2. СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

Рассмотрим сначала основные методы анализа переходных процессов, а затем применим их к методу нестационарной газопроницаемости.

Мощным инструментом обработки данных, определённых дискретной зависимостью $y(x_i)$ или непрерывной функцией $f(x)$, является спектральный анализ, имеющий в своей основе различные интегральные преобразования. Спектром совокупности данных $y(x)$ называют некоторую функцию другой координаты $F(\omega)$, полученную в соответствии с определённым алгоритмом. Примерами спектров являются преобразование Фурье и вейвлет-преобразование. Каждое из интегральных преобразований эффективно для решения своего круга задач анализа данных.

Задачами, непосредственно связанными со спектральным анализом, являются проблемы сглаживания и фильтрации данных. Они заключаются в построении из исходной экспериментальной зависимости $y(x_i)$ некоторой (непрерывной или дискретной) зависимости $f(x)$, которая должна приблизить её, учитывая к тому же, что данные (x_i, y_i) получены с некоторой погрешностью, выражающей шумовую компоненту измерений. При этом функция $f(x)$ с помощью того или иного алгоритма уменьшает погрешность, присутствующую в данных (x_i, y_i). Такого типа задачи называются задачами фильтрации. Сглаживание путём построения регрессии данных – это частный случай фильтрации.

2.1 Преобразование Фурье

Преобразование Фурье - преобразование функции, превращающее её в совокупность частотных составляющих. Преобразование Фурье - интегральное преобразование, раскладывающее исходную функцию по базисным функциям, в качестве которых выступают синусоидальные (или мнимые экспоненты) функции, то есть представляет исходную функцию в виде интеграла синусоид (мнимых экспонент) различной частоты, амплитуды и фазы. Преобразование обратимо, причем обратное преобразование имеет практически такую же форму, как и прямое преобразование. Преобразование названо по имени Жана Фурье.

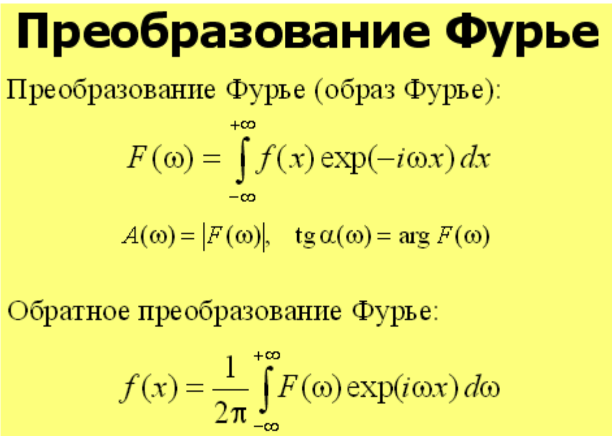
В основе преобразования Фурье (ПФ) лежит чрезвычайно простая, но исключительно плодотворная идея – почти любую периодическую функцию можно представить суммой отдельных гармонических составляющих (синусоид и косинусоид с различными амплитудами А, периодами Т и, следовательно, частотами ω).

Математический смысл преобразования Фурье состоит в представлении сигнала $y(x)$ в виде бесконечной суммы синусоид вида $F(\omega)\cdot\sin(\omega x)$. Функция $F(\omega)$ называется преобразованием Фурье, или интегралом Фурье или Фурье – спектром сигнала. Обратное преобразование Фурье переводит спектр $F(\omega)$ в исходный сигнал $y(x)$. Согласно определению,

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} y(x)\cdot\exp(-i\omega x)dx \qquad (8)$$

Как видно, преобразование Фурье является комплексной величиной, даже если сигнал действительный.

Одним из простейших видов колебательных смещений является синусоида, описываемая уравнением вида:



$$y = F(t) = ACos\omega t + BSin\omega t = aSin(\omega t + \phi) \qquad (9)$$

где *a* амплитуда колебания, ϕ-фаза.

С помощью этих величин можно определить коэффициенты А и В:

$$A = aSin\phi; \quad B = aCos\phi$$

Такое синусоидальное колебание является монохроматическим по отношению к частоте ω. Оно имеет одно единственное значение амплитуды а и фазы ϕ в функции частоты. Если изобразить эту функцию графически, отложив по оси абсцисс частоту, а по оси ординат – амплитуду (или фазу), то мы получим один отрезок прямой, соответствующей собственной частоте колебаний ω_0. Это будет простейший амплитудный (или фазовый) спектр функции $y=F(x)$, состоящий в данном случае из одной спектральной линии.

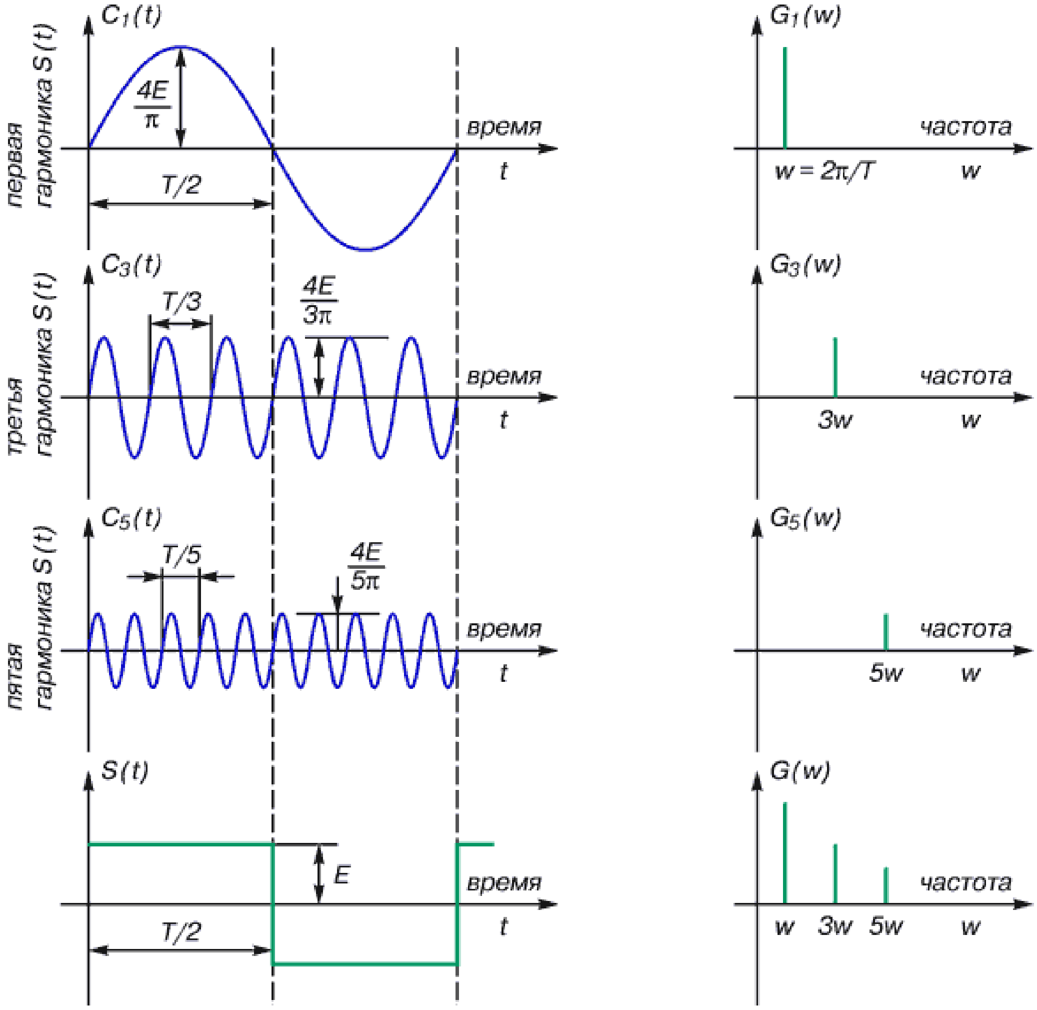


Рис. 4. Представление прямоугольного импульса суммой гармонических составляющих

При сложении нескольких синусоидальных колебаний с различными частотами ω_1, ω_2, …, ω_n амплитудный спектр суммарного колебания характеризуется наличием n линий, т.е. будет линейчатым. При этом функция, изображающая характер колебаний, выражается суммой:

$$F(\omega) = \sum_{\omega=\omega_1}^{\omega_n} \left[A(\omega) Cos\,\omega t + B(\omega) Sin\,\omega t \right] \qquad (10)$$

Если колебания носят непериодических характер, то функцию F(t) можно представить как предел суммы бесконечно большого количества гармонических колебаний, различающихся по частоте на бесконечно малую величину dω, т.е. воспользоваться интегралом Фурье:

$$F(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[A(\omega) Cos\,\omega t + B(\omega) Sin\,\omega t \right] d\omega \qquad (11)$$

где $A_0 = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)dt$, $\quad A(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) Cos\,\omega t dt$; $\quad B(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) Sin\,\omega t dt$.

<u>Замечание.</u> Преобразование Фурье часто записывают в комплексной форме:

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) (Cos\,\omega t - i Sin\,\omega t) dt \qquad (12)$$

где $i = \sqrt{-1}$ - мнимая единица. Т.е. у преобразования Фурье есть действительная и мнимая часть.

Любую **периодическую** функцию $f(t)$ периода T можно представить в виде дискретного ряда Фурье

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n \exp[i\beta\omega_n t] \qquad (13)$$

где $\omega_n = n\omega_0 = n\frac{2\pi}{T}$ – круговая частота n-ой гармонической составляющей, C_n– комплексная амплитуда n-ой гармоники

$$C_n = \frac{1}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t)\exp\{-i\omega_n t\}dt. \qquad (14)$$

Совокупность коэффициентов C_n называют ***спектром функции*** $f(t)$; при этом $|C_n|$ есть амплитуда гармоники частоты ω_n, а $\arg C_n$ – относительный фазовый сдвиг.

Дискретный случай

$$x[n] = \sum_{k=0}^{N/2} A_k \cos\frac{2\pi kn}{N} + \sum_{k=0}^{N/2} B_k \sin\frac{2\pi kn}{N} = \sum_{k=0}^{N/2} C_k \cos\frac{2\pi k(n+\varphi_k)}{N}$$

$$A_k = \frac{2}{N}\sum_{i=0}^{N-1} x[i]\cos\frac{2\pi ki}{N} \qquad k = 1,\dots,\frac{N}{2}-1$$

$$A_k = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} x[i]\cos\frac{2\pi ki}{N} \qquad k = 0, \frac{N}{2}$$

$$B_k = \frac{2}{N}\sum_{i=0}^{N-1} x[i]\sin\frac{2\pi ki}{N} \qquad k = 0,\dots,\frac{N}{2}$$

Замечание. При комплексной записи ряда Фурье формально возникают как положительные так и отрицательные частоты. Однако при разложении действительных функций времени $f(t)$ колебания с отрицательными частотами не имеют физического смысла. Легко показать, что если функция $f(t)$ – действительная, описывающая реальный физический процесс, то $C_{-n} = C_n^*$ (знак * означает комплексную сопряженность). Тогда

$$C_{-n0}\exp\{-in\omega_0 t\} + C_n[in\omega_0 t] = 2|C_n|Cos(n\omega_0 t + \varphi_n) \quad (15)$$

где $\varphi_n = \arg C_n$.

Следовательно, ряд Фурье можно записать в виде

$$f(t) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n Cos(n\omega_0 t + \varphi_n), \qquad (16)$$

где $a_0 = C_0, \quad a_n = 2|C_n|$.

Таким образом, спектр функции $f(t)$ можно изобразить только по положительным частотам (n>0), но тогда под амплитудой гармоники следует понимать величину $2|C_n|$. При этом амплитуда «гармоники нулевой частоты» (постоянная составляющая, n=0) остается равной C_0.

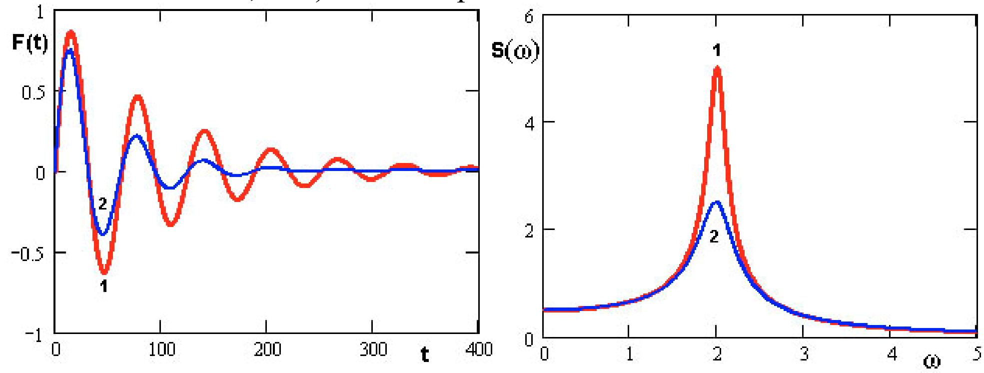


Рис. 5. Затухающая по экспоненте синусоида (а) и её спектр (б): положение пика определяется параметром ω_0=2, высота пика – параметром α=0,01 (1) и 0,02 (2).

Спектр такого непериодического колебания является непрерывным, поскольку любой частоте ω отвечает некоторое значение его амплитуды или фазы.

Амплитудный спектр непериодического колебания определяется формулой:

$$S(\omega) = \sqrt{A^2(\omega) + B^2(\omega)} \qquad (17)$$

в то время как фазово-частотный спектр кривой F(t) выражается величиной:

$$\phi(\omega) = arctg\frac{B(\omega)}{A(\omega)} \qquad (18)$$

Для практических целей сигнал (*) может быть заменён конечной суммой, взятой через равные малые интервалы времени t:

$$F(t) = \frac{1}{\pi}\sum_{k=0}^{n}\left[A(k\Delta\omega)Cos(k\Delta t) + B(k\Delta\omega)Sin(k\Delta\omega t)\right] \qquad (19)$$

где n и k – номера интервала.

Функция F(t) представляется как ряд синусоид

$$F(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n e^{in\omega}, \qquad (20)$$

где F_n – комплексная амплитуда.

Замечание. На всякий случай напомним, что комплексная переменная обычно обозначается z. Пусть x и y суть вещественные числа, такие, что z = x + iy. Числа $x = \Re(z)$ или Re(z) и $y = \Im(z)$ или Im(z) называются соответственно **вещественной** (***Re***al) и **мнимой** (***Im***aginary) частями *z*. Если x = 0, то z называется мнимым или чисто мнимым. Число $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$

называется модулем числа z. Угол φ такой, что $\cos\varphi = \frac{x}{|z|}$ и $\sin\varphi = \frac{y}{z}$, называется аргументом z. Комплексное число $\bar{z} = x - iy$ называется сопряжённым (или комплексно сопряжённым) к z. Применительно к преобразованию Фурье **Real** – это косинус-коэффициенты разложения, а **Imaginary** – синус-коэффициенты разложения. Тогда амплитуда волны, $|C|$

$$|C|^2 = [real(C)]^2 + [imag(C)]^2 \qquad (21)$$

Сдвиг фазы:

$$\phi = arctg\frac{imag(C)}{real(C)} \qquad (22)$$

В общем случае, когда функция $f(t)$ **не является периодической**, она может быть представлена по теореме Фурье в виде непрерывного набора гармонических колебаний с различными частотами.

$$f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega)\exp\{i\omega t\}d\omega \qquad (23)$$

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\exp\{-i\omega t\}dt \qquad (24)$$

Соотношения ( ) и () называются ***обратным и прямым*** Фурье-преобразованием соответственно. В общем случае спектр F(ω) оказывается непрерывным.

Табл.1 содержит список важных формул для преобразования Фурье F(ω) и G(ω) обозначают Фурье-компоненты функций f(t) и g(t), соответственно. f и g должны быть интегрируемыми функциями или обобщёнными функциями. Помните, что соотношения в этой таблице и в особенности множители такие как $\sqrt{2\pi}$, зависят от соглашения, какая форма определения для Фурье преобразования использовалась прежде (хотя в общем виде соотношения, конечно, правильны).

	Функция	**Образ**	**Примечания**
1	$af(t) + bg(t)$	$aF(\omega) + bG(\omega)$	Линейность
2	$f(t-a)$	$e^{-i\omega a}F(\omega)$	Запаздывание
3	$e^{iat}f(t)$	$F(\omega - a)$	Частотный сдвиг
4	$f(at)$	$\lvert a\rvert^{-1}F\left(\frac{\omega}{a}\right)$	Если *a* большое, то f(at) сосредоточена около 0 и $\lvert a\rvert^{-1}F\left(\frac{\omega}{a}\right)$ становится плоским
5	$\frac{d^n f(t)}{dt^n}$	$(i\omega)^n F(\omega)$	Свойство преобразования Фурье от *n*-й производной
6	$t^n f(t)$	$i^n \frac{d^n F(\omega)}{d\omega^n}$	Это обращение правила 5
7	$(f * g)(t)$	$\sqrt{2\pi}F(\omega)G(\omega)$	Запись f*g означает свёртку f и g. Это правило – теорема о свёртке
8	$f(t)g(t)$	$\frac{(F * G)(\omega)}{\sqrt{2\pi}}$	Это обращение 7
9	$\delta(t)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	δ(t) означает дельта-функцию Дирака
10	1	$\sqrt{2\pi}\delta(\omega)$	Обращение 9.
11	t^n	$i^n\sqrt{2\pi}\delta^{(n)}(\omega)$	Здесь, n-натуральное число, δn(ω)- *n*-я обобщённая производная дельта-функции Дирака. Следствие правил 6 и 10. Использование его

			вместе с правилом 1 позволяет делать преобразования любых многочленов
12	e^{iat}	$\sqrt{2\pi}\delta(\omega - a)$	Следствие 3 и 10
13	$\cos(at)$	$\sqrt{2\pi}\dfrac{\delta(\omega-a)+\delta(\omega+a)}{2}$	Следствие 1 и 12 с использованием формулы Эйлера $\cos(at) = \frac{1}{2}\left(e^{iat} + e^{-iat}\right)$
14	$\sin(at)$	$\sqrt{2\pi}\dfrac{\delta(\omega-a)-\delta(\omega+a)}{2i}$	Также из 1 и 12
15	$\exp(-at^2)$	$\dfrac{1}{\sqrt{2a}}\exp\left(\dfrac{-\omega^2}{4a}\right)$	Показывает, что функция Гаусса $\exp(-t^2/2)$ совпадает со своим изображением
16	$W\sqrt{\dfrac{2}{\pi}}\mathrm{sinc}(Wt)$	$\mathrm{rect}\left(\dfrac{\omega}{2W}\right)$	Прямоугольная функция - идеальный фильтр низких частот и sinc функция её временной эквивалент
17	$\dfrac{1}{t}$	$-i\sqrt{\dfrac{\pi}{2}}\,\mathrm{sgn}(\omega)$	Здесь sgn(ω)- sign функция. Это правило согласуется с 6 и 10
18	$\dfrac{1}{t^n}$	$-i\sqrt{\dfrac{\pi}{2}}\dfrac{(-i\omega)^{n-1}}{(n-1)!}\,\mathrm{sgn}(\omega)$	Обобщение 17
19	$\mathrm{sgn}(t)$	$\sqrt{\dfrac{2}{\pi}}(i\omega)^{-1}$	Обращение 17
20	$\sqrt{2\pi}\mathrm{H}(t)$	$\dfrac{1}{i\omega} + \pi\delta(\omega)$	Здесь H(t) – функция Хевисайда. Следует из правил 1 и 19

Отметим, что прикладное применение спектрального анализа можно разделить на две части:
- сигнал, подвергающийся анализу, получен в условиях пренебрежимо малой погрешности, т.е. его можно считать детерминированным;
- сигнал, получен в присутствии значительной шумовой компоненты, существенно искажающей его структуру. Здесь следует говорить о смеси «полезный сигнал + шум» и проводить интерпретацию спектров с вероятностной точки зрения.

В силу стохастичности исходных данных, представляющих сумму полезного сигнала и шума, сами вычисленные значения спектра Фурье носят также случайный характер. В этой связи необходимо знать с какой погрешностью они рассчитываются. К сожалению, для обычного Фурье-преобразования случайного сигнала не найдено оценок его погрешности. Это слабое место Фурье-спектров делает их практически неприменимыми для анализа случайных процессов, а вместо них надо применять так называемые спектры мощности (или, по-другому, энергетические спектры, *dencity*), для которых указанные оценки существуют.

Спектром мощности сигнала называют Фурье-преобразование его корреляционной функции. При расчёте спектра мощности вычисляют автокорреляционную функцию, сглаживают её в целях уменьшения влияния конечности выборки и рассчитывают Фурье-преобразование.

2.2 Преобразование Фурье в системе STATISTICA

Поскольку мы в данном обзоре используем систему STATISTICA-6 (английская версия), то полезно остановиться на некоторых её особенностях.

STATISTICA - универсальный статистический пакет, содержит много современных статистических методик. Имеется отдельный модуль анализа временных рядов с широким набором возможностей.

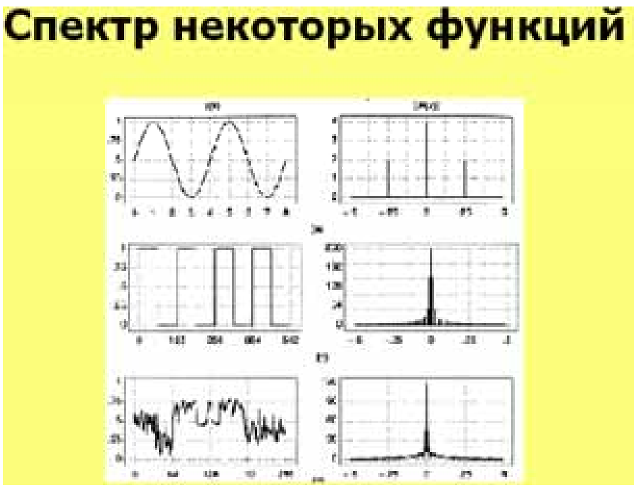
Модуль *Временные ряды* включает полную реализацию методов спектрального или Фурье анализа одного ряда и кросс-спектральный анализ двух рядов. Преимущества реализации спектрального анализа в *STATISTICA* проявляются при анализе очень длинных временных рядов и не предполагают каких-либо ограничений на длину ряда (в частности, длина исходного ряда не обязана быть четной). Стандартные методы предварительной обработки ряда включают косинус-сглаживание, вычитание среднего и удаление тренда. Результаты обычного спектрального анализа содержат: частоту и период колебаний, коэффициенты при синусах и косинусах, периодограмму и оценку спектральной плотности. Оценка плотности может быть вычислена с помощью весов Даниеля, Хэмминга, Бартлетта, Тьюки, Парзена или с весами и шириной, заданными пользователем. Очень полезна, особенно при работе с длинными рядами, возможность выводить в убывающем порядке заранее заданное число точек периодограммы или спектральной плотности; таким образом можно обнаружить резкие пики периодограммы и спектральной плотности для длинных рядов. Имеется возможность вычислить *d*-критерий Колмогорова-Смирнова для значений периодограммы чтобы проверить, подчиняются ли они экспоненциальному распределению (является ряд белым шумом или нет). Для представления результатов анализа имеются различные типы графиков; можно отобразить коэффициенты при синусах и косинусах, периодограмму, лог- периодограмму, спектральную и лог-спектральную плотность по отношению к частотам, периодам и лог- периодам. В случае длинного исходного ряда имеется возможность выбрать конкретный сегмент (период), для которого будут изображаться соответствующие периодограмма и график спектральной плотности, тем самым будет улучшено их «разрешение».

Отметим, что для преобразования Фурье разработан очень эффективный алгоритм, называемый БПФ – быстрое преобразование Фурье. При использовании БПР, аргумент прямого Фурье-преобразования, т.е. вектор y, должен иметь ровно 2n элементов (n – целое число). Результатом является вектор с $1+2^{n-1}$ элементами. Если число данных не совпадает со степенью 2, то необходимо дополнить недостающие элементы нулями. В случае обратного преобразования, если аргумент является N- компонентным вектором, где $N=1+2^n$, то в результате получается в два раза больший вектор из $2(N-1)=2^{n+1}$ компонент.

Для проведения спектрального (Фурье) анализа и кросс-спектрального анализа осуществляется переход по схеме: Statistics $\rightarrow$ Advanced linear/nonlinear model $\rightarrow$ Time series/Forecasting $\rightarrow$ Spectral Fourier Analysis (после введения данных) $\rightarrow$ Single series Fourier $\rightarrow$ Periodogramm и Spectral Dencity (выдача графиков). Для получения массивов данных следует нажать Summary. Будут выданы: частоты (Frequency), периоды (Period), косинус и синус-коэффициенты (Cosine Coeff Sine Coeff), перидограмма (Periodog) и спектральная плотность (Dencity), а также окно сглаживания плотности (по умолчанию- Haming Weights). По кнопке Advanced можно получить значения N (по умолчанию – 10) наибольших значений в спектре. Review – Plot даёт все графики.

Это – для быстрого проведения разложения Фурье.

Замечание. По непонятной причине STATICNICA выдаёт амплитуды волн, но не их фазы! А для диффузии важны именно фазовые сдвиги. Попытки найти фазы по формуле $\phi(\omega) = arctg\dfrac{SinCoeff}{CosCoeff}$, где коэффициенты взяты из указанной выше таблицы, регулярно приводят к совершенно идиотским результатам.



Для получения более грамотных оценок и для осуществления обратного преобразования Фурье лучше поступать по-другому. После Time series/Forecasting не жать Spectral Fourier Analysis, а войти в OK [transformations, autocorrelations, crosscorrelations, plots], там поставить точку в окошке действительная и мнимая часть (Real and Imaginary part) или обратное преобразование Фурье (Inverse Fourier transform) – здесь реализуется алгоритм Быстрого Преобразования Фурье - нажать OK[transform selected series] и получить таблицы и графики. Практически Real and Imaginary part те же самые коэффициенты косинусов и синусов, но они при расчёте фазы по формуле $\phi(\omega) = arctg\dfrac{\mathrm{Im}}{\mathrm{Re}}$ дают лучшие результаты, чем по быстрому пути. Хотя – тоже плохие. БЭСМ-6 при МГУ 40 лет назад считала куда лучше…

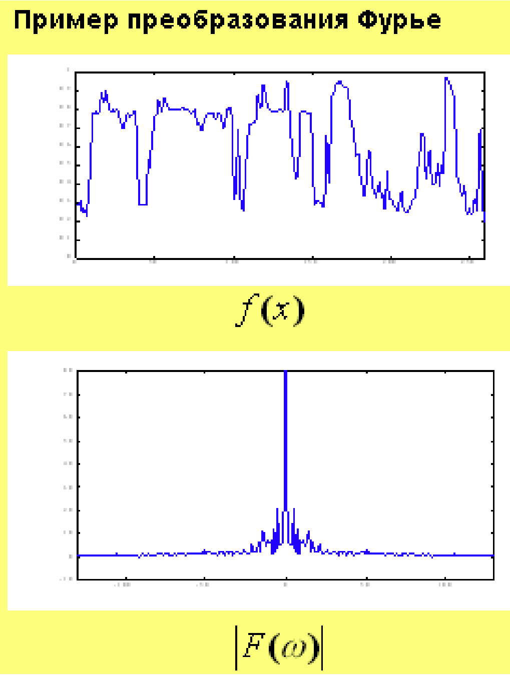
По каким формулам считает STATISTICA?

Целью спектрального анализа является разложение исходного ряда sin- и cos- функции с различными частотами и выделение самых важных колебаний. Эта задача относится к сфере линейной множественной регрессии (Multiple Regression problem), где зависимая переменная – экспериментальный временной ряд, а независимые переменные или регрессоры – sin-функции всех возможных (дискретных) частот.

Такая модель линейной множественной регрессии записывается как:

$$x_t = a_0 + \Sigma\left[a_k Cos(\lambda_k t) + b_k Sin(\lambda_k t)\right] \qquad \text{(для k = от 1 до q)} \qquad (25)$$

где λ- частота в радианах на единицу времени: $\lambda = 2\pi\nu_k$, где $\pi=3.1415...$ и $\nu_k = k/q$, ν - частота, цикло циклов за единицу времени, период $T=1/\nu$.



Здесь параметры Cos (a_k) и Sin (b_k) – коэффициенты регрессии, указывающие на степень, с которой соответствующие функции коррелируют с данными. Очевидно, что тригонометрических функций, q, не может быть больше, чем число данных. Если в массиве N точек, то Cos-функций будет N/2+1, а Sin-функций N/2-1, т.е. тригонометрических функций, столько же, сколько точек в массиве. (Заметим, если количество данных в ряде нечетно, то последнее наблюдение обычно опускается)

Периодограмма *– графическое изображение оценки модуля преобразования Фурье автокорреляционной функции стационарного временного ряда или случайного процесса. Это – графическая форма оценки спектра функции автокорреляции. Ее еще можно рассматривать как график зависимости мощности процесса (или, что тоже, квадрата амплитуды) от частоты. При анализе периодограммы нужно обращать особое внимание на ее пики. Большой пик в области некоторой частоты* ω_0 *указывает на то, что в спектральном разложении автокорреляционной функции присутствует соответствующая гармоническая компонента. Чем выше и резче выделен пик, тем большая часть мощности сосредоточена около частоты* ω_0 *и тем большую роль играет эта частота в описании соответствующего случайного процесса или временного ряда.*

Значения периодограммы STATISTICA рассчитывает по формуле

$$P_k = \frac{N}{2}\left(\sin e\ coefficient_k^2 + \cos ine\ coefficient_k^2\right) \qquad (26)$$

где P_k – значение периодограммы при частоте λ_k и N – общая длина ряда. Значения периодограммы можно интерпретировать в терминах дисперсии (суммы квадратов) при соответствующей частоте или периоде. Обычно значения периодограммы строят в зависимости от частоты или периода.

При численном нахождении преобразования Фурье следует внимательно относится к таким важным параметрам, как объём выборки и интервал дискредитации (Δ). Соотношение этих двух величин определяет диапазон частот (ω_0, ω_N), для которых возможно вычисление значений Фурье-спектра. (Если число точек N, максимальное значение аргумента x_{max}, то $\Delta = x_{max}/N$ и $\omega_0 = 1/x_{max}$ и $\omega_N = N/(2x_{max})$).

В этой связи следует обратить внимание на опасности, которые могут подстерегать неподготовленного исследователя при расчёте дискетного Фурье-преобразования: влияние конечности интервала выборки, сдвиг ноль-линии, маскировка частот и др. Во-первых, влияние конечности интервала выборки появляется в искажении низкочастотной области спектра. Для борьбы с проявлением конечности интервала выборки используются специальные методы, основанные на применении техники спектральных окон. Во-вторых, возможен сдвиг ноль-линии. Избавиться от этого искажения довольно просто. Достаточно до Фурье-преобразования вычислить среднее значение выборки и затем вычесть его из каждого элемента выборки. Если после этой операции вычислить Фурье-спектр, то сдвига ноль-линии не будет. В-третьих, в случае присутствия в сигнале гармоник с частотой, превышающей частоту Найквиста, в спектре появляются «лишние» пики. Появление артефактов спектра связано с тем, что дискретных отсчётов начинает не хватать для того, чтобы прописать высокочастотные гармоники с достаточной информативностью.

Так как значения периодограммы - объект существенного случайного колебания, то можно столкнуться с проблемой многих хаотических пиков периодограммы. В этом случае хотелось бы найти частоты с большими *спектральными плотностями*, т.е. частотные области, состоящие из многих близких частот, которые вносят наибольший вклад в периодическое поведение всего ряда. Чтобы убрать случайные колебания, периодограмму сглаживают, например, методом взвешенного скользящего среднего. Получаемые при этом значения называются **спектральной плотностью** (spectral dencity).

Ширина окна скользящего среднего равна *m* (должно быть нечетным числом, далее $p = (m-1)/2$).

В данной системе используются преобразования:

Daniell (равные веса) окно Даниэля – самое простое (равных весов) сглаживание скользящим средним значений периодограммы. Каждая оценка спектральной плотности вычисляется как среднее m/2 предшествующих и последующих значений периодограммы.

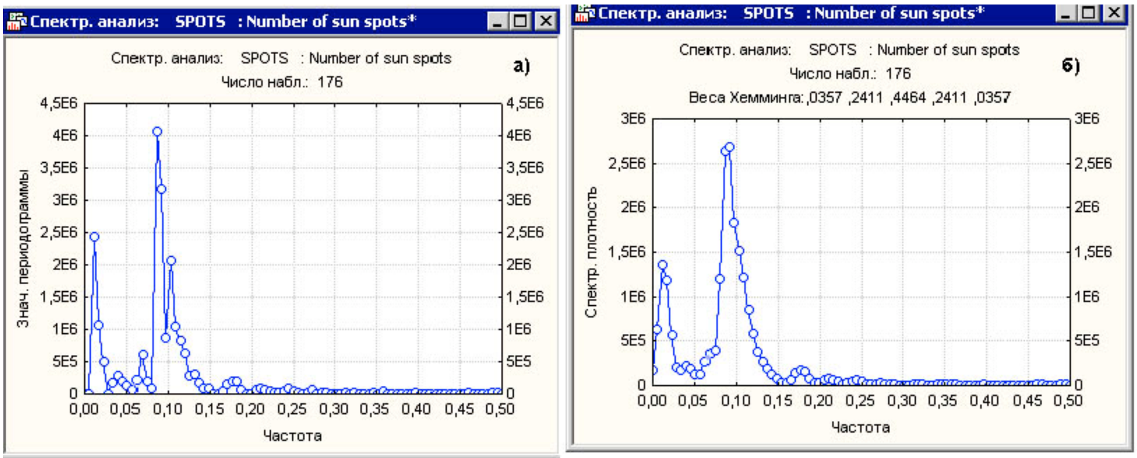


Рис. 6. Периодограмма (а) и спектральная плотность (б).

Tukey окно Тьюки: для каждой частоты веса для взвешенного скользящего среднего значений периодограммы рассчитываются по формулам:

$$w_j = 0.5 + 0.5Cos(\frac{\pi j}{p}) \qquad (\text{ для } j=0\ldots..p) \quad (27)$$

$$w_{-j} = w_j \quad (j \neq 0)$$

Hamming – окно Хемминга: для каждой частоты, веса для взвешенного скользящего среднего значений периодограммы вычисляются как:

$$w_j = 0{,}5 + 0{,}5Cos\left(\frac{\pi j}{p}\right) \quad (\text{для } j=0\ldots p) \qquad (28)$$

$w_{-j} = w_j \quad (j \neq 0)$

Parzen окно Парзена:

$$w_j = 1 - 6\left(\frac{j}{p}\right)^2 + 6\left(\frac{j}{p}\right)^3 \qquad \mathbf{(29)}$$

$$w_j = 2\left(1 - \frac{j}{p}\right)^3 \qquad (\text{для } j \neq 0)$$

Bartlett окно Бартлетта

$$1 - \frac{1}{p} \quad (\text{для } j=0\ldots p) \qquad (30)$$

$$w_{-j} = w_j \quad (j \neq 0)$$

За исключением окна Даниэля, все весовые функции приписывают больший вес сглаживаемому наблюдению, находящемуся в центре окна и меньшие веса значениям по мере удаления от центра. Во многих случаях, все эти окна данных получают очень похожие результаты. Эти же фильтры используются и при прямом-обратном преобразованиях Фурье. Поэтом в этом режиме фазо-частотные характеристики выглядят приличнее.

Помимо преобразования Фурье, программа STATISTICA обеспечивает и другие алгоритмы (гистограммы, автокорелляционные- частные автокорелляционные функции), полезные с точки зрения частотной диагностики мембран.

2.3 Преобразование Фурье в системе MATHAD 14

Для быстрого преобразования Фурье в системе Mathad реализовано несколько встроенных функций, различающихся нормировкой:

fft(y) – вектор прямого преобразования Фурье;

FFT(y) – вектор прямого преобразования Фурье в другой нормировке:

• y – вектор действительных данных, взятых через равные промежутки времени.

Замечание. Аргумент прямого Фурье-преобразования, т.е. вектор y должен иметь 2^n элементов (n – целое число). Результатом является вектор с $1+2^{n-1}$ элементами. Если число данных не совпадает со степенью 2, то необходимо дополнить недостающие элементы нулями, иначе вместо решения появится сообщение об ошибке.

Результаты расчёта по fft представляется в виде модуля Фурье-спектра, поскольку сам спектр является комплексным. Важными параметрами являются: граничная частота $\Omega_0 = \dfrac{1}{xMAX}$ и частота Найквиста

$\Omega_N = \dfrac{N}{2 \cdot xMAX}$. Граничная частота определяет нижнюю, а частота Найквиста – верхнюю границу вычисленного спектра. При этом интервал дискредитации Фурье-спектра также равен Ω_0, а общее число вычисляемых точек спектра составляет N/2.

Для расчёта обратного Фурье-преобразования (восстановления сигнала по имеющемуся действительному спектру) используют функции:

ifft(v) – вектор обратного действительного преобразования Фурье;

IFFT(v) – вектор обратного действительного преобразования Фурье в другой нормировке:

• v – вектор данных Фурье-спектра, взятых через равные промежутки значений частоты.

Замечание. Аргумент (вектор v) функций, реализующих обратное преобразование Фурье может быть как действительным, так и комплексным. А вот результат их работы является вектором, составленным из действительных чисел. Если аргумент является N- компонентным вектором, где $N=1+2^n$, то в результате получается в два раза больший вектор из $2(N-1)=2^{n+1}$ компонент.

Алгоритмы быстрого преобразования Фурье для комплексных данных встроен в соответствующие функции, и имя которых входит литера «с»:

cfft(y) – вектор прямого комплексного преобразования Фурье;

CFFT(y) – вектор прямого комплексного преобразования Фурье в другой нормировке;

ifft(v) – вектор обратного комплексного преобразования Фурье;

IFFT(v) – вектор обратного комплексного преобразования Фурье в другой нормировке:

• y – вектор данных, взятых через равные промежутки значений аргумента.

• v – вектор данных Фурье-спектра, взятых через равные промежутки значений частоты.

Функции действительного преобразования Фурье используют тот факт, что в случае действительных данных спектр получается симметричным относительно нуля, и выводят только половину. Функция комплексного преобразования выводит все данные (почти в 2 раза больше).

2.4 Примеры разложения Фурье

Ниже даны примеры разложения некоторых колебаний простейшей формы.

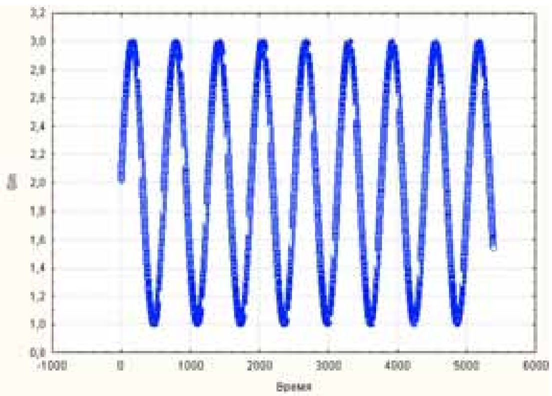
Отрезок синусоиды, содержит n колебаний и описывается уравнениями:

$$F(t) = Sin\omega_0 t \text{ при } 0 < t < \frac{2\pi n}{\omega_0} \qquad (31)$$

$$F(t) = 0 \text{ при } 0 > t > \frac{2\pi n}{\omega_0} \qquad (32)$$

Амплитудный спектр определяется выражением:

$$S(\omega) = \left| \frac{2\omega_0 \dfrac{n\pi\omega}{\omega_0}}{\omega_0^2 - \omega^2} \right| \qquad (33)$$



При малых значениях ω_0:

$$S(\omega) \approx \frac{1}{\omega}$$

В логарифмическом масштабе имеем прямую линию.

Рис. 7. Отрезок синусоиды (n=8)

Пик амплитудного спектра на частоте ω выражен тем резче, чем большее число периодов взято на отрезке синусоиды. При бесконечной продолжительности колебаний непрерывный спектр синусоиды вырождается в линейчатый с одной линией.

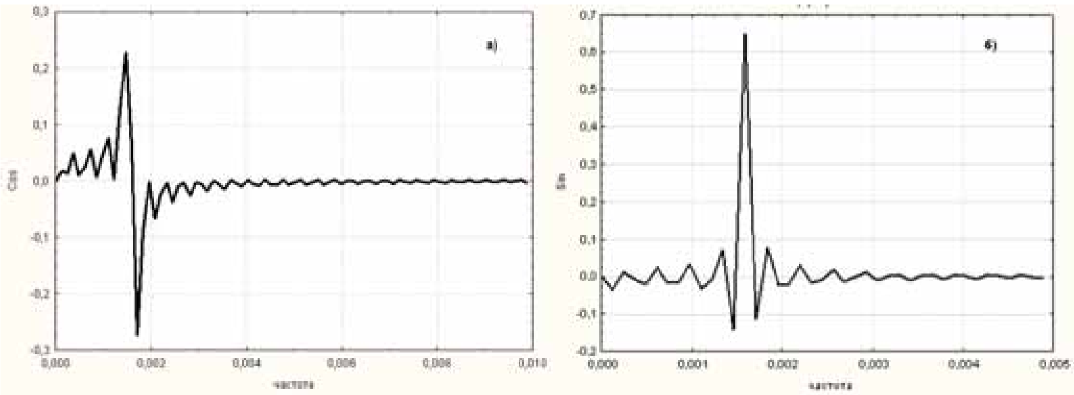


Рис. 8. Cos- (а) и Sin-(б) коэффициенты разложения Фурье для отрезка синусоиды (n=8).

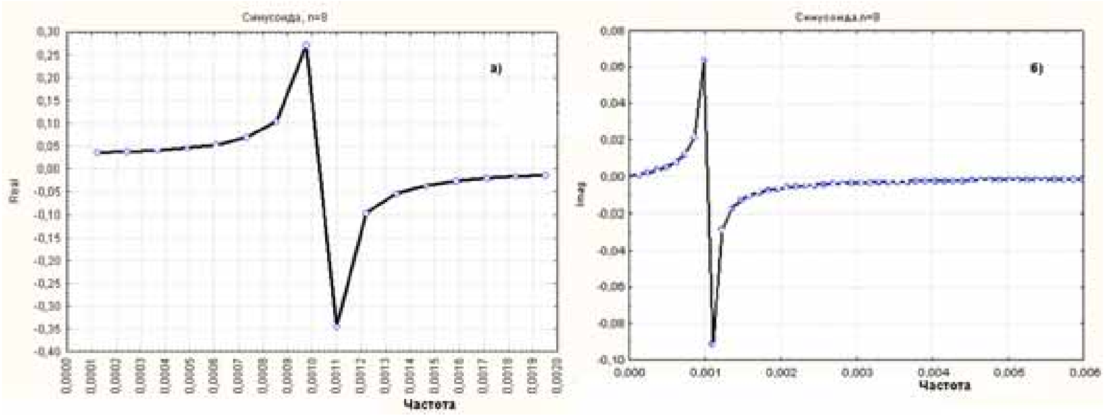


Рис. 9. Действительная (а) и комплексная (б) части отрезка синусоиды, n=8.

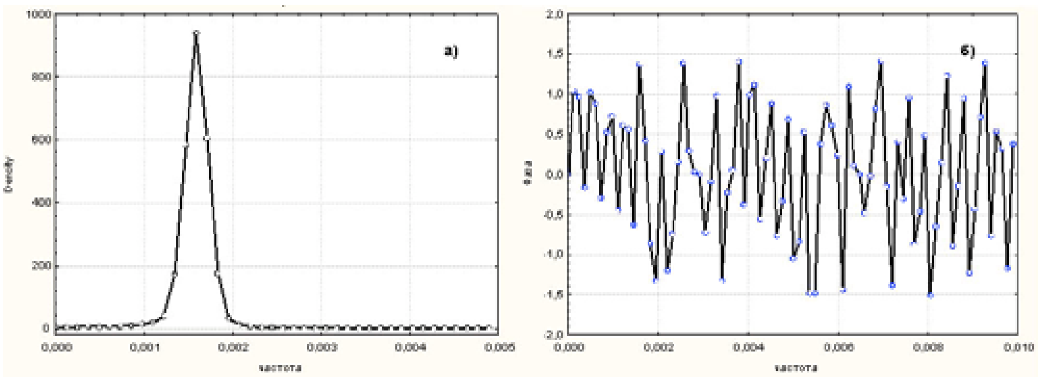


Рис. 10. Амплитудо- (а) и фазово – (б) частотные характеристики отрезка синусоиды.

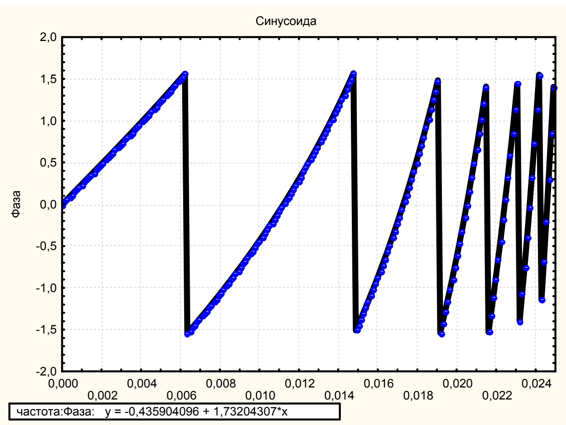


Рис. 11. Улучшенная фазо-частотная характеристика отрезка синусоиды.

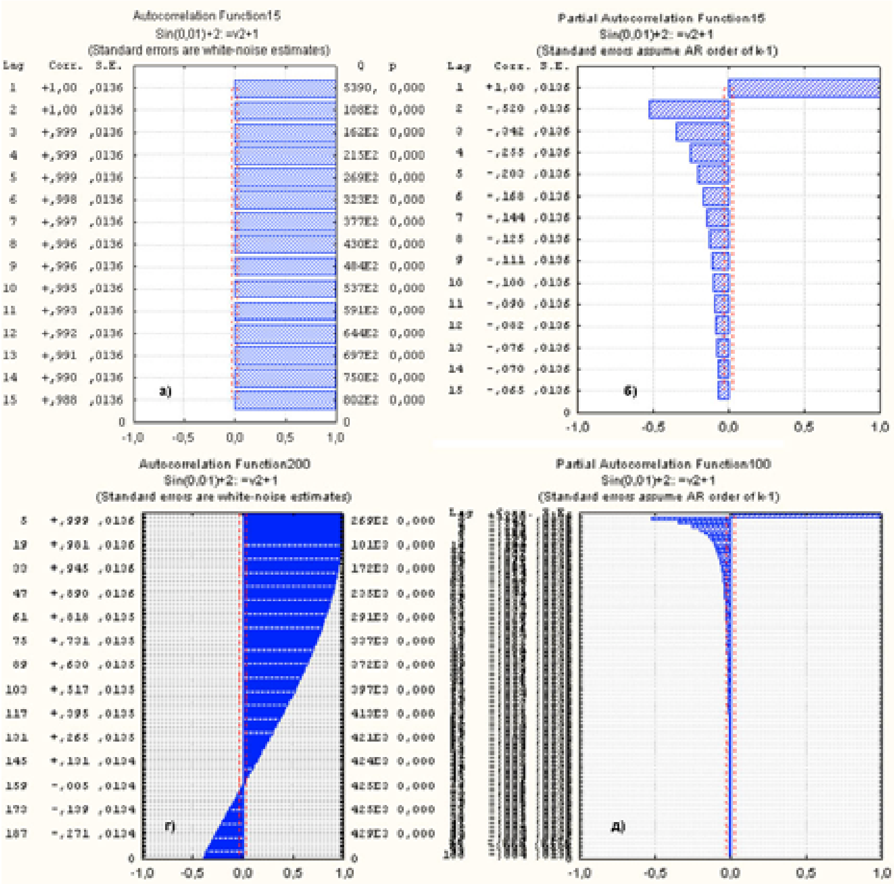


Рис. 12. Автокорреляционная (а) и частная автокорреляционная (б) функции отрезка синусоиды (n=2).

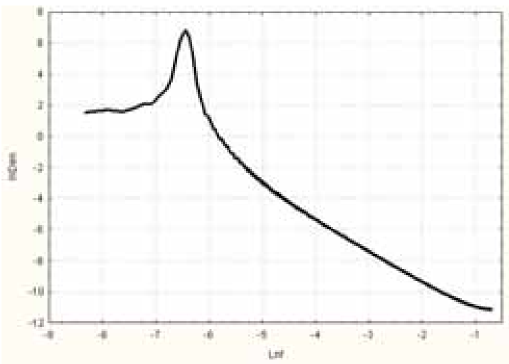


Рис. 13. Амплитудо-частотная характеристика отрезка синусоиды (n=2), построенная в двойном логарифмическом масштабе.

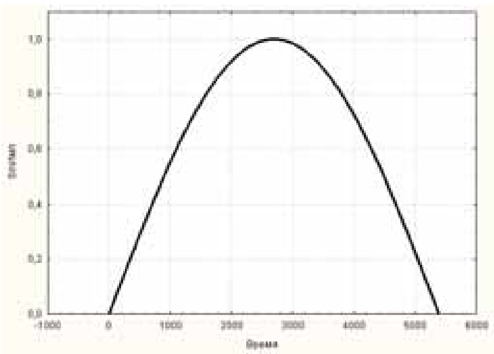


Рис. 14. Импульс форма которого представляет собой полуволну синусоиды

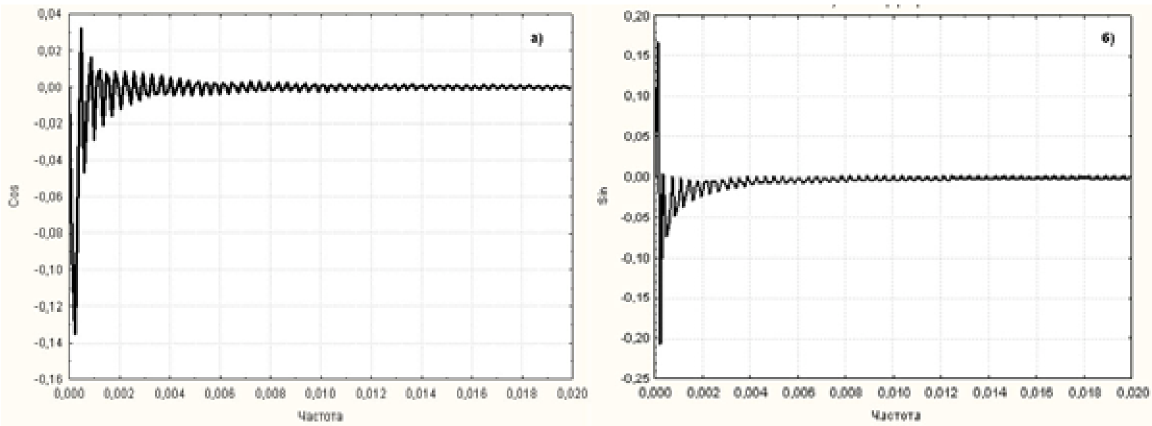


Рис. 15. Cos- (а) и Sin-(б) коэффициенты разложения Фурье для полупериодного синусоидального импульса.

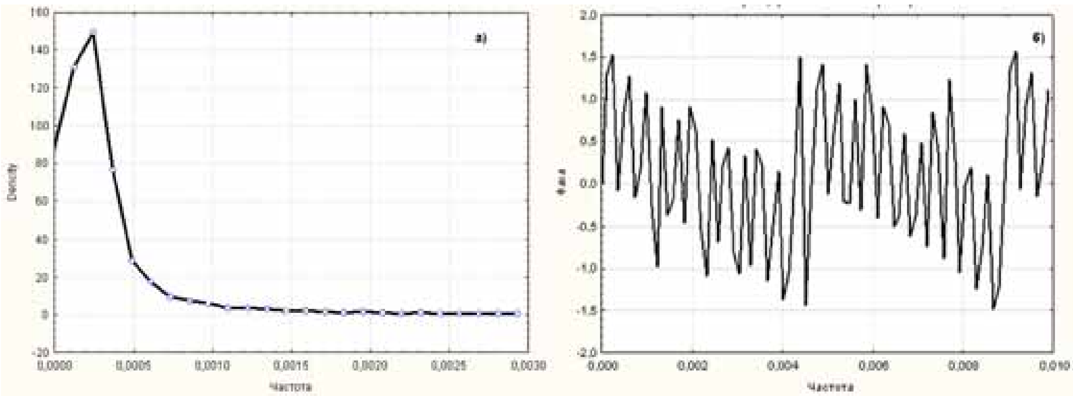


Рис. 16. Амплитудо- (а) и фазово – (б) частотные характеристики полупериодного синусоидального импульса.

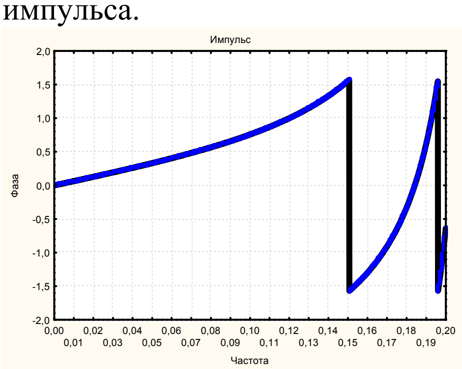


Рис. 17. Фазово-частотная характеристика прямоугольного импульса, рассчитанная как arctg(Im/Re). Результат намного лучше, чем на предыдущем **Рис. 16** (по крайней мере до частоты ω=0,2).

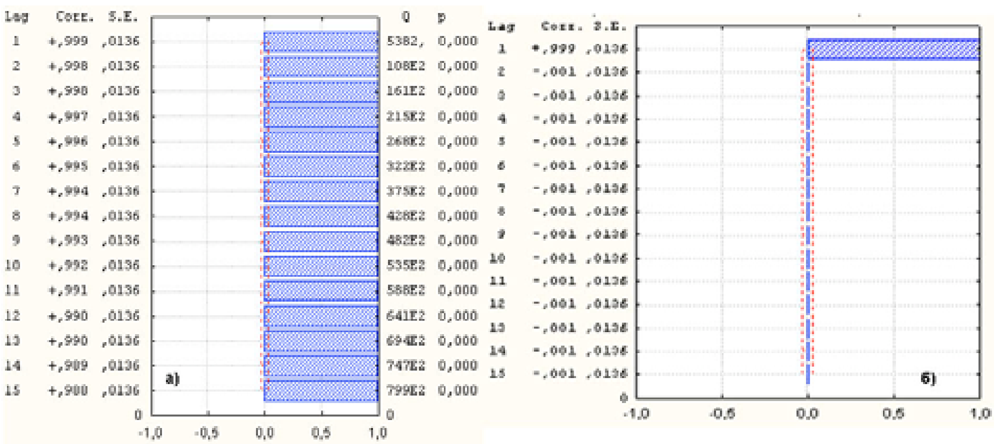


Рис. 18. Амплитудо-частотная характеристика полупериодного синусоидальнего импульса, построенная в двойном логарифмическом масштабе.

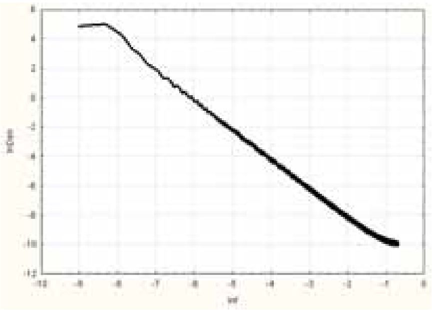
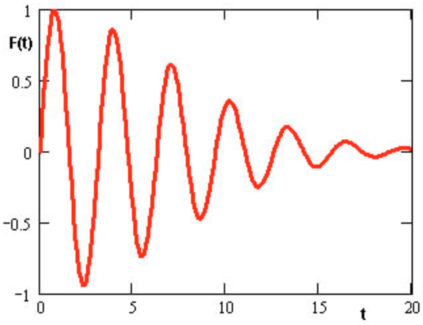


Рис. 19. Автокорреляционная (а) и частная автокорреляционная (б) функции полупериодного синусоидальнего импульса.

<u>Затухающая синусоида</u>, для которой функции колебаний:

$$F(t) = e^{-\alpha t} Sin\omega t \text{ при } t>0 \qquad (34)$$

$$F(t)=0 \text{ при } t\leq 0$$



Даёт спектр

$$S(\omega) = \frac{\omega_0}{\sqrt{\left(\alpha^2 + \omega_0^2\right)^2 + 4\alpha^2\omega^2}} \qquad (35)$$

Рис. 20. Затухающая синусоида с колоколообразной (Гаусса) огибающей.

<u>Экспоненциальный импульс</u> $F(t) = e^{-\alpha t}$ при t>0, F(t)=0 при t≤0 приводит к амплитудному спектру:

$$S(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \omega^2}} \approx \frac{1}{\omega}, \qquad (36)$$

если $F(t) = 1 - e^{-\beta t}$, то

$$S(\omega) = \frac{\beta}{\omega\sqrt{\beta^2 + \omega^2}} \approx \frac{1}{\omega^2} \qquad (37)$$

Колокольная функция (вероятностная кривая, Гаусс), форма которой определяется параметром β, имеет функцию колебаний:

$$S(\omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{\beta} e^{-\frac{\omega^2}{4\beta^2}} \qquad (38)$$

Синусоидальная функция с колокольной огибающей задаётся уравнением:

$$F(t) = e^{-\beta^2 t^2} Sin\omega_0 t \qquad (39)$$

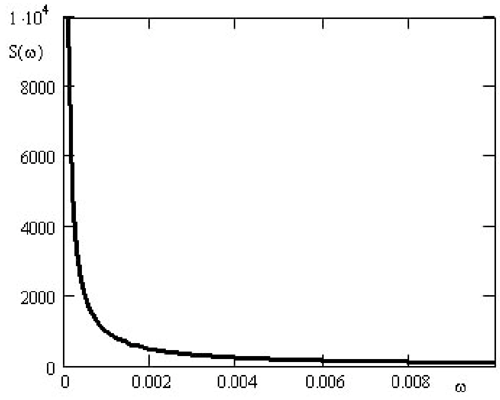
и приводит к подобному же амплитудному спектру.

Важно познакомиться со спектральными разложениями некоторых разрывных функций типа прямоугольных импульсов.

<u>Ступень</u> или **единичная прямоугольная функция** 1(t) определяется уравнениями:

1(t)=0 при t<0

1(t)=1 при t≥0



При больших длительностях этой ступени ($T_0 \to \infty$) амплитудный спектр ступени имеет вид:

$$S(\omega) = \frac{1}{\omega}$$

Рис. 21. Амплитудо-частотный спектр ступени, $S(\omega) = \dfrac{1}{\omega}$

<u>Замечание</u>. Эта же формула справедлива для отрезка синусоиды при малой ω_0.

$$S(\omega) = \frac{1}{\omega}$$

Если высота ступени равна а, то спектр

$$S(\omega)=\frac{a}{\omega}.$$

<u>Прямоугольный импульс</u> длительности Δt и амплитуды a. Он – не что иное, как разность двух единичных прямоугольных функций, амплитуды которых смещены на время Δt:

F(t)=a при a≤t≤Δt

F(t)=0 при t≤0, t≥Δt

Эта разность даёт преобразование Фурье (амплитудный спектр):

$$F(\omega)=A\int_{-\frac{\Delta t}{2}}^{\frac{\Delta t}{2}}\exp\{-\omega t\}dt=\frac{2ASin\frac{\omega\Delta t}{2}}{\omega\Delta t} \qquad (40)$$

Cos-коэффициенты (Real):

$$A(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}f(t)Cos\,\omega t=a\int_{0}^{\Delta t}Cos\,\omega t dt=a\frac{Sin\,\omega\Delta t}{\omega} \qquad (41)$$

Sin- разложение (Imag):

$$B(\omega)=\int_{0}^{t}Sin\,\omega t=\frac{1-Cos\,\omega\Delta t}{\omega} \qquad (42)$$

Амплитудо-частотный спектр:

$$S(\omega)=\sqrt{A(\omega)^2+B(\omega)^2}=\frac{2}{\omega}\sqrt{\frac{1-Cos\,\omega\Delta t}{2}}=\left|\frac{2aSin\frac{\omega\Delta t}{2}}{\omega}\right|=\left|\frac{2ASin\frac{\omega\Delta t}{2}}{\omega}\right| \qquad (43)$$

Здесь A – площадь, ограничиваемая импульсом длительности Δt, A =aΔt.

Спектр F(ω) по положительным и отрицательным частотам оказался в данном случае чисто действительным.

Фазово-частотный спектр:

$$\phi(\omega)=arctg\frac{B(\omega)}{A(\omega)}=arctg\frac{(1-Cos\,\omega\Delta t)\omega}{\omega aSin\,\omega\Delta t}=arctg\frac{1-Cos\,\omega\Delta t}{aSin\,\omega\Delta t} \qquad (44)$$

Мгновенный импульс F(t) до значения *a* в течение бесконечно малого времени δΔt при t=0 имеет самый простой амплитудный спектр S(ω)=1.

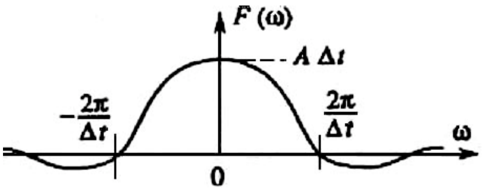


Рис. 22. Спектр одиночного прямоугольного импульса

Полуширина «главного максимума» функции F(ω) равна $\Delta\omega=\frac{2\pi}{\Delta t}$.

Произведение длительности сигнала Δt на Δω есть

$$\Delta t\cdot\Delta\omega=2\pi \qquad (45)$$

Формула (45) называется ***соотношением неопределенности***. Она справедлива для любых функций *f*(*t*) и F(ω), связанных преобразованием Фурье, если понимать это соотношение как равенство по порядку величины. Это соотношение - одно из самых важных и универсальных соотношений в физике колебаний и волн.

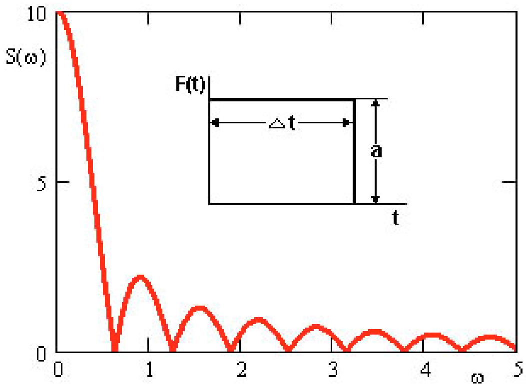


Рис. 23. Прямоугольный импульс и его частотный спектр.

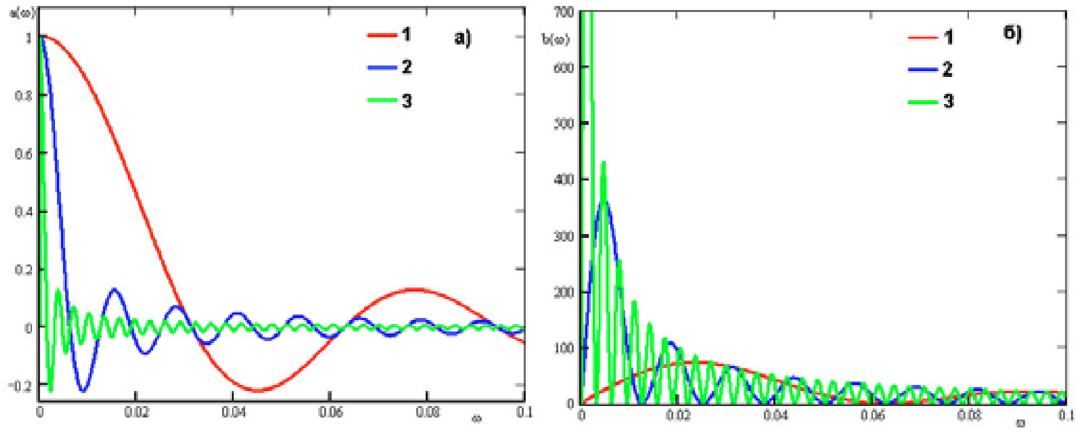


Рис. 24. Cos и Sin – компоненты разложения Фурье прямоугольных импульсов различной длительности Δt: 100 (1), 500 (2) и 2000 (3).

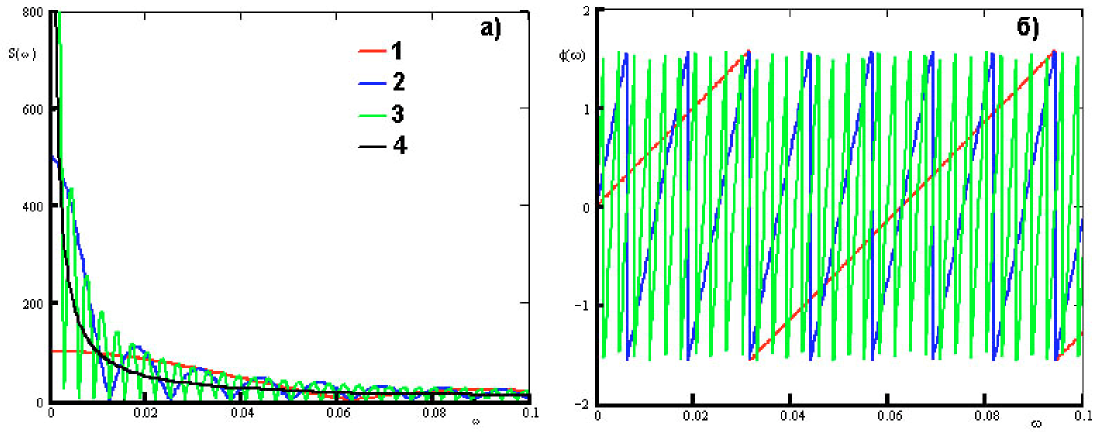


Рис. 25. Амплитудо-частотный (а) и фазово-частотный (б) спектры прямоугольных импульсов различной длительности Δt: 100 (1), 500 (2) и 2000 (3), кривая 4 – спектр ступени, амплитуда импульса a=1.

Мгновенный импульс F(t) до значения a в течение бесконечно малого времени δΔt при t=0 имеет самый простой амплитудный спектр S(ω)=1.

При Δt→∞ прямоугольный импульс переходит в ступеньку.

Из обзора спектральных функций следует одна общая закономерность: с увеличением длительности сигнала его спектр сжимается, и, наоборот, с сокращением его продолжительности спектр значительно расширяется.

Рассмотрим сначала графики, генерируемые аналитическими формулами.

Мгновенный импульс F(t) до значения a в течение бесконечно малого времени δΔt при t=0 имеет самый простой амплитудный спектр S(ω)=1.

При Δt→∞ прямоугольный импульс переходит в ступеньку.

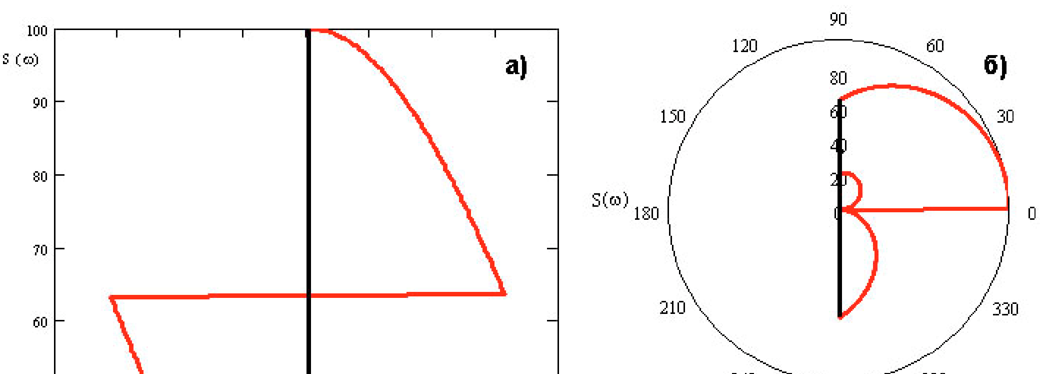


Рис. 26. Амплитудо-фазовые частотные спектры прямоугольного импульса длительностью Δt=100: а) декартовы координаты, б) полярные координаты.

Из обзора спектральных функций следует одна общая закономерность: с увеличением длительности сигнала его спектр сжимается, и, наоборот, с сокращением его продолжительности спектр значительно расширяется.

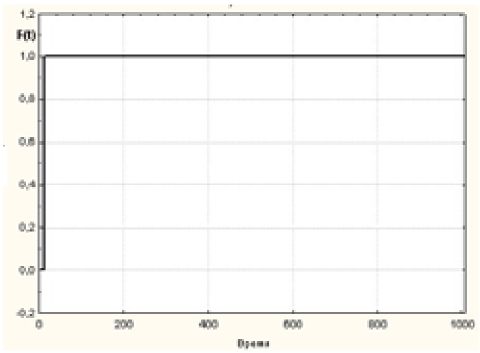
Рассмотрим сначала графики, генерируемые аналитическими формулами.

Мгновенный импульс F(t) до значения a в течение бесконечно малого времени $\delta\Delta t$ при t=0 имеет самый простой амплитудный спектр $S(\omega)=1$.

При $\Delta t \to \infty$ прямоугольный импульс переходит в ступеньку.

Из обзора спектральных функций следует одна общая закономерность: с увеличением длительности сигнала его спектр сжимается, и, наоборот, с сокращением его продолжительности спектр значительно расширяется.

Рассмотрим сначала графики, генерируемые аналитическими формулами.



Применим теперь разложение Фурье по программе STATISTICA непосредственно к «экспериментальному» прямоугольному импульсу.

Рис. 27. Ступень длительностью 1000 с.

Как уже упоминалось, в методе проницаемости основные распределения концентрации на входе в мембрану – ступень и прямоугольный импульс. Однако встречаются и другие – треугольный импульс, синусоида, серия прямоугольных импульсов. Рассмотрим некоторые из них более подробно – не только спектральные характеристики, но и автокорреляционные функции, причём рассмотрение будем вести не на основе аналитических выражений, как было до сих пор, а прямым моделированием на базе пакета STATISTICA.

На **Рис. 27.** представлен режим реализуемый в динамическом варианте метода проницаемости – ступенчатое изменение концентрации. На **Рис. 28** изображены Sin- и Cos- коэффициенты разложения Фурье для ступени, на **Рис. 29** – действительная)- (а) и комплексная-(б) составляющие разложения Фурье для ступени, на **Рис. 30** амплитудо- (а) и фазово- (б) частотные характеристика ступени. На **Рис. 31** представлена амплитудо-фазовая характеристика ступени длительности 1000 в декартовых (а) и полярных (б) координатах.

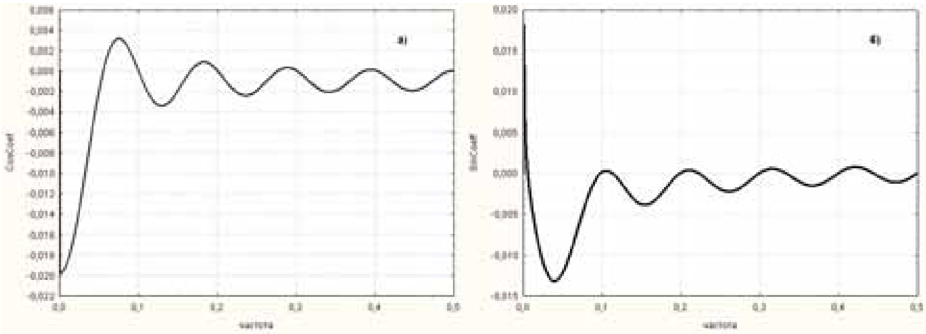


Рис. 28. Cos- (а) и Sin-(б) коэффициенты разложения Фурье для ступени.

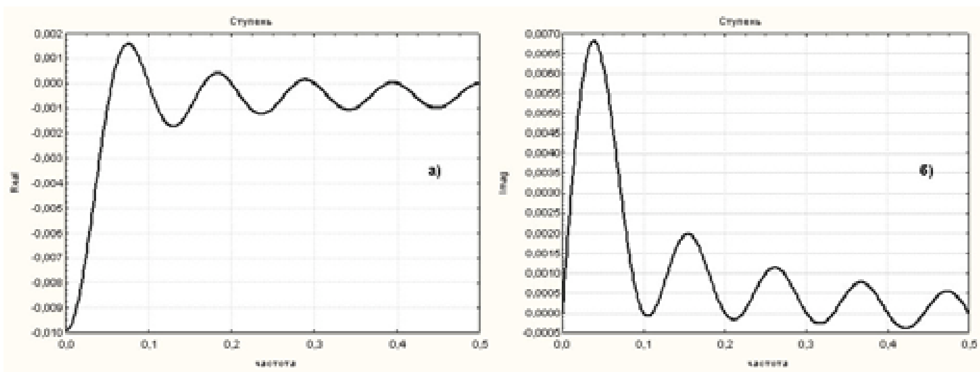


Рис. 29. Real (действительная)- (а) и Imag (комплексная)-(б) составляющие разложения Фурье для ступени, рассчитанные по альтернативному алгоритму программы STATISTICA (раздел Прямое и Обратное преобразование Фурье). Real здесь по форме аналогичен Cos-коэффициентам на предыдущем **Рис. 28**, хотя по амплитуде отличается, Imag здесь отличается от Sin предыдущего **Рис.** 28, знаком и амплитудой.

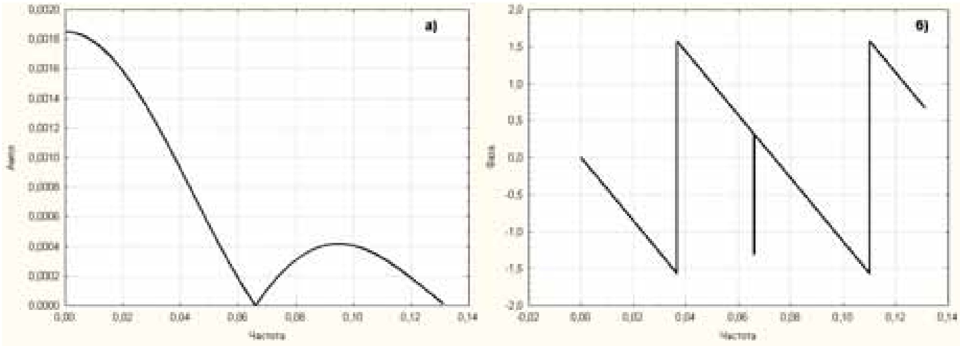


Рис. 30. Амплитудо- (а) и фазово- (б) частотные характеристика ступени длительности 1000. Амплитудо-частотная характеристика рассчитана как $\sqrt{\mathrm{Re}^2+\mathrm{Im}^2}$, а фазово-частотная характеристика - как arctg(Im/Re)

На **Рис. 32** представлены автокорреляционная (прямая линия) и частная автокорреляционная (отмечен момент возникновения ступени) функции.

В импульсном варианте метода проницаемости используется прямоугольный импульс концентрации диффузанта определённой длительности. На **Рис. 33** представлены амплитудо- фазово-частотные характеристики прямоугольного импульса, построенная в двойном логарифмическом масштабе.

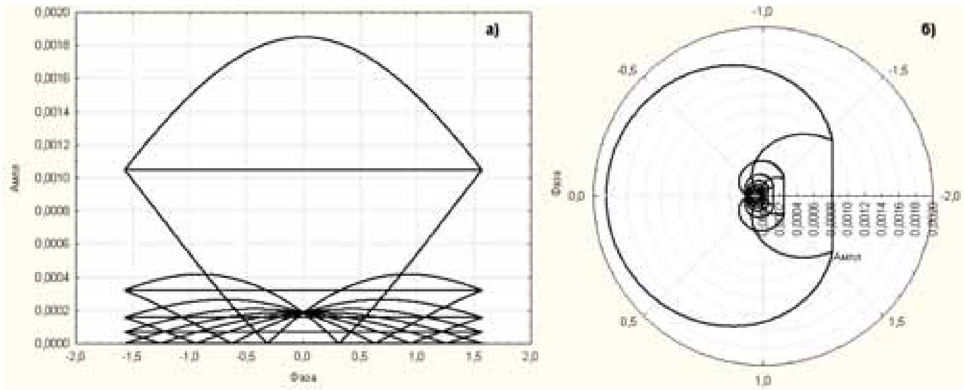


Рис. 31. . Амплитуда фазовая характеристика ступени длительности 1000 в декартовых (а) и полярных (б) координатах.

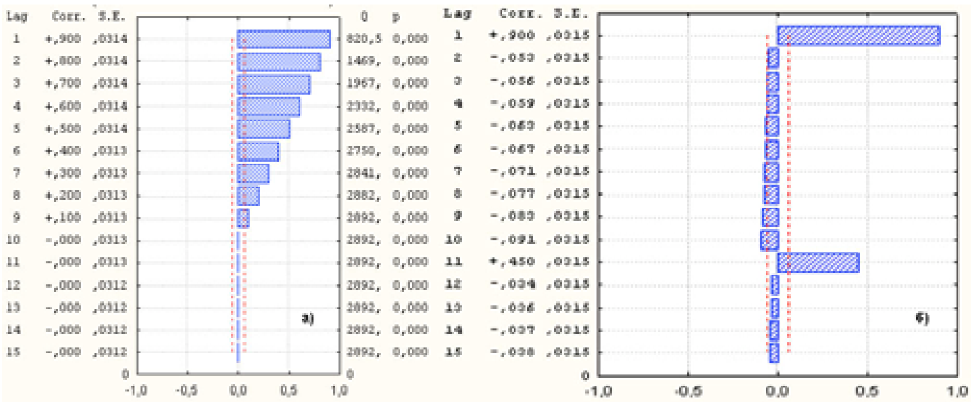


Рис. 32. Автокорреляционная (а) и частная автокорреляционная (б) функции ступени.

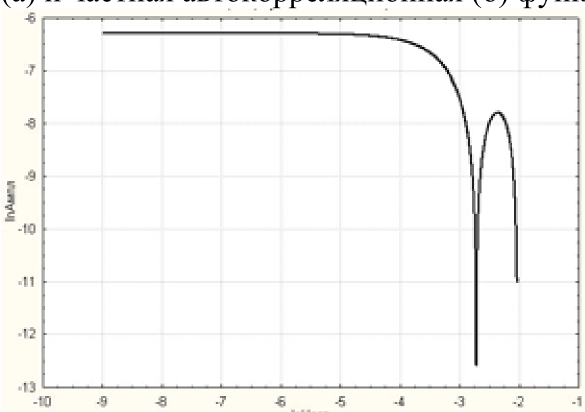


Рис. 33. Амплитудо-частотная характеристика ступени, построенная в двойном логарифмическом масштабе.

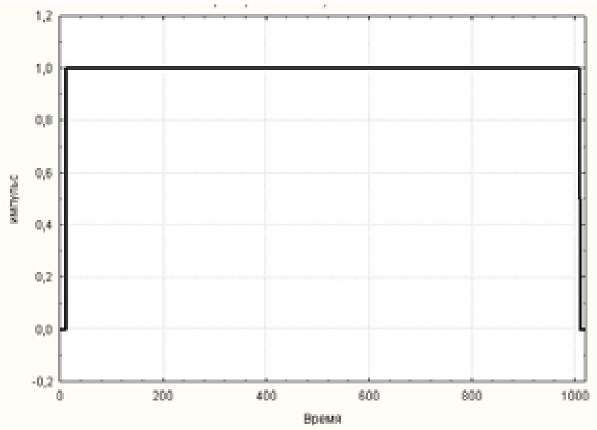


Рис. 34. Изменение входной концентрации – прямоугольный импульс длительностью Δt=1000 с.

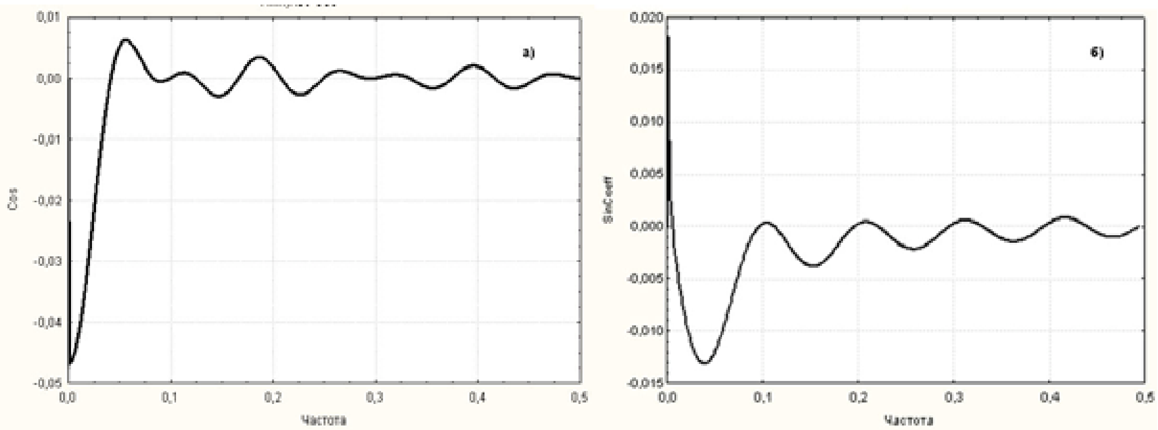


Рис. 35. Cos- (а) и Sin-(б) коэффициенты разложения Фурье для прямоугольного импульса.

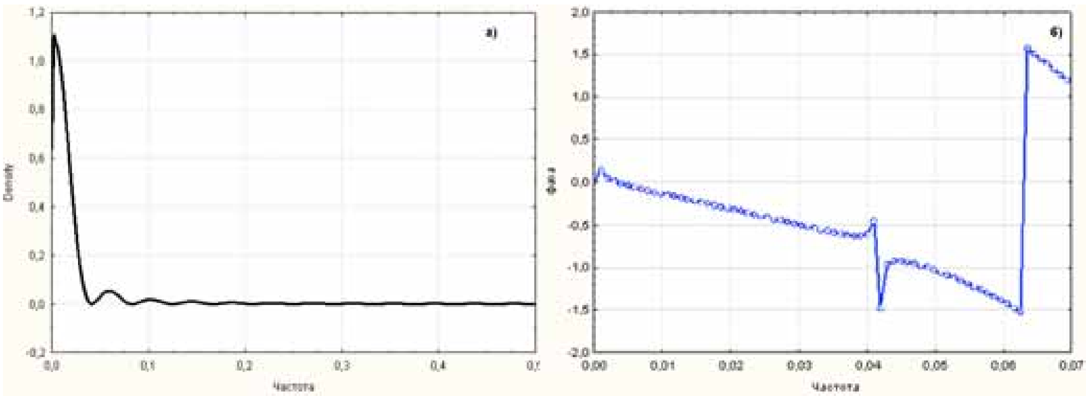


Рис. 36. Амплитудо- (а) и фазово – (б) частотные характеристики прямоугольного импульса.

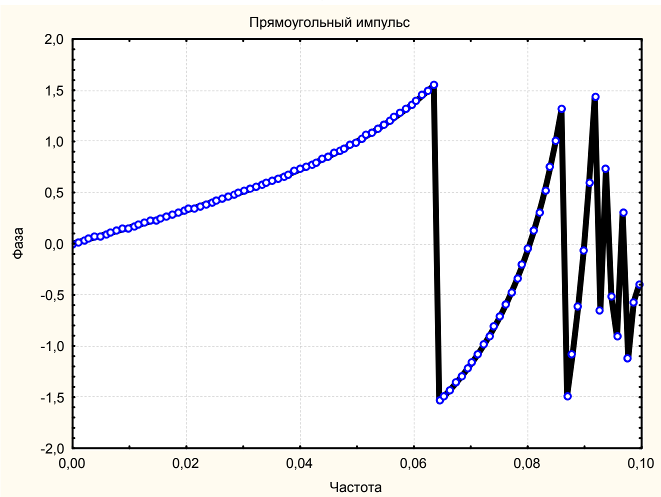


Рис. 37. Фазово-частотная характеристика прямоугольного импульса, рассчитанная как arctg(tgIm/Re). Результат намного лучше, чем на предыдущем **Рис. 36** (по крайней мере до частоты ω=0,085).

Замечание. Поскольку функция Arg определена в интервале от $-\pi$ до π, то при выходе из этого интервала фазовый угол на графике дает скачок. На самом деле это означает, что часть графика фазо-частотной характеристики после скачка надо просто перенести вверх.

Как видно из **Рис. 36,** расчёт амплитудо-фазовой характеристики прямоугольного импульса не представляет серьёзной проблемы, тогда как на графике зависимости фазы от частоты наблюдаются физически не обоснованные разрывы. Связано это с тем, что в формулу для фазы входит отношение $\frac{Sin\,\omega t}{Cos\,\omega t}$, причём при некоторых значениях частоты числитель и знаменатель обращаются в нуль. В принципе, в этом ничего нет страшного, так как теоретически числитель и знаменатель обращаются в ноль при одних и тех же значениях частоты, а неопределённость $\frac{0}{0}$ равняются константе. Однако, из-за конечной точности счёта, числитель и знаменатель обращаются в ноль при разных частотах, так что возникает деление на ноль и, как следствие, разрывы на графике $\phi(\omega)$. Этот эффект особенно заметен на экспериментальных кривых из-за наличия статистических погрешностей. Именно по этому спектры $S(\omega)$ на практике используются гораздо чаще, чем фазово-частотные характеристики.

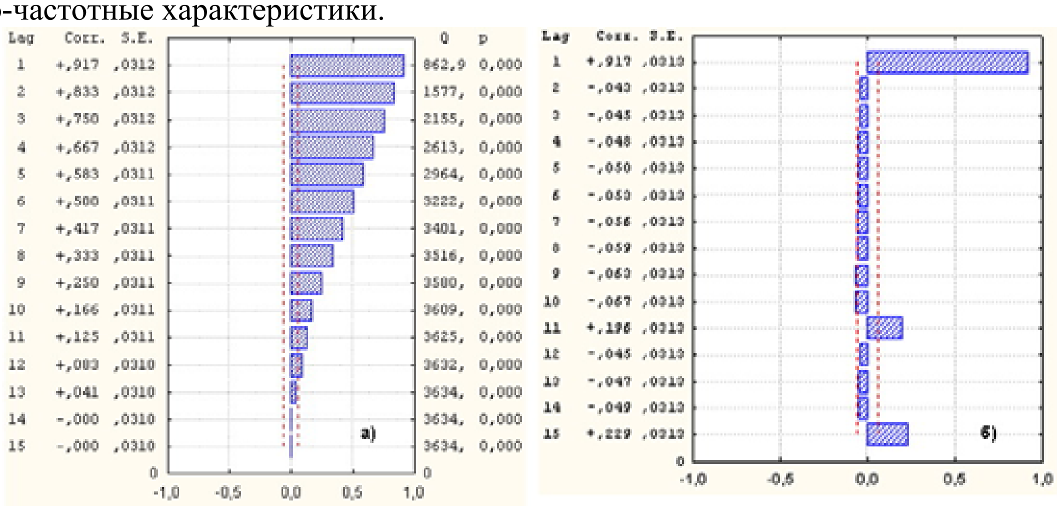


Рис. 38. Автокорелляционная (а) и частная автокорреляционная (б) функции прямоугольного импульса.

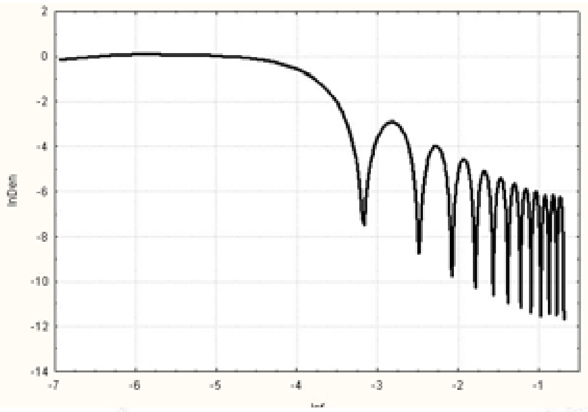


Рис. 39. Амплитудо-частотная характеристика прямоугольного импульса, построенная в двойном логарифмическом масштабе.

<u>**Периодическая последовательность прямоугольных импульсов**</u> длительности t и периода Δt (в дальнейшем такую последовательность для краткости будем называть меандром, хотя это не совсем верно).

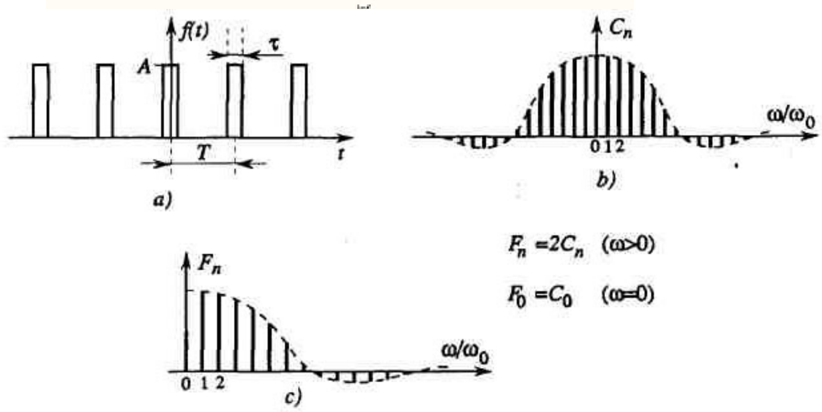


Рис. 40. Периодическая последовательность прямоугольных импульсов (а), ее спектр на интервале -∞, +∞ (b) и спектр по положительным частотам (c).

Пример прямоугольных колебаний (меандр) представлен на **Рис. 41** (n=5).

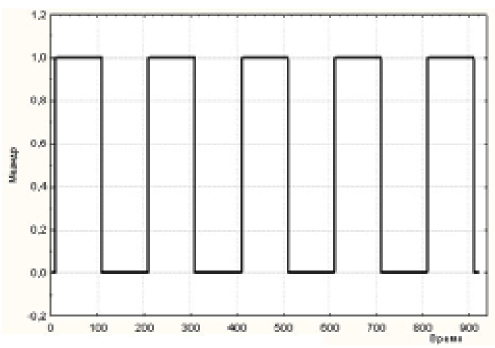


Рис. 41. Прямоугольное колебание концентрации на поверхности мембраны. Последовательность пяти прямоугольных импульсов.

Основные частотные характеристики представлены на **Рис. 42, 43**, и **44**.

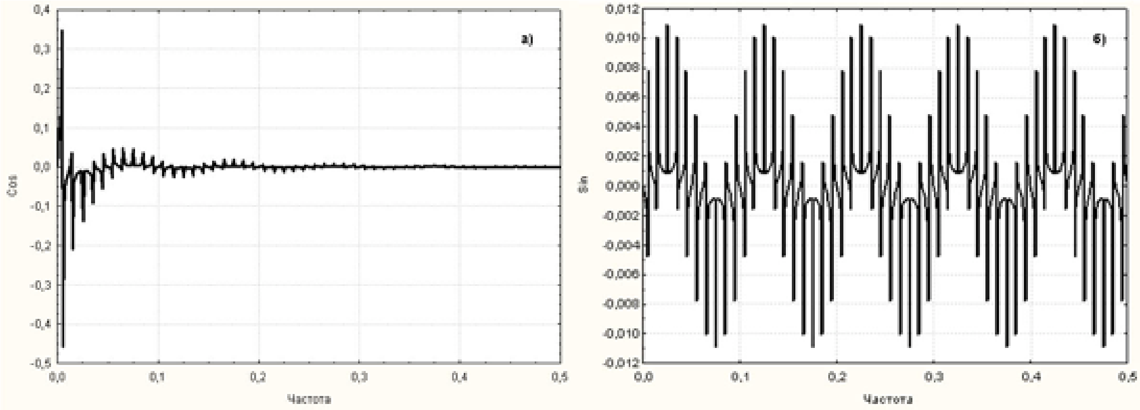


Рис. 42. Cos- (а) и Sin-(б) коэффициенты разложения Фурье для отрезка синусоиды (n=2).

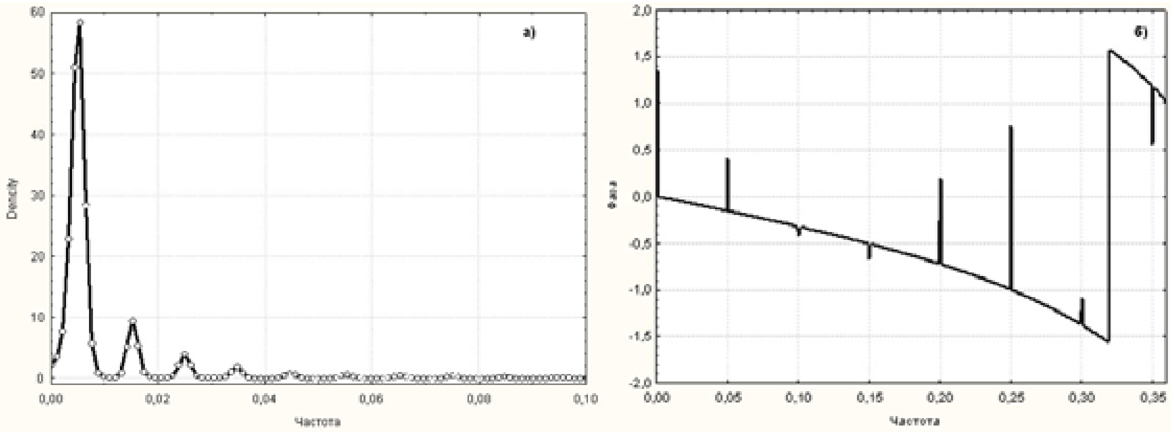


Рис. 43. Амплитудо- (а) и фазово – (б) частотные характеристики отрезка меандра.

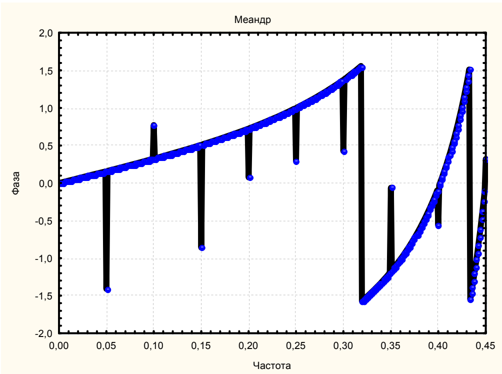
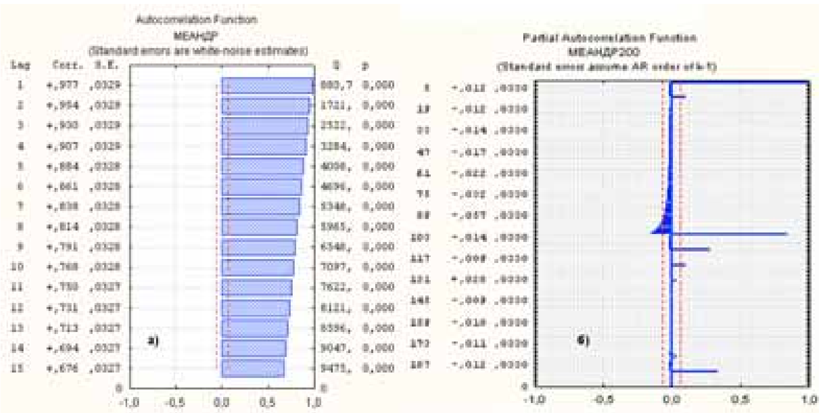


Рис. 44. Фаза меандра по Real и Imag.



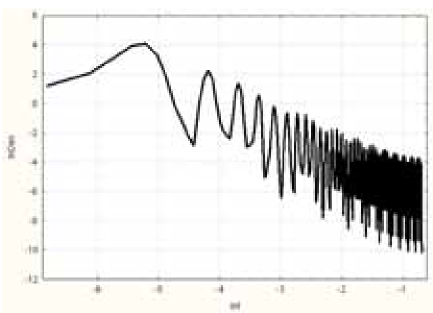


Рис. 45. Автокорреляционная (а) и частная автокорреляционная (б) функции отрезка меандра (n=5).

Рис. 46. Амплитудо-частотная характеристика отрезка меандра (n=5), построенная в двойном логарифмическом масштабе.

<u>Белый шум.</u> Рассмотрение типов переменных концентраций на входе в мембрану закончим белым шумом (**Рис. 47**). Его частотные характеристики представлены на **Рис. 48**, **49**, и **50**.

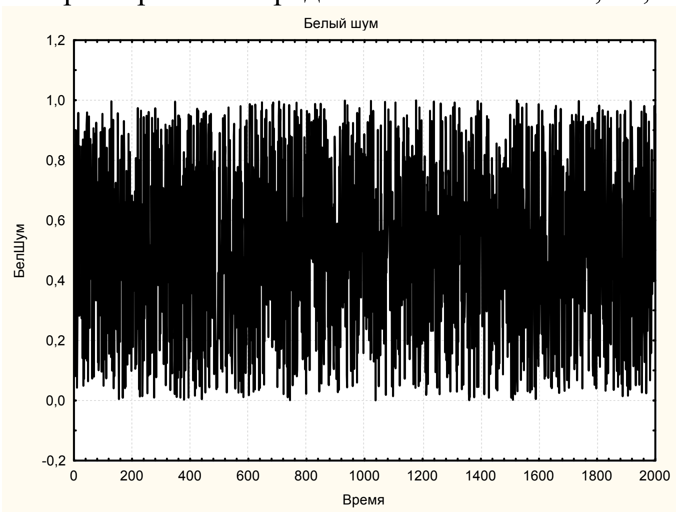


Рис. 47. Белый шум концентрации на поверхности мембраны.

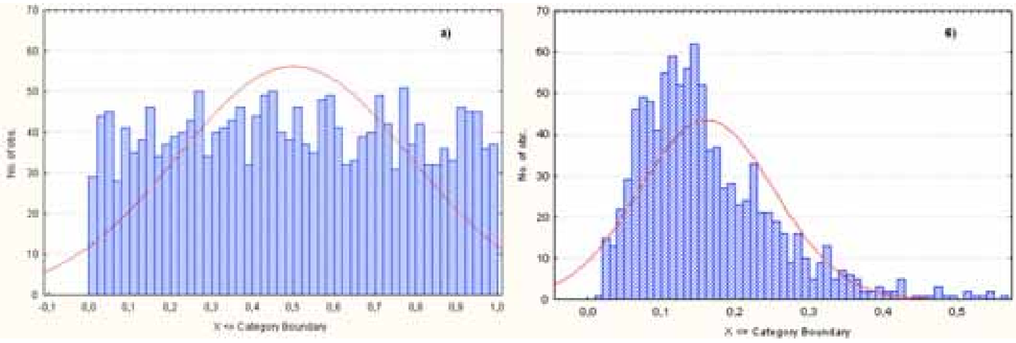


Рис. 48. Гистограммы белого шума (а) и его спектральной характеристики.

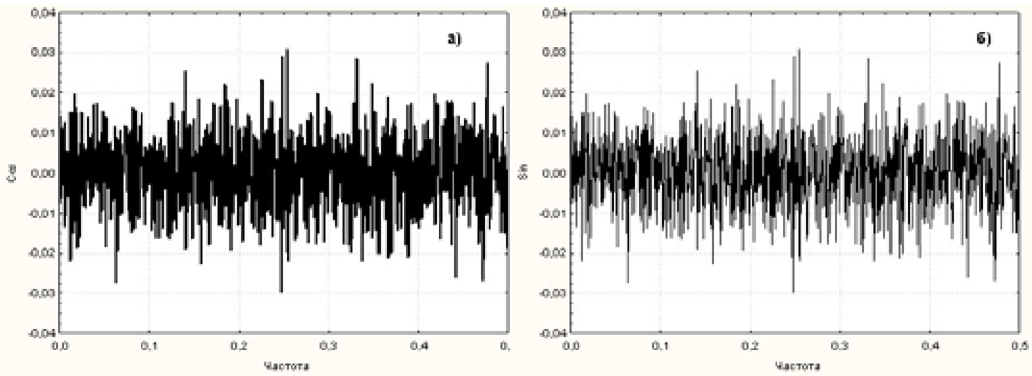


Рис. 49. Cos (а)- и Sin (б) – коэффициенты белого шума.

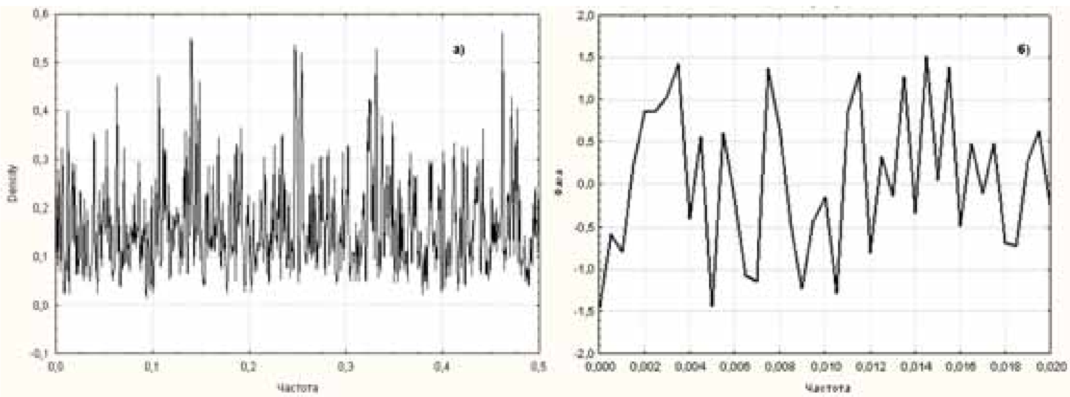


Рис. 50. Плотность и фаза белого шума.

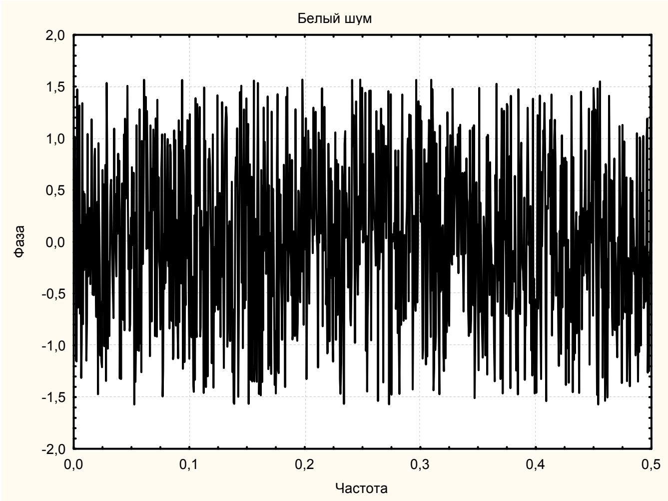
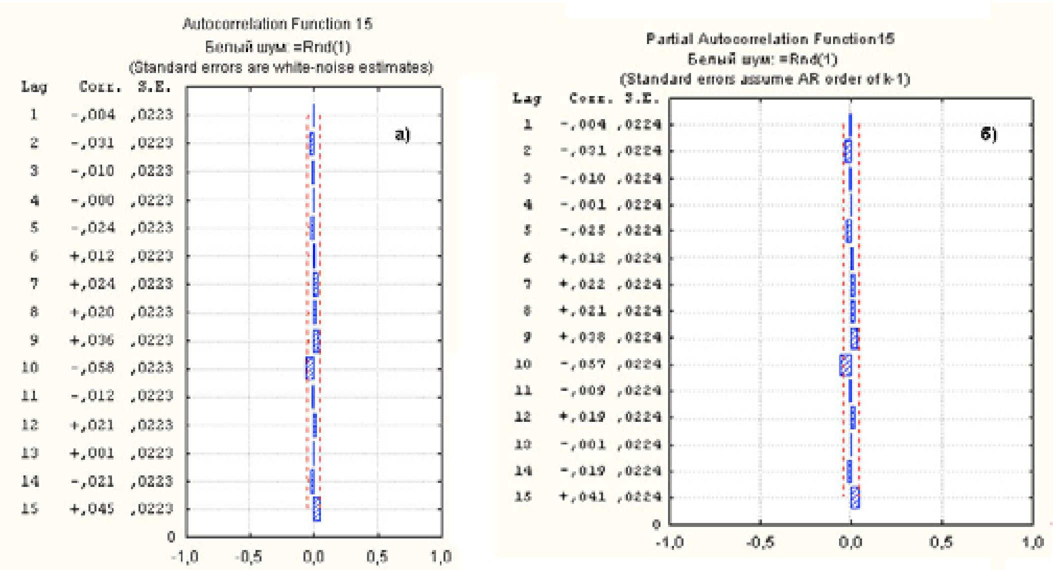


Рис. 51. Фаза белого шума, рассчитанная по действительной и мнимой частям разложения Фурье.



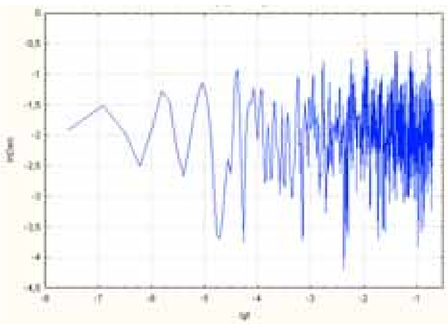


Рис. 52. Автокорреляционная (а) и частная автокорреляционная (б) функции отрезка белого шума.

Рис. 53. Амплитудо-частотная характеристика отрезка белого шума, построенная в двойном логарифмическом масштабе.

2.5 Вейвлет-спектры

В последнее время возрос интерес к другим интегральным преобразованиям, в частности, вейвлет-преобразованию (или дискретному волновому). Оно применяется, главным образом, для анализа нестационарных сигналов и для многих задач подобного рода оказывается более эффективным, чем преобразование Фурье. Основным отличием вейвлет-преобразования является разложение данных не по синусоидам (как для преобразования Фурье), а по другим функциям, называемым вейвлетобразующими. Вейвлетобразующие функции, в противоположность бесконечно осциллирующим синусоидам, локализованы в некоторой ограниченной области своего аргумента, а вдали от неё равны нулю или ничтожно малы. Вейвлет-спектр имеет не один аргумент, а два. Помимо частоты, вторым аргументом b является место локализации вейвлетообразующей функции. Поэтому b имеет ту же размерность, что и x.

Mathcad имеет одну встроенную функцию для расчёта вейвлет-преобразования на основе вейвлетобразующей функции Добеши:

wave(y) – вектор прямого вейвлет- преобразования;

iwave(v) – вектор обратного вейвлет- преобразования;

y – вектор данных, взятых через равные промежутки значений аргумента: v – вектор данных вейвлет-спектра.

Аргумент функции вейвлет преобразования, т.е. вектор y, должен иметь ровно 2^n элементов. Результатом функции wave является вектор, скомпонованный из нескольких коэффициентов с двухпараметрического вейвлет-спектра.