Στοχαστικές Μέθοδοι

Φασματική ανάλυση χρονοσειρών

Δημήτρης Κουτσογιάννης

Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος,
Σχολή Πολιτικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Αθήνα – Αναθεώρηση 2017

Ο μετασχηματισμός Fourier

Η ταυτότητα του Euler: $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ (i η φανταστική μονάδα)

Ορισμός του μετασχηματισμού Fourier: $F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, e^{-i\, 2\pi\, \omega\, t}\, dt$

Αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier: $f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)\, e^{i\, 2\pi\, \omega\, t}\, d\omega$

Τα μεγέθη t και ω νοούνται συνήθως ως χρόνος και συχνότητα ή αντίστροφα. Αν η $f(t)$ είναι πραγματική και άρτια συνάρτηση (δηλαδή $f(t) = f(-t)$) τότε η $F(\omega)$ είναι επίσης πραγματική και άρτια και η μορφή της απλοποιείται ως εξής:

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos(2\pi\, \omega\, t)\, dt = 2 \int_{0}^{\infty} f(t) \cos(2\pi\, \omega\, t)\, dt$$

Αντίστοιχα, ο αντίστροφος μετασχηματισμός απλοποιείται ως εξής:

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \cos(2\pi\, \omega\, t)\, d\omega = 2 \int_{0}^{\infty} F(\omega) \cos(2\pi\, \omega\, t)\, d\omega$$

Σημείωση: Συχνά στη βιβλιογραφία χρησιμοποιούνται διαφοροποιημένες σχέσεις, όπως για παράδειγμα:

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, e^{-i\, \omega\, x}\, dt, \quad f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\, t\, \omega}\, d\omega$$

Ο πεπερασμένος μετασχηματισμός Fourier

Αν η συνάρτηση $f(x)$ είναι περιοδική με περίοδο 1, τότε ο μετασχηματισμός Fourier μηδενίζεται για κάθε μη ακέραια τιμή του ω. Αυτό δίνει το έναυσμα για τον ορισμό μιας ειδικής περίπτωσης μετασχηματισμού Fourier με το x να κινείται σε ένα από τα επαναλαμβανόμενα περιοδικά διαστήματα (έστω το [–1/2, 1/2]) και το ω να παίρνει ακέραιες μόνο τιμές k. Έτσι για τη συνάρτηση $f(t)$ ορίζεται ο πεπερασμένος μετασχηματισμός Fourier F_k (αντί $F(\omega)$) που ο αντίστροφος του είναι άθροισμα αντί ολοκλήρωμα:

$$F_k = \int_{-1/2}^{1/2} f(t)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, 2\pi\, k\, t}\, \mathrm{d}t, \quad f(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} F_k\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, 2\pi\, k\, t}$$

Αν η $f(x)$ είναι πραγματική και άρτια συνάρτηση (δηλαδή $f(t) = f(-t)$) τότε η F_k είναι επίσης πραγματική και άρτια και η μορφή της απλοποιείται ως εξής:

$$F_k = \int_{-1/2}^{1/2} f(t) \cos(2\pi\, k\, t)\, \mathrm{d}t = 2 \int_{0}^{1/2} f(t) \cos(2\pi\, k\, t)\, \mathrm{d}t$$

Αντίστοιχα, ο αντίστροφος μετασχηματισμός απλοποιείται ως εξής:

$$f(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} F_k \cos(2\pi\, k\, t) = F_0 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} F_k \cos(2\pi\, k\, t)$$

Παραλλαγές του πεπερασμένου μετασχηματισμού Fourier

Ανάλογα με το διάστημα, στο οποίο ορίζεται η συνάρτηση $f(t)$, μπορεί να οριστεί ποικιλία πεπερασμένων μετασχηματισμών Fourier. Αναφέρονται δύο παραδείγματα που θα είναι χρήσιμα στη συνέχεια.

1. Πεπερασμένος μετασχηματισμός συνημιτόνου στο διάστημα [0, ½]

Έστω ότι η πραγματική συνάρτηση $f(t)$ ορίζεται στο διάστημα [0, ½]. Ορίζουμε τον πεπερασμένο μετασχηματισμό συνημιτόνου, για κάθε ακέραιο k (άρτια συνάρτηση του k)

$$F_k^{c} = \int_0^{1/2} f(t) \cos(2\pi\, k\, t)\, dt$$

Αν επεκτείνουμε την $f(t)$ προς τις αρνητικές τιμές, υποθέτοντάς την συμμετρική, τότε εύκολα προκύπτει ότι $F_k^{c} = (1/2)F_k$, όπου F_k είναι ο πεπερασμένος μετασχηματισμός Fourier στο διάστημα [–1/2, 1/2], οπότε από τα προηγούμενα προκύπτει ότι ο αντίστροφος μετασχηματισμός θα είναι ο $2f(t)$, ή

$$f_k^{c}(t) = 2\, f(t) = 2 \sum_{k=-\infty}^{\infty} F_k^{c} \cos(2\pi\, k\, t) = 2\, F_0^{c} + 4 \sum_{k=1}^{\infty} F_k^{c} \cos(2\pi\, k\, t)$$

2. Πεπερασμένος μετασχηματισμός Fourier στο διάστημα [0, 1] και αντιστροφή του

$$F_k^{I} = \int_0^{1} f(t)\, e^{-i\, 2\pi\, k\, t}\, dt, \quad f(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} F_k^{I}\, e^{i\, 2\pi\, k\, t}$$

Ο διακριτός μετασχηματισμός Fourier

Έστω ότι υπάρχουν n παρατηρήσεις (δεδομένα) που έχουν ληφθεί σε μια συνολική περίοδο t ανά ίσα χρονικά διαστήματα $\Delta t = t / n$. Η συχνότητα δειγματοληψίας (sampling frequency) είναι $\omega_s = 1 / \Delta t = n / t$, ενώ η λεγόμενη ευκρίνεια συχνότητας (frequency resolution) είναι $\Delta\omega = 1 / t = \omega_s / n$. Συμβολίζουμε τα n δεδομένα με x_τ, όπου $\tau = 0, ..., n - 1$ (όχι 1, ..., n).

Παρατηρούμε ότι το μέγεθος τ / n βρίσκεται στο διάστημα [0, 1) (ακριβέστερα, στο [0, 1 – 1/n], οπότε κατ' αναλογία με τον πεπερασμένο μετασχηματισμό Fourier F^{I}, μετά από αντικατάσταση, διακριτοποίηση και μετατροπή του ολοκληρώματος σε άθροισμα ($t \to \tau/n$, $f(t) \to x_\tau$, $dt \to 1/n$) μπορεί να οριστεί ο διακριτός μετασχηματισμός Fourier (Discrete Fourier Transform – DFT):

$$u_k = \frac{1}{n} \sum_{\tau=0}^{n-1} x_\tau \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, 2\pi\, k\, \tau\, /\, n}, \; k = 0, ..., n - 1$$

Ο αντίστροφος διακριτός μετασχηματισμός Fourier είναι:

$$x_\tau = \sum_{k=0}^{n-1} u_k \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, 2\pi\, k\, \tau\, /\, n}, \; \tau = 0, ..., n - 1$$

Παρατήρηση: Το μέγεθος $\tau\, \Delta t$ αντιπροσωπεύει χρόνο, ενώ το μέγεθος $k\, \Delta\omega = (k / n)\, \omega_s =: \omega_k$ αντιπροσωπεύει συχνότητα. Έτσι, το μέγεθος u_k μπορεί εναλλακτικά να συμβολίζεται ως $u_{k/n}$ ή u_{ω_k}. Εξάλλου, μπορεί για απλοποίηση να θεωρηθεί $\Delta t = 1 = \omega_s$, οπότε ο χρόνος και η συχνότητα παριστάνονται από τους αριθμούς τ και k / n, αντίστοιχα.

Σημείωση: Συχνά στη βιβλιογραφία χρησιμοποιούνται διαφοροποιημένες σχέσεις, όπως για παράδειγμα:

$$u_k = \sum_{\tau=0}^{n-1} x_\tau \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, 2\pi\, k\, \tau\, /\, n}, \quad x_\tau = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} u_k \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, 2\pi\, k\, \tau\, /\, n}$$

Παρατηρήσεις για το διακριτό μετασχηματισμό Fourier

1. Συνήθως τα δεδομένα x_τ, $\tau = 0, ..., n-1$, είναι πραγματικοί αριθμοί. Ωστόσο, οι μετασχηματισμοί τους u_k, $k = 0, ..., n-1$, είναι μιγαδικοί αριθμοί, ήτοι

   $u_k = v_k + i\, w_k$,

   όπου v_k και w_k πραγματικοί αριθμοί. Ο αντίστροφος μετασχηματισμός, εφαρμοζόμενος πάνω στους μιγαδικούς αριθμούς u_k δίνει ως αποτέλεσμα πραγματικούς αριθμούς x_τ.

2. Εφόσον τα δεδομένα x_τ είναι πραγματικοί αριθμοί, ισχύουν οι εξής σχέσεις:

   $k = 0$: $\quad v_0 = \overline{x}$ (μέση τιμή των x_m), $w_0 = 0$

   $1 \le k \le n-1$: $\quad v_k = v_{n-k}$, $w_k = -w_{n-k}$

   Δηλαδή, η πραγματική συνιστώσα είναι συμμετρική ως προς το σημείο $n/2$, ενώ η φανταστική συνιστώσα είναι αντισυμμετρική. Κατά συνέπεια για άρτιο n, $w_{n/2} = 0$.

3. Οι σχέσεις συμμετρίας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι από n πραγματικούς αριθμούς x_τ, με το μετασχηματισμό καταλήγουμε σε n ανεξάρτητους πραγματικούς αριθμούς v_k και w_k.

4. Οι ίδιες σχέσεις οδηγούν στο συμπέρασμα ότι αν είναι γνωστά τα μεγέθη u_k για $k \le n/2$, τότε προκύπτουν άμεσα και τα υπόλοιπα. Με άλλα λόγια, οι συχνότητες $k/n \le 0.5$ προσδιορίζουν πλήρως το μετασχηματισμό, ενώ οι υπόλοιπες συχνότητες δεν προσθέτουν καμία πληροφορία. Η οριακή συχνότητα $\omega_{\mathrm{N}} = 0.5$ είναι γνωστή ως συχνότητα Nyquist.

Παρατηρήσεις για το διακριτό μετασχηματισμό Fourier (2)

5. Αν $r_k = |u_k| = (v_k^2 + w_k^2)^{1/2}$ το μέτρο του μιγαδικού αριθμού u_k, τότε ισχύουν τα εξής:

$$\frac{1}{n}\sum_{\tau=0}^{n-1} x_\tau^2 = \sum_{k=0}^{n-1} r_k^2,\; s^2 = \frac{1}{n}\sum_{\tau=0}^{n-1}(x_\tau - \bar{x})^2 = \sum_{k=1}^{n-1} r_k^2 = \frac{1}{n}\sum_{1\le k\le n/2} p_k^2 - \frac{p_{n/2}^2}{2n}$$

όπου $p_k^2 := 2\, n\, r_k^2$. Ο τελευταίος όρος, ο οποίος αφαιρείται, υπάρχει μόνο αν το n είναι άρτιος αριθμός.

6. Η δεύτερη από τις παραπάνω εξισώσεις μας επιτρέπει να αναλύσουμε τη δειγματική διασπορά s^2 σε επιμέρους συνιστώσες r_k^2 που αντιστοιχούν στις συχνότητες k/n από $\Delta\omega = 1/n$ μέχρι $\omega_N = 0.5$ (η συχνότητα 0 αντιστοιχεί στη μέση τιμή και δεν σχετίζεται με τη διασπορά). Τυχόν σημαντική υπεροχή ενός από τα r_k^2 έναντι των άλλων αποκαλύπτει περιοδική συμπεριφορά της διεργασίας με συχνότητα k/n (περίοδο n/k).

7. Το μέγεθος $p_k^2 = 2\, n\, r_k^2$ εκφρασμένο ως συνάρτηση του k (για $1 \le k \le n/2$) ή συνηθέστερα της συχνότητας k/n (για $1/n \le k/n \le 0.5$), ονομάζεται περιοδόγραμμα.

8. Οι σχέσεις ορισμού του DFT μπορούν να χρησιμοποιηθούν άμεσα για τον υπολογισμό του, αλλά η υπολογιστική διαδικασία είναι αργή. Για την περίπτωση που το πλήθος δεδομένων n είναι δύναμη του 2 (π.χ. 64, 128, 256, 512), υπάρχει ένας διαδεδομένος γρήγορος αλγόριθμος (Fast Fourier Transform – FFT), ο οποίος σήμερα έχει επεκταθεί ώστε να λειτουργεί χωρίς περιορισμούς για το πλήθος δεδομένων.

Φάσμα ισχύος

Για μια στοχαστική ανέλιξη $\underline{x}_t$ σε διακριτό χρόνο $\tau = 0, 1, ...$, με συνάρτηση αυτοσυνδιασποράς $c_\eta := \mathrm{Cov}[\underline{x}_\tau, \underline{x}_{\tau+\eta}]$, $\eta = 0, \pm 1, ...$, ο αντίστροφος πεπερασμένος μετασχηματισμός Fourier της συνάρτησης αυτοσυνδιασποράς ονομάζεται φάσμα ισχύος $s(\omega)$ με ω στο διάστημα [0, 1/2]. Επειδή η c_η είναι άρτια συνάρτηση, ισχύει

$$s(\omega) = 2 \sum_{\eta=-\infty}^{\infty} c_\eta \cos(2\pi\,\eta\,\omega) = 2\,c_0 + 4 \sum_{\eta=1}^{\infty} c_\eta \cos(2\pi\,\eta\,\omega)$$

Η σχέση αντιστροφής είναι $c_\eta = \int_0^{1/2} s(\omega) \cos(2\pi\,\eta\,\omega)\, d\omega$

Άμεσα προκύπτει ότι το εμβαδό του φάσματος ισχύος είναι ίσο με τη διασπορά c_0. Εναλλακτικά, το φάσμα ισχύος μπορεί να οριστεί με βάση τη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης, οπότε έχει εμβαδό 1. Αν χρησιμοποιηθεί ως συνάρτηση αυτοσυνδιασποράς η εκτίμηση από μια χρονοσειρά x_τ ($t = 0, ..., n-1$), που σύμφωνα με την τυπική εκτιμήτρια είναι

$$\hat{c}_\eta = \frac{1}{n} \sum_{\tau=0}^{n-\eta} (x_\tau - \bar{x})(x_{\tau+\eta} - \bar{x})$$

τότε αποδεικνύεται ότι το φάσμα ισχύος $s(\omega)$ ταυτίζεται με το περιοδόγραμμα για κάθε διακριτή συχνότητα $\omega = k/n$, με k θετικό ακέραιο $\le n/2$ (δεν ισχύει για $\omega = 0 = k$).

Για πραγματικές στοχαστικές ανελίξεις ισχύει $s(\omega) \ge 0$ για κάθε ω. Τυχόν υπολογιστική απόκλιση από αυτό τον κανόνα πρέπει να αποδοθεί είτε σε υπολογιστικό σφάλμα είτε σε ασυνέπεια της ακολουθίας $\hat{c}_\eta$ (μη θετικά ορισμένο μητρώο συνδιασπορών).

Υπολογισμός του φάσματος ισχύος με βάση τον ορισμό του

Υποθέτουμε ότι η συνάρτηση αυτοσυνδιασποράς c_η είναι γνωστή για n τιμές του $\eta = 0, ..., n - 1$. Θεωρητικά, η εφαρμογή της εξίσωσης ορισμού του φάσματος ισχύος μπορεί να γίνει για κάθε τιμή της συχνότητας ω, με βάση την εξίσωση ορισμού του (θεωρώντας $c_\eta = 0$ για $\eta \geq n$):

$$s(\omega) = 2\, c_0 + 4 \sum_{\eta=1}^{n-1} c_\eta \cos(2\pi\, \eta\, \omega)$$

Ωστόσο, τα αποτελέσματα δεν είναι πάντα συνεπή για κάθε ω και έτσι λαμβάνονται διακριτές συχνότητες υπολογισμού. Διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

(0) Υπολογισμός στα σημεία $\omega_k = k/n$ για $k = 0, ..., n/2$ για n άρτιο (υποπερίπτωση 0α) ή $k = 0, ..., (n - 1)/2$ για n περιττό (υποπερίπτωση 0β) (όπως ακριβώς στο περιοδόγραμμα για ίσο αριθμό τιμών n).

(1) Υπολογισμός στα σημεία $\omega_k = k/(2n - 2)$ για $k = 0, ..., n - 1$

(2) Υπολογισμός στα σημεία $\omega_k = k/(2n - 1)$ για $k = 0, ..., n - 1$

Στις περιπτώσεις (1) και (0α), που η τελευταία συχνότητα είναι η 0.5, είναι προτιμότερο ο υπολογισμός να γίνεται με την ελαφρώς διαφοροποιημένη εξίσωση

$$s(\omega) = 2\, c_0 + 4 \sum_{n=1}^{n-2} c_\eta \cos(2\pi\, \eta\, \omega) + 2\, c_{n-1} \cos[2\pi\, (n - 1)\, \omega]$$

Η αντιστροφή γίνεται με μετατροπή του αντίστοιχου πεπερασμένου μετασχηματισμού Fourier σε άθροισμα, ήτοι με την ακόλουθη σχέση, όπου η $s(0.5)$ υπάρχει στις περιπτώσεις (1) και (0α):

$$c_\eta = \omega_1 \left[\frac{s(0) + (-1)^\eta\, s(0.5)}{2} + \sum_{0 < \omega_k < 0.5} s(\omega_k) \cos(2\pi\, \eta\, \omega_k) \right]$$

Υπολογισμός του φάσματος ισχύος με χρήση DFT ή FFT

Υποθέτουμε και πάλι ότι η συνάρτηση αυτοσυνδιασποράς c_η είναι γνωστή για n τιμές του $\eta = 0, \ldots, n - 1$. Αν το $n - 1$ είναι δύναμη του 2 (όχι το n όπως στην τυπική ανάλυση δεδομένων) τότε το φάσμα ισχύος μπορεί να εκτιμηθεί με τη χρήση του FFT (μειώνοντας δραστικά το χρόνο υπολογισμού) στα σημεία $\omega_k = k/(2n - 2)$ για $k = 0, \ldots, n - 1$ (όπως στην προηγούμενη περίπτωση 1).

Θεωρώντας $c_\eta = 0$ για $\eta > n$, ορίζουμε την ακολουθία δ_η για $\eta = 0, \ldots, 2n - 3$, με τον εξής τρόπο

$$\delta_\eta = \begin{cases} 4\,(n-1)\,c_\eta & \text{αν } \eta \le n-1 \\ \delta_{2(n-1)-\eta} & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

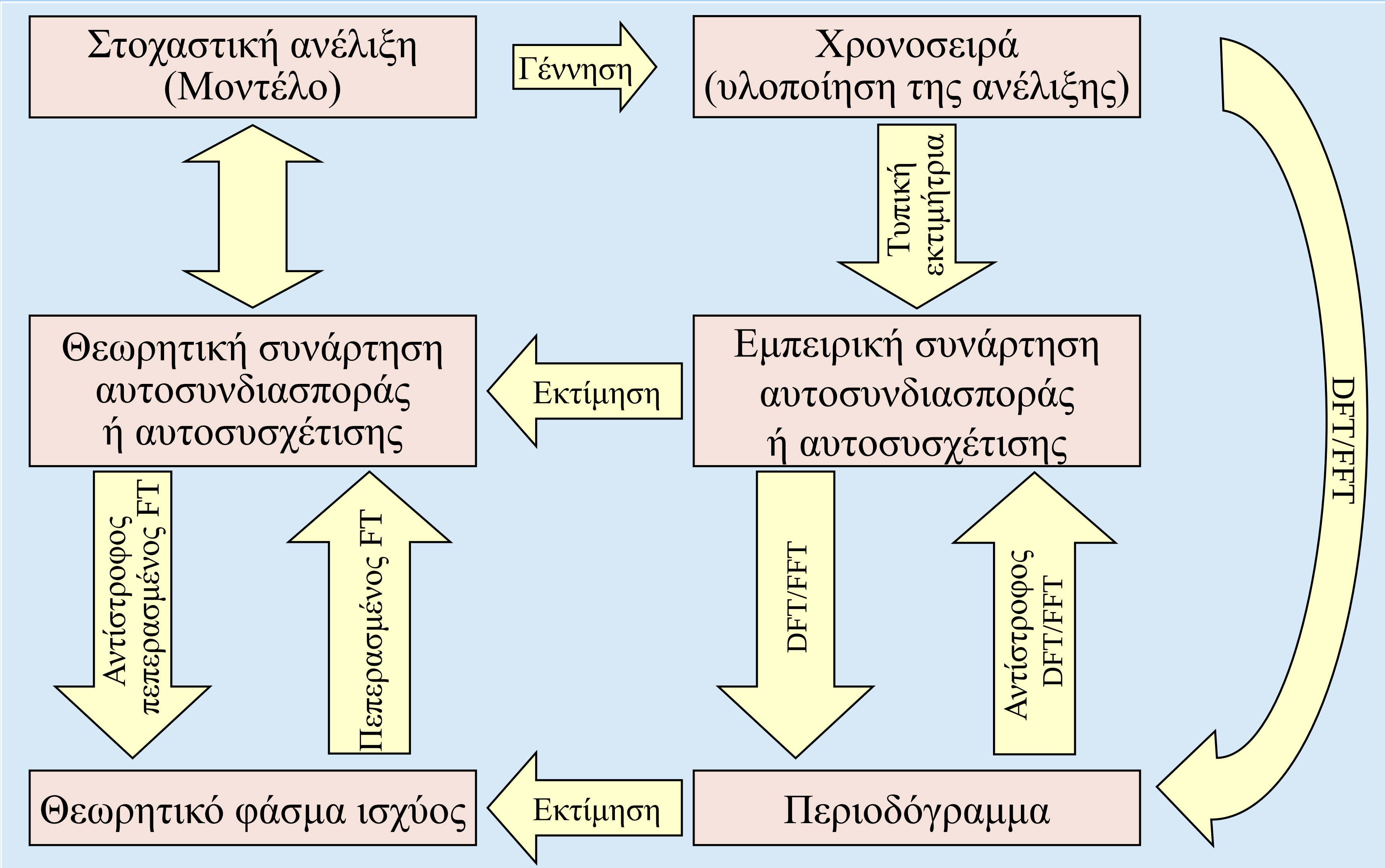
Οι τιμές του u_k του DFT ή FFT στα σημεία $k = 0, \ldots, n - 1$ είναι οι ζητούμενες τιμές $s(\omega_k)$ για συχνότητες 0 έως 0.5.

Η αντιστροφή της ακολουθίας u_k με τον αντίστροφο DFT ή FFT δίνει τις τιμές δ_η, από τις οποίες προκύπτουν οι αυτοσυνδιασπορές

$$c_\eta = \delta_\eta \,/\, [4\,(n - 1)]$$

για $\eta = 0, \ldots, n - 1$.

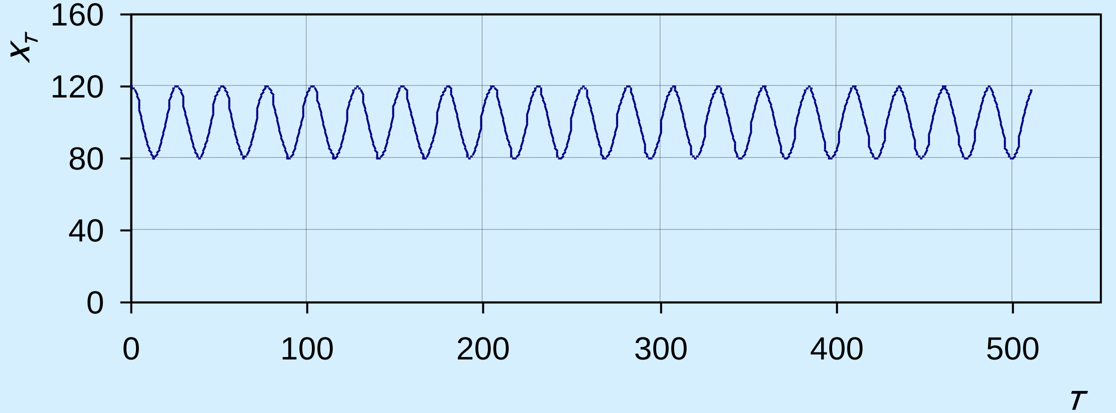
Σχέση ανέλιξης/χρονοσειράς, αυτοσυνδιασποράς και φάσματος ισχύος/περιοδογράμματος

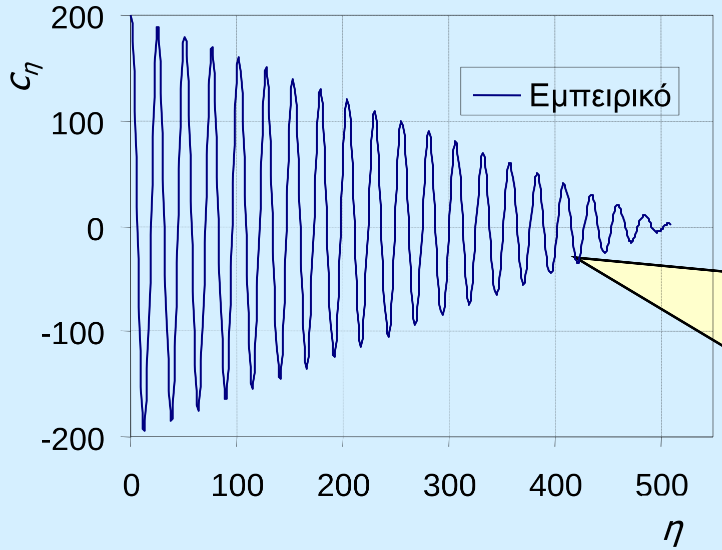


Παραδείγματα φασματικής ανάλυσης
1. Περιοδικό σήμα μιας αρμονικής

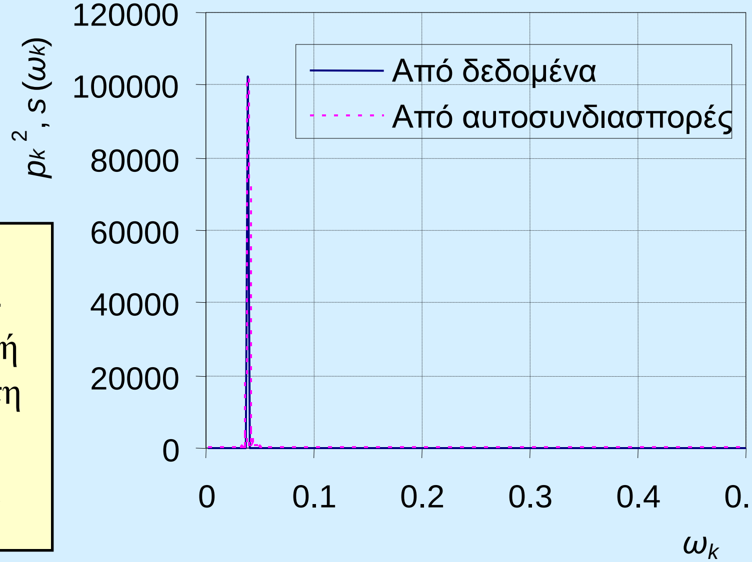
Παράμετροι μοντέλου	
Μέση στάθμη σήματος	100
Πλάτος σήματος	20
Συχνότητα αρμονικής	0.039
Μέγεθος δείγματος	512

Σημείωση: Το μοντέλο δεν είναι στοχαστικό αλλά ντετερμινιστικό και κατά συνέπεια δεν έχει νόημα η θεωρητική συνάρτηση αυτοσυνδιασποράς



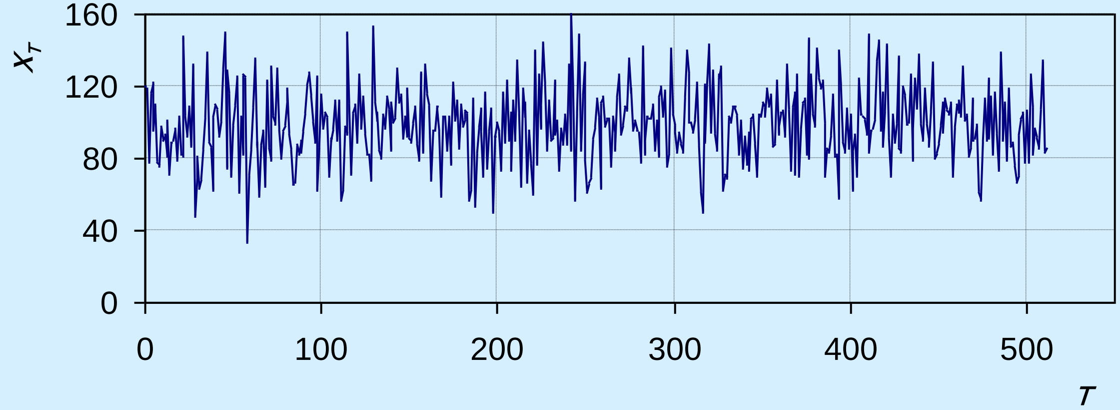


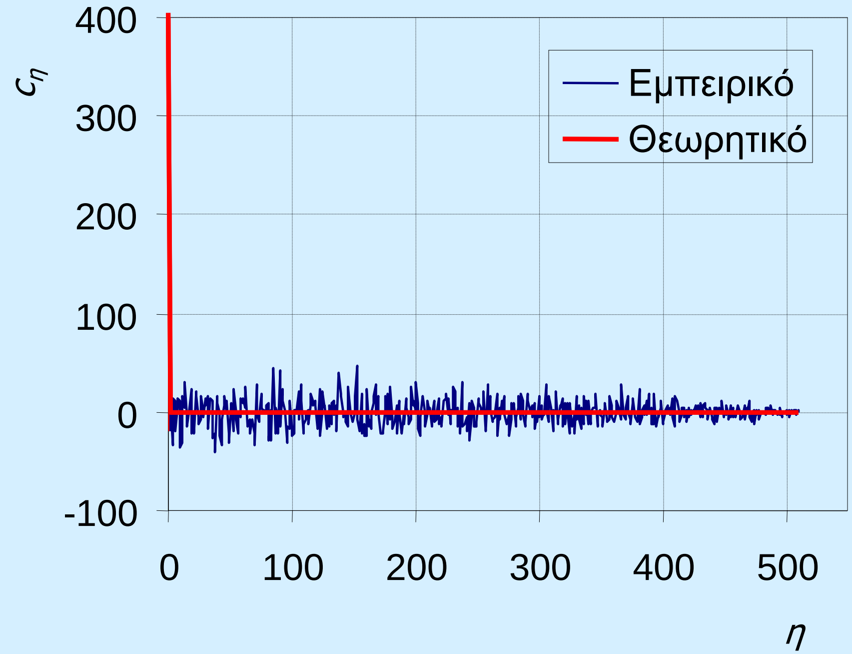
Η μείωση της αυτοσυνδιασπο-ράς είναι τεχνητή και οφείλεται στη μεροληψία που εισάγει η τυπική εκτιμήτρια

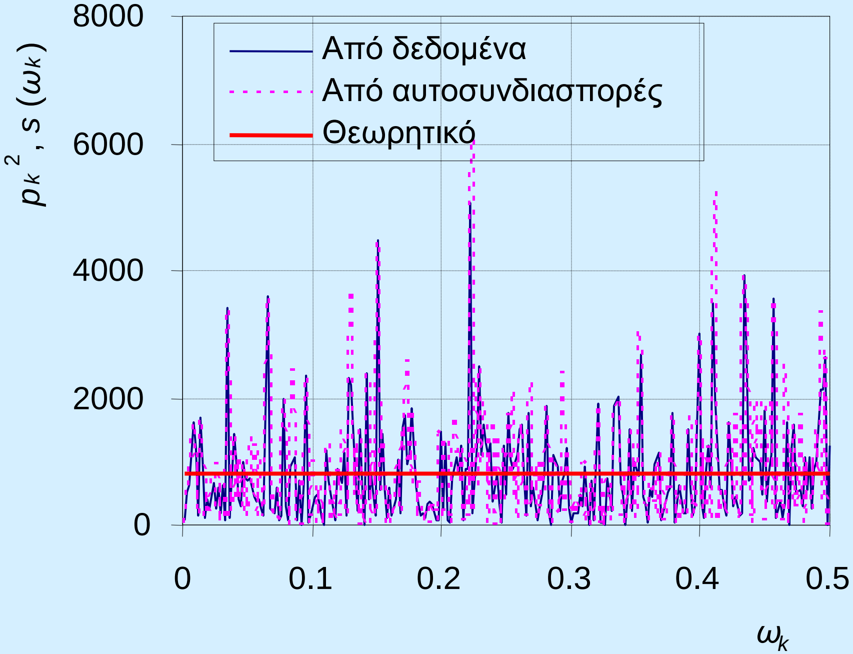


2. Λευκός θόρυβος

Παράμετροι μοντέλου	
Θεωρητική μέση τιμή	100
Θεωρητική τυπική απόκλιση	20
Μέγεθος δείγματος	512



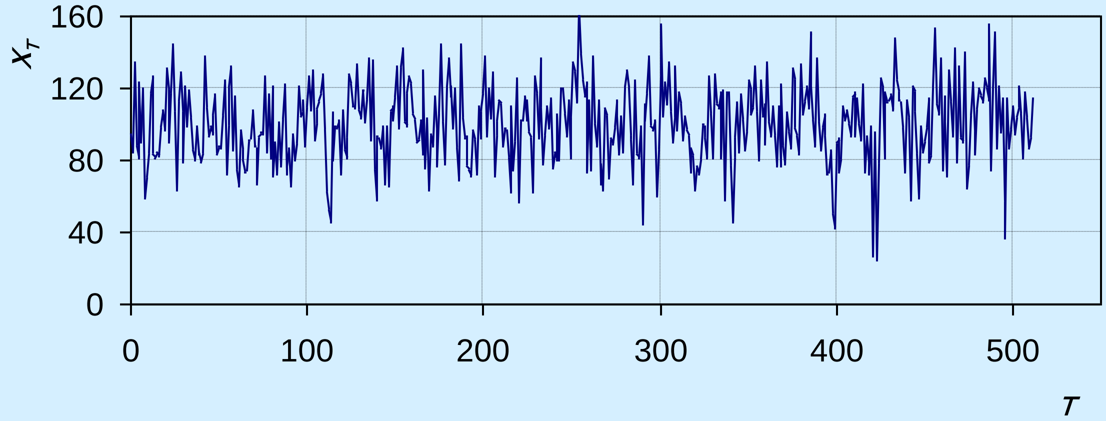


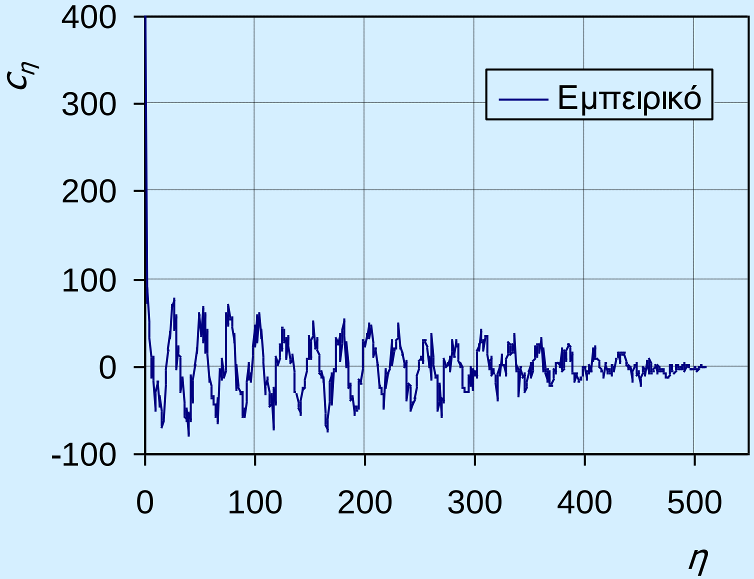


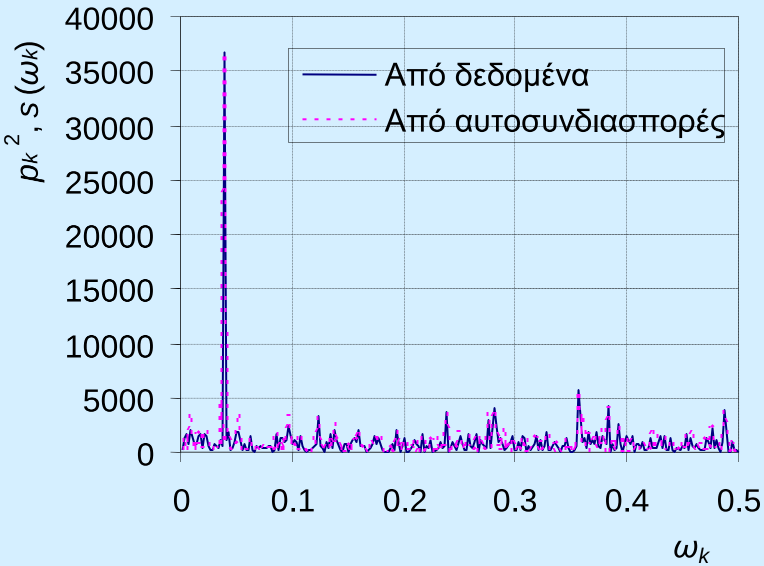
3. Περιοδικό σήμα με λευκό θόρυβο

Παράμετροι μοντέλου	
Μέση στάθμη σήματος	100
Πλάτος σήματος	10
Συχνότητα αρμονικής	0.039
Τυπική απόκλιση θορύβου	20
Μέγεθος δείγματος	512

Σημείωση: Το μοντέλο είναι κυκλοστάσιμο και έτσι η θεωρητική συνάρτηση αυτοσυνδιασποράς είναι περιοδική συνάρτηση του χρόνου

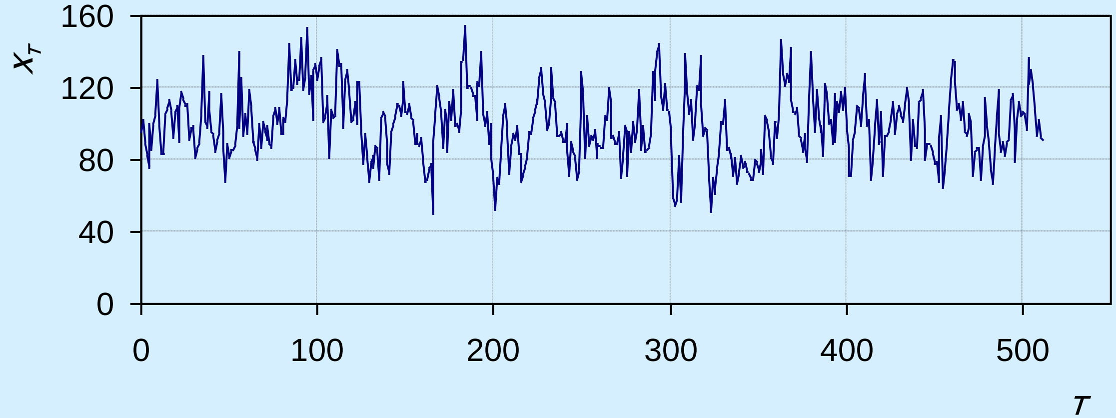


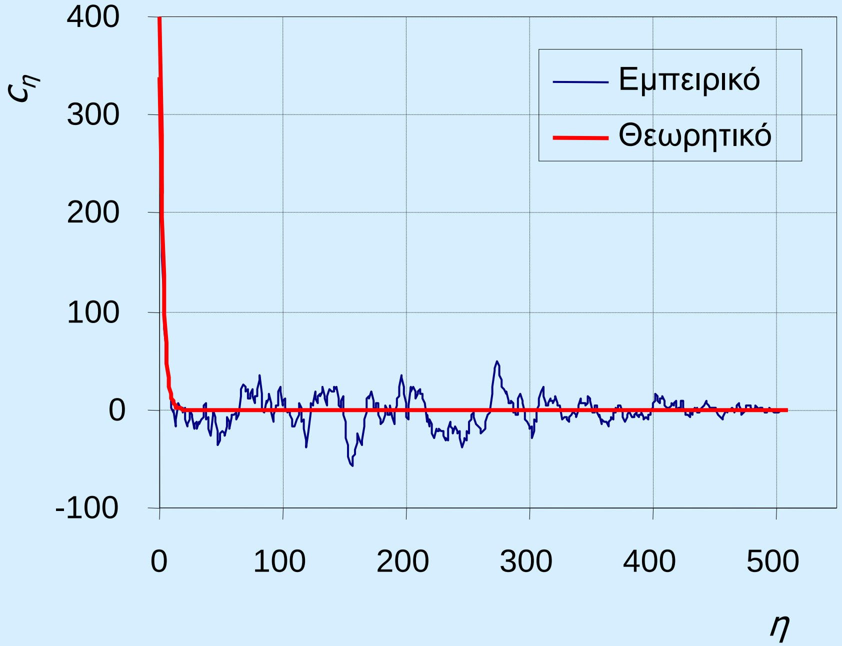


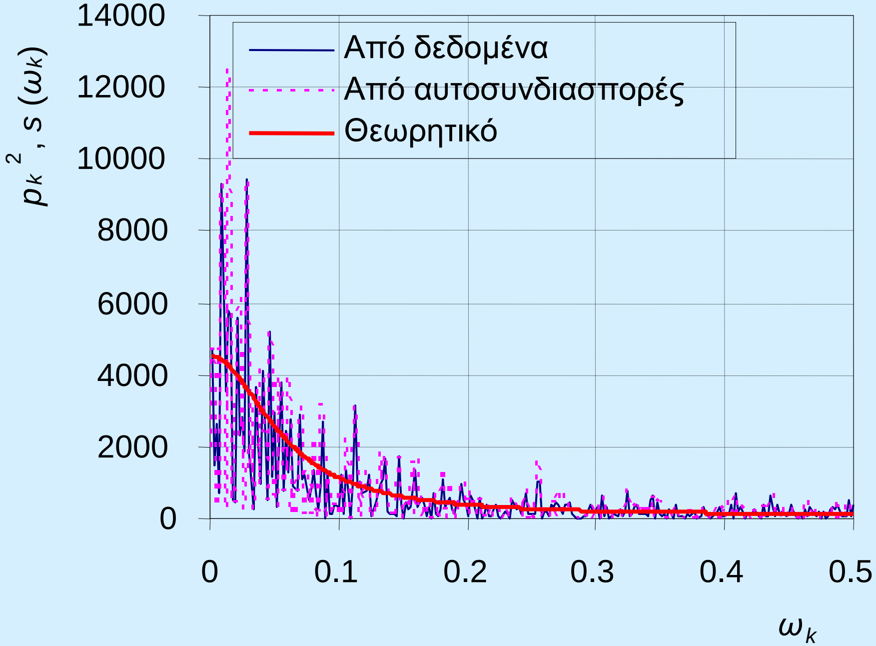


4. Μοντέλο Μαρκόφ (βραχυπρόθεσμης εξάρτησης)

Παράμετροι μοντέλου	
Θεωρητική μέση τιμή	100
Θεωρητική τυπική απόκλιση	20
Θεωρητικός συντελεστής αυτοσυσχέτισης τάξης 1	0.7
Μέγεθος δείγματος	512

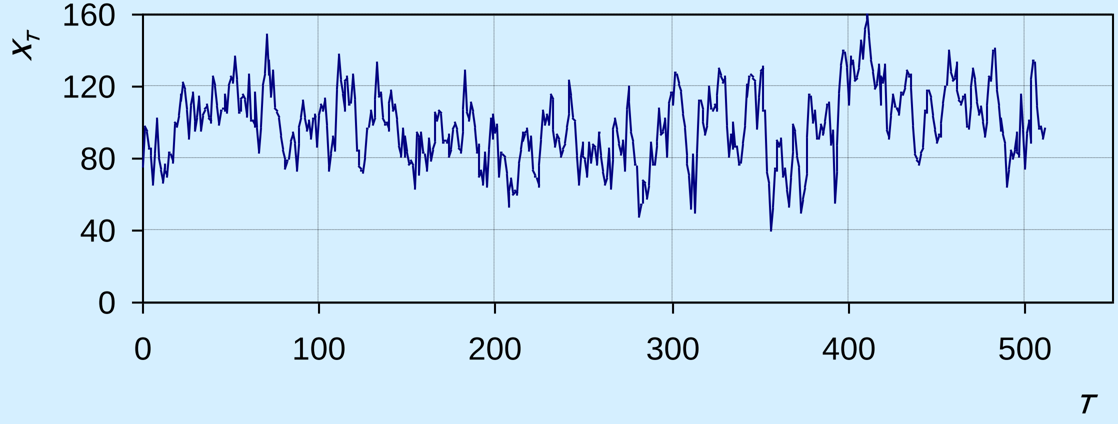


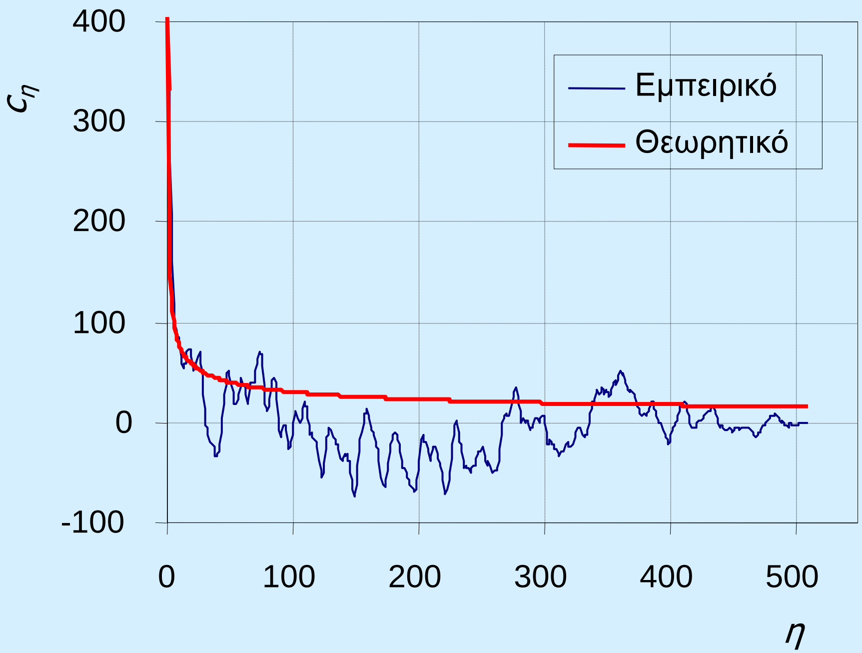


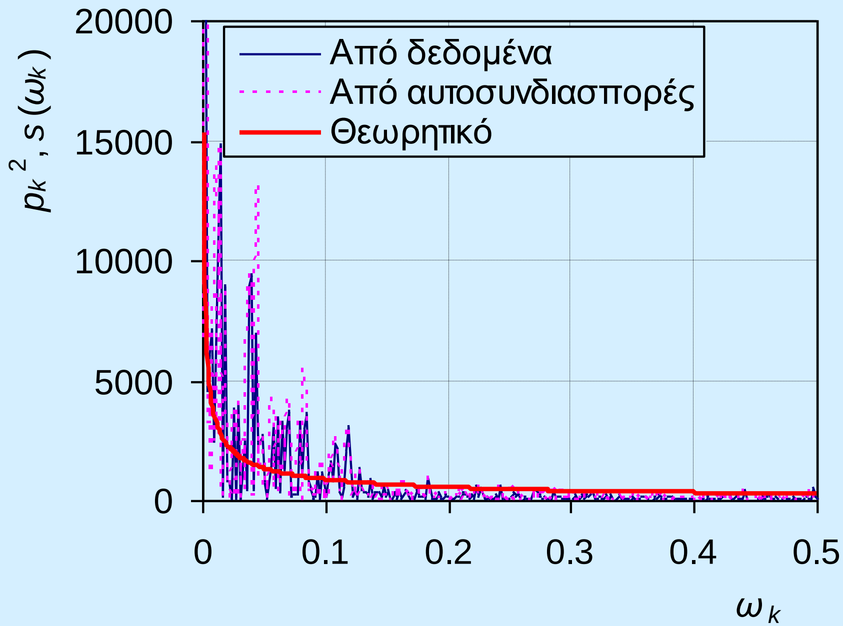


5. Μοντέλο Hurst-Kolmogorov (μακροπρόθεσμης εμμονής)

Παράμετροι μοντέλου	
Θεωρητική μέση τιμή	100
Θεωρητική τυπική απόκλιση	20
Θεωρητικός συντελεστής Hurst	0.7
Μέγεθος δείγματος	512







Εφαρμογή

1. Να γίνει φασματική ανάλυση (α) μιας συνθετικής χρονοσειράς με δύο αρμονικές χωρίς θόρυβο (β) μιας συνθετικής χρονοσειράς που προκύπτει ως κινούμενος μέσος 10 ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών
2. Να γίνει φασματική ανάλυση των ετήσιων και μηνιαίων χρονοσειρών βροχής στην Αλίαρτο και απορροής στη θέση Διώρυγα Καρδίτσας του Βοιωτικού Κηφισού.
3. Να γραφεί έκθεση με σχολιασμό των πιο πάνω αναλύσεων.