

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Karel Segeth

Od naměřených dat k jejich matematickému popisu pomocí funkce - a zase zpátky

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 60 (2015), No. 2, 133–147

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/144407>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 2015

Institute of Mathematics of the Czech Academy of Sciences provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This document has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://dml.cz>

Od naměřených dat k jejich matematickému popisu pomocí funkce – a zase zpátky

Karel Segeth, Praha

1. Úvod

Měření dat, jejich zpracování, pochopení a interpretace je základní badatelský proces ve fyzice a mnoha přírodních i společenských vědách. Data se obvykle měří v závislosti na čase nebo prostorových proměnných, ale jen v konečném počtu uzlů měření. Vždy proto byla důležitá úloha nahradit naměřená data funkčním předpisem, tj. analytickým vzorečkem. Smyslem té náhrady nemusí být jen rychlý výpočet přibližných hodnot měřené veličiny v jiných bodech, než jsou samotné uzly. Výpočet derivace naměřených dat nebo integrálu z nich je rovněž úloha v praxi častá. Derivace umožňuje hledání míst růstu nebo poklesu dat, integrál výpočet plochy mezi osou nezávisle proměnné a grafem naměřených dat. Další důležitá úloha může být stanovení nulových bodů (kořenů) z dat. Při řízení procesů je tyto úlohy často třeba řešit v reálném čase.

Interpolaci v nějaké podobě používaly starověké civilizace již v době před naším letopočtem. První interpolovaná data byly astronomické údaje. Velký rozmach zažila interpolace a aproximace dat v druhé polovině minulého století v souvislosti s rozvojem počítačů.

Ve výkladu se od naměřených dat dostaneme k jejich analytickému vyjádření několika nejčastějšími způsoby interpolace nebo aproximace s ohlazením (vyrovnáním). Autor vybíral způsoby, které se mu zdály důležité nebo zajímavé. Zmíníme se o některých speciálních interpolačních metodách používaných ve zvláštních případech a na cestě zpátky naznačíme základní způsoby, jak získat derivaci dat a integrál z nich. Celý postup přehledně vyložíme na jednorozměrném příkladu naměřených meteorologických teplotních dat a znázorníme pomocí grafů interpolant a aproximant.

2. Měření dat

Výsledkem měření (vzorkování) je vždy konečný počet N hodnot měřené veličiny. Přitom si musíme být vědomi, že při každém měření se dopouštíme různých chyb a nepřesností. Hodnoty dat měříme zpravidla v závislosti na čase nebo prostoru. V dalším se omezíme na data měřená v čase nebo na přímce (jednorozměrná data). Body, ve kterých měříme, nazývané *uzly*, označíme t_j , $j = 1, \dots, N$, naměřené hodnoty f_j , $j = 1, \dots, N$, a budeme předpokládat, že to jsou vzorky hladké funkce f . Dále budeme požadovat, aby $t_j < t_{j+1}$ pro $j = 1, \dots, N - 1$. Pro existenci interpolace,

Prof. RNDr. KAREL SEGETH, CSc., Matematický ústav AV ČR, v. v. i., Žitná 25, 115 67 Praha 1, e-mail: segeth@math.cas.cz

jak ji zavedeme, je to nutná podmínka. Obecně označíme $h_{j+1} = t_{j+1} - t_j$. V některých případech se omezíme na *ekvidistantní uzly*, tj. uzly, pro které platí $t_{j+1} - t_j = h$, kde h je konstanta.

3. Základní úlohy interpolace a aproximace

Pokusíme se doplnit vhodným způsobem hodnoty mezi uzly, ve kterých jsou data naměřena, tak, aby výsledný graf byla spojitá funkce. Zavedeme definice dvou úloh, *interpolace* a *aproximace*.

Základní úloha interpolace. Sestrojme v definičním oboru $[t_1, t_N]$ spojitou funkci F (*interpolantu dat*) takovou, že splňuje *podmínky interpolace*

$$F(t_j) = f_j \text{ pro } j = 1, \dots, N. \quad (1)$$

Je patrné, že úloha interpolace nemá jediné řešení. Jednotlivá řešení se vzájemně mohou lišit např. svou hladkostí a plynulostí, tedy subjektivním dojmem, jakým jejich graf působí [10]. Jakmile ovšem zvolíme vhodnou třídu funkcí, ve které budeme interpolantu hledat (třeba polynomy stupně nejvýše $N - 1$), má úloha interpolace jediné řešení. Podrobněji o existenci a jednoznačnosti řešení úlohy interpolace viz např. [10].

Nalezení interpolanty většinou spočívá v řešení soustavy lineárních algebraických rovnic, přičemž čím více je naměřených dat, tím větší soustavu je třeba řešit. Často však existují možnosti, jak se řešení soustavy vyhnout. V době před masovým užitím počítačů to byly možnosti velmi významné. Jestliže používáme nalezenou interpolantu mimo interval $[t_1, t_N]$, hovoříme zpravidla o *extrapolaci*.

Základní úloha aproximace. Jiná důležitá úloha je najít hladkou funkci G (*aproximantu dat*), která *nesplňuje* podmínky interpolace (1) přesně, ale o to méně osciluje, o to je plynulejší. To je *úloha aproximace, ohlazení* nebo *vyrovnání dat*. Součástí konstrukce aproximanty je většinou minimalizace vhodného funkcionálu.

Příklad 1. Téměř v celém textu budeme pro konstrukci různých interpolant a aproximant používat následující naměřené denní hodnoty teploty vzduchu. Hodnoty byly měřeny automaticky od půlnoci do půlnoci s intervalem měření $h = 3$ hodiny, tedy v ekvidistantních uzlech.

t (h)	0,0	3,0	6,0	9,0	12,0	15,0	18,0	21,0	24,0
f (°C)	3,0	1,4	1,0	5,6	9,3	12,7	10,0	8,2	3,2

Tab. 1. Naměřené hodnoty teploty vzduchu

4. Příklady několika základních způsobů interpolace

4.1. Po částech lineární interpolanta

První nápad, jak interpolovat data z příkladu 1, je prostý. Vyneseme naměřená data do grafu a bod po bodu je spojíme tužkou podle pravítka úsečkami. Dostaneme tak *po částech lineární interpolantu* (čárkovaná čára na obr. 1). Tato křivka splňuje zadání základní úlohy interpolace, je spojitá a vyhovuje podmínkám (1). Její nevýhoda však spočívá v tom, že se v uzlech interpolace lomí, nemá v nich derivaci (tečnu), a není

tedy hladká. Analytické vyjádření po částech lineární interpolanty se konstruuje pro každý interval $[t_j, t_{j+1}]$ zvlášť. Je to na každém intervalu mnohočlen prvního stupně, tj. hledáme postupně pro $j = 1, \dots, N - 1$ rovnice přímek

$$F_j(t) = a_j + b_j t,$$

které procházejí dvěma body $[t_j, f_j]$ a $[t_{j+1}, f_{j+1}]$ v rovině. Snadno se ukáže, že

$$a_j = f_j - \frac{f_{j+1} - f_j}{h_{j+1}} t_j, \quad b_j = \frac{f_{j+1} - f_j}{h_{j+1}} \quad \text{pro } t \in [t_j, t_{j+1}], \quad j = 1, \dots, N - 1.$$

4.2. Mnohočlen stupně $N - 1$

Zkusme interpolovat jedním mnohočlenem na celém intervalu $[t_1, t_N]$. Takovou interpolaci lze provést *mnohočlenem stupně $N - 1$* . Interpolanta

$$F(t) = \sum_{k=1}^N a_k t^{k-1}$$

má totiž N koeficientů a_k , $k = 1, \dots, N$, které se určí z N interpolačních podmínek (1), a má derivace všech řádů na $[t_1, t_N]$. Dá se ukázat, že soustava

$$F(t_j) = \sum_{k=1}^N a_k t_j^{k-1} = f_j, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2)$$

pro neznámé a_k , $k = 1, \dots, N$, má za našeho předpokladu, že uzly jsou navzájem různé, jediné řešení. V našem případě je $N = 9$ a interpolanta bude mnohočlen stupně 8, tečkovaná čára v grafu na obr. 1.

Protože interpolace mnohočlenem se používala dávno před vynálezem počítače, existují algoritmy, které vedou k určení koeficientů a_k , aniž by bylo třeba řešit soustavu (2). Příkladem je třeba *Lagrangeův interpolační vzorec* [11].

Interpolace mnohočlenem může dát pro velké N (tedy pro rozsáhlou množinu dat) velmi neuspokojivé výsledky, protože mnohočleny vysokých stupňů výrazně oscilují.

Interpolace mnohočlenem může být efektivní a numericky stabilní pouze v případě, kdy pro výpočet hodnoty mnohočlenu argumentu τ použijeme tzv. *Hornerovo schéma* (*Hornerův algoritmus*). Jeho princip ukážeme na jednoduchém příkladu. Mějme mnohočlen třetího stupně

$$F(t) = a_1 + a_2 t + a_3 t^2 + a_4 t^3.$$

První nápad, jak spočítat $F(\tau)$, samozřejmě je napřed vyčíslit τ^2 a τ^3 a pak $F(\tau)$ jako lineární kombinaci koeficientů mnohočlenu a mocnin τ . To je způsob často velmi nevhodný, zejména pak v případě, kdy jednotlivé sčítance mají různá znaménka. Vzhledem k zaokrouhlovacím chybám může být výsledek velmi nepřesný.

Hornerovo schéma spočívá ve vhodném rozmístění závorek ve výrazu, tedy ve vhodném uspořádání výpočtu. V našem příkladu ho zapíšeme jako

$$F(\tau) = a_1 + \tau \cdot (a_2 + \tau \cdot (a_3 + \tau \cdot a_4)).$$

4.3. Speciální případ z teorie hladké interpolace

Základy celé teorie i praxe tohoto způsobu interpolace i aproximace jsou položeny v [8]. V dalším textu uvedeme jen jednoduchý, ale typický speciální případ. Zvolíme lineál komplexních funkcí $L(t_1, t_N)$, v němž budeme hledat interpolantu. O funkcích $g \in L$ budeme předpokládat, že jsou spojité spolu se svými derivacemi všech řádů. Lineál L nejsnáze určíme tak, že stanovíme jeho úplnou ortonormální, obecně spočetnou bázi $g_k \in L, k = 1, 2, \dots$. Úplnost a ortonormalitu báze budeme posuzovat prostřednictvím skalárního součinu

$$(g, h) = \sum_{l=0}^{\infty} B_l \int_{t_1}^{t_N} [g^{(l)}(t)]^* h^{(l)}(t) dt, \quad g, h \in L, \quad (3)$$

kde g^* značí funkci komplexně sdruženou k funkci g , $B_0 > 0$ a $B_l, l = 1, 2, \dots$, jsou vhodně zvolená nezáporná čísla. Budeme předpokládat, že hodnota výrazu (g, g) existuje pro každou funkci $g \in L$.

Řekneme, že

$$F(t) = \sum_{k=1}^{\infty} A_k g_k(t), \quad (4)$$

kde A_k jsou komplexní koeficienty, je *hladká interpolanta*, jestliže splňuje podmínky interpolace (1) a minimalizuje funkcionál

$$\Psi(u) = \sum_{l=0}^{\infty} B_l \int_{t_1}^{t_N} |u^{(l)}|^2 dt = \|u\|^2. \quad (5)$$

Vyjádření (4) pro hladkou interpolantu je nutné pro teoretické odvození, ale nevhodné pro praktické počítání už jen proto, že sčítanců je nekonečně mnoho. Označme

$$R(t, v) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{g_k(t) g_k^*(v)}{\|g_k\|^2} \quad (6)$$

a předpokládejme, že řada (6) konverguje. Určení hladké interpolanty se standardními prostředky převede na řešení soustavy N lineárních algebraických rovnic

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j R(t_i, t_j) = f_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (7)$$

pro neznámé koeficienty $\lambda_j, j = 1, \dots, N$, a hladká interpolanta bude tvaru

$$F(t) = \sum_{j=1}^N \lambda_j R(t, t_j). \quad (8)$$

Omezíme se na $N = 9$ a data z příkladu 1. V definici (3) skalárního součinu položíme $B_l = (\frac{1}{3})^{2l} / (2l)!, l = 0, 1, \dots$. Za úplnou ortonormální bázi lineálu L vezmeme 2π -periodické komplexní funkce

$$g_k(t) = \exp(ikt), \quad k = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, \quad (9)$$

přičemž nejprve provedeme limitní přechod krajních bodů intervalu $[0, 2\pi]$ do $-\infty$ a $+\infty$ stejným způsobem, jakým se přechází od Fourierovy řady periodické funkce k Fourierově transformaci neperiodické funkce [7]. Přitom definice (6) funkce R pomocí nekonečné řady přejde v definici

$$R(t, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik(t-v))}{\|g_k\|^2} dk$$

prostřednictvím integrálu přes k . Výsledek je Fourierova transformace funkce $\|g_k\|^{-2}$ reálné proměnné k . Tento integrál se dá vyčíslit analyticky, vyjde

$$R(t, v) = \frac{1}{\frac{2}{3} \cosh(\frac{3}{2}\pi|t-v|)}.$$

Funkci R transformujeme na interval $[0, 24]$, vyřešíme pozitivně definitní soustavu (7), která má 9 rovnic pro 9 neznámých λ_j , $j = 1, \dots, 9$, a dostaneme hladkou interpolantu (8) s $N = 9$, znázorněnou v grafu na obr. 1 čerchovaně.

Připomeňme, že jsme zde všechny váhy B_l , $l = 0, 1, \dots$, zvolili kladné, takže minimalizace funkcionálu Ψ představuje podle (5) minimalizaci integrálů (opatřených rychle klesajícími vahami B_l) z kvadrátu derivací všech řádů.

Ukazuje se, že některé způsoby interpolace se dají interpretovat jako konkrétní případy hladké interpolace se speciální volbou posloupnosti B_l (srov. např. následující odstavec).

4.4. Kubický splajn

Zavedeme velmi hladkou a plynulou interpolantu (plná čára na obr. 1), která je známa jako *kubický splajn* (spline). Můžeme ji užívat pro posouzení kvality ostatních interpolant. Na každém intervalu $[t_j, t_{j+1}]$ se dá lokálně napsat ve tvaru mnohočlenu F třetího stupně. Budeme požadovat splnění podmínek interpolace (1) a dále spojitost F , její první derivace F' i druhé derivace F'' na celém intervalu $[t_1, t_N]$, tedy i v uzlech měření.

Konstrukce je popsána např. v [3], kde je také dokázána existence a jednoznačnost výsledku. Z právě uvedených podmínek plyne, že F'' je spojitá lineární funkce. Na každém intervalu $[t_j, t_{j+1}]$ ji budeme psát ve tvaru

$$F''(t) = m_j \frac{t_{j+1} - t}{h_{j+1}} + m_{j+1} \frac{t - t_j}{h_{j+1}}, \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (10)$$

kde $m_j = F''(t_j)$. Obě strany rovnosti (10) dvakrát zintegrujeme podle t a dostaneme

$$F(t) = m_j \frac{(t_{j+1} - t)^3}{6h_{j+1}} + m_{j+1} \frac{(t - t_j)^3}{6h_{j+1}} + C_{j+1} \frac{t_{j+1} - t}{h_{j+1}} + D_{j+1} \frac{t - t_j}{h_{j+1}} \quad (11)$$

pro $j = 1, \dots, N-1$, kde C_{j+1} a D_{j+1} jsou integrační konstanty vyjádřené způsobem, který se nám bude v dalším postupu hodit. Určíme je z podmínky interpolace (1), když do (11) postupně na každém intervalu $[t_j, t_{j+1}]$ dosadíme $t = t_j$ a $t = t_{j+1}$. Obdržíme

$$\frac{1}{6}m_j h_{j+1}^2 + C_{j+1} = f_j, \quad \frac{1}{6}m_{j+1} h_{j+1}^2 + D_{j+1} = f_{j+1}, \quad j = 1, \dots, N-1.$$

Podle (11) tedy bude

$$F(t) = m_j \frac{(t_{j+1} - t)^3}{6h_{j+1}} + m_{j+1} \frac{(t - t_j)^3}{6h_{j+1}} + \left(f_j - \frac{m_j h_{j+1}^2}{6} \right) \frac{t_{j+1} - t}{h_{j+1}} + \left(f_{j+1} - \frac{m_{j+1} h_{j+1}^2}{6} \right) \frac{t - t_j}{h_{j+1}} \quad (12)$$

pro $j = 1, \dots, N - 1$, kde neznámé už jsou jen veličiny m_j , $j = 1, \dots, N$.

Zderivujeme výraz (12) a určíme limity funkce F' v bodech t_2, \dots, t_{N-1} zprava a zleva. Dostaneme

$$F'(t_j - 0) = \frac{h_j}{6} m_{j-1} + \frac{h_j}{3} m_j + \frac{f_j - f_{j-1}}{h_j}, \quad (13)$$

$$F'(t_j + 0) = -\frac{h_{j+1}}{3} m_j - \frac{h_{j+1}}{6} m_{j+1} + \frac{f_{j+1} - f_j}{h_{j+1}}. \quad (14)$$

Protože předpokládáme spojitost derivace interpolanty v uzlech t_2, \dots, t_{N-1} , budeme požadovat, aby se (13) rovnalo (14), tj.

$$\frac{h_j}{6} m_{j-1} + \frac{h_j + h_{j+1}}{3} m_j + \frac{h_{j+1}}{6} m_{j+1} = \frac{f_{j+1} - f_j}{h_{j+1}} - \frac{f_j - f_{j-1}}{h_j} \quad (15)$$

pro $j = 2, \dots, N - 1$. To je $N - 2$ rovnic pro N neznámých m_j , $j = 1, \dots, N$. Snadno se ukáže, že po přidání rovnic

$$m_1 = 0, \quad m_N = 0 \quad (16)$$

je soustava (15), (16) třídiagonální, symetrická a pozitivně definitní, takže má jediné řešení. Použijeme-li pro řešení třídiagonální soustavy $Am = b$ Gaussovu eliminaci a provedeme jen ty operace, které mají nenulové operandy, dostaneme řešení algoritmem, který vyžaduje řádově pouze N operací, zatímco Gaussova eliminace pro obecnou soustavu potřebuje řádově N^3 operací. Algoritmus, který spočítá N hodnot výstupních dat pomocí řádově N operací se vstupními daty, se nazývá *rychlý*.

Popsaný postup je tedy rychlý algoritmus a je ekvivalentní faktorizaci matice A soustavy na součin dvou matic, $A = BC$, a následnému řešení dvou soustav s dvudiagonálními maticemi B a C , jež odpovídá přímému a zpětnému chodu Gaussovy eliminace (srov. [6], v ruštině má tato faktorizace název *progonka*).

Pro zadané uzly t_j a data f_j řešíme soustavu (15), (16) jen jednou a hodnotu interpolanty $F(t)$ pak určíme pro libovolný argument t . Splajn (11) splňující podmínku (16) se nazývá *přirozený* (plná čára na obr. 1). Místo (16) můžeme volit i jiné podmínky, jak uvidíme v dalším.

Kubický splajn má jednu důležitou vlastnost, jež ho řadí mezi hladké interpolanty podle naší definice z odst. 4.3 a má za důsledek vysokou efektivnost interpolace. Uvažme na intervalu $[t_1, t_N]$ třídu $W_2^2(t_1, t_N)$ tvořenou funkcemi, které mají druhou zobecněnou derivaci integrovatelnou s kvadrátem. Oslabíme-li v odst. 4.3 předpoklad

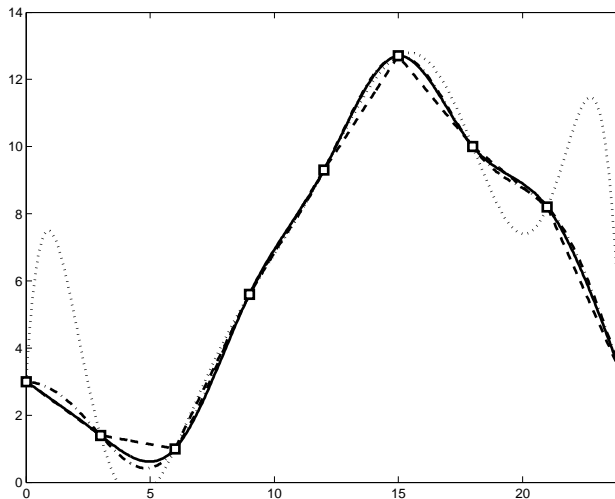
$B_0 > 0$ na $B_0 \geq 0$, dostaneme složitější teorii, ale jako prostředek pro hladkou interpolaci bude fungovat. Zvolíme-li v definici skalárního součinu (3) váhu $B_2 = 1$ a všechny ostatní váhy $B_l = 0$, bude mít funkcionál Ψ tvar

$$\Phi(u) = \int_{t_1}^{t_N} |u''(t)|^2 dt. \quad (17)$$

Řešme prostředky odst. 4.3 úlohu nalézt hladkou interpolantu $F \in W_2^2(t_1, t_N)$, která splňuje podmínky interpolace (1), minimalizuje funkcionál (17) na třídě $W_2^2(t_1, t_N)$ a užívá bázové funkce (9). Snadno se dá dokázat (viz např. [3]), že tento funkcionál nabývá minima na kubickém splajnu F , který jsme právě sestrojili. Navíc se ukáže, že funkcionál (17) nemá jiné body minima.

Druhá derivace funkce (v našich úvahách u'') má geometrický význam *křivosti* grafu funkce. Například křivost přímky je rovna 0, křivost kružnice o poloměru R je rovněž konstantní a je rovna $1/R$. Kubický splajn je tedy podle (17) interpolanta s minimální celkovou mírou křivosti Φ .

Povšimněme si, že funkcionál $\Phi(u)$ lze interpretovat jako potenciální energii pružného nosníku upevněného v bodech $[t_j, f_j]$ roviny. To věděli už angličtí lodní konstruktéři v 19. století, kteří neměli k dispozici výše uvedený matematický aparát ani počítač pro vyřešení soustavy (15), (16). Původní význam anglického slova *spline* je *pružina na rýsování velkých křivek v lodním stavitelství* [4]. Pružina byla na výkresu upevněna v bodech $[t_j, f_j]$ a realizovala minimum funkcionálu (17) svým tvarem fyzicky.



Obr. 1. Data z příkladu 1. $N = 9$, vodorovně čas v h, svisle teplota ve °C. Po částech lineární interpolanta: čárkovaná čára, mnohočlen stupně 8: tečkovaná čára, hladká interpolanta: čerchovaná čára, kubický splajn: plná čára

4.5. Racionální interpolace

Interpolantu zvolíme ve tvaru racionální funkce. Pro náš příklad 1, kde je $N = 9$, budou čitatel i jmenovatel mnohočleny stupně 4,

$$F(t) = \frac{\sum_{k=0}^4 p_k t^k}{\sum_{k=0}^4 q_k t^k}.$$

Položíme $q_0 = 1$ a z $N = 9$ podmínek interpolace (1) v uzlech t_j určíme koeficienty p_k , $k = 0, \dots, 4$, a q_k , $k = 1, \dots, 4$. Dá se ukázat, že soustava má jediné řešení [5]. Racionální interpolanta je velmi vhodná pro data, jejichž průběh je podobný převrácené hodnotě mnohočlenu, tj. například pro data naměřená v okolí pólu zkoumané veličiny. Z technických důvodů není racionální interpolanta v černobílém grafu na obr. 1 uvedena.

4.6. Ještě jeden příklad. Neekvidistantní uzly

Při měření teploty vzduchu může nastat mimořádná situace: automatické měření selhalo, měříme teplotu vzduchu ručně a nejsme schopni zaručit přesně tříhodinový interval mezi měřeními.

Příklad 2. Hodnoty teploty vzduchu, které byly naměřeny (týž den jako hodnoty v tabulce 1) od půlnoci do půlnoci ručně v neekvidistantní časové síti uzlů s kroky h_j . Hodnot je opět $N = 9$.

t (h)	0,0	5,0	7,0	8,0	10,0	13,0	15,5	20,0	24,0
f (°C)	3,0	1,2	2,4	3,9	6,6	10,4	12,3	9,0	3,2

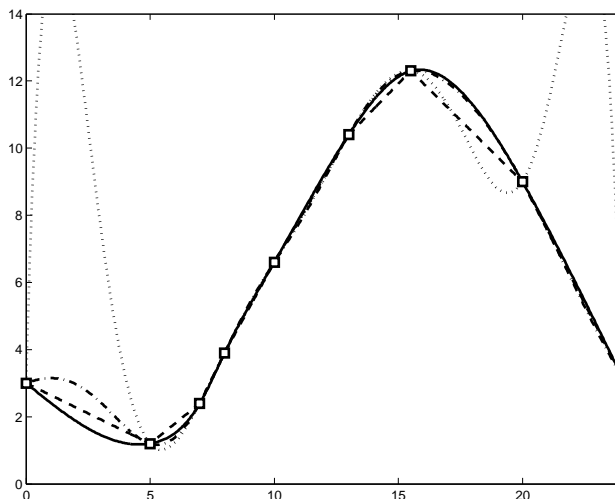
Tab. 2. Hodnoty teploty vzduchu naměřené v neekvidistantní síti

Metody interpolace, o kterých jsme se zmínili v této kapitole (po částech lineární interpolanta, mnohočlen, hladká interpolanta, kubický splajn, racionální interpolanta), se dají použít i pro neekvidistantní uzly, přičemž splňujeme podmínku (1). Algoritmy výpočtu se přitom většinou mírně zkomplikují. Na obr. 2 jsou uvedeny interpolanty stejného druhu jako na obr. 1.

5. Periodická data

Pokud je první hodnota naměřených dat rovna té poslední, tj. pokud $f_1 = f_N$, což někdy může být i případ teplotních dat, můžeme data v intervalu $[0, 24]$ považovat za periodická.

Příklad 3. Vraťme se pro jednoduchost k ekvidistantním uzlům měření. Změníme hodnoty dat naměřených pro $t_1 = 0$ a $t_9 = 24$. Nahradíme je obě průměrem hodnot z tab. 1, tj. $f_1 = f_9 = 3,1$. Celkem máme opět $N = 9$ uzlů a naměřených hodnot, ale s nimi podmínku periodicity, tedy jen 8 nezávislých naměřených hodnot.



Obr. 2. Neekvidantní data z příkladu 2. $N = 9$, vodorovně čas v h, svisle teplota ve °C. Po částech lineární interpolanta: čárkovaná čára, mnohočlen stupně 8: tečkovaná čára, hladká interpolanta: čerchovaná čára, kubický splajn: plná čára

t (h)	0,0	3,0	6,0	9,0	12,0	15,0	18,0	21,0	24,0
f (°C)	3,1	1,4	1,0	5,6	9,3	12,7	10,0	8,2	3,1

Tab. 3. Periodicky upravené naměřené hodnoty teploty vzduchu

5.1. Trigonometrická interpolanta

Jsou k dispozici velmi účinné metody interpolace periodických dat, založené na systémech periodických funkcí 1 , $\cos kt$, $\sin kt$ (trigonometrické mnohočleny) [11]. Pro N liché a po transformaci na interval $t \in [0, 24]$ má interpolanta tvar

$$F(t) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{(N-3)/2} (a_k \cos kSt + b_k \sin kSt) + \frac{1}{2}a_{(N-1)/2} \cos(\frac{1}{2}(N-1)St),$$

kde $S = \frac{1}{12}\pi$. Koeficientů a_0 a a_k , b_k trigonometrického mnohočlenu je celkem $N - 1$ a jednoznačně je určíme z interpolačních podmínek (1) pro $j = 1, \dots, N - 1$. Koeficienty se dají vyjádřit jako součty výrazů $f_{j+1} \cos(kSt_j)$ nebo $f_{j+1} \sin(kSt_j)$ přes j od 0 do $N - 2$. Pro výpočet všech koeficientů je třeba řádově N^2 aritmetických operací. Pro N sudé jsou vzorce obdobné.

Existuje algoritmus zvaný *rychlá Fourierova transformace* [1], který spočte všechny koeficienty a_k , b_k při použití řádového počtu pouze $N \ln N$ aritmetických operací a nehlédě na faktor $\ln N$ se považuje za rychlý. Logaritmus N roste tak pomalu, že ho ve srovnání s N lze zanedbat. Předpokladem je, že číslo $N - 1$ je mocnina 2. Rychlá Fourierova transformace byla vybrána mezi *Top 10 Algorithms* dvacátého století [2] a může být pro velká N časově velmi výhodná. Byla prvním rychlým algoritmem. Dnes je rychlých algoritmů v různých oblastech numerické matematiky známa celá řada.

5.2. Periodický kubický splajn

Při konstrukci přirozeného kubického splajnu v odst. 4.4 jsme k $N - 2$ rovnicím soustavy (15) přidali dvě rovnice (16), které soustavu doplnily tak, aby měla jediné řešení m_1, \dots, m_N . Jestliže víme, že naměřená data jsou periodická, je účelné hledat interpolantu ve tvaru kubického splajnu také jako periodickou funkci. Budeme tedy místo (16) požadovat splnění rovnice

$$m_N = m_1 \quad (18)$$

a také splnění dodatečné rovnice ze soustavy (15) pro $j = 1$. V soustavě zatím byly rovnice pouze pro $j = 2, \dots, N-1$. Rovnice pro $j = 1$ odpovídá podmínkám periodicity $F'(t_1) = F'(t_N)$ a $F''(t_1) = F''(t_N)$. Připomeňme, že $m_j = F''(t_j)$. Dosadíme-li do dodatečné rovnice vztah (18) a analogické vztahy $f_0 = f_{N-1}$, $m_0 = m_{N-1}$, $h_1 = h_N$, které popisují periodicitu dat, dostaneme

$$\frac{h_N + h_2}{3} m_1 + \frac{h_2}{6} m_2 + \frac{h_N}{6} m_{N-1} = \frac{f_2 - f_1}{h_2} - \frac{f_1 - f_{N-1}}{h_N}.$$

Do rovnice pro $j = N - 1$ ze soustavy (15) rovněž dosadíme (18). Dostaneme tak pro $N - 1$ neznámých m_1, \dots, m_{N-1} soustavu rovnic (15), kde $j = 1, \dots, N - 1$, a pro m_N rovnici (18). Matice soustavy, na rozdíl od matice soustavy pro koeficienty přirozeného splajnu, není třídiagonální, ale má jediné řešení a existuje rychlý algoritmus pro řešení soustavy, který vyžaduje řádově N operací. Je to varianta metody faktorizace zvaná *cyklická faktorizace* [6].

6. Úloha aproximace dat

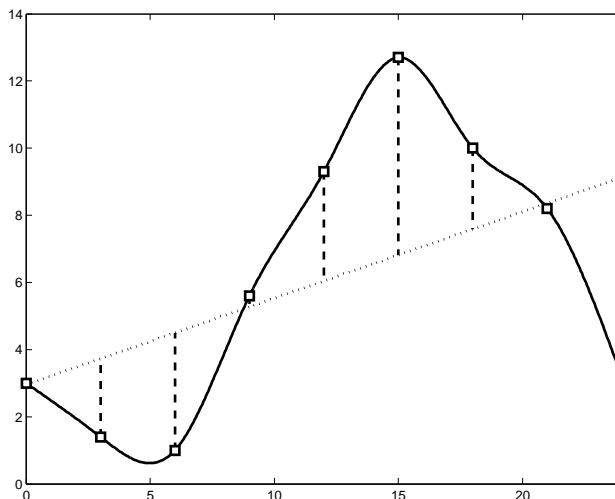
Podle definice z kap. 3 hledáme aproximantu, hladkou funkci G , která nespĺňuje N podmínek interpolace (1), ale o to je hladší. Neprovádíme tedy interpolaci dat, ale jejich *ohlazení* nebo *vyrovnání*. Ukážeme to na jednoduché úloze.

Zkusme 9 hodnot teplotních dat f_j z příkladu 1 co nejlépe aproximovat přímkou $G(t) = a + bt$ (tečkovaná čára v grafu na obr. 3). Máme tedy najít pouze dva koeficienty, a a b , ale podmínek interpolace by bylo 9. Nesplníme žádnou z podmínek interpolace (1) přesně, ale dosáhneme minimalizace funkcionálu

$$\sum_{j=1}^N (G(t_j) - f_j)^2.$$

To je v našem případě ten funkcionál, který minimalizujeme ve smyslu definice úlohy aproximace v kap. 3. Tento způsob, který jsme zvolili pro *přibližné* řešení soustavy, jež má více rovnic než neznámých, se nazývá *metoda nejmenších čtverců* [11]. Ohlazení (vyrovnání) dat metodou nejmenších čtverců je pro velká N numerická úloha silně ovlivněná zaokrouhlovacími chybami, ale vhodné metody pro její řešení jsou známy, například *metoda singulárního rozkladu matice soustavy* [5].

Aproximace přímkou, která na obr. 3 vyrovnává data z příkladu 1, se nazývá *lineární regrese*. Místo přímky můžeme za aproximantu vzít jinou hladkou funkci (třeba mnohočlen stupně 2) nebo systém funkcí s vhodně určenými koeficienty. Některé způsoby interpolace se dají po jednoduché úpravě použít i pro aproximaci, například hladká aproximace [7], kubický splajn [3] nebo trigonometrický mnohočlen [11].



Obr. 3. Data z příkladu 1. $N = 9$, vodorovně čas v h, svisle teplota ve $^{\circ}\text{C}$. Lineární aproxima: tečkovaná čára, interpolanta (kubický splajn): plná čára, rozdíly $G(t_j) - f_j$: čárkovaná čára

Protože se při každém měření dopoušíme chyby (statistická charakteristika chyby je přitom většinou známa), dostaneme jako aproximantu (vyrovnávací funkci) funkci, která je ve statistickém smyslu věrnější aproximací naměřených dat než interpolanta. Před výpočtem můžeme navíc předepsat, jak velkou relativní váhu má mít splnění podmínek interpolace a jak velkou váhu má mít hladkost aproximanty.

7. Dostupný software

Existuje mnoho dalších způsobů interpolace a aproximace, které se v praxi běžně používají (srov. např. [10]). Některé z nich jsou vhodné pro speciální účely, jiné jsou univerzální. Jeden ze způsobů interpolace, který jsme neuvadli, je *Hermitova interpolace* mnohočlenem [11]. V ní vycházíme z předpokladu, že jsme v uzlech t_j naměřili nejen hodnoty dat f_j , ale i hodnoty f'_j derivace f' měřené funkce f . V uzlech splňujeme nejen podmínky (1), ale navíc i podmínky pro interpolaci derivace, tj.

$$F'(t_j) = f'_j \text{ pro } j = 1, \dots, N.$$

Význam Hermitovy interpolace je nejen teoretický (může sloužit k odvození Gaussových integračních vzorců), ale data tohoto typu lze naměřit např. při současném měření dráhy a rychlosti tělesa.

Software ke konstrukci interpolant a aproximant je k dispozici v řadě programových systémů (Maple, Mathematica, Matlab apod.) a publikací (například [5]). Konstrukce jsou založeny na různých matematických principech a u každého výsledku je známa jeho *přesnost* v určitém smyslu. Analogické interpolanty a aproximanty lze konstruovat i jako funkce dvou nebo tří proměnných (pro data měřená ve 2D nebo 3D síti uzlů).

8. Co dál

Interpolantu i aproximantu umíme popsat vzorečkem, tj. jako funkci, jejíž argument probíhá spojitě celý interval $[t_1, t_N]$ uzlů měření; naměřená data jsou vyjádřena analyticky. Je tedy čas vrátit se zpátky [9], jak to slibuje název příspěvku.

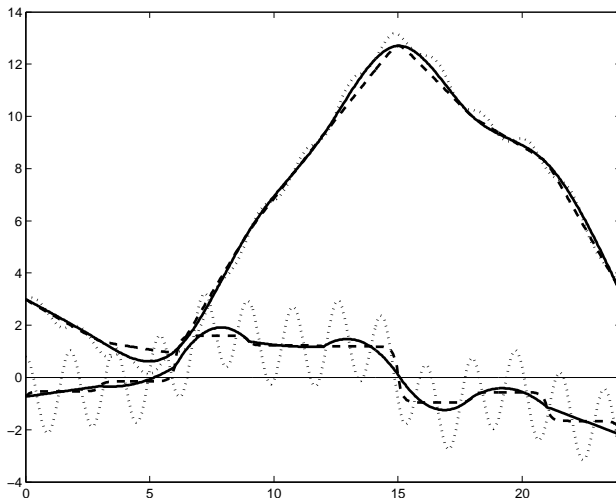
Matematický popis dat, tj. analytické vyjádření neboli vyjádření vzorcem, se dá použít při kreslení grafu interpolanty (aproximanty). Častá je situace, kdy potřebujeme mít data vzorkovaná v jemnější síti uzlů, než byla ta původní (tzv. *resampled data*); ta můžeme snadno získat, protože máme popis dat pomocí funkce, ale to se dá dělat i jinými způsoby, třeba také prostřednictvím rychlé Fourierovy transformace (se zachováním Fourierova spektra dat). Interpolace dat např. na trojúhelníku nebo ve čtyřstěnu má důležité aplikace v metodě konečných prvků.

Znalost interpolanty umožňuje získat grafické vyjádření dat pomocí *vrstevnic* dat naměřených v rovině (tj. vrstevnic funkce $F(x_1, x_2)$, pro funkce více než dvou proměnných se konstruují analogické *hladiny*).

8.1. Výpočet derivace dat

Derivace naměřených dat se dá využít k analýze jejich průběhu, tj. ke stanovení bodů, ve kterých data rostou nebo klesají, a k nalezení lokálních minim nebo maxim v datech.

Pokud je interpolanta analyticky vyjádřená hladká funkce F , můžeme v každém bodě intervalu $[t_1, t_N]$ spočítat její derivaci (tj. směrnici její tečny) vzorcem. Sám výpočet je jednoduchý, ale získat uspokojivé řešení není snadné. Výpočet derivace lze provést i bez interpolace naměřených dat, ale v každém případě je přitom třeba dbát zejména na hladkost interpolanty. Uvidíme, že při nedostatečné péči můžeme jako derivaci interpolanty dostat libovolně rozkmitanou funkci.



Obr. 4. Data z příkladu 1. $N = 9$, vodorovně čas v h, svisle teplota ve °C. Kubický splajn: plná čára, perturbovaný kubický splajn: tečkovaná čára, splajn pod napětím: čárkovaná čára. V dolní části obrázku: derivace horních křivek vyznačené odpovídajícími druhy čar

Vraťme se k datům z příkladu 1. Jejich interpolantu ve tvaru kubického splajnu jsme zkonstruovali v odst. 4.4 a je na obr. 1 i na obr. 4 (plná čára). Shledali jsme, že je to interpolanta hladká a plynulá. Po zderivování analytického vyjádření kubického splajnu dostaneme plnou čáru v dolní části obr. 4. Derivace je polynom druhého stupně, který je rovněž hladký a plynulý. Z obrázku je vidět, že data (tj. jejich interpolanta) rostou tam, kde je derivace kladná, a klesají tam, kde je derivace záporná.

Zkusme interpolantu velmi málo porušit, náhodně perturbovat, tak, aby se od původního kubického splajnu lišila nejvýše o $\pm 0,5^\circ\text{C}$ (tečkovaná čára na obr. 4). Poznamenejme, že perturbovaný splajn už nemusí splňovat podmínky (1) a je tedy aproximantou. Výsledná derivace perturbovaného splajnu je v dolní části obr. 4 znázorněna tečkovaně. Výrazně osciluje a neodpovídá subjektivní představě o plynulé derivaci interpolanty.

Jak vidno, úloha numericky spočítat derivaci je *špatně podmíněná* (viz např. [10]), její řešení velmi silně závisí i na malém porušení (změně) vstupních dat. Před řešením je třeba úlohu *regularizovat*, v našem případě maximálně ohladit interpolantu, která má být derivována.

Jeden způsob, jak zabránit oscilacím derivace interpolanty, jež nemají reálné opodstatnění, souvisí s hladkou interpolací. Připomeňme, že jsme kubický splajn sestrojili jako funkci z třídy $W_2^2(t_1, t_N)$, která splňuje podmínky interpolace (1) a minimalizuje funkcionál Φ zavedený v (17), tj. celkovou míru křivosti grafu interpolanty. Přičteme-li k Φ ještě *celkovou míru oscilací* grafu interpolanty vynásobenou nezápornou vahou α , dostaneme funkcionál

$$\Psi(u) = \alpha \int_{t_1}^{t_N} \|u'(t)\|^2 dt + \int_{t_1}^{t_N} \|u''(t)\|^2 dt.$$

Stanovení takové interpolanty patří do hladké aproximace (odst. 4.3). V definici skalárního součinu (3) položíme $B_1 = \alpha$, $B_2 = 1$ a všechny ostatní váhy $B_l = 0$ a použijeme báze funkce (9). Pro zvolené α tak určíme interpolantu, která minimalizuje jak křivost, tak oscilace a nazývá se *splajn pod napětím*. Název charakterizuje „mechanické vlastnosti“ interpolanty. Váha α umožňuje předepsat, co má vypočtená interpolanta minimalizovat více: křivost nebo oscilace. Hodnota $\alpha = 0$ odpovídá kubickému splajnu, protože pak je $\Psi(u) = \Phi(u)$ a oscilace se neminimalizují.

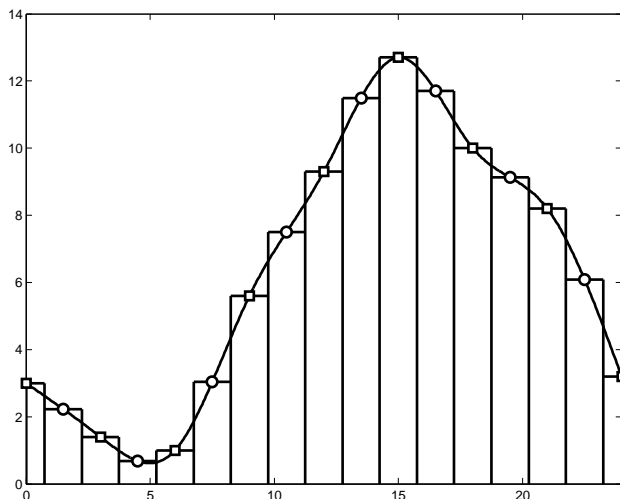
Příklad splajnu pod napětím je pro $\alpha = 20$ na obr. 4 (čárkovaná čára). Derivace splajnu pod napětím (čárkovaná čára v dolní části obrázku) je podobná po částech konstantní funkci, která je ohlazená v místech skoků, zatímco sám splajn pod napětím připomíná po částech lineární interpolantu, ale v uzlech je hladký, neláme se. Vhodnou volbou parametru α můžeme získat kompromisní výsledek: splajn pod napětím i jeho derivaci tak hladké, aby působily dobrým subjektivním dojmem.

8.2. Výpočet integrálu z dat

Další úloha, kterou umíme pro naměřená data vyřešit, známe-li interpolantu F , je spočítat integrál z funkce F (určit velikost plochy mezi osou t a grafem interpolanty). V případě teplotních dat tato úloha souvisí se stanovením *průměrné denní teploty*.

Průměrnou denní teplotu F_A můžeme spočítat vzorcem

$$F_A = \frac{1}{N-1} \left(\frac{1}{2}f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1} + \frac{1}{2}f_N \right)$$



Obr. 5. Data z příkladu 1. $N = 9$, vodorovně čas v h, svisle teplota ve °C. Kubický splajn: plná čára. Součet ploch obdélníků v grafu aproximuje hodnotu F_a .

přímo z naměřených dat, aniž bychom brali ohled na to, jaký je průběh dat mezi naměřenými hodnotami. První a poslední naměřenou hodnotu teploty přičítáme s koeficientem $\frac{1}{2}$, protože je vztahujeme k časovému intervalu poloviční šířky. Pro data z příkladu 1 ($N = 9$) vyjde $F_A = 6,4477$. Zkusme průměrnou denní teplotu počítat přesněji a v závislosti na interpolantě, kterou jsme stanovili.

Velikost plochy mezi osou t a grafem interpolanty F (kubický splajn, plná čára v obr. 5) určíme jako integrál z interpolanty od t_1 do t_N . Velikost této plochy závisí na průběhu interpolanty F .

Úlohu stanovit průměrnou denní teplotu teď můžeme převést na analytický nebo numerický výpočet veličiny

$$F_a = \frac{1}{t_N - t_1} \int_{t_1}^{t_N} F(t) dt,$$

tj. *integrálního průměru* z funkce F přes interval $[t_1, t_N]$. Úloha je dobře podmíněná a její řešení není spojeno s žádnými mimořádnými úskalími, jako to bylo v případě derivování.

Nabízí se ještě jeden postup. Aniž bychom integrovali analyticky, můžeme k výpočtu integrálního průměru F_a použít zdokonalený algoritmus výpočtu průměru F_A , který je ekvivalentní konstrukci speciální kvadraturní formule (*lichoběžníkové pravidlo* [11]), viz obr. 5. K uzlům t_j , $j = 1, \dots, t_N$, v nichž jsme data měřili (naměřené hodnoty jsou vyznačeny čtverečky), přidáme další uzly $\frac{1}{2}(t_j + t_{j+1})$, $j = 1, \dots, N - 1$, v nichž hodnotu interpolanty F spočteme (resampling, interpolované hodnoty jsou vyznačeny kroužky), a stanovíme průměr F_A z těchto „rozšířených“ dat. Počet uzlů „měření“ pro $N = 9$ je teď $2 \times N - 1 = 17$ a i hodnot rozšířených dat je více, tj. 17, a proto každou hodnotu vztáhneme k užšímu intervalu. V postupu výpočtu můžeme stejným

způsobem pokračovat. Zjistíme, že posloupnost průměrů F_A má pro hladkou interpolantu F a zvětšující se počet uzlů limitu rovnou integrálnímu průměru F_a . Limita bude záviset na průběhu interpolanty. Tato myšlenka je podstatou definice *Riemannova integrálu*. V našem případě vyjde $F_a = 6,4594$ a tato hodnota závisí na průběhu zvolené interpolanty.

9. Závěr

Začali jsme od naměřených dat a ukázali jsme, jak se konstruuje interpolanta nebo aproximanta k takovým datům. Přitom jsme zdůraznili, že taková úloha nemá jediné řešení a že hodnocení kvality interpolanty může být subjektivní. Vrátili jsme se ke zpracování naměřených dat a naznačili jsme, jak se dá spočítat derivace dat (včetně obtíží, které jsou s touto úlohou spojeny) a jak se dá spočítat integrál z dat.

Na příkladech jsme ukázali, proč může být při zpracování dat užitečné tyto hodnoty počítat. Odkázali jsme na softwarové systémy vhodné pro řešení takových a podobných úloh. To vše jsme předvedli na příkladu 1D dat; pro 2D a 3D data je úloha podobná, ale řešení složitější.

Poděkování. Práce na tomto příspěvku byla podpořena projektem RVO 67985840. Autor též děkuje RNDr. Pavlu Kůsovi, Ph.D., za cenné připomínky k textu.

L i t e r a t u r a

- [1] COOLEY, J. W., TUKEY, J. W.: *An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series*. Math. Comp. 19 (1965), 297–301.
- [2] DONGARRA, J., SULLIVAN, F.: *The top 10 algorithms*. Computing Sci. Engrg. 2 (2000), 22–23.
- [3] MARČUK, G. I.: *Metody numerické matematiky*. Academia, Praha, 1987.
- [4] OSIČKA, A., POLDAUF, I.: *Anglicko-český slovník s dodatky*. Academia, Praha, 1970.
- [5] PRESS, W. H., FLANNERY, B. P., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T.: *Numerical recipes. The art of scientific computing*. Cambridge University Press, Cambridge, 1986.
- [6] SAMARSKIJ, A. A., NIKOLAJEV, J. S.: *Numerické řešení velkých řídkých soustav*. Academia, Praha, 1984.
- [7] SEGETH, K.: *A periodic basis system of the smooth approximation space*. Appl. Math. Comput. (2015), dx.doi.org/10.1016/j.amc.2015.01.120.
- [8] TALMI, A., GILAT, G.: *Method for smooth approximation of data*. J. Comput. Phys. 23 (1977), 93–123.
- [9] TOLKIEN, J. R. R.: *The Hobbit, or there and back again*. George Allen & Unwin, London, 1937.
- [10] UEBERHUBER, S. C.: *Numerical computation*. Springer, Berlin, 1997.
- [11] VITÁSEK, E.: *Numerické metody*. SNTL, Praha, 1987.