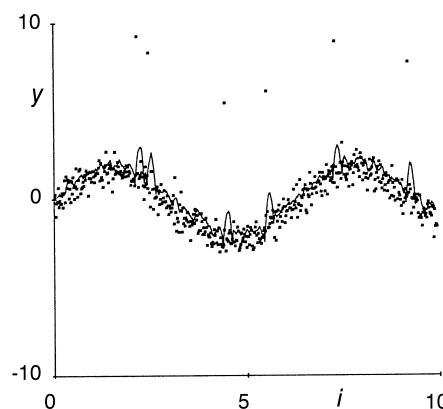
Závěr: Lineární filtry jsou obecně nerobustní. Z nelineárních se jako nejvhodnější jeví filtr 53H, který lze jednoduše zařadit do programů pro předzpracování analytických signálů, pokud lze očekávat výskyt hrubých chyb.

Vzorová úloha 9.22 *Vliv délky regresního filtru na vyhlazující vlastnosti* Pro data generovaná ve vzorové úloze 9.21 sestrojte číselný kvadratický filtr ($d = 2$) o délce $F = 2N + 1 = 7$ a také o délce $F = 13$.

Řešení: Výsledek vyhlazení pro $F = 7$ je znázorněn plnou čarou na obr. 9.34, jež vznikla spojením vyhlazených hodnot lineárními úseky.



Obr. 9.34 Vyhlazení kvadratickým regresním filtrem délky $N = 7$.



Obr. 9.35 Vyhlazení kvadratickým regresním filtrem délky $N = 13$.

Vyhlazení pro $F = 13$ je znázorněno na obr. 9.35.

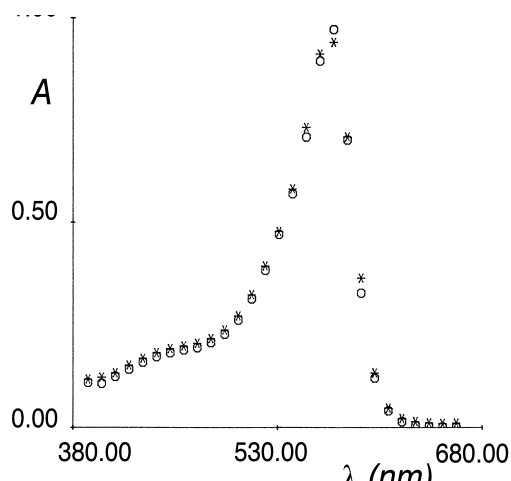
Závěr: S růstem délky filtru dochází k omezení vlivu hrubých chyb. Na druhé straně však při nadměrném růstu N roste nebezpečné "převyhlazení", vedoucí až k odstranění i nenáhodné lokální změny tvaru.

Vzorová úloha 9.23 *Filtrace absorpčního spektra fenolové červeně*

Bylo proměřeno spektrum fenolové červeně při $\text{pH} = 8.1$ v rozsahu vlnových délek 390 až 660 nm s intervalem 10nm. Proved'te vyhlazení pomocí klouzavých parabol.

Data: hodnoty absorpance začínají od 390 nm: 0.1114, 0.1091, 0.1259, 0.1438, 0.1606, 0.1742, 0.1837, 0.1906, 0.1959, 0.2083, 0.2284, 0.2632, 0.3149, 0.3845, 0.4723, 0.5717, 0.7103, 0.8960, 0.9735, 0.7030, 0.3291, 0.1224, 0.0424, 0.0159, 0.0069, 0.0037, 0.0025, 0.0020.

Řešení: Na obr. 9.36 je původní naměřené spektrum. Pro $SMP = 7$ je $F = 5$ a $N = 2$. Vyhlazené hodnoty jsou na obrázku znázorněny hvězdičkami.



Obr. 9.36 Vyhlazení bodů spektra (kolečka) pomocí klouzavých parabol $N = 2$ (hvězdičky).

Závěr: Kvalita vyhlazení závisí na volbě délky $(2N+1)$.

Vzorová úloha 9.24 Výpočet hustoty kyseliny fosforečné

Pro laboratorní výpočet je třeba znát hustotu 68%ní kyseliny fosforečné. V tabulkách jsou však uvedeny hustoty s intervalem 5 hm. %. Určete požadovaný údaj využitím spline interpolace.

Data: V rozmezí 60 až 80 hm. % byly z tabulek odečteny následující hodnoty

c [hm. %]	60	65	70	75	80
$h \cdot 10^3$ [kg m ⁻³]	1.426	1.475	1.526	1.579	1.633

Řešení: Programem Spline byla určena hustota 68%ní H_3PO_4 rovna 1505 kg. m⁻³.

Závěr: Program SPLINE lze použít nejenom pro znázornění grafu interpolující funkce, výpočet derivací, resp. integrálu, ale také pro interpolaci v tabulkách.

Vzorová úloha 9.25 Určení chybějící hodnoty v infračerveném spektru

Při měření infračerveného spektra methylsulfonylchloridu došlo k výpadku registračního zařízení tiskárny a nebyla zaznamenána hodnota pro vlnočet $\hat{\nu} = 1165 \text{ cm}^{-1}$. Určete chybějící hodnotu.

Data: $n = 10$

$\hat{\nu}$ [cm ⁻¹]	1160	1161	1162	1163	1164	1166	1167	1168	1169	1170
A	0.0466	0.0539	0.0631	0.0744	0.0883	0.1254	.1482	0.17112	0.1907	0.2023

Řešení: Protože lze očekávat, že naměřené hodnoty absorbance nebudou zcela přesné, byl použit program pro spline regresi, využívající parabolických spline. Stupeň blízkosti modelu k experimentálním bodům se řídí výběrem uzlových bodů. Byla zvolena strategie automatického vkládání uzlů tak, aby mezi nimi byly stejné vzdálenosti (tzv. konstantní uzlové intervaly).

Vliv počtu uzlů kvadratické spline regrese na hodnotu absorbance při vlnočtu $\hat{\nu} = 1165 \text{ cm}^{-1}$

Počet uzlů	2	3	4	5	6	7	8
A pro $\hat{v}=1165$	0.10462	0.10555	0.10507	0.105288	0.105201	0.105271	0.105264

Závěr: Z tabulky je patrné, že s růstem počtu uzlů se stabilizuje hodnota absorbance. Výhodou spline regrese je její flexibilita, což umožňuje použití i pro komplikované nelineární závislosti.