

Spektralanalyse

Jürgen Grieser

26.09.1997

Inhaltsverzeichnis

1	Spektrale Dichte	2
1.1	Berechnung der spektralen Dichte mittels Fourierdarstellung .	3
1.1.1	Aliasing	4
1.1.2	Der Einfluß der Verwendung von Mittelwerten	7
1.2	Warum berechnet man Periodogramme?	9
1.3	Vom Periodogramm zum Spektralschätzer	10
1.3.1	Wie schlecht ist das Periodogramm?	10
1.3.2	Verlässlichere Spektralschätzer	11
1.4	Periodogramm bei nichtäquidistanten Stützstellen	14
2	Anwendungen	15
2.1	Verschiedene Darstellungsformen	15
2.2	Harmonische Analyse	16
2.2.1	Suche nach beliebigen Frequenzen	16
2.2.2	Ist der höchste Peak im Periodogramm eine Periodizität im weißen Rauschen?	17
2.3	Test auf White-Noise	17
2.4	Test auf Markov-Rauschen	19

Kapitel 1

Spektrale Dichte

Die spektrale Dichte gibt an, welcher Anteil der Varianz einer beobachteten Zeitreihe durch Schwingungen mit bestimmten Frequenzen begründet werden kann. Deshalb ist die Herleitung über die Fourierdarstellung einer Zeitreihe wohl adäquat, auch wenn oft andere Wege beschritten werden (z.B. über die Autokorrelationsfunktion, weshalb die Spektralanalyse auch ASA = Autokorrelations-Spektral-Analyse genannt wird, um sie von anderen ähnlichen Analysen, mit gleichem Ziel, zu unterscheiden). Die Zerlegung einer Zeitreihe in ein System von orthogonalen Funktionen ist immer möglich, aber nicht immer sinnvoll. Noch fraglicher ist es, ob es sinnvoll ist gerade ein bestimmtes fest vorgegebenes System von Funktionen zu wählen, nämlich Sinus- und Cosinus-Funktionen. So kann man zwar einen linearen Trend in harmonische Funktionen zerlegen (und als Überlagerung solcher darstellen), jedoch macht dies sicher weniger Sinn, als den linearen Trend explizit als solchen zu betrachten und ihn am Ende gar von den zyklischen Komponenten zu unterscheiden, die man spektral analysieren will. Dies entspricht im Ansatz dem klassischen Zeitreihenmodell, das besagt, daß eine Zeitreihe aus mehreren Komponenten additiv zusammengesetzt ist:

$$X_t = G_t + Z_t + R_t \quad (1.1)$$

mit:

- X_t = Zeitreihe,
- G_t = Glatte Komponente,
- Z_t = Zyklische Komponente und
- R_t = Rauschanteil.

Betrachtet man eine Zeitreihe unter diesem Gesichtspunkt, so dient die Spektralanalyse dem Ziel zyklisches Verhalten zu finden und zu analysieren. Die glatte Komponente sollte dann vorher herausgefiltert werden, während der Rauschanteil dann übrigbleibt. Auch dessen spektrale Eigenschaften können

mit der spektralen Varianzanalyse untersucht werden. Um den glatten Anteil aus einer Zeitreihe herauszufiltern, hat man zahlreiche Möglichkeiten, z.B.:

- Hochpaßfiltern.
- explizit erklären, durch ein Modell mit Einflußgrößen (z.B. physikalisch, aber auch statistisch (Regressionsmodell)).
- Eine Funktion (z.B. ein Polynom) optimal anpassen und abziehen.
- Splines anpassen und abziehen.
- linear detrenden (global).
- lokale Differenzen verwenden (d.h. die Reihe $y_t = x_t - x_{t-1}$ analysieren).

All das, was man vor der Spektralanalyse mit den Daten machen kann, nennt man Konditionierung. Man kann dabei schon ziemlich viel Unsinn machen; es kann aber auch sehr unsinnig, sein die Daten nicht aufzuarbeiten. Einen wichtigen Unterschied sollte man sich jedoch immer klar machen. Das Spektrum, das man berechnet ist zunächst das Spektrum der Zeitreihe – keinesfalls das Spektrum des die Zeitreihe erzeugenden Prozesses. Letzteres aus dem ersten zu schließen ist das Problem der Analyse. Denn die interessante Frage ist nicht „wie sieht die Zeitreihe aus“, sondern „warum sieht sie so aus“. Doch zunächst zur Berechnung des Stichprobenspektrums.

1.1 Berechnung der spektralen Dichte mittels Fourierdarstellung

Es wird nun von einer Zeitreihe $x(n)$ mit den N Werten $n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ ausgegangen. Diese Zeitreihe überdeckt demnach den Zeitraum von $N - 1$ mal der Zeitschrittlänge. Die Fourier-Darstellung der Zeitreihe ist

$$x(n) = \sum_{k=0}^{N-1} F(k) \exp\left(\frac{i2\pi nk}{N}\right) \quad (1.2)$$

mit:

- n = Zeitschrittzähler
- k = Wellenzahl
- = 0, entspricht dem Mittelwert
- $F(k)$ = Fourierkomponente bei der Wellenzahl k
- $\frac{k}{N}$ = f = Frequenz
- $\frac{N}{k}$ = τ = Periode.

Sehr handlich kann man die Fourier-Stützstellen als Wellenzahlen ausdrücken. Die N Stützstellen sind dann äquidistant von $k = 0$ bis $k = N - 1$ durchgezählt. Die Fourier-Frequenzen folgen daraus. Um nun die Fourier-Komponenten zu berechnen, macht man die inverse Transformation von Glg. (1.2):

$$F(k) = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{x(n)}{N} \exp\left(\frac{-i2\pi nk}{N}\right) \quad (1.3)$$

also:

$$F(k) = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{x(n)}{N} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N}\right) - i \sum_{n=0}^{N-1} \frac{x(n)}{N} \sin\left(\frac{2\pi nk}{N}\right). \quad (1.4)$$

Dabei ist $F(0)$ der Mittelwert \bar{x} der Zeitreihe. Die Fourier-Darstellung der Zeitreihe kann nun verwendet werden, um deren Varianz auszudrücken, denn es gilt der wichtige Zusammenhang:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (x(n) - \bar{x})^2 = \sum_{k=1}^{N-1} F(k)^2 = \sum_{k=1}^{N-1} \sigma^2(k). \quad (1.5)$$

Dabei ist zu beachten, daß die Summe über die Fourier-Komponenten bei 1 beginnt, da der Mittelwert (Die Schwingung mit der Wellenzahl 0) nicht zur Varianz beiträgt. $\sigma^2(k)$ ist die spektrale Varianz der untersuchten Zeitreihe bei der Wellenzahl k und setzt sich zusammen aus:

$$\sigma^2(k) = F(k)^2 = \operatorname{Re}(F(k))^2 + \operatorname{Im}(F(k))^2. \quad (1.6)$$

Trägt man $\sigma^2(k)$ gegen k auf, so erhält man das Periodogramm bzw. das geschätzte Varianzspektrum. Für eine Zeitreihe der Länge N besteht es theoretisch aus $N - 1$ Werten.

Tabelle 1.1 zeigt die Ergebnisse eines einfachen Rechenbeispiels.

1.1.1 Aliasing

Betrachtet man die letzte Spalte von Tabelle 1.1 genauer, so sieht man, daß bei den Frequenzen $\frac{(4+j)}{8}$ das konjugiert Komplexe zu den Werten bei den Frequenzen $\frac{(4-j)}{8}$ steht. Dies ist kein Zufall. Da die Beispielzeitreihe aus 8 Werten besteht, kann die Fourier-Darstellung nicht aus mehr Werten bestehen (da die Fourier-Frequenzen orthogonal sind; hätte jede der 8 Fourier-Komponenten Real- und Imaginärteil, und wären diese unabhängig, ergäbe das 16 Informationen). Man kann nun schließen, daß für Fourier-Frequenzen, die größer sind als $\frac{1}{2}$, keine neue Information ins Spiel kommt. Wie kommt das?

Um eine Schwingung abzutasten benötigt man mindestens zwei Meßpunkte pro Periode. Hat man in seiner Zeitreihe nun Schwingungen, die hochfrequenter sind als eine Schwingung pro zwei Meßpunkte, d.h. ($f > \frac{1}{2}$) so

Tabelle 1.1: Ein einfaches Beispiel einer Fourier-Zerlegung. Die ersten zwei Spalten geben die Reihe in der Zeitdomäne an, die anderen beiden Spalten in der Frequenzdomäne.

n	$x(n)$	f	$F(f)$
0	8	$\frac{0}{8}$	7
1	9	$\frac{1}{8}$	$.28 - 1.03i$
2	9	$\frac{2}{8}$.5
3	6	$\frac{3}{8}$	$-.78 - .03i$
4	10	$\frac{4}{8}$	1.
5	3	$\frac{5}{8}$	$-.78 + .03i$
6	5	$\frac{6}{8}$.5
7	6	$\frac{7}{8}$	$.28 + 1.03i$

wird diese Schwingung zwar registriert, aber deren Frequenz wird mißgedeutet. Diese Frequenzmißdeutung heißt Aliasing. Die Frequenz, die die noch aufgelösten von den unaufgelösten Schwingungen trennt, heißt Nyquist-Frequenz $f_N = \frac{1}{2}$. Nun kann die Fourier-Zerlegung nicht zwischen Schwingungen der Frequenz $\frac{(\frac{N}{2}+j)}{N}$ und $\frac{(\frac{N}{2}-j)}{N}$ unterscheiden. Deshalb erhalten beide Frequenzen den gleichen Betrag, sind aber konjugiert komplex. Es ist zu beachten, daß dieses Aliasing nur für Perioden zwischen 1 und N gilt, denn nur solche werden überhaupt von der Fourier-Zerlegung erfaßt. Was mit Schwingungen bei Perioden kleiner 1 passiert, wird weiter unten besprochen. Zunächst stellt sich die Frage, welche Schwingung durch die Fourieranalyse auf welche gefaltet wird. Es werden Schwingungen mit Wellenzahlen zwischen $\frac{N}{2}$ und N auf Wellenzahlen kleiner $\frac{N}{2}$ gefaltet. Dadurch wird eine Schwingung der Wellenzahl k als eine Schwingung der Wellenzahl k_{alias} interpretiert. Es gilt:

$$k = \frac{N}{2} + j \quad \longrightarrow \quad k_{alias} = \frac{N}{2} - j. \quad (1.7)$$

Daraus folgen die Zusammenhänge der Fehlinterpretation:

$$\begin{aligned} k_{alias}(k) &= N - k, \text{ für } \frac{N}{2} < k \leq N \\ f_{alias}(f) &= 1 - f, \text{ für } \frac{1}{2} < f \leq 1 \\ \tau_{alias}(\tau) &= \frac{\tau}{\tau - 1}, \text{ für } 1 < \tau \leq 2. \end{aligned}$$

Das Spektrum, das nur an den Wellenzahlen $k < \frac{N}{2}$ dargestellt wird, besteht immer aus dem Mittel von dem Frequenzanteil bei der dargestellten und der dazugehörigen Aliasing-Wellenzahl. Da dem so ist, scheint es nicht möglich das Spektrum eindeutig zu interpretieren. Tatsächlich ist das auch nur möglich, wenn man die Spektralanteile der Alias-Wellenzahlen unterdrückt (herausfiltert), oder weiß, daß solche „hohen“ Frequenzen nicht auftreten. Die hochfrequenten Anteile (mit $f > f_N$) kann man nur herausfiltern, wenn man sie auch gemessen hat, d.h. man muß eine deutlich höhere (z.B. Faktor 10) Abtastrate haben und die so erzeugte Zeitreihe tiefpaßfiltern. Erst dann kann man ein Aliasing-freies Periodogramm berechnen. Man weiß dann, daß der spektrale Varianzanteil bei Schwingungen mit $f > f_N$ aus der Fourier-Zerlegung stammt, denn aus der Zeitreihe ist er herausgefiltert. Deshalb muß der durch die Fourier-Zerlegung in den hohen Spektralbereich gefaltete Anteil wieder zurückgefaltet werden. Dies geschieht, indem man alle Varianzanteile bei $f < f_N$ verdoppelt. Man erhält somit das Varianzspektrum der Zeitreihe. Teilt man dieses durch die Gesamtvarianz, so erhält man die spektrale Varianzdichte $I(f) = \frac{\sigma(f)^2}{\sigma^2}$.

Für das Beispiel aus Tabelle 1.1 bedeutet das, daß man wissen muß, daß Frequenzen mit $f > f_N$ nicht vorkommen. Damit ist vom Spektrum nur der auswertbare Teil mit $f \leq f_N = \frac{4}{8}$ von Interesse. Da die Wellenzahl $k = 0$ den Mittelwert repräsentiert, bleiben also nur noch die Wellenzahlen 1 bis 4 auswertbar (4 ist in diesem Fall die Nyquist-Wellenzahl), von denen die spektralen Varianzen von $k = 1$ bis $k = 3$ verdoppelt werden (man beachte, das bei ungeradzahligter Zeitreihenlänge die Nyquistfrequenz nicht auf eine Stützstelle fällt. Dann muß der zugehörige Wert auch verdoppelt werden). Damit folgt für die spektralen Varianzanteile aus dem Beispiel:

f	$ F(f) ^2$	Nach Rückfaltung	$I(f)$
$\frac{1}{8}$	1.14	2.28	.456
$\frac{2}{8}$.25	.5	.1
$\frac{3}{8}$.61	1.22	.244
$\frac{4}{8}$	1.	1.	.2
$\frac{5}{8}$.61		
$\frac{6}{8}$.25		
$\frac{7}{8}$	1.14		
Summe=	5.0	5.0	1.0

Die kleinste durch die Fourier-Zerlegung aufgelöste (wenn auch mißgedeutete) Periode ist knapp über 1. Was aber ist mit noch hochfrequenten Schwingungen, deren Perioden also kleiner als eins sind. Diese können im

Spektrum nicht vorkommen. Auch solche sehr hohen Frequenzen gehen zwar nicht explizit, aber jedenfalls fehlgedeutet in das Spektrum ein. Ein Beispiel kann dies verdeutlichen. Eine Schwingung habe eine Periode von $.8$ der Abtastrate. Zum Zeitpunkt 0 beginne auch die Schwingung. Dann werden zum Zeitpunkt 1 fünf Viertel der Schwingung stattgefunden haben, was wegen der Abtastung erscheint wie ein Viertel. Zum Zeitpunkt 2 haben 2.5 Schwingungen stattgefunden, was wie eine halbe Schwingung erscheint. Wie man sich weiter überlegen kann, wird die Schwingung der Periode $.8$ als Schwingung der Periode 4 fehlinterpretiert. Dieser Effekt liegt nicht an der Fourier-Zerlegung, ist also vom oben besprochenen Aliasing zu unterscheiden. Zumindest für $.5 < \tau < 1$ folgt dann der fehlinterpretierte Wert τ^* mit

$$\tau^* = \frac{\tau}{1 - \tau}. \quad (1.8)$$

Die einfachste Art dieses Problem zu umgehen, ist die Verwendung von Mittelwerten, die die hohen Frequenzen herausfiltern. Die beliebten einfachen Intervallmittel (Jahresmittel, Monatsmittel, Tagesmittel) haben allerdings nicht den angenehmsten Einfluß auf das Spektrum.

1.1.2 Der Einfluß der Verwendung von Mittelwerten

Im folgenden wird eine spezielle Art der zeitlichen Mittelung weiter untersucht. Diese ist zwar nicht die für Spektralanalysen sinnvollste Art der Mittelung, aber immerhin die am häufigsten verwendete. Es handelt sich dabei um die Untersuchung von Zeitreihen von Zeitmitteln. D.h. es wird nicht zu bestimmten Zeitpunkten ein Meßwert aufgenommen und daraus ergibt sich die Zeitreihe, sondern es wird immer über konstante Zeiträume gemittelt. Die so entstehenden Zeitreihen sind dann z.B. Zeitreihen von Jahres-, Monats- oder Tagesmittelwerten. Um den Einfluß dieser Mittelung zu untersuchen, werden harmonische Schwingungen der Amplitude A_0 und Phase ϕ_0 betrachtet:

$$X(t) = A_0 \sin\left(\frac{2\pi t}{\tau} + \phi_0\right). \quad (1.9)$$

Tastet man diese Funktion in Abständen n ab, so erhält man die Folge:

$$x_n = A_0 \sin\left(\frac{2\pi n}{\tau} + \phi_0\right). \quad (1.10)$$

Für die Folge der Mittelwerte über Intervalle der Länge 1 gilt:

$$\begin{aligned} \bar{x}_n &= \int_n^{n+1} A_0 \sin\left(\frac{2\pi t}{\tau} + \phi_0\right) dt \\ &= -A_0 \frac{\tau}{2\pi} \left[\cos\left(\frac{2\pi n}{\tau} + \phi_0\right) - \cos\left(\frac{2\pi(n+1)}{\tau} + \phi_0\right) \right]. \end{aligned}$$

Nun ist $\cos(x) - \cos(y) = -2 \sin\left(\frac{x}{2} + \frac{y}{2}\right) \sin\left(\frac{x}{2} - \frac{y}{2}\right)$ und deshalb folgt:

$$\bar{x}_n = A_0 \frac{\tau}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{\tau}\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{\tau} + \frac{\pi}{\tau} + \phi_0\right). \quad (1.11)$$

Demnach führt der Filter (Verwendung von Mittelwertzeitreihen) zur Amplitudendämpfung $a(\tau)$ und Phasendrehung $\Phi(\tau)$ mit:

$$a(\tau) = \frac{\tau}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{\tau}\right), \quad (1.12)$$

$$\Phi(\tau) = \frac{\pi}{\tau}. \quad (1.13)$$

Man beachte, daß für große Perioden τ die Phasenverschiebung gegen null und die Amplitudendämpfung gegen eins geht, das heißt niederfrequente Schwingungen werden von dem Filter nicht verändert. Für kleine Werte von τ wird $\sin\left(\frac{\pi}{\tau}\right)$ immer schneller alternieren. Andererseits wird $\frac{\tau}{\pi}$ immer kleiner werden. Daraus folgt, daß $a(\tau)$ für kleine τ alternierend gegen null konvergiert. Wie man sich leicht klar machen kann, werden die Schwingungen mit $\tau = \frac{1}{n}$ exakt weggefiltert. Für dazwischenliegende Werte von τ sind die Amplituden durch die Einhüllende der Amplitudendämpfung $|\frac{\tau}{\pi}|$ begrenzt. Nun interessiert nicht die Amplitudendämpfung des Filters, sondern der dadurch hervorgerufene Einfluß auf das Varianzspektrum. Dieser Einfluß wird im Folgenden berechnet. Zunächst ist die Varianz gegeben durch:

$$\sigma^2 = \frac{1}{T} \int_0^T (x(t) - \bar{x})^2 dt \quad (1.14)$$

Dabei sei T der Beobachtungszeitraum und $x(t)$ eine harmonische Schwingung gemäß Glg. (1.9). Unter der Annahme $\phi_0 = 0$ vereinfacht sich der Ausdruck für die Varianz der harmonischen Schwingung zu:

$$\sigma^2 = \frac{A^2}{T} \int_0^T \sin^2\left(\frac{2\pi t}{\tau}\right) dt \quad (1.15)$$

mit der Lösung

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \frac{A^2}{T} \left[\frac{1}{2}t - \frac{1}{4\left(\frac{2\pi}{\tau}\right)} \sin\left(\frac{4\pi t}{\tau}\right) \right]_0^T \\ &= \frac{A^2}{2} - \frac{A^2\tau}{8\pi T} \sin\left(\frac{4\pi T}{\tau}\right) < \frac{A^2}{2} \left(1 \pm \frac{1}{4\pi}\right). \end{aligned}$$

Die Ungleichung gilt, da nur Perioden kleiner als der Meßzeitraum aufgelöst werden. Mit $T = \frac{n}{4}\tau$ (und n aus den natürlichen Zahlen) folgt exakt

$$\sigma^2 = \frac{1}{2}A^2. \quad (1.16)$$

Die Varianz einer konkreten Schwingung hängt erst durch die Einführung des Filters von der Periode ab. Dann nämlich gilt $A = a(\tau)A_0$ und somit für die spektrale Varianz der gefilterten Reihe:

$$\sigma^2(\tau) = \frac{1}{2}a^2(\tau)A_0^2 = a^2(\tau)\sigma^2 \quad (1.17)$$

Will man also aus dem berechneten Spektrum der Mittelwertzeitreihe auf das Spektrum der zugrundeliegenden Zeitreihe schließen, so muß man dieses mit $a^{-2}(\tau)$ multiplizieren. Dabei gilt für $\tau > 2$ (d.h. Frequenzen kleiner als die Nyquist-Frequenz) in guter Näherung (Fehler kleiner .5 %) die abgebrochene Reihenentwicklung:

$$a(\tau) \approx 1 - \frac{\pi^2}{6\tau^2} + \frac{\pi^4}{120\tau^4} \quad (1.18)$$

Der Einfluß des Filters auf das Spektrum ist in Abbildung 1.1 dargestellt. In Tabelle 1.2 sind einige Zahlenwerte zusammengefaßt. Wie man sieht, ist der Filter keineswegs optimal, denn

- weder werden Schwingungen mit Perioden größer 2 nicht beeinflusst,
- noch werden Schwingungen mit Perioden kleiner 2 vollständig weggedämpft.

Gerade zwischen $\tau = 1$ und $\tau = 2$ bleibt noch bis zu 40% der Varianz der Schwingung erhalten und wird durch Aliasing in das Spektrum hineingefaltet. Es kann dann nicht mehr von dem dortigen Spektralanteil unterschieden werden. Schwingungen mit Perioden kleiner 1 werden fast vollständig weggefiltert, so daß höchstens 4% von ihnen übrigbleiben und in das Spektrum einfließen.

1.2 Warum berechnet man Periodogramme?

Im allgemeinen ist es wenig interessant zu wissen, wie sich die Varianz einer gemessenen Zeitreihe auf die verschiedenen Frequenzen einer Fourierdarstellung der Zeitreihe verteilt, wenn man nicht davon ausgeht, das die Zeitreihe die Realisation eines Prozesses ist, der durch ein bestimmtes Spektrum charakterisiert ist, über das man durch die Analyse des Zeitreihenspektrums Aufschluß erhält. Das bedeutet man berechnet Periodogramme um auf Prozeßspektren zu schließen, oder zu testen, ob ein Periodogramm überzufällig stark von einem vorgegebenen Prozeßspektrum abweicht. Man steht nun vor folgenden Fragen:

- Welche Prozesse können eindeutige Spektren hervorrufen?

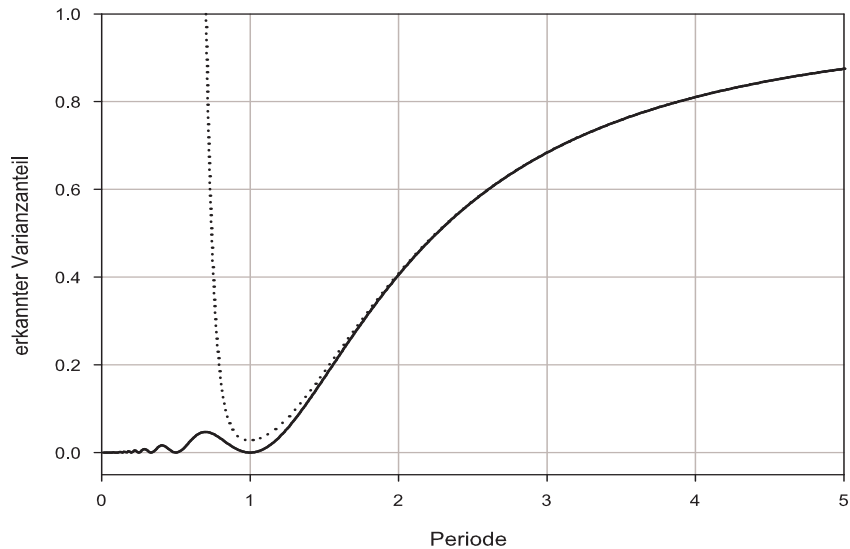


Abbildung 1.1: Vom Periodogramm erkannter Anteil der Varianz bei verschiedenen Perioden und einem Mittelungsintervall der Länge 1. Die Reihennäherung aus Glg. (1.18) ist gepunktet eingezeichnet.

- Wie sehen Spektren von bestimmten Prozessen aus?
- Wie bekommt man einen zuverlässigen Schätzer für den die Zeitreihe erzeugenden Prozeß?
- Wie testet man, ob im Spektrum etwas „interessantes“ zu sehen ist?

1.3 Vom Periodogramm zum Spektralschätzer

Hat man sich bewußt gemacht, daß der der Zeitreihe unterliegende Prozeß stationär ist, so kann man versuchen dessen Spektrum aus dem Periodogramm zu schließen.

1.3.1 Wie schlecht ist das Periodogramm?

Sehr schlecht! Das Periodogramm ist als Schätzer für das Spektrum des die Zeitreihe erzeugenden Prozesses völlig ungeeignet. Dies liegt vor allem daran, das zwar der Erwartungswert des Periodogramms gegen das Prozeßspektrum konvergiert, wenn die beobachtete Zeitreihe beliebig lang wird, die Varianz des Schätzers aber immer von der gleichen Größenordnung wie

Tabelle 1.2: Wirkung der Verwendung von Mittelwerten.

τ	$a^2(\tau)$
.66	.0450
1	.0000
2	.4015
3	.6839
4	.8105
5	.8752
6	.9118
7	.9347
8	.9497
9	.9600
10	.9675
15	.9855

der Erwartungswert bleibt, unabhängig von der Länge der Zeitreihe. Eine Verlängerung der Zeitreihe bringt keine Verringerung der Varianz, da alle neu hinzukommende Information in die Verwendung von mehr Fourier-Stützstellen fließt, und somit keine zusätzliche Information zur Verringerung der Varianz an den einzelnen Stützstellen bleibt. Falls die Zeitreihe in dichteren Abständen gemessen wurde, bedeutet das eine Verschiebung der Nyquist-Frequenz, d.h. es werden neue Spektralanteile erfaßbar. Falls die Zeitreihe bei gleichbleibender Abtastrate erfaßt wurde (nur über einen längeren Zeitraum), bedeutet das eine dichtere Verteilung der gleichbleibend ungenauen Schätzwerte. Deshalb ist es dringend erforderlich verlässlichere Spektralschätzer zur Schätzung des der Zeitreihe zugrunde liegenden Prozeßspektrums zu suchen.

1.3.2 Verlässlichere Spektralschätzer

Im folgenden werden vier Möglichkeiten vorgestellt, mit denen man verlässlichere Spektralschätzer bekommt. Grundsätzlich wird davon ausgegangen, daß die glatte (für die Spektralanalyse störende) Komponente schon irgendwie aus der Zeitreihe herausgefiltert wurde.

Zerlegung der Zeitreihe in Subintervalle

Zerlegt man die Zeitreihe in m Intervalle der Länge $M = N/m$ und betrachtet diese als m Realisierungen des Prozesses, so erhält man m Schätzer der Spektraldichte. Deren Mittelwert ist um \sqrt{m} besser als der Einzelwert. Der

Preis, den man für diese Verbesserung des Schätzwertes zahlt, liegt in der Nichtberücksichtigung der tiefen Frequenzen. Man kann nun nur noch Perioden von 2 bis $\frac{N}{m}$ erfassen. Beispiel: Hat man eine Zeitreihe mit 128 Werten, so kann man

- 64 Perioden von 2 bis 128 auflösen, mit einem Fehler von der Größenordnung des Schätzers selbst, oder
- 32 Perioden von 2 bis 64 auflösen, mit einem Fehler von der Größenordnung $\sqrt{2}$ des Schätzers, oder z.B.
- 16 Perioden von 2 bis 32 auflösen, mit einem Fehler von der halben Größenordnung des Schätzers.

Data-Windowing

Der endliche Ausschnitt der Zeitreihe kann als Multiplikation der unendlichen Realisierung des Prozesses mit einem Datenfenster interpretiert werden. Dieses Datenfenster hat dann den Wert 1 im Untersuchungszeitraum und sonst den Wert null. Die Fourier-Zerlegung setzt nun die im Fenster sichtbare Datenreihe periodisch ins Unendliche fort. Dadurch entstehen Perioden, die nicht in der Meßreihe vorhanden sind. Das Problem wird als Leakage bezeichnet, weil man von einem Leck reden kann, das dazu führt, daß Varianz von bestimmten Frequenzen zu anderen Frequenzen fließt. Dieses Problem kann eingedämmt werden, wenn man nicht einfach ein Rechteckfenster über die Datenreihe legt, sondern ein Fenster, das an den Rändern sanft gegen null geht. Es gibt zahlreiche solcher Fensterfunktionen (mit denen die Zeitreihe einfach multipliziert werden kann; auch Taper genannt), die sich nicht sonderlich unterscheiden und von denen einige hier vorgestellt sind:

- Bell-Taper

$$w(n) = \begin{cases} \sin^2\left(5\pi\frac{n}{N}\right) & , \text{ mit } n < \frac{N}{10} \\ 1 & , \text{ sonst} \\ \sin^2\left(5\pi\frac{n}{N}\right) & , \text{ mit } n > \frac{9N}{10} \end{cases} \quad (1.19)$$

- Welch-Taper

$$w(n) = 1 - \left(\frac{n - .5N}{.5N}\right)^2, \text{ mit } n = 1, 2, \dots, N \quad (1.20)$$

- Hanning-Window

$$w(n) = \frac{1}{2} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) \right], \text{ mit } n = 1, 2, \dots, N \quad (1.21)$$

- Barlett-Taper

$$w(n) = 1 - \left| \frac{n - .5 N}{.5 N} \right|, \text{ mit } n = 1, 2, \dots, N \quad (1.22)$$

Spektralglätter

Einem einzelnen Wert des Spektrums sollte man nicht trauen. Dies liegt wesentlich daran, daß Schwingungen mit Frequenzen zwischen zwei Stützstellen mehr oder weniger gleichmäßig auf die benachbarten Stützstellen verteilt werden. Insbesondere wenn man sich für die grobe Form des Spektrums interessiert, d.h. nicht darauf aus ist, einzelne Peaks zu analysieren (d.h. nach speziellen Frequenzen sucht), ist es sinnvoll ein geglättetes Spektrum zu betrachten. Dabei haben sich insbesondere zwei Glätter durchgesetzt:

1. Hanning-Glätter I_H

$$\begin{aligned} I_H(0) &= .5(I(0) + I(1)) \\ I_H(k) &= .25(I_{k-1} + 2I_k + I_{k+1}), \text{ für } 0 < k < \frac{N}{2} \\ I_H\left(\frac{N}{2}\right) &= .5\left(I\left(\frac{N}{2}\right) + I\left(\frac{N}{2} - 1\right)\right) \end{aligned}$$

2. Daniell-Glätter $I_{D,B}$ der Breite $B = 2b + 1$

$$I_{D,B}(k) = \frac{1}{2b + 1} \sum_{j=-b}^b I(k - j). \quad (1.23)$$

Der erste Glätter berücksichtigt nur die beiden unmittelbaren Nachbarn einer Stützstelle, während der zweite beliebig ausgedehnt werden kann. Von den das Spektrum verzerrenden Eigenschaften her gesehen, ist der erste Schätzer besser, hat aber in der hier verwendeten ursprünglichen Form nicht die Freiheit beliebig ausgedehnt zu werden (Die Erweiterung wäre aber ohne Aufwand möglich). Als Notlösung könnte man den Hanning-Glätter mehrmals hintereinander anwenden. Der Nachteil des Daniell-Glätters ist, daß er zwei getrennte Peaks zu einem zusammenschmelzen läßt, wenn man ihn (zu) breit wählt.

Detrenden

Unabhängig von der Frage der Konditionierung der Ursprungsdaten ist es immer sinnvoll, den linearen Trend getrennt zu untersuchen. Er stellt immer ein genau definiertes spezielles rotes Spektrum dar. Deshalb stört er meist

bei der Analyse des Teils des Spektrums, der nicht vom Trend herrührt, insbesondere, wenn man das Zeitreihenspektrum als Realisation eines Prozeßspektrums eines stationären Prozesses interpretiert. Also sollte man meiner Meinung nach im Normalfall immer detrenden.

1.4 Periodogramm bei nichtäquidistanten Stützstellen

Es kann vorkommen, daß eine vorliegende Zeitreihe aus nicht äquidistant gemessenen Werten besteht (z.B. weil ein Meßgerät einen Eintrag sammelt, bis das Sammelgefäß irgendwann voll ist). Auch dann kann ein Periodogramm berechnet werden. Dies geschieht in diesem Fall einfach über eine Regressionsanpassung von Sinus- und Kosinusfunktionen. Man erhält so einen einfachen und anderen Zugang zum Stichprobenspektrum als auf Seite 3, indem man eine Kleinstquadrat-Anpassung macht. Dazu wählt man zunächst das System von anzupassenden Funktionen $m(t)$. Dies sind sinnvollerweise Sinus- und Kosinusfunktionen, bei den Fourier-Perioden:

$$m(t) = \beta_1(\lambda) \cos(2\pi\lambda t) + \beta_2(\lambda) \sin(2\pi\lambda t) \quad (1.24)$$

Diese werden an die mittelwertbereinigte Zeitreihe durch folgenden Ansatz optimal angepaßt:

$$\sum_t [(x(t) - \bar{x}) - m(t)]^2 = \min \quad (1.25)$$

Leitet man diesen nach $\beta_1(\lambda)$ und $\beta_2(\lambda)$ ab, so erhält man die beiden Bedingungsgleichungen für diese. Für das Periodogramm folgt dann (bei N durchnummerierten Werten):

$$I(\lambda) = \frac{1}{N} \left\{ \sum_{n=1}^N (x(t(n)) - \bar{x}) \cos(2\pi\lambda t(n)) \right\}^2 + \frac{1}{N} \left\{ \sum_{n=1}^N (x(t(n)) - \bar{x}) \sin(2\pi\lambda t(n)) \right\}^2 \quad (1.26)$$

Kapitel 2

Anwendungen

Das Hauptproblem der Spektralanalyse ist die Frage

„**Wie interpretiere ich ein geschätztes Spektrum?**“

Es gibt dabei so viele Möglichkeiten etwas fehl-, über- oder unterzuinterpretieren, das J.W. Tukey gesagt haben soll, daß das Periodogramm ohne Übertreibung als diejenige Statistik angesehen werden kann, die in der Geschichte der Wissenschaften den größten Schaden angerichtet hat. Also Vorsicht! Hier sind einige Versuche von Anwendungen beschrieben.

2.1 Verschiedene Darstellungsformen

Zeichnet man $I(\lambda)$ gegen λ an den Fourier-Stützstellen auf, so erkennt man sehr wenig, da die meisten Stützstellen bei relativ kleinen Werten von λ liegen. Hat man z.B. eine Zeitreihe von $N = 100$ Werten, so sind die Fourier-Perioden gegeben durch die Folge $100, 50, 100/3, 25, 20, \dots$. Man sieht, daß 95% der Werte auf einem Fünftel des Spektrums zusammengeknäult sind, während die restlichen vier Fünftel nur von fünf Fourierstützstellen überdeckt werden. Um das Bild etwas zu entzerren, kann $I(\lambda)$ gegen $\log \lambda$ aufgetragen werden. Das aber hat den Nachteil, daß die Fläche unter dem Spektrum zwischen zwei beliebigen Perioden nicht mehr proportional zum Varianzanteil in diesem Teil des Spektrums ist. Dies ist aber eine sehr angenehme Eigenschaft. Das Varianzspektrum ist nämlich eigentlich ein Dichtespektrum, so daß das Integral (bzw. hier im diskreten Fall die Summe) über einen Teil des Spektrums der Varianz in diesem Frequenzband entspricht. Der Schätzer für dieses Integral wird übrigens zunehmend besser, je breiter das Band ist. Um trotz der Verzerrung die Flächentreue zu erhalten, muß folgende Integration unverändert bleiben:

$$\sigma^2 = \int \sigma^2(\lambda) d\lambda \quad (2.1)$$

Dies ist z.B. erfüllt für:

$$\sigma^2(\lambda)d\lambda = \lambda \ln(10)\sigma^2(\lambda)d\log_{10} \lambda \quad (2.2)$$

denn es gilt:

$$\frac{d\log_{10} \lambda}{d\lambda} = \frac{1}{\lambda \ln(10)}. \quad (2.3)$$

Der Nachteil, den man sich mit dem Erhalt der Flächentreue einhandelt, ist der, daß Peaks durch die Transformation verschoben werden können. Dies sollte man auf keinen Fall aus den Augen verlieren, wenn man Peaks beurteilen will (wohlgemerkt: einzelne Peaks sind etwas sehr unsicheres, Flächen unter mehreren benachbarten Peaks sind viel genauer). Natürlich sind noch verschiedene andere Darstellungsformen möglich, z.B. eine log-log-Darstellung, die nicht flächentreu ist.

2.2 Harmonische Analyse

Die harmonische Analyse basiert auf der Modellvorstellung, daß die beobachtete Zeitreihe eine Realisation des folgenden Modells ist:

$$X_t = \sum_{i=1}^m [A_i \cos(2\pi\omega_i t) + B_i \sin(2\pi\omega_i t)] + \varepsilon_t. \quad (2.4)$$

Das ist ein Prozeß, der aus der Einbettung eines stationären und sehr regelmäßigen (nämlich zumindest quasiperiodischen) Signals mit drei m Freiheitsgraden (A_i, B_i und ω_i) in weißes Rauschen ε_t besteht. Vor der Anwendung der harmonischen Analyse, sollte man sich also klar machen, ob eine solche Modellvorstellung überhaupt sinnvoll ist. Meist ist dies nur bei sehr reinen Daten (d.h. hier z.B. astronomische Daten, oder Daten aus sehr sauber durchgeführten Laborexperimenten) der Fall. Andererseits kann man aber auch z.B. den anthropogen verursachten Wochengang der urbanen Aerosolkonzentration im (dann als weiß angenommenen) meteorologisch verursachten Hintergrundrauschen suchen.

2.2.1 Suche nach beliebigen Frequenzen

Die Spektralanalyse wurde bis hierhin unter der Annahme dargestellt, daß die Varianz der Zeitreihe auf verschiedene Frequenzen verteilt wird. Dann müssen die dazu auserwählten Frequenzen so gewählt sein, daß sie ein orthogonales System ergeben. Daher die Verwendung von Fourierfrequenzen. Diese Einschränkung kann man fallen lassen, wenn man nicht die spektrale Verteilung der Varianz sucht, sondern bestimmte herausragende Frequenzen.

Man kann dann entsprechend dem Regressionsansatz aus Abschnitt 1.4 beliebige Frequenzen anpassen. Damit ist es einerseits möglich das Spektrum nach extremen Peaks abzuscannen. Andererseits kann man damit nachsehen, wieviel Varianz bei einer bestimmten Frequenz zu finden ist (z.B. Wochengang). Findet man nun im Periodogramm besonders hohe Peaks, so muß man sich die Frage stellen ob sie tatsächlich überzufällig hoch sind oder nicht. Dazu wurden verschiedene Tests entwickelt. Hier wird nur ein Test vorgestellt. Die Frage lautet:

2.2.2 Ist der höchste Peak im Periodogramm eine Periodizität im weißen Rauschen?

Der Test stammt bereits von Schuster (1898) und wurde von Fisher (1929) exakt bewiesen. Die Zusammenfassung hier bezieht sich auf Schlittgen und Streitberg (1994).

Zunächst sucht man den höchsten vorkommenden Wert I_{max} im Spektrum und normiert diesen mit dem Mittelwert:

$$I_{max}^* = \frac{I_{max}}{\bar{I}} \quad (2.5)$$

mit:

$$\bar{I} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M I(\lambda_j) \quad (2.6)$$

und $M =$ Anzahl der Fourier-Stützstellen.

Nun ist

$$P = (1 - e^{-I_{max}^*})^M \quad (2.7)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß I_{max} nicht durch das unterstellte weiße Rauschen erzeugt ist, d.h. P ist die Wahrscheinlichkeit mit der die Nullhypothese (nämlich das in dem weißen Rauschen keine Periodizität steckt) abgelehnt wird.

Es ist dringend zu beachten, daß dieser Test nicht umgekehrt interpretiert werden darf, d.h. nur weil keine signifikante Periodizität gefunden wurde, muß nicht keine da sein. Sind Periodizitäten zwischen zwei Fourier-Stützstellen, so bekommt jede Stützstelle nur einen Teil der Varianz der Periodizität ab. Im Extremfall ist I_{max} demnach nur halb so groß, wie es sein sollte.

2.3 Test auf White-Noise

Hier werden zwei Tests auf White-Noise vorgestellt. Beidesmal besagt die Nullhypothese, daß die Zeitreihe eine Realisierung eines White-Noise-Prozesses ist. Dies ist z.B. sinnvoll bei der Analyse von Residuen. Getestet

wird nicht das Periodogramm, sondern das kumulierte Periodogramm, das wie folgt definiert ist:

$$S(r) = \frac{\sum_{k=1}^r I(\lambda_k)}{\sum_{k=1}^M I(\lambda_k)}, \text{ mit } r = 1, 2, \dots, M \quad (2.8)$$

wenn M die Anzahl der Fourier-Frequenzen ist, an denen das Periodogramm $I(\lambda_k)$ aufgenommen wurde. Entsprechend dieser Definition ist $S_0 = 0$ und $S_M = 1$. Bei einem White-Noise-Prozeß gilt für das kumulierte Periodogramm

$$S_{WN}(r) = \frac{r}{M}. \quad (2.9)$$

Das ist die Diagonale im Einheitsquadrat. Damit kann die Abweichung von dieser Winkelhalbierenden als Maß für die Unwahrscheinlichkeit von H_0 (die Stichprobe stammt aus einem White-Noise-Prozeß) verwendet werden. Für die größte Abweichung kann man einen Kolmogoroff-Smirnoff-Test machen:

Kolmogoroff-Smirnoff-Test

Untersucht wird die größte vorkommende Abweichung C von der Diagonalen:

$$C = \max_r \left| S(r) - \frac{r}{M} \right|. \quad (2.10)$$

Für $M \geq 6$ und $\alpha \leq .62$ gilt in guter Näherung:

$$P(C \leq c) = 1 - \alpha \quad (2.11)$$

mit

$$c = \frac{\sqrt{-\frac{1}{2} \ln \frac{\alpha}{2}}}{\sqrt{M-1} + .2 + \frac{.68}{\sqrt{M-1}}} - \frac{.4}{M-1}. \quad (2.12)$$

Invertiert man die Abhängigkeit $c(\alpha)$ zu $\alpha(c)$, so gibt $1 - \alpha$ an, wie unwahrscheinlich es ist, daß ein White-Noise-Prozeß vorliegt und trotzdem ein so hoher Wert von c . Also geht man wie folgt vor: Man berechnet C , setzt $c = C$ und berechnet die Unwahrscheinlichkeit $1 - \alpha(C)$ mit der ein solcher Wert bei einem White-Noise-Prozeß auftritt. Die Inversion von Gleichung (2.12) führt zur Ablehnungswahrscheinlichkeit der Nullhypothese p :

$$p = 1 - 2 \cdot \exp\left(-2a^2(C + b)^2\right) \quad (2.13)$$

mit

$$a = \sqrt{M-1} + .2 + \frac{.68}{\sqrt{M-1}} \quad (2.14)$$

und

$$b = \frac{.4}{M-1}. \quad (2.15)$$

Schlittgen und Streitberg (1994, S. 376) haben gezeigt, daß dieser Test schlecht ist im Vergleich zum

Anderson-Darling-Test

Der Testwert A beim Anderson-Darling-Test ist gegeben durch

$$A = -(M-1) - \frac{1}{M-1} \sum_{i=1}^{M-1} (2i-1) [\ln S_i + \ln(1-S_{M-i})]. \quad (2.16)$$

Die Wichtigsten Quantile sind:

Signifikanzniveau $(1-\alpha)$	$A_{max}(1-\alpha)$
90 %	1.933
95 %	2.492
99 %	3.857

2.4 Test auf Markov-Rauschen

Der einfachste stochastische Prozeß ist das weiße Rauschen, das besagt, daß keine Information von Zeitreihenwert zu Zeitreihenwert weitergegeben wird. Im zweiteinfachsten Fall wird ein Anteil a der Information immer genau einen Zeitschritt weitergegeben, d.h.

$$X_t = a X_{t-1} + \varepsilon_t \quad (2.17)$$

wobei ε_t ein weißes Rauschen darstellt. Ein solcher Prozeß wird autoregressiver Prozeß erster Ordnung (AR(1)-Prozeß, aber auch Markov-Prozeß) genannt, eben weil die Information autoregressiv um einen Zeitschritt weitergegeben wird. Der Prozeß erscheint physikalisch sehr plausibel, denn die Zukunft hängt dann nur vom momentanen Wert und einer Übergangswahrscheinlichkeit ab, nicht aber davon wie der momentane Wert erreicht wurde. Wenn der Anteil a um einen Zeitschritt weitergegeben wird und davon wieder der gleiche Anteil noch einen Zeitschritt weiter, so wird der Anteil a^2 zwei Zeitschritte weiter gegeben und allgemein der Anteil a^n um n Zeitschritte. Ein solcher Prozeß hat demnach eine Autokorrelationsfunktion von a^l , wenn l die Verschiebung (Lag) ist. Man kann sich nun die Frage stellen, ob die betrachtete Zeitreihe die Realisation eines solchen Prozesses (möglicherweise mit überlagerten Schwingungen, die dann wegen der Linearität des Prozesses nicht frequenzverzerrt sind) ist, d.h.:

$$X_t = aX_{t-1} + \varepsilon_t + \sum_{i=1}^m [A_i \cos(2\pi\omega_i t) + B_i \sin(2\pi\omega_i t)]. \quad (2.18)$$

Falls die Schwingungen nun wesentlich zur Varianz beitragen, sieht man sie in der Zeitreihe mit bloßem Auge. Ist dies nicht der Fall, so ist der Wert der Autokorrelation der Zeitreihe zur Verschiebung eins (r_1) ein guter

Schätzwert für a . Kennt man aber a so kennt man den Prozeß, wie er ohne die Schwingungen wäre. Das Spektrum hätte dann folgende Form:

$$I_{Markov}(\tau) = \frac{2}{N} \frac{1 - r_1^2}{1 + r_1^2 - 2r_1 \cos\left(\frac{2\pi}{\tau}\right)}. \quad (2.19)$$

Selbst wenn nun r_1 ein guter Schätzer für a ist (was bedingt, daß die Störungen gegenüber dem reinen Markov-Prozeß klein sind) und die Zeitreihe tatsächlich aus einem Markov-Prozeß stammt, muß das Zeitreihenspektrum (auch das geglättete) nicht so aussehen. Nun kann man aber versuchen zu testen, ob das Zeitreihenspektrum ganz und gar nicht mit der Hypothese verträglich ist. Dazu genügt es die Konfidenzintervalle des theoretisch zugeordneten Spektrums zu kennen, d.h. die Wahrscheinlichkeit, mit der ein bestimmter Spektralwert weiter als ein bestimmter Wert vom theoretischen Spektrum abweicht. Es muß also nun der zu einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit größte Abstand gesucht werden (d.h. das Konfidenzintervall). Der Unterschied dieses Tests zum obigen White-Noise-Test ist der, daß hier eine unzuverlässigere Variable (nämlich der spektrale Wert, statt dem kumulativen spektralen Wert) getestet wird. Diese ist nach Panofsky und Brier (1958) χ^2 -verteilt. Man erhält das Konfidenzintervall demnach gegeben durch

$$Konf = I_{Markov}(\tau) \frac{\chi_{\varphi, \alpha}^2}{\varphi} \quad (2.20)$$

mit der Irrtumswahrscheinlichkeit α (d.h. α ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Konfidenzintervall durch Zufall überschritten wird) und dem Freiheitsgrad φ , der von der Anzahl der verwendeten Fourier-Frequenzen M und der Zeitreihenlänge N abhängt:

$$\varphi = \frac{2N - \frac{M}{2}}{M}. \quad (2.21)$$

Für die Anwendung hier (mit $M = \frac{N}{2}$) folgt daraus $\varphi = 3.5 \approx 4$. Die Konfidenzlevels c_{χ^2} der χ^2 -Verteilung können (mit Hilfe der Cornish-Fisher-Entwicklung) aus denen der Gauß-Verteilung $c_{Gauß}$ wie folgt berechnet werden:

$$c_{\chi^2} = \varphi + c_{Gauß} * \sqrt{2\varphi} + \frac{2}{3}(c_{Gauß}^2 - 1) + \frac{c_{Gauß}^3 - 7c_{Gauß}}{9\sqrt{2\varphi}} \quad (2.22)$$

mit:

$$\begin{aligned} c_{Gauß}(.2) &= .842 \\ c_{Gauß}(.1) &= 1.282 \\ c_{Gauß}(.05) &= 1.645 \\ c_{Gauß}(.01) &= 2.326. \end{aligned}$$

Bei aller Vorsicht kann man mit diesem Test auch das weiße Spektrum (d.h. das nicht kumulative) auf überzufällige Peaks testen. Der Vorteil gegenüber dem obigen Test liegt darin, daß man bestimmte Peaks verantwortlich für die Nichtübereinstimmung machen kann, der Nachteil ist, daß das Ergebnis zweifelhaft ist.